

Proyecto 1 de Laboratorio

ALGORITMOS Y ESTRUCTURAS DE DATOS

SEMESTRE: 2021-2

Las soluciones computacionales abarcan distintas áreas y diversas disciplinas del mundo real. Este proyecto busca resolver una problemática asociada al campo de la Química Orgánica donde el estudiante debe utilizar las distintas estructuras dinámicas de los TDAs listas ,pilas y colas vistos en clases.

Introducción:

Los alcanos son compuestos orgánicos que se componen sólo de átomos de carbono y de hidrógeno, llamados hidrocarburos. Los átomos de carbonos forman una cadena continua sin ramificaciones que se denominan alcanos de cadena lineal. A continuación, se muestran los nombres de los alcanos con número de carbonos 1,2,3 y 4.

NOMBRE DEL ALCANO	ESTRUCTURA DE KEKULÉ	ESTRUCTURA CONDENSADA
<i>metano</i>	$ \begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array} $	CH_4
<i>etano</i>	$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array} $	CH_3CH_3
<i>propano</i>	$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array} $	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$
<i>butano</i>	$ \begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \quad \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array} $	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

Los números relativos de átomos de carbono e hidrógeno están dados por la fórmula general de la molécula de un alcano que es:

$$\text{C}_n\text{H}_{2n+2} \quad n > 0 \in \mathbb{N}$$

Entonces, si un alcano tiene **un** átomo de carbono, debe tener cuatro átomos de hidrógeno; si tiene **dos** átomos de carbono, debe tener seis átomos de hidrógeno. En la tabla siguiente se muestran los **nombres** de varios alcanos de cadena lineal según su número de carbonos.

NÚMERO DE CARBONOS	FÓRMULA MOLECULAR	NOMBRE DEL ALCANO	ESTRUCTURA CONDENSADA
1	CH ₄	metano	CH ₄
2	C ₂ H ₆	etano	CH ₃ CH ₃
3	C ₃ H ₈	propano	CH ₃ CH ₂ CH ₃
4	C ₄ H ₁₀	butano	CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₃
5	C ₅ H ₁₂	pentano	CH ₃ (CH ₂) ₃ CH ₃
6	C ₆ H ₁₄	hexano	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH ₃
7	C ₇ H ₁₆	heptano	CH ₃ (CH ₂) ₅ CH ₃
8	C ₈ H ₁₈	octano	CH ₃ (CH ₂) ₆ CH ₃
9	C ₉ H ₂₀	nonano	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH ₃
10	C ₁₀ H ₂₂	decano	CH ₃ (CH ₂) ₈ CH ₃
11	C ₁₁ H ₂₄	undecano	CH ₃ (CH ₂) ₉ CH ₃
12	C ₁₂ H ₂₆	dodecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ CH ₃
13	C ₁₃ H ₂₈	tridecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₁ CH ₃
14	C ₁₄ H ₃₀	tetradecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₂ CH ₃
15	C ₁₅ H ₃₂	pentadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₃ CH ₃
16	C ₁₆ H ₃₄	hexadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ CH ₃
17	C ₁₇ H ₃₆	heptadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₅ CH ₃
18	C ₁₈ H ₃₈	octadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₆ CH ₃
19	C ₁₉ H ₄₀	nonadecano	CH ₃ (CH ₂) ₁₇ CH ₃
20	C ₂₀ H ₄₂	eicosano	CH ₃ (CH ₂) ₁₈ CH ₃
21	C ₂₁ H ₄₄	heneicosano	CH ₃ (CH ₂) ₁₉ CH ₃
22	C ₂₂ H ₄₆	docosano	CH ₃ (CH ₂) ₂₀ CH ₃
23	C ₂₃ H ₄₈	tricosano	CH ₃ (CH ₂) ₂₁ CH ₃
24	C ₂₄ H ₅₀	tetracosano	CH ₃ (CH ₂) ₂₂ CH ₃
30	C ₃₀ H ₆₂	triacontano	CH ₃ (CH ₂) ₂₈ CH ₃
40	C ₄₀ H ₈₂	tetracontano	CH ₃ (CH ₂) ₃₈ CH ₃

A medida que el número de carbonos de un alcano aumenta más allá de tres, se incrementa el número de estructuras posibles para la misma fórmula molecular. Es decir, los compuestos como butano e isobutano, que tienen la misma fórmula molecular, pero difieren en el orden en el que se unen los átomos, se denominan isómeros estructurales, es decir, sus moléculas tienen estructuras diferentes. Cada uno de estos alcanos se nombran (dependiendo de su estructura) con un **nombre común** (color rojo en los ejemplos) y/o con un **nombre sistemático** (color azul en los ejemplos).

Por lo tanto, para una misma fórmula con número de carbonos superior a 5, el número de isómeros estructurales aumenta con rapidez a medida que se incrementa el número de carbonos del alcano. Veamos algunos ejemplos:

Ejemplo 1: Existen dos estructuras posibles para un alcano con fórmula molecular C_4H_{10} . El butano (alcano de cadena lineal) y el alcano de cadena ramificada llamado isobutano. Ambas estructuras satisfacen el requisito de que cada carbono forma cuatro enlaces y cada hidrógeno forme sólo uno.

FÓRMULA MOLECULAR	ESTRUCTURA LINEAL	ESTRUCTURA RAMIFICADA
C_4H_{10}	$CH_3CH_2CH_2CH_3$ butano	CH_3CHCH_3 $ $ CH_3 isobutano <p>El nombre isobutano nos dice que el compuesto es un alcano de cuatro carbonos con una unidad estructural iso:</p> CH_3CH- $ $ CH_3

Ejemplo 2: Existen tres alcanos con fórmula molecular C_5H_{12} . El pentano es el alcano de cadena lineal. El isopentano, como su nombre indica, tiene una unidad estructural iso y cinco átomos de carbono. Y el 2,2-dimetilpropano que es el otro alcano de cadena ramificada donde explicaremos su unidad estructural en las reglas de nomenclatura definidas más adelante.

FÓRMULA MOLECULAR	ESTRUCTURA LINEAL	ESTRUCTURA RAMIFICADA 1	ESTRUCTURA RAMIFICADA 2
C_5H_{12}	$CH_3CH_2CH_2CH_2CH_3$ pentano	$CH_3CHCH_2CH_3$ $ $ CH_3 isopentano	CH_3 $ $ CH_3CCH_3 $ $ CH_3 2,2-dimetilpropano

Ejemplo 3: Existen cinco isómeros estructurales con fórmula molecular C_6H_{14} . Una vez más, los nombres de las unidades estructurales ramificadas 2,3, 4 y 5 (color azul) se explicarán en las reglas definidas más adelante.

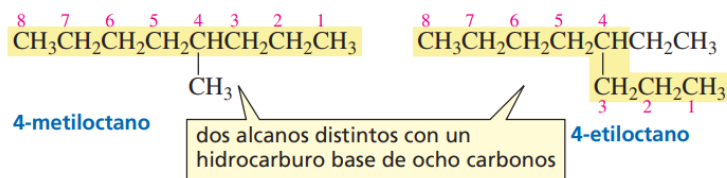
FÓRMULA MOLECULAR	ESTRUCTURA LINEAL	ESTRUCTURA RAMIFICADA 1	ESTRUCTURA RAMIFICADA 2	ESTRUCTURA RAMIFICADA 3	ESTRUCTURA RAMIFICADA 4
C_6H_{14}	$CH_3CH_2CH_2CH_2CH_2CH_3$ hexano hexano	$CH_3CHCH_2CH_2CH_3$ $ $ CH_3 isohexano 2-metilpentano	CH_3 $ $ $CH_3CCH_2CH_3$ $ $ CH_3 2,2-dimetilbutano	$CH_3CH_2CHCH_2CH_3$ $ $ CH_3 3-metilpentano	$CH_3CH-CHCH_3$ $ $ $ $ CH_3 CH_3 2,3-dimetilbutano

Por otro lado, para completar el nombre sistemático de un alcano es necesario saber que al eliminar un hidrógeno de un alcano se obtiene un **sustituyente alquilo** (o grupo alquil). Los sustituyentes alquilo se designan según la tabla siguiente:

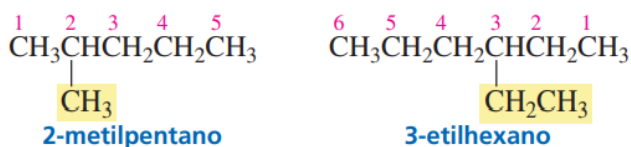
SUSTITUYENTE ALQUILO	NOMBRE
$\text{CH}_3\text{—}$	<i>metil</i>
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{—}$	<i>etil</i>
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{—}$	<i>protil</i>
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{—}$	<i>butil</i>
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{—}$	<i>pentil</i>
R—	<i>cualquier grupo alquilo</i>

Entonces, el **nombre sistemático de un alcano** (nomenclatura de los alcanos) se obtiene siguiendo las siguientes reglas:

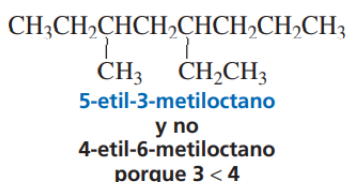
- Se determina el número de carbonos en la cadena continua de carbonos más larga. Esta cadena se denomina hidrocarburo base o cadena principal. El nombre que indica el número de carbonos en el hidrocarburo base se convierte en el “apellido” del alcano. Por ejemplo, un hidrocarburo base con ocho carbonos se llamaría octano. La cadena continua más larga no siempre es una cadena lineal; a veces se tiene que “doblar la esquina” para obtener la cadena continua más larga. El primer nombre del alcano metil y etil de los ejemplos se obtienen del nombre del sustituyente alquino correspondiente acompañado previamente (al inicio) con un número. Esto se indica en la siguiente regla.



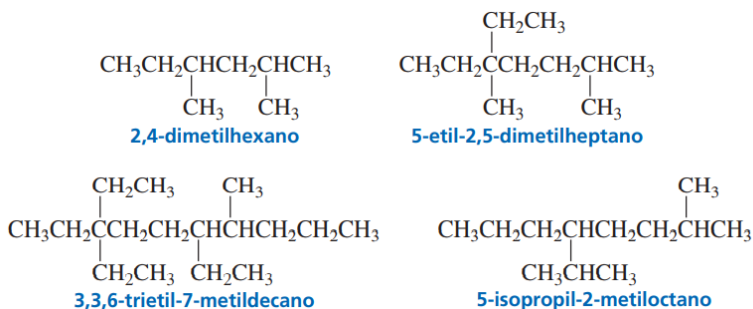
- El nombre de cualquier sustituyente alquilo unido al hidrocarburo base se cita antes del nombre del hidrocarburo base, junto con un número que designa al carbono al que se encuentra unido. La cadena se numera en la dirección en que se asigne al sustituyente el número más bajo posible. El nombre de sustituyente y del hidrocarburo base se une para formar una sola palabra, y se coloca un guion entre el número y el nombre del sustituyente.



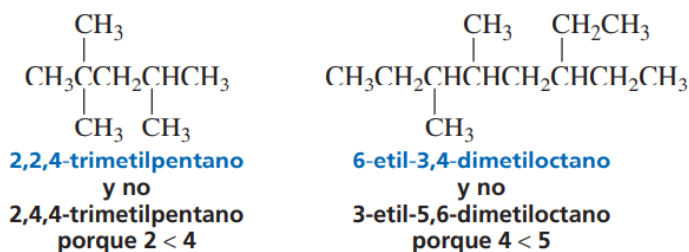
3. Si el hidrocarburo base tiene unido más de un sustituyente, la cadena se enumerará en la dirección que tenga como resultado el número más bajo posible para el nombre del compuesto. Los sustituyentes se enlistan en orden alfabético (no numérico), asignando a cada uno su valor apropiado. En el siguiente ejemplo, el nombre correcto (5-etil-3-metiloctano) tiene un 3 como número mínimo, mientras que el nombre incorrecto (4-etil-6-metiloctano) contiene un 4 como su número mínimo:



Si dos o más sustituyentes son iguales, se utilizan los prefijos “di”, “tri” y “tetra” para indicar cuántos sustituyentes iguales tiene el compuesto. Los números que indican la ubicación de los sustituyentes iguales se colocan juntos y separados por comas. Observe que debe haber tantos números en el nombre como sustituyentes. Al ordenar en forma alfabética se ignoran los prefijos di, tri, tetra, sec y ter, y se toman en cuenta los prefijos iso y ciclo.



4. Cuando al contar en ambas direcciones se obtiene el mismo número mínimo para alguno de los sustituyentes, se selecciona la dirección que brinda el número más pequeño para alguno de los demás sustituyentes.



Tarea:

Usando las reglas anteriormente descritas, se le solicita crear un programa el cual, dado un conjunto de alcanos (recibidos a través del archivo alcanos.txt) determine sus nombres sistemáticos utilizando las reglas anteriormente enumeradas, y lo guarde en un archivo salida.txt. Además, debe producir un archivo diagramas.txt el cual contendrá el dibujo de la estructura de cada alcano.

Un ejemplo de la entrada es la siguiente:

archivo: alcanos.txt

```
3
32-#3#2-#3#3
32+-#23##3#22-#3#3
22+-#23##23#22-#23#+#3#223
```

Donde la primera fila indica la cantidad de alcanos que posee el archivo y cada fila corresponde a la representación de un alcano a través de la siguiente sintaxis:

- Los números 2 y 3 (excepto el número de la primera fila) representan el número de hidrógenos para la tupla de átomos C (carbono) (Hidrógeno)H del alcano.
- El signo + significa que un sustituyente alquino está presente en la parte superior del átomo de Carbono correspondiente, seguido de su fórmula. El inicio y fin de la fórmula del sustituyente se representa con el símbolo #.
- El signo - significa que un sustituyente alquino está presente en la parte inferior del átomo de Carbono correspondiente, seguido de su fórmula. El inicio y fin de la fórmula del sustituyente se representan con el mismo símbolo #.
- Cuando encuentre los signos + y - seguidos, es porque posee 2 sustituyentes, superior e inferior, en el átomo de carbono correspondiente.

La salida producida por el archivo de entrada descrito en el punto anterior, corresponde a los archivos "salida.txt" y "diagramas.txt", los cuales deben contener lo siguiente:

archivo: salida.txt

```
2,4-dimetilhexano
5-etil-2,5-dimetilheptano
3,3,6-trietil-7-metildecano
```

archivo: diagramas.txt

```
1
2
3  CH3CH2CHCH2CHCH3
4  |   |   |   |   |
5  |   |   |   |   |
6  |   |   |   |   |
7  |   |   |   |   |
8  |   |   |   |   |
9  CH3CH2CCH2CH2CHCH3
10 |   |   |   |   |
11 |   |   |   |   |
12 |   |   |   |   |
13 |   |   |   |   |
14 |   |   |   |   |
15 CH2CH2CCH2CH2CHCH2CH2CH3
16 |   |   |   |   |
17 |   |   |   |   |
```

Observe que el archivo `diagramas.txt` contiene dos líneas en blanco en la parte superior debido a que el primer alcano no tiene enlaces hacia arriba.

También observe que cuando en la misma línea, un carbono tiene dos sustituyentes (superior e inferior) solo lleva un átomo de Carbono, como se observa en la línea 9 y la línea 15.

Instrucciones

1. La fecha de entrega es el **domingo 26 de septiembre hasta las 23:59 horas**.
2. Este proyecto es individual. No comparta sus códigos o especificaciones de implementación con sus compañeros, ya que si su proyecto es similar a otro, será evaluado con la nota mínima.
3. La implementación debe ser con lenguaje C. Usted tiene libertad para modelar la solución, sin embargo, por obligación debe utilizar estructuras dinámicas listas, colas o pilas para almacenar los alcanos.
4. Los formatos de entrada y salida no son modificables, por lo tanto, debe seguirlos de manera estricta. También debe seguir la estructura de archivos propuesta.
5. La entrega se realizará a través de su repositorio privado en github, creado con el link enviado a su correo.
6. Si no sigue las instrucciones, su docente puede decidir no revisar su proyecto y evaluarlo con nota mínima.

Código de Honor:

Toda persona inscrita en este curso se compromete a:

- Actuar con honestidad, rectitud y buena fe frente a sus profesores y compañeros.
- No presentar trabajos o citas de otras personas como propias o sin su correspondiente citación, ya sea de algún compañero, libro o extraídos de internet; como también a no reutilizar trabajos presentados en semestres anteriores como trabajos originales.
- No copiar a compañeros ni hacer uso de ayudas o comunicaciones fuera de lo permitido durante las evaluaciones.

Cualquier alumno o alumna que no respete el código de honor durante una evaluación (sea este la entrega de una tarea o el desarrollo de una prueba o control tanto durante la cátedra como el laboratorio) será evaluado con la nota mínima y será virtud de profesor, de acuerdo con la gravedad de la falta, las acciones siguientes a tomar.