

PROGRAMA DE CÓMPUTO PARA LA DETERMINACIÓN DE FÓRMULAS EMPÍRICAS. I

Alejandro Corona Jiménez y Rodolfo Acevedo Chávez*

Dada la importancia que ha adquirido la computadora como apoyo docente, esta sección se ha creado para divulgar novedades en este terreno y para propiciar entre los interesados el intercambio de *software*.

Sin la intención de descubrir el hilo negro, y tan sólo con la finalidad de facilitar con sus recursos la solución de problemas analíticos en un laboratorio de investigación química, se diseñó, construyó y demostró la ejecución correcta de un programa de cómputo para la determinación de fórmulas empíricas de compuestos. El programa está construido en forma modular, en lenguaje de comandos dBase III plus, y es ejecutable en una microcomputadora compatible PC que reúna las características de poseer cuando menos 640 Kbytes de memoria RAM y dos unidades de disco flexible. El programa permite el estudio de compuestos constituidos hasta por 10 elementos diferentes, pudiendo variar los subíndices respectivos de ellos entre 0 y 9. Así también, el programa permite el estudio de compuestos mononucleares de coordinación constituidos hasta por 10 ligantes diferentes, siendo 99 el límite superior de los subíndices del metal y de cada ligante. El programa es alimentado con los porcentajes analíticos experimentales (C, H y N

para el primer caso: C, H y N, y de ser posible % del metal, para el segundo caso) eligiéndose el tipo de compuesto que se va a estudiar (1º ó 2º caso). Independientemente del caso elegido, el programa es alimentado con el número y con el tipo de especies químicas asumidas a constituir el compuesto en estudio, alimentándose posteriormente y en la

misma secuencia las proposiciones de los subíndices respectivos. Para cada proposición de formulación alimentada, el programa determina los porcentajes teóricos y de error de los elementos C, H y N, ordenando las proposiciones al final en forma ascendente según la suma de dichos porcentajes analíticos experimentales y el listado de todas las proposiciones de formulación alimentadas, con sus porcentajes teóricos y de error para C, H y N. De esta forma, el usuario puede elegir la formulación adecuada.

Por último, los autores expresan su disposición amplia para la reproducción del programa, bajo solicitud por escrito y envío de 1 (uno) disco flexible (5 1/4").

PROGRAMA DE CÓMPUTO PARA LA DETERMINACIÓN DE FÓRMULAS EMPÍRICAS. II

Alejandro Corona Jiménez y Rodolfo Acevedo Chávez**

Con las mismas motivaciones que en el caso anterior, en nuestro laboratorio se ha diseñado, construido y demostrado un programa que facilita la determinación de fórmulas empíricas de compuestos de coordinación heterobimetálicos. Al igual que en el programa anterior, se tiene un diseño modular, en lenguaje de comandos dBase III plus, y puede ejecutarse en una computadora compatible PC que tenga cuando menos 640 Kbyte de memoria RAM y dos unidades de disco flexible. El programa permite el estudio de compuestos heterobimetálicos constituidos como máximo por 10 tipos de ligantes diferentes, siendo 99 el límite superior de los subíndices metálicos y de los ligantes, incluyéndose además valores fraccionarios.

El programa es alimentado por los porcentajes analíticos experimentales de C, H, N y de los metales (M₁ y M₂) del compuesto en estudio. Se definen a continuación el número y tipo de ligantes asumidos a consti-

tuir dicho compuesto. Se alimentan los subíndices metálicos y de los ligantes para una proposición de formulación dada, obteniéndose los porcentajes teóricos y de error de los metales y de C, H y N para dicha proposición, así como su masa molecular. Este proceso se aplica a todas las proposiciones requeridas, obteniéndose al final el listado de proposiciones de fórmula empírica, ordenadas respecto al valor ascendente del % de error de N. El impreso contiene los porcentajes experimentales y los subíndices de todas y cada una de las proposiciones de formulación abordadas, acompañadas por los porcentajes teóricos y de error de los cinco elementos, y de su masa molecular, posibilitando al usuario la selección de la fórmula más congruente.

La reproducción del programa puede hacerse por solicitud escrita y envío de 1 (uno) disco flexible (5 1/4").

Centro de Química del Instituto de Ciencias de la Universidad Autónoma de Puebla.
Apdo. Postal 1613, Puebla, Pue.

* *Recibido:* 6 de septiembre de 1991
Aceptado: 1 de marzo de 1992

** *Recibido:* 20 de enero de 1992
Aceptado: 1 de marzo de 1992