

Nombre del Proyecto:

ChemTools Pro

Plataforma educativa y práctica para el estudio y análisis químico.

Objetivo General

Desarrollar una aplicación web integral que facilite el aprendizaje, cálculo y simulación de procesos químicos, dirigida a estudiantes, docentes y profesionales de la química, mediante herramientas interactivas y funcionalidades especializadas.

Funcionalidades Principales

1. Módulo de Análisis de Sistemas Químicos

- **Descripción de sistemas:** Clasifica sistemas en homogéneos o heterogéneos, identifica fases y componentes.
- **Diagramas de separación:** Genera métodos de fraccionamiento (destilación, filtración, etc.).

2. Módulo de Cálculos Químicos

- **Calculadora de disoluciones:** % m/m, % m/v, considerando densidad.
- **Herramienta de estequiometría:** Reactivo limitante, rendimiento teórico.
- **Número de oxidación y nomenclatura:** Clasificación y reacción con agua.

3. Módulo de Estructuras y Enlaces

- **Generador de Lewis:** Dibuja estructuras y clasifica enlaces (iónico, covalente).
- **Descripción atómica:** Z, A, N, electrones, configuración electrónica.

4. Tabla Periódica Virtual

- Información detallada por elemento (masa, electronegatividad, estados de oxidación).
- Gráficos de tendencias periódicas y calculadora de masa molar.

5. Herramientas Educativas

- **Quizzes interactivos:** Refuerzo de nomenclatura, balanceo de ecuaciones, etc.
- **Seguridad en laboratorio:** Fichas SDS y pictogramas GHS.

Arquitectura Técnica

Frontend

- **Tecnología:** React.js con TypeScript.
- **Librerías:**
 - **Visualización:** 3Dmol.js (moléculas 3D), Chart.js (gráficos).
 - **UI:** Material-UI para diseño responsive.

Backend Híbrido

- **Node.js + Express.js:**
 - Gestión de usuarios, autenticación (JWT), y APIs externas (PubChem).
- **Python + Flask:**
 - Cálculos químicos complejos (RDKit, SymPy).
 - Comunicación con Node.js vía REST o RabbitMQ.

Base de Datos

- **MongoDB:** Almacena datos de usuarios, compuestos, reacciones y quizzes.
- **Esquemas principales:**
 - users, compounds, reactions, quizzes.

Despliegue

- **Docker:** Contenedores para frontend, backend-Node, backend-Python y MongoDB.
- **Nube:** MongoDB Atlas, despliegue en AWS/Heroku.

Fases de Desarrollo (Versiones Alpha)

| Versión | Nivel | Hitos Clave |
|-----------|-----------------------------------|--|
| Alpha-1.0 | Básico (Esqueleto) | Configuración inicial de React, Node.js, Python y MongoDB. Dockerización básica. |
| Alpha-1.1 | Bajo (Articulaciones) | Componentes UI básicos, endpoints de salud y esquemas de MongoDB. |
| Alpha-2.0 | Intermedio Bajo (Órgano: | Tabla periódica estática y calculadora de disoluciones. |
| Alpha-2.1 | Intermedio (Músculos) | Descripción atómica y generador de estructuras de Lewis. |
| Alpha-3.0 | Intermedio Alto (Venas y Nervios) | Optimización con Redis, gráficos interactivos y comunicación asíncrona. |
| Alpha-3.1 | Alto (Piel) | Autenticación JWT, diseño responsive y validación de datos. |
| Alpha-4.0 | Avanzado (Ropa) | Quizzes, integración con PubChem y despliegue escalable en Kubernetes. |

Aspectos Innovadores

- Backend híbrido:** Combina velocidad de Node.js para APIs y potencia de Python para cálculos químicos.
- Enfoque educativo:** Desde quizzes hasta simulaciones de seguridad en laboratorio.
- Escalabilidad:** Diseñado para crecer con microservicios y herramientas de ML.

Perspectivas Futuras

- Realidad Aumentada (RA):** Visualización 3D de moléculas usando la cámara del dispositivo.
- Laboratorio Virtual:** Simulaciones interactivas de experimentos (ej. titulaciones ácido-base).
- Comunidad Colaborativa:** Foros y retos mensuales para usuarios.
- Machine Learning:** Predicción de propiedades químicas (solubilidad, toxicidad).

Conclusión

ChemTools Pro busca ser un **referente en educación química digital**, combinando herramientas prácticas, teoría accesible y tecnología moderna. Su arquitectura modular y enfoque en la experiencia del usuario lo hacen adaptable para evolucionar con las necesidades del sector educativo y profesional.

Versión Alpha-1.0: Nivel Básico (Esqueleto del Proyecto)

Objetivo: Establecer la estructura base del proyecto.

- **Frontend:**
 - Configurar React con TypeScript.
 - Crear estructura de carpetas (components, pages, services, etc.).
 - Configurar enrutamiento básico con React Router.
- **Backend:**
 - Configurar Node.js con Express.js.
 - Configurar Python con Flask.
 - Crear conexión básica entre Node.js y Python (REST API o RabbitMQ).
- **Base de Datos:**
 - Configurar MongoDB y crear conexión desde Node.js (Mongoose) y Python (PyMongo).
- **Despliegue:**
 - Dockerizar el proyecto (frontend, backend-Node, backend-Python, MongoDB).
 - Desplegar en un entorno local o en la nube (Heroku, AWS, etc.).

Versión Alpha-1.1: Nivel Bajo (Articulaciones del Proyecto)

Objetivo: Agregar funcionalidades básicas de interacción.

- **Frontend:**
 - Crear componentes básicos (navbar, footer, formularios).
 - Integrar librerías de UI (Material-UI o Bootstrap).
- **Backend:**
 - Crear endpoints básicos en Node.js (ej. /api/health para verificar estado del servidor).
 - Crear endpoints básicos en Python (ej. /api/calculate para cálculos simples).
- **Base de Datos:**
 - Crear esquemas básicos en MongoDB (ej. users, compounds).

Versión Alpha-2.0: Nivel Intermedio Bajo (Órganos del Proyecto)

Objetivo: Implementar funcionalidades centrales.

- **Frontend:**
 - Crear página para la **tabla periódica virtual**.
 - Crear página para la **calculadora de disoluciones**.
- **Backend:**
 - Implementar lógica para la **tabla periódica** (datos estáticos o consumo de API externa).
 - Implementar lógica para la **calculadora de disoluciones** en Python.
- **Base de Datos:**
 - Almacenar datos de compuestos y usuarios.

Versión Alpha-2.1: Nivel Intermedio (Músculos del Proyecto)

Objetivo: Agregar funcionalidades avanzadas.

- **Frontend:**
 - Crear página para **descripción atómica**.
 - Crear página para **generador de estructuras de Lewis**.
- **Backend:**
 - Implementar lógica para **descripción atómica** (Z, A, N, configuración electrónica).
 - Implementar lógica para **estructuras de Lewis** (usando RDKit o Open Babel en Python).
- **Base de Datos:**
 - Almacenar estructuras de Lewis y datos atómicos.

Versión Alpha-3.0: Nivel Intermedio Alto (Venas, Arterias y Nervios del Proyecto)

Objetivo: Conectar y optimizar funcionalidades.

- **Frontend:**
 - Integrar gráficos interactivos (Chart.js, D3.js).
 - Mejorar la experiencia de usuario con animaciones y transiciones.
- **Backend:**
 - Optimizar comunicación entre Node.js y Python (usar RabbitMQ para tareas asíncronas).
 - Implementar caché con Redis para resultados frecuentes.
- **Base de Datos:**
 - Indexar colecciones para mejorar rendimiento.

Versión Alpha-3.1: Nivel Alto (Piel del Proyecto)

Objetivo: Pulir la interfaz y experiencia de usuario.

- **Frontend:**
 - Diseño responsive y accesible.
 - Temas personalizables (claro/oscuro).
 - Validación de formularios y manejo de errores.
- **Backend:**
 - Implementar autenticación y autorización (JWT).
 - Validación de datos en APIs.
- **Base de Datos:**
 - Añadir auditoría (logs de cambios en datos).

Versión Alpha-4.0: Nivel Avanzado (Ropa del Proyecto)

Objetivo: Agregar funcionalidades adicionales y mejorar escalabilidad.

- **Frontend:**
 - Integrar quizzes interactivos.
 - Añadir sección de seguridad en el laboratorio.
- **Backend:**
 - Implementar machine learning para predicciones químicas.
 - Integrar APIs externas (PubChem, ChemSpider).
- **Base de Datos:**
 - Escalar con MongoDB Atlas (nube).
- **Despliegue:**
 - Usar Kubernetes para orquestación de contenedores.

• Resumen de Versiones

| Versión | Nivel | Funcionalidades Principales |
|-----------|---------------------------|---|
| Alpha-1.0 | Básico (Esqueleto) | Estructura base (React, Node.js, Python, MongoDB). |
| Alpha-1.1 | Bajo (Articulaciones) | Componentes básicos, endpoints básicos, esquemas básicos. |
| Alpha-2.0 | Intermedio Bajo (Órganos) | Tabla periódica, calculadora de disoluciones. |
| Alpha-2.1 | Intermedio (Músculos) | Descripción atómica, estructuras de Lewis. |
| Alpha-3.0 | Intermedio Alto (Venas) | Gráficos interactivos, optimización de comunicación, caché. |
| Alpha-3.1 | Alto (Piel) | Diseño responsive, autenticación, validación de datos. |
| Alpha-4.0 | Avanzado (Ropa) | Quizzes, seguridad en laboratorio, machine learning, escalabilidad. |