

# CMOL

**Cálculos sobre fórmulas químicas:** masa molar, conversiones de gramos a moles, moléculas, volumen de gas... Composición centesimal. Fórmula empírica y molecular

The screenshot shows the 'Cálculos con moles' software interface. The main window title is 'Cálculos con moles'. The menu bar includes 'Fichero', 'Datos', 'Utilidades', and 'Info'. The central area displays the chemical formula  $C_{10}N_2H_{14}$  in green. Below it, the 'Fórmula' field contains 'C10N2H14' with 'Genera' and 'Acepta' buttons. The 'Cálculo Masa Molar (MM)' section shows a calculation:  $12 \cdot 10 + 14 \cdot 2 + 1.01 \cdot 14$ , resulting in a molar mass of 162.14 g/mol. The 'Conversiones' section shows a conversion from 3.56 grams to 0.02195 moles, and then to  $1.32e22$  molecules. The 'Composición - Fórmula empírica / molecular' panel shows a table of element percentages: C (7.41%), N (1.73%), and H (0.87%). The 'Cálculo M. Molar de un gas' section includes fields for density (d), pressure (P), and temperature (T).

[Entrada/generación fórmula](#)

[Datos de masas atómicas](#)

[Cálculo de la masa molar](#)

[Conversiones](#)

[Composición centesimal](#)

[Fórmula empírica / molecular](#)

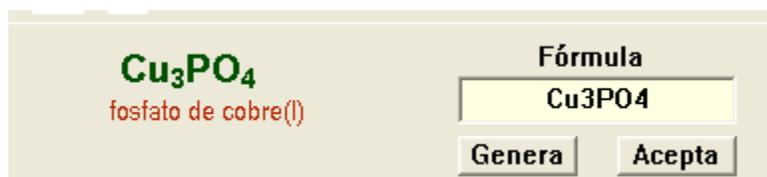
## Entrada/generación fórmula

Se puede introducir la fórmula manualmente (sin tener en cuenta el formato de subíndices, etc) siempre que todos sus elementos estén en la base de datos (la cual se puede editar y ampliar)



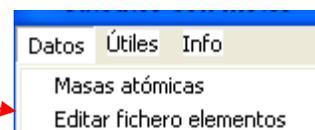
También puede ser generada aleatoriamente por el programa y entonces también aparecerá su nombre.

En ambos casos aparecerá la fórmula formateada a la izquierda.



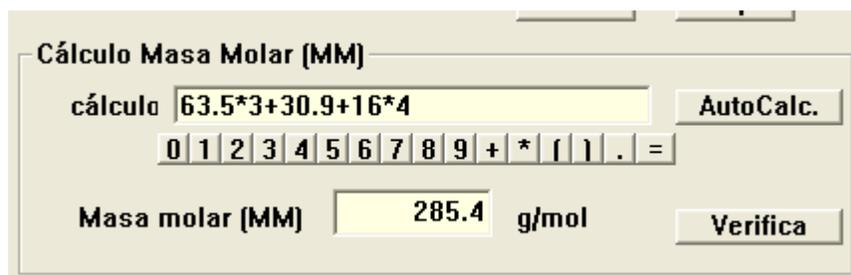
## Datos de masas atómicas

Los cálculos con las fórmulas utilizan una base de datos de elementos que se puede ampliar/editar con la opción del menú...



## Cálculo de la masa molar

Una opción consiste en efectuar el cálculo y comprobar el resultado con el botón **Verifica**. Otra es que la calcule el programa pulsando el botón **AutoCalc**.



## Conversiones

Se puede seleccionar el tipo (gramos, moles, "moléculas" (\*)..) del dato que se debe convertir a los otros tipos con el ratón

Conversiones

gramos     moles     "moléculas"

97.3    0.33987    2.04e23

1mol: MM g    1mol: 6.02 · 10<sup>23</sup>

gas    1mol: 22.4 L

L. en C.N.    [ ]

Generar    Aceptar

Si una sustancia es gaseosa (como CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, etc...) se puede activar la casilla por hacer cálculos también de volumen en C.N

Una vez introducido o generado aleatoriamente el valor del dato original, y dependiendo de si se han entrado también o no las conversiones, pulsando el botón Aceptar se calcularán las conversiones y/o se mostrará, si procede, una lista de entradas erróneas

Conversiones

gramos     moles     "m

77    1.6    39.2

1mol: MM g    1mol: 6.02 · 10<sup>23</sup>

gas    1mol: 22.4 L

L. en C.N.    39.2

Generar

Resultados erróneos o imprecisos

moles 1,6

"moléculas" 2.05e24

Aceptar

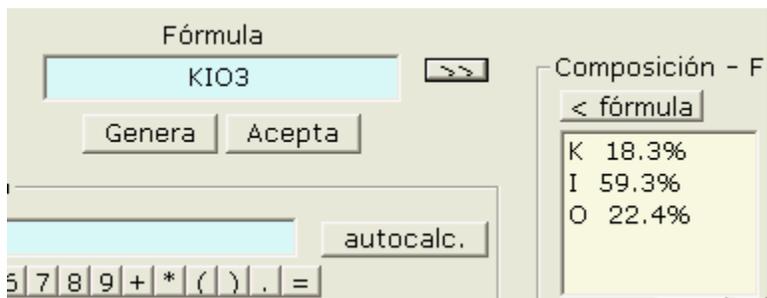
(Si se quiere ver los valores correctos hay que poner en blanco las casillas correspondientes y pulsar de nuevo Aceptar)

Nota:

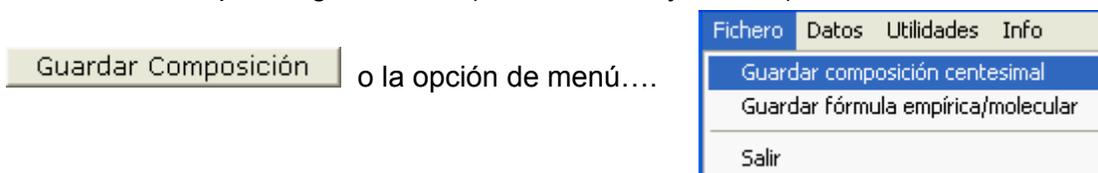
(\*): Los compuestos iónicos (típicamente, las sales) no están formados por auténticas moléculas sino por agrupaciones de iones de signo opuesto que constituyen las unidades mínimas del compuesto

## Composición centesimal

Una vez introducida o generada una fórmula se puede obtener su composición centesimal clicando sobre el botón  :



El resultado se puede guardar en (o añadir a, si ya existe) un fichero de texto mediante el botón



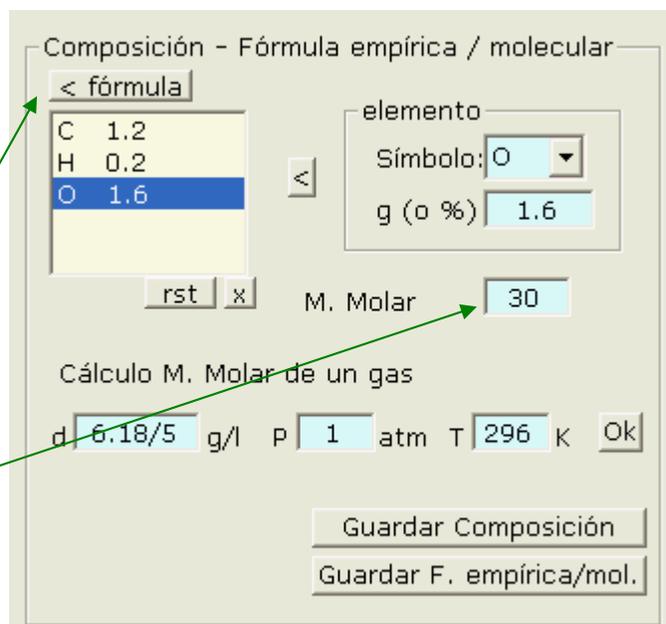
## Fórmula empírica / molecular

Se puede obtener en este panel:

Los elementos se introducen o eligen de lista, así como sus cantidades.

Una vez completada la relación, con se obtendrá la fórmula:

que será la *empírica* (la más simple) o la *molecular* si se ha especificado una masa molar



la

Se puede calcular la masa molar de compuestos gaseosos a partir de sus datos de densidad (o de gramos y volumen ocupado escritos en forma de cociente) a cierta presión y temperatura.

También se puede guardar el caso en un fichero de texto.