

Cátedra de Geoquímica – Trabajo Práctico N° 4
Expresión de fórmulas minerales como porcentaje en elementos u óxidos

Las fórmulas químicas de los minerales pueden descomponerse de manera tal que representen la **composición porcentual en elementos o en óxidos de los elementos mayoritarios** que los constituyen, tal como si fueran los datos de un análisis químico. En el caso de un sulfuro como (Fe,Zn)S, se podrá descomponer en **porcentaje de los elementos** presentes, pero no en los óxidos de los mismos ya que en su composición no posee Oxígeno.

Es importante saber que **el Aluminio puede ocupar dos posiciones distintas en la estructura del mineral**, pues su radio iónico así lo permite. **Si está reemplazando al Silicio** estará como **Al tetraédrico**, si, por el contrario, aparece **fuera del paréntesis** en la fórmula mineral correspondiente al radical silicato, ocupará posiciones **octaédricas**. Esto no se verá reflejado ni en el análisis químico ni en el cálculo del porcentaje en óxidos a partir de la fórmula. La posición que ocupa el Al en la red cristalográfica se determina por estudios de Difracción de Rayos X (DRX). Así, por ejemplo:

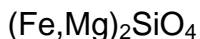


El Al que se encuentra dentro del paréntesis es tetraédrico y el que está por fuera es octaédrico.



En esta fórmula todo el Al es tetraédrico, ya que se encuentra reemplazando al Silicio.

Los **elementos diádocos** se deben presentar entre paréntesis y separados entre sí por una coma, por ejemplo: Fe^{+2} y Mg^{+2} en la serie de las Olivinas.



El paréntesis representa la suma de ambos elementos como si fueran uno solo, también se puede expresar cuánto hay de cada uno:



La suma de los elementos diádocos en cada paréntesis debe sumar el 100 % (70 % Fe + 30 % Mg = 100 %).

Para descomponer la fórmula en óxidos es necesario conocer **con qué valencia actúan los elementos**, especialmente aquellos como Fe, Mn, Cr, etc., que en los medios naturales y dependiendo de las condiciones de cristalización, pueden estar en distintos estados de oxidación.

Para proceder a la descomposición debemos ver cuál es **el número total de cada átomo presente en la fórmula** y así determinar **cuántas moléculas del óxido de ese elemento habrá**. Una vez determinado el número de moléculas de los distintos óxidos, **se multiplica el peso molecular (PM) de cada óxido por el número de moléculas del mismo** que haya en la fórmula. El **PM del mineral** estará dado por la **sumatoria de los distintos PM de los óxidos** componentes. Tomando este **PM del mineral como el 100%** se calculan **los porcentajes de cada óxido en dicho mineral**. La suma de los porcentajes debe ser $100 \pm 0,2$.

Cátedra de Geoquímica – Trabajo Práctico N° 4
Expresión de fórmulas minerales como porcentaje en elementos u óxidos

Un modo de controlar que la descomposición llevada a cabo es correcta es **sumar el oxígeno de todos los óxidos presentes**, que debe **coincidir con el número de átomos de oxígeno en la fórmula mineral**.

Ejemplo 1: $\text{Ca}_4(\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_8)_3\cdot\text{CO}_3$ Escapolita cálcica (Meionita)

Óxidos	PM óxidos	N° moléculas	PM mineral	% óxidos
6 SiO_2	60,09	x 2	= 360,54	38,58
3 Al_2O_3	102,00	x 1	= 306,00	32,74
4 CaO	56,00	x 1	= 224,00	23,97
1 CO_2	44,00	x 3	= 44,00	4,71
PM de la Meionita			934,54	100,00

Cálculo del porcentaje para SiO_2 :

$$\frac{360,54}{934,54} \times 100 \% = 38,58 \% \text{ SiO}_2$$

El cálculo se repite para cada óxido.

Ejemplo 2: mineral compuesto por porcentajes variables de dos moléculas terminales de una serie continua (solución sólida). Ej.: Plagioclasas, Olivinas, Piroxenos, algunos anfíboles.

50% $[\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8]$ -50% $[\text{NaAlSi}_3\text{O}_8]$

	Óxidos	PM óxidos	N° moléculas	Aporte mineral al	PM mineral	% óxidos
An	2 SiO_2	60,09	x 2	= 120,18x0,5	= 60,09	22,24
	1 Al_2O_3	102,00	x 1	= 102,00 x 0,5	= 51,00	18,87
	1 CaO	56,00	x 1	= 56,00 x 0,5	= 28,00	10,36
Ab	3 SiO_2	60,09	x 3	= 180,27 x 0,5	= 90,13	33,35
	$\frac{1}{2}$ Al_2O_3	102,00	x $\frac{1}{2}$	= 51,00 x 0,5	= 25,50	9,44
	$\frac{1}{2}$ Na_2O	62,00	x $\frac{1}{2}$	= 31,00 x 0,5	= 15,50	5,74
PM de la An₅₀-Ab₅₀					270,22	100,00

Del mismo modo, se puede expresar la **composición porcentual en óxidos**, para una **roca** de la que se conozca la **composición mineralógica modal** (moda), obtenida por determinación microscópica o Difracción de Rayos X. En este caso, **una vez que cada mineral haya sido descompuesto en óxidos y calculada su composición porcentual**, como ya se ha visto, **cada uno de ellos se multiplicará por el porcentaje de ese mineral en la roca, dividido por 100**. Una vez realizado el cálculo para todos los minerales presentes se **sumarán los porcentajes** de SiO_2 , Al_2O_3 , etc., en que contribuyen las **distintas especies** para obtener la **composición porcentual en óxidos de la roca**. Por ejemplo: una roca que, entre otros minerales, tiene un 20% de **Cuarzo** (Qz), este mineral está constituido por **SiO_2 en un 100%** y el total de la roca aportará: $\text{SiO}_2 \text{ (Qz)} = 100 \times 0,20 = 20\%$.