



Composición centesimal, fórmula empírica y fórmula molecular

Composición centesimal de un elemento en un compuesto es el porcentaje que tiene de ese elemento en su fórmula. Se puede ver cualitativamente como un %masa pero no asociado a soluto/disolución sino a elemento/compuesto.

Ejemplo H_2O ; pesos atómicos $H=1$ y $O=16$. Podemos comprobar que todas las composiciones centesimales de todos los elementos que aparecen en la fórmula suman $100\%=11,1\%+88,9\%$

$$\%H = \frac{2 \cdot 1 \text{ g H}}{2 \cdot 1 + 16 \text{ g H}_2\text{O}} \cdot 100 = 11,1\% \quad \%O = \frac{16 \text{ g O}}{2 \cdot 1 + 16 \text{ g H}_2\text{O}} \cdot 100 = 88,9\%$$

Estos porcentajes son fijos para cada compuesto según las leyes ponderales vistas (Proust).

A partir de la fórmula calcular los porcentajes es trivial; lo habitual es tener los porcentajes (se obtienen mediante procesos químicos) y a partir de ellos deducir la/s fórmula/s, de dos tipos:

Fórmula empírica es la que indica las proporciones de elementos con los números más simples posibles, indicando simplemente proporciones. Los subíndices son enteros para cada elemento.

Fórmula molecular es la que indica el número de átomos de cada elemento que forman una molécula, en un compuesto con enlaces covalentes.

Ejemplos: peróxido de hidrógeno tiene fórmula molecular H_2O_2 y empírica HO . La fórmula molecular no se pueden simplificar los subíndices, ya que reflejan cómo es la molécula, con dos átomos de H y dos de O enlazados (H-O-O-H). Otro ejemplo sería el etino C_2H_2 , que no podemos simplificar porque pasaría a tener un único átomo de carbono y sería derivado del metano!

El Oxido de calcio CaO es iónico, y se unen Ca^{2+} y O^{2-} , pero no es Ca_2O_2 porque como compuesto iónico su estructura es una red cristalina y la fórmula CaO indica la proporción entre elementos.

Es importante tener claro que *la composición centesimal es fija para un compuesto dado, se use la fórmula empírica o la fórmula molecular si es que la tiene.*

Cálculo de fórmula empírica a partir de composición centesimal.

Datos de partida son los elementos forman el compuesto y sus composiciones centesimales (como todas suman 100%, pueden darse todas menos una y deducirse). Los pasos a seguir son:

1.- Asumimos una cantidad de sustancia, por simplicidad 100 g, y calculamos los moles de cada uno de los elementos en esa cantidad. Los números de moles obtenidos no serán números enteros.

2.- Dividimos los números de moles obtenidos en el paso anterior por el número menor de moles.

Así garantizamos que tenemos al menos un número entero, 1, para un elemento, y los otros números son iguales o mayores que 1. Redondeamos a números enteros dentro de cierto margen de error debido al redondeo, o dejamos como decimales. (Ejemplo $1,01 \approx 1$ pero $1,33$ no lo redondeamos)

3.- Convertimos todos los subíndices en enteros, si quedase algún número con decimales. Se puede hacer convirtiendo los números decimales en fracciones y luego operando con ellas, o multiplicando todos los subíndices por los números necesarios para que los que tienen decimales dejen de tenerlos. Ejemplo: Compuesto con C,N y H con 56,6% de C y 39,6% de N (deducimos 3,8% de H)

Paso 1: Asumimos 100 g de sustancia, donde habrá 56,6 g C, 39,6 g de N y 3,8 g de H.

$$56,6 \text{ g C} \cdot \frac{1 \text{ mol C}}{12 \text{ g C}} = 4,72 \text{ mol C} \quad 39,6 \text{ g N} \cdot \frac{1 \text{ mol N}}{14 \text{ g N}} = 2,83 \text{ mol N} \quad 3,8 \text{ g H} \cdot \frac{1 \text{ mol H}}{1 \text{ g H}} = 3,8 \text{ mol H}$$

Paso 2: Dividimos por el menor número, 2,83 mol N, obtenemos proporción moles respecto N

$$H : \frac{3,8}{2,83} \approx 1,34 ; C : \frac{4,72}{2,83} \approx 1,67 , N : \frac{2,83}{2,83} = 1 \quad \text{Fórmula empírica sería } C_{1,67}H_{1,34}N, \text{ no nos vale}$$

Paso 3: $1,34 \approx 4/3$, $1,66 \approx 5/3$, luego podemos plantear $C_{5/3}H_{4/3}N$, si multiplicamos por 3 $C_5H_4N_3$

Cálculo de fórmula molecular a partir de composición centesimal.

Paso intermedio obligatorio es obtener la fórmula empírica y su masa molar. Se usan la relación

$$F. \text{ molecular} = n(F. \text{ Empírica}), \text{ que supone } M(F. \text{ molecular}) = n \cdot M(F. \text{ empírica})$$

El problema de calcular el valor n (que tiene que ser necesariamente un número entero), se reduce a obtener de alguna manera el valor de la masa molar para la fórmula molecular. Una manera habitual es dando la masa de cierto número de moles, moles que a veces se indican indirectamente indicando que en estado gaseoso ocupan cierto volumen a cierta presión y temperatura.