



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN

Vienna University of Technology

Datenverarbeitung für TPH I

Gruppe Mittwoch 14:00

**Erwin Jericha, Franz Sauerzopf
Rafael Reiter, David Seppi**

Wintersemester 2012/13 -- Übung zu Kurs 09

Übung

1. Erstelle eine eigene Klasse **atom** lt. der Angabe in **element.txt**
2. Erstelle unter Verwendung der **atom**-Klasse eine weitere Klasse **molekuel** lt. der Angabe in **molekuel.txt**
3. Benütze die **molekuel**-Klasse, um eine Klasse **material** abzuleiten, siehe **material.txt**

element.txt

Schreibe eine Atom-Klasse, die ein chemisches Element charakterisiert.

Datenelemente dieser Klasse sind ein String, der das Elementsymbol enthält und zwei numerische Elemente für die Ordnungszahl und die Atommasse.

Schreibe Methoden zum Setzen und Lesen der entsprechenden Datenwerte und für die Klasse notwendige Konstruktoren und Destruktoren sowie eine Methode zur Ausgabe des gesamten Datensatzes eines Atoms.

Teste diese Methoden in einem einfachen main() Beispiel.
(Keine Eingaben oder Abfragen, benutze nur den Konstruktor der Klasse und die öffentlichen Methoden.)

Verwende als Beispiele (Oz...Ordnungszahl, rAm...relative Atommasse):

Name	Oz	rAm, g/mol	Name	Oz	rAm, g/mol
H	1	1.00794	O	8	16.00
He	2	4.0026	S	16	32.0650
C	6	12.01	U	92	238.03
N	7	14.01			

molekuel.txt

Schreibe eine Molekül-Klasse, die 2 Atomarten (Profis: n Atomarten), die Anzahl der Atome pro Atomart, einen String für die chemische Summenformel und eine Variable für das Molekulargewicht enthält.

Schreibe die entsprechenden Zugriffsmethoden, Konstruktoren und eine Ausgabefunktion für diese Klasse.

Auch hier: Keine besonderen Eingaben oder Lesen von Dateien...Ruf einfach den Konstruktor der Klasse mit bereits vorhandenen Atomen auf.

Verwende als mögliche Beispiele:

UH₃, UO, UO₂, U₂O₅, U₃O₇, U₄O₉, U₂S₃, UN, U₃N₂, U₂N₃ S₂O, SO₂, SO₃, H₂O, CS₂, CO, CO₂, C₃O₂, CH₄, NH₃, N₂H₄ NO, NO₂, N₂O, N₂O₃, N₂O₄, N₂O₅

Anmerkung: Zur Umwandlung einer einstelligen Zahl in die entsprechende Charakterkonstante muss man nur zu dieser Zahl 48 ('0') dazu zählen. Alternativ kann man auch die [stringstream](#) Klasse verwenden.

material.txt

Leite eine Material-Klasse von der Molekül-Klasse ab, die den Schmelzpunkt und den Siedepunkt als neue Datenelemente enthält.

Schreibe die entsprechenden Zugriffsmethoden, Konstruktoren und eine Ausgabefunktion für diese Klasse.

Eine weitere Methode soll für eine bestimmte Temperatur den Aggregatzustand des Materials ausgeben.

Auch hier wieder möglichst einfach, am besten mit einer Eingabemöglichkeit für die zu testende Temperatur, damit nicht dauernd neu kompiliert werden muss.

Verwende als mögliche Beispiele (Fp...Schmelzpunkt, Sp...Siedepunkt):

Verbindung	Fp, °C	Sp, °C	Verbindung	Fp, °C	Sp, °C
SO ₂	-72.5	-10	SO ₃	16.9	45
H ₂ O	0	100	H ₂ S	-85.6	-60.3
H ₂ S ₂	-90	71	NH ₃	-77.74	-33.33
CS ₂	-111	46	CO	-205	-191.49
CO ₂	-78	-56.5	C ₃ O ₂	-107	6.8,
H ₄ N ₂	2	113.5	NO	-163.7	-151.8
N ₂ O	-90.81	-88.46	N ₂ O ₃	-102	3
N ₂ O ₄	-10.2	22.4	N ₂ O ₅	30	47