



1- Introducción:

Una empresa industrial química que genera compuestos químicos mediante diversas reacciones químicas necesita un pequeño programa informático que cubra sus necesidades básicas. El programa se realizará en C# con Windows Forms llamado **ChemicalCompany**. **La realización y entrega de este programa será en grupos de TRES personas.**

La empresa desea almacenar la lista completa de **reacciones químicas** que se producen en sus instalaciones, y la lista de **compuestos químicos** que se utilizan (reactivos) y generan (productos) en dichas reacciones químicas. Como es conocido, los compuestos químicos están formados por **elementos químicos**. Estos tres conceptos son los que guiarán el desarrollo del programa.

2- Elementos Químicos:

De cada elemento químico nos interesarán las siguientes propiedades:

- Nombre.
- Símbolo.
- Número atómico.
- Masa atómica.
- Número de neutrones¹.
- Número de protones.
- Número de electrones.

Se debe definir una estructura llamada *ElementoQuimico* para poder trabajar con este concepto.

Ejemplos de elementos químicos:

| H |
|--------------------------|
| -Nombre: Hidrógeno |
| -Símbolo: H |
| -Número atómico: 1 |
| -Masa atómica: 1.007 |
| -Número de neutrones: 0 |
| -Número de protones: 1 |
| -Número de electrones: 1 |

| C |
|--------------------------|
| -Nombre: Carbono |
| -Símbolo: C |
| -Número atómico: 6 |
| -Masa atómica: 12.011 |
| -Número de neutrones: 6 |
| -Número de protones: 6 |
| -Número de electrones: 6 |

| Au |
|---------------------------|
| -Nombre: Oro |
| -Símbolo: Au |
| -Número atómico: 79 |
| -Masa atómica: 196.967 |
| -Número de neutrones: 118 |
| -Número de protones: 79 |
| -Número de electrones: 79 |

| Li |
|--------------------------|
| -Nombre: Litio |
| -Símbolo: Li |
| -Número atómico: 4 |
| -Masa atómica: 6.941 |
| -Número de neutrones: 4 |
| -Número de protones: 3 |
| -Número de electrones: 3 |

| O |
|--------------------------|
| -Nombre: Oxígeno |
| -Símbolo: O |
| -Número atómico: 8 |
| -Masa atómica: 15.999 |
| -Número de neutrones: 8 |
| -Número de protones: 8 |
| -Número de electrones: 8 |

Sabemos que se conocen, a día de hoy, 118 elementos químicos, por lo que el programa deberá mantener un vector **de exactamente 118 elementos químicos**. Este vector será un vector de 118 elementos de tipo *ElementoQuimico*. A este vector le llamaremos *TablaPeriodica*.

La información de los elementos químicos deberá obtenerse de un fichero de texto llamado **PeriodicTable.csv** que se proporciona como material de la práctica. Este fichero contiene información, en idioma inglés, sobre los 118 elementos químicos conocidos. Esta información está en formato CSV (*comma-separated values*). Es decir, cada propiedad de cada elemento químico está separada por un carácter coma (',') de la siguiente propiedad. No hay espacios en blanco ni antes ni después de la coma. Además, la información de

¹ Un mismo elemento químico puede presentarse con diferente número de neutrones dando lugar a *isótopos* distintos. Este campo se refiere al número de neutrones del isótopo más común. Este es el valor que aparecerá en el fichero de elementos químicos.

un elemento está separada de la información del siguiente elemento por un carácter nueva línea ('\\n'). El fichero contiene también una cabecera en la primera línea, que da información sobre en qué orden se almacenan los datos y qué representan. El fichero contiene más información de la que se necesita para esta práctica, por lo que algunos de sus datos serán ignorados.

3- Compuestos Químicos:

De cada compuesto químico que la empresa utilice necesitaremos almacenar, **al menos**, las siguientes propiedades:

- Número CAS. Es un código alfanumérico único para cada compuesto químico, formado por dígitos y guiones.
- Nombre del compuesto químico.
- Lista de elementos químicos que componen el compuesto químico.
- Lista con el número de elementos químicos de cada tipo que componen el compuesto químico.

Se deberá definir una estructura llamada *CompuestoQuimico* para trabajar con este concepto.

Por simplicidad, supondremos que un compuesto químico puede tener un **máximo de 8 elementos químicos distintos** en su fórmula. Para no repetir información, la lista de elementos químicos deberá contener **únicamente los números atómicos** de los elementos químicos que componen el compuesto químico. **No deberá contener toda la información del elemento químico**, pues dicha información ya se encontrará en el vector *TablaPeriodica*.

Ejemplos de compuestos químicos:

| Agua (H ₂ O) |
|--|
| -Número CAS: 7732-18-5 |
| -Nombre del compuesto químico: Agua |
| -Lista de elementos químicos: [1, 8] |
| -Lista con el número de elementos químicos: [2, 1] |

| Ácido Sulfúrico (H ₂ SO ₄) |
|---|
| -Número CAS: 7664-93-9 |
| -Nombre del compuesto químico: Ácido Sulfúrico |
| -Lista de elementos químicos: [1, 16, 8] |
| -Lista con el número de elementos químicos: [2, 1, 4] |

| Hidrógeno Molecular (H ₂) |
|---|
| -Número CAS: 1333-74-0 |
| -Nombre del compuesto químico: Dihidrógeno |
| -Lista de elementos químicos: [1] |
| -Lista con el número de elementos químicos: [2] |

| Trióxido de Azufre (SO ₃) |
|---|
| -Número CAS: 7446-11-9 |
| -Nombre del compuesto químico: Óxido de Azufre (VI) |
| -Lista de elementos químicos: [16, 8] |
| -Lista con el número de elementos químicos: [1, 3] |

| Oxígeno Molecular (O ₂) |
|---|
| -Número CAS: 7782-44-7 |
| -Nombre del compuesto químico: Dioxígeno |
| -Lista de elementos químicos: [8] |
| -Lista con el número de elementos químicos: [2] |

Como la empresa desea almacenar todos los compuestos químicos, se deberá definir un vector llamado *ListaCompuestosQuimicos* que permita almacenar en él datos de tipo *CompuestoQuimico*.

4- Reacciones Químicas:

La empresa desea también almacenar la lista completa de posibles reacciones químicas que es capaz de llevar a cabo en sus instalaciones. Para cada reacción química se deben almacenar, **al menos**, las siguientes propiedades:

- Identificador de la reacción.
- Nombre.
- Tipo.
- Relación energética (endotérmica/exotérmica).
- Lista de reactivos (compuestos químicos que reaccionan).
- Lista con el número de moléculas (coeficientes estequiométricos) empleadas de cada uno de los reactivos.
- Lista de productos (compuestos químicos que se producen).
- Lista con el número de moléculas (coeficientes estequiométricos) producidas de cada uno de los productos.
- Temperatura óptima (en Kelvin).

-Entalpía de la reacción (en kJ/mol).

-Rendimiento de la reacción (en %).

Se deberá definir una estructura llamada *ReaccionQuimica* para trabajar con este concepto. A continuación, se explica con detalle el significado de cada uno de sus campos:

- El *identificador* será un número natural único que usaremos para diferenciar una reacción química de las demás.
- El *nombre* es un texto descriptivo de la reacción.
- El *tipo* podrá tener los siguientes valores: "synthesis", "decomposition", "displacement", "acid-base", "redox", "others".
- La *relación energética* sólo podrá tener dos opciones: endotérmica (si la reacción necesita energía para producirse) o exotérmica (si la reacción química desprende energía al producirse).
- La *lista de reactivos* será una lista de números CAS correspondientes a los compuestos que se necesitan para que se produzca la reacción. Por simplicidad, asumiremos que **nunca hay más de 10 reactivos** en una reacción.
- La *lista de productos* será una lista de números CAS correspondientes a los compuestos que se generan cuando se produce la reacción. Por simplicidad asumiremos que **nunca hay más de 10 productos** en una reacción.
- La *temperatura* representa la temperatura óptima para que se produzca la reacción química. A dicha temperatura, la reacción tiene el rendimiento máximo, cuyo valor vendrá dado por el campo *rendimiento*.
- El campo *entalpía* nos indicará la entalpía (es decir, la energía intercambiada con su entorno) liberada en la reacción (si es exotérmica) o necesaria para que se produzca la reacción (si es endotérmica) por cada mol de reactivos utilizados, suponiendo que la reacción tiene lugar a la temperatura óptima.
- El *rendimiento* de la reacción (en %) nos dice qué porcentaje de masa de productos se produce (respecto de la masa teórica que podría generarse según la ecuación química) por unidad de masa del reactivo limitante, suponiendo que la reacción tiene lugar a la temperatura óptima. El reactivo limitante es el reactivo que antes se agota en la reacción.

Ejemplos de reacciones químicas²:

| $2\text{H}_2\text{O} + 156.03 \text{ kJ/mol} \rightarrow 2\text{H}_2 + \text{O}_2$ |
|--|
| -Identificador de la reacción: 0 |
| -Nombre: electrólisis del agua |
| -Tipo: descomposición |
| -Relación energética: endotérmica |
| -Lista de reactivos: [7732-18-5] |
| -Número de moléculas de cada uno de los reactivos: [2] |
| -Lista de productos: [1333-74-0, 7782-44-7] |
| -Número de moléculas de cada uno de los productos: [2, 1] |
| -Temperatura óptima: 323.45 K |
| -Entalpía: 156.03 kJ/mol |
| -Rendimiento de la reacción: 99.32 % |

| $\text{SO}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{SO}_4 + 94.49 \text{ kJ/mol}$ |
|---|
| -Identificador de la reacción: 1 |
| -Nombre: obtención del ácido sulfúrico |
| -Tipo: síntesis |
| -Relación energética: exotérmica |
| -Lista de reactivos: [7446-11-9, 7732-18-5] |
| -Número de moléculas de cada uno de los reactivos: [1, 1] |
| -Lista de productos: [7664-93-9] |
| -Número de moléculas de cada uno de los productos: [1] |
| -Temperatura óptima: 298.36 K |
| -Entalpía: 94.49 kJ/mol |
| -Rendimiento de la reacción: 45.89 % |

Como la empresa desea almacenar todas las reacciones químicas con las que trabaja, se deberá definir un vector llamado *ListaReaccionesQuimicas* que permita almacenar en él datos de tipo *ReaccionQuimica*.

5- Consideraciones Generales:

La empresa no prevé tener nunca más de 500 compuestos químicos, ni más de 200 reacciones químicas distintas. Supondremos que todos los compuestos químicos son puros. No trabajaremos con disoluciones, ni aleaciones, ni mezclas de distintos compuestos.

Los datos de compuestos químicos y reacciones químicas se leerán y almacenarán en dos ficheros diferentes, denominados respectivamente **Compounds.txt**, y **Reactions.txt**. El anexo I muestra el formato que deben tener esos ficheros. Dicho **formato no podrá ser alterado en ningún caso**, aunque por supuesto se puede modificar el contenido de los ficheros para almacenar más información (pero nunca menos). Si se añade información a los archivos, el/la estudiante deberá proporcionar dichos ficheros como parte de la entrega.

² Los valores de entalpía, temperatura óptima y rendimiento mostrados en los ejemplos no tienen por qué corresponder con la realidad. Se utilizan exclusivamente de modo ilustrativo.

Los datos de elementos químicos se almacenarán en el citado fichero **PeriodicTable.csv** en formato CSV. **Ni el formato ni el contenido de este fichero deberá ser modificado.**

El programa debe funcionar con los ficheros proporcionados como parte del enunciado, y también con cualesquiera otros que tengan los mismos formatos.

Es necesario entregar el archivo ZIP con el contenido del proyecto: **ChemicalCompany.zip** (y los archivos **PeriodicTable.csv**, **Compounds.txt** y **Reactions.txt** si es que dichos archivos se han modificado).

6- Funcionalidades a Implementar Durante la Sesión de Clase:

- 1) Diseñar las estructuras (usando la palabra clave *struct*) *ElementoQuimico*, *CompuestoQuimico* y *ReaccionQuimica* para almacenar la información necesaria sobre cada uno de los conceptos principales del programa.

Para cada miembro de cada estructura se debe utilizar el tipo más adecuado, en función de las operaciones y funcionalidades que se piden realizar para el programa.

- 2) Definir los vectores *TablaPeriodica*, *ListaCompuestosQuimicos* y *ListaReaccionesQuimicas*. Estos vectores contendrán la lista de elementos químicos, la lista de compuestos químicos y la lista de reacciones químicas, respectivamente.
- 3) Crear una función *MostrarElementoQuimico()* que muestre por pantalla los datos de un elemento químico (**sólo de uno**) que se le pase como argumento a la función. Realizar a continuación, utilizando la función anterior, una función llamada *MostrarTablaPeriodica()* que sea capaz de mostrar todos los datos cargados en el vector *TablaPeriodica*, que se le pase como argumento a la función.
- 4) Realizar una función *LeerTablaPeriodica()* que sea capaz de cargar los datos de los elementos químicos, a partir del contenido de un fichero que tenga la misma estructura que el fichero **PeriodicTable.csv**. Los datos deben ser leídos del fichero y copiados en el vector *TablaPeriodica*.

Nota 1:

Para leer del fichero datos separados por coma, se recomienda usar el método de la clase *File* *ReadLines()* y/o sus derivados *ReadAllLines()* y *ReadAllText()*, y el método *Split()* de la clase *String* para extraer los valores separados por comas (",").

Nota 2:

Para convertir de *string* a *int*, de *string* a *float*, de *int* o *float* a *string*, gastad las funciones de conversión vistas en clase.

- 5) El programa debe ser capaz de cargar la información del fichero **PeriodicTable.csv** y guardarla en el vector *TablaPeriódica*, y luego mostrarla. **No se debe continuar si esto no funciona adecuadamente.**
- 6) Realizar una función *ComponerFormulaQuimica()*, que a partir de los datos de un compuesto químico sea capaz de crear una cadena de texto en la que se represente la fórmula química que corresponda con ese compuesto.

El formato de la fórmula química será el habitual, usando subíndices ya que Windows Forms lo permite.

Ejemplos: H₂O, SO₃, H₂SO₄.

- 7) Realizar una función llamada *LeerCompuestosQuimicos()* que sea capaz de cargar los datos de un fichero de compuestos químicos que tenga la misma estructura que el fichero **Compounds.txt**. Los datos se leerán del fichero y se copiarán en el vector *ListaCompuestosQuimicos*.
- 8) Realizar una función *MostrarCompuestoQuimico()* y una función *MostrarListaCompuestosQuimicos()* que muestre toda la lista de compuestos químicos que la empresa utiliza. Al mostrarse un compuesto, debería mostrarse, además de todos sus campos, la **fórmula química** del mismo.
- 9) El programa debe ser capaz de cargar la información de compuestos químicos, y luego mostrarla (incluyendo las fórmulas químicas). Utiliza las funciones anteriores y otras adicionales que puedas necesitar.

7- Funcionalidades a Realizar como Parte del Proyecto (además de las anteriores):

- 10) Realizar una función llamada *LeerReaccionesQuimicas()* que sea capaz de cargar los datos de un fichero de reacciones químicas que tenga la misma estructura que el fichero **Reactions.txt**. Los datos se leerán del fichero y se copiarán en el vector *ListaReaccionesQuimicas*.
- 11) Realizar una función *ComponerEcuacionQuimica()*, que a partir de una reacción química sea capaz de crear una cadena de texto en la que se represente la ecuación química que corresponda con esa reacción.

El formato de la ecuación química será este si la reacción es exotérmica:

$\langle n1 \rangle \langle \text{reactivo1} \rangle + \langle n2 \rangle \langle \text{reactivo2} \rangle + \dots \rightarrow \langle m1 \rangle \langle \text{producto1} \rangle + \langle m2 \rangle \langle \text{producto2} \rangle + \dots + \langle \text{entalpía} \rangle$

Donde $n1, n2, \dots, m1, m2, \dots$ representan el número de moléculas de cada tipo. Es decir, los coeficientes estequiométricos.

Ejemplo:

$\text{SO}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{SO}_4 + 94.49 \text{ kJ/mol}$

El formato de la ecuación química será este si la reacción es endotérmica:

$\langle n1 \rangle \langle \text{reactivo1} \rangle + \langle n2 \rangle \langle \text{reactivo2} \rangle + \dots + \langle \text{entalpía} \rangle \rightarrow \langle m1 \rangle \langle \text{producto1} \rangle + \langle m2 \rangle \langle \text{producto2} \rangle + \dots$

Ejemplo:

$2\text{H}_2\text{O} + 156.03 \text{ kJ/mol} \rightarrow 2\text{H}_2 + \text{O}_2$

- 12) Realizar dos funciones llamadas *EscribirCompuestosQuimicos()* y *EscribirReaccionesQuimicas()* que sean capaces de escribir los datos del programa en los ficheros de compuestos y reacciones químicas, respectivamente, antes mencionados. Los datos se leerán de los vectores *ListaCompuestosQuimicos* y *ListaReaccionesQuimicas* y se escribirán en los ficheros correspondientes. **El fichero CSV de elementos químicos no debe ser modificado en ningún caso.**
- 13) Crear una función llamada *AnyadirCompuestoQuimico()* que permita añadir un compuesto a la lista de compuesto químicos (al vector *ListaCompuestosQuimicos*, no al fichero correspondiente). No hace falta comprobar que no se introducen compuestos químicos con números CAS repetidos. Supondremos que esto no ocurre. Crear, análogamente, una función para añadir una reacción química (*AnyadirReaccionQuimica()*) a la lista de reacciones.
- 14) Crear una función llamada *EliminarReaccionQuimica()* que permita eliminar una reacción química de la lista de reacciones químicas (del vector *ListaReaccionesQuimicas*, no del fichero correspondiente) a partir de su identificador.
- 15) Crear una función llamada *ContarReactivos()*. Esta función calculará el número de reactivos (**sin distinguir si se repiten o no**) que la empresa **utiliza** en sus reacciones químicas. Crear, análogamente, una función llamada *ContarProductos()* para contar el número de productos (**sin distinguir si se repiten o no**) que la empresa **produce**.
- 16) Crear una función llamada *CalcularEntalpiaPromedioDiferencial()*. Esta función calculará el valor correspondiente a la resta de dos cantidades: la entalpía promedio de todas las reacciones exotérmicas menos la entalpía promedio de todas las reacciones endotérmicas.
- 17) Crear una función llamada *ContarElectrones()* que, a partir del identificador de una reacción química, sea capaz de contar cuantos electrones intervienen, sumando todos los electrones de todos los elementos químicos de todos los compuestos que participan en la reacción química.

- 18) Crear una o varias funciones para simular la ejecución de una reacción química. Para ello, el programa pedirá al usuario que escoja una reacción química y una temperatura. También pedirá la cantidad (en gramos) de cada reactivo, y deberá calcular la cantidad (en gramos) de productos que se generarán, y la energía total consumida/liberada por la reacción. Para ello, debe tenerse en cuenta el rendimiento de la reacción, la temperatura óptima de la misma, la cantidad de moléculas de cada compuesto químico que intervienen en ella, y la entalpía de la reacción. Supondremos que, por cada grado de diferencia con respecto a la temperatura óptima, el rendimiento disminuye en un punto porcentual (no pudiendo ser negativo dicho rendimiento). Supondremos también, por simplificar, que la entalpía no cambia aunque cambie la temperatura.
- 19) El programa dispondrá de un menú que permita escoger entre las diferentes operaciones que se indican a continuación:
- 0) *Salir*
 - 1) *Leer ficheros*
 - 2) *Escribir ficheros*
 - 3) *Mostrar*
 - a. *Volver.*
 - b. *Mostrar Tabla Periódica*
 - c. *Mostrar Todos los Compuestos Químicos*
 - d. *Mostrar Reacciones Químicas Endotérmicas*
 - e. *Mostrar Reacciones Químicas Exotérmicas*
 - f. *Mostrar Todas las Reacciones Químicas*
 - 4) *Añadir*
 - a. *Volver.*
 - b. *Añadir Compuesto Químico*
 - c. *Añadir Reacción Química*
 - 5) *Eliminar Reacción Química*
 - 6) *Calcular*
 - a. *Volver.*
 - b. *Contar Reactivos*
 - c. *Contar Productos*
 - d. *Calcular Entalpía Promedio Diferencial*
 - e. *Contar Electrones de una Reacción*
 - f. *Simular Reacción Química*

El menú deberá tener las opciones dispuestas en el orden descrito. Si se añaden más opciones o submenús, deberá hacerse a continuación de las existentes.

Para completar algunas de las operaciones que se corresponden con algunas de estas opciones, el programa principal deberá pedir (en algunos casos) información previa, por teclado, al usuario de modo que se pueda realizar la llamada a las funciones correspondientes con los datos que se precise.

Se valorará especialmente la estructuración del programa en funciones y el correcto uso de las mismas, así como el paso de parámetros a las funciones. A este respecto es **muy recomendable crear funciones adicionales a las propuestas** para evitar repetir código innecesariamente.

Las funciones que **no tengan** como misión **mostrar datos por pantalla o pedir información** por teclado **no deberán, en principio, mostrar nada por pantalla ni pedir nada por teclado** al usuario.

También se valorará el uso de las estructuras de datos apropiadas, usando los tipos de datos más adecuados en cada caso.

8- Funcionalidades Opcionales

Opcional 1: añadir la posibilidad de modificar (en los vectores, no en los ficheros) la información relativa a un compuesto químico. Realizar la funcionalidad análoga para una reacción química.

Opcional 2: comprobar, en las operaciones de añadir, que no se intentan introducir compuestos químicos o reacciones químicas con números CAS o identificadores que ya existan en las listas correspondientes. En caso de repetición, el programa debe avisar al usuario de que está intentando introducir un elemento duplicado y evitar su inserción.

Opcional 3: añadir una opción al menú para comprobar si una reacción está balanceada. Para comprobar esto, se debe comprobar si los elementos que hay en los reactivos son los mismos y están en las mismas cantidades que los que hay en los productos.

Opcional 4: modificar las operaciones de contar reactivos y contar productos para que sólo se cuenten los reactivos/productos **distintos que la empresa utiliza/produce**.

Opcional 5: añadir la posibilidad de escribir y leer la información guardada en los vectores de compuestos químicos y de reacciones químicas a ficheros binarios, sin eliminar la posibilidad de leer/escribir de/a ficheros de texto.

Anexo I – Formato de los ficheros que usará el programa

Formato de los ficheros:

| Fichero de compuestos químicos: | Fichero de reacciones químicas: |
|--|--|
| <Número CAS> <Nombre> <Número de Elementos Químicos> <NumAtómico1>, <NumAtómico2>, ... <NumDeVecesElem1>, <NumDeVecesElem2> | <Identificador> <Nombre> <Tipo> <Relación Energética> [0=endotérmica 1=exotérmica] <Número de Reactivos> <CAS Reactivo1>, <CAS Reactivo2>, ... <NumDeVecesReactivo1>, <NumDeVecesReactivo2> ... <Número de Productos> <CAS Producto1>, <CAS Producto2>, ... <NumDeVecesProducto1>, <NumDeVecesProducto2> ... <Temperatura> <Entalpía> <Rendimiento> ... |

Ejemplo de ficheros:

| Fichero de compuestos químicos: | Fichero de reacciones químicas: |
|---|--|
| 7732-18-5 Water 2 1,8 2,1 1333-74-0 Dihydrogen 1 1 2 7782-44-7 Dioxygen 1 8 2 7664-93-9 Sulfuric acid 3 1,16,8 2,1,4 7446-11-9 Sulfur trioxide 2 16,8 1,3 | 0 Electrolysis of water Decomposition 0 1 7732-18-5 2 2 1333-74-0,7782-44-7 2,1 323.45 156.03 99.32 1 Synthesis of sulfuric acid Synthesis 1 2 7446-11-9,7732-18-5 1,1 1 7664-93-9 1 298.36 94.49 45.89 |