

UE1 - Chimie Générale : Formulaire

Eléments	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	$M = \sum_i \frac{\tau_i * M_i}{\sum_i \tau_i}$
Diagramme d'NRJ pour 1 atome : n = nombre quantique principal K = constante	$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} = -\frac{1}{n^2} * K = -\frac{1}{n^2} * 13,6 \text{ (eV)}$
Diagramme d'NRJ pour hydrogène et hydrogénoïde	$E_{(eV)} = -13,6 * \frac{Z^2}{n^2}$
Transition entre niveaux électronique : h = constante de Planck = $6,626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$	$ \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 résonnance en eV	E_d (liaison réelle covalente polaire A-B) – Moyenne des E_d A-A et B-B = Δ $EN_{(B)} - EN_{(A)} = \Delta^{1/2}$ $\Delta =$ $E_d(\text{liaison réelle covalente polaire}) - E_d(\text{liaison covalente à 100\%})$ $E_d(\text{liaison covalente à 100\%}) = \sqrt{E_{A-A} * E_{B-B}}$ $ EN_{(B)} - EN_{(A)} = 0,102 \sqrt{E_{A-B} - \sqrt{E_{A-A} * E_{B-B}}}$
Nombre total de doublets dans une molécule	$\text{Nombre total} = \frac{[\sum \text{nbre électrons de valence de tous les atomes}] - \text{valeur algébrique de la charge}}{2}$
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	$NI = \frac{(\text{nb électrons O.M liantes} - \text{nb électrons O.M. antiliantes})}{2}$
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 :	$v_{\text{inst}} = \lim_{t_2 - t_1 \rightarrow 0} \left(\frac{\xi_2 - \xi_1}{t_2 - t_1} \right) = \frac{d\xi}{dt} = \frac{1}{\nu_i} \frac{dn_i}{dt}$

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 , v_i	$v_i = \pm \frac{d[i]}{dt}$
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	$v = k'[A]_t^\alpha \quad \text{avec } k' = \text{constante de vitesse apparente} = k[B]_0^\beta$
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	$\xi = \frac{\text{nombre de moles transformées ou formées}}{\text{nombre stoechiométrique } v_k}$
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)
	$\int_a^b P dV = \text{travail}$
Travail lors transformation irréversible	$W_{\text{irr} \rightarrow 2} = -P_2[V_2 - V_1]$
Travail lors transformation réversible	$W_{\text{rév} \rightarrow 2} = -nRT \ln \frac{V_2}{V_1}$
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	$Q = C \cdot \Delta T$ $\delta Q = n C dt$ $C = \frac{\partial Q}{\partial T}$
Thermodynamique	$dU = \delta Q + \delta W$
	$QV = \Delta U$ $\Delta U = Q + W$ $QP = \Delta H$
	$\Delta(PV) = P_2V_2 - P_1V_1 \sim 0$ $\Delta H = \Delta U$ $Q_p = Q_v$
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	$\Delta_r H_{(T)}^\circ = \sum_i c_i \Delta_f H_{i(T)}^\circ - \sum_i a_i \Delta_f H_{i(T)}^\circ - \sum_k v_k \Delta_f H_{k(T)}^\circ$
Loi de Kirchoff	$\Delta_r H_{T_2}^\circ = \Delta_r H_{T_1}^\circ + \int_{T_1}^{T_2} \sum_k v_k C_{p,k}^\circ dT$
Energie de liaison covalente	$E_{A-B} \text{ ou } \Delta_l H_{(A-B)}^\circ = -\Delta_{\text{diss}} H_{(A-B)}^\circ$
Energie de résonnance	Energie de résonnance = $\Delta_f H_{\text{réelle}}^\circ - \Delta_f H_{\text{calculée}}^\circ$
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	$\Delta_r S_{(T)}^\circ = \sum_k v_k S_k^\circ(T)$

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	$\Delta_r G_{(T)} \text{ pH}=\text{x} = \Delta_r G_{(T)}^\circ \text{ pH}=\text{x} + RT \ln \Phi_{\text{pH}=\text{x}}$
Taux de dissociation à l'équilibre	$\alpha = \frac{\xi_{\text{eq}}}{\xi_{\text{max}}} = \frac{\xi_{\text{eq}}}{n_{i,0}} = \frac{\text{nombre de moles dissociées de } PCl_5}{\text{nombre de moles de } PCl_5 \text{ à l'état initial}}$
	$K = \frac{\alpha^2}{(1 - \alpha^2)} * P_{\text{tot}}$
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	$\text{pH} = -\log [H_3O^+]$
Relation d'Henderson-Hasselbach	$\text{pH} = pK_a + \log \frac{[Base]}{[Acide]}$
Monoacide fort	$\text{pH} = -\log [H_3O^+] = -\log [acide]$
Monobase forte	$\text{pH} = pK_e + \log C_o = 14 + \log [base]$
Acide faible	$\text{pH} = 1/2(pK_a - \log [acide])$
Base faible	$\text{pH} = 1/2(14 + pK_a + \log [base])$
Ampholyte	$\text{pH} = 1/2(pK_{a1} + pK_{a2})$
Tampon	$\text{pH} = pK_a + \log \frac{[base]}{[acide]}$
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	$E = E^\circ - 0.06 * \frac{p}{n} * \text{pH} + \frac{0.06}{n} \log \frac{[Ox]^a}{[Red]^c}$