

REPRESENTACIÓN DE LAS MOLÉCULAS EN 3D

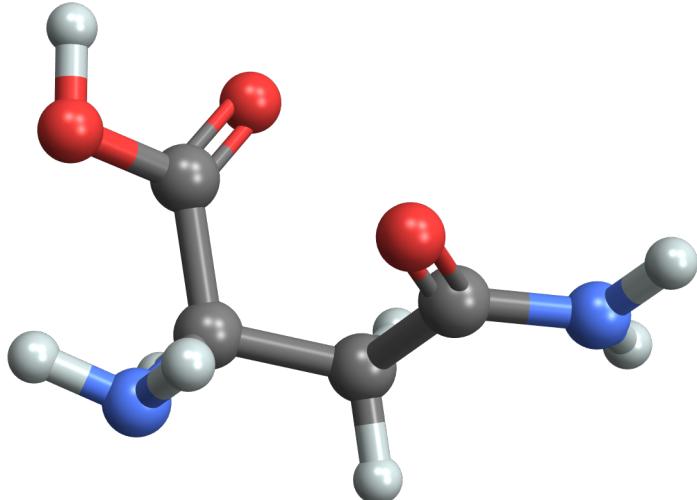
Molecule Plot 3D

Podemos crear una molécula y representarla gráficamente en 3D:

```
In[1]:= MoleculePlot3D[Molecule["NC(=O)C[C@H](C(=O)O)N"]]
```

[representación 3D de la molécula]

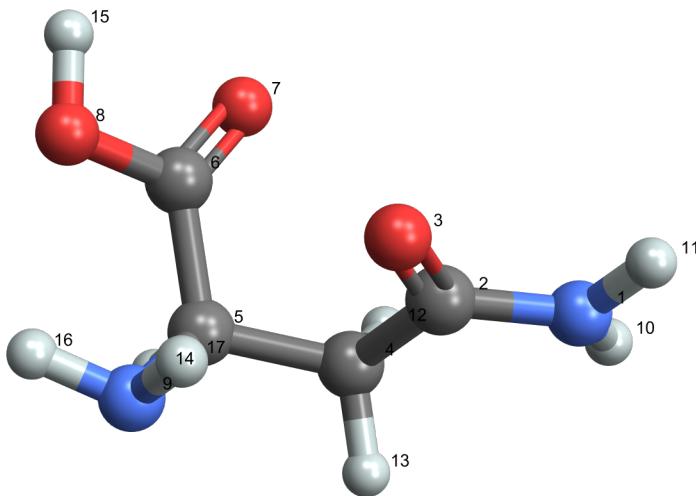
```
Out[1]=
```



Si numeramos los átomos:

In[1]:= MoleculePlot3D[Molecule["NC(=O)C[C@H](C(=O)O)N"], AtomLabels → "AtomIndex"]
representación 3D de la molécula con los valores de las etiquetas de átomos

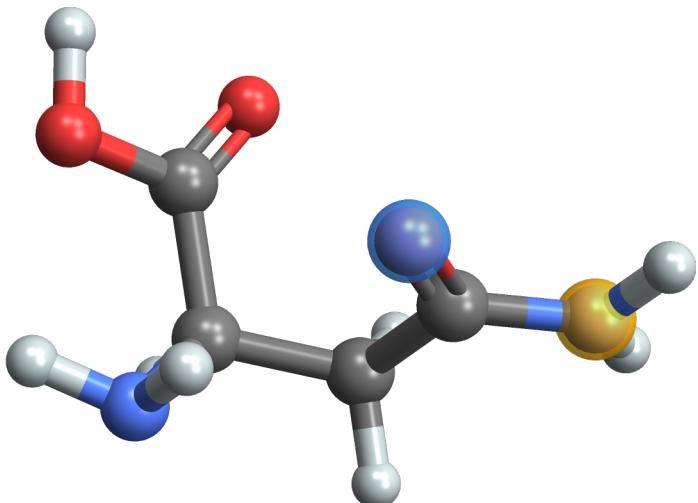
Out[1]=



Si queremos resaltar el primer y tercer átomo:

In[2]:= MoleculePlot3D[Molecule["NC(=O)C[C@H](C(=O)O)N"], {1, 3}]
representación 3D de la molécula con los valores numéricos

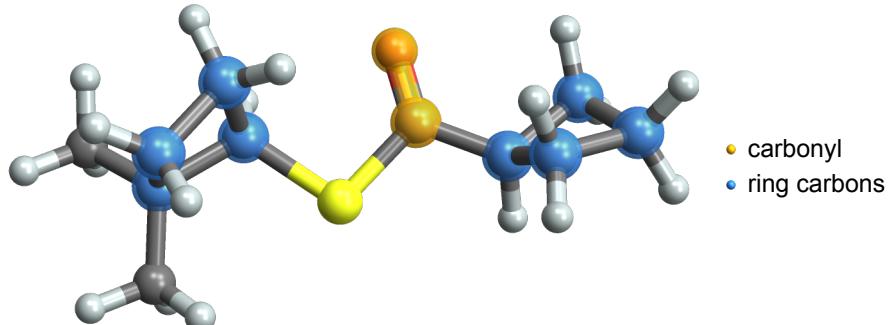
Out[2]=



Podemos resaltar patrones diferentes:

```
In[1]:= MoleculePlot3D[
  representación 3D de molécula
  "O=C(C1CCC1)S[C@@H]1CCC1(C)C", <|"carbonyl" → Bond[{"C", "O"}, "Double"],
  ⋮ constante ⋮ constante ⋮ constante ⋮ enlace ⋮ con...|notación O
  "ring carbons" → Atom["C", "RingAtomQ" → True] |>
  ⋮ Átomo ⋮ constante ⋮ verdadero
```

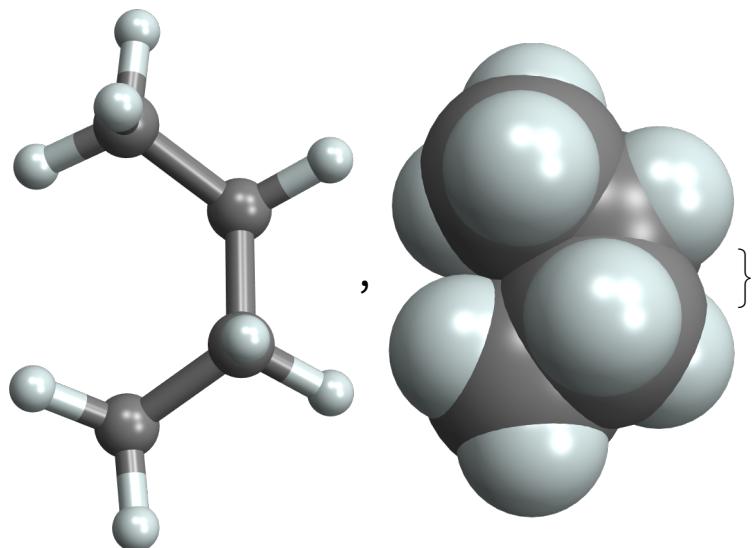
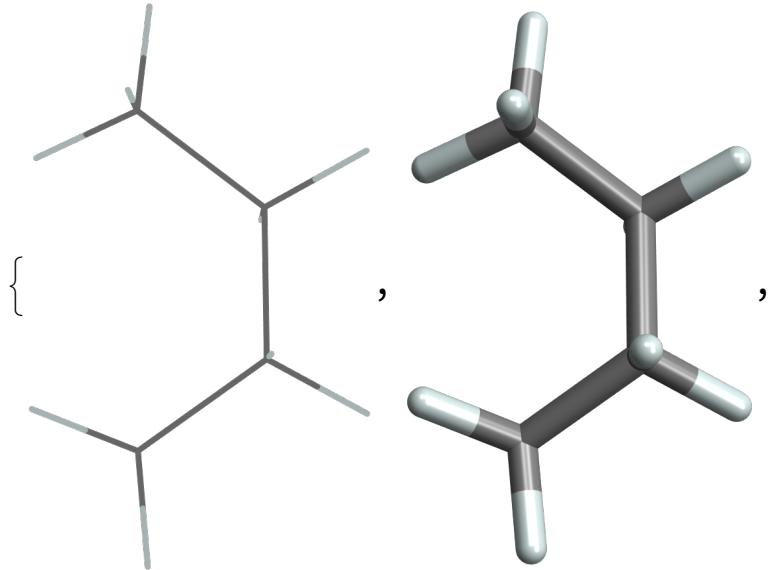
Out[1]=

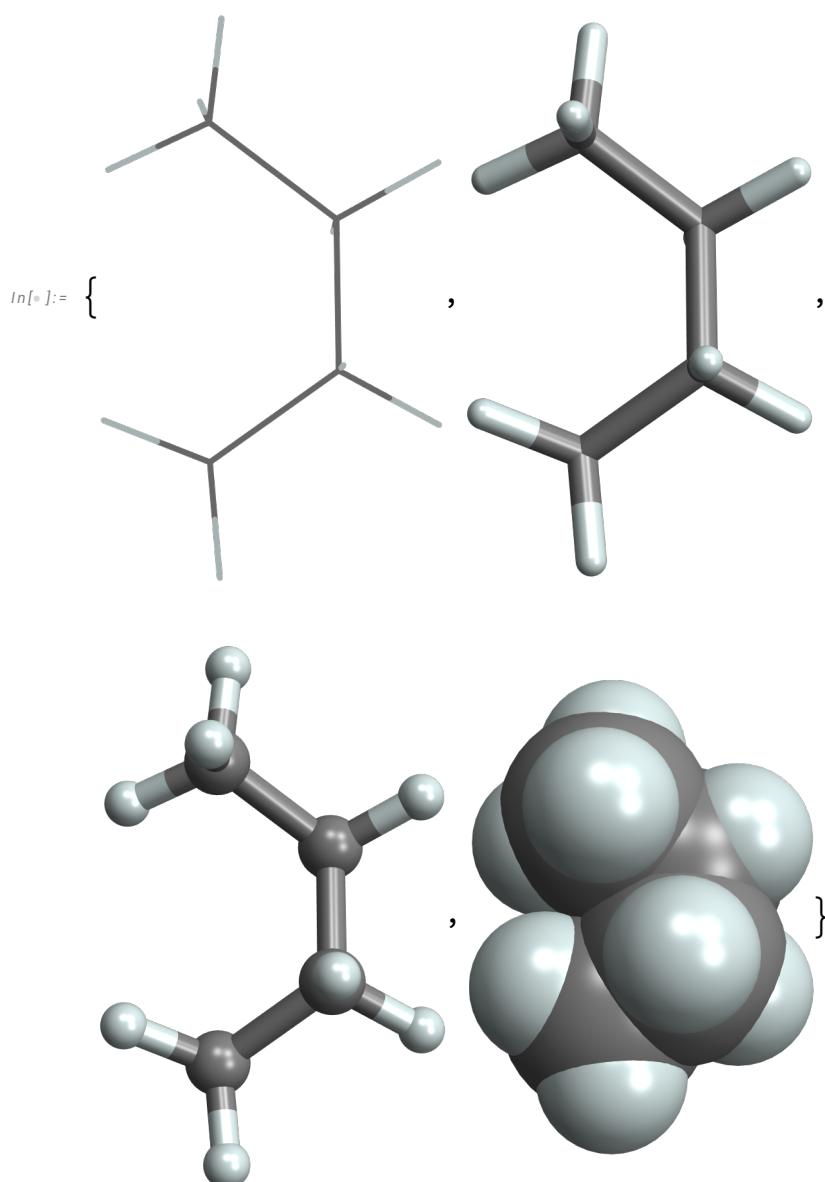


O utilizar diferentes formas de representación:

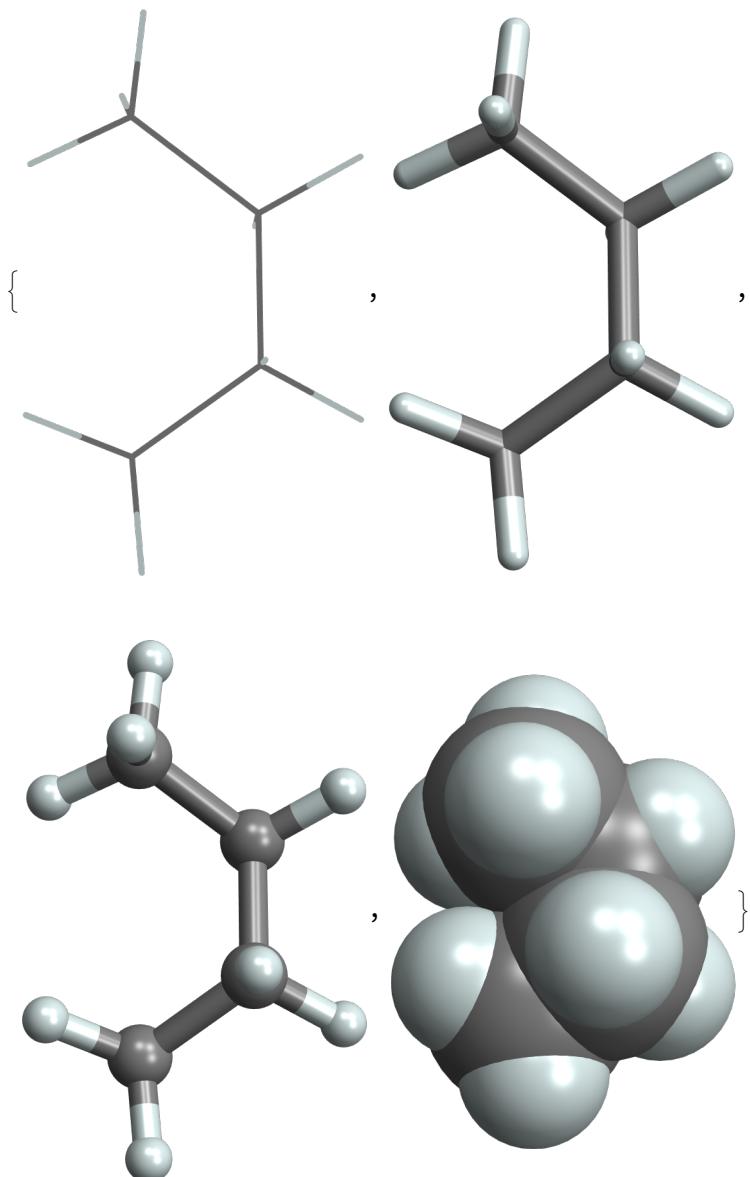
```
In[4]:= MoleculePlot3D[Molecule["CCCC"], PlotTheme -> #] & /@  
representación 3D de la molécula tema de representación  
{"Wireframe", "Tubes", "BallAndStick", "SpaceFilling"}
```

Out[4]=





Out[⁶] =

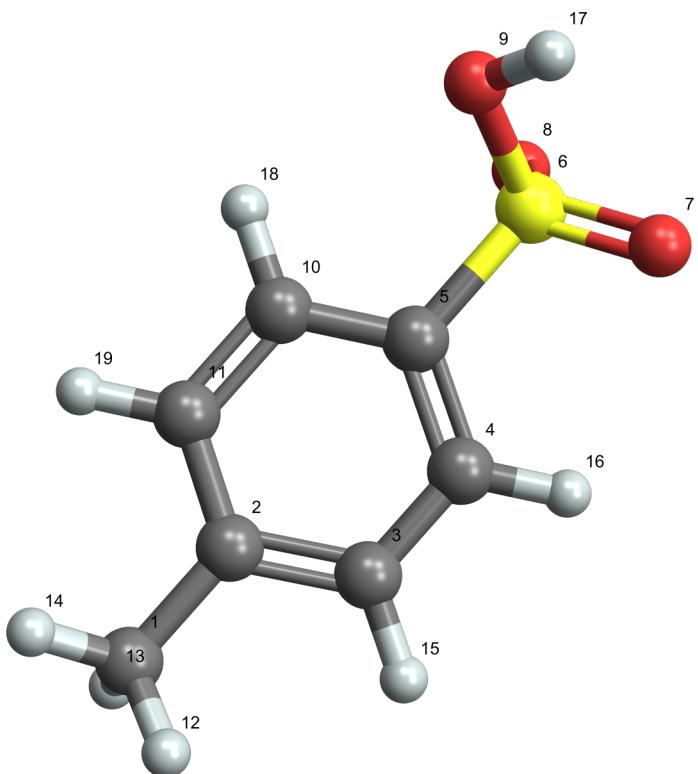


In[1]:= MoleculePlot3D[Molecule["4-methylbenzenesulfonic acid"],
representación 3D de la molécula

AtomLabels → "AtomIndex"]

[etiquetas de átomos]

Out[1]=



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

```
In[8]:= m = Molecule[{Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["O"], Atom["N"], Atom["C"], 
  |molécula| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |nota...| |átomo| |valo...| |átomo| |constante|
  Atom["O"], Atom["N"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["O"], Atom["O"], Atom["O"], 
  |átomo| |nota...| |átomo| |valo...| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |nota...| |átomo| |notació|
  Atom["C"], Atom["N"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["O"], Atom["O"], Atom["C"], 
  |átomo| |con...| |átomo| |valo...| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |nota...| |átomo| |nota...| |átomo| |constar|
  Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], 
  |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |con...| |átomo| |constante|
  Atom["C"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], 
  |átomo| |con...| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo|
  Atom["H"], 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"], Atom["H"], 
  |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo|
  Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], Atom["H"], 
  |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo| |átomo|
  {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"], Bond[{3, 4}, "Double"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{3, 5}, "Single"], Bond[{5, 6}, "Single"], Bond[{6, 7}, "Double"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{6, 8}, "Single"], Bond[{8, 9}, "Single"], Bond[{9, 10}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{10, 11}, "Single"], Bond[{11, 12}, "Double"], 
  |enlace| |enlace|
  Bond[{11, 13}, "Single"], Bond[{8, 14}, "Single"], Bond[{2, 15}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{15, 16}, "Single"], Bond[{16, 17}, "Single"], Bond[{17, 18}, "Double"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{17, 19}, "Single"], Bond[{16, 20}, "Single"], Bond[{20, 21}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{21, 22}, "Single"], Bond[{22, 23}, "Aromatic"], 
  |enlace| |enlace|
  Bond[{23, 24}, "Aromatic"], Bond[{24, 25}, "Aromatic"], 
  |enlace| |enlace|
  Bond[{25, 26}, "Aromatic"], Bond[{26, 27}, "Aromatic"], 
  |enlace| |enlace|
  Bond[{10, 5}, "Single"], Bond[{27, 22}, "Aromatic"], 
  |enlace| |enlace|
  Bond[{1, 28}, "Single"], Bond[{1, 29}, "Single"], Bond[{1, 30}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{2, 31}, "Single"], Bond[{9, 32}, "Single"], Bond[{9, 33}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{10, 34}, "Single"], Bond[{13, 35}, "Single"], Bond[{14, 36}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{14, 37}, "Single"], Bond[{14, 38}, "Single"], Bond[{15, 39}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{16, 40}, "Single"], Bond[{19, 41}, "Single"], Bond[{20, 42}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
  Bond[{20, 43}, "Single"], Bond[{21, 44}, "Single"], Bond[{21, 45}, "Single"], 
  |enlace| |enlace| |enlace|
```

```

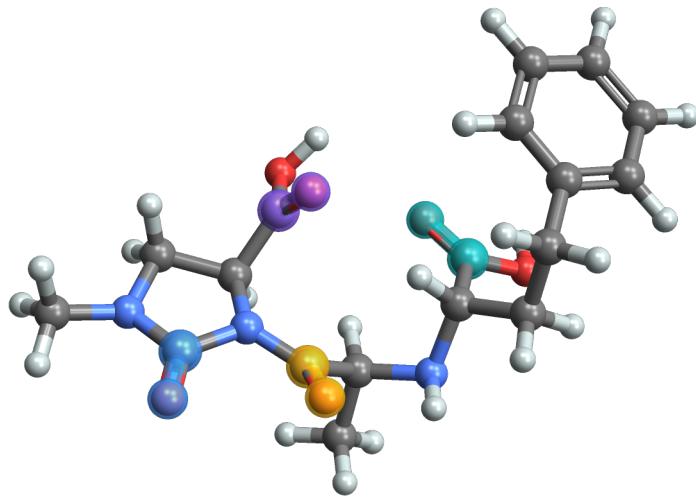
Bond[{23, 46}, "Single"], Bond[{24, 47}, "Single"], Bond[{25, 48}, "Single"],
[enlace] [enlace] [enlace]
Bond[{26, 49}, "Single"], Bond[{27, 50}, "Single"]},
[enlace] [enlace]
StereochemistryElements → {<|"StereoType" → "Tetrahedral", "ChiralCenter" → 2,
[elementos estereoquímicos]
"Direction" → "Clockwise", "FiducialAtom" → 1, "Ligands" → {3, 15, 31}|>, <|
[dirección
"StereoType" → "Tetrahedral", "ChiralCenter" → 10,
"Direction" → "Clockwise", "FiducialAtom" → 9, "Ligands" → {11, 5, 34}|>, <|
[dirección
"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 en colores diferentes:

In[5]:= MoleculePlot3D[m, carbonylPattern]
[representación 3D de molécula]

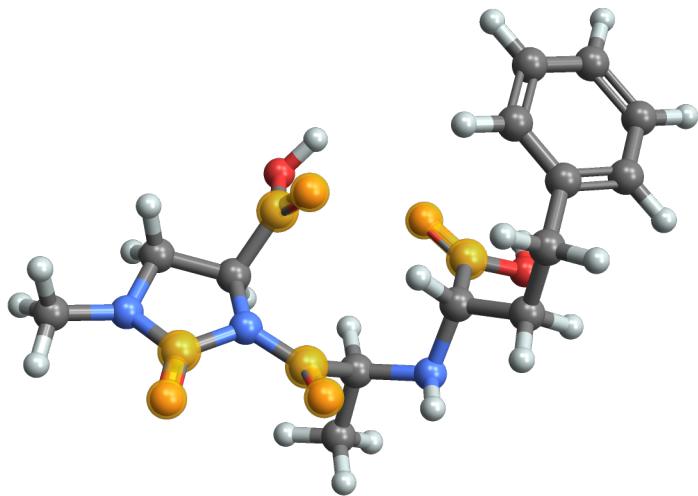
Out[5]=



O podemos resaltar todos los carbonilos en el mismo color:

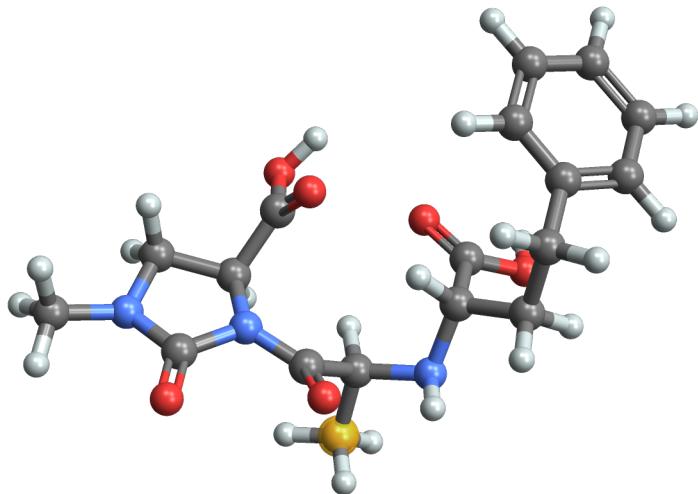
In[1]:= MoleculePlot3D[m, {carbonylPattern}]
representación 3D de molécula

Out[1]=



In[2]:= MoleculePlot3D[m, {1, Bond[{ "C", "C"}, "Double"]}]
representación 3D de molécula [enlace] [con... constante

Out[2]=



Podemos resaltar varios patrones:

```
In[1]:= MoleculePlot3D[
  representación 3D de molécula

  Molecule[{Atom["C"], Atom["N"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["N"]},
    molécula   átomo | con...| átomo | valo..| átomo | con...| átomo | con...| átomo | con...| átomo | valor numé

    Atom["C"], Atom["O"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["H"],
    |átomo | con...| átomo | nota..| átomo | con...| átomo | con...| átomo | con...| átomo | con...| átomo

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

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

  {Bond[{1, 2}, "Single"], Bond[{2, 3}, "Single"], Bond[{3, 4}, "Single"],
  |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

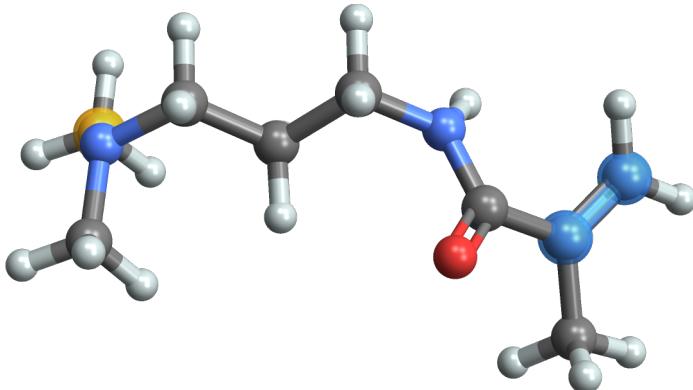
  Bond[{10, 23}, "Single"], Bond[{10, 24}, "Single"], Bond[{11, 25}, "Single"],
  |enlace |enlace |enlace

  Bond[{11, 26}, "Single"], Bond[{11, 27}, "Single"], Bond[{12, 28}, "Single"],
  |enlace |enlace |enlace

  Bond[{12, 29}, "Single"], Bond[{12, 30}, "Single"]}],

{1, Bond[{"C", "C"}, "Double"]}]
  |enlace |con...| constante
```

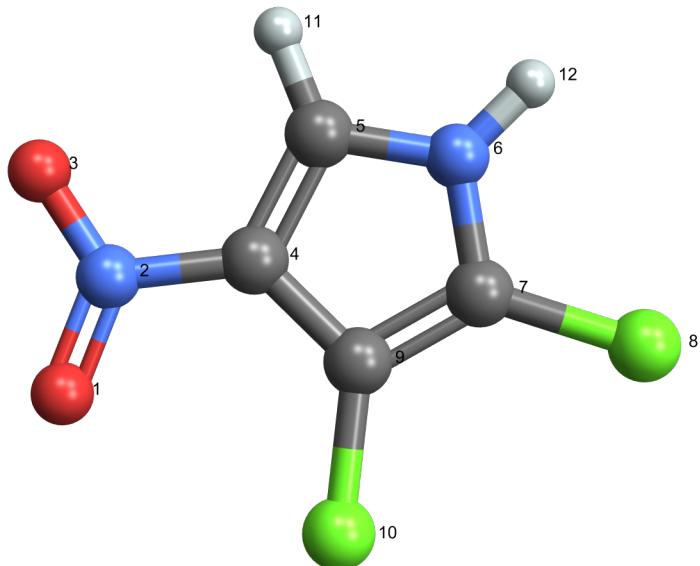
Out[1]=



Podemos etiquetar todos los átomos por su índice:

```
In[1]:= MoleculePlot3D[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"], 
  representación 3D de la molécula
  AtomLabels → "AtomIndex"]
  [etiquetas de átomos]
```

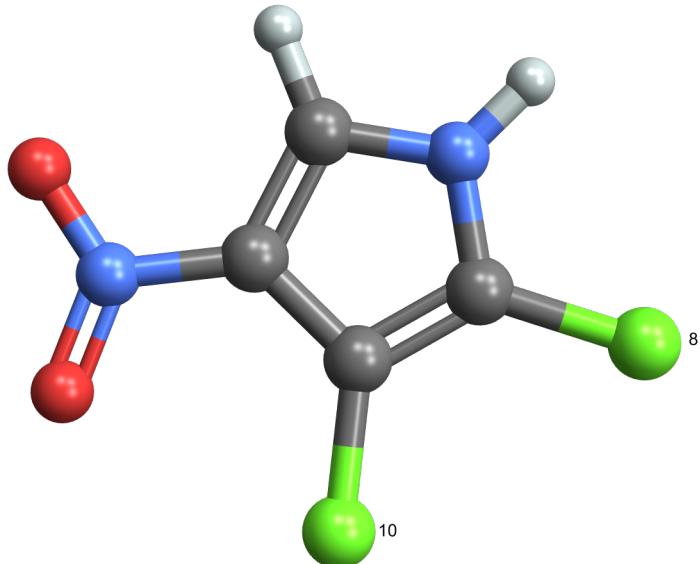
Out[1]=



Podemos etiquetar solo los átomos de cloro:

```
In[2]:= MoleculePlot3D[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"], 
  representación 3D de la molécula
  AtomLabels → {Atom["Cl"] → "AtomIndex"}]
  [etiquetas de átomos]
```

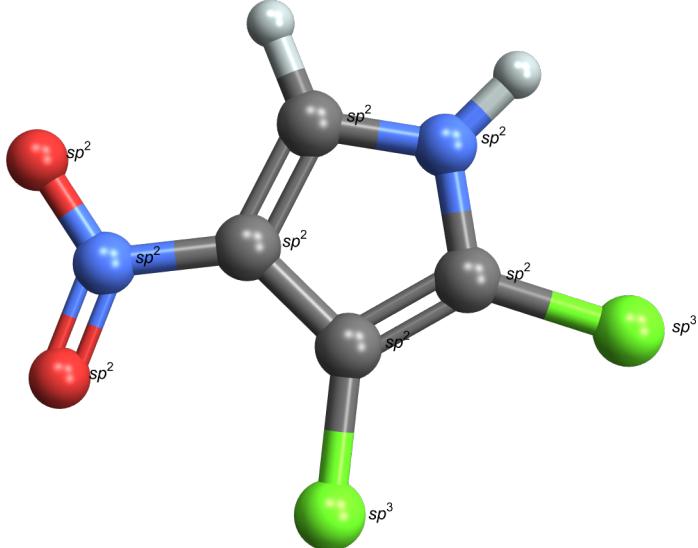
Out[2]=



O escribir las hibridaciones de los enlaces:

```
In[1]:= MoleculePlot3D[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"], 
  representación 3D de la molécula
  AtomLabels → {Atom[Except["H"]] → MoleculeProperty["OrbitalHybridization"]}]
  [etiquetas de átomos → [átomo Excepto] → [propiedad de molécula]
```

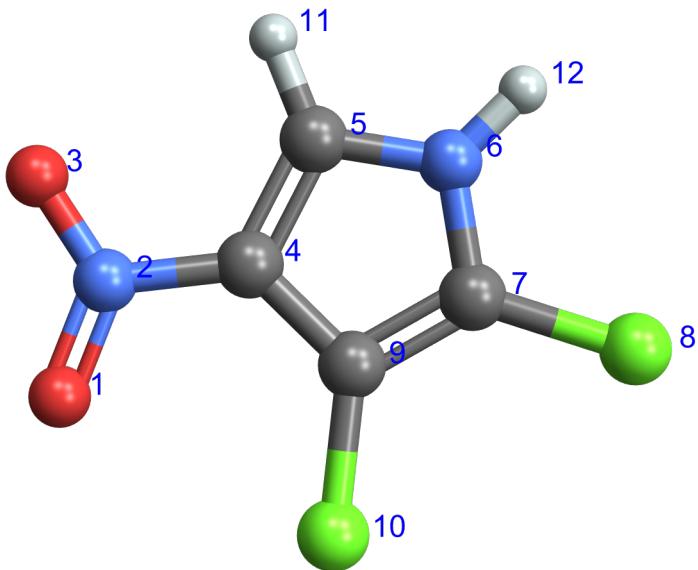
Out[1]=



Podemos configurar las etiquetas para que tengan un estilo:

```
In[2]:= MoleculePlot3D[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"], 
  representación 3D de la molécula
  AtomLabels → "AtomIndex", AtomLabelStyle → Directive[FontSize → 16, Blue]
  [etiquetas de átomos → [índice de átomo] → [estilo de etiqueta de átomo] → [directiva] → [tamaño de tipo de 16] → [azul]
```

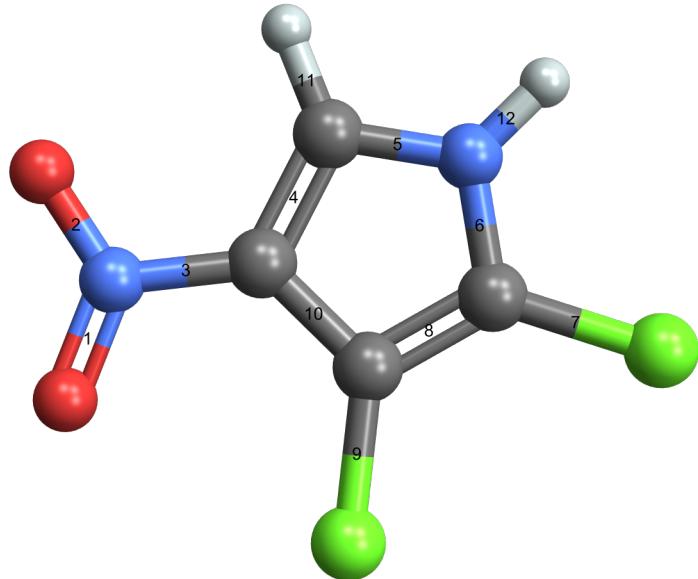
Out[2]=



También podemos etiquetar los enlaces de forma general:

```
In[=]:= MoleculePlot3D[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"], 
  representación 3D de la molécula
  BondLabels → "BondIndex"]
  [etiquetas de enlaces]
```

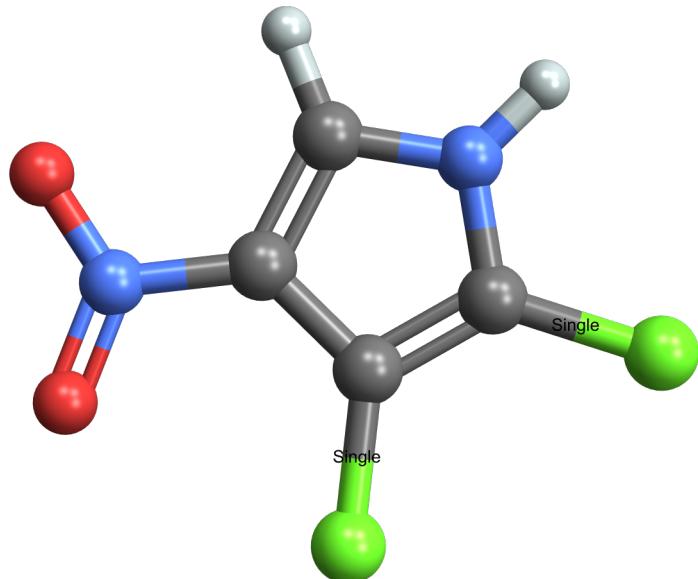
Out[=]=



O etiquetarlos de forma específica, por ejemplo solo los enlaces con los átomos de cloro:

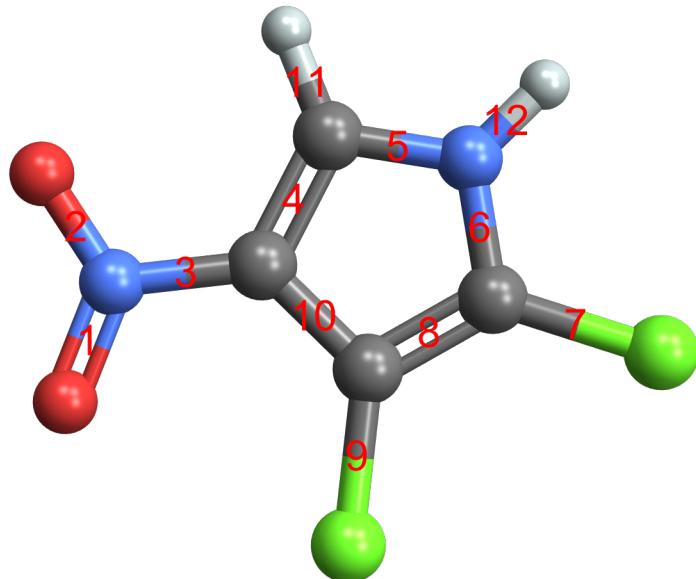
```
In[=]:= MoleculePlot3D[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"], 
  representación 3D de la molécula
  BondLabels → {Bond[{"Cl", _}] → MoleculeProperty["BondType"]}]
  [etiquetas de enlaces]
  [propiedad de molécula]
```

Out[=]=



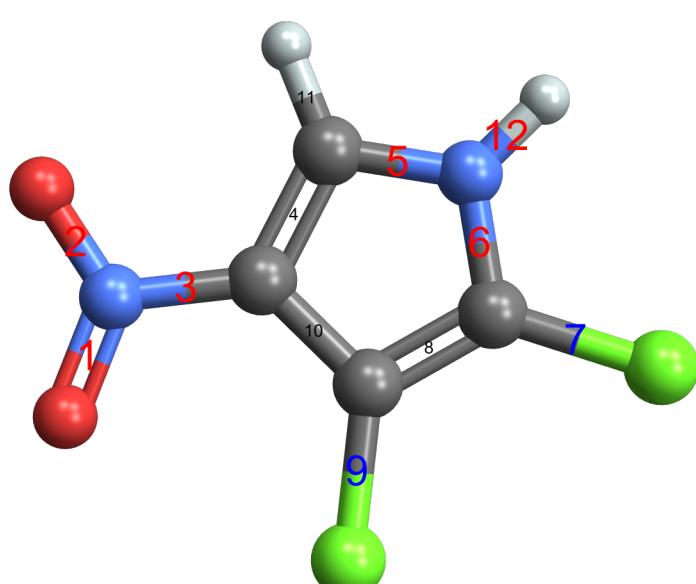
Siempre podemos dar las etiquetas con un determinado estilo:

```
In[1]:= MoleculePlot3D[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"], 
  representación 3D de la molécula
  BondLabels → "BondIndex", BondLabelStyle → Directive[FontSize → 22, Red]]
  Etiquetas de enlaces Estilo de etiqueta de enlace directiva Tamaño de tipo de letra roja
Out[1]=
```



O etiquetarlos de forma diferente según sus átomos:

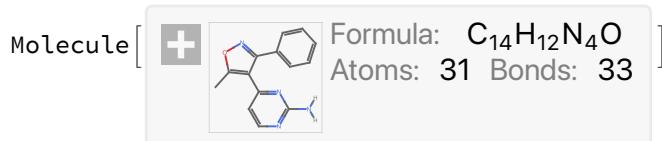
```
In[2]:= MoleculePlot3D[Molecule["2,3-dichloro-4-nitro-1H-pyrrole"], 
  representación 3D de la molécula
  BondLabels → "BondIndex",
  Etiquetas de enlaces
  BondLabelStyle → {Bond[{"N", _}] → Directive[FontSize → 22, Red],
  Estilo de etiqueta de enlace Enlace Valor numérico directiva Tamaño de tipo de letra roja
  Bond[{"Cl", _}] → Directive[FontSize → 22, Blue]}
  Enlace directiva Tamaño de tipo de letra azul
Out[2]=
```



Podemos especificar diferentes colores para los elementos atómicos:

```
In[1]:= p = Molecule["Nc1nccc(n1)c1c(C)onc1c1ccccc1"]
          molécula
          constante
```

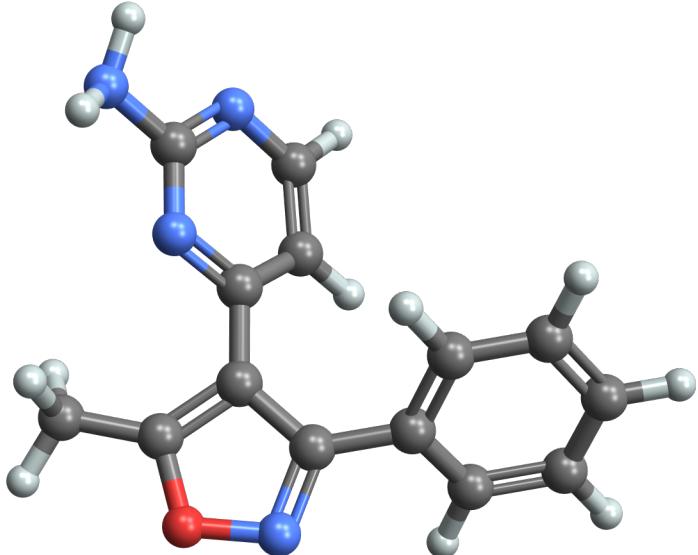
Out[1]=



La representamos:

```
In[2]:= MoleculePlot3D[p]
          representación 3D de molécula
```

Out[2]=

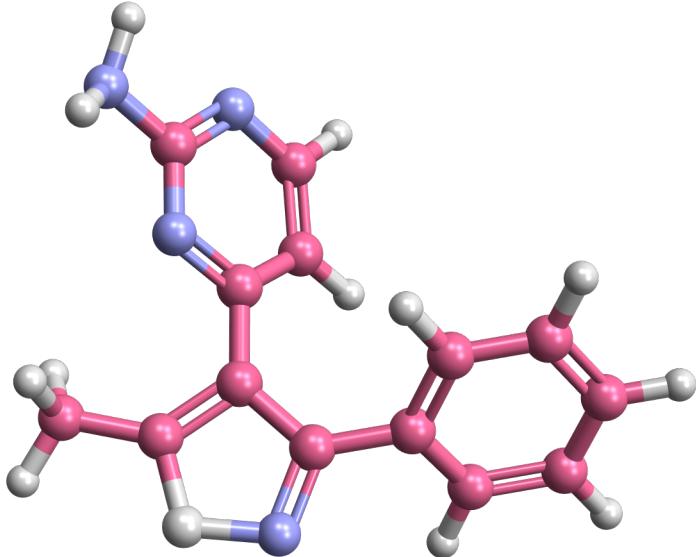


Podemos resaltar los enlaces que nos interesen:

```
In[8]:= MoleculePlot3D[p, ColorRules -> {"C" -> RGBColor[0.79, 0.34, 0.5], "N" -> RGBColor[0.5, 0.51, 0.81], _ -> GrayLevel[.7]}]
```

representación 3D de moléculas | reglas de color | con color RGB
 valor color RGB | nivel de gris

Out[8]=

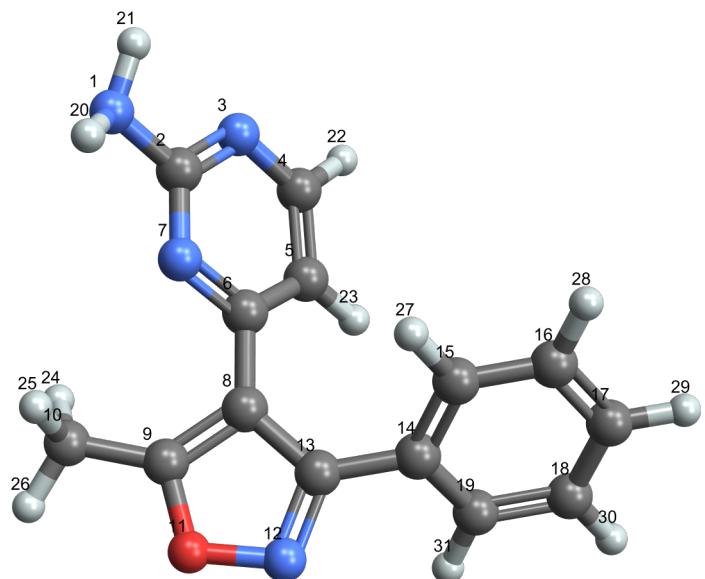


Si numeramos los átomos de la molécula:

```
In[9]:= MoleculePlot3D[p, AtomLabels -> "AtomIndex"]
```

representación 3D de moléculas | etiquetas de átomos

Out[9]=

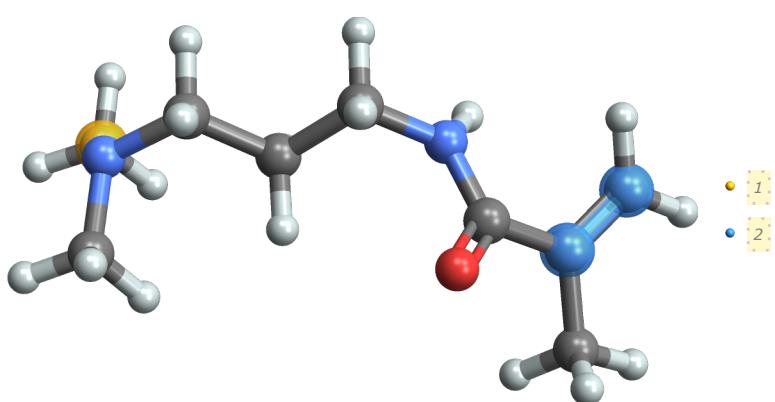


Podemos utilizar marcadores de posición para diferentes leyendas:

```
In[1]:= r = Molecule[{Atom["C"], Atom["N"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["C"], Atom["N"], 
  molécula   |átomo |con...|átomo |valo...|átomo |con...|átomo |con...|átomo |con...|átomo |valor num
  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
  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
  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
  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
```

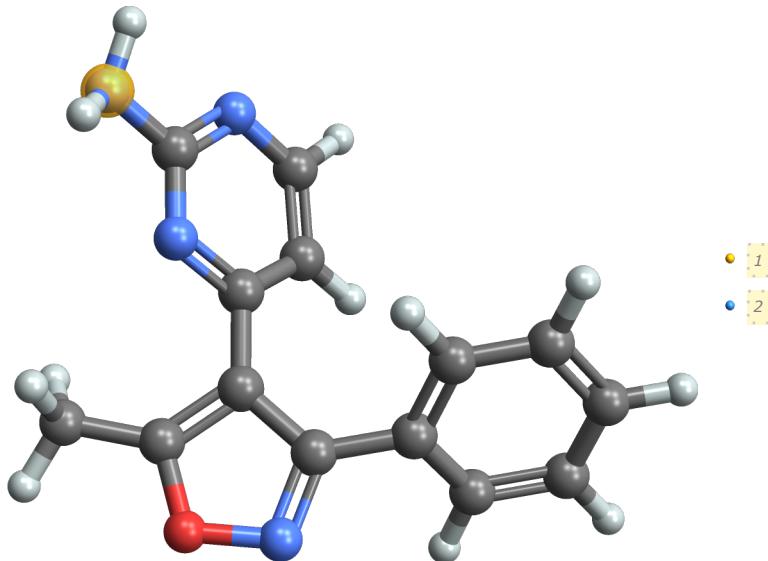
In[2]:= MoleculePlot3D[r, {1, Bond[{ "C", "C"}, "Double"]}], PlotLegends → Automatic]

Out[2]=



In[1]:= `MoleculePlot3D[p, {1, Bond[{"C", "C"}, "Double"]}, PlotLegends → Automatic]`
 representación 3D de molécula [enlace] [constante] [leyendas de repr...] [automático]

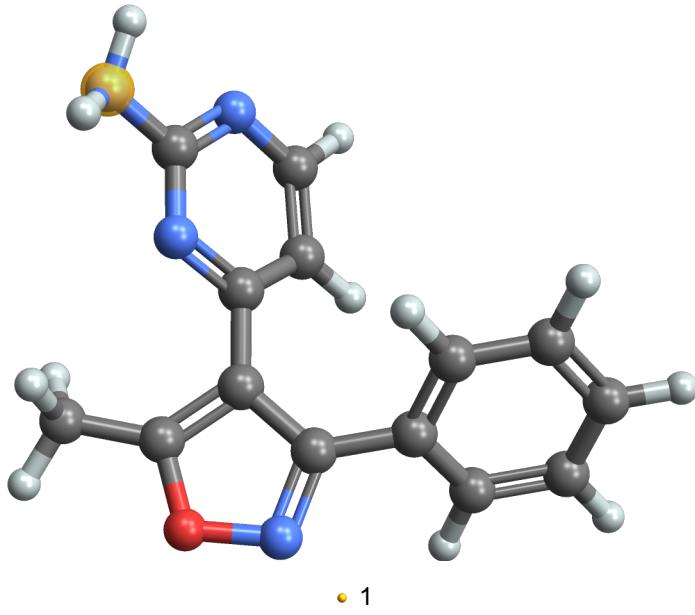
Out[1]=



Podemos modificar la posición de la leyenda:

In[2]:= `MoleculePlot3D[p, {1, Bond[{"C", "C"}, "Double"]}, PlotLegends → Placed["Expressions", Below]]`
 representación 3D de molécula [enlace] [constante] [leyendas de repr...] [colocado] [debajo]

Out[2]=

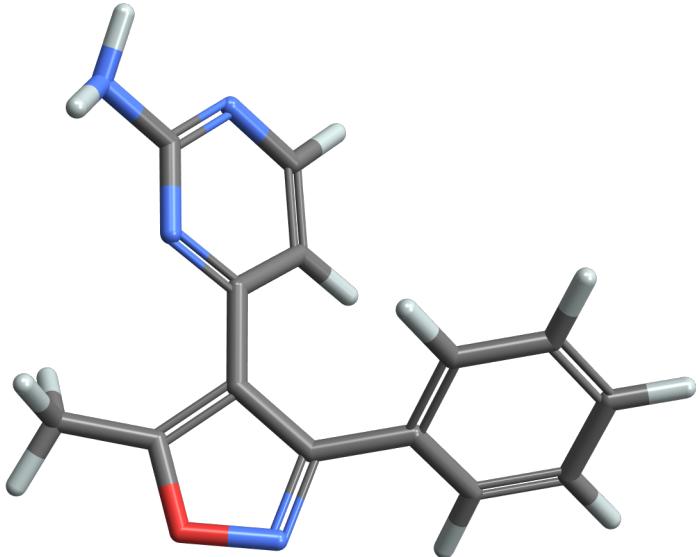


Podemos modificar el formato de presentación de la molécula:

```
In[1]:= q = Molecule["Nc1nccc(n1)c1c(C)onc1c1ccccc1"];
          molécula constante
```

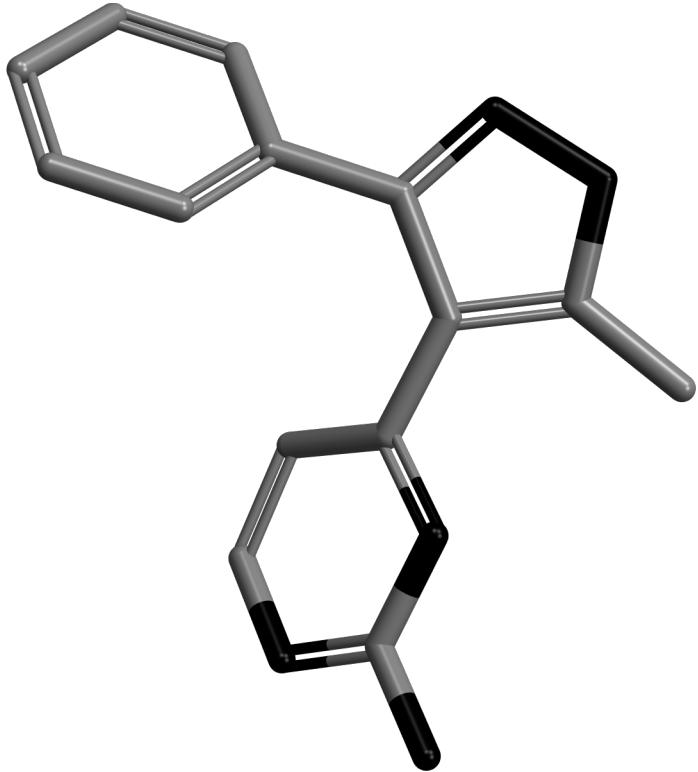
```
In[2]:= MoleculePlot3D[q, PlotTheme -> "Tubes"]
          representación 3D de m... tema de representación
```

Out[2]=



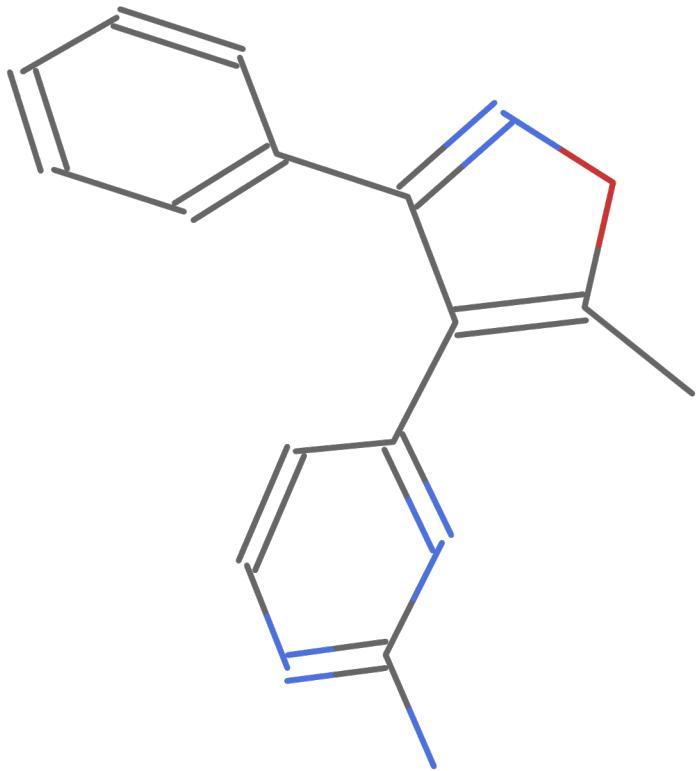
```
In[3]:= MoleculePlot3D[q, PlotTheme -> {"HeavyAtom", "Tubes", "Monochrome"}]
          representación 3D de m... tema de representación
```

Out[3]=



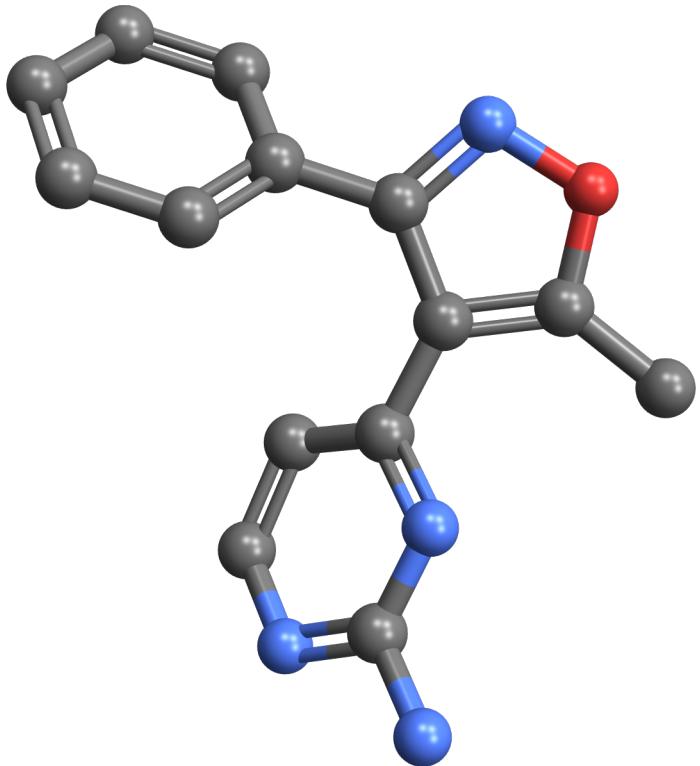
In[1]:= `MoleculePlot3D[q, PlotTheme -> {"HeavyAtom", "Wireframe"}]`
↳ representación 3D de m... tema de representación

Out[1]=



In[2]:= `MoleculePlot3D[q, PlotTheme -> {"HeavyAtom", "BallAndStick"}]`
↳ representación 3D de m... tema de representación

Out[2]=



In[8]:= **MoleculePlot3D[q, PlotTheme -> {"HeavyAtom", "Spacefilling"}]**
|representación 3D de m...|tema de representación

Out[8]=

