

Cátedra de Geoquímica – Trabajo Práctico N°5
Obtención de fórmulas minerales de porcentajes en óxidos o elementos

Se pueden presentar diferentes casos según de qué tipo de mineral se trate, a saber:

Caso 1: Análisis expresado en porcentaje de elementos

A- Calcular la **relación atómica** de cada elemento, catiónico y aniónico, **dividiendo el porcentaje del mismo por su peso atómico**.

B- Sobre la base de los radios iónicos de los cationes **sumar las relaciones atómicas obtenidas en A**, para aquellos que pueden **sustituirse diadóticamente** para formar soluciones sólidas.

C- Expresar la fórmula **relacionando los cationes con los aniones**.

D- Discriminación del paréntesis de la sumatoria de las relaciones catiónicas.

Ejemplo 1:

<u>Análisis</u>	<u>A- Relación atómica</u>	<u>B- Sumatoria de cationes</u>
Fe: 18,25%	$18,25 / 55,85 = 0,327$	$\Sigma (\text{Fe}^{+2} + \text{Mn}^{+2} + \text{Cd}^{+2} + \text{Zn}^{+2})$
Mn: 2,66%	$2,66 / 54,90 = 0,048$	$\Sigma_{\text{cat}} = 0,327 + 0,48 + 0,003 + 0,684$
Cd: 0,28%	$0,28 / 112,4 = 0,003$	$\Sigma_{\text{cat}} = \mathbf{1,062}$
Zn: 44,66%	$44,66 / 65,40 = 0,684$	
S: 33,57%	$33,57 / 32,00 = 1,049$	

C- Relación catión / anión

$$\frac{\Sigma (\text{Fe}^{+2} + \text{Mn}^{+2} + \text{Cd}^{+2} + \text{Zn}^{+2})}{\text{S}^{-2}} = \frac{1,062}{1,049} \cong 1$$

Fórmula: (Fe, Mn, Cd, Zn) S

D- Discriminación del paréntesis:

$$\text{Fe} = 0,327 / 1,062 = 0,31$$

$$\text{Mn} = 0,048 / 1,062 = 0,05$$

$$\text{Cd} = 0,003 / 1,062 \cong 0,003$$

$$\text{Zn} = 0,684 / 1,062 = 0,64$$

Fórmula discriminada: (Fe_{0,31}; Mn_{0,05}; Cd_{0,003}; Zn_{0,64})S

Cátedra de Geoquímica – Trabajo Práctico N°5
Obtención de fórmulas minerales de porcentajes en óxidos o elementos

Caso 2: Análisis expresado en porcentaje de óxidos

- A-** Calcular la **relación molecular** de cada óxido, dividiendo su porcentaje por el peso molecular del mismo.
- B-** Calcular la **relación atómica** de cada elemento. Para el **oxígeno** se deberán sumar los resultados parciales.
- C- Agrupar los elementos diadócicos**, por ejemplo: $Mg^{+2}-Fe^{+2}$; $Al^{+3}-Fe^{+3}$; etc.
Aquí se deberá **aplicar criterio de acuerdo al número de coordinación** con que actúen (recordar el caso del Al visto en el TP N°5).
- D-** Dividir cada **relación atómica** obtenida en **C** por el **M.C.D.**
- E-** **Expresar la fórmula**, aplicando criterio, reordenar los elementos.

El H puede aparecer como H_2O o como OH^- .

Ejemplo 1:

<u>Análisis</u>	<u>A- Relación molecular</u>	<u>B- Relación atómica</u>
Diád.[$Al_2O_3 = 66,27\%$	$66,27/102,0 = 0,63$	$Al^{+3} = 2 \times 0,63 = 1,26$
$Fe_2O_3 = 4,07\%$	$4,07/159,6 = 0,03$	$Fe^{+3} = 2 \times 0,03 = 0,06$
Diád.[$MgO = 19,94\%$	$19,94/ 40,0 = 0,50$	$Mg^{+2} = 1 \times 0,50 = 0,50$
$FeO = 11,30\%$	$11,30/71,8 = 0,16$	$Fe^{++} = 1 \times 0,16 = 0,16$

$$\Sigma O^- = (0,63 \times 3) + (0,03 \times 3) + 0,5 + 0,16 = 2,64$$

$$C-[Al^{+3} + Fe^{+3}] = 1,26 + 0,06 = 1,32$$

$$[Mg^{+2} + Fe^{+2}] = 0,50 + 0,16 = 0,66 = \text{M.C.D.}$$

$$O^- = 2,64$$

$$D-(Al^{+3} + Fe^{+3}) = 1,32/0,66 = 2 \quad (Mg^{+2} + Fe^{+2}) = 0,66/0,66 = 1 \quad O^- = 2,64/0,66 = 4$$

Fórmula: $(Mg,Fe)(Al,Fe)_2O_4$ espinela

Todavía se pueden **discriminar las relaciones diadócicas** de los paréntesis, por ejemplo:

$$Al^{+3} = 1,26/1,32 = 0,95; Fe^{+3} = 0,06/1,32 = 0,05; Mg^{+2} = 0,50/0,66 = 0,76;$$

$$Fe^{+2} = 0,16/0,66 = 0,24$$

Fórmula con la discriminación de los contenidos de los elementos diádicos:



Cátedra de Geoquímica – Trabajo Práctico N°5
Obtención de fórmulas minerales de porcentajes en óxidos o elementos

Ejemplo 2:

<u>Análisis</u>	<u>A- Relación molecular</u>	<u>B- Relación atómica</u>
SiO ₂ = 57,41%	57,41/60,09 = 0,96	Si ⁺⁴ = 0,96 x 1 = 0,96
Al ₂ O ₃ = 16,43%	16,43/102,00 = 0,16	Al ⁺³ = 0,16 x 2 = 0,32
CaO = 8,93%	8,93/56,00 = 0,16	Ca ⁺² = 0,16 x 1 = 0,16
H ₂ O = 17,23%	17,23/18,00 = 0,96	H ⁺ = 0,96 x 2 = 1,92

$$\Sigma O^- = (0,96 \times 2) + (0,16 \times 3) + 0,16 + 0,96 = \mathbf{3,52}$$

C- El Al⁺³, en determinadas condiciones, **puede ser diádoco del Si⁺⁴**, pero como no siempre lo es y además muchas veces **en una misma fórmula puede ocupar posiciones tetraédricas y octaédricas, no se considera esta diadocia** sino que **cada catión se calcula por separado** y luego se ubican en la fórmula, aplicando criterio, según corresponda.

D- El Ca⁺² = 0,16 será el **M.C.D.**

$$\text{Si}^{+4} \text{ } 0,96/0,16 = \mathbf{6} \quad \text{Al}^{+3} = 0,32/0,16 = \mathbf{2} \quad \text{Ca}^{+2} = 0,16/0,16 = \mathbf{1}$$

$$\text{H}^{+1} = 1,92/0,16 = \mathbf{12} \quad \text{O}^{-2} = 3,52/0,16 = \mathbf{22}$$

Armado de la fórmula: CaSi₆Al₂H₁₂O₂₂



Fórmula: Ca(AlSi₃O₈)₂ · 6H₂O **Ceolita cálcica**