

# TRABAJO PRÁCTICO FINAL

ANÁLISIS DE LENGUAJES DE PROGRAMACIÓN

Dzikiewicz, Luis Enrique

Legajo: D-3850/4

luisdzi.87@gmail.com

Fecha de entrega: 01-03-2017

## Docentes

Mauro Jaskelioff

Cecila Manzino

Eugenia Simich

Juan M. Rabasedas



# 1 Descripción del proyecto:

El proyecto final es un intérprete de formulas químicas derivadas de la Química Inorgánica. Dada una formula química de un compuesto inorgánico, permite obtener sus distintas nomenclaturas:

- ▶ **Nomenclatura sistemática o de atomicidad**
- ▶ **Nomenclatura de stock**
- ▶ **Nomenclatura tradicional**

Este trabajo surge con el objetivo de complementar, mediante esta herramienta, el estudio de los ingresantes de la Facultad de Bioquímica y Farmacia de la UNR. Para poder definir los objetivos a cumplir, realice una investigación acompañada de cuestionarios a los futuros usuarios del intérprete.

## 1.1 Conceptos básicos

**Compuesto químico:** Es una sustancia formada por la combinación de dos o más elementos de la tabla periódica.

**Fórmula química:** Representación simbólica de un compuesto molecular que indica como mínimo:

- Los elementos presentes;
- El número relativo de átomos de cada elemento.

**Estado de oxidación(EO):** Número de electrones que un átomo pierde, gana o bien parece que utiliza para unirse a otros átomos en los compuestos.

## 1.2 ¿Cómo se forman los compuestos químicos?

Cuando los átomos se aproximan en una reacción química, los electrones estos interaccionan para formar los enlaces químicos. Cuantos electrones se tendran en cuenta en la reacción, depende de los EOs de los átomos en cuestión <sup>1</sup>.

# 2 Tipos de compuestos

Los compuestos químicos soportados por el proyecto son<sup>2</sup>:

1. Óxidos metálicos
2. Anhídridos
3. Peróxidos
4. Hidruros metálicos
5. Hidruros volátiles
6. Hidrácidos
7. Sales neutras
8. Hidróxidos
9. Oxoácidos
10. Oxosales

En caso de que el lector no tenga noción de los compuestos previamente nombrados, se procede a realizar un repaso breve de cómo estan formados y de sus nomenclaturas.

---

<sup>1</sup>Durante el proyecto trabajaremos con compuestos químicos "neutros", es decir, las sumas de los EOs, junto a la cantidad de átomos de cada elemento respectivamente, debe dar 0.

<sup>2</sup>Existen muchos otros compuestos inorgánicos, pero aqui solamente nos ocuparemos por los más básicos

## 3 Compuestos y nomenclaturas

### 3.1 Óxidos metálicos

Son compuestos formados por un elemento metálico y por oxígeno. Este último trabaja con un EO de -2. La fórmula de los óxidos metálicos es del tipo  $\mathbf{M_aO_b}$  (donde M es el elemento metálico y O es oxígeno). Entre los numerosos ejemplos de óxidos metálicos se encuentran: ZnO, MgO, Na<sub>2</sub>O, FeO, Au<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, etc.

#### Nomenclatura Sistemática

En esta nomenclatura se indica, mediante un prefijo, el número de átomos de cada elemento. Los prefijos utilizados que indican el número de átomos en esta nomenclatura son:

- 1 átomo: Mono
- 2 átomos: Di
- 3 átomos: Tri
- 4 átomos: Tetra
- 5 átomos: Penta
- 6 átomos: Hexa
- 7 átomos: Hepta
- ...

Cuando el elemento metálico tiene un solo átomo no se indica el prefijo mono.

Ejemplos:

- Na<sub>2</sub>O: monóxido de disodio
- Ni<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: trióxido de diníquel
- NiO: monóxido de níquel en lugar de monóxido de mononíquel

#### Nomenclatura de Stock

Los óxidos en esta nomenclatura están dados por la siguiente expresión:

*“óxido de” + nombre del elemento metálico + (EO del metal en nros romanos)*

Cuando el elemento metálico sólo tiene un EO posible, no es necesario indicarlo.

Ejemplos:

- Ni<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: óxido de níquel (III)
- HgO: óxido de mercurio (II)
- CaO: óxido de calcio, en lugar de óxido de calcio (II)

## Nomenclatura Tradicional

En esta nomenclatura, el óxido metálico se nombra de la siguiente manera:

***“óxido” + prefijo + nombre elemento metálico + sufijo***

donde el prefijo y el sufijo dependen de la cantidad de EOs posibles del elemento metálico.

Dichos sufijos y prefijos son:

- Un EO posible:
  - óxido ... ico
- Dos EO posible:
  - óxido ... oso (menor EO)
  - óxido ... ico (mayor EO)
- Tres EO posible:
  - óxido hipo ... oso (menor EO)
  - óxido ... oso (EO intermedio)
  - óxido ... ico (mayor EO)
- Cuatro EO posible:
  - óxido hipo ... oso (menor EO)
  - óxido ... oso (1er EO intermedio)
  - óxido ... ico (2do EO intermedio)
  - óxido per ... ico (mayor EO)

Ejemplos:

- Un EO:
  - $\text{Na}^+ + \text{O}^{-2} \longrightarrow \text{Na}_2\text{O}$  – óxido sódico
- Dos EOs:
  - Menor EO:  $\text{Ni}^{+2} + \text{O}^{-2} \longrightarrow \text{NiO}$  – óxido níqueloso
  - Mayor EO:  $\text{Ni}^{+3} + \text{O}^{-2} \longrightarrow \text{Ni}_2\text{O}_3$  – óxido níquelico
- Tres EOs:
  - Menor EO:  $\text{Rh}^{+2} + \text{O}^{-2} \longrightarrow \text{RhO}$  – óxido hiporodioso
  - EO intermedio:  $\text{Rh}^{+3} + \text{O}^{-2} \longrightarrow \text{Rh}_2\text{O}_3$  – óxido rodioso
  - Mayor EO:  $\text{Rh}^{+4} + \text{O}^{-2} \longrightarrow \text{RhO}_2$  – óxido ródico
- Cuatro EOs:
  - Primer EO (bajo):  $\text{V}^{+2} + \text{O}^{-2} \longrightarrow \text{VO}$  – óxido hipovanádico
  - Segundo EO:  $\text{V}^{+3} + \text{O}^{-2} \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_3$  – óxido vanádico
  - Tercer EO:  $\text{V}^{+4} + \text{O}^{-2} \longrightarrow \text{VO}_2$  – óxido vanádico
  - Cuarto EO (alta):  $\text{V}^{+5} + \text{O}^{-2} \longrightarrow \text{V}_2\text{O}_5$  – óxido pervanádico

## 3.2 Anhídridos

Son compuestos formados por un elemento no metálico y por oxígeno. Este último trabaja con un EO de -2. La fórmula de los anhídridos es del tipo  $\text{NM}_a\text{O}_b$  (donde NM es el elemento no metálico y O es oxígeno). Entre los numerosos ejemplos de anhídridos se encuentran:  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SO}_3$ ,  $\text{Cl}_2\text{O}$ , etc.

### Nomenclatura Sistemática

La nomenclatura sistemática de los anhídridos es igual a la de los óxidos metálicos.

Ejemplos:

- $\text{P}_2\text{O}_5$ : pentaóxido de difósforo
- $\text{Cl}_2\text{O}$ : monóxido de dicloro

### Nomenclatura de Stock

La nomenclatura de stock de los anhídridos es igual a la de los óxidos metálicos.

Ejemplos:

- $\text{CO}_2$ : óxido de carbono (IV)
- $\text{Br}_2\text{O}_3$ : óxido de bromo (III)

### Nomenclatura Tradicional

La nomenclatura tradicional de los anhídridos es igual a la de los óxidos metálicos, reemplazando la palabra “óxido” por “anhídrido”.

Ejemplos:

- $\text{I}_2\text{O}$ : anhídrido hipoyodoso
- $\text{SO}_3$ : anhídrido sulfúrico

## 3.3 Peróxidos

Son compuestos formados por un elemento metálico y por oxígeno. Este último trabaja con un EO de -1. La fórmula de los peróxidos es del tipo  $\text{M}_a(\text{O}_2)_b$  (donde M es el elemento no metálico y O es oxígeno).

### Nomenclatura Sistemática

La nomenclatura sistemática de los peróxidos es igual a la de los óxidos metálicos, reemplazando la palabra “óxido” por “peróxido”.

Ejemplos:

- $\text{Li}_2\text{O}_2$ : peróxido de litio
- $\text{Ti}_2(\text{O}_2)_3$ : triperóxido de dititanio
- $\text{Ti}(\text{O}_2)$ : peróxido de titanio

### Nomenclatura de Stock

La nomenclatura de stock de los peróxidos es igual a la de los óxidos metálicos, reemplazando la palabra “óxido” por “peróxido”.

Ejemplos:

- $\text{Cu}_2\text{O}_2$ : peróxido de cobre (I)
- $\text{Ti}_2(\text{O}_2)_3$ : peróxido de titanio (III)
- $\text{Li}_2\text{O}_2$ : peróxido de litio

### Nomenclatura Tradicional

La nomenclatura tradicional de los peróxidos es igual a la de los óxidos metálicos, reemplazando la palabra “óxido” por “peróxido”.

Ejemplos:

- $\text{Li}_2\text{O}_2$ : peróxido lítico
- $\text{Cu}_2\text{O}_2$ : peróxido cuproso
- $\text{U}(\text{O}_2)_2$ : peróxido uranioso

## 3.4 Hidruros metálicos

Los hidruros metálicos o simplemente hidruros, son combinaciones de hidrógeno junto a un elemento metálico. En este tipo de compuestos los metales actúan con EOs positivos mientras que el hidrógeno actúa con EO -1. La fórmula de los hidruros es del tipo  $\text{MH}_n$  (donde M es el elemento metálico, H es el hidrógeno y n es el EO del elemento metálico). Entre los numerosos ejemplos de hidruros metálicos se encuentran:  $\text{NiH}_3$ ,  $\text{SrH}_2$ ,  $\text{FeH}_3$ , etc.

### Nomenclatura Sistemática

La nomenclatura sistemática de los hidruros es igual a la de los óxidos metálicos, reemplazando la palabra “óxido” por “hidruro”.

Ejemplos:

- $\text{NiH}_2$ : dihidruro de níquel
- $\text{NiH}_3$ : trihidruro de níquel

### Nomenclatura de Stock

La nomenclatura de stock de los hidruros es igual a la de los óxidos metálicos, reemplazando la palabra “óxido” por “hidruro”.

Ejemplos:

- $\text{CoH}_2$ : hidruro de cobalto (II)
- $\text{CoH}_3$ : hidruro de cobalto (III)

## Nomenclatura Tradicional

La nomenclatura tradicional de los hidruros es igual a la de los óxidos metálicos, reemplazando la palabra “óxido” por “hidruro”.

Ejemplos:

- $\text{CoH}_2$ : hidruro cobaltoso
- $\text{TiH}_4$ : hidruro titánico
- $\text{VH}_5$ : hidruro pervanádico

## 3.5 Hidruros volátiles

Los hidruros volátiles son combinaciones de hidrógeno junto a uno de los siguientes elementos: N, P, As, Sb, C, Si y B. Todos ellos actúan con EO 3 salvo el C y el Si que actúan con EO 4. Las fórmulas de los hidruros volátiles son del tipo  $\text{NMH}_n$  (donde NM es el elemento no metálico y n es la EO de dicho elemento).

## Nomenclatura Sistemática

La nomenclatura sistemática de los hidruros volátiles es igual a la de los hidruros metálicos.

Ejemplos:

- $\text{NH}_3$ : trihidruro de nitrógeno
- $\text{CH}_4$ : tetrahidruro de carbono

## Nomenclatura de Stock

Los hidruros volátiles no tienen nomenclatura de stock.

## Nomenclatura Tradicional

Los hidruros volátiles pueden ser llamados utilizando nombres propios que los identifican.

Ejemplos:

- $\text{NH}_3$ : amoníaco
- $\text{PH}_3$ : fosfina
- $\text{AsH}_3$ : arsina
- $\text{SbH}_3$ : estibina
- $\text{CH}_4$ : metano
- $\text{SiH}_4$ : silano
- $\text{BH}_3$ : borano

## 3.6 Hidrácidos

Los hidrácidos, también llamados ácidos hidrácidos o hidruros no metálicos, son combinaciones binarias entre hidrógeno junto a los halógenos (F, Cl, Br, I) exceptuando el At y con los anfígenos (S, Se, Te) exceptuando el O, los primeros actúan con EO -1 y los segundos actúan con EO -2. Las fórmulas de los hidrácidos son del tipo  $\text{H}_n\text{NM}$  (donde NM es el elemento no metálico, H es el hidrogeno con EO -1 y n es la EO de dicho elemento).

## Nomenclatura Sistemática

La nomenclatura sistemática de los hidrácidos es de la siguiente forma:

*nombre del no metal + “uro” + “de hidrógeno”*

Ejemplos:

- HCl: cloruro de hidrógeno
- HF: fluoruro de hidrógeno

## Nomenclatura de Stock

Los hidrácidos no tienen nomenclatura de stock.

## Nomenclatura Tradicional

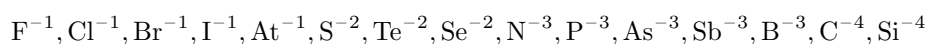
En la nomenclatura tradicional, los hidrácidos se nombran usando la palabra ácido y añadiendo el sufijo hídrico al nombre del elemento no metal.

Ejemplos:

- H<sub>2</sub>S: ácido sulfhídrico
- HBr: ácido bromhídrico

## 3.7 Sales neutras

Las sales binarias son combinaciones de 2 elementos distintos del hidrógeno y del oxígeno. La unión de un elemento metálico con un elemento no metálico forman una sal neutra. Los tipos de sales neutras que existen son: fluoruros, cloruros, bromuros, yoduros, astatos, sulfuros, telururos, seleniuros, nitruros, fosfuros, arseniuros, antimoniuros, boruros, carburos y siliciuros. La formulación de las sales neutras siguen el siguiente modelo:  $M_aNM_b$ , donde M: elemento metálico, NM: elemento no metálico, a: EO del elemento no metálico y b: EO del elemento metálico. Hay que tener en cuenta que el elemento no metálico siempre actúa con el EO fijo, y este será con el que actúe frente al hidrógeno. Por lo tanto los elementos no metálicos tendrán las siguientes EOs:



## Nomenclatura Sistemática

En la nomenclatura sistemática, el nombre de las sales neutras se indica de la siguiente manera:

*prefijo nro de átomos del no metal + nombre del no metal + “uro” +  
prefijo nro de átomos del metal + nombre del metal*

Ejemplos:

- Au<sub>2</sub>S: monosulfuro de dioro
- Au<sub>2</sub>S<sub>3</sub>: trisulfuro de dioro
- CaF<sub>2</sub>: difluoruro de calcio
- FeBr<sub>3</sub>: tribromuro de hierro

## Nomenclatura de Stock

La nomenclatura de stock de las sales neutras es de la siguiente manera:

*raíz del no metal + “uro” + “de ” + nombre del metal + (EO del metal en nros romanos)*



Ejemplos:

- $\text{Au}_2\text{S}$ : sulfuro de oro (I)
- $\text{CaF}_2$ : fluoruro de calcio
- $\text{FeBr}_3$ : bromuro de hierro(III)

### Nomenclatura Tradicional

La nomenclatura tradicional tiene la siguiente forma:

*raiz del no metal + “uro” + prefijo EO del metal + raiz del metal + sufijo EO del metal*

Ejemplos:

- $\text{LiF}$ : fluoruro lítico
- $\text{TiF}_2$ : fluoruro hipotitanioso
- $\text{UF}_5$ : fluoruro uránico

## 3.8 Hidróxidos

Los hidróxidos son compuestos iónicos formados por un metal (catión) y un elemento del grupo hidróxido o oxhidrilo ( $\text{OH}^-$ ) (anión). Se trata de compuestos ternarios aunque tanto su formulación y nomenclatura son idénticas a las de los compuestos binarios. La fórmula general de los hidróxidos es del tipo  $\text{M}(\text{OH})_n$ , siendo el número de grupos hidróxidos igual que el número de oxidación del catión metálico, para que la suma total de las cargas sea cero.

### Nomenclatura Sistemática

La nomenclatura sistemática de los hidróxidos es igual a la de los óxidos metálicos, reemplazando la palabra “óxido” por “hidróxido”.

Ejemplos:

- $\text{Be}(\text{OH})_2$ : dihidróxido de berilio
- $\text{Sn}(\text{OH})_4$ : tetrahidróxido de estaño
- $\text{Fe}(\text{OH})_3$ : trihidróxido de hierro

### Nomenclatura de Stock

La nomenclatura de stock de los hidróxidos es igual a la de los óxidos metálicos, reemplazando la palabra “óxido” por “hidróxido”.

Ejemplos:

- $\text{HgOH}$ : hidróxido de mercurio (I)
- $\text{Sn}(\text{OH})_2$ : hidróxido de estaño (II)
- $\text{Be}(\text{OH})_2$ : hidróxido de berilio
- $\text{CsOH}$ : hidróxido de cerio

## Nomenclatura Tradicional

La nomenclatura tradicional de los hidróxidos es igual a la de los óxidos metálicos, reemplazando la palabra “óxido” por “hidróxido”.

Ejemplos:

- $\text{Co}(\text{OH})_2$ : hidróxido cobaltoso
- $\text{Ti}(\text{OH})_4$ : hidróxido titánico
- $\text{V}(\text{OH})_5$ : hidróxido pervanádico

## 3.9 Oxoácidos

Los oxoácidos son combinaciones ternarias formadas por hidrógeno, un elemento no metal y el oxígeno (en ocasiones puede ser un elemento metálico del grupo del cromo, manganeso, wolframio o el vanadio ya que actúan como no metálicos en alto estado de oxidación). La fórmula general de los oxoácidos es  $\text{H}_a\text{NM}_b\text{O}_c$  donde el hidrógeno actúa con número de oxidación +1, el oxígeno actúa con número de oxidación -2.

### Nomenclatura Sistemática

La nomenclatura sistemática de los oxoácidos es la siguiente:

*prefijo nro oxígenos + “oxo” + prefijo nro de átomos de NM + raíz NM + “ato” + (EO del NM) + “de hidrógeno”*

Ejemplos:

- $\text{H}_2\text{SO}_2$ : dioxosulfato (II) de hidrógeno
- $\text{H}_2\text{SO}_3$ : trioxosulfato (IV) de hidrógeno
- $\text{H}_2\text{SO}_4$ : tetraoxosulfato (VI) de hidrógeno
- $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$ : heptaoxodisulfato (VI) de hidrógeno

### Nomenclatura de Stock

La nomenclatura de stock de los oxoácidos es la siguiente:

*“ácido” + prefijo nro oxígenos + “oxo” + prefijo nro de átomos de NM + raíz NM + “ico” + (EO del NM)*

Ejemplos:

- $\text{HClO}_2$ : ácido dioxoclórico (III)
- $\text{H}_2\text{SO}_3$ : ácido trioxosulfúrico (IV)
- $\text{H}_3\text{PO}_4$ : ácido tetraoxofosfórico (V)
- $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$ : ácido heptaoxodisulfúrico (VI)
- $\text{HClO}$ : ácido oxoclórico (I), en lugar de ácido monoxoclórico (I)

## Nomenclatura Tradicional

La nomenclatura tradicional de los oxoácidos es igual a la de los óxidos metálicos, reemplazando la palabra “óxido” por “ácido”.

Ejemplos:

- $\text{HBrO}$ : ácido hipobromoso
- $\text{HBrO}_2$ : ácido bromoso
- $\text{HBrO}_3$ : ácido brómico
- $\text{HBrO}_4$ : ácido perbrómico
- $\text{HNO}$ : ácido hiponitroso
- $\text{HNO}_2$ : ácido nitroso
- $\text{HNO}_3$ : ácido nítrico

### 3.10 Oxosales

Las oxosales o sales ternarias, son compuestos formados por un metal, un no metal y oxígeno. Son consideradas como las sales de los ácidos oxoácidos, ya que éstas se forman por la sustitución de los hidrógenos del oxoácido por un metal. La fórmula general de las oxosales es  $\text{M}_a(\text{NM}_b\text{O}_c)_n$  donde M es el elemento metálico, NM es el elemento no metálico y O es el oxígeno. Los valores de a, b y c corresponden a los valores del oxoácido del que procede y n es el EO del elemento metálico.

## Nomenclatura Sistemática

La nomenclatura sistemática de las oxosales es la siguiente:

*prefijo griego + prefijo nro oxígenos + “oxo” + prefijo nro de átomos de NM + raíz NM + “ato” + (EO del NM) + “de” + prefijo nro de átomos de M + nombre de M*

En el caso de que el anión se encuentre entre paréntesis, el número de iones se indica mediante los prefijos griegos:

- Para 2: bis-
- Para 3: tris-
- Para 4: tetrakis-
- Para 5: pentakis-
- Para 6: hexakis-
- Para 7: heptakis-
- Para 8: octakis-
- ...

Ejemplos:

Actuando el hierro con EO 2:

- $\text{FeSO}_2$ : dioxosulfato (II) de hierro
- $\text{FeSO}_3$ : trioxosulfato (IV) de hierro
- $\text{FeSO}_4$ : tetraoxosulfato (VI) de hierro

Actuando el hierro con EO 3:

- $\text{Fe}_2(\text{SO}_2)_3$ : tris-dioxosulfato (II) de dihierro
- $\text{Fe}_2(\text{SO}_3)_3$ : tris-trioxosulfato (IV) de dihierro
- $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ : tris-tetraoxosulfato (VI) de dihierro

### Nomenclatura Tradicional

se nombra de forma similar al ácido oxoácido del que procede sustituyendo la terminación -oso por -ito y la terminación -ico por -ato seguido del elemento metálico terminado en:

- ...ico (si tiene un EO)
- ...oso, ...ico (si tiene 2 EOs)
- hipo ...oso, ...oso, ...ico (si tiene 3 EOs)
- hipo ...oso, ...oso, ...ico, per ...ico (si tiene 4 EOs)

Ejemplos:

- $\text{NaClO}_2$  procede del ácido cloroso ( $\text{HClO}_2$ ), sustituimos -oso por -ito seguido del elemento metálico terminado en -ico porque sólo tiene una EO, por lo tanto su nomenclatura tradicional es **clorito sódico**.
- $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$  procede del ácido sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ), sustituimos -ico por -ato seguido del elemento metálico terminado en -ico ya que el hierro tiene 2 EOs y en este caso actúa con la EO mayor 3, por lo tanto su nomenclatura tradicional es **sulfato férrico**.

### Nomenclatura de Stock

Se nombra de forma similar a la nomenclatura tradicional seguido del elemento metálico indicando el EO con el que actúa en números romanos entre paréntesis. Ejemplos:

- $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ : sulfato de hierro (III)
- $\text{NaClO}_2$ : clorito de sodio, cuando el elemento metálico sólo tiene un EO no se indica este, entonces no se usaría clorito de sodio (I)

## 4 Diseño del proyecto

### 4.1 EDSL

Construimos el EDSL utilizado en este proyecto como sigue:

- El tipo de dato manipulado en este caso es el tipo **Elem**.
- Para construir elementos del tipo a manipular se utilizan los parsers en el archivo **Parser.hs**.
- No existen operadores que permitan componer elementos.
- Los evaluadores desallorados permiten realizar distinto tipos de acciones sobre los elementos del tipo **Elem**.
- El EDSL creado tiene una aproximación hacia el deep embedding ya que:
  - Representamos los elementos por como se construyen.
  - El trabajo lo realizan las funciones de ejecución (evaluadores).
  - Los constructores son triviales.

## 4.2 Implementación

El programa se divide en seis partes:

### 4.2.1 Tipos

En el archivo `Tipos.hs` encontraremos todos los tipos que utilizaremos en el programa. Nos enfocaremos en manipular a los elementos del tipo `Elem`. Estos representaran los distintos tipos de compuestos que podamos llegar a formar. Para llevar los nombres de los compuestos usaremos la mónada `Output`, que nos permite ir llevando una traza a medida que ejecutemos nuestro programa. Esta mónada llevara como dato los EOs de los elementos con EO variable (metales, no metales). Los elementos los guardaremos en diccionarios (`Data.Map`). En estos, la clave sera la fórmula del elemento y como dato llevara una tupla, donde guardaremos su nombre y una lista con los posibles EOs del elemento.

### 4.2.2 Parser

En el archivo `Parser.hs` encontraremos el parser para fórmulas inorgánicas. Dicho parser permitira tomar cadenas de caracteres y transformarlas en elementos de tipo `Elem`.

### 4.2.3 Evaluadores

En los archivos `EvalTrad.hs`, `EvalSist.hs`, `EvalStock.hs`, se encuentran las funciones encargadas de devolver la nomenclatura tradicional, sistemática y de stock, respectivamente, de un compuesto. Además, en `EvalTrad.hs` se comprueba que el compuesto, dado como argumento, se encuentra bien formulado, es decir, que los EOs de los elementos que lo componen multiplicados por sus subindices den 0. En el archivo `Eval.hs`, la función `eval` se encarga de ejecutar todos los evaluadores para obtener las nomenclaturas y prepara la salida para poder imprimirla por pantalla.

### 4.2.4 Tests

Si bien el testeo no es parte del intérprete en sí, se provee el archivo `Test.hs`, donde se encuentra todo lo relacionado con el testeo de los evaluadores. Para correr el tester, basta con cargar el archivo `Test.hs` en el `ghci` desde una terminal y correr su respectiva funcion `main`. Si le agregamos la opcion `-d`, le podremos pasar el nombre de la carpeta donde se encuentren archivos en el formato que el tester acepte. Por ejemplo, en el `ghci`:

```
Prelude>:l Test
...
*Test>:main -d Tests
```

Para ver como es dicho formato, ir a la carpeta `Tests` que se encuentra en la carpeta del proyecto y ver cualquiera de los archivos que se encuentran allí.

### 4.2.5 Funciones auxiliares

En el modulo `ForEval.hs`, se encuentran todas las funciones auxiliares necesarias a lo largo de la ejecución, desde las que se encargan de poner sufijos y prefijos en los nombres de los compuestos hasta la funciones que permiten chequear que un compuesto esta bien formulado.

### 4.2.6 Main

En el archivo `Main.hs`, la funcion `main` se encarga de ejecutar el intérprete. Dicha función permite que cuando el interprete toma una fórmula, esta es parseada por el parser del tipo de datos `Elem` que se encuentra en el archivo `Parser.hs`. Si el parseo es correcto, se procede a realizar la evaluacion correspondiente segun los parametros adicionales que se dieron en el interprete. De esto último se encargan las funciones de `Eval.hs` que a su vez llaman a cada uno de los evaluadores que existen.

## 5 Ejecución del intérprete

Para ejecutar el intérprete basta ir hasta la carpeta donde se encuentre el archivo “**Interprete**”, abrir una terminal y ejecutar el siguiente comando:

```
$ ./Interprete
```

Si todo sale bien nos debería aparecer lo siguiente:

```
Interprete de formulas quimicas inorganicas:  
λ >
```

Ya estaríamos listos para usar el intérprete.

## 6 Manual de uso del intérprete

Una vez dentro del intérprete podremos:

a) Ingresar una fórmula directamente. Hay que tener en cuenta ciertos conceptos<sup>3</sup>:

- En la mayoría de los casos, la fórmula se ingresa tal como se lee, es decir, si el compuesto que quiero ingresar es  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  simplemente ingreso:

```
...  
λ > Fe2O3  
Nomenclatura tradicional: oxido ferrico  
Nomenclatura de stock: oxido de hierro(III)  
Nomenclatura sistematica: trioxido de dihierro  
λ >
```

- Al ingresar un peróxido, se debe ingresar los  $\text{O}_2$  entre paréntesis, sino el programa no lo detectara. Por ejemplo,  $\text{Na}_2(\text{O}_2)$  y no  $\text{Na}_2\text{O}_2$ .
- Al ingresar un hidróxido, si no hay más de un oxhidrilo, se puede ingresar sin paréntesis, sino hay que ingresarlo entre paréntesis. Por ejemplo, la fórmula  $\text{NaOH}$  sera válida, pero no  $\text{FeOH}_3$ . En cambio  $\text{Fe}(\text{OH})_3$ , si sera tomada como válida pero no  $\text{Na}(\text{OH})$ .
- Al momento de ingresar oxosales, si hay mas de un anion, hay que ingresarlo entre paréntesis, sino no hace falta. Por ejemplo, la fórmula  $\text{Na}_2\text{SO}_3$  esta bien escrita así como  $\text{Fe}_2(\text{SO}_3)_3$  pero no  $\text{Na}_2(\text{SO}_3)$  o  $\text{Fe}_2\text{SO}_3$ .

b) Ingresar un archivo con fórmulas. Esto lo podremos hacer con el comando:

```
...  
λ >:f file
```

Dentro de la carpeta del proyecto se encuentra un archivo llamado **Formulas** que sirve como ejemplo del formato que debe tener el archivo **file**.

c) Obtener el estado de oxidación del elemento que tiene su EO variable. Lo podemos hacer con el comando:

```
...  
λ >:eo form
```

donde **form** es una fórmula.

---

<sup>3</sup>Se han eliminado los tildes del interprete para una correcta visualización de los nombres.

d) Se puede realizar una combinación del item b) y c), dado un archivo **file**:

```
...  
λ>:f :eo file  
...  
λ>:eo :f file
```

Cualquiera de los dos comandos ingresados en la parte superior deben dar el mismo resultado.

e) Para obtener ayuda en el intérprete se puede usar el comando:

```
...  
λ>:h
```

f) Para salir utilizaremos:

```
...  
λ>:q  
Saliendo del interprete ...
```

Sino podremos salir presionando Ctrl+d.

## 7 Bibliografía

### 7.1 Formulas:

- <http://www.formulacionquimica.com/>
- [http://www.ugr.es/~fgarciac/pdf\\_color/formulacioninor.pdf](http://www.ugr.es/~fgarciac/pdf_color/formulacioninor.pdf)
- [https://es.wikipedia.org/wiki/Compuesto\\_qu](https://es.wikipedia.org/wiki/Compuesto_qu)
- Libro: Química General de Petrucci, Harwood, Herring 8va edición Prentice hall

### 7.2 Haskell:

- <http://aprendehaskell.es/content/EntradaSalida.html>
- <https://courses.cs.washington.edu/courses/cse341/10wi/haskell/UnitTestExample.hs>
- <http://stackoverflow.com/questions/5480521/how-to-read-all-files-of-a-directory-in-haskell>
- <https://www.haskell.org/hoogle/>
- <https://hackage.haskell.org/package/readline-1.0.3.0/docs/System-Console-Readline.html>
- <https://hackage.haskell.org/package/containers-0.5.10.1/docs/Data-Map.html>
- <https://hackage.haskell.org/package/parsec-3.1.11/docs/Text-ParserCombinators-Parsec.html>
- <https://hackage.haskell.org/package/parsec-3.1.11/docs/Text-ParserCombinators-Parsec-Token.html>
- <https://hackage.haskell.org/package/parsec-3.1.11/docs/Text-Parsec-Token.html>
- <https://hackage.haskell.org/package/base-4.9.1.0/docs/Data-Char.html>
- <https://hackage.haskell.org/package/split-0.2.3.1/docs/Data-List-Split.html>
- <https://hackage.haskell.org/package/base-4.9.1.0/docs/Data-Maybe.html>
- <https://hackage.haskell.org/package/HUnit-1.5.0.0/docs/Test-HUnit.html>
- <https://hackage.haskell.org/package/directory-1.3.0.2/docs/System-Directory.html>
- <https://hackage.haskell.org/package/base-4.9.1.0/docs/System-IO.html>
- <https://hackage.haskell.org/package/base-4.9.1.0/docs/System-Environment.html>

### 7.3 Latex:

- <http://tex.stackexchange.com/questions/84185/displaying-linux-commands-in-latex>
- <https://en.wikibooks.org/wiki/LaTeX/>
- <http://detexify.kirelabs.org/classify.html>
- <http://www.quimicaorganica.org/foro/101-latex/20-insertar-f>
- <http://minisconlatex.blogspot.com.ar/2011/04/notas-al-pie-de-pagina.html>
- <http://tex.stackexchange.com/questions/2291/how-do-i-change-the-enumerate-list-format-to-use-letters-instead-of-the-default>
- <http://www.rafallinux.com/?p=599>