

Matériaux : de la chimie aux propriétés – Constantes et Équations

Constantes et Valeurs

| | | |
|------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Vitesse de la lumière | c | 3×10^8 m/s |
| Accélération gravitationnelle | g | 9.8 m/s ² |
| Constante de Planck | h | $6,626 \times 10^{-34}$ J.s (et $\hbar = \frac{h}{2\pi}$) |
| Constante de Boltzmann | k ou k _B | $1,38 \times 10^{-23}$ J/K |
| Nombre d'Avogadro | N _a | 6.022×10^{23} particules mol ⁻¹ |
| Charge élémentaire | e | $1,6 \times 10^{-19}$ C (et 1eV vaut cela en J) |
| Constante des gaz parfaits | R = N _a k = | $8,314$ J K ⁻¹ mol ⁻¹ $0,08205$ L atm mol ⁻¹ K ⁻¹ $8,3145$ kPa L mol ⁻¹ K ⁻¹ 8.314×10^{-2} L bar K ⁻¹ mol ⁻¹ |
| Volume molaire d'un gaz parfait, p ₀ = 1 atm, T = 0°C | V _{mol} = R × 273,15/P ₀ = | $22,4$ L mol ⁻¹ |
| Unité de masse atomique | u = 10 ⁻³ /N _a = | $1,66 \times 10^{-27}$ kg |
| Constante de Faraday | F = N _a · e = | $96\ 485$ C mol ⁻¹ |
| Constante de Rydberg | R _∞ = m _e μ ₀ ² e ⁴ c ³ /(8h ³) = | $1,097 \times 10^7$ m ⁻¹ |
| Constant énergétique de Rydberg | R _H = h c R _∞ | $13,6$ eV |
| Masse du proton | m _p = | $1,672 \times 10^{-27}$ kg = 1 u |
| Masse du neutron | m _n = | $1,674 \times 10^{-27}$ kg = 1 u |
| Masse de l'électron | m _e = | $9,1 \times 10^{-31}$ kg = $5,485 \times 10^{-4}$ u |

Unités: Joule: 1 J= 1 kg·m²·s⁻² ; Watt: 1W= 1 J. s⁻¹ ; Coulomb: 1C= 1A.s ; Volt: 1V= 1 J C⁻¹ ; Pascal: 1 Pa= 1 Nm⁻²;

Structure atomique (constantes données ci-dessus)

Energie d'un photon de longueur d'onde λ : $E = h \frac{c}{\lambda} = hv$ [J]

Energie des niveaux n de l'atome d'hydrogène: $E_n = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2}$ (n = 1, 2, 3, ...)

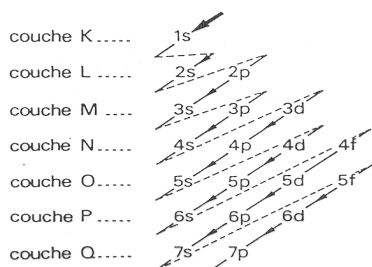
Rydberg pour l'Hydrogène $\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$ λ: longueur d'onde [m]

Equation de Broglie, corps de masse m, vitesse v: $\lambda = \frac{h}{mv}$

Incertitude de Heisenberg $\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2} \hbar = h/4\pi$ incertitude sur le mvt Δp = mΔv et sur la position Δx

Loi de gaz parfait : pV = nRT

Potentiel de Lennard Jones, Energie potentielle : $E = \varepsilon_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$ avec ε₀ : énergie de liaison[eV] et r₀ : distance à l'équilibre [m]



cristallographie

masse volumique : $\rho = \frac{N_{\text{atomes par mailles}} m_{\text{atome}}}{V_{\text{maille}}}$

compacité : $c = \frac{N_{\text{atomes par mailles}} V_{\text{atome}}}{V_{\text{maille}}}$

angle entre 2 droites:

$$\cos\theta = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\sqrt{h_1^2 + k_1^2 + l_1^2} \sqrt{h_2^2 + k_2^2 + l_2^2}}$$

Thermodynamique

$\Delta U = W + Q$ Enthalpie $H = U + pV$ [$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$] (U : énergie interne, p : pression en Pa, V : volume en m^3/mol)

Entropie : classique : $\Delta S = \frac{Q_{rev}}{T}$ [$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$]

Variation de l'entropie de l'Univers : $\Delta S_{univers} = \Delta S_{sys} + \Delta S_{env} = \Delta S_r^0 + \frac{-\Delta H_r^0}{T}$

La capacité calorifique spécifique, à $p = \text{const.}$: $c_p = \frac{1}{m} \frac{dH}{dT}$ [$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$]

Variation de l'enthalpie libre (énergie de Gibbs) : $\Delta G = \Delta H - T\Delta S = -T\Delta S_{univers}$

Variation standard de

- l'entropie de réaction $\Delta_r S^0 = \sum_{i=1}^p \nu_i S_i^0(\text{produits}) - \sum_{j=1}^r \nu_j S_j^0(\text{réactifs})$

- l'enthalpie de réaction $\Delta_r H^0 = \sum_{i=1}^p \nu_i \Delta_f H_i^0(\text{produits}) - \sum_{j=1}^r \nu_j \Delta_f H_j^0(\text{réactifs})$

- l'enthalpie libre de réaction $\Delta_r G^0 = \sum_{i=1}^p \nu_i \Delta_f G_i^0(\text{produits}) - \sum_{j=1}^r \nu_j \Delta_f G_j^0(\text{réactifs})$

ΔG_r^0 , ΔH_r^0 et S^0 mesurées dans des conditions standards et tabulées

avec ν_i , ν_j les coefficients stœchiométriques pour les produits et réactifs respectivement

Variation d'enthalpie libre dans une réaction chimique : $\Delta G_r^0 = \Delta H_r^0 - T\Delta S_r^0$

Relation entre ΔG_r^0 et ΔG_r : $\Delta G_r = \Delta G_r^0 + RT \ln Q$ avec Q quotient réactionnel

Relation entre ΔG_r^0 et K (constante d'équilibre) : $\Delta G_r^0 = -RT \ln K$

Equilibre chimique

$aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$, la constante d'équilibre: concentrations à l'équilibre $K = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$

Quotient réactionnel $Q = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$ (concentrations en fonction du temps)

Les acides et bases

$HA + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + A^-$ $B + H_2O \rightleftharpoons BH^+ + OH^-$

Constante de dissociation de l'eau : $K_e = [H_3O^+][OH^-] \text{ M}^2 = 1,0 \times 10^{-14}$ (à 25°C)

Expression de l'échelle de pH et pOH : $\text{pH} = -\log[H_3O^+]$ $\text{pOH} = -\log[OH^-]$

Relation entre pH et pOH : $\text{pH} + \text{pOH} = 14,00$ (à 25°C)

Constante d'acidité $K_a = \frac{[H_3O^+][A^-]}{[HA]}$ Constante de basicité $K_b = \frac{[BH^+][OH^-]}{[B]}$

Relation : $K_a K_b = K_e$

pH d'une solution d'acide fort ($K_a \gg 1$) : $\text{pH} = -\log([H^+]/1M) = -\log(c_a/1M)$

$c_a = [HA]^0 = [H^+]$

pH d'une solution aqueuse diluée d'un acide fort : $[H^+] = \frac{c_a + \sqrt{c_a^2 + 4K_e}}{2}$ quand $c_a < 10^{-6}$

pH d'une solution d'un acide faible ($K_a \ll 1$) : général : $[H^+] = x = \frac{-K_a + \sqrt{K_a^2 + 4K_a c_a}}{2}$

Si $[HA]_0 > 100 K_a$: $x = [H^+] = \sqrt{K_a c_a}$ $\text{pH} = \frac{1}{2} (\text{p}K_a - \log[HA]_0)$

pOH d'une solution d'une base forte ($K_b \gg 1$) : $\text{pOH} = -\log(c_b)$ $c_b = [B]_0$

pOH d'une solution aqueuse diluée d'une base forte : $[OH]^- = \frac{c_b + \sqrt{c_b^2 + 4K_e}}{2}$ quand $c_b < 10^{-6}$

pH d'une solution d'une base faible ($K_b \ll 1$): $x = [\text{OH}^-]$: général: $x = \frac{-K_b + \sqrt{K_b^2 + 4K_b c_b}}{2}$

Si $[B]_0 > 100 K_b$: $x = [\text{OH}^-] = \sqrt{K_b c_b}$ $pH = 1/2 (14 + pK_a + \log[B]_0)$

Equation de Henderson-Hasselbach $pH \approx pK_a - \log(c_a/c_b)$ ou C_a est la concentration en HA et C_b celle en NaA

| Acide | Base conjuguée |
|-----------------------------------------------|----------------------------------------------|
| HI (acide iodhydrique) | I^- (ion iodure) |
| HBr (acide bromhydrique) | Br^- (ion bromure) |
| HCl (acide chlorhydrique) | Cl^- (ion chlorure) |
| H_2SO_4 (acide sulfurique) | HSO_4^- (ion hydrogènesulfate) |
| HNO_3 (acide nitrique) | NO_3^- (ion nitrate) |
| H_3O^+ (ion hydronium) | H_2O (eau) |
| HSO_4^- (ion hydrogènesulfate) | SO_4^{2-} (ion sulfate) |
| HNO_2 (acide nitreux) | NO_2^- (ion nitrite) |
| HF (acide fluorhydrique) | F^- (ion fluorure) |
| CH_3COOH (acide acétique) | CH_3COO^- (ion acétate) |
| H_2CO_3 (acide carbonique) | HCO_3^- (ion hydrogénocarbonate) |
| NH_4^+ (ion ammonium) | NH_3 (ammoniac) |
| HCO_3^- (ion hydrogénocarbonate) | CO_3^{2-} (ion carbonate) |
| H_2O (eau) | OH^- (ion hydroxyde) |
| CH_3OH (méthanol) | CH_3O^- (ion méthanolate) |

| | ACID | BASE | |
|--------------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------------|
| 100% ionized in H_2O | HCl | Cl^- | Negligible |
| | H_2SO_4 | HSO_4^- | |
| | HNO_3 | NO_3^- | |
| Acid strength increases | $\text{H}_3\text{O}^+(aq)$ | H_2O | Base strength increases |
| | HSO_4^- | SO_4^{2-} | |
| | H_3PO_4 | H_2PO_4^- | |
| | HF | F^- | |
| | $\text{HC}_2\text{H}_3\text{O}_2$ | $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^-$ | |
| | H_2CO_3 | HCO_3^- | |
| | H_2S | HS^- | |
| | H_2PO_4^- | HPO_4^{2-} | |
| | NH_4^+ | NH_3 | |
| | HCO_3^- | CO_3^{2-} | |
| Negligible | H_2O | OH^- | 100% protonated in H_2O |
| | H_2 | H^- | |
| | CH_4 | CH_3^- | |

L'électrochimie

Equation pour le potentiel de pile : $\Delta E^0_{\text{pile}} = E^0(\text{cathode}) - E^0(\text{anode})$ [V]

Relation ΔG_r^0 entre ΔE^0_{pile} et : $\Delta G_r^0 = -z F \Delta E^0_{\text{pile}}$ [J.mol⁻¹] (car [J]=[C.V])

Potentiel standard et constante équilibre : $\ln K = \frac{z F \Delta E^0}{RT}$

L'équation de Nernst : $\Delta E = \Delta E^0 - \frac{RT}{zF} \ln Q$

Loi de Faraday : $n = \frac{I t}{z F}$ avec n = nombre de moles du produit formé ; I = intensité de courant [A];

F : constante de Faraday ; z = nombre d'électrons transférés

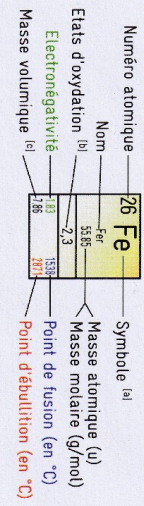
Potentiel standard (page suivante) E^0 , donné par mole d'électrons échangés, et 1 concentration de 1 mol/l, 1 atm

Tableau 7.1 Potentiels d'électrode standard à 25 °C

| Demi-réaction de réduction | | E° (V) |
|----------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|---------------|
| Agent oxydant plus fort | $F_2(g) + 2 e^- \longrightarrow 2 F^-(aq)$ | 2,87 |
| | $H_2O_2(aq) + 2 H^+(aq) + 2 e^- \longrightarrow 2 H_2O(l)$ | 1,78 |
| | $PbO_2(s) + 4 H^+(aq) + SO_4^{2-}(aq) + 2 e^- \longrightarrow PbSO_4(s) + 2 H_2O(l)$ | 1,69 |
| | $MnO_4^-(aq) + 4 H^+(aq) + 3 e^- \longrightarrow MnO_2(s) + 2 H_2O(l)$ | 1,68 |
| | $MnO_4^-(aq) + 8 H^+(aq) + 5 e^- \longrightarrow Mn^{2+}(aq) + 4 H_2O(l)$ | 1,51 |
| | $Au^{3+}(aq) + 3 e^- \longrightarrow Au(s)$ | 1,50 |
| | $PbO_2(s) + 4 H^+(aq) + 2 e^- \longrightarrow Pb^{2+}(aq) + 2 H_2O(l)$ | 1,46 |
| | $Cl_2(g) + 2 e^- \longrightarrow 2 Cl^-(aq)$ | 1,36 |
| | $Cr_2O_7^{2-}(aq) + 14 H^+(aq) + 6 e^- \longrightarrow 2 Cr^{3+}(aq) + 7 H_2O(l)$ | 1,33 |
| | $O_2(g) + 4 H^+(aq) + 4 e^- \longrightarrow 2 H_2O(l)$ | 1,23 |
| | $MnO_2(s) + 4 H^+(aq) + 2 e^- \longrightarrow Mn^{2+}(aq) + 2 H_2O(l)$ | 1,21 |
| | $IO_3^-(aq) + 6 H^+(aq) + 5 e^- \longrightarrow \frac{1}{2} I_2(aq) + 3 H_2O(l)$ | 1,20 |
| | $Br_2(l) + 2 e^- \longrightarrow 2 Br^-(aq)$ | 1,09 |
| | $VO_2^+(aq) + 2 H^+(aq) + e^- \longrightarrow VO^{2+}(aq) + H_2O(l)$ | 1,00 |
| | $NO_3^-(aq) + 4 H^+(aq) + 3 e^- \longrightarrow NO(g) + 2 H_2O(l)$ | 0,96 |
| | $ClO_2(g) + e^- \longrightarrow ClO_2^-(aq)$ | 0,95 |
| | $Ag^+(aq) + e^- \longrightarrow Ag(s)$ | 0,80 |
| | $Fe^{3+}(aq) + e^- \longrightarrow Fe^{2+}(aq)$ | 0,77 |
| | $O_2(g) + 2 H^+(aq) + 2 e^- \longrightarrow H_2O_2(aq)$ | 0,70 |
| | $MnO_4^-(aq) + e^- \longrightarrow MnO_4^{2-}(aq)$ | 0,56 |
| | $I_2(s) + 2 e^- \longrightarrow 2 I^-(aq)$ | 0,54 |
| | $Cu^+(aq) + e^- \longrightarrow Cu(s)$ | 0,52 |
| | $O_2(g) + 2 H_2O(l) + 4 e^- \longrightarrow 4 OH^-(aq)$ | 0,40 |
| | $Cu^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Cu(s)$ | 0,34 |
| | $SO_4^{2-}(aq) + 4 H^+(aq) + 2 e^- \longrightarrow H_2SO_3(aq) + H_2O(l)$ | 0,20 |
| | $Cu^{2+}(aq) + e^- \longrightarrow Cu^+(aq)$ | 0,16 |
| | $Sn^{4+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Sn^{2+}(aq)$ | 0,15 |
| | $2 H^+(aq) + 2 e^- \longrightarrow H_2(g)$ | 0 |
| | $Fe^{3+}(aq) + 3 e^- \longrightarrow Fe(s)$ | -0,036 |
| | $Pb^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Pb(s)$ | -0,13 |
| | $Sn^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Sn(s)$ | -0,14 |
| | $Ni^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Ni(s)$ | -0,23 |
| | $Cd^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Cd(s)$ | -0,40 |
| | $Fe^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Fe(s)$ | -0,45 |
| | $Cr^{3+}(aq) + e^- \longrightarrow Cr^{2+}(aq)$ | -0,50 |
| | $Cr^{3+}(aq) + 3 e^- \longrightarrow Cr(s)$ | -0,73 |
| | $Zn^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Zn(s)$ | -0,76 |
| | $2 H_2O(l) + 2 e^- \longrightarrow H_2(g) + 2 OH^-(aq)$ | -0,83 |
| | $Mn^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Mn(s)$ | -1,18 |
| | $Al^{3+}(aq) + 3 e^- \longrightarrow Al(s)$ | -1,66 |
| | $Mg^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Mg(s)$ | -2,37 |
| | $Na^+(aq) + e^- \longrightarrow Na(s)$ | -2,71 |
| | $Ca^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Ca(s)$ | -2,76 |
| | $Ba^{2+}(aq) + 2 e^- \longrightarrow Ba(s)$ | -2,90 |
| | $K^+(aq) + e^- \longrightarrow K(s)$ | -2,92 |
| Agent oxydant plus faible | $Li^+(aq) + e^- \longrightarrow Li(s)$ | -3,04 |

Tableau périodique des éléments

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------|--------------------------------------|--------------------------------|-----------------------------------|---------------------------------|-----------------------------------|---------------------------------|----------------------------------|------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|--------------------------------------|--------------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------|--------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|------------------------------------|-------------------------------------|------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|----------------------------------|-------------------------------------|---------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|-----------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|---------------------------------------|------------------------------------|---------------------------------------|-------------------------------------|---------------------------------------|----------------------------------------|---------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|------------------------------------|-------------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------|---------------------------------------|-------------------------------------|---------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|--------------------------------------|------------------------------------|----------------------------------------|-------------------------------------|----------------------------------------|--------------------------------------|--------------------------------------|----------------------------------------|-------------------------------------|----------------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|-------------------------------------|---------------------------------------|--------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|-------------------------------------|------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|-----------------------------------|-------------------------------------|--------------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------|--------------------------------------|------------------------------------|--------------------------------------|-------------------------------------|------------------------------------------|------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|------------------------------------|---------------------------------------|-----------------------------------------|-----------------------------------------|--------------------------------------|------------------------------------------|---------------------------------------|-----------------------------------------|--|--|--|--|--|------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|-----|--|--|--|--|--|--|--|--|--|------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|-------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|
| I A | | II A | | | | | | | | | | | | | | | | III B | | | | | | | | | | IV B | | | | | | | | | | V B | | | | | | | | | | VI B | | | | | | | | | | VII B | | | | | | | | | | VIII B | | | | | | | | | | I B | | | | | | | | | | II B | | | | | | | | | | III A | | | | | | | | | | IV A | | | | | | | | | | V A | | | | | | | | | | VI A | | | | | | | | | | VII A | | | | | | | | | | VIII A | | | | | | | | | |
| 1 H Hydrogène 1.008 | 2 He Hélium 4.000 | 3 Li Lithium 6.941 | 4 Be Béryllium 9.012 | 5 B Bore 10.81 | 6 C Carbone 12.01 | 7 N Azote 14.01 | 8 O Oxygène 16.00 | 9 F Fluor 18.99 | 10 Ne Neon 20.18 | 11 Na Sodium 22.99 | 12 Mg Magnésium 24.31 | 13 Al Aluminium 26.98 | 14 Si Silicium 28.09 | 15 P Phosphore 30.97 | 16 S Soufre 32.06 | 17 Cl Chlore 35.45 | 18 Ar Argon 39.95 | 19 K Potassium 39.10 | 20 Ca Calcium 40.08 | 21 Sc Scandium 44.96 | 22 Ti Titane 47.88 | 23 V Vanadium 50.94 | 24 Cr Chrome 51.99 | 25 Mn Manganèse 54.94 | 26 Fe Fer 55.85 | 27 Co Cobalt 58.93 | 28 Ni Nickel 58.71 | 29 Cu Cuivre 63.55 | 30 Zn Zinc 65.39 | 31 Ga Gallium 69.72 | 32 Ge Germanium 72.64 | 33 As Arsenic 74.92 | 34 Se Sélénium 78.96 | 35 Br Brome 79.90 | 36 Kr Krypton 83.80 | 37 Rb Rubidium 85.47 | 38 Sr Strontium 87.62 | 39 Y Yttrium 88.91 | 40 Zr Zirconium 91.22 | 41 Nb Niobium 92.91 | 42 Mo Molybdène 95.94 | 43 Tc Technetium 98.91 | 44 Ru Ruthénium 101.1 | 45 Rh Rhodium 102.9 | 46 Pd Paladium 106.4 | 47 Ag Argent 107.9 | 48 Cd Cadmium 112.4 | 49 In Indium 114.8 | 50 Sn Étain 118.7 | 51 Sb Antimoine 121.8 | 52 Te Tellure 127.6 | 53 I Iode 126.9 | 54 Xe Xénon 131.3 | 55 Cs Césium 132.9 | 56 Ba Baryum 137.3 | 57 La Lanthane 138.9 | 58 Ce Cérium 140.1 | 59 Pr Praseodyme 140.9 | 60 Nd Néodyme 144.2 | 61 Pm Prométhium (147) | 62 Sm Samarium 150.4 | 63 Eu Europium 151.9 | 64 Gd Gadolinium 157.3 | 65 Tb Terbium 158.9 | 66 Dy Dysprosium 162.5 | 67 Ho Hélium 164.9 | 68 Er Erbium 167.3 | 69 Tm Thulium 168.9 | 70 Yb Ytterbium 173.0 | 71 Lu Lutétium 175.0 | 72 Hf Hafnium 178.5 | 73 Ta Tantale 180.9 | 74 W Tungstène 183.8 | 75 Re Rhenium 186.2 | 76 Os Osmium 190.2 | 77 Ir Iridium 192.2 | 78 Pt Platine 195.1 | 79 Au Or 197.0 | 80 Hg Mercure 200.6 | 81 Tl Thallium 204.4 | 82 Pb Plomb 207.2 | 83 Bi Bismuth 208.9 | 84 Po Polonium (209) | 85 At Astate (210) | 86 Rn Radon (222) | 87 Fr Francium (223) | 88 Ra Radium 226.0 | 89 Ac Actinium 227.0 | 90 Th Thorium 232.0 | 91 Pa Protactinium 231.0 | 92 U Uranium 238.0 | 93 Np Neptunium 237.0 | 94 Pu Plutonium 244.0 | 95 Am Americium 243.0 | 96 Cm Curium 247.0 | 97 Bk Berkélium 247.0 | 98 Cf Californium 251.0 | 99 Es Einsteinium 252.0 | 100 Fm Fermium 257.0 | 101 Md Mendelevium 258.0 | 102 No Nobelium 259.0 | 103 Lr Lawrencium 260.0 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |



[a] La couleur représente l'état à 25°C
 Noir solide - Bleu liquide - Rouge gaz
 En évidence les éléments artificiels
 [b] Les plus courants sont en gras
 [c] en g/cm³ pour les solides et les
 liquides (à 20°C)
 en g/l pour les gaz (à 0°C et 1 atm)
 Ces derniers sont marqués d'une *



Les valeurs sont tirées de David R. Lide, CRC Handbook of Chemistry and Physics, 90th éd., 2009

Matériaux – Principales relations et équations

GENERALITES – LIAISONS (voir formulaire chimie)

Principe de Pauli : un set (n, l, m_l, m_s) correspond à 1 seul e⁻
 Règle de Hund : sur les orbitales (n, l), on fixe d'abord m_s avant de varier m_l

DIFFRACTION (θ est l'angle, λ la longueur d'onde du faisceau lumineux, et n un entier).

Loi de Bragg : $2d_{hkl} \sin\theta = n\lambda$ [m] avec, pour un réseau cubique, la distance entre les plans (h,k,l) : $d_{hkl} = a(h^2+k^2+l^2)^{-1/2}$

ELASTICITE – VISCOSITE (F_x force selon la direction x, S_x section normale à la direction x, S_y section normale à la direction y)

Contrainte en traction (compression uniaxiale) [Pa] : $\sigma_{xx} = \frac{F_x}{S_x}$ Contrainte de cisaillement [Pa] : $\sigma_{xy} = \frac{F_x}{S_y}$

Déformation [-] traction/compression : $\epsilon_{xx} = \frac{\Delta L_x}{L_{0x}}, \epsilon_{yy} = \frac{\Delta L_y}{L_{0y}}, \epsilon_{zz} = \frac{\Delta L_z}{L_{0z}}$ Cisaillement : $\epsilon_{xy} = \frac{1}{2}\gamma = \frac{1}{2} \frac{\Delta L_x}{L_{0y}}$

Module élastique E [Pa] : $\sigma_{xx} = E \epsilon_{xx}$ Coefficient de Poisson [-] : $\nu = \frac{-\epsilon_{yy}}{\epsilon_{xx}} = \frac{-\epsilon_{zz}}{\epsilon_{xx}}$

Module de cisaillement G [Pa] : $\sigma_{xy} = G 2\epsilon_{xy} = G \frac{\Delta L_x}{L_{0y}}$ Pour un solide isotrope : $G = \frac{1}{2} \frac{E}{1+\nu}$

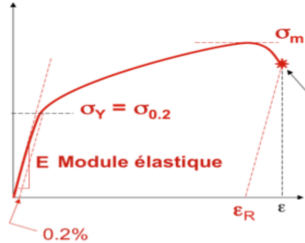
Coefficient de compressibilité K [Pa] : $K = -V_0 \frac{\Delta p}{\Delta V}$ Pour un solide isotrope : $K = \frac{1}{3} \frac{E}{1-2\nu}$

Viscosité μ d'un liquide [Pa.s] : $\sigma_{xy} = \mu \frac{dv_x}{dy} = \mu \dot{\epsilon}_{xy}$ Vitesse de propagation d'une onde [m/s] : $v = \sqrt{E/\rho}$

Densité d'énergie élastique en traction uniaxiale [J/m³=Pa] : $w = \frac{1}{2} E \epsilon_{xx}^2 = \frac{1}{2} \frac{\sigma_{xx}^2}{E}$ (Energie totale, multiplier par le volume V)

Pour un potentiel de Lennard-Jones : $E = \frac{72\epsilon_0}{r_0^3}$ Changement de volume : $\frac{\Delta V}{V} = (1-2\nu)\epsilon_{xx}$

PLASTICITE



Limite d'élasticité d'un matériau : σ_{el} ou σ_Y [Pa] (Métaux : $\sigma_{0.2}$ Polymères : $\sigma_{0.5}$)

Résistance maximum d'un matériau : σ_m [Pa]

Ductilité d'un matériau : ϵ_R (- ou %)

Déformation totale : $\epsilon_{xx} = \epsilon_{xx}^{el} + \epsilon_{xx}^{pl}$

Augmentation de limite d'élasticité due au durcissement: par solution solide $\Delta\sigma_Y^{SS} = K_{SS} G \delta \sqrt{X}$, par précipités $\Delta\sigma_Y^p = K_p \frac{Gb}{L}$,

par écrouissage $\Delta\sigma_Y^E = K_E G b \sqrt{\rho_d}$, par taille des grains (Hall Petch) $\Delta\sigma_Y^{HP} = \frac{K_{HP}}{\sqrt{\phi_g}}$ où K constantes, G module de cisaillement

[Pa], δ: différence de rayons atomiques [m], X: composition [-], b: norme du vecteur de Burgers [m], L: distance entre obstacles

[m], ρ_d: densité de dislocations [m⁻²], φ_g: diamètre des grains [m].

DURETE - TENACITE

Dureté Vickers H_V [Vickers] = $1.854 \frac{F[kgf]}{d^2[mm^2]} = 0.189 \frac{F[N]}{d^2[mm^2]}$ où d est la moyenne des diagonales de l'empreinte.

Pour l'acier, H_V ≅ σ_Y[Mpa]/3 et la dureté en Mpa : H[Mpa] = 9.81 H_V ≅ 3 σ_Y

Dureté Brinell, $H_B = 0.102 \frac{2F[N]}{\pi D(D - \sqrt{D^2 - d^2})[mm^2]}$ où D est le diamètre de la bille et d diamètre moyen de l'empreinte.

Facteur de concentration de contraintes K_{sc} = $1 + \alpha(l/\rho_{sc})^{0.5}$ [-], α cst, ρ_{sc} rayon de courbure;

Facteur d'intensité de contraintes : K₁ = σ₀ √πl [Pa m^{1/2}], σ₀ est la contrainte appliquée, l la longueur de fissure.

Extension de la zone plastique en avant d'une fissure : $r_y = \frac{(K_1)^2}{\pi \sigma_y^2}$ [m]

Tenacité théorique d'un matériau : K_{1c} = √G_cE avec G_c = 2γ + G_c^{pl} (γ : énergie de surface ; G_c^{pl} : énergie plastique [Pa.m ou J/m²])

Critère de fissuration spontanée : K₁ ≥ K_{1c} Pour un potentiel de Lennard-Jones, énergie de surface $\gamma = \frac{1}{2} \frac{\epsilon_0}{r_0^2}$

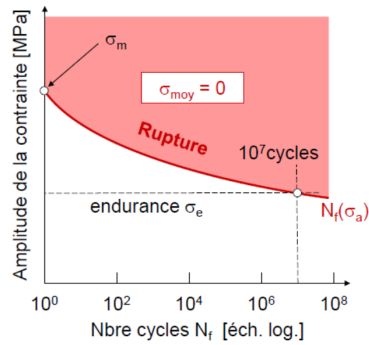
FATIGUE – USURE

Coefficients de frottements statiques [-] : $\mu_s \approx \frac{F_t}{F_n}$ (v=0) dynamiques : $\mu_d \approx \frac{F_t}{F_n}$ (v ≠ 0)

Taux d'usure spécifique Ω [-] : $\Omega = \frac{W}{A}$ où A est l'aire de frottement et W = $\frac{\text{volume enlevé}}{\text{distance parcourue}}$

Coefficient d'Archard k_a [Pa⁻¹] : $\Omega = \frac{W}{A} = k_a p = k_a \frac{F_n}{A}$

Matériaux – Principales relations et équations



A gauche, courbe de fatigue à $\sigma_{moy}=0$ donnant le nombre de cycles à rupture pour une amplitude de contrainte σ_a . σ_m est la contrainte à rupture statique, N_f le nombre de cycle à rupture. L'endurance du matériau σ_e est donnée pour une rupture à 10^7 cycles. Lorsque $\sigma_{moy} \neq 0$, on utilise la loi de Goodman, qui donne la nouvelle amplitude qui donne un nombre de cycle à rupture N_f : $\sigma_a(N_f, \sigma_{moy}) = \sigma_a^0(N_f) \left(1 - \frac{\sigma_{moy}}{\sigma_m}\right)$
 $\sigma_a^0(N_f)$ est l'amplitude pour $\sigma_{moy}=0$ donnant N_f cycles à rupture. Lorsque des cycles d'amplitudes variables sont appliquées, on utilise la règle de Miner : $\sum \frac{N_i}{N_f(\sigma_{a,i})} = 1$, avec N_i nombre de cycles de la période i , a l'amplitude $\sigma_{a,i}$.
 Loi de Paris : $\frac{dl}{dN} = A \Delta K_1^m$, A, m constantes, l [m] longueur de fissure et N nombre de cycles, K_1 facteur d'intensité de contraintes.

PROPRIETES THERMIQUES

Chaleur spécifique : $c_p = \frac{1}{m} \frac{dH}{dT}$ [J K⁻¹ kg⁻¹]

Chaleur latente de transformation : $L = \frac{\Delta H}{m}$ [J kg⁻¹]

Flux thermique : $j_T = -k \frac{dT}{dz}$ [W m⁻²] où k est la conductivité thermique [W m⁻¹ K⁻¹]

Eq. de la chaleur : $\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial j_T}{\partial z} = k \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$ où $\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$ et diffusivité $a = \frac{k}{\rho c_p}$ [m² s⁻¹]

Nbre Fourier [-] : $F_o = \frac{a \Delta t}{\Delta x^2}$ Position où $T = (T_1 + T^*)/2$ est $Lc_1 = \nu(a_1 t)$; Effusivité : $e = \sqrt{k \rho c_p}$

Coeff. d'expansion thermique linéaire [K⁻¹] : $\alpha = \frac{1}{L} \frac{dL}{dT}$ Déformation thermique [-] $\epsilon_{xx}^{th} = \frac{\Delta L}{L_0} = \alpha(T_1 - T_0)$

COMPORTEMENT A HAUTE TEMPERATURE

Coefficient de diffusion des espèces chimiques : $D(T) = D_0 \exp\left[\frac{-Q}{RT}\right]$ [m²s⁻¹], D_0, Q constantes, R constante des gaz parfaits

Loi de la diffusion (C concentration en mol ou g/volume) : $j_C = -D \frac{\partial C}{\partial x}$ $\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial j_C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ Nombre de Fourier [-] : $F_o = \frac{D \Delta t}{\Delta x^2}$

DIAGRAMME DE PHASES

Composition ou fraction molaire [-] : $X_A = \frac{N_A}{N_A + N_B}$

Composition ou fraction massique [-] : $C_A = \frac{m_A}{m_A + m_B}$

Règle des phases de Gibbs : $N_{DL} = 2 + N_C - N_P$, où : N_{DL} : nbre de degrés de liberté ; N_C : nbre de composants chimiques

N_P : nbre de phases présentes dans le système. Si P fixé, la règle devient : $N_{DL} = 1 + N_C - N_P$

Loi des leviers donnant la fraction molaire d'une phase α dans le domaine biphasé ($\alpha + \beta$) [-] : $\chi_\alpha = \frac{X_{B\beta} - X_{B0}}{X_{B\beta} - X_{B\alpha}}$

où X_{B0} : composition nominale en B ; $X_{B\alpha}$: composition de la phase α en B ; $X_{B\beta}$: composition de la phase β en B

OXYDATION/CORROSION

Cinétique d'oxydation, couche dense : $x^2 \sim D_0 \exp\left(\frac{-Q_D}{RT}\right) C_0 t = D C_0 t$, D coeff de diffusion, C_0 concentration en O₂ à la surface

Corrosion aqueuse possible si le potentiel E^0 est inférieur à celui de O₂+2H₂O+4e⁻->4 OH⁻

PROPRIETES ELECTRIQUES – MAGNETIQUES

Dipôle électrique [A s m] : $\mathbf{p} = q\mathbf{d}$

Moment magnétique orbital [A m²] : $\mathbf{m} = \frac{1}{2} q \mathbf{r} \times \mathbf{v}$

Vecteur polarisation : $\mathbf{P} = \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{p}_i$ [A s m⁻²]

Vecteur aimantation : $\mathbf{M} = \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{m}_i$ [A m⁻¹]

$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi_E \mathbf{E}$ (\mathbf{E} : champ électrique [V m⁻¹])

$\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}$ [A s V⁻¹ m⁻¹] et $\epsilon_r = (1 + \chi_E)$, χ_E susceptibilité électrique [-]

Charge d'un condensateur [Coulomb=Fahrad.V] : $Q = C V$ avec pour un condensateur plan : $C = \epsilon_0 \epsilon_r \frac{S}{d}$, S surface et d distance plaques.

$\mathbf{M} = \chi_M \mathbf{H}$ (\mathbf{H} : champ magnétique [A m⁻¹]) $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ [V s A⁻¹ m⁻¹] et $\mu_r = (1 + \chi_M)$ χ_M susceptibilité magnétique [-]

Induction magnétique d'un solénoïde de N spires, de longueur L et courant I : $\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}) = \mu_0 \mu_r \frac{N I}{L}$ [V s m⁻²]

Modèle de Drude pour la conductivité électrique : $\mathbf{j}_e = -n_e e \mathbf{v} = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e} \mathbf{E} = \sigma_e \mathbf{E} = \rho_e^{-1} \mathbf{E}$, n_e : densité d'électrons

Résistance : $R = \rho_e l/S$, ρ_e résistivité [Ω m], l longueur du fil, S section. σ_e est la conductivité électrique, [Ω^{-1} m⁻¹]