

Mineralogía II de Grado en Geología. Prácticas. 11. Cálculo de fórmulas cristalquímicas

Nuria Sánchez-Pastor. Francisco Javier Luque del Villar.

Dpto. de Cristalografía y Mineralogía. Facultad de Ciencias Geológicas. Universidad Complutense.
c/ José Antonio Nováis nº 2. 28040-Madrid.
nsanchez@geo.ucm.es jluque@geo.ucm.es

Resumen: Exceptuando los elementos nativos, los minerales están compuestos por dos o más elementos. Las fórmulas minerales son recalculadas a partir de los resultados de análisis químicos cuantitativos e indican las proporciones atómicas de los elementos constituyentes. La gran mayoría de los minerales muestran grandes variaciones en composición dentro de las posiciones atómicas estructurales, p.ej. la esfalerita, ZnS, presenta un amplio intervalo en su contenido en Fe que sustituye al Zn.

Palabras clave: Cristalquímica. Fórmula mineral. Sulfuros. Carbonatos. Sulfatos. Análisis químico.

CÁLCULO DE FÓRMULAS CRISTALOQUÍMICAS DE SULFUROS

Las composiciones químicas de los minerales se presentan habitualmente en forma de análisis químicos. Para realizar el cálculo de la fórmula cristalquímica de los minerales conviene distinguir entre aquellos que no presentan oxígeno en su composición (sulfuros, halogenuros, etc.) y los que sí contienen oxígeno (carbonatos, sulfatos, silicatos, etc.). En el primer caso, los análisis se dan en porcentajes en peso de los distintos átomos, lo cual permite calcular las proporciones atómicas de los elementos presentes.

Para calcular la fórmula de un sulfuro (o cualquier otro compuesto sin oxígeno) a partir de su análisis químico se pueden seguir los siguientes pasos:

- Buscar en la tabla periódica el valor del peso atómico de cada elemento.
- Dividir el porcentaje en peso de cada elemento por su correspondiente peso atómico.
- Los valores resultantes han de reducirse, si es posible, a números enteros, teniendo en cuenta el número de aniones (azufre en el caso de los sulfuros).

A continuación se presenta un ejemplo:

Elemento	% peso	Peso atómico	Proporción elementos	Átomos por fórmula
Cu	34,62	63,54	0,545	1
Fe	30,43	55,85	0,545	1
S	34,94	32,07	1,089	2
Total	99,99			

Por tanto, la fórmula del mineral analizado sería: CuFeS_2

CÁLCULO DE FÓRMULAS CRISTALOQUÍMICAS DE MINERALES CON OXÍGENO

En los minerales con oxígeno (silicatos, carbonatos, sulfatos, etc.) los análisis químicos se presentan como porcentajes en peso de los óxidos de los distintos elementos. El cálculo de la fórmula en este caso debe hacerse en relación al peso molecular de los distintos óxidos. Además, es preciso considerar las posiciones que ocupan los diferentes elementos en la estructura. Para ello, se deben agrupar aquellos cationes que ocupan una misma posición en la estructura del mineral y ordenarlos según un tamaño de radio iónico decreciente hacia la derecha. En la fórmula del mineral primero se escriben los cationes de acuerdo con la regla precedente y, finalmente, los aniones que se encuentran en la estructura.

A continuación se presenta un ejemplo:

Óxido	% peso	Peso molecular	Proporción molecular	Proporción catiónica	Proporción de oxígeno	Nº cationes p.f.u.
MgO	0,17	40,30	0,004	0,004	0,004	0,008
FeO	1,18	71,85	0,016	0,016	0,016	0,032
MnO	8,10	70,94	0,114	0,114	0,114	0,234
CaO	47,11	56,08	0,840	0,840	0,840	1,723
CO ₂	42,90	44,01	0,975	0,975	1,950	2
Total	99,46	Nº de oxígenos por fórmula unidad: 6			2,924	

1. La proporción molecular se obtiene dividiendo el porcentaje en peso (segunda columna de la tabla) por el peso molecular del óxido correspondiente.
2. La proporción catiónica se obtiene multiplicando la proporción molecular por el número de cationes en la molécula del óxido.
3. La proporción de oxígeno se obtiene multiplicando la proporción molecular por el número de oxígenos en la molécula del óxido.
4. A partir de la suma de las proporciones de oxígeno (en este caso, 2.924) se calcula el valor de normalización, que es el resultado de dividir el número de oxígenos por fórmula unidad en el mineral (6 para los carbonatos; 4 para los sulfatos) por esa suma.
5. La última columna corresponde al número de cationes por fórmula unidad y es el resultado de multiplicar las proporciones catiónicas de cada uno de los elementos por el valor de normalización (en este caso, 6: 2.924 = 2.052).

Por tanto, la fórmula del carbonato analizado sería:



REPRESENTACIÓN GRÁFICA DE LA COMPOSICIÓN MINERAL

Las representaciones minerales suelen ser útiles en minerales que constituyen soluciones sólidas o que muestran ciertas sustituciones químicas en su estructura. Como éste es el caso de la mayoría de los minerales existentes en la naturaleza, estos diagramas son habitualmente utilizados en mineralogía y petrología.

- En primer lugar será necesario elegir los componentes químicos que forman la fase mineral que queremos representar.
- Para la representación utilizaremos la proporción molecular o atómica de los componentes. Es importante tener en cuenta que si sólo son dos los componentes, la representación se hace en un diagrama de barras horizontal donde los extremos indican el 100 % de un componente dado.
- Desde cada vértice (100 % del compuesto en él representado) y hasta la arista opuesta (0 % del compuesto representado en el vértice opuesto) existen nueve líneas paralelas que representan sucesivamente los porcentajes de composición 90-80-70-60-50-40-30-20-10. El punto donde se crucen las tres líneas que representan el % en composición de cada uno de los compuestos de los vértices, es el punto que representa el mineral problema.

PRÁCTICA

1. Ejercicio de cálculo de fórmula química de sulfuros:

Se han analizado una serie de sulfuros, cuyas composiciones químicas, expresadas en porcentaje en peso de los distintos elementos, se presentan en la siguiente tabla:

A partir de los datos que se dan a continuación, se pide:

- Calcular la fórmula de cada uno de esos sulfuros.
- Identificar a qué mineral corresponde cada una de las fórmulas.
- Proyectar la composición de esos minerales en el diagrama triangular.

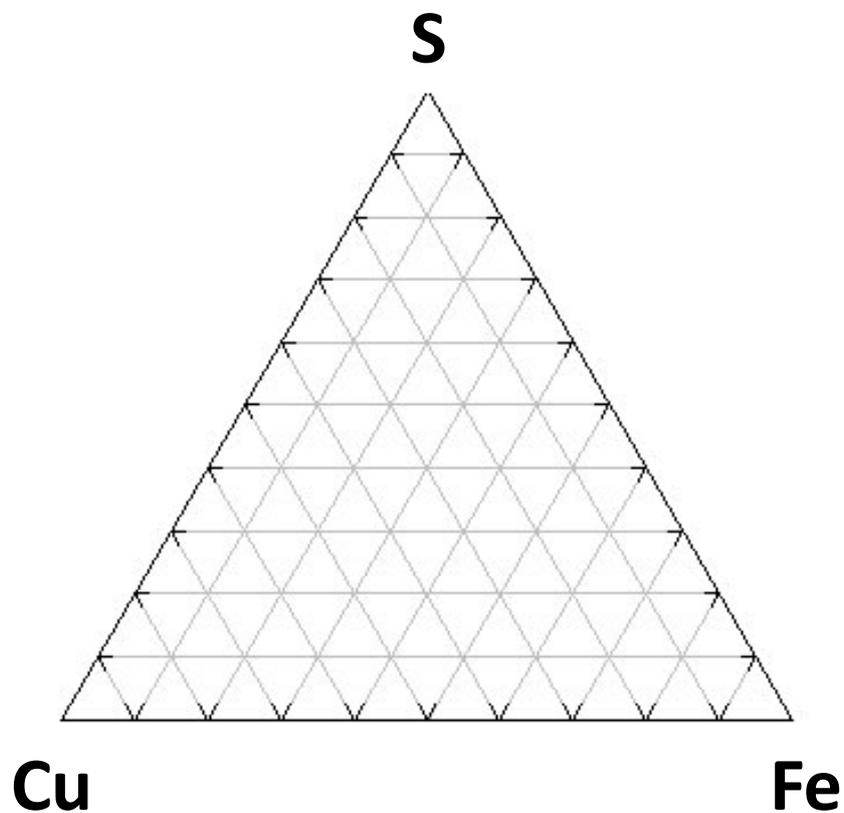
ANÁLISIS 1				
Elemento	% peso	Peso atómico	Proporción elementos	Átomos por fórmula
Cu	-			
Fe	46,54			
S	53,45			
Total	99,99	FÓRMULA:		

ANÁLISIS 2				
Elemento	% peso	Peso atómico	Proporción elementos	Átomos por fórmula
Cu	66,46			
Fe	-			
S	33,54			
Total	100,00	FÓRMULA:		

ANÁLISIS 3				
Elemento	% peso	Peso atómico	Proporción elementos	Átomos por fórmula
Cu	79,85			
Fe	-			
S	20,15			
Total	100,00	FÓRMULA:		

ANÁLISIS 4				
Elemento	% peso	Peso atómico	Proporción elementos	Átomos por fórmula
Cu	-			
Fe	61,05			
S	38,95			
Total	100,00	FÓRMULA:		

ANÁLISIS 5				
Elemento	% peso	Peso atómico	Proporción elementos	Átomos por fórmula
Cu	63,31			
Fe	11,13			
S	25,56			
Total	100,00	FÓRMULA:		



2. Ejercicio de cálculo de fórmula química de carbonatos:

Se han analizado una serie de carbonatos, cuyas composiciones químicas, expresadas en porcentaje en peso de los distintos óxidos, se presentan en tablas a continuación.

A partir de estos datos, se pide:

- Calcular la fórmula de cada uno de esos carbonatos.
- Identificar a qué mineral corresponde cada una de las fórmulas.
- Proyectar la composición de esos minerales en el diagrama triangular.

ANÁLISIS 1						
Óxido	% peso	Peso molecular	Proporción molecular	Proporción catiónica	Proporción de oxígeno	Nº cationes p.f.u.
MgO	47,10					
FeO	0,60					
MnO	0,10					
CaO	0,10					
CO ₂	51,93					
Total	99,83	Nº de oxígenos por fórmula unidad:				
FÓRMULA:						

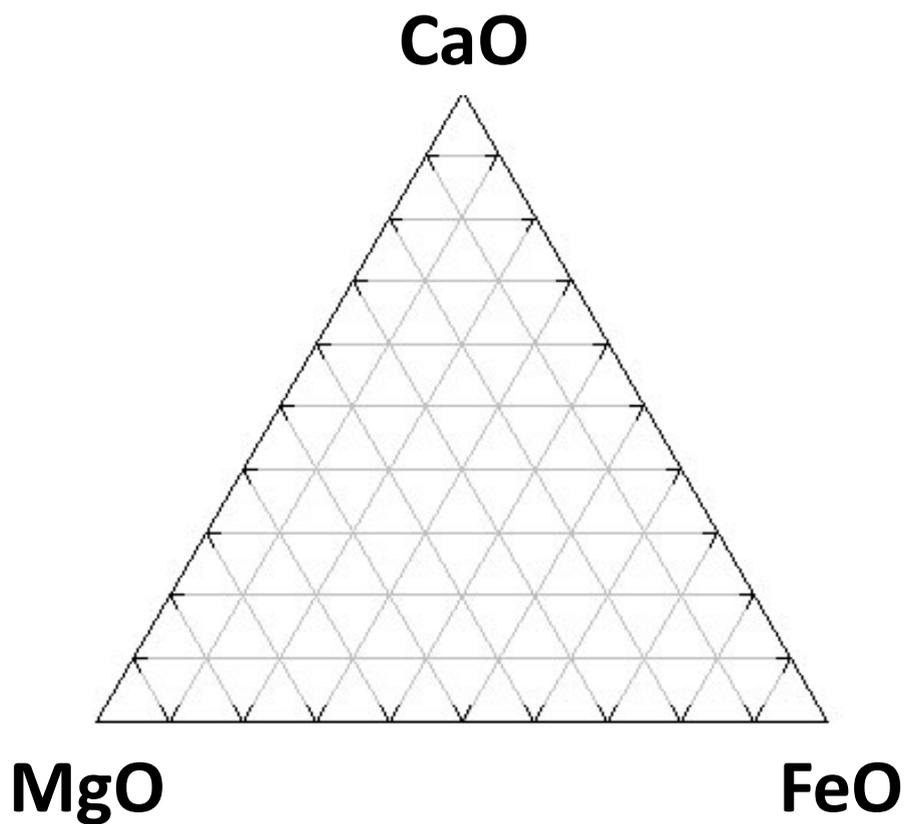
ANÁLISIS 2						
Óxido	% peso	Peso molecular	Proporción molecular	Proporción catiónica	Proporción de oxígeno	Nº cationes p.f.u.
MgO	19,37					
FeO	34,64					
MnO	0,79					
CaO	0,81					
CO ₂	43,48					
Total	99,09	Nº de oxígenos por fórmula unidad:				
FÓRMULA:						

ANÁLISIS 3						
Óxido	% peso	Peso molecular	Proporción molecular	Proporción catiónica	Proporción de oxígeno	Nº cationes p.f.u.
MgO	19,37					
FeO	34,64					
MnO	0,79					
CaO	0,81					
CO ₂	43,48					
Total	99,09	Nº de oxígenos por fórmula unidad:				
FÓRMULA:						

ANÁLISIS 4						
Óxido	% peso	Peso molecular	Proporción molecular	Proporción catiónica	Proporción de oxígeno	Nº cationes p.f.u.
MgO	19,37					
FeO	34,64					
MnO	0,79					
CaO	0,81					
CO ₂	43,48					
Total	99,09	Nº de oxígenos por fórmula unidad:				
FÓRMULA:						

ANÁLISIS 5						
Óxido	% peso	Peso molecular	Proporción molecular	Proporción catiónica	Proporción de oxígeno	Nº cationes p.f.u.
MgO	19,37					
FeO	34,64					
MnO	0,79					
CaO	0,81					
CO ₂	43,48					
Total	99,09	Nº de oxígenos por fórmula unidad:				
FÓRMULA:						

ANÁLISIS 6						
Óxido	% peso	Peso molecular	Proporción molecular	Proporción catiónica	Proporción de oxígeno	Nº cationes p.f.u.
MgO	19,37					
FeO	34,64					
MnO	0,79					
CaO	0,81					
CO ₂	43,48					
Total	99,09	Nº de oxígenos por fórmula unidad:				
FÓRMULA:						



Recibido: 23 marzo 2011.

Aceptado: 11 octubre 2011.