

Extracción de Segmentos

1. Parsear estructura

BioPython MMCIFParser
lee el archivo .cif

2. NeighborSearch

Filtrar aminoácidos
a distancia $\leq 4.0 \text{ \AA}$
del ligando

3. Extraer segmentos

Mayúsculas = AA
que interactúan
con el ligando

Ejemplo de salida: CxxHyyyC →
segmento con C, H, C interactuantes