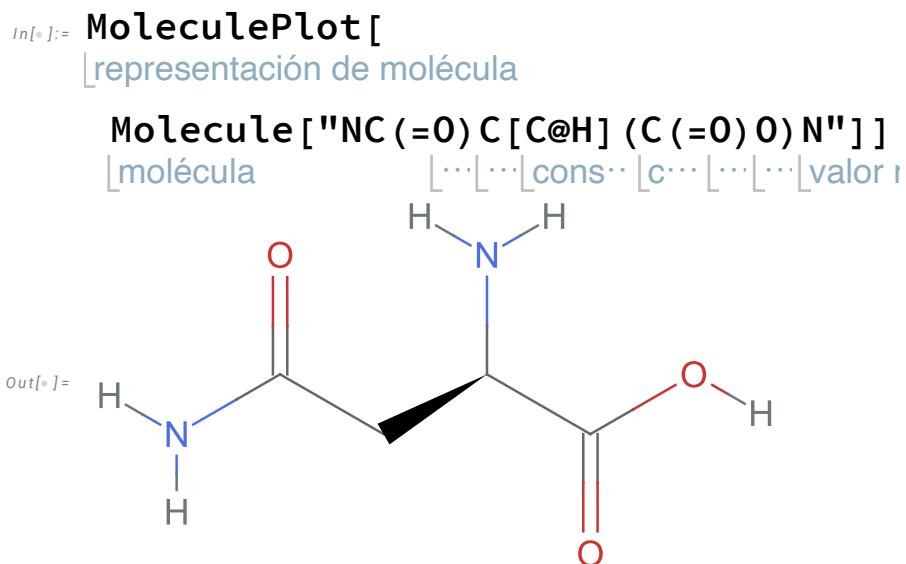


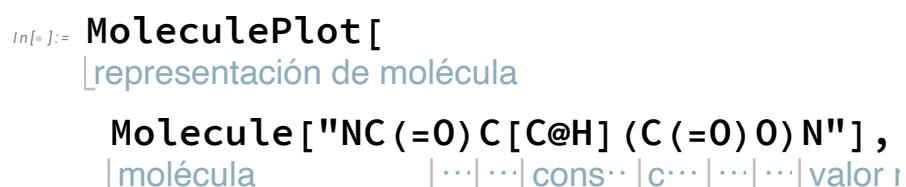
# REPRESENTACIÓN DE LAS MOLÉCULAS EN 2D

## MOLECULE PLOT

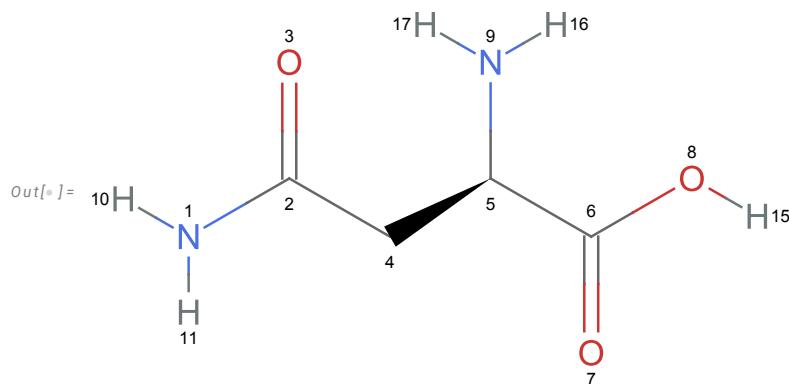
Podemos crear una molécula y representarla gráficamente:



Numeramos los átomos:



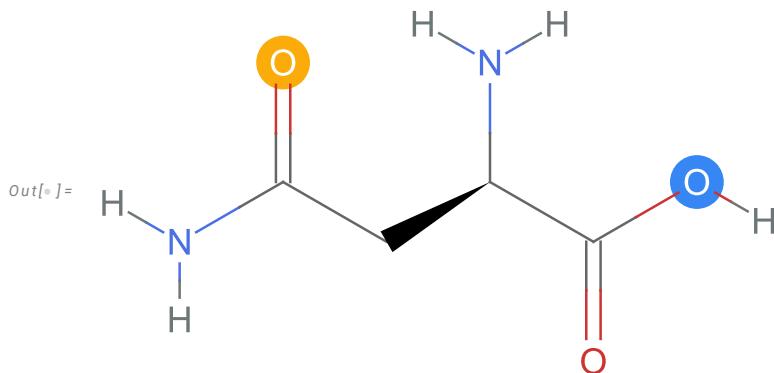
AtomLabels → "AtomIndex"]  
etiquetas de átomos



Si queremos resaltar el primer y tercer átomo de

### oxígeno:

```
In[1]:= MoleculePlot[Molecule["NC(=O)C[C@H](C(=O)O")]
```

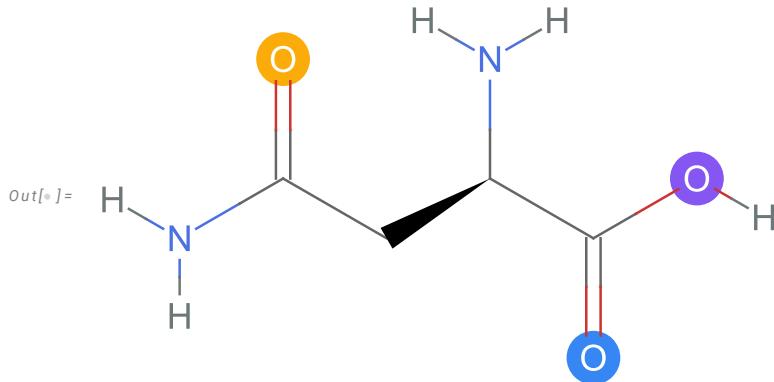


### O resaltar todos los átomos de oxígeno:

```
In[2]:= MoleculePlot[Molecule[
```

representación d... molécula

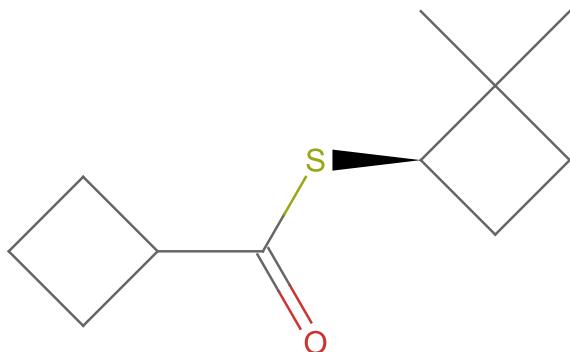
```
"NC(=O)C[C@H](C(=O)O)N"], Atom["O"]]
```



## De la representación gráfica de una molécula determinada:

```
In[1]:= MoleculePlot[
  representación de molécula
  Molecule["O=C(C1CCC1)S[C@@H]1CCC1(C)C"]
  molécula   ⋯ constante   ⋯ constante   ⋯ constante
```

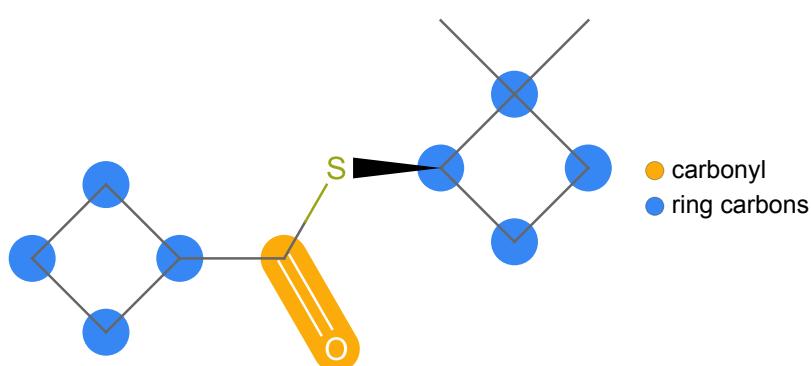
Out[1]=



## Podemos seleccionar dos patrones diferentes de átomos:

```
In[2]:= MoleculePlot["O=C(C1CCC1)S[C@@H]1CCC1(C)C", <|
  representación de molécula ⋯ constante ⋯ constante ⋯ constante
  "carbonyl" → Bond[{"C", "O"}, "Double"], 
  ⋯ enlace ⋯ constante ⋯ notación O
  "ring carbons" →
  Atom["C", "RingAtomQ" → True] |>]
  átomo ⋯ constante ⋯ verdadero
```

Out[2]=



## Un patrón puede coincidir con una o varias posiciones en una molécula:

```
In[4]:= m = Molecule[{Atom["C"], Atom["C"]},  
                      |molécula| |átomo| |con...| |átomo| |constante|  
                      Atom["C"], Atom["O"], Atom["N"], Atom["C"],  
                      |átomo| |con...| |átomo| |nota...| |átomo| |valo...| |átomo| |constante|  
                      Atom["O"], Atom["N"], Atom["C"], Atom["C"],  
                      |átomo| |nota...| |átomo| |valo...| |átomo| |con...| |átomo| |constante|  
                      Atom["C"], Atom["O"], Atom["O"], Atom["C"],  
                      |átomo| |con...| |átomo| |nota...| |átomo| |nota...| |átomo| |constante|  
                      Atom["N"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["O"],  
                      |átomo| |valo...| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |notación O|  
                      Atom["O"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"],  
                      |átomo| |nota...| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |constante|  
                      Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"],  
                      |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |constante|  
                      Atom["C"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"],  
                      |átomo| |con...| |átomo| |átomo| |átomo|  
                      Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"],  
                      |átomo| |átomo| |átomo| |átomo|  
{Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"],  
 |enlace| |enlace|  
 Bond[{3, 4}, "Double"], Bond[{3, 5}, "Single"],  
 |enlace| |enlace|  
 Bond[{5, 6}, "Single"], Bond[{6, 7}, "Double"],  
 |enlace| |enlace|
```

```
  L--->      L--->
Bond[{6, 8}, "Single"], Bond[{8, 9}, "Single"],  
|enlace          |enlace  
Bond[{9, 10}, "Single"],  
|enlace  
Bond[{10, 11}, "Single"], Bond[{11, 12},  
|enlace          |enlace  
    "Double"], Bond[{11, 13}, "Single"],  
        |enlace  
Bond[{8, 14}, "Single"], Bond[{2, 15},  
|enlace          |enlace  
    "Single"], Bond[{15, 16}, "Single"],  
        |enlace  
Bond[{16, 17}, "Single"], Bond[{17, 18},  
|enlace          |enlace  
    "Double"], Bond[{17, 19}, "Single"],  
        |enlace  
Bond[{16, 20}, "Single"], Bond[{20, 21},  
|enlace          |enlace  
    "Single"], Bond[{21, 22}, "Single"],  
        |enlace  
Bond[{22, 23}, "Aromatic"], Bond[{23, 24},  
|enlace          |enlace  
    "Aromatic"], Bond[{24, 25}, "Aromatic"],  
        |enlace  
Bond[{25, 26}, "Aromatic"], Bond[{26, 27},  
|enlace          |enlace  
    "Aromatic"], Bond[{10, 5}, "Single"],  
        |enlace  
Bond[{27, 22}, "Aromatic"], Bond[{1, 28},  
|enlace          |enlace  
    "Single"], Bond[{1, 29}, "Single"],  
        |enlace  
Bond[{1, 30}, "Single"], Bond[{2, 31},  
|enlace          |enlace  
    "Single"], Bond[{9, 32}, "Single"],  
        |enlace
```

```

Bond[{9, 33}, "Single"], Bond[{10, 34},
|enlace |enlace
"Single"], Bond[{13, 35}, "Single"],
|enlace
Bond[{14, 36}, "Single"], Bond[{14, 37},
|enlace |enlace
"Single"], Bond[{14, 38}, "Single"],
|enlace
Bond[{15, 39}, "Single"], Bond[{16, 40},
|enlace |enlace
"Single"], Bond[{19, 41}, "Single"],
|enlace
Bond[{20, 42}, "Single"], Bond[{20, 43},
|enlace |enlace
"Single"], Bond[{21, 44}, "Single"],
|enlace
Bond[{21, 45}, "Single"], Bond[{23, 46},
|enlace |enlace
"Single"], Bond[{24, 47}, "Single"],
|enlace
Bond[{25, 48}, "Single"], Bond[{26, 49},
|enlace |enlace
"Single"], Bond[{27, 50}, "Single"]),
|enlace
StereochemistryElements →
|elementos estereoquímicos
{<|"StereoType" → "Tetrahedral",
 "ChiralCenter" → 2, "Direction" → "Clockwise",
 |dirección
 "FiducialAtom" → 1, "Ligands" →
 {3, 15, 31}|>, <|"StereoType" → "Tetrahedral",
 "ChiralCenter" → 10, "Direction" →
 |dirección
 "Clockwise", "FiducialAtom" → 9, "Ligands" →


```

```

{11, 5, 34}|>, <|"StereoType" → "Tetrahedral",
"ChiralCenter" → 16, "Direction" →
[dirección
"Counterclockwise", "FiducialAtom" → 15,
"Ligands" → {17, 20, 40}|>}];
carbonylPattern = Bond[{"C", "O"}, "Double"];
[enlace [con···]notación O

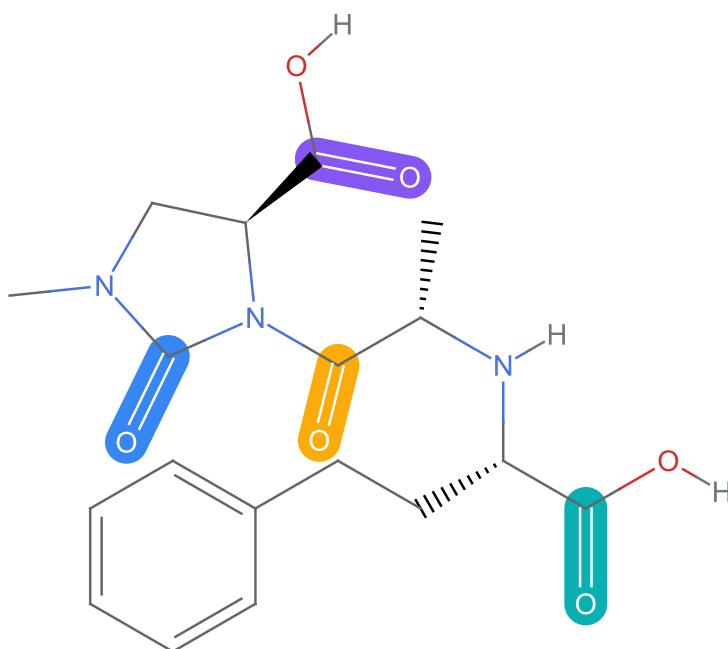
```

**Podemos resaltar cada carbonilo por separado:**

In[6]:= MoleculePlot[m, carbonylPattern]

[representación de molécula

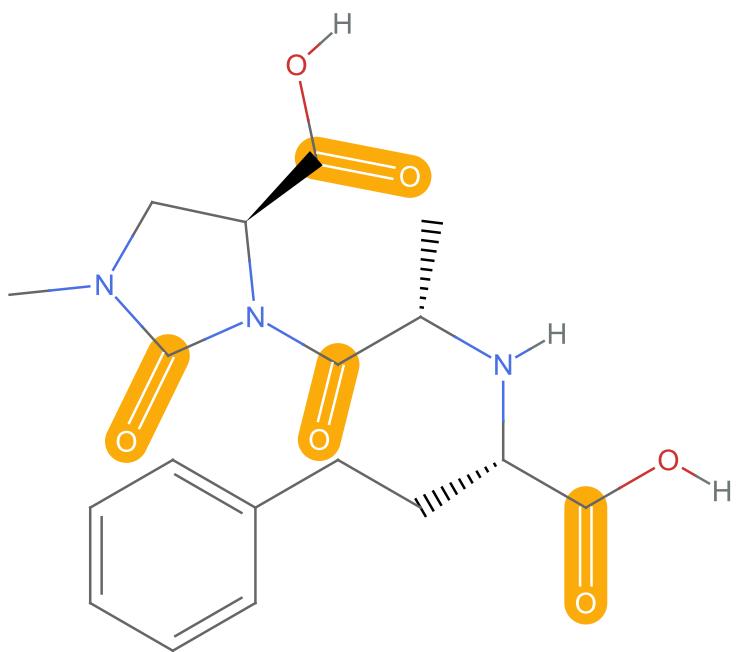
Out[6]=



**O con un solo color:**

In[8]:= **MoleculePlot[m, {carbonylPattern}]**  
representación de molécula

Out[8]=



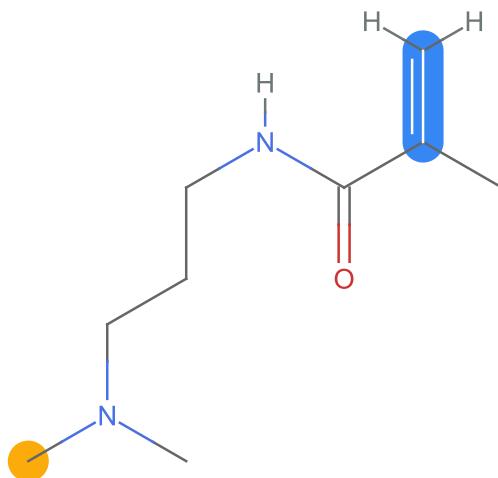
## De una determinada molécula:

```
In[]:= n = Molecule[{Atom["C"], Atom["N"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["N"], 
  |molécula| |átomo| |con...| |átomo| |valor| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |valor| |núm|
  Atom["C"], Atom["O"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], 
  |átomo| |con...| |átomo| |nota| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |constante|
  Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], 
  |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo|
  Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], 
  |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo|
  Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], 
  |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo|
{Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"], Bond[{3, 4}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{4, 5}, "Single"], Bond[{5, 6}, "Single"], Bond[{6, 7}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{7, 8}, "Double"], Bond[{7, 9}, "Single"], Bond[{9, 10}, "Double"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{9, 11}, "Single"], Bond[{2, 12}, "Single"], Bond[{1, 13}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{1, 14}, "Single"], Bond[{1, 15}, "Single"], Bond[{3, 16}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{3, 17}, "Single"], Bond[{4, 18}, "Single"], Bond[{4, 19}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{5, 20}, "Single"], Bond[{5, 21}, "Single"], Bond[{6, 22}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{10, 23}, "Single"], Bond[{10, 24}, "Single"], Bond[{11, 25}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{11, 26}, "Single"], Bond[{11, 27}, "Single"], Bond[{12, 28}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{12, 29}, "Single"], Bond[{12, 30}, "Single"]}];
  |enlace| |enlace|
```

## Podemos resaltar varios patrones:

```
In[]:= MoleculePlot[n, {1, Bond[{ "C", "C"}, "Double"]}]
  |representación de molécula| |enlace| |con...| |constante|
```

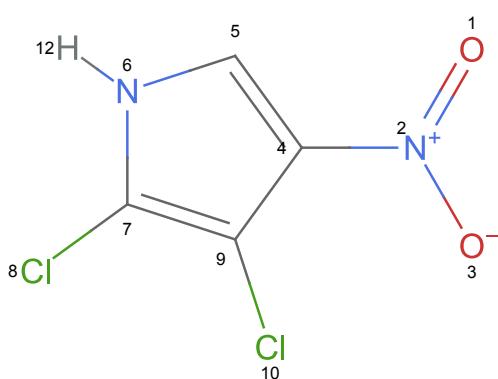
Out[=]



**Podemos etiquetar todos los átomos por su índice:**

```
In[°]:= MoleculePlot[
  Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
  AtomLabels → "AtomIndex"]
Out[°]=
```

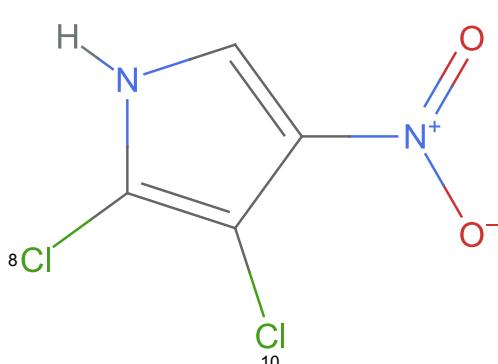
[representación de molécula]  
[molécula]  
[etiquetas de átomos]



**Podemos etiquetar solo unos determinados átomos, como por ejemplo los de cloro:**

```
In[°]:= MoleculePlot[
  Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
  AtomLabels → {Atom["Cl"] → "AtomIndex"}]
Out[°]=
```

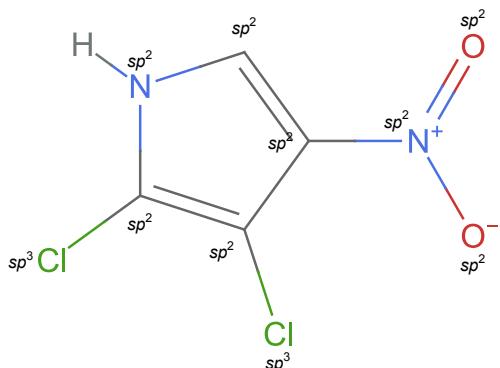
[representación de molécula]  
[molécula]  
[etiquetas de átomos]



**Etiquete los átomos que no son de hidrógeno por su hibridación:**

```
In[1]:= MoleculePlot[
  representación de molécula
  Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"], 
  molécula
  AtomLabels → {Atom[Except["H"]]} →
  etiquetas de átomos → átomo excepto
  MoleculeProperty["OrbitalHybridization"]}]
propiedad de molécula
```

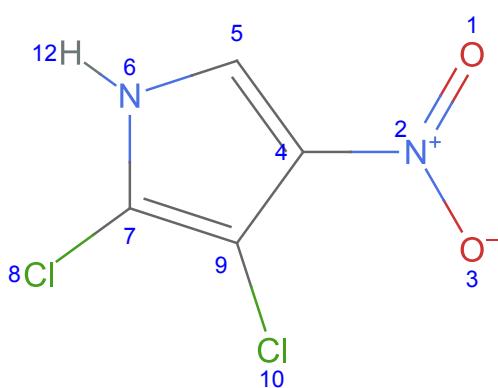
Out[1]=



**Podemos configurar todas las etiquetas para que tengan el mismo estilo:**

```
In[2]:= MoleculePlot[
  representación de molécula
  Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"], 
  molécula
  AtomLabels → "AtomIndex",
  etiquetas de átomos
  AtomLabelStyle → Directive[FontSize → 12, Blue]]
estilo de etiqueta de átomos → directiva → tamaño de tipo de azul
```

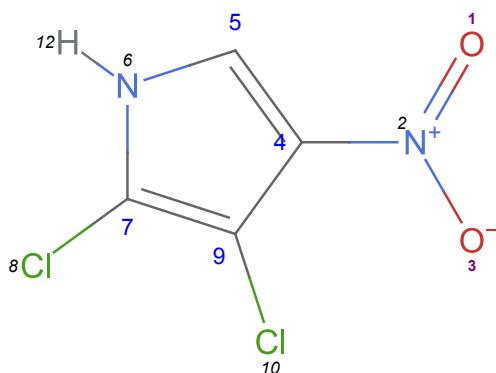
Out[2]=



## Establezca el estilo de la etiqueta según el tipo de átomo:

```
In[°]:= MoleculePlot[
  representación de molécula
  Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
  molécula
  AtomLabels → "AtomIndex", AtomLabelStyle →
  [etiquetas de átomos] [estilo de etiqueta de átomo]
  {Atom["C"] → Directive[12, Blue], Atom["O"] →
  [átomo] [cons...directive] [azul] [átomo] [notación]
  Directive[8, Purple, Bold], _ → Italic}]
  [directive] [púrpura] [negrita] [ítálica]
```

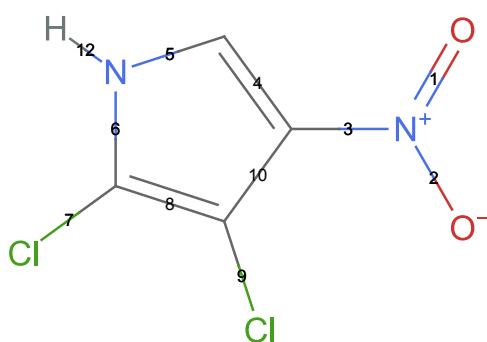
Out[°]=



## Etiquete todos los enlaces por su índice:

```
In[°]:= MoleculePlot[
  representación de molécula
  Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
  molécula
  BondLabels → "BondIndex"]
  [etiquetas de enlaces]
```

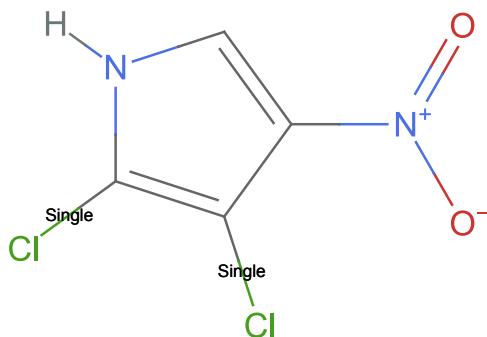
Out[°]=



## Etiquete solo los enlaces a átomos de cloro por su tipo de enlace:

```
In[1]:= MoleculePlot[Molecule[
  representación d... molécula
  "2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"], BondLabels →
  [etiquetas de enlaces
  {Bond[ {"Cl", _}] → MoleculeProperty["BondType"]}]
  [enlace] [propiedad de molécula]
```

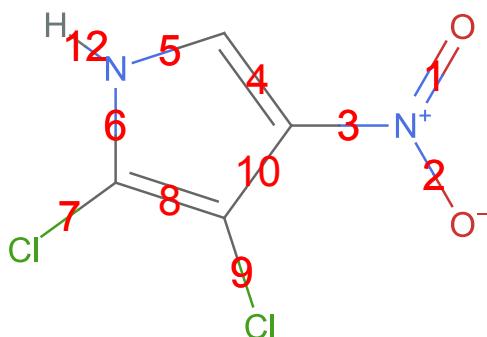
Out[1]=



## Podemos dar a todas las etiquetas de enlace un mismo estilo:

```
In[2]:= MoleculePlot[
  representación de molécula
  Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
  [molécula
  BondLabels → "BondIndex",
  [etiquetas de enlaces
  BondLabelStyle → Directive[FontSize → 22, Red]]
  [estilo de etiqueta de ... directiva] [tamaño de tipo de ... rojo]
```

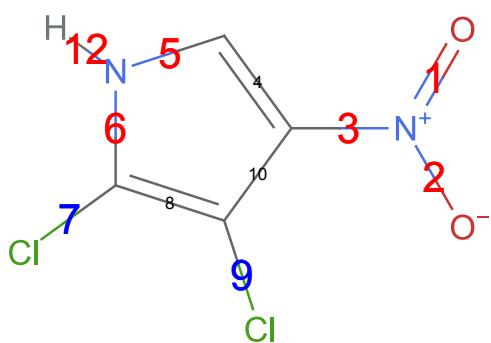
Out[2]=



## O etiquetar los enlaces de forma diferente según sus átomos:

```
In[°]:= MoleculePlot[
  representación de molécula
  Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"],
  molécula
  BondLabels → "BondIndex", BondLabelStyle →
  etiquetas de enlaces           estilo de etiqueta de enlace
  {Bond[{"N", _}] → Directive[FontSize → 22, Red],
   enlace    valor numérico directiva    tamaño de tipo de letra rojo
  Bond[{"Cl", _}] → Directive[FontSize → 22, Blue]}]
  enlace           directiva    tamaño de tipo de letra azul
```

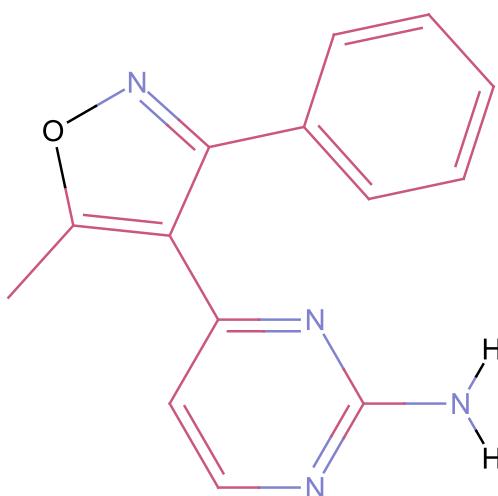
Out[°]=



## Podemos especificar diferentes colores para los elementos atómicos:

```
In[8]:= MoleculePlot["Nc1nc(cc(n1)c1c(C)onc1c1cccccc1",
  representación de molécula      constante
  ColorRules → {"C" → RGBColor[0.79, 0.34, 0.5],
  reglas de color      con... color RGB
  "N" → RGBColor[0.5, 0.51, 0.81], _ → Black}]
  valor color RGB      negro
```

Out[8]=



## Podemos utilizar marcadores de posición para las leyendas de la trama:

```
In[9]:= o = Molecule[{Atom["C"], Atom["N"],
  molécula      átomo  con... átomo  valor numérico
  Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["N"],
  átomo  con... átomo  con... átomo  con... átomo  valor numé
  Atom["C"], Atom["O"], Atom["C"], Atom["C"],
  átomo  con... átomo  nota... átomo  con... átomo  constante
  Atom["C"], Atom["C"], Atom["H"], Atom["H"],
  átomo  con... átomo  con... átomo  átomo
  Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"],
  átomo  átomo  átomo  átomo
  Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"],
  átomo  átomo  átomo  átomo
  Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"],
  átomo  átomo  átomo  átomo}
```

```

Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"]},
|átomo |átomo |átomo |átomo

{Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"],
|enlace |enlace

Bond[{3, 4}, "Single"], Bond[{4, 5}, "Single"],
|enlace |enlace

Bond[{5, 6}, "Single"], Bond[{6, 7}, "Single"],
|enlace |enlace

Bond[{7, 8}, "Double"], Bond[{7, 9}, "Single"],
|enlace |enlace

Bond[{9, 10}, "Double"], Bond[{9, 11},
|enlace |enlace

"Single"], Bond[{2, 12}, "Single"],
|enlace

Bond[{1, 13}, "Single"], Bond[{1, 14},
|enlace |enlace

"Single"], Bond[{1, 15}, "Single"],
|enlace

Bond[{3, 16}, "Single"], Bond[{3, 17},
|enlace |enlace

"Single"], Bond[{4, 18}, "Single"],
|enlace

Bond[{4, 19}, "Single"], Bond[{5, 20},
|enlace |enlace

"Single"], Bond[{5, 21}, "Single"],
|enlace

Bond[{6, 22}, "Single"], Bond[{10, 23},
|enlace |enlace

"Single"], Bond[{10, 24}, "Single"],
|enlace

Bond[{11, 25}, "Single"], Bond[{11, 26},
|enlace |enlace

"Single"], Bond[{11, 27}, "Single"],
|enlace

Bond[{12, 28}, "Single"], Bond[{12, 29},
|enlace |enlace

```

```

"Single"], Bond[{12, 30}, "Single"]}];  

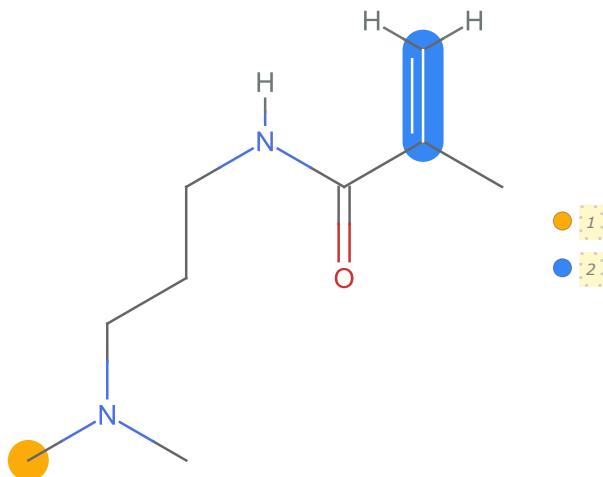
[enlace
In]:= MoleculePlot[o, {1, Bond[{"C", "C"}, "Double"]},  

[representación de molécula[enlace [con...[constante
PlotLegends -> Automatic]  

[leyendas de rep...[automático

```

Out[ ]=



**Podemos colocar las leyendas donde queramos:**

```

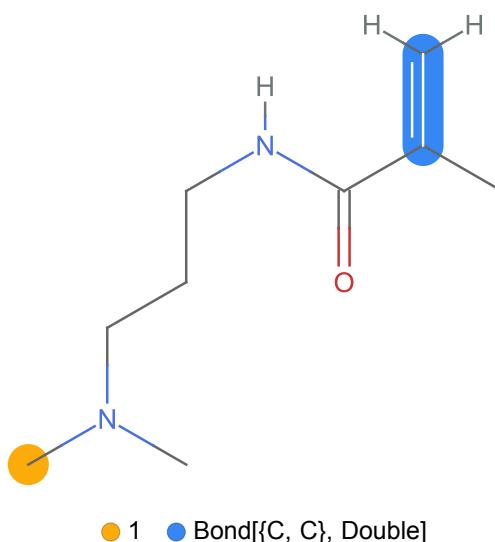
In:= MoleculePlot[o, {1, Bond[{"C", "C"}, "Double"]},  

[representación de molécula[enlace [con...[constante
PlotLegends -> Placed["Expressions", Below]  

[leyendas de rep...[colocado [debajo

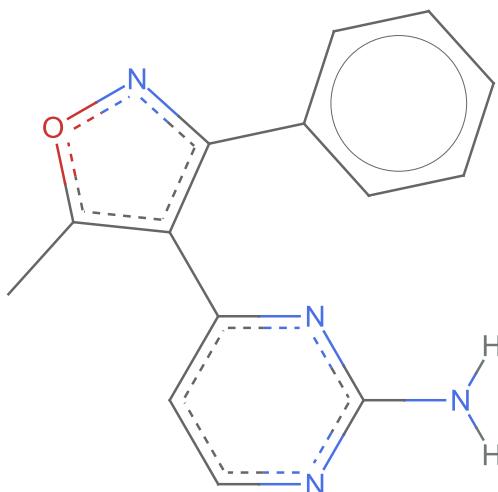
```

Out[ ]=



**Por defecto, los enlaces aromáticos se muestran en su forma Kekule deslocalizada. Utilice el tema argumental “Aromático” para mostrar qué enlaces son aromáticos. Los anillos de fenilo se muestran con un círculo para indicar los electrones de enlace deslocalizados. Los heterociclos aromáticos utilizan líneas discontinuas para los enlaces aromáticos:**

```
In[5]:= MoleculePlot["Nc1nccc(n1)c1c(C)onc1c1cccc1",  
    |representación de molécula|constante  
    PlotTheme -> "Aromatic"]  
    |tema de representación|
```



**Podemos combinar diferentes temas de la trama:**

In[6]:= **MoleculePlot["Nc1nccc(n1)c1c(C)onc1c1cccc1",**  
| representación de molécula                           | constante  
    **PlotTheme → {"Aromatic", "AllAtom", "Monochrome"} ]**  
| tema de representación

Out[6]=

