

## Calcul des pourcentages massiques et recherche des formules brutes par ordinateur

par Jean-Louis Janier-Dubry  
(Laboratoire de chimie générale du 1er Cycle, Faculté des Sciences, La Bouloie, 25030 Besançon Cedex).



La synthèse au laboratoire, de composés nouveaux (composés organiques ou minéraux) conduit le plus souvent à l'analyse quantitative des éléments qui les composent.

Le calcul des pourcentages massiques théoriques de ces éléments est évidemment fonction du nombre de chacun de ces éléments qui composent le produit considéré.

L'addition d'un atome supplémentaire, d'un radical, modifie la fraction massique de tous les éléments mis en jeu.

Dans ces conditions, les exercices numériques sont particulièrement fastidieux surtout lorsque la composition du produit préparé est incertaine et nécessite recherche et tâtonnement.

Pour éviter cette perte de temps et pour effectuer ce travail à l'aide d'un document exactement adapté à notre problème, nous nous sommes tourné vers l'informatique.

### Calcul des pourcentages massiques

Nous avons élaboré plusieurs programmes de calcul suivant le type de problème posé :

#### A. Programme n° 1

Ce programme permet la détermination

- de la masse moléculaire théorique,
- du pourcentage massique théorique de tous les éléments qui constituent le composé considéré.

Pour chaque élément, le nombre d'atomes varie dans une fourchette que l'on peut définir à l'avance.

Toutes les possibilités de formules chimiques sont alors essayées. Pour toutes les compositions possibles, le pourcentage

massique de chaque élément est donné (les formules impossibles ne sont pas prises en considération dans un but évident de concision et d'économie).

Tous les éléments peuvent être envisagés. La précision est de quatre chiffres après la virgule (cf. exploitation des spectres de masse).

Les formules chimiques peuvent présenter jusqu'à neuf éléments.

Les formules envisagées sont écrites dans un ordre logique permettant une recherche facile de la composition intéressante.

**Exemple :** un chercheur travaille sur des composés renfermant les éléments suivants : hydrogène, carbone, oxygène, silicium.

Tableau 1

Éléments	Masse atomique	Nombre minimum d'atomes	Nombre maximum d'atomes	Pas d'incrémentations
H	1,0080	0	9	1
C	12,0111	1	3	1
O	15,9994	1	1	1
Si	28,0860	1	2	1

Le nombre minimum et maximum d'atomes pouvant rentrer dans la composition du produit attendu est indiqué dans le tableau 1.

Dans ces conditions, les résultats donnés par l'ordinateur seront les suivants (Tableau 2).

Les résultats théoriques ainsi présentés peuvent être directement comparés aux résultats expérimentaux de l'analyse quantitative (par exemple ceux de la microanalyse).

Le nombre maximum d'un élément n'est en fait limité que par le prix de revient de l'exécution du programme.

## B. Programme n° 2

Ce programme est comparable au précédent mais il permet en outre d'introduire des «groupements» en plus des éléments déjà envisagés (par exemple : phényle (C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>), méthyle (CH<sub>3</sub>), méthylène (-CH<sub>2</sub>-), ...).

L'ordinateur, dans ce cas encore, indique :

- la masse molaire théorique,
- le pourcentage massique théorique de tous les éléments mis en jeu pour former tous les composés possibles.

Les formules chimiquement impossibles ne sont pas prises en considération.

Le nombre d'éléments, comme le nombre de groupements, est limité à huit.

Tous les groupements (à condition qu'ils ne mettent pas en jeu plus de huit éléments) peuvent être considérés.

**Exemple :** les composés étudiés renferment les éléments, hydrogène, carbone, oxygène, chlore, étain et les groupements C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>- et -CH<sub>2</sub>-.

Les données sont indiquées dans le tableau 3.

Tableau 2 (extrait)

Composé	% H	% C	% O	% Si	Masse Mol.
H <sub>6</sub> C <sub>2</sub> O <sub>1</sub> Si <sub>2</sub>	5.9154	23.4955	15.6486	54.9404	102.2416
H <sub>0</sub> C <sub>3</sub> O <sub>1</sub> Si <sub>2</sub>		33.3010	14.7862	51.9127	108.2047
H <sub>2</sub> C <sub>3</sub> O <sub>1</sub> Si <sub>2</sub>	1.8291	32.6920	14.5158	50.9632	110.2207
H <sub>4</sub> C <sub>3</sub> O <sub>1</sub> Si <sub>2</sub>	3.5924	32.1047	14.2551	50.0478	112.2367

Tableau 3

Éléments ou groupements	Masse atomique ou symbole	Nombre minimum d'atomes	Nombre maximum d'atomes	Pas d'incrémentation
H	1,0079	0	4	1
C	12,0111	0	1	1
O	15,9994	1	4	1
Cl	35,4530	4	4	—
Sn	118,6900	1	1	1
C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> -	PH	1	4	1
-CH <sub>2</sub> -	ME	1	4	1

Les résultats sont indiqués dans le tableau 4.

Tableau 4 (extrait)

Composé	% H	% C	% O	% Cl	% Sn	Masse mol.
PH <sub>2</sub> ME <sub>1</sub> H <sub>4</sub> C <sub>0</sub> O <sub>3</sub> Cl <sub>4</sub> Sn <sub>1</sub>	5.7259	31.6809	9.7386	28.7729	24.0816	492.8657
PH <sub>2</sub> ME <sub>1</sub> H <sub>0</sub> C <sub>1</sub> O <sub>3</sub> Cl <sub>4</sub> Sn <sub>1</sub>	4.8298	33.5743	9.5834	28.3145	23.6979	500.8452
PH <sub>2</sub> ME <sub>1</sub> H <sub>2</sub> C <sub>1</sub> O <sub>3</sub> Cl <sub>4</sub> Sn <sub>1</sub>	5.2113	33.4397	9.5450	28.2010	23.6029	502.8611
PH <sub>2</sub> ME <sub>1</sub> H <sub>4</sub> C <sub>1</sub> O <sub>3</sub> Cl <sub>4</sub> Sn <sub>1</sub>	5.5897	33.3062	9.5069	28.0884	23.5087	504.8767

## Recherche des formules brutes

La recherche des formules brutes possibles, à partir des résultats de l'analyse quantitative, est souvent pénible lorsqu'elle nécessite un certain tâtonnement. Dans ces conditions, deux autres programmes de calcul sont mis au point.

### A. Programme n° 3

Ce programme s'applique lorsque la nature, le nombre maximum et minimum de chacun des éléments qui rentrent dans la composition du produit étudié sont connus.

Il permet, à partir de chaque dosage de donner le classement des formules brutes les plus proches des résultats expérimentaux.

La précision du dosage est indiquée.

Les formules brutes sont rangées par ordre d'erreur relative croissante.

La liste est limitée :

- soit par une précision limite que l'on fixe à l'avance,

- soit par un nombre fini maximum de formules (une dizaine par exemple).

Les formules brutes signalées pour plusieurs dosages sont repérées.

Le problème est repris x fois en supprimant les résultats de un, deux... dosages (pour le cas où les valeurs de l'un ou de plusieurs d'entre eux seraient erronées).

Dans ces conditions, le problème est cerné avec le maximum de rigueur. La recherche des composés possibles n'est plus laissée au hasard.

Cette étude permet, évidemment, de ne pas laisser échapper de formules possibles qui n'auraient pas été envisagées par tâtonnement.

### B. Programme n° 4

Lorsque tous les éléments qui entrent dans la composition du produit étudié

ne sont pas connus, le programme n° 4 permet d'approcher les proportions relatives possibles des éléments pour lesquels les dosages ont été effectués.

**Si vous êtes intéressés par ces possibilités** et par la possession de tels documents, adaptés à vos problèmes scientifiques, trois possibilités s'offrent alors à vous. Vous pouvez :

**1. Nous soumettre directement votre problème précis** par courrier et nous en effectuerons alors l'exécution.

Nous sommes obligés de vous facturer le prix de l'exécution sur ordinateur. (Joindre un bon).

Vous pouvez évaluer les frais en considérant qu'il y a 30 formules par page, environ, et que le prix de revient moyen d'une page varie entre 0,60 F et 1 F.

Il suffit de présenter le problème sous la forme des tableaux 1 ou 3.

**2. Nous demander de vous faire parvenir le «listing» du programme** pour le prix de son impression (prix de l'exécution : 10 F environ).

Il est rédigé en fortran IV.

Outre son utilisation en recherche analytique, il peut présenter un intérêt didactique certain (surtout depuis l'apparition de l'informatique dans les programmes du D.E.U.G.-S.S.M.).

**3. Nous soumettre, éventuellement, par téléphone, votre problème spécifique.** Cette solution peut s'avérer la meilleure en cas d'urgence. Les résultats peuvent, dans la plupart des cas, être envoyés le jour même, d'une façon certaine, le lendemain.

**Dans tous les cas,** vous pouvez pour toute question en relation avec ce sujet vous mettre en relation avec Janier-Dubry

Jean-Louis, Laboratoire de chimie générale, 1er Cycle, Faculté des Sciences, La Bouloie, 25030 Besançon Cedex. Tél. (81) 81.80.08, poste 234.

Il est facile de concevoir que cette proposition n'a aucun but lucratif et qu'elle n'est destinée qu'à aider les chercheurs qui (comme nous) ont des problèmes de chimie analytique à résoudre.