

Matériaux : de la chimie aux propriétés – Constantes et Équations

Constantes et Valeurs

Vitesse de la lumière	c	$3 \times 10^8 \text{ m/s}$
Accélération gravitationnelle	g	9.8 m/s^2
Constante de Planck	h	$6,626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ (et $\hbar = \frac{h}{2\pi}$)
Constante de Boltzmann	k ou k_B	$1,38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$
Nombre d'Avogadro	N_A	$6.022 \times 10^{23} \text{ particules mol}^{-1}$
Charge élémentaire	e	$1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$ (et 1eV vaut cela en J)
Constante des gaz parfaits	$R = N_A k =$	$8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $0,08205 \text{ L atm mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ $8,3145 \text{ kPa L mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ $8.314 \times 10^{-2} \text{ L bar K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
Volume molaire d'un gaz parfait, $p_0 = 1 \text{ atm}$, $T = 0^\circ\text{C}$	$V_{\text{mol}} = R \times 273,15 / P_0 =$	$22,4 \text{ L mol}^{-1}$
Unité de masse atomique	$u = 10^{-3} / N_A =$	$1,66 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Constante de Faraday	$F = N_A \cdot e =$	$96\,485 \text{ C mol}^{-1}$
Constante de Rydberg	$R_\infty = m_e \mu_0^2 e^4 c^3 / (8h^3) =$	$1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$
Constant énergétique de Rydberg	$R_H = h c R_\infty$	$13,6 \text{ eV}$
Masse du proton	$m_p =$	$1,672 \times 10^{-27} \text{ kg} = 1 \text{ u}$
Masse du neutron	$m_n =$	$1,674 \times 10^{-27} \text{ kg} = 1 \text{ u}$
Masse de l'électron	$m_e =$	$9,1 \times 10^{-31} \text{ kg} = 5,485 \times 10^{-4} \text{ u}$

Unités: Joule: $1 \text{ J} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$; Watt: $1 \text{ W} = 1 \text{ J} \cdot \text{s}^{-1}$; Coulomb: $1 \text{ C} = 1 \text{ A} \cdot \text{s}$; Volt: $1 \text{ V} = 1 \text{ J C}^{-1}$; Pascal: $1 \text{ Pa} = 1 \text{ Nm}^{-2}$;

Structure atomique (constantes données ci-dessus)

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

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

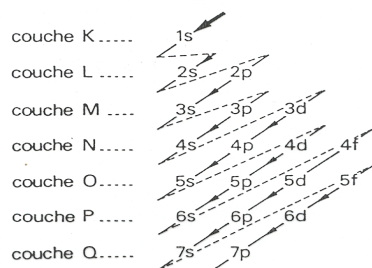
Rydberg pour l'Hydrogène $\frac{1}{\lambda} = R_\infty \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$ λ : longueur d'onde [m]

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

Incertitude de Heisenberg $\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2} \hbar = \hbar / 4\pi$ incertitude sur le mvt $\Delta p = m\Delta v$ 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 ε_0 : énergie de liaison[eV] et r_0 : distance à l'équilibre [m]



Thermodynamique

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

$\Delta_r G^0$, $\Delta_r H^0$ 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 : $\Delta_r G^0 = \Delta_r H^0 - T\Delta_r S^0$

Relation entre $\Delta_r G^0$ et $\Delta_r G$: $\Delta_r G = \Delta_r G^0 + RT \ln Q$ avec Q quotient réactionnel

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

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 ($K_a \gg 1$) : $\text{pH} = -\log([H^+]/1\text{M}) = -\log(c_a/1\text{M})$

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

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

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 ($K_b \ll 1$): $x = [OH^-]$: général: $x = \frac{-K_b + \sqrt{K_b^2 + 4K_b c_b}}{2}$

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

Acide	Base conjuguée
HI (acide iodhydrique)	I ⁻ (ion iodure)
HBr (acide bromhydrique)	Br ⁻ (ion bromure)
HCl (acide chlorhydrique)	Cl ⁻ (ion chlorure)
H ₂ SO ₄ (acide sulfurique)	HSO ₄ ⁻ (ion hydrogénosulfate)
HNO ₃ (acide nitrique)	NO ₃ ⁻ (ion nitrate)
H ₃ O ⁺ (ion hydronium)	H ₂ O (eau)
HSO ₄ ⁻ (ion hydrogénosulfate)	SO ₄ ²⁻ (ion sulfate)
HNO ₂ (acide nitreux)	NO ₂ ⁻ (ion nitrite)
HF (acide fluorhydrique)	F ⁻ (ion fluorure)
CH ₃ COOH (acide acétique)	CH ₃ COO ⁻ (ion acétate)
H ₂ CO ₃ (acide carbonique)	HCO ₃ ⁻ (ion hydrogénocarbonate)
NH ₄ ⁺ (ion ammonium)	NH ₃ (ammoniac)
HCO ₃ ⁻ (ion hydrogénocarbonate)	CO ₃ ²⁻ (ion carbonate)
H ₂ O (eau)	OH ⁻ (ion hydroxyde)
CH ₃ OH (méthanol)	CH ₃ O ⁻ (ion méthanolate)

	ACID	BASE			
100% ionized in H ₂ O	Strong	HCl	Cl ⁻	Negligible	
		H ₂ SO ₄	HSO ₄ ⁻		
		HNO ₃	NO ₃ ⁻		
		H ₃ O ⁺ (aq)	H ₂ O		
Acid strength increases ↑	Weak	HSO ₄ ⁻	SO ₄ ²⁻	Weak	Base strength increases ↓
		H ₃ PO ₄	H ₂ PO ₄ ⁻		
		HF	F ⁻		
		HC ₂ H ₃ O ₂	C ₂ H ₃ O ₂ ⁻		
		H ₂ CO ₃	HCO ₃ ⁻		
		H ₂ S	HS ⁻		
		H ₂ PO ₄ ⁻	HPO ₄ ²⁻		
		NH ₄ ⁺	NH ₃		
		HCO ₃ ⁻	CO ₃ ²⁻		
		HPO ₄ ²⁻	PO ₄ ³⁻		
			H ₂ O		
Negligible	Strong	OH ⁻	O ²⁻	100% protonated in H ₂ O	
		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 1mol/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	Agent réducteur plus faible
	$H_2O_2(aq) + 2 H^+(aq) + 2 e^-$	$\longrightarrow 2 H_2O(l)$	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	Agent réducteur plus fort

Tableau périodique des éléments

I A

Tableau périodique des éléments

VIII A

1	H
Hydrogène	1.008

II A

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	19.00

10	Ne
Néon	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

III B

23	V
Vanadium	50.94

24	Cr
Chrome	52.00

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	72.59

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

IV B

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
Palladium	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	132.91

56	Ba
Baryum	137.3

V B

57	La
Lanthane	138.91

58	Ce
Cérum	140.12

59	Pr
Praseodyme	140.91

60	Nd
Néodyme	144.24

61	Pm
Prométhium	144.91

62	Sm
Samarium	150.36

63	Eu
Europium	151.96

64	Gd
Gadolinium	157.25

65	Tb
Terbium	158.93

66	Dy
Dysprosium	162.50

67	Ho
Holmium	164.93

68	Er
Erbium	167.26

69	Tm
Thulium	168.93

70	Yb
Ytterbium	173.05

71	Lu
Lutétium	174.97

72	Hf
Hafnium	178.49

73	Ta
Tantale	180.95

VI B

74	W
Tungstène	183.84

75	Re
Rhenium	186.21

76	Os
Osmium	190.23

77	Ir
Iridium	192.22

78	Pt
Platine	195.08

79	Au
Or	196.97

80	Hg
Mercure	200.59

81	Tl
Thallium	204.38

82	Pb
Plomb	207.2

83	Bi
Bismuth	208.98

84	Po
Polonium	(209)

85	At
Astato	(210)

86	Rn
Radon	(222)

87	Fr
Francium	(223)

88	Ra
Radium	(226)

89	Ac
Actinium	(227)

90	Th
Thorium	(232)

VII B

91	Pa
Protactinium	(231)

92	U
Uranium	(238)

93	Np
Néptunium	(237)

94	Pu
Plutonium	(244)

95	Am
Américium	(243)

96	Cm
Curium	(247)

97	Bk
Berkélium	(247)

98	Cf
Californium	(251)

99	Es
Einsteinium	(254)

100	Fm
Fermium	(257)

101	Md
Mendelevium	(258)

102	No
Nobelium	(259)

103	Lr
Lawrencium	(260)

104	Rf
Rutherfordium	(261)

105	Db
Dubnium	(262)

106	Sg
Seaborgium	(266)

107	Bh
Bohrium	(264)

VIII B

108	Hs
Hassium	(277)

109	Mt
Meitnerium	(268)

110	Uu
Ununium	(289)

111	Uu
Ununium	(289)

112	Uu
Ununium	(289)

113	Uu
Ununium	(289)

114	Uu
Ununium	(289)

115	Uu
Ununium	(289)

116	Uu
Ununium	(289)

117	Uu
Ununium	(289)

118	Uu
Ununium	(289)

119	Uu
Ununium	(289)

120	Uu
Ununium	(289)

121	Uu
Ununium	(289)

122	Uu
Ununium	(289)

123	Uu
Ununium	(289)

124	Uu
Ununium	(289)

IX B

125	Uu
Ununium	(289)

126	Uu
Ununium	(289)

127	Uu
Ununium	(289)

128	Uu
Ununium	(289)

129	Uu
Ununium	(289)

130	Uu
Ununium	(289)

131	Uu
Ununium	(289)

132	Uu
Ununium	(289)

133	Uu
Ununium	(289)

134	Uu
Ununium	(289)

135	Uu
Ununium	(289)

136	Uu
Ununium	(289)

137	Uu
Ununium	(289)

138	Uu
Ununium	(289)

139	Uu
Ununium	(289)

140	Uu
Ununium	(289)

141	Uu
Ununium	(289)

X B

142	Uu
Ununium	(289)

143	Uu
Ununium	(289)

144	Uu
Ununium	(289)

145	Uu
Ununium	(289)

146	Uu
Ununium	(289)

147	Uu
Ununium	(289)

148	Uu
Ununium	(289)

149	Uu
Ununium	(289)

150	Uu
Ununium	(289)

151	Uu
Ununium	(289)

152	Uu
Ununium	(289)

153	Uu
Ununium	(289)

154	Uu
Ununium	(289)

155	Uu
Ununium	(289)

156	Uu
Ununium	(289)

157	Uu
Ununium	(289)

158	Uu
Ununium	(289)

XI B

159	Uu
Ununium	(289)

160	Uu
Ununium	(289)

161	Uu
Ununium	(289)

162	Uu
Ununium	(289)

163	Uu
Ununium	(289)

164	Uu
Ununium	(289)

165	Uu
Ununium	(289)

166	Uu
Ununium	(289)

167	Uu
Un	

Métaux
 Métalloïdes
 Non-métaux
 Gaz rares

58 Ce 59 Pr 60 Nd 61 Pm 62 Sm 63 Eu 64 Gd 65 Tb 66 Dy 67 Ho 68 Er 69 Tm 70 Yb 71 Lu
 Cérum Praseodyme Néodyme Prométhium Samarium Europium Gadolinium Terbium Dysprosium Holmium Erbium Thulium Ytterbium Lutétium
 90 Th 91 Pa 92 U 93 Np 94 Pu 95 Am 96 Cm 97 Bk 98 Cf 99 Es 100 Fm 101 Md 102 No 103 Lr
 Thorium Protactinium Uranium Néptunium Plutonium Américium Curium Berkélium Californium Einsteinium Fermium Mendelevium Nobelium Lawrencium

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_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 : $\varepsilon_{xx} = \frac{\Delta L_x}{L_{0x}}, \varepsilon_{yy} = \frac{\Delta L_y}{L_{0y}}, \varepsilon_{zz} = \frac{\Delta L_z}{L_{0z}}$ 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 μ d'un liquide [Pa.s] : $\sigma_{xy} = \mu \frac{dv_x}{dy} = \mu \dot{\varepsilon}_{xy}$

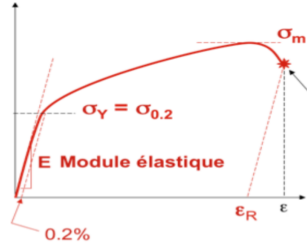
Vitesse de propagation d'une onde [m/s] : $v = \sqrt{E/\rho}$

Densité d'énergie élastique en traction uniaxiale [J/m³=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 : 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 : $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{xx}^{el} + \varepsilon_{xx}^{pl}$

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], 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 + α(l/ρ_{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 γ = $\frac{1}{2} \frac{\varepsilon_0}{r_0^2}$

FATIGUE – USURE

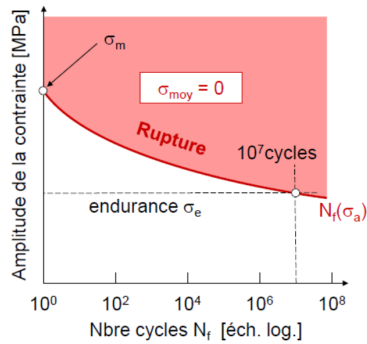
Coefficients de frottements statiques [-] : μ_s ≈ $\frac{F_t}{F_n}$ (v=0)

dynamiques : μ_d ≈ $\frac{F_t}{F_n}$ (v ≠ 0)

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

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

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: $\sum \frac{N_i}{N_{fi}(\sigma_{a,i})} = 1$, avec N_i nombre de cycles de la période i , à l'amplitude $\sigma_{a,i}$.
Loi de Paris: $\frac{dl}{dN} = A \Delta K_I^m$, A, m constantes, l [m] longueur de fissure et N nombre de cycles, K_I 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 $L_c = V(a_1 t)$; 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: $D(T) = D_0 \exp\left[\frac{-Q}{RT}\right]$ [m² s⁻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⁻→4OH⁻

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]