

# FORMULAIRE “Matériaux: de la Chimie aux Propriétés” / FORMULARY “Materials : from Chemistry to Properties”

## DIFFRACTION

Loi de Bragg:

Espacement interplan pour un système cubique

Indices de Miller: direction [hkl], famille de directions {hkl}  
plan (hkl), famille de plans {hkl}

## ELASTICITE

Contrainte uniaxiale

Contrainte de cisaillement

Composantes d'une déformation uniaxiale

Déformation en cisaillement

Module élastique (ou de Young)  $E$

Coefficient de Poisson  $\nu$  (déformation selon  $x$ )

Changement de volume lors d'une déformation uniaxiale selon  $x$

Changement de surface transverse

Module de cisaillement  $G$

Module de compression  $K$

Pour un solide isotrope

Viscosité d'un liquide  $\eta$  [N s m<sup>-2</sup>]

$\tau$ : contrainte de cisaillement,  $\dot{\gamma}$  : taux de cisaillement

Densité d'énergie élastique lors d'une déformation uniaxiale

Module élastique du potentiel de Lennard-Jones

## DURETE – TENACITE

Dureté Vickers

$d$  : Moyenne des diagonales de l'empreinte de dureté

Lien entre dureté et limite élastique

Dureté Brinell

$D$  : diamètre de l'indenteur ;  $d$  : diamètre de l'empreinte

## DIFFRACTION

Bragg's law :

Interplanar spacing for a cubic system :

Miller indices: direction [hkl], set of directions {hkl}  
plane (hkl), set of planes {hkl}

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$$

$$d_{hkl} = a/\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

## ELASTICITY

Uniaxial stress :

Shear stress :

Uniaxial strain components :

Shear strain :

Elastic (or Young's) modulus  $E$  :

Poisson's coefficient  $\nu$  (deformation along  $x$ ) :

Volume change during uniaxial deformation along  $x$

Transverse surface change :

Shear modulus  $G$  :

Compression modulus :

For an isotropic solid :

Viscosity of a fluid  $\eta$  [N s m<sup>-2</sup>] :

$\tau$  : shear stress,  $\dot{\gamma}$  : shear rate

Elastic energy density during uniaxial deformation :

Elastic modulus for Lennard-Jones' potential :

$$\sigma_{xx} = F_x/S_x \text{ [Pa]}$$

$$\tau = \sigma_{xy} = F_x/S_y \text{ [Pa]}$$

$$\varepsilon_{xx} = \Delta L_x/L_{0x}, \varepsilon_{yy} = \Delta L_y/L_{0y}, \varepsilon_{zz} = \Delta L_z/L_{0z}$$

$$\varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \Delta L_x/L_{0y}$$

$$\sigma_{xx} = E \varepsilon_{xx}$$

$$\varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = -\nu \varepsilon_{xx}$$

$$\Delta V/V = (1 - 2\nu)\varepsilon_{xx}$$

$$\Delta S/S_0 = -2\nu\varepsilon_{xx}$$

$$\sigma_{xy} = G 2\varepsilon_{xy} = G \Delta L_x/L_{0y}$$

$$K = -V_0(\Delta p/\Delta V)$$

$$G = \frac{1}{2} E/(1 + \nu) \quad / \quad K = \frac{1}{3} E/(1 - 2\nu)$$

$$\tau (\sigma_{xy}) = \eta \frac{dv_x}{dy} = \eta \dot{\gamma} = \eta \dot{\varepsilon}_{xy}$$

$$w = \frac{1}{2} E \varepsilon_{xx}^2 = \frac{1}{2} \sigma_{xx}^2/E \quad [\text{J m}^{-3} = \text{Pa}]$$

$$E = 72\varepsilon_0/r_0^3$$

$$H_V = 1.854 \times (F/d^2) \text{ [kg mm}^{-2}\text{]}$$

$$H_V[\text{MPa}] = g H_V \cong 3\sigma_Y \text{ [MPa]}$$

$$H_B = 0.102 \frac{2F \text{ [N]}}{\pi D(D - \sqrt{D^2 - d^2}) \text{ [mm}^2\text{]}}$$

$D$  : indenter diameter ;  $d$  : imprint diameter

Facteur d'intensité de contrainte

Rayon de la zone plastique

Ténacité  $K_{1c}$ , résilience  $G_C [\text{Jm}^{-2}] = 2\gamma + G_C^{pl}$

$\gamma$ : énergie de surface ;  $G_C^{pl}$  : énergie plastique

Propagation spontanée d'une fissure

Stress intensity factor :

Radius of the plastic zone :

Toughness  $K_{1c}$ , resilience  $G_C [\text{Jm}^{-2}] = 2\gamma + G_C^{pl}$  :

$\gamma$ : surface energy ;  $G_C^{pl}$  : plastic energy

Spontaneous propagation of a crack :

$$K_1 = \sigma_0 \sqrt{\pi l} \quad [\text{Pa m}^{1/2}]$$

$$r_y = (K_1)^2 / (\pi \sigma_y^2) \quad [\text{m}]$$

$$K_{1c} = \sqrt{G_c E}$$

$$K_1 \geq K_{1c}$$

## PLASTICITE

Limite élastique d'un matériau

Métaux :  $\sigma_{0.2}$  Polymères :  $\sigma_{0.5}$

Résistance maximum

Ductilité d'un matériau : déformation plastique à rupture

Déformation totale

Ecrouissage : augmentation de  $\sigma_Y$  par les dislocations

Dislocation coin :  $\vec{b} \perp \vec{t}$  / Dislocation vis :  $\vec{b} \parallel \vec{t}$

$\vec{b}$  : vecteur de Burgers,  $\vec{t}$  : vecteur de la ligne de dislocation

## PLASTICITY

Elastic limit of a material :

Metals :  $\sigma_{0.2}$  Polymers:  $\sigma_{0.5}$

$$\sigma_Y \quad [\text{Pa}]$$

Ultimate tensile stress :

$$\sigma_{ts} = \sigma_{max} \quad [\text{Pa}]$$

Ductility of a material : plastic deformation at rupture :

$$\varepsilon_R$$

Total strain :

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{xx}^{el} + \varepsilon_{xx}^{pl}$$

Work hardening : increase of  $\sigma_Y$  by dislocations

Edge dislocation :  $\vec{b} \perp \vec{t}$  / Screw dislocation :  $\vec{b} \parallel \vec{t}$

$\vec{b}$  : Burgers vector,  $\vec{t}$  : vector of the dislocation line

## FATIGUE

Pour une contrainte variable  $\pm\sigma_a$  imposée ( $\sigma_{moy} = 0$ ), une courbe de Wöhler reporte  $|\sigma_a|$  en ordonnée et le nombre de cycles à rupture  $N_f(\sigma_a)$  en abscisse

Endurance à la fatigue : contrainte  $\sigma_a$  correspondant à une rupture après

$N_f = 10^7$  cycles

Si l'amplitude de la contrainte  $\pm\sigma_a$  ( $\sigma_{moy} = 0$ ) varie dans le temps, on applique la règle de Miner : il y a rupture lorsque  $\sum \frac{N_i}{N_{fi}(\sigma_{ai})} = 1$

Loi de Paris: l'avance  $dl$  d'une fissure pour un incrément de cycles  $dN$  est telle que :  $\frac{dl}{dN} = A\Delta K_1^m$ ;  $A, m$  constantes

## FATIGUE

For a variable imposed stress  $\pm\sigma_a$  ( $\sigma_{moy} = 0$ ), a Wöhler curve shows  $|\sigma_a|$  on the y-axis and the number of cycles at rupture  $N_f(\sigma_a)$  on the x-axis

Fatigue endurance : stress  $\sigma_a$  corresponding to a rupture after  $N_f = 10^7$  cycles.

When the amplitude of the applied stress  $\pm\sigma_a$  ( $\sigma_{moy} = 0$ ) varies, Miner's rule states that rupture occurs when  $\sum \frac{N_i}{N_{fi}(\sigma_{ai})} = 1$

Paris' law : the propagation  $dl$  of a crack during an increment  $dN$  of the number of cycles is such that :  $\frac{dl}{dN} = A\Delta K_1^m$ ;  $A, m$  constants

## PROPRIETES THERMIQUES

Chaleur spécifique

Chaleur latente de transformation

## THERMAL PROPERTIES

Specific heat :

Latent heat of transformation :

$$c_p = \frac{1}{m} \frac{dH}{dT} \quad [\text{JK}^{-1}\text{kg}^{-1}]$$

$$L = \frac{\Delta H}{m} \quad [\text{J kg}^{-1}]$$

Flux thermique, avec  $\lambda$  conductivité thermique [Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>]

Equation de la chaleur,  $a = \frac{\lambda}{\rho c_p}$  [m<sup>2</sup>s<sup>-1</sup>] diffusivité thermique :

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial j_T}{\partial z} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

Solution de l'équation de la chaleur, pour un milieu semi-infini ayant une température initiale  $T_2$  avec une température imposée  $T_1$  en  $z = 0$  :

Solution of the heat flow equation, for a semi-infinite media having an initial temperature  $T_2$  and an imposed surface temperature  $T_1$  at  $z = 0$  :

$$T(z, t) = T_1 - (T_1 - T_2) \times \operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{at}}\right) \quad \text{avec/with} \quad \operatorname{erf}(s) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^s e^{-\tau^2} d\tau$$

Coefficient d'expansion thermique linéaire

Déformation thermique

Nombre de Fourier,  $L/t^*$  : distance/temps caractéristiques

Heat flux, with  $\lambda$  thermal conductivity [Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>] :

$$j_T = -\lambda \frac{dT}{dz} [\text{Wm}^{-2}]$$

Heat flow equation,  $a = \frac{\lambda}{\rho c_p}$  [m<sup>2</sup>s<sup>-1</sup>] thermal diffusivity of the material :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

Linear thermal expansion coefficient :

Thermal deformation :

Fourier number,  $L/t^*$  characteristic distance/time :

$$\alpha = dL/dT L^{-1} [\text{K}^{-1}]$$

$$\varepsilon_{xx}^{th} = \Delta L/L_0 = \alpha (T_1 - T_2)$$

$$\text{Fo} = at^*/L^2$$

## DIFFUSION ATOMIQUE

Coefficient de diffusion

$Q$  énergie d'activation [J mol<sup>-1</sup>],  $D_0$  coefficient pré-exponentiel [m<sup>2</sup>s<sup>-1</sup>]

1<sup>ère</sup> Loi de Fick : flux d'une espèce chimique

avec  $C$  : concentration [mole m<sup>-3</sup>]

2<sup>ème</sup> loi de Fick :

Nombre de Fourrier chimique ( $L$  : distance;  $t^*$  : temps)

## ATOMIC DIFFUSION

Diffusion coefficient :

$$D(T) = D_0 \exp\left[-\frac{Q}{RT}\right]$$

with  $Q$  activation energy [J mol<sup>-1</sup>],  $D_0$  pre-exponentiel coefficient [m<sup>2</sup>s<sup>-1</sup>]

1<sup>st</sup> Fick's law : flux of chemical species :

$$j_c = -D \frac{\partial C}{\partial z} [\text{mole m}^{-2}\text{s}^{-1}]$$

with  $C$  : concentration [mole m<sup>-3</sup>]

2<sup>nd</sup> Fick's law :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial j_c}{\partial z} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$$

Chemical Fourier number ( $L$  : distance;  $t^*$  : time) :

$$\text{Fo}_C = Dt^*/L^2$$

## DIAGRAMME DE PHASES

Composition molaire/atomique (système binaire A+B)

Composition massique (système binaire A+B)

Règle des phases de Gibbs

## PHASE DIAGRAM

Molar/atomic composition (binary system A+B) :

$$X_A = \frac{N_A}{N_A + N_B}$$

Mass composition (binary system A+B) :

$$C_A = \frac{m_A}{m_A + m_B}$$

$$N_{DL} = 2 + N_C - N_P$$

avec  $N_{DL}$  : nombre de degrés de liberté ;  $N_C$  : nombre de composants ;  $N_P$  : nombre de phases présentes dans le système

with  $N_{DL}$  : number of free parameters ;  $N_C$  : number of components ;  $N_P$  : number of phases present in the system

Loi des leviers déterminant la quantité d'une phase  $\alpha$ , molaire, dans une région biphasée ( $\alpha + \beta$ ):

Lever rule giving the amount of phase  $\alpha$  (molar) in a 2-phase region ( $\alpha + \beta$ ) :

avec :  $X_{B0}$  : composition nominale ;  $X_{B\alpha}$  : composition en B dans la phase  $\alpha$ ;  $X_{B\beta}$  : composition en B dans la phase  $\beta$

$$\chi_\alpha = \frac{X_{B\beta} - X_{B0}}{X_{B\beta} - X_{B\alpha}}$$

with :  $X_{B0}$  : nominal composition ;  $X_{B\alpha}$  : composition in B of phase  $\alpha$ ;  $X_{B\beta}$  : composition in B of phase  $\beta$

## PROPRIETES ELECTRIQUES

Dipôle électrique  $\vec{p}$  [As m] ; Polarisation  $\vec{P} = \frac{1}{V} \sum_i \vec{p}_i$  [Asm<sup>-2</sup>]

Constante diélectrique relative du matériau

Relation entre champ électrique  $\vec{E}$  [V/m] et polarisation  $\vec{P}$

Charge d'un condensateur  $Q$ , potentiel appliqué  $V$

La capacitance  $C$  d'un condensateur plan, surface  $S$ , espacement  $d$ , rempli par une diélectrique, est donnée par:

The capacity  $C$  of a planar capacity, surface  $S$ , spacing  $d$ , filled with a dielectric, is given by :

Coefficient de perte diélectrique

Résistance électrique d'un conducteur métallique de section  $S$ , de longueur  $L$ , et de résistivité  $\rho_e$  [Ωm] :

Electrical resistance of a metallic conductor, section  $S$ , length  $L$ , resistivity  $\rho_e$  [Ωm] :

Loi d'Ohm, avec le courant électrique  $I = j_e S$

Modèle de Drude pour la conductivité électrique d'un métal

avec la conductivité électrique

Densité d'électrons « libres » dans la bande de conduction pour un semi-conducteur, ayant un gap d'énergie  $E_g$  :

Density of « free » electrons in the conduction band of a semi-conductor, characterized by an energy gap  $E_g$  :

## ELECTRICAL PROPERTIES

Electric dipole  $\vec{p}$  [As m] ; Polarization  $\vec{P}$  [Asm<sup>-2</sup>] :

$$\vec{p} = q\vec{d} \quad ; \quad \vec{P} = \frac{1}{V} \sum_i \vec{p}_i$$

Relative dielectric constant of the material :

$$\varepsilon_r$$

Relation between electric field  $\vec{E}$  [V/m] and polarisation  $\vec{P}$  :

$$\vec{P} = \varepsilon_0(\varepsilon_r - 1)\vec{E}$$

Electric charge of a capacity  $Q$ , potential appliquéd  $V$  :

$$Q = C V$$

$$C = \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{S}{d}$$

$$L_E = \varepsilon_r \tan \delta$$

$$R = \rho_e \frac{L}{S}$$

$$U = RI \quad [V]$$

$$\vec{j}_e = -en_e \vec{v} = en_e \mu_e \vec{E} = \sigma_e \vec{E}$$

$$\sigma_e = en_e \mu_e = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e}$$

$$n_e = n_i \exp[-E_a/(k_B T)]$$

$$E_a \approx E_g / 2$$

## PROPRIETES MAGNETIQUES

Moment magnétique dipolaire d'une charge  $q_e$  en rotation

Moment magnétique orbital d'un électron ( $l, m_l$ )

Magneton de Bohr

Moment magnétique associé à un spin  $m_s$

Aimantation (vecteur) d'un matériau

Aimantation d'un matériau dans un champ magnétique  $\vec{H}$  [A/m]

Susceptibilité magnétique du matériau

Relation entre champ d'induction magnétique  $\vec{B}$  [Vsm<sup>-2</sup>], champ magnétique  $\vec{H}$  [Am<sup>-1</sup>] et aimantation  $\vec{M}$  [Am<sup>-1</sup>] :

Relation between magnetic induction  $\vec{B}$  [Vsm<sup>-2</sup>], magnetic field  $\vec{H}$  [Am<sup>-1</sup>] and magnetization  $\vec{M}$  [Am<sup>-1</sup>] :

Champ magnétique dans un solénoïde avec  $N$  spires sur une longueur  $D$  dans lesquelles circule un courant  $I$  :

Magnetic field in a coil made of  $N$  turns over a length  $D$  within which a current  $I$  flows :

## MAGNETIC PROPERTIES

Magnetic dipole of a rotating charge  $q_e$  :

Magnetic moment of an ( $l, m_l$ ) electron :

Bohr's magneton :

Magnetic moment associated with a spin  $m_s$  :

Magnetization (vector) of a material :

Magnetization of a material in a magnetic field  $\vec{H}$  [A/m] :

Magnetic susceptibility of a material :

$$\vec{m} = 1/2q_e \vec{r} \times \vec{v} \quad [\text{Am}^2]$$

$$|\vec{m}| = -\mu_B \sqrt{l(l+1)} m_l$$

$$\mu_B = \frac{|q_e| \hbar}{2m_e} = 9.274 \times 10^{-24} \text{ Am}^2$$

$$|\vec{m}| = 2\mu_B m_s$$

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_i \vec{m}_i [\text{Am}^{-1}]$$

$$\vec{M} = \chi_M \vec{H},$$

$$\chi_M$$

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}) = \mu_0 \mu_r \vec{H}$$

$$\mu_r = (1 + \chi_M)$$

$$H = NI/D$$

## PROPRIETES OPTIQUES

Coefficient d'absorption d'un milieu « transparent »

Loi de Lambert-Beer : flux de photons  $\phi(x, \lambda)$  de longueur d'onde  $\lambda$  après une distance  $x$  de propagation dans un milieu :

Lambert-Beer's law : flux of photons  $\phi(x, \lambda)$ , of wavelength  $\lambda$ , after a propagation distance  $x$  in a material :

Energie d'un photon de longueur d'onde  $\lambda$

Loi de la réfraction : à l'interface entre 2 milieux d'indice de réfraction  $n_1$  et  $n_2$ , le changement de direction de propagation de la lumière suit la loi :  $n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2$

Refraction law : at the interface of 2 media of refraction indices  $n_1$  and  $n_2$ , the change of propagation direction of light follows the law :  $n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2$

## OPTICAL PROPERTIES

Absorption coefficient of a « transparent » material :

$$\beta(\lambda) [\text{m}^{-1}]$$

$$\phi(x, \lambda) = \phi_0(\lambda) \exp(-\alpha(\lambda)x)$$

$$E = h\nu \quad \text{avec/with } v = c/\lambda$$