

**Fecha Máxima de entrega: Viernes 12 de Enero**

**Instrucciones:** Resuelva el problema propuesto usando Python. Envíe todos los archivos necesarios para reproducir sus resultados (archivos de datos, códigos .py, notebooks .ipynb, etc.) por email a [evohringer@udec.cl](mailto:evohringer@udec.cl).

En esta tarea usted deberá calcular el centro de masa de la molécula de cafeína.

Las coordenadas de los átomos que forman esta molécula la podrá bajar en <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/cafeine#section=3D-Conformer> apretando el botón *Download* y seleccionando uno de los formatos ofrecidos (recomiendo el formato *sdf*).

- Obtenga del formato que mas le acomode las coordenadas y el tipo de átomo (elemento) que componen la molécula.
- Utilizando numpy calcule los componentes  $x$ ,  $y$  y  $z$  del centro de masa de la molécula ( $cms_{x,y,z}$ ) mediante la siguiente fórmula:

$$cms_x = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^N m_i * x_i \quad (1)$$

$$cms_y = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^N m_i * y_i \quad (2)$$

$$cms_z = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^N m_i * z_i, \quad (3)$$

en donde  $m_i$  es la masa en g del elemento que representa el átomo,  $x_i$  la coordenada  $x$  del átomo  $i$ ,  $M$  la masa total de la molécula en g, y  $N$  es el número total de átomos en la molécula.