

UE1 - Chimie Générale : Formulaire

| Éléments | Formules |
|--|---|
| Masse atomique moyenne d'un élément : $\tau_1, \tau_2, \tau_3, \tau_4, \dots$ = abondance des # isotopes M_1, M_2, M_3 = leurs masses atomiques respectives | $M = \frac{\sum_i \tau_i * M_i}{\sum_i \tau_i}$ |
| Diagramme d'NRJ pour 1 atome : n = nombre quantique principal K = constante | $E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = -\frac{1}{n^2} * K = -\frac{1}{n^2} * 13,6 \text{ (eV)}$ |
| Diagramme d'NRJ pour hydrogène et hydrogénoïde | $E_{(eV)} = -13,6 * \frac{Z^2}{n^2}$ |
| Transition entre niveaux électronique : h = constante de Planck = $6,626 \times 10^{-34}$ J.s | $ \Delta E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$ |
| Echelle d'électronégativité de Mulliken : | $EN = \frac{(EI_I + AE)}{2}$ |
| Echelle de Pauling avec Δ = énergie de résonance en eV | <ul style="list-style-type: none"> ▪ E_d (liaison réelle covalente polaire A-B) – Moyenne des E_d A-A et B-B = Δ ▪ $EN_{(B)} - EN_{(A)} = \Delta^{1/2}$ ▪ $\Delta = \frac{E_d(\text{liaison réelle covalente polaire}) - E_d(\text{liaison covalente à 100\%})}{E_d(\text{liaison covalente à 100\%}) - \sqrt{E_{A-A} * E_{B-B}}}$ $ EN_{(B)} - EN_{(A)} = 0,102 \sqrt{E_{A-B} - \sqrt{E_{A-A} * E_{B-B}}}$ |
| Nombre total de doublets dans une molécule | Nombre total = $\frac{[\sum \text{nbre électrons de valence de tous les atomes}] - \text{valeur algébrique de la charge}}{2}$ |
| Moment dipolaire dans une liaison covalente | $\left\ \vec{\mu} \right\ = e * \delta * d$ |
| Pourcentage de caractère ionique d'1 liaison covalente A-B polaire | $(\%i) = 100\delta = \frac{\mu_{\text{réel}}}{\mu_i} * 100$ |
| Interaction de Keesom | $E_K = -K_K \left(\frac{\mu_A * \mu_B}{T * r^6} \right)$ |
| Interaction de Debye | $E_D = -K_D \left(\frac{\mu_A^2 * \alpha_B}{T * r^6} \right)$ |
| Interaction de London | $E_L = -K_L \left(\frac{\alpha_A * \alpha_B}{r^6} \right)$ |
| Indice de liaison | $NI = \frac{(\text{nb électrons O.M liantes} - \text{nb électrons O.M.anti-liantes})}{2}$ |
| Avancement d'une réaction | $d\xi = \frac{dn_i}{\nu_i}$ |
| Nombre de moles transformées ou formées lors de la réaction | $= \nu_k * \xi$ |
| Variation de l'avancement de réaction ξ en fonction du temps : | $\frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{\nu_i} \frac{dn_i}{dt}$ |
| Vitesse moyenne v_m entre 2 temps : | $v_m = \frac{\xi_2 - \xi_1}{t_2 - t_1}$ |
| Vitesse instantanée d'une réaction v_{inst} à un temps t : | $v_{inst} = \lim_{t_2 - t_1 \rightarrow 0} \left(\frac{\xi_2 - \xi_1}{t_2 - t_1} \right) = \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{\nu_i} \frac{dn_i}{dt}$ |

| | |
|--|---|
| Vitesse spécifique d'une réaction $v_{spé}$: | $v_{spé} = \frac{1}{V} \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{V} \frac{1}{\nu_i} \frac{dn_i}{dt}$ |
| Vitesse volumique v : | $v_t = \frac{1}{\nu_i} \frac{d(\frac{n_i}{V})}{dt} = \frac{1}{\nu_i} \frac{d[i]}{dt}$ |
| Vitesse d'évolution d'une espèce chimique i , ν_i | $\nu_i = \pm \frac{d[i]}{dt}$ |
| Vitesse de réaction v : | $v = \frac{1}{a} v_A = \frac{1}{b} v_B = \frac{1}{c} v_C = \frac{1}{d} v_D$ $v(t) = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = +\frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = +\frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt}$ |
| Influence de la concentration sur la vitesse d'une réaction : α : ordre partiel par rapport à A β : ordre partiel par rapport à B $\alpha+\beta$: ordre total k : constante de vitesse, dépend de la température | $v = k[A]^\alpha [B]^\beta$ |
| Equation cinétique d'ordre nul | $v = k$ $[A]_t = [A]_0 - akt$ |
| Equation cinétique d'ordre 1 | $v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = k[A]$ $\ln[A]_t = \ln[A]_0 - akt$ |
| Temps de réaction à un temps x | $t_{1/4} = \frac{1}{k} \ln \frac{4}{3}$ |
| Réaction d'ordre 2 | $[A]_t = \frac{[A]_0}{1 + akt[A]_0}$ $t_{1/2} = \frac{1}{ak[A]_0}$ |
| Système à 2 réactifs | $v = k[A]^2$ $\frac{1}{[A]_t} = \frac{1}{[A]_0} + kt$ |
| Loi cinétique en fonction de l'avancement | $[A]_t = [A]_0 - \xi$ $v = k([A]_0 - \xi)^\alpha$ |
| Dégénérescence de l'ordre d'une réaction | $v = k'[A]_t^\alpha$ avec k' = constante de vitesse apparente = $k[B]_0^\beta$ |
| Loi d'Arrhénius | $k = A_0 * \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$ $\ln k = \ln A_0 - \frac{E_a}{RT}$ |
| Influence de la température | $\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$ |
| Cinétique des réactions complexes | $v = v_1 - v_{-1} = k_1[A]^\alpha [B]^\beta - k_{-1}[C]^{\alpha'} [B]^{\beta'}$ $K = \frac{k_1}{k_{-1}} = \frac{[C]_{\text{éq}}^c [D]_{\text{éq}}^d}{[A]_{\text{éq}}^a [B]_{\text{éq}}^b}$ |
| Mécanisme SN2 | $v = k[Y]^{-1} [R-X]^1$ |
| Mécanisme SN1 | $v = k[R-X]^1$ |
| Mécanisme supplémentaire | $\frac{d[X]}{dt} = k_1[A] - k_{-1}[X][B] - k_2[X][C]$ |
| Cinétique enzymatique | $v = \left(\frac{d[ES]}{dt}\right) = k_1[E][S] - k_{-1}[ES] - k_2[ES]$ $\frac{d[ES]}{dt} = 0 \Rightarrow [ES] = \frac{k_1[E]_0[S]}{k_{-1} + k_2 + k_1[S]}$ |
| Vitesse de cinétique enzymatique | $v = \frac{k_2[E]_0}{1 + \frac{k_{-1} + k_2}{k_1[S]}} = \frac{k_2[E]_0}{1 + \frac{K_M}{[S]}} = \frac{V_{max}}{1 + \frac{K_M}{[S]}}$ |

| | |
|--|---|
| Constante de Michaelis | $K_M(\text{constante de Michaelis}) = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1}$ |
| Équation à partir du diagramme de Liineweaver et Burk | $\frac{1}{v} = \frac{1}{v_{\max}} + \frac{K_M}{v_{\max}} \frac{1}{[S]}$ |
| Rapport stœchiométrique | $R = \frac{\text{nombre de moles du réactif 1}}{\text{nombre de moles du réactif 2}} = \frac{\alpha}{\beta} = \frac{n_1}{n_2}$ |
| Avancement de la réaction ξ | $\xi = \frac{\text{nombre de moles transformées ou formées}}{\text{nombre stoechiométrique } \nu_k}$ |
| Constante des gaz parfaits | $\frac{PV}{nT} = \text{constante} = R$ |
| Pression partielle | $P_i = \frac{n_i}{\sum_i n_i} * P_{\text{tot}} = \chi_i * P_{\text{tot}}$ |
| Travail | $ \delta W = F * dl = P_{\text{ext}} * S * dl = P_{\text{ext}} * dV $ Travail = force x distance (force = pression x surface) |
| | $\int_a^b PdV = \text{travail}$ |
| | |
| Travail lors transformation irréversible | $W_{\text{irrév.1} \rightarrow 2} = -P_2[V_2 - V_1]$ |
| Travail lors transformation réversible | $W_{\text{rév.1} \rightarrow 2} = -nRT \ln \frac{V_2}{V_1}$ |
| Calcul de W avec une phase condensée | $W = -PnM \left(\frac{1}{\rho_{\text{liq.273K}}} - \frac{1}{\rho_{\text{sol.273K}}} \right)$ |
| Energie calorifique | $Q=C.\Delta T$ $\delta Q = n C dt$ $C = \frac{\partial Q}{\partial T}$ |
| | $dU = \delta Q + \delta W$ |
| | $QV = \Delta U$ $\Delta U = Q + W$ $QP = \Delta H$ |
| Thermodynamique | $\Delta(PV) = P_2V_2 - P_1V_1 \sim 0$ $\Delta H = \Delta U$ $Q_p = Q_v$ |
| | |
| | |
| Réaction en phase aqueuse | $\Delta H = \Delta U + RT\Delta(n_{\text{gaz}})$ |
| Enthalpie standard de réaction | $\Delta_r H^\circ = \left(\frac{\partial H^\circ}{\partial \xi} \right)_{T,P}$ |
| | $Q_p = \Delta H_{1 \rightarrow 2} = H_2^\circ - H_1^\circ = \Delta_r H^\circ * \xi$ $\Delta_r H^\circ = \Delta_r U^\circ + RT * [(c + d) - (a + b)]$ |
| Application de la loi de Hess | $\Delta_r H_{(T)}^\circ = \sum_i c_i \Delta_f H_{i(T)}^\circ - \sum_i a_i \Delta_f H_{i(T)}^\circ - \sum_k \nu_k \Delta_f H_{k(T)}^\circ$ |
| Loi de Kirchoff | $\Delta_r H_{T_2}^\circ = \Delta_r H_{T_1}^\circ + \int_{T_1}^{T_2} \sum_k \nu_k C_{p,k}^\circ dT$ |
| Energie de liaison covalente | $E_{A-B} \text{ ou } \Delta_l H_{(A-B)}^\circ = -\Delta_{\text{diss}} H_{(A-B)}^\circ$ |
| Energie de résonance | Energie de résonance = $\Delta_f H_{\text{réelle}}^\circ - \Delta_f H_{\text{calculée}}^\circ$ |
| Transformation réversible : | $dS = \frac{\delta Q}{T}$ $\Delta S = \int_i^f dS$ |
| | |
| Transformation irréversible | $dS > \frac{\delta Q}{T}$ |
| Variation d'entropie standard d'une réaction se produisant à T | $\Delta_r S_{(T)}^\circ = \sum_k \nu_k S_k^\circ(T)$ |

| | |
|--|--|
| constante | $\Delta_r S_{(T)}^\circ = \sum_k v_k \Delta_f S_k^\circ(T)$ $\Delta_r S = \Delta_{c.e.} S = \frac{\Delta_{c.e.} H}{T_{c.e.}}$ |
| Quotient de réaction | $\phi = \frac{(a_C)^c (a_D)^d}{(a_A)^a (a_B)^b}$ |
| Fonction enthalpie libre G | $\Delta G = \Delta H - T \Delta S$ $\Delta_r G_{(T)} = RT \ln \frac{\phi}{K}$ |
| Enthalpie libre standard de réaction | $\Delta_r G_{(T)}^\circ = \Delta_r H_{(T)}^\circ - T \Delta_r S_{(T)}^\circ$ $\Delta_r G_{(T)}^\circ = \sum_k v_k \Delta_f G_k^\circ(T)$ |
| Variation de l'enthalpie libre en milieu biologique | $\Delta_r G_{(T) \text{ pH}=x} = \Delta_r G_{(T) \text{ pH}=x}^\circ + RT \ln \Phi_{\text{pH}=x}$ |
| Taux de dissociation à l'équilibre | $\alpha = \frac{\xi_{\text{éq}}}{\xi_{\text{max}}} = \frac{\xi_{\text{éq}}}{n_{i,0}} = \frac{\text{nombre de moles dissociées de } PCl_5}{\text{nombre de moles de } PCl_5 \text{ à l'état initial}}$ |
| | $K = \frac{\alpha^2}{(1 - \alpha^2)} * P_{\text{tot}}$ |
| Constante d'équilibre | $K_{(T_2)} = K_{(T_1)} * \exp\left(-\frac{\Delta_r H^\circ}{R}\right) \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)$ |
| Equilibre de dissociation de l'eau | $K_e = [H_3O^+][OH^-]$ |
| Constante d'équilibre d'une réaction de 2 couples acido-basiques | $K = 10^{pK_{a2} - pK_{a1}}$ |
| Potentiel hydrogène | $pH = -\log [H_3O^+]$ |
| Relation d'Henderson-Hasselbach | $pH = pK_a + \log \frac{[Base]}{[Acide]}$ |
| Monoacide fort | $pH = -\log [H_3O^+] = -\log [acide]$ |
| Monobase forte | $pH = pK_e + \log C_o = 14 + \log [base]$ |
| Acide faible | $pH = 1/2(pK_a - \log [acide])$ |
| Base faible | $pH = 1/2(14 + pK_a + \log [base])$ |
| Ampholyte | $pH = 1/2(pK_{a1} + pK_{a2})$ |
| Tampon | $pH = pK_a + \log \frac{[base]}{[acide]}$ |
| Loi de Nernst | $\Delta_r G = \frac{\partial G}{\partial \xi} = -nFE$ $\Delta_r G = \Delta_r G^\circ + RT \ln \frac{a_{red1}^c a_{ox2}^d}{a_{red2}^b a_{ox1}^a}$ $E = E^\circ + \frac{0.06}{n} * \log \frac{a_{red1}^c a_{ox2}^d}{a_{red2}^b a_{ox1}^a}$ |
| Formule de Nernst | $E = E^\circ + \frac{0.06}{n} * \log \frac{[Ox]^a}{[Red]^c}$ |
| Electrode type métal | $E = E^\circ_{Ag^+/Ag} + 0.06 \log [Ag^+]$ |
| Sens des réactions | $\Delta_r G^\circ = -nF(E_1^\circ - E_2^\circ) = -RT \ln K$ $(E_1^\circ - E_2^\circ) \approx \frac{0.06}{n} \log K$ |
| Influence du pH sur le potentiel d'électrode | $E = E^\circ - 0.06 * \frac{p}{n} * pH + \frac{0.06}{n} \log \frac{[Ox]^a}{[Red]^c}$ |