

La stoechiométrie

La masse atomique

- il est impossible de peser un seul atome, mais on peut facilement établir la masse relative d'un atome par rapport à un autre
- on doit établir un étalon:
 - un atome de carbone 12 (six protons, six neutrons, six électrons) a une masse d'exactly 12 unités de masse atomique (u)
 - donc 1 unité de masse atomique équivaut exactement à un douzième de la masse d'un atome de carbone 12
- ex.; si on trouve qu'un atome d'hydrogène a seulement 8.400% de la masse d'un carbone 12, la masse atomique d'hydrogène doit être

$$0.08400 \times 12 \text{ u} = 1.008 \text{ u}$$

La masse atomique moyenne

- la plupart des éléments naturels ont plus qu'un isotope
 - ex.; il y a deux isotopes pour le carbone, soit le carbone 12 (98.89%) et le carbone 13 (1.11%, masse atomique = 13.00335 u), et la masse moyenne pondérée est

$$(0.9889)(12.00000\text{u}) + (0.0111)(13.00335) = 12.01 \text{ u}$$

- le fait que le carbone 12 soit l'isotope dominant fait que la masse atomique moyenne est approximativement 12
- N.B. 12.01 u est une valeur moyenne et aucun atome individuel de carbone n'a cette masse, i.e., c'est soit 12.00000 u ou 13.00335 u

La masse atomique moyenne

- Exemple: Les masses atomiques des deux isotopes stables du bore, le bore 10 (19.78%) et le bore 11 (80.22%), sont respectivement de 10.0129 u et de 11.0093 u. Calculez la masse atomique moyenne du bore.
- Solution:

masse atomique du B =

$$(0.1978)(10.0129\text{u}) + (0.8022)(11.0093\text{ u}) = 10.81\text{ u}$$

Le nombre d'Avogadro

- une mole décrit un nombre particulier d'objets, tout comme une paire (2), une douzaine (12), ou une grosse (144)
- une mole est le nombre d'atomes de carbone 12 dans exactement 12 g de carbone 12
- la valeur couramment acceptée est

$$1 \text{ mole} = 6.022045 \times 10^{23} \text{ particules}$$

La masse molaire

- la masse molaire d'un atome ou d'une molécule est la masse d'une mole de ces atomes ou de ces molécules
- la masse molaire de carbone 12 est donc 12 g par définition
- la valeur numérique de la masse molaire (en grammes) pour un atome est la même que la valeur numérique pour la masse atomique moyenne (en u)
 - ex.; pour le Na, la masse atomique moyenne = 22.99 u
et la masse molaire = 22.99 g

La masse d'un atome

- nous savons que, par définition, 12 g de carbone 12 contient 6.022045×10^{23} atomes de carbone 12
- la masse d'un seul atome de carbone 12 est donc

$$\frac{12 \text{ g}}{6.022045 \times 10^{23} \text{ atomes}} = 1.992679 \times 10^{-23} \text{ g/atome}$$

- une seule unité de masse atomique est 12 fois plus petit
 - donc $1 \text{ u} = 1.660565 \times 10^{-24}$ et $1 \text{ g} = 6.022045 \times 10^{23} \text{ u}$

La masse molaire d'un élément et le nombre d'Avogadro

- Exemple: Quelle est la masse (en grammes) d'un atome d'iode (I)?
- Solution:
 - la masse molaire de l'iode = 126.9 g/mol, donc

$$\text{masse} = \frac{126 \text{ g mol}^{-1}}{6.022045 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}} = 2.107 \times 10^{-22} \text{ g}$$

La masse moléculaire

- la masse moléculaire est la somme des masses atomiques (en unités de masse atomique) des atomes qui forment une molécule
- ex.; la masse moléculaire de l'eau est
$$(2)(1.008 \text{ u}) + (1)(16.00 \text{ u}) = 18.02 \text{ u}$$
- la masse molaire d'une molécule (en grammes) a une valeur numérique égale à sa masse moléculaire moyenne (en unités de masse atomique)
- ex.; la masse molaire de l'eau est 18.02 g, et donc 18.02 g d'eau contient une mole (ou 6.022045×10^{23} molécules) d'eau

La masse moléculaire

- Exemple: Quelle est la masse moléculaire du méthanol (CH₃OH)?
- Solution:

$$\begin{aligned} \text{masse moléculaire de CH}_3\text{OH} &= (4)(1.008 \text{ u}) \\ &\quad + (1)(12.01 \text{ u}) \\ &\quad + \underline{(1)(16.00 \text{ u})} \\ &= 32.04 \text{ u} \end{aligned}$$

La masse molaire

- Exemple: Calculez le nombre de moles contenues dans 198 g de chloroforme (CHCl_3).

- Solution:

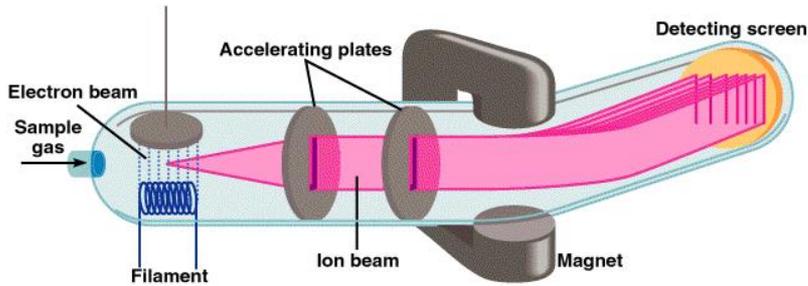
$$\text{masse molaire de } \text{CHCl}_3 = (1)(12.01 \text{ g}) + (1)(1.008 \text{ g}) + (3)(35.45 \text{ g}) = 119.37 \text{ g}$$

$$\text{nombre de molécules de } \text{CHCl}_3 = \frac{198 \text{ g}}{119.37 \text{ g mol}^{-1}} = 1.66 \text{ mol}$$

Le spectromètre de masse

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

Mass Spectrometer

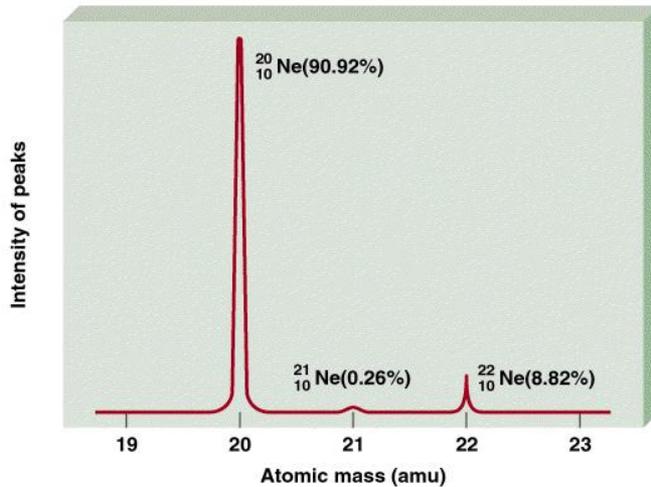


- un faisceau d'électrons ionise les molécules, et un aimant modifie la trajectoire des ions produits selon leur rapport charge : masse
- le signal produit par un ion particulier est proportionnel à son abondance

Le spectromètre de masse

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

Mass Spectrum of the Three Isotopes of Neon



- dans cet exemple, on peut déterminer l'abondance relative de chaque isotope de Ne
- la spectrométrie de masse peut aussi être utilisée pour identifier la masse moléculaire d'un composé

La composition centésimale

- la composition centésimale est le pourcentage en masse de chaque élément contenu dans un composé
- la composition centésimale nous permet d'établir la formule empirique d'un composé
 - avec sa masse moléculaire, obtenue par la spectrométrie de masse, ou l'équation des gaz parfaits dans le cas d'un gaz, on peut ensuite établir sa formule moléculaire

La composition centésimale

- Exemple: La composition centésimale du peroxyde d'hydrogène est 5.94% H et 94.06% O. Quelle est sa formule empirique? Si la masse moléculaire de ce composé est 34.02 u, quelle est sa formule moléculaire?
- Solution:
 - Si on avait 100 g de peroxyde d'hydrogène, on aurait 94.06 g de O et 5.94 g de H, soit $(94.06 \text{ g}) / (16.00 \text{ g/mol}) = 5.88 \text{ mol}$ de O et $(5.94 \text{ g}) / (1.008 \text{ g/mol}) = 5.89 \text{ mol}$ de H.
 - Ceci donne un rapport H:O d'environ 1:1. Sa formule empirique est donc HO.
 - Si la formule moléculaire était HO, la masse moléculaire serait 17.01 u (soit deux fois trop petit).
 - La formule moléculaire est donc H₂O₂.

La composition centésimale

- Exemple: Déterminez la formule empirique d'un composé selon la composition centésimale suivante: 24.75% K, 34.77% Mn, et 40.51% O.

- Solution:

- Si on avait 100 g de ce composé, on aurait 24.75 g de K, 34.77 g de Mn, et 40.51 g de O, ou soit

$$(24.75 \text{ g}) / (39.10 \text{ g/mol}) = 0.6330 \text{ mol de K,}$$

$$(34.77 \text{ g}) / (54.94 \text{ g/mol}) = 0.6329 \text{ mol de Mn, et}$$

$$(40.51 \text{ g}) / (16.00 \text{ g/mol}) = 2.532 \text{ mol de O}$$

- Ceci donne un rapport K:Mn:O d'environ 1:1:4.
- La formule empirique est donc KMnO_4 .

- La composition centésimale d'un composé est de 38.08% C, 31.71% O, 25.42% S, et 4.79% H. La masse moléculaire du composé est approximativement 504.6 g/mol. Quelle est la formule empirique de ce composé? Quelle est sa formule moléculaire? Quelle est la masse (en g) d'une molécule de ce composé?

L'équilibrage des équations chimiques

- une fois que tous les réactifs et produits sont connus (ceci n'est pas toujours trivial), on peut équilibrer une équation chimique afin de respecter la loi de la conservation de masse
- on peut équilibrer l'équation en jouant avec les coefficients devant chaque réactif ou produit (on ne peut pas jouer avec la formule moléculaire!!!)
- il est souvent plus facile de commencer à équilibrer un élément qui apparaît à seulement une place de chaque côté de la flèche

L'équilibration des réactions chimiques

- eg.; $\text{KClO}_3 \longrightarrow \text{KCl} + \text{O}_2$
 - K et Cl sont équilibrés (pour l'instant)
 - on équilibre O



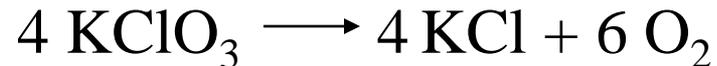
- O est maintenant équilibré
- K et Cl ne sont plus équilibrés



- l'équation est maintenant équilibrée

L'équilibration des équations chimiques

- N.B. les équations chimiques



sont acceptables et équilibrées.

- cependant, il est courant, pour équilibrer les équations, d'utiliser les plus petits nombres entiers possibles comme coefficients

L'équilibration des équations chimiques

- ex.;
 - $$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{O}_2 \longrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$$
 - aucun élément n'est équilibré
 - on équilibre le C
 - $$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{O}_2 \longrightarrow 2 \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$$
 - on équilibre l'H
 - $$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{O}_2 \longrightarrow 2 \text{CO}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$$
 - on équilibre l'O
 - $$\text{C}_2\text{H}_6 + (7/2) \text{O}_2 \longrightarrow 2 \text{CO}_2 + 3 \text{H}_2\text{O}$$
 - l'équation est équilibrée
 - on double les coefficients pour avoir des nombres entiers



L'équilibration des équations chimiques

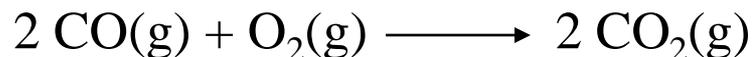
- ex.; $\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{CO} \longrightarrow \text{Fe} + \text{CO}_2$

Les calculs des quantités de réactifs et de produits

- la stoechiométrie est l'étude des relations entre les masses des réactifs et des produits dans une réaction chimique
- si on connaît la quantité de réactifs (produits), on peut calculer la quantité de produits (réactifs) qui est formée (requisite)
- afin de simplifier le processus, on utilisera la méthode des moles, i.e., on travaillera directement avec les moles (plutôt qu'avec les grammes ou litres)

Les calculs des quantités de réactifs et de produits

- pour la réaction



on observe qu'au moins deux moles de CO(g) sont nécessaires pour produire deux moles de CO₂(g) et qu'au moins une mole de O₂(g) est aussi nécessaire

- dans cet exemple, on dit que 2 mol CO sont stoechiométriquement équivalent à 1 mol O₂(g) ainsi que 2 mol CO₂(g)
- de la même façon, on dit que 1 mol O₂(g) est stoechiométriquement équivalent à 2 mol CO₂(g)

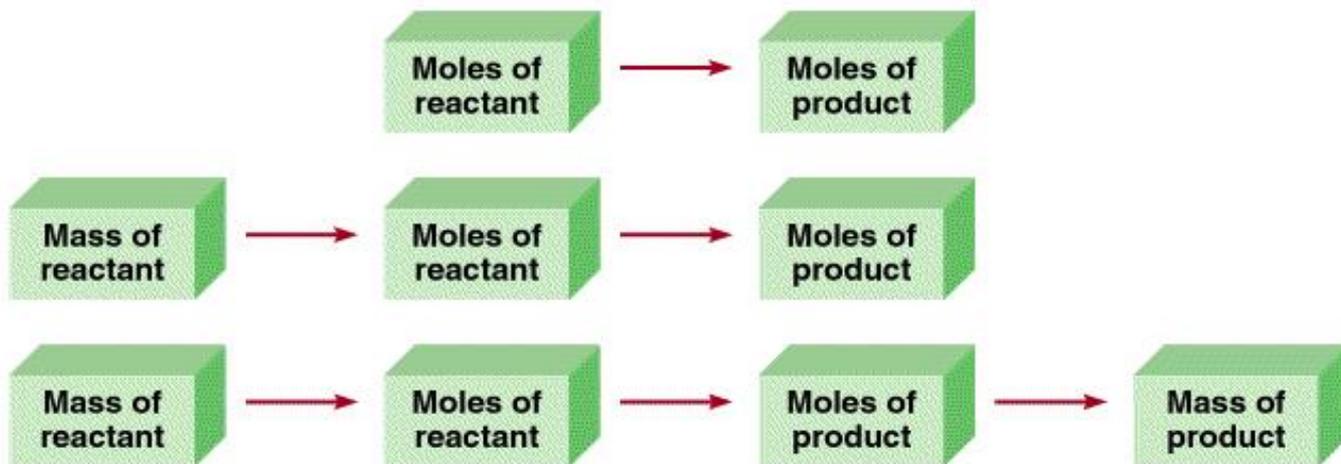
La méthode des moles

- étape (1): identifiez tous les réactifs et produits
- étape (2): équilibrez l'équation chimique
- étape (3): convertissez toutes les quantités connues en moles
- étape (4): utilisez les coefficients de l'équation chimique équilibrée pour établir le nombre de moles des quantités recherchées
- étape (5): si nécessaire, convertissez le nombre de moles des quantités recherchées en grammes, litres, etc.

La méthode des moles

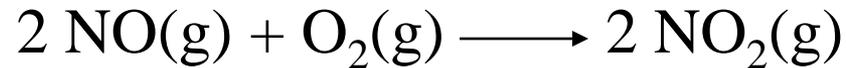
Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

Three Types of Stoichiometric Calculations Based on the Mole Method



La méthode des moles

- Exemple: La réaction entre NO et O₂ est une étape clé dans la formation de smog photochimique:



- (a) Combien de moles de NO₂(g) sont formées par réaction complète de 0.254 mole de O₂(g)?
- (b) Quelle masse en grammes de NO₂(g) est obtenue par la réaction complète de 1.44 g de NO(g)?

La méthode des moles

- Solution: (a) L'équation est déjà équilibrée et on sait que 0.254 mole de $O_2(g)$ réagissent. On produit donc deux fois plus de NO_2 , soit 0.508 moles.

(b) 1.44 g de NO est $(1.44 \text{ g}) / (14.01 \text{ g/mol} + 16.00 \text{ g/mol}) = 0.0480 \text{ mol}$ de NO

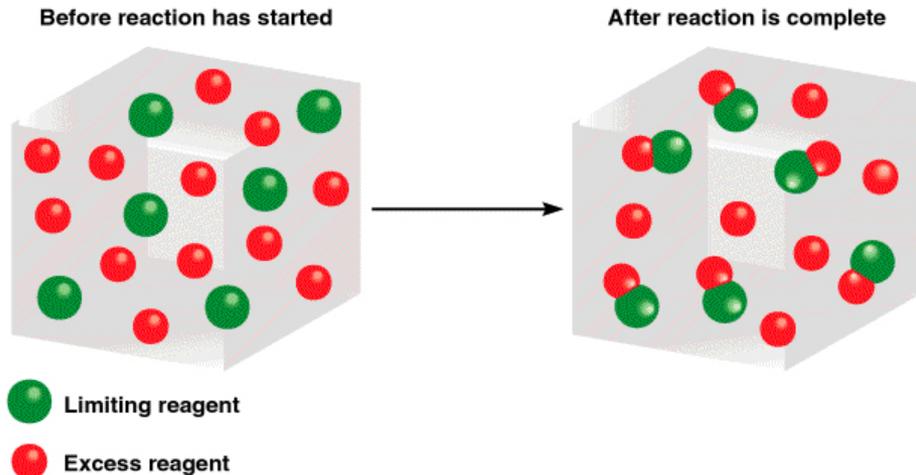
Ceci va produire 0.0480 mol de NO_2 .

Ceci a une masse de $(0.0480 \text{ mol}) \times [14.01 \text{ g/mol} + (2)(16.00 \text{ g/mol})] = 2.21 \text{ g}$

Les réactifs limitants et le rendement des réactions

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

Limiting Reagents



- le réactif épuisé le premier s'appelle le réactif limitant
- la quantité maximum de produit dépend de la quantité initiale du réactif limitant
- les autres réactifs sont appelés les réactifs en excès

Les réactifs limitants et le rendement des réactions

- ex.; Pour la réaction
$$\text{S(l)} + 3 \text{F}_2\text{(g)} \longrightarrow \text{SF}_6\text{(g)}$$
 - on a 4 moles de S et 9 moles de F_2
 - 4 moles de S vont réagir avec 12 moles de F_2
 - mais nous avons seulement 9 moles de F_2
 - le F_2 va s'épuiser avant que tout le S ne puisse réagir
 - le F_2 est le réactif limitant
 - N.B. on serait arrivé à la même conclusion en se disant que les 9 moles de F_2 réagiraient avec seulement 3 moles de S
 - 3 moles de SF_6 seront produites

- Quelle masse de POCl_3 produit-on lorsque 790.0 g de $\text{PCl}_3(\text{l})$, 345.0 g de $\text{Cl}_2(\text{g})$, et 265.0 g de $\text{P}_4\text{O}_{10}(\text{s})$ réagissent ensemble de la façon suivante?

