

## Le cayó cloruro de sodio a la herida

*“Siglos de siglos y sólo en el presente ocurren los hechos; innumerables hombres en el aire; la tierra y el mar, y todo lo que realmente pasa me pasa a mí.”* **Borges, Jorge Luis**

### Introducción

Se define la Química como: “la ciencia que estudia las sustancias, su estructura (tipos y formas de acomodo de los átomos), sus propiedades y las reacciones que las transforman en otras sustancias en referencia con el tiempo.” **Pauling, Linus**

### Estructura de Lewis

“La estructura de Lewis, también llamada diagrama de punto y raya diagonal, modelo de Lewis, representación de Lewis o fórmula de Lewis, es una representación gráfica que muestra los pares de electrones de enlaces entre los átomos de una molécula y los pares de electrones solitarios que puedan existir. Son representaciones adecuadas y sencillas de iones y compuestos, que facilitan el recuento exacto de electrones y constituyen una base importante, estable y relativa. Esta representación se usa para saber la cantidad de electrones de valencia de un elemento que interactúan con otros o entre su misma especie, formando enlaces ya sea simples, dobles, o triples y después de cada uno de estos se encuentran en cada enlace formado.” (Wikipedia.org)

### Nomenclatura Sistemática

“Se basa en nombrar a las sustancias usando prefijos numéricos griegos que indican la atomicidad de cada uno de los elementos presentes en cada molécula. La atomicidad indica el número de átomos de un mismo elemento en una molécula, como por ejemplo el agua con fórmula  $H_2O$ , que significa que hay un átomo de oxígeno y dos átomos de hidrógeno presentes en cada molécula de este compuesto, aunque de manera más práctica, la atomicidad en una fórmula química también se refiere a la proporción de cada elemento en una cantidad determinada de sustancia. En este estudio sobre nomenclatura química es más conveniente considerar a la atomicidad como el número de átomos de un elemento en una sola molécula.

La forma de nombrar los compuestos en este sistema es: **prefijo-nombre genérico + prefijo-nombre específico** (Wikipedia.org)

## Software a desarrollar

Su trabajo consiste en implementar un programa Python que utilice los principios básicos de programación explicados en clase y detallados a través de la bibliografía, para resolver un problema cercano a la realidad del estudiantado.

Sobre el sistema es importante que considere las siguientes funcionalidades:

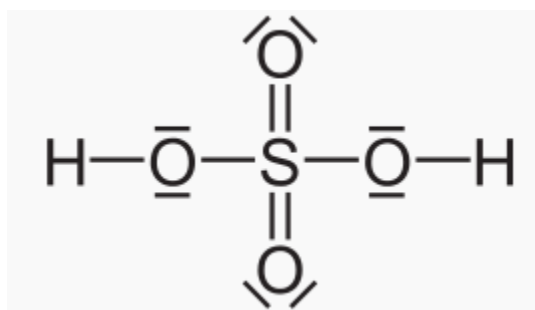
1. Lectura de moléculas: El programa deberá leer archivos de texto plano, debe tener una función de selección de archivo (file chooser).
2. El programa deberá mostrar la representación gráfica de la molécula utilizando la representación de Lewis.
3. Debe incluir además la nomenclatura sistemática recomendado por la UIPAC para compuestos inorgánicos con prefijos.
4. Es esencial incluir un sistema de navegación entre representaciones.

## Información adicional

- El programa de leer archivos de texto plano de múltiples líneas, cada línea será una molécula diferente.
- Las únicas moléculas válidas serán oxácidos o hidrácidos cuya base sean átomos de N, O, S, Cl, F, I, Mn, Br, Cr, Se, B.
- No se aceptan imágenes pre-definidas. Deben ser representaciones generadas.
- Se debe leer la secuencia de la molécula y hacer los cálculos de acuerdo a las reglas definidas.
- Recuerde hacer todas las validaciones necesarias.

## Ejemplo

Para la molécula  $\text{H}_2\text{SO}_4$



Ácido Sulfúrico

## Tabla de Cotejo

Items a Evaluar	Pts
Lecturas de archivos	10
Navegación entre representaciones	10
Representación Gráfica de la molécula	20
Nomenclatura sistemática	20
Validaciones	20
Funcionalidad completa	20
<b>Total</b>	<b>100 Pts</b>

## Documentación

La documentación interna del código debe ser mínima, puede limitarse únicamente a una descripción breve del objetivo de cada función. Evite hacer comentarios excesivos. Escriba código claro y conciso, trate de apegarse a los principios de código limpio para el código que escriba. Recuerde que es mucho más importante que su código sea claro y fácil de entender que si es muy eficiente.

En cuanto a la documentación externa, debe entregarse un documento en formato estándar, que incluya las siguientes secciones:

- Portada
- Resumen ejecutivo. El objetivo de este resumen es captar la atención del lector y motivarlo a aprender más sobre el proyecto. Menos de una página.
- Introducción. ¿Por qué se hace el proyecto y qué se incluye?
- Valoraciones: todas las observaciones que fueron necesarias para llegar a una respuesta.
- Conclusiones: resoluciones puntuales tras el proyecto. Estas deben ser relacionadas con los aspectos técnicos del trabajo únicamente. Si no tiene claro cómo escribir conclusiones para un trabajo académico, consulte al profesor o asistentes.
- Referencias. Deben incluirse en formato APA.

## Porcentaje Extra

Realice la representación gráfica utilizando el modelo de Teoría de Repulsión de Pares de Electrones de Valencia (TRPEV), se premiará con hasta 100% extra de la nota del proyecto.

Para que este porcentaje extra se considere adecuadamente desarrollado deberá dibujar las figuras utilizando figuras tridimensionales.

**Nota:** Los puntos extra son sobre la nota obtenida en el proyecto, únicamente se evaluarán los puntos extra a aquellos estudiantes, que hayan cumplido con al menos el 80% de los puntos de la tabla de cotejo, que se encuentra en este mismo documento. Únicamente se revisarán los puntos extra que se encuentre completamente funcional.

Puntualmente:

- No se revisarán puntos extra si no realizó más del 80% de la funcionalidad básica.
- Solo se revisarán código funcional.
- Será un porcentaje extra sobre la nota obtenida. Por ejemplo, si usted obtuvo un 90 y tuvo 30% extra su nota en el proyecto será 117.

## Forma de trabajo

El proyecto se desarrollará en parejas. No dude en consultar cualquier asunto tanto de programación como de elaboración de la documentación con el profesor, el asistente o tutores del curso.

## Evaluación

El proyecto tiene un valor de 15% de la nota final, en el rubro de Proyectos Programados.

Desglose de la evaluación de la tarea programada:

Documentación: 10

Programación: 90

## Recomendaciones adicionales

Pruebe cada funcionalidad individualmente. No implemente grandes secciones del programa sin verificar el funcionamiento por separado de cada una de sus partes. Esto dirige a errores que son más difíciles de encontrar.

Comparta el conocimiento con los demás compañeros de grupo, la ciencia de la computación es una disciplina que requiere el traspaso libre de conocimientos. Se logran mejores resultados con la colaboración de todos que con el esfuerzo separado de diferentes personas.

No dude en consultar diferentes fuentes para satisfacer las dudas. Aparte de las búsquedas en internet, asegúrese de exponer sus dudas a sus compañeros, profesor y conocidos que estudien el curso; en la mayoría de las ocasiones es más provechosa conversación de 10 minutos entre personas que están trabajando en lo mismo que pasar horas buscando la respuesta a una duda de forma individual.

Plagios no serán tolerados bajo ninguna circunstancia. Cualquier intento de fraude será evaluado con una nota de cero y se enviará una carta al expediente del estudiante. Siempre escriba su propio código.

## Referencias

Wikipedia.org. (s.f.). Recuperado el 20 de Mayo de 2017, de Wikipedia.org: <http://es.wikipedia.org/>