

CMOL

Càlculs amb fórmules químiques: *massa molar, conversions grams – mols-mol·lècules-
volum de gas... Composició centesimal, fórmula empírica /mol·lecular*

The screenshot shows the 'Càlculs amb mols' software interface. The main window displays the chemical formula C_2H_6 and its molar mass, 30.06 g/mol. The 'Càlcul Massa Molar (MM)' section shows the calculation $12 \cdot 2 + 1.01 \cdot 6$ resulting in 30.06 g/mol. The 'Conversions' section shows the conversion of 3.162 grams to 0.10519 moles and 6.33e22 molecules, with a gas volume of 2.36 L. The 'Composició - Fórmula empírica / mol·lecular' section shows the composition: C 0.6, H 0.15, and a molar mass of 30. The interface also includes a menu bar (Arxiu, Dades, Eines, Info) and various input fields and buttons for calculations.

[Entrada/generació d'una fórmula](#)

[Dades de masses atòmiques](#)

[Càlcul de la massa molar](#)

[Conversions](#)

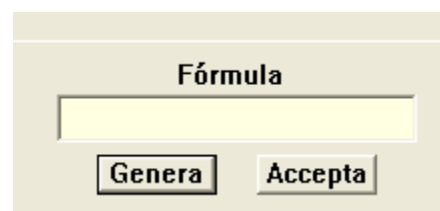
[Composició centesimal](#)

[Fórmula empírica / mol·lecular](#)

Entrada/generació d'una fórmula

Es pot introduir la fórmula manualment (sense tenir en compte el format de subíndexs, etc)

sempre que tots els seus elements estiguin a la [base de dades](#) (la qual podeu editar i ampliar)

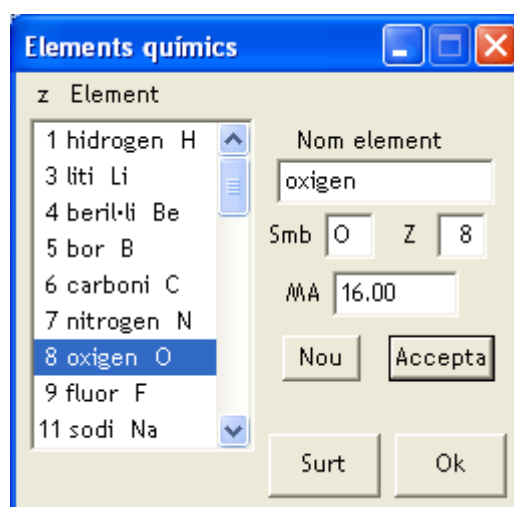
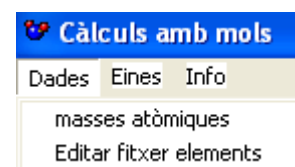


També es pot generar aleatòriament pel programa i llavors també apareix el seu nom. En els dos casos apareixerà la fórmula formatejada a l'esquerra.



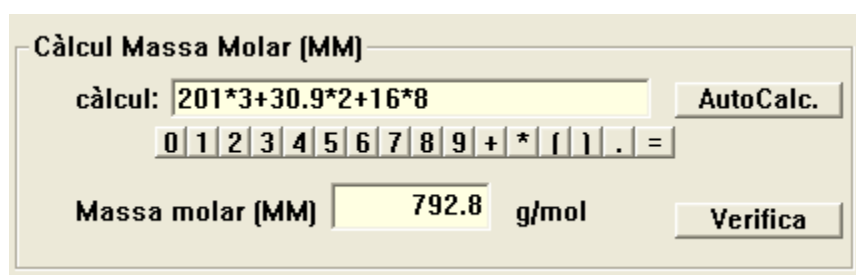
Dades de masses atòmiques

Els càlculs amb les fórmules utilitzen una base de dades d'elements que es pot ampliar/editar amb l'opció del menú...



Càlcul de la massa molar

Podeu provar de calcular-la i comprovar-la amb el botó **Verifica** o que la calculi el programa amb el botó **AutoCalc**.



Conversions

Es pot seleccionar el tipus (grams, mols, "mol·lècules"..) de la dada que s'ha de convertir als altres tipus punxant amb el ratolí

Si una substància és gasosa (com ara CO₂, CH₄, etc...) es pot activar la casella per fer càlculs de volum en C.N.

Conversions

grams mols "mol·lècules"

76.3 0.09586 5.77e22

1mol: MM g 1mol: 6.02 · 10²³

gas

L. en C.N.

Genera Accepta

Un cop introduït o generat aleatòriament el valor de la dada original, i depenent de si s'han entrat també o no les conversions, pulsant el botó d'acceptar es calcularan les conversions i/o es mostrarà una llista si escau d'entrades errònies

Conversions

grams mols "m

27 2.1

1mol: MM g 1mol: 6.02 · 10²³

gas

L. en C.N.

Genera

Resultats erronis o imprecisos

mols	2.1
litres	46.5


Aceptar

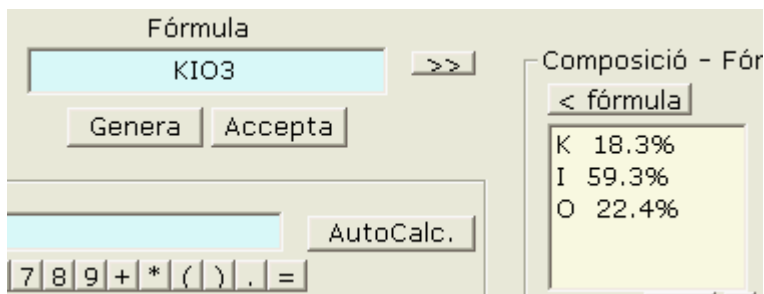
(I si es vol veure els valors correctes cal posar en blanc les caselles corresponents i pulsar un altre cop Accepta)

Nota:

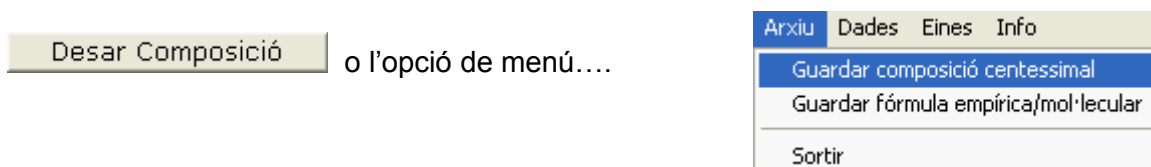
(*): Els compostos iònics (típicament, les sals) no estan formats per autèntiques mol·lècules sinó per agrupacions d'ions de signe oposat que constitueixen les unitats mínimes del compost

Composició centesimal

Un cop introduïda o generada una fórmula es pot obtenir la seva composició centesimal clicant al botó  :



El resultat es pot guardar en (o afegir a, si ja existeix) un fitxer de text mitjançant el botó

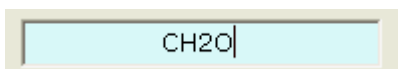


Fórmula empírica / mol·lecular

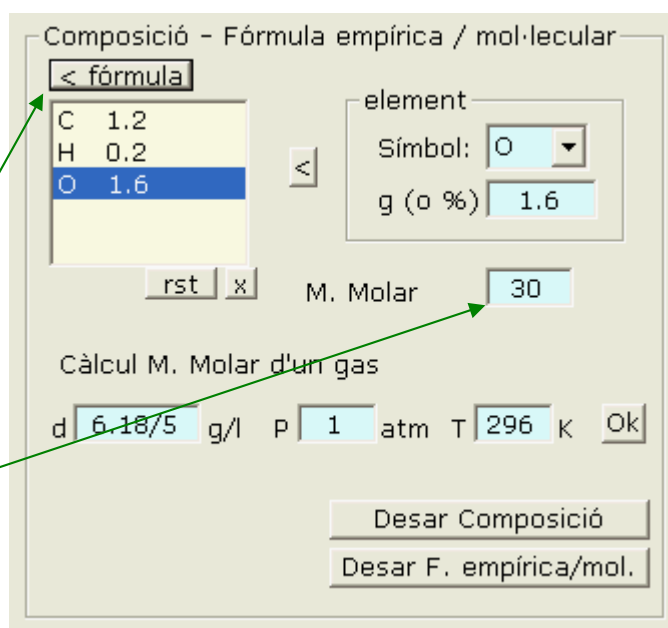
Es pot obtenir en aquest panell:

Els elements s'introdueixen o trien de la llista i les seves quantitats.

Un cop completada la llista clicant a s'obtindrà la fórmula



que serà l'*empírica* (la més simple) o la *mol·lecular* si s'ha especificat una massa molar



Es pot calcular la massa molar de compostos gasosos a partir de les seves dades de densitat (o de grams i volum ocupat escrits en forma de quocient) a certa pressió i temperatura.

També es pot desar el cas en un fitxer de text.