

## Matériaux : de la chimie aux propriétés – Constantes et Équations

### Constantes et Valeurs

Vitesse de la lumière	c	$3 \times 10^8$ m/s
Accélération gravitationnelle	g	9.8 m/s <sup>2</sup>
Constante de Planck	h	$6,626 \times 10^{-34}$ J.s (et $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ )
Constante de Boltzmann	k ou k <sub>B</sub>	$1,38 \times 10^{-23}$ J/K
Nombre d'Avogadro	N <sub>a</sub>	$6,022 \times 10^{23}$ particules mol <sup>-1</sup>
Charge élémentaire	e	$1,6 \times 10^{-19}$ C (et 1 eV vaut cela en J)
Constante des gaz parfaits	R = N <sub>a</sub> k =	$8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $0,08205 \text{ L atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ $8,3145 \text{ kPa L mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ $8,314 \times 10^{-2} \text{ L bar K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
Volume molaire d'un gaz parfait, p <sub>o</sub> = 1 atm, T = 0°C	V <sub>mol</sub>	$= R \times 273,15 / P_o = 22,4 \text{ L mol}^{-1}$
Unité de masse atomique	u = 10 <sup>-3</sup> /N <sub>a</sub> =	$1,66 \times 10^{-27}$ kg
Constante de Faraday	F = N <sub>a</sub> · e =	96 485 C mol <sup>-1</sup>
Constante de Rydberg	R <sub>∞</sub> = m <sub>e</sub> μ <sub>0</sub> <sup>2</sup> e <sup>4</sup> c <sup>3</sup> /(8h <sup>3</sup> ) =	$1,097 \times 10^7$ m <sup>-1</sup>
Constant énergétique de Rydberg	R <sub>H</sub> = h c R <sub>∞</sub>	13,6 eV
Masse du proton	m <sub>p</sub> =	$1,672 \times 10^{-27}$ kg = 1 u
Masse du neutron	m <sub>n</sub> =	$1,674 \times 10^{-27}$ kg = 1 u
Masse de l'électron	m <sub>e</sub> =	$9,1 \times 10^{-31}$ kg = $5,485 \times 10^{-4}$ u

**Unités:** Joule: 1 J = 1 kg·m<sup>2</sup>·s<sup>-2</sup> ; Watt: 1 W = 1 J·s<sup>-1</sup> ; Coulomb: 1 C = 1 A·s ; Volt: 1 V = 1 J C<sup>-1</sup>; Pascal: 1 Pa = 1 N m<sup>-2</sup>;

### Structure atomique ( constantes données ci-dessus)

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

Energie des niveaux n de l'atome d'hydrogène:  $E_n = \frac{-13,6 \text{ eV}}{n^2}$  (n = 1, 2, 3, ...)

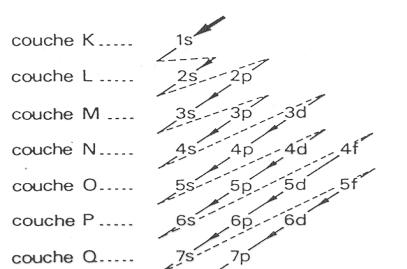
Rydberg pour l'Hydrogène  $\frac{1}{\lambda} = R_{\infty} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$   $\lambda$ : longueur d'onde [m]

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  $\Delta p = m\Delta v$  et sur la position  $\Delta x$

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  $\varepsilon_0$  : énergie de liaison[eV] et  $r_0$  : distance à l'équilibre [m]



## Thermodynamique

Enthalpie  $H = U + pV$  [J.mol<sup>-1</sup>] (U : énergie interne, p: pression en Pa, V : volume en m<sup>3</sup>/mol)

Entropie : classique :  $\Delta S = \frac{Q_{rev}}{T}$  [J.mol<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>]

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=const. :  $c_p = \frac{1}{m} \frac{dH}{dT}$  [J.kg<sup>-1</sup>.K<sup>-1</sup>]

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  $\Delta_r S^0 = \sum_{i=1}^p v_i S_i^0$  (produits) -  $\sum_{j=1}^r v_j S_j^0$  (réactifs)

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

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

$\Delta G_f^0$ ,  $\Delta H_f^0$  et  $S^0$  mesurées dans des conditions standards et tabulées

avec  $v_i$ ,  $v_j$  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  $\Delta G_r^0$  et  $\Delta G_r$ :  $\Delta G_r = \Delta G_r^0 + RT \ln Q$  avec Q quotient réactionnel

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

## Équilibre 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



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

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

Relation entre pH et pOH :  $pH + pOH = 14,00$  (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 ( $K_a \gg 1$ ) :  $pH = -\log([H^+]/1M) = -\log(c_a/1M)$

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

pH d'une solution aqueuse diluée d'un acide fort :  $[H^+] = \frac{c_a + \sqrt{c_a^2 + 4K_a c_a}}{2}$  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  $[HA]_0 > 100 K_a$ :  $x = [H^+] = \sqrt{K_a c_a}$   $pH = \frac{1}{2} (pK_a - \log[HA]_0)$

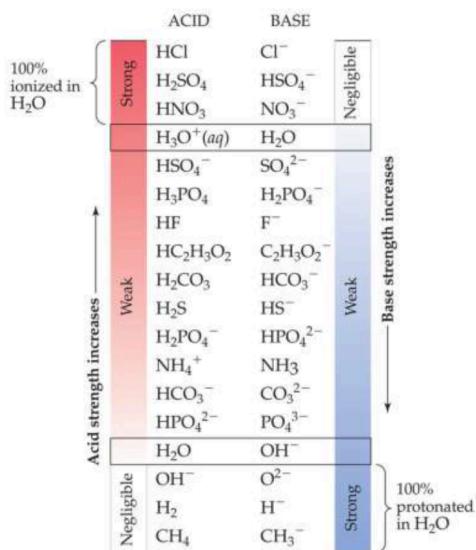
pOH d'une solution d'une base forte ( $K_b \gg 1$ ) :  $pOH = -\log(c_b)$   $c_b = [B]_0$

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

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

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

Acide	Base conjuguée
HI (acide iodhydrique)	$\text{I}^-$ (ion iodure)
HBr (acide bromhydrique)	$\text{Br}^-$ (ion bromure)
HCl (acide chlorhydrique)	$\text{Cl}^-$ (ion chlorure)
$\text{H}_2\text{SO}_4$ (acide sulfurique)	$\text{HSO}_4^-$ (ion hydrogénosulfate)
$\text{HNO}_3$ (acide nitrique)	$\text{NO}_3^-$ (ion nitrate)
$\text{H}_3\text{O}^+$ (ion hydronium)	$\text{H}_2\text{O}$ (eau)
$\text{HSO}_4^-$ (ion hydrogénosulfate)	$\text{SO}_4^{2-}$ (ion sulfate)
$\text{HNO}_2$ (acide nitreux)	$\text{NO}_2^-$ (ion nitrite)
HF (acide fluorhydrique)	$\text{F}^-$ (ion fluorure)
$\text{CH}_3\text{COOH}$ (acide acétique)	$\text{CH}_3\text{COO}^-$ (ion acétate)
$\text{H}_2\text{CO}_3$ (acide carbonique)	$\text{HCO}_3^-$ (ion hydrogénocarbonate)
$\text{NH}_4^+$ (ion ammonium)	$\text{NH}_3$ (ammoniac)
$\text{HCO}_3^-$ (ion hydrogénocarbonate)	$\text{CO}_3^{2-}$ (ion carbonate)
$\text{H}_2\text{O}$ (eau)	$\text{OH}^-$ (ion hydroxyde)
$\text{CH}_3\text{OH}$ (méthanol)	$\text{CH}_3\text{O}^-$ (ion méthanolate)



## L'électrochimie

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

Relation  $\Delta G_r^0$  entre  $\Delta E^0_{\text{pile}}$  et :  $\Delta G_r^0 = -zF\Delta E^0_{\text{pile}}$  [J.mol<sup>-1</sup>] (car [J]=[C.V])

Potentiel standard et constante d'équilibre :  $\ln K = \frac{zF\Delta E^0}{RT}$

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 1mol/l, 1 atm

Tableau 7.1 Potentiels d'électrode standard à 25 °C

Demi-réaction de réduction		$E^\circ$ (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
$Li^+(aq) + e^-$	$\longrightarrow Li(s)$	-3,04

Agent réducteur plus fort

Agent oxydant plus faible

# Tableau périodique des éléments

I A		II A		III A		IV A		V A		VI A		VII A		VIII A					
1 <b>H</b> Hydrogène 1.008	1	2 <b>He</b> Hélium 4.003	0	3 <b>Li</b> Lithium 6.941	4 <b>Be</b> Béryllium 9.012	5 <b>B</b> Bore 10.81	6 <b>C</b> Carbone 12.01	7 <b>N</b> Azote 14.01	8 <b>O</b> Oxygène 16.00	9 <b>F</b> Fluor 19.00	10 <b>Ne</b> Néon 20.18	11 <b>Na</b> Sodium 22.99	12 <b>Mg</b> Magnésium 24.31	13 <b>Al</b> Aluminium 26.98	14 <b>Si</b> Silicium 28.09	15 <b>P</b> Phosphore 30.97	16 <b>S</b> Soufre 32.06	17 <b>Cl</b> Chlore 35.45	18 <b>Ar</b> Argon 39.95
Masse atomique (u)		Symbol[e]		Numéro atomique		Masse atomique (u)		< Masse atomique (u)		Masse moléaire (g/mol)		Electronegativité [e]		Point de fusion (en °C)					
[a] La couleur représente l'état à 25°C		Non-solide Bleu liquide - Rouge-gaz		[b] Fer		En gris: les éléments artificiels		[c] Les plus courants sont en gris		[d] en g/cm³ pour les solides et les liquides à 20°C		[e] en g/mol pour les gaz (à 0°C et 1 atm)		[f] en °C pour les solides et les liquides à 20°C					
Masse volumique [c]		Point d'ébullition (en °C)		Des derniers sont marqués d'une *		Des derniers sont marqués d'une *		Des derniers sont marqués d'une *		Des derniers sont marqués d'une *		Des derniers sont marqués d'une *		Des derniers sont marqués d'une *					
I B		II B		III B		IV B		V B		VI B		VII B		VIII B					
19 <b>K</b> Potassium 39.10	20 <b>Ca</b> Calcium 40.08	21 <b>Sc</b> Scandium 44.96	22 <b>Ti</b> Titanium 47.90	23 <b>V</b> Vanadium 50.94	24 <b>Cr</b> Chromium 51.96	25 <b>Mn</b> Manganèse 54.94	26 <b>Fe</b> Fer 55.85	27 <b>Co</b> Cobalt 58.93	28 <b>Ni</b> Nickel 58.69	29 <b>Cu</b> Cuivre 63.55	30 <b>Zn</b> Zinc 65.39	31 <b>Ga</b> Gallium 69.72	32 <b>Ge</b> Germanium 71.92	33 <b>As</b> Arsenic 72.96	34 <b>Se</b> Sérum 82.80	35 <b>Br</b> Brome 87.90	36 <b>Kr</b> Krypton 88.00		
[a] La couleur représente l'état à 25°C		Non-solide Bleu liquide - Rouge-gaz		[b] Fer		En gris: les éléments artificiels		[c] Les plus courants sont en gris		[d] en g/cm³ pour les solides et les liquides à 20°C		[e] en g/mol pour les gaz (à 0°C et 1 atm)		[f] en °C pour les solides et les liquides à 20°C					
[a] La couleur représente l'état à 25°C		[b] Fer		[c] Les plus courants sont en gris		[d] en g/cm³ pour les solides et les liquides à 20°C		[e] en g/mol pour les gaz (à 0°C et 1 atm)		[f] en °C pour les solides et les liquides à 20°C		[a] La couleur représente l'état à 25°C		[b] Fer					
37 <b>Rb</b> Rubidium 85.44	38 <b>Sr</b> Strontium 87.62	39 <b>Y</b> Yttrium 88.93	40 <b>Zr</b> Zirconium 91.22	41 <b>Nb</b> Nobium 91.93	42 <b>Mo</b> Molibdène 95.93	43 <b>Tc</b> Technetium 97.93	44 <b>Ru</b> Ruthénium 101.1	45 <b>Rh</b> Rhodium 102.93	46 <b>Pd</b> Palladium 106.93	47 <b>Ag</b> Argent 107.93	48 <b>Cd</b> Cadmium 112.4	49 <b>In</b> Indium 114.8	50 <b>Sn</b> Étain 118.7	51 <b>Sb</b> Antimoine 121.8	52 <b>Te</b> Tellure 127.5	53 <b>I</b> Iode 131.3	54 <b>Xe</b> Xénon 131.3		
[a] La couleur représente l'état à 25°C		[b] Fer		[c] Les plus courants sont en gris		[d] en g/cm³ pour les solides et les liquides à 20°C		[e] en g/mol pour les gaz (à 0°C et 1 atm)		[f] en °C pour les solides et les liquides à 20°C		[a] La couleur représente l'état à 25°C		[b] Fer					
55 <b>Cs</b> Césium 132.9	56 <b>Ba</b> Baryum 137.3	57 <b>La</b> Lanthane 138.9	72 <b>Hf</b> Hafnium 178.5	73 <b>Ta</b> Taïtanate 180.9	74 <b>W</b> Tungstène 183.5	75 <b>Re</b> Rhénium 186.2	76 <b>Os</b> Osmium 189.2	77 <b>Ir</b> Iridium 192.2	78 <b>Pt</b> Platine 195.1	79 <b>Au</b> Or 197.0	80 <b>Hg</b> Mercure 200.6	81 <b>Tl</b> Thallium 204.4	82 <b>Pb</b> Plomb 207.2	83 <b>Bi</b> Bismuth 209.0	84 <b>Po</b> Plutonium 210.9	85 <b>At</b> Astatine 212.0	86 <b>Rn</b> Radium 222.0		
[a] La couleur représente l'état à 25°C		[b] Fer		[c] Les plus courants sont en gris		[d] en g/cm³ pour les solides et les liquides à 20°C		[e] en g/mol pour les gaz (à 0°C et 1 atm)		[f] en °C pour les solides et les liquides à 20°C		[a] La couleur représente l'état à 25°C		[b] Fer					
87 <b>Fr</b> Francium (223)	88 <b>Ra</b> Radium (226)	89 <b>Ac</b> Actinium (227)	104 <b>Rf</b> Ruthénium (223)	105 <b>Db</b> Dubium (224)	106 <b>Sg</b> Sébarium (225)	107 <b>Bh</b> Bérbérium (226)	108 <b>Hs</b> Hassium (226)	109 <b>Mt</b> Mithium (226)	110 <b>Uub</b> Uubium (227)	111 <b>Uup</b> Uupium (227)	112 <b>Uub</b> Uubium (227)	113 <b>Uut</b> Uutium (227)	114 <b>Uujq</b> Uujqium (227)	115 <b>Uup</b> Uupium (227)	116 <b>Uuh</b> Uuhium (227)	117 <b>Uus</b> Uusium (227)	118 <b>Ujo</b> Ujomium (227)		
[a] La couleur représente l'état à 25°C		[b] Fer		[c] Les plus courants sont en gris		[d] en g/cm³ pour les solides et les liquides à 20°C		[e] en g/mol pour les gaz (à 0°C et 1 atm)		[f] en °C pour les solides et les liquides à 20°C		[a] La couleur représente l'état à 25°C		[b] Fer					
17 <b>Cl</b> Gaz rares 1.07	18 <b>Ar</b> Gaz rares 39.95	19 <b>Br</b> Gaz rares 79.90	20 <b>Kr</b> Gaz rares 83.80	21 <b>Xe</b> Gaz rares 131.30	22 <b>Rn</b> Gaz rares 162.00	23 <b>Cs</b> Gaz rares 173.00	24 <b>Fr</b> Gaz rares 223.00	25 <b>Ra</b> Gaz rares 226.00	26 <b>Ac</b> Gaz rares 227.00	27 <b>Db</b> Gaz rares 227.00	28 <b>Sg</b> Gaz rares 227.00	29 <b>Bh</b> Gaz rares 227.00	30 <b>Hs</b> Gaz rares 227.00	31 <b>Mt</b> Gaz rares 227.00	32 <b>Uub</b> Gaz rares 227.00	33 <b>Uup</b> Gaz rares 227.00	34 <b>Uujq</b> Gaz rares 227.00	35 <b>Uup</b> Gaz rares 227.00	
[a] La couleur représente l'état à 25°C		[b] Fer		[c] Les plus courants sont en gris		[d] en g/cm³ pour les solides et les liquides à 20°C		[e] en g/mol pour les gaz (à 0°C et 1 atm)		[f] en °C pour les solides et les liquides à 20°C		[a] La couleur représente l'état à 25°C		[b] Fer					
Métaux		Métalloïdes		Non-métalloïdes		Gaz rares		Métalloïdes		Métalloïdes		Non-métalloïdes		Gaz rares					

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

# Matériaux – Principales relations et équations

## GENERALITES – LIAISONS (voir formulaire chimie)

Principe de Pauli : un set (n, l, m<sub>l</sub>, m<sub>s</sub>) correspond à 1 seul e<sup>-</sup>

Règle de Hund : sur les orbitales (n, l), on fixe d'abord m<sub>s</sub> avant de varier m<sub>l</sub>

**DIFFRACTION** ( $\theta$  est l'angle,  $\lambda$  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<sub>x</sub> force selon la direction x, S<sub>x</sub> section normale à la direction x, S<sub>y</sub> 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 :  $\varepsilon_{xx} = \frac{\Delta L_x}{L_{0x}}$ ,  $\varepsilon_{yy} = \frac{\Delta L_y}{L_{0y}}$ ,  $\varepsilon_{zz} = \frac{\Delta L_z}{L_{0z}}$

Cisaillement :  $\varepsilon_{xy} = \frac{1}{2}\gamma = \frac{1}{2} \frac{\Delta L_x}{L_{0y}}$

Module élastique E [Pa] :  $\sigma_{xx} = E \varepsilon_{xx}$

Coefficient de Poisson [-] :  $\nu = \frac{-\varepsilon_{yy}}{\varepsilon_{xx}} = \frac{-\varepsilon_{zz}}{\varepsilon_{xx}}$

Module de cisaillement G [Pa] :  $\sigma_{xy} = G 2\varepsilon_{xy} = G \frac{\Delta L_x}{L_{0y}}$

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  $\mu$  d'un liquide [Pa.s] :  $\sigma_{xy} = \mu \frac{dv_x}{dy} = \mu \dot{\varepsilon}_{xy}$

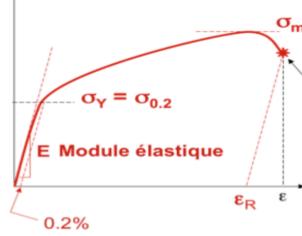
Vitesse de propagation d'une onde [m/s] :  $v = \sqrt{E/\rho}$

Densité d'énergie élastique en traction uniaxiale [J/m<sup>3</sup>=Pa] :  $w = \frac{1}{2} E \varepsilon_{xx}^2 = \frac{1}{2} \frac{\sigma_{xx}^2}{E}$  (Energie totale, multiplier par le volume V)

Pour un potentiel de Lennard-Jones :  $E = \frac{72\varepsilon_0}{r_0^3}$

Changement de volume :  $\frac{\Delta V}{V} = (1 - 2\nu)\varepsilon_{xx}$

## PLASTICITE



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

Résistance maximum d'un matériau :  $\sigma_m$  [Pa]

Ductilité d'un matériau :  $\varepsilon_r$  (- ou %)

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

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],  $\delta$ : différence de rayons atomiques [m], X: composition [-], b: norme du vecteur de Burgers [m], L: distance entre obstacles [m],  $\rho_d$ : densité de dislocations [m<sup>-2</sup>],  $\phi_g$ : 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,  $H_V \approx \sigma_y[\text{Mpa}]/3$  et la dureté en Mpa :  $H[\text{Mpa}] = 9.81 H_V \approx 3 \sigma_y$

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

Facteur d'intensité de contraintes :  $K_1 = \sigma_0 \sqrt{\pi l}$  [Pa m<sup>1/2</sup>],  $\sigma_0$  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 :  $K_{1c} = \sqrt{G_c E}$  avec  $G_c = 2\gamma + G_c^{pl}$  ( $\gamma$  : énergie de surface ;  $G_c^{pl}$  : énergie plastique [Pa.m ou J/m<sup>2</sup>])

Critère de fissuration spontanée :  $K_1 \geq K_{1c}$  Pour un potentiel de Lennard-Jones, énergie de surface  $\gamma = \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_0}{r_0^2}$

## FATIGUE – USURE

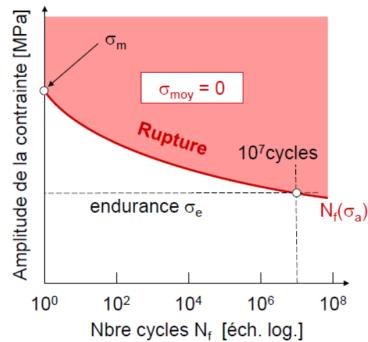
Coefficients de frottements statiques [-] :  $\mu_s \approx \frac{F_t}{F_n}$  ( $v=0$ )

dynamiques :  $\mu_d \approx \frac{F_t}{F_n}$  ( $v \neq 0$ )

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

Coefficient d'Archard  $k_a$  [Pa<sup>-1</sup>] :  $\Omega = \frac{W}{A} = k_a p = k_a \frac{F_n}{A}$

# 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  $\sigma_a$ .  $\sigma_m$  est la contrainte à rupture statique,  $N_f$  le nombre de cycle à rupture. L'endurance du matériau  $\sigma_e$  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

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

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

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

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

$$\text{Nbre Fourier [-] : } F_0 = \frac{a \Delta t}{\Delta x^2} \text{ Position où } T = (T_1 + T^*)/2 \text{ est } Lc_1 = v(a_1 t) ; \text{ Effusivité : } e = \sqrt{k \rho c_p}$$

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

## COMPORTEMENT A HAUTE TEMPERATURE

$$\text{Coefficient de diffusion des espèces chimiques : } D(T) = D_0 \exp\left[\frac{-Q}{RT}\right] [\text{m}^2 \text{s}^{-1}] \text{, } D_0, Q \text{ constantes, } R \text{ constante des gaz parfaits}$$

$$\text{Loi de la diffusion (C concentration en mol ou g/volume): } j_C = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad \frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial j_C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \text{ Nombre de Fourier [-] : } F_0 = \frac{D \Delta t}{\Delta x^2}$$

## DIAGRAMME DE PHASES

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

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

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

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

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

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

## OXYDATION/CORROSION

$$\text{Cinétique d'oxydation, couche dense : } x^2 \sim D_0 \exp\left(\frac{-Q_D}{RT}\right) C_0 t = D C_0 t, \text{ D coeff de diffusion, } C_0 \text{ concentration en O}_2 \text{ à la surface}$$

Corrosion aqueuse possible si le potentiel  $E^0$  est inférieur à celui de  $O_2 + 2H_2O + 4e^- \rightarrow 4 OH^-$

## PROPRIETES ELECTRIQUES – MAGNETIQUES

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\text{Résistance : } R = \rho_e I / S, \rho_e \text{ résistivité } [\Omega \text{m}], I \text{ longueur du fil, } S \text{ section. } \sigma_e \text{ est la conductivité électrique, } [\Omega^{-1} \text{m}^{-1}]$$