

## Stœchiométrie

## Formation de molécules

Arianna Marchioro

Références: Hill1, chap. 3

# Intéraction entre les atomes

---

Mis en présence les uns avec les autres, les atomes peuvent former un/une:

## **Molécule:**

- Groupe de deux atomes ou plus, unis selon un arrangement spatial déterminé par des forces appelées liaisons covalentes
- Entité électroniquement neutre

*Ex:  $H_2$ ,  $CO_2$*

## **Composé moléculaire:**

- Composé dont les plus petites entités caractéristiques sont les molécules

*Ex: l'eau ( $H_2O$ ), le sucre (saccharose), la rouille (oxyde de fer)...*

## **Composé ionique:**

- Lorsqu'un atome isolé ou un groupe d'atomes cède ou acquiert des électrons, il y a formation d'ions (cation ou anion).
- La formule d'un composé ionique a comme base une combinaison électriquement neutre de cations et d'anions qu'on appelle une *entité formulaire*

*Ex:  $NaCl$ , regroupement le plus simple d'anions et cations qui représente une unité électriquement neutre. On ne peut pas isoler une molécule de sel dans le solide ou en solution!*

# Interaction entre les atomes

---

- La façon dont ces interactions se passent et la distance d'équilibre entre les atomes dépend de leur structure atomique (= position dans le tableau périodique) qui va déterminer leur ***propension à donner/recevoir des électrons***
- Certaines molécules sont stables et sont trouvées dans la nature alors qu'on ne trouve pas les atomes isolés. Ex: H<sub>2</sub>O
- De plus certaines molécules réagissent avec d'autres pour donner encore d'autres composés...Comment comprendre tout cela?

# Définitions: la masse atomique

- Unité de masse atomique (u.m.a., ou Dalton Da): exactement le douzième de la masse d'un atome de l'isotope 12 du carbone

$$1 \text{ u.m.a.} = 1 \text{ Da} = \frac{1}{N_A} = \frac{1}{6,02 \cdot 10^{23}} \text{ g} = 1,66 \cdot 10^{-24} \text{ g}$$

- Masse atomique:** Masse de l'atome d'un élément, exprimée **relativement** à la masse d'un atome de  $^{12}\text{C}$

carbone
6
C
12,0107

→ Masse atomique de l'élément naturel = masse moyenne, exprimée en u.m.a, des isotopes de l'élément dans leur abondance naturelle.

# Définitions: la masse moléculaire

---

- **Masse moléculaire:** somme de la masse atomique de chaque élément  $E_i$  qui compose la molécule, multipliée par le nombre  $n_i$  d'atomes de cet élément présent dans la molécule

$$\text{Masse moléculaire} = \sum_i \text{masse atomique } (E_i) \times n_i$$

- **Formule chimique :** indication du nombre d'atomes  $n_i$  de chaque élément  $E_i$  qui compose une molécule.

Ex :  $\text{C}_6\text{H}_6$  (benzène),  $\text{C}_2\text{H}_6$  (éthane),  $\text{C}_6\text{H}_{12}$  (cyclohexane)

- **Masse d'une entité formulaire:** la somme des masses des ions présents dans une entité formulaire du composé Ex:  $\text{NaCl}$ ,  $\text{CaSO}_4$

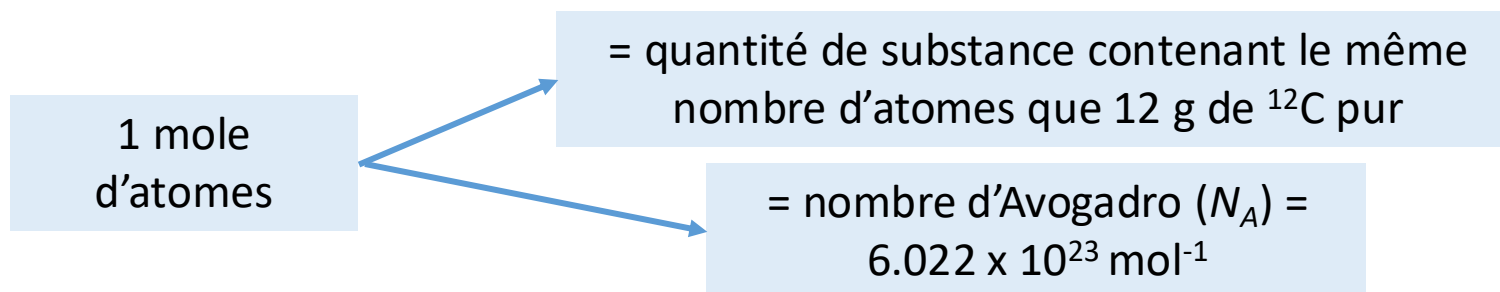
## Exemple:

Masse moléculaire de  $\text{CO}_2$ ?

Masse moléculaire du chlorure de sodium?

# Définitions: la mole

**Unité** qui permet de rapporter simplement les nombres gigantesques d'atomes et de molécules dans des échantillons visibles!



**Description  
microscopique**

**Nombre d'Avogadro**  $6.022 \times 10^{23}$   
atomes, ions, molécules...par mole

**Description  
macroscopique**

**Masse atomique  
Masse moléculaire**



**Masse molaire atomique  
Masse molaire**

## Exemples:

Une mole de carbone pèse 12,011 g et contient  $6.022 \times 10^{23}$  atomes de carbone.

Une mole de plomb pèse 207,2 g et contient  $6.022 \times 10^{23}$  atomes de plomb.

# La masse molaire

---

- La **masse molaire** ( $M$ ) de n'importe quelle substance est **numériquement égale** à la masse atomique, la masse moléculaire ou la masse d'une entité formulaire mais elle s'exprime en **grammes par moles!!!**

... Car par définition, la masse de 1 mole de  $^{12}\text{C}$  est exactement 12g, donc numériquement égale à sa masse atomique (12 u)

- On peut donc écrire:

$$M = \sum_i M_i(E_i) \times n_i$$

→ Somme de la masse molaire *atomique*  $M_i$  de chaque élément  $E_i$  qui compose la molécule, multipliée par le nombre  $n_i$  d'atomes de cet élément présent dans la molécule, exprimée en [g/mol]

## Exemples :

Masse molaire de l'éthane?

Masse molaire du chlorure de sodium?

# Volume molaire – loi des gaz parfaits

---

## Gaz parfait:

- Modèle thermodynamique décrivant le comportement de tous les gaz à basse pression
- Les interactions entre les molécules/atomes de gaz peuvent être négligées

**Loi des gaz parfaits**

$$pV = nRT$$

p : pression

V : volume occupé par le gaz

n : nombre de moles

T : température

**R : constante des gaz parfaits**

**Volume molaire** = Volume occupé par 1 mol du gaz à une température et à une pression données



# Volume molaire – loi des gaz parfaits

---

## Volume molaire:

- Volume occupé par 1 mol du gaz à une température et à une pression données
- Conditions de pression et température normales (**TPN**):

$$P = 1 \text{ atm} = 101,325 \text{ kPa}$$

$$T = 273,15 \text{ K (0}^{\circ} \text{ C)}$$

$$V_m = 22.4 \text{ L}$$

- Conditions de température ambiante et pression normales (**TAPN**):

$$P = 1 \text{ atm} = 101,325 \text{ kPa}$$

$$T = 298,15 \text{ K (25}^{\circ} \text{ C)}$$

$$V_m = 24.5 \text{ L}$$

Set de **conditions standard** pour réaliser des mesures expérimentales et pouvoir ensuite les comparer

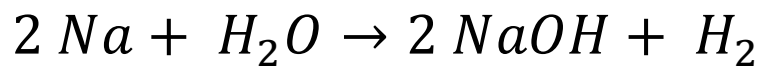
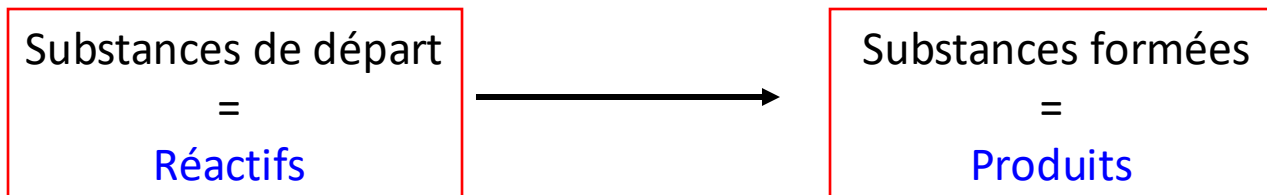
$$p = 1 \text{ atm} = 101,325 \text{ kPa}$$

Anciennement

$$p = 1 \text{ bar} = 100 \text{ kPa}$$

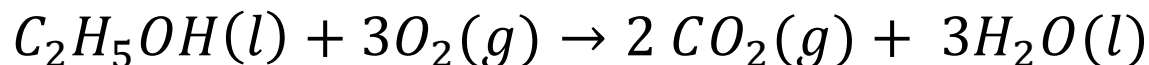
Définition IUPAC

# Equation chimique



↑  
— Coefficient stœchiométrique

- Formule des réactifs et des produits
- Nombre de molécules, atomes, ions impliqués
- Flèche vers la droite : la réaction inverse n'a pas lieu



- **Conservation du nombre de chacun des atomes:** Lorsqu'il y a le même nombre d'atomes de chaque élément des deux côtés de la flèche, la réaction est **équilibrée**
- **Conservation de la charge électrique totale**

Indications

supplémentaires:

(g) phase gazeuse

(l) phase liquide

(s) phase solide

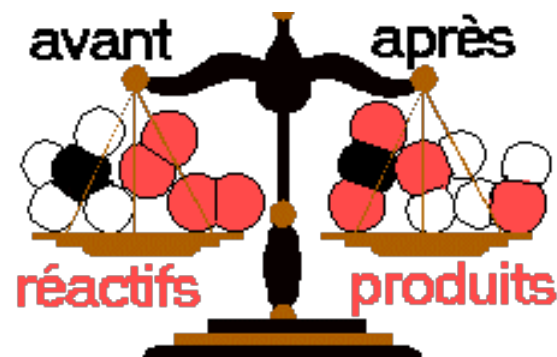
(aq) solution aqueuse

# Stœchiométrie

## Loi de conservation de masse (Lavoisier):

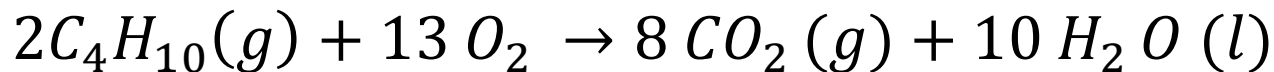
Au cours d'une réaction chimique, on peut considérer que la masse est conservée (sauf en cas de réaction nucléaire)

**Interprétation de Dalton:** au cours d'une réaction chimique, les atomes ne sont ni créés ni détruits, ils changent de partenaires!



Les coefficients stœchiométriques sont introduits pour **équilibrer** les réactions : même nombre d'atomes de chaque élément de part et d'autre de la flèche.

**Exemple** : combustion du butane ( $C_4H_{10}$ )



**En mole:**

**En masse:**

carbone  
6  
C  
12,0107

hydrogène  
1  
H  
1,00794

oxygène  
8  
O  
15,9994

# Classification des réactions

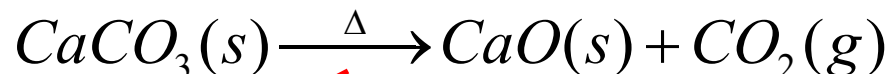
---

## Par type de réaction:

(1) **Equilibre** (cas général, défini par thermodynamique)



(2) **Réaction complète** (équilibre déplacé)



Chauffage

L'oxyde de calcium, «chaux vive», est un produit obtenu par calcination du calcaire à 825° C  
Industrie: aciérie, verrerie, cimenterie

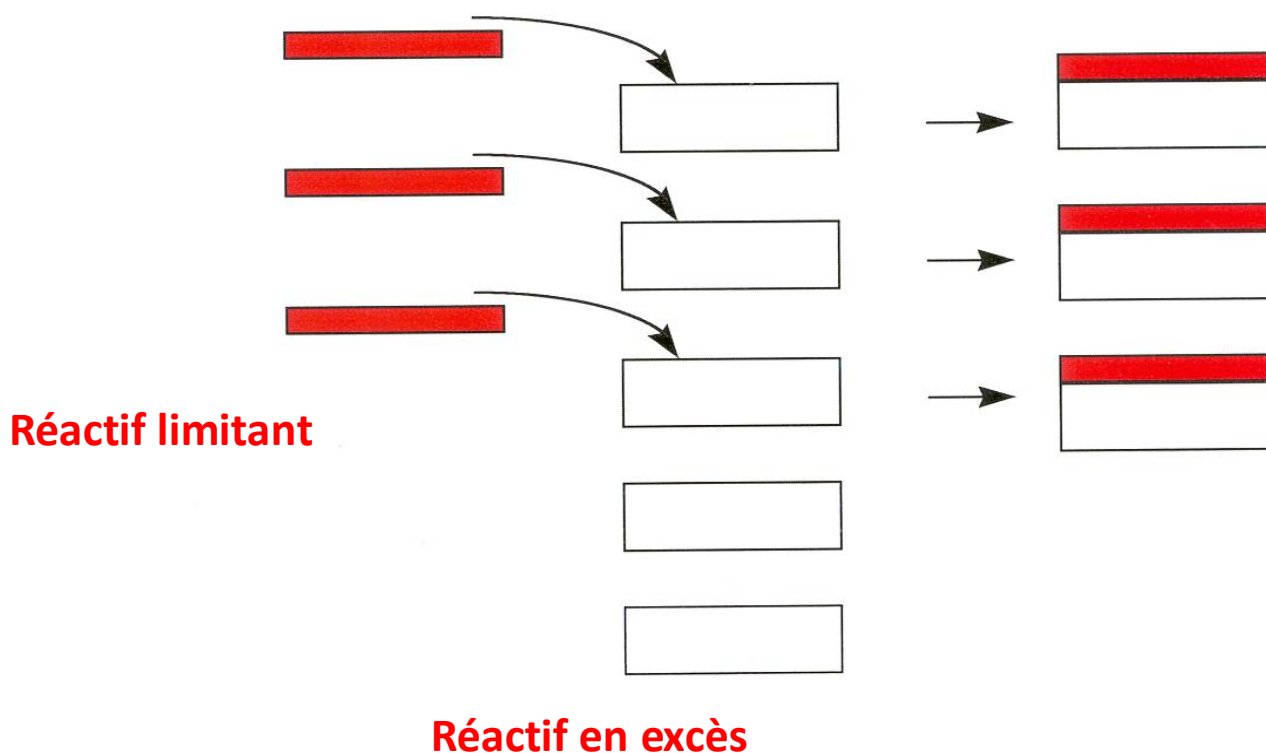
## Par transformation chimique:

- Transfert de protons → acide-base
- Transfert d'électrons → oxydation-réduction
- Fixation de ligands → complexation
- Substitution, dissociation, précipitation...

# Réactif limitant

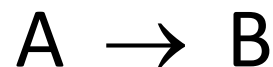
Le **réactif limitant** pour une réaction donnée est le réactif qui détermine la quantité maximum de produit qui peut être formée!

On est dans des conditions **non-stœchiométriques**: On a plus d'un certain type de réactif



# Rendement de formation d'un produit B

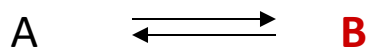
---



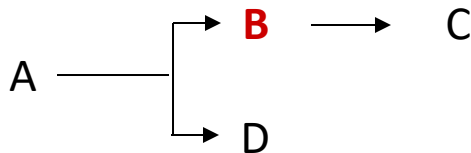
$$h_s (\%) = \frac{\text{masse de B pratique}}{\text{masse de B théorique}} \times 100 = \frac{\text{mole de B pratique}}{\text{mole de B théorique}} \times 100$$

$\eta < 100\%$  dans les cas:

i) Réactions incomplètes (réversibles)



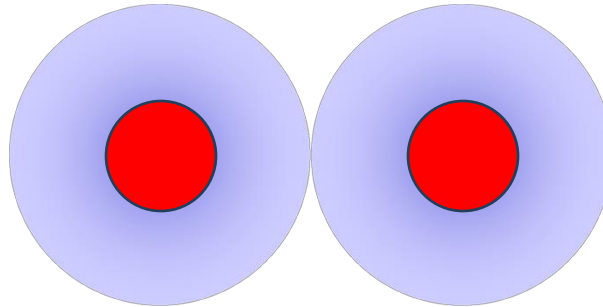
ii) formation des autres produits secondaires (C et D)



# Comment se forment les molécules?

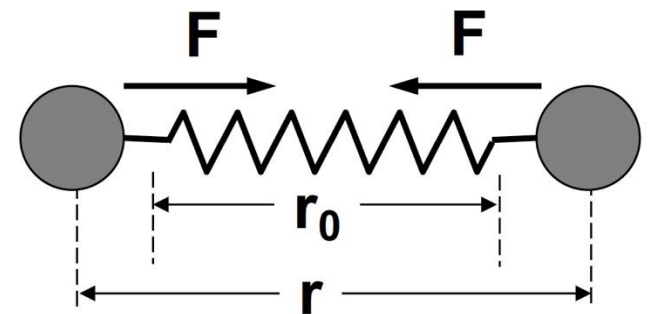
- Les atomes interagissent entre eux (en fonction de la température, de la pression) pour former, ou non, des interactions durables:

Attraction:  
noyaux /électrons

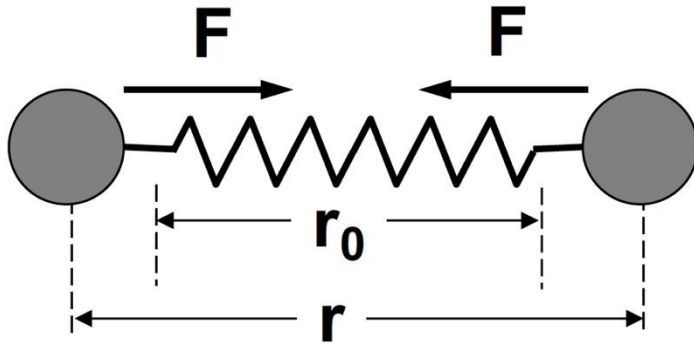


Répulsion:  
noyaux/noyaux  
électrons /électrons

- Un modèle simple d'interaction entre atomes consiste à prendre un potentiel d'interaction, comme pour un ressort



# Energie du système



**À noter** que par convention, on écrit:  
 $r$  la distance entre deux centres d'atomes  
 $r_0$  la distance d'équilibre

Ce n'est pas le rayon atomique  $r_a$  !

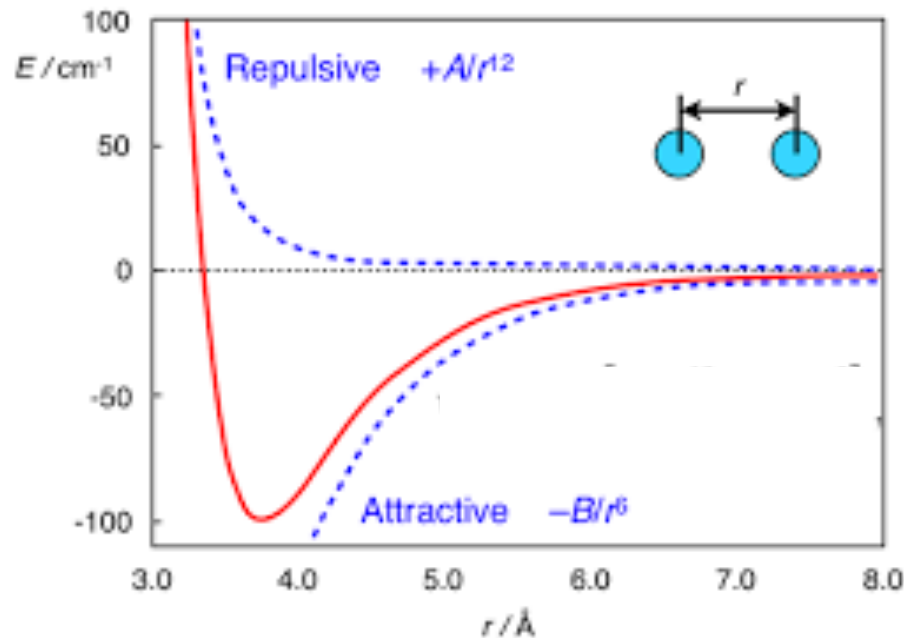
- Le modèle du ressort est un modèle très simple mais qui suffit à expliquer beaucoup de phénomènes!

*Ex: Absorption dans l'IR*

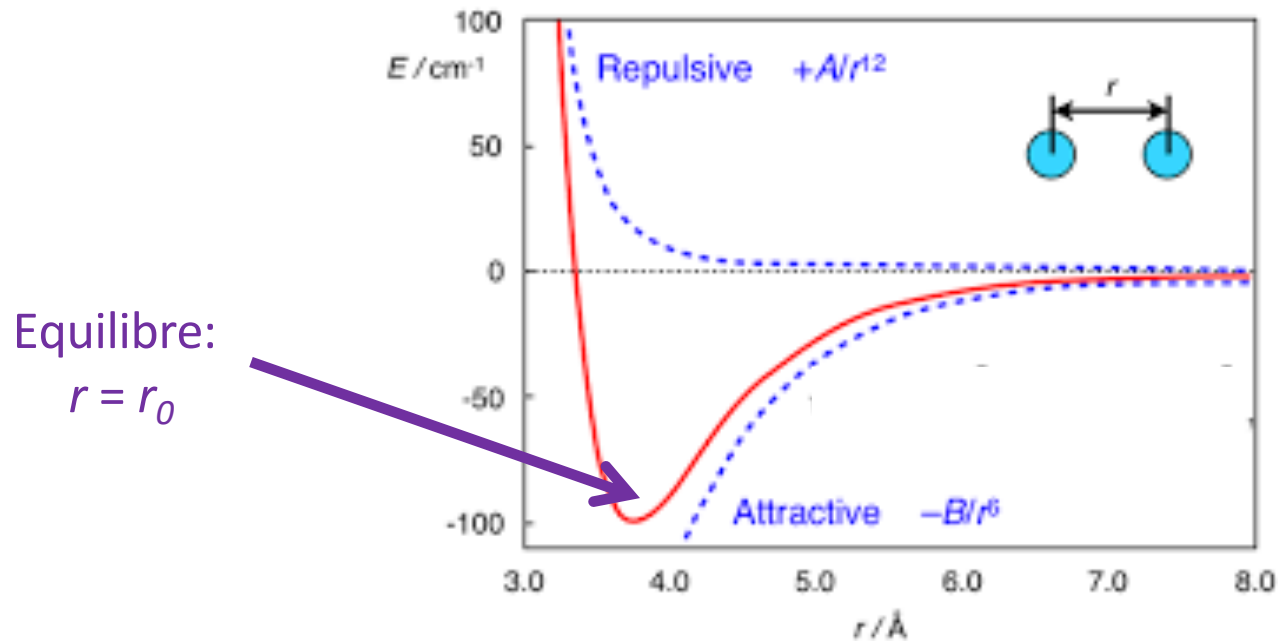


# Le potentiel de Lennard Jones

- En pratique, un modèle plus réaliste est donné par le potentiel de Lennard-Jones
- Deux atomes vont se repousser à une distance très proche, s'attirer à une distance modérée et vont cesser d'interagir à une distance infinie!
- Les forces d'attraction et de repulsion entre deux atomes se superposent: Au point où les deux forces se compensent, l'énergie potentielle a un minimum



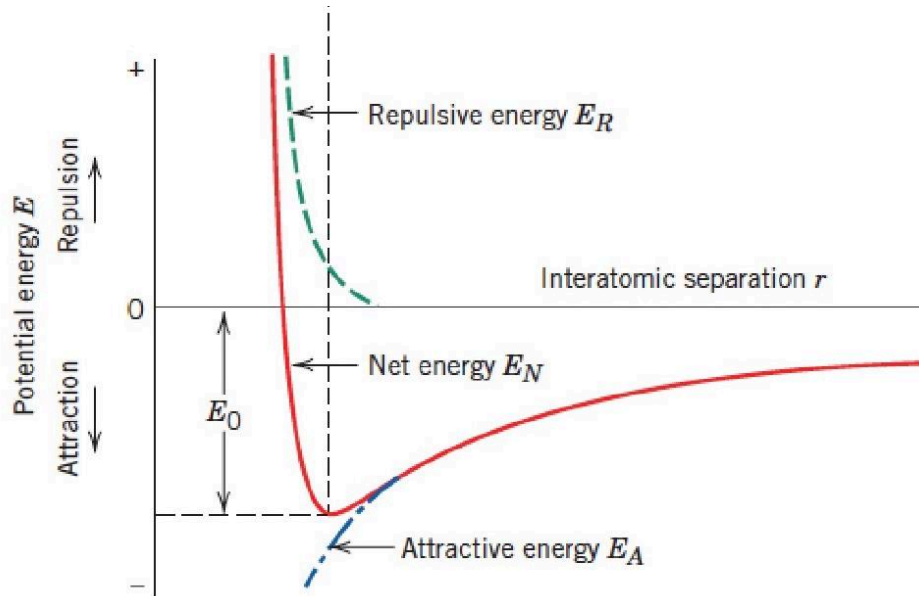
# Le potentiel de Lennard Jones



$$E_{LJ} \propto E_0 \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$

Cette expression du potentiel d'interaction va donner des indications sur la rigidité des matériaux!

# Relation entre force, travail et énergie

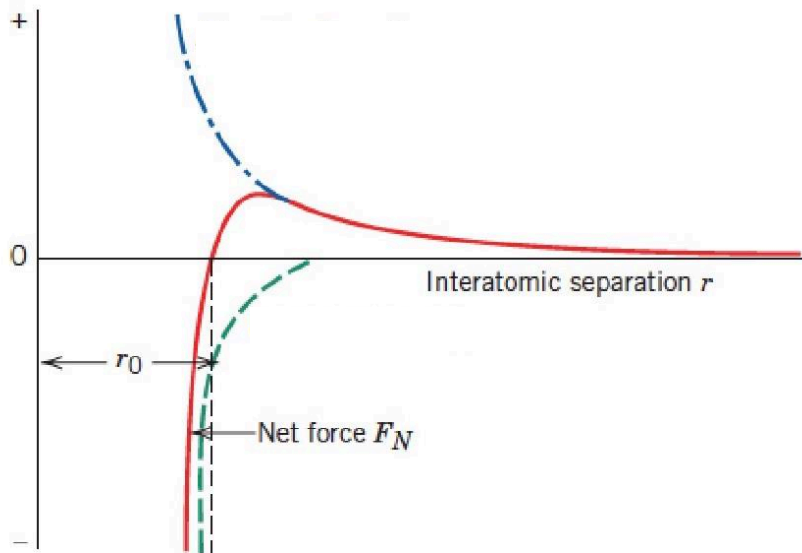


$$dW = -dE = Fdr$$

$$dE = -Fdr = F_{ext}dr$$

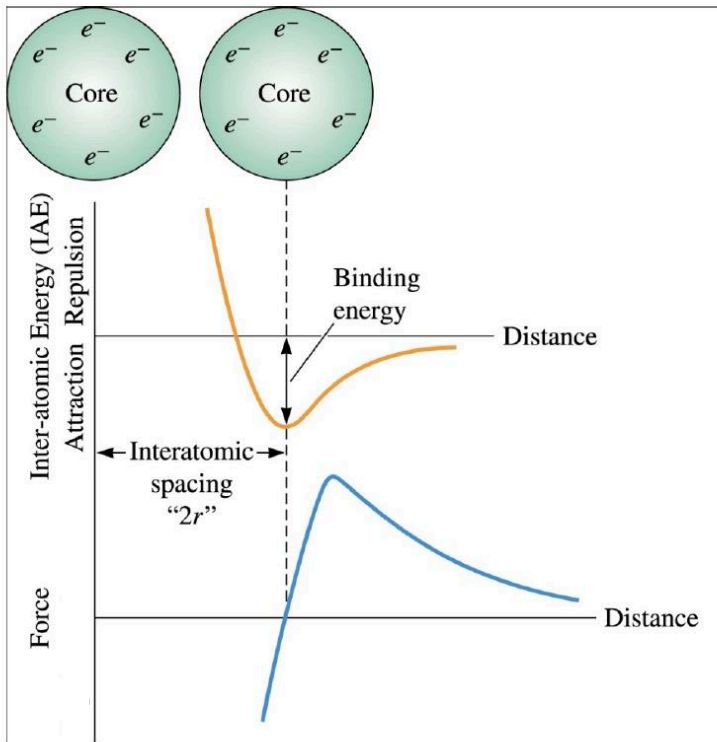
Pour déplacer un atome par rapport à un autre:

- Appliquer une force extérieure  $F_{ext}$  de même amplitude que la force exercée entre deux atomes
- Doit être de sens opposé, donc  $F_{ext} = -F$



# Energie de liaison

Energie interatomique minimale, correspond à une force nulle entre les atomes



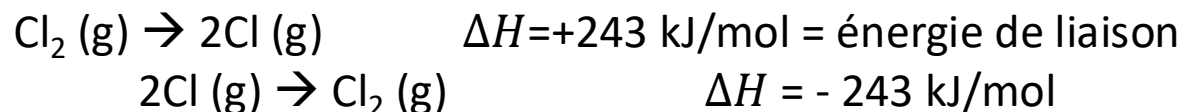
liaison	énergie de liaison (Kcal/mol)	kJ/mol
ionique	150 - 370	600-1600
covalente	25 - 300	100-1200
métallique	25 - 200	100-800
Van der Waals	< 10	< 40

# Energie de liaison

---

**= Quantité d'énergie nécessaire pour briser une liaison chimique!**

- Pour une molécule simple, comme Cl-Cl gazeux, il y a une relation directe entre l'enthalpie (la chaleur) de réaction pour former ou briser la molécule, et son énergie de liaison:



- Ce sont les mêmes! (On verra l'enthalpie dans le cours "Thermodynamique")
- On peut donc trouver, dans certains cas simples (gaz), l'énergie de liaison d'une molécule en mesurant la chaleur dégagée ou absorbée lors d'une réaction chimique (*calorimétrie*)

# Résumé

---

- Certaines propriétés atomiques reviennent périodiquement lorsqu'on examine les éléments par ordre croissant de numéro atomique
  - Rayon atomique
  - Rayon ionique
  - L'énergie d'ionisation
  - L'affinité électronique
  - L'électronégativité
- L'équation chimique d'une réaction s'écrit à partir des symboles des éléments ou des formules des composés qui participent à la réaction. La mole est la grandeur adaptée au travail en chimie → la constante d'Avogadro
- Les coefficients stœchiométriques sont introduits pour **équilibrer** les réactions : même nombre d'atomes de chaque élément de part et d'autre de la flèche
- La loi des gaz parfaits:  $pV = nRT$
- Les liaisons chimiques: Les forces d'attraction et de repulsion entre deux atomes se superposent: Au point où les deux forces se compensent, l'énergie potentielle a un minimum

# Constante de gaz parfait R

$$PV = nRT$$

$$1 \text{ atm} = 1.013 \text{ bar} = 1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$$

R	V	P	T	n
0.0821 L.atm.K <sup>-1</sup> .mol <sup>-1</sup>	L	atm	K	mol
0.0831 L.bar.K <sup>-1</sup> .mol <sup>-1</sup>	L	bar	K	mol
8.314 L.kPa.K <sup>-1</sup> .mol <sup>-1</sup>	L	kPa	K	mol
8.314 J.K <sup>-1</sup> .mol <sup>-1</sup>	m <sup>3</sup>	Pa	K	mol

Pour  $n = 1 \text{ mol}$ ,  $T = 273.15 \text{ K}$ ,  $P = 1 \text{ atm}$

On calcule  $V = nRT/P = (1 \text{ mol} * 0.0821 \text{ L atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1} * 273.15 \text{ K}) / 1 \text{ atm} = 22.4 \text{ L}$

ou  $V = nRT/P = (1 \text{ mol} * 8.314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} * 273.15 \text{ K}) / 1.013 \times 10^5 \text{ Pa} = 2.24 \times 10^{-2} \text{ m}^3$

$1 \text{ J} = 1 \text{ Nm}$  et  $1 \text{ Pa} = 1 \text{ N/m}^2$