

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

CONSTANTES ET VALEURS

Vitesse de la lumière
Accélération terrestre
Constante de Planck
Constante de Boltzmann
Nombre d’Avogadro
Charge fondamentale
Constante des gaz parfaits

Volume molaire des gaz parfaits
Masse atomique unitaire
Constante de Faraday
Constante de Rydberg
Masse du proton
Masse du neutron
Masse de l’électron
Constante diélectrique du vide
Perméabilité magnétique du vide

CONSTANTS and VALUES

Speed of light
Acceleration due to gravity
Planck’s constant
Boltzmann’s constant
Avogadro’s constant
Fundamental Charge
Gas constant

Molar Volume of a perfect gas
Atomic mass unit
Faraday constant
Rydberg constant
Mass of the proton
Mass of the neutron
Mass of the electron
Permittivity of vacuum
Permeability of vacuum

c 3×10^8 m/s
 g 9.8 m/s²
 h $6,626 \times 10^{-34}$ J s
 k ou k_B $1,38 \times 10^{-23}$ J/K
 N_A 6.022×10^{23} particules mol⁻¹
 e (ou $-q_e$) $1,6 \times 10^{-19}$ C ou As
 $R = N_A k$ $8,314$ 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
 $V_{mol} = R \times 273.15 / p_0$ $22,7$ L mol⁻¹, $p_0 = 1$ bar, $T = 0^\circ\text{C}$
 $\underline{u} = 10^{-3} / N_A$ $1,66 \times 10^{-27}$ kg
 $F = N_A e$ $96\,485$ C mol⁻¹
 $R_\infty = m_e \mu_0^2 e^4 c^3 / (8 h^3)$ $1,097 \times 10^7$ m⁻¹
 m_p $1,672 \times 10^{-27}$ kg = 1 u
 m_n $1,674 \times 10^{-27}$ kg = 1 u
 m_e $9,1 \times 10^{-31}$ kg = $5,485 \times 10^{-4}$ u
 ϵ_0 8.85×10^{-12} A s V⁻¹ m⁻¹
 μ_0 $4\pi \times 10^{-7}$ V s (Am)⁻¹

CONVERSION D’UNITÉS /

$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ $1 \text{ eV} = 1.6021 \times 10^{-19} \text{ J}$

CONVERSION OF UNITS

$1 \text{ N} = \text{kg m s}^{-2}$ $1 \text{ Pa} = 1 \text{ N m}^{-2} = 1 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-2}$ $1 \text{ F} = 1 \text{ As V}^{-1}$ $1 \text{ J} = 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2} = 1 \text{ Ws}$ $1 \text{ T} = \text{Vs m}^{-2}$

STRUCTURE ATOMIQUE /

Equation de De Broglie
Principe d’incertitude
Niveaux d’énergie de l’atome H
Energie de Rydberg
Spectre longueur d’ondes pour H
Energie d’un photon
Principe d’exclusion de Pauli : un jeu (n, ℓ, m_ℓ, m_s) correspond à un seul électron
Règle de Hund: sur une orbitale (n, ℓ) , on fixe d’abord m_s et m_ℓ varie

ATOMIC STRUCTURE

De Broglie equation
Uncertainty principle
Energy levels of the H-atom:
Rydberg energy
Wavelength of the spectra of H:
Energy of a photon
Principle of Pauli : one set (n, ℓ, m_ℓ, m_s) corresponds to one single electron
Hund’s Rule : for a (n, ℓ) orbital, m_s is fixed first while m_ℓ is varied

$\lambda = h / mv$ [m]
 $\Delta mv \cdot \Delta x \geq \frac{1}{2} \hbar$ [J s]
 $E_n = -13.6 \text{ eV } n^{-2}$ ($n = 1, 2, 3, \dots$)
 Ry $13,6 \text{ eV}$
 $\frac{1}{\lambda} = R_\infty \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$ $n_2 > n_1$; λ : longueur d’onde / wavelength
 $E = hc / \lambda = h\nu$ [J]

Potentiel de Lennard-Jones

Lennard-Jones Potential

$$V = \varepsilon_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$

$$F(r) = -\frac{dV}{dr}$$

THERMODYNAMIQUE

Loi des gaz parfaits

+ apporté au système, - enlevé du système

Enthalpie (U : énergie interne, p : pression, V : volume)

Entropie (classiquement)

Variation d'entropie de l'Univers

Chaleur spécifique à p constant

Variation d'énergie libre de Gibbs à T constant

Variation standard de / **Standard Variation of**

- Entropie de réaction / **reaction entropy**

$$\Delta S_r^0 = \sum_{i=1}^p \nu_i S_i^0 (\text{products}) - \sum_{j=1}^r \nu_j S_j^0 (\text{reactants})$$

- Enthalpie ΔH ou énergie libre de Gibbs ΔG de réaction

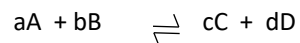
Reaction enthalpy ΔH and Gibbs free energy ΔG : ($X = H, G$)

$$\Delta X_r^0 = \sum_{i=1}^p \nu_i \Delta_f X_i^0 (\text{products}) - \sum_{j=1}^r \nu_j \Delta_f X_j^0 (\text{reactants})$$

Variation de l'énergie libre de Gibbs de réaction avec la composition

Relation entre ΔG_r^0 et K (constante d'équilibre)

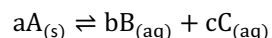
EQUILIBRE



constante d'équilibre / **equilibrium constant**

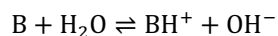
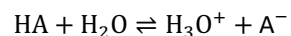
Quotient de réaction / **reaction Quotient**

Solubilité / **solubility** :



Constante de solubilité / **solubility constant** : $K_s = [B]^b [C]^c$

ACIDES ET BASES



Constante de dissociation de l'eau

THERMODYNAMICS

Gas law

+ on the system, - from the system

Enthalpy (U : internal energy, p : pressure, V : volume) :

Entropy (classically) :

Variation of the entropy of the universe :

Specific heat capacity, $p = \text{const.}$:

Variation of Gibbs free energy at constant temperature:

$$pV = nRT$$

$$H = U + pV \quad [\text{kJ mol}^{-1}]$$

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

$$\Delta S_{universe} = \Delta S_{sys} + \Delta S_{env} = \Delta S_r^0 + \frac{-\Delta H_r^0}{T}$$

$$c_p = \frac{1}{m} \frac{dH}{dT} \quad [\text{J K}^{-1} \text{g}^{-1}]$$

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

- $\Delta G_f^0, \Delta H_f^0$ et S^0 mesurés aux conditions standards (et tabulés)

measured at standard conditions (and tabulated)

- avec ν_i, ν_j les coefficients stoechiométriques des produits et réactants

with ν_i, ν_j stoichiometric coefficients of the products and reactants

Variation of Gibbs free energy of reaction with composition:

avec Q le quotient de réaction / **with Q reaction Quotient**

Relation between ΔG_r^0 and K (equilibrium constant) :

$$\Delta G_r = \Delta G_r^0 + RT \ln Q$$

$$\Delta G_r^0 = -RT \ln K$$

EQUILIBRIUM

$$K = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

(concentrations à l'équilibre / **concentrations at equilibrium**)

$$Q = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

(concentrations à tout instant / **concentrations at any moment**)

ACIDS AND BASES

Dissociation constant of water : $K_e = [H_3O^+][OH^-] M^{-2} = 1.0 \times 10^{-14} (@25^\circ\text{C})$

Echelle des pH et pOH
 Relation entre pH et pOH
 Constante d'acidité K_a
 Constante basique K_b
 Relation entre K_a et K_b pour une paire conjuguée acide-base
 pH d'une solution acide forte ($K_a \gg 1$)

pH d'une solution aqueuse diluée d'un acide fort

pH d'une solution acide faible ($K_a \ll 1$) (general)
 Si $[HA]_0 > 100K_a$

pOH d'une solution basique forte ($K_b \gg 1$)

pOH d'une solution aqueuse diluée d'une base forte

pH of a weak base solution (general) ($K_b \ll 1$)
 Si $[B]_0 > 100K_b$

ELECTROCHIMIE

Potentiel standard d'une batterie
 Relation entre ΔG_r^0 et ΔE_{pile}^0

Potentiel standard et constante d'équilibre

Equation de Nernst

Loi de Faraday (F : constante de Faraday)

Avec: n : nombre de moles produit / number of moles of products ;
 z : nombre d'électrons transférés / number of transferred electrons

Scale of pH and pOH : $pH = -\log[H_3O^+]$ $pOH = -\log[OH^-]$
 Relation between pH and pOH : $pH + pOH = 14.00$ (@ 25°C)
 Acidity Constant K_a : $K_a = \frac{[H_3O^+][A^-]}{[HA]}$
 Basicity Constant K_b : $K_b = \frac{[BH^+][OH^-]}{[B]}$
 Relation between K_a and K_b of a conjugate acid-base pair : $K_a K_b = K_e$
 pH of a strong acid solution ($K_a \gg 1$) : $pH = -\log\left(\frac{[H^+]}{1M}\right) = -\log\left(\frac{c_a}{1M}\right)$

$$c_a = [HA]_0 = [H^+] \text{ [mol L}^{-1}\text{]}$$

pH of a diluted aqueous solution of a strong acid : $[H^+] = \frac{c_a + \sqrt{c_a^2 + 4K_e}}{2}$ $c_a < 10^{-6}$

pH of a weak acid solution ($K_a \ll 1$) (general): $[H^+] = x = \frac{-K_a + \sqrt{K_a^2 + 4K_a c_a}}{2}$
 If $[HA]_0 > 100 K_a$: $x = [H^+] = \sqrt{K_a c_a}$ $pH = \frac{1}{2} (pK_a - \log[HA]_0)$

pOH of a strong base solution ($K_b \gg 1$) : $pOH = -\log(c_b/1M)$ $c_b = [B]_0$

pOH of a diluted aqueous solution of a strong base : $[OH]^- = \frac{c_b + \sqrt{c_b^2 + 4K_e}}{2}$ $c_b < 10^{-6}$

pH of a weak base solution (general) ($K_b \ll 1$) : $x = [OH^-] = \frac{-K_b + \sqrt{K_b^2 + 4K_b c_b}}{2}$
 If $[B]_0 > 100K_b$: $x = [OH^-] = \sqrt{K_b c_b}$ $pH = \frac{1}{2} (14 + pK_b + \log[B]_0)$

ELECTROCHEMISTRY

Standard potential of a battery : $\Delta E_{pile}^0 = E^0(\text{cathode}) - E^0(\text{anode})$ [V]
 Relation between ΔG_r^0 and ΔE_{pile}^0 : $\Delta G_r^0 = -zF\Delta E_{pile}^0$

Standard Potential and equilibrium constant : $\ln K = zF\Delta E^0/(RT)$

Nernst equation : $\Delta E = \Delta E^0 - RT/(zF) \ln Q$
 Faraday's law (F : Faraday constant) : $n = It/(zF)$

I : intensité du courant / current intensity
 t : temps / time

Standard Electrode Potentials at 25 °C

Reduction Half-Reaction	E° (V)
$F_2(g) + 2 e^- \longrightarrow 2 F^-(aq)$	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
$Cu^+(aq) + e^- \longrightarrow Cu(s)$	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

Stronger
oxidizing agent

Weaker
reducing agent

Weaker
oxidizing agent

Stronger
reducing agent

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

1																	18
1 H Hydrogen 1.0 <i>a</i>	2 He Helium 4.0026 <i>i</i>																
3 Li Lithium 6.941 1.0 <i>a</i>	4 Be Beryllium 9.0122 1.5 <i>b</i>																
11 Na Sodium 22.990 0.9 <i>a</i>	12 Mg Magnesium 24.305 1.2 <i>b</i>																
19 K Potassium 39.098 0.8 <i>a</i>	20 Ca Calcium 40.078 1.0 <i>b</i>	21 Sc Scandium 44.956 1.3 <i>d</i>	22 Ti Titanium 47.867 1.5 <i>d</i>	23 V Vanadium 50.942 1.6 <i>d</i>	24 Cr Chromium 51.996 1.6 <i>d</i>	25 Mn Manganese 54.938 1.5 <i>d</i>	26 Fe Iron 55.845 1.8 <i>d</i>	27 Co Cobalt 58.933 1.8 <i>d</i>	28 Ni Nickel 58.693 1.8 <i>d</i>	29 Cu Copper 63.546 1.9 <i>d</i>	30 Zn Zinc 65.38 1.6 <i>d</i>	31 Ga Gallium 69.723 1.6 <i>c</i>	32 Ge Germanium 72.64 1.8 <i>f</i>	33 As Arsenic 74.922 2.0 <i>f</i>	34 Se Selenium 78.96 2.4 <i>g</i>	35 Br Bromine 79.904 2.8 <i>h</i>	36 Kr Krypton 83.798 <i>i</i>
37 Rb Rubidium 85.468 0.8 <i>a</i>	38 Sr Strontium 87.62 1.0 <i>b</i>	39 Y Yttrium 88.906 1.2 <i>d</i>	40 Zr Zirconium 91.224 1.4 <i>d</i>	41 Nb Niobium 92.906 1.6 <i>d</i>	42 Mo Molybdenum 95.96 1.8 <i>d</i>	43 (98) Tc Technetium 95 1.9 <i>d</i>	44 Ru Ruthenium 101.07 2.2 <i>d</i>	45 Rh Rhodium 102.91 2.2 <i>d</i>	46 Pd Palladium 106.42 2.2 <i>d</i>	47 Ag Silver 107.87 1.9 <i>d</i>	48 Cd Cadmium 112.41 1.7 <i>d</i>	49 In Indium 114.82 1.7 <i>e</i>	50 Sn Tin 118.71 1.8 <i>c</i>	51 Sb Antimony 121.76 1.9 <i>f</i>	52 Te Tellurium 127.60 2.1 <i>f</i>	53 I Iodine 126.90 2.5 <i>h</i>	54 Xe Xenon 131.29 <i>i</i>
55 Cs Caesium 132.91 0.7 <i>a</i>	56 Ba Barium 137.33 0.9 <i>b</i>	57 - 71 La-Lu Lanthanide	72 Hf Hafnium 178.49 1.3 <i>d</i>	73 Ta Tantalum 180.95 1.5 <i>d</i>	74 W Tungsten 183.84 1.7 <i>d</i>	75 Re Rhenium 186.21 1.9 <i>d</i>	76 Os Osmium 190.23 2.2 <i>d</i>	77 Ir Iridium 192.22 2.2 <i>d</i>	78 Pt Platinum 195.08 2.2 <i>d</i>	79 Au Gold 196.97 2.4 <i>d</i>	80 Hg Mercury 200.59 1.9 <i>d</i>	81 Tl Thallium 204.38 1.8 <i>c</i>	82 Pb Lead 207.20 1.8 <i>c</i>	83 Bi Bismuth 208.98 1.9 <i>e</i>	84 (209) Po Polonium 209 2.0 <i>f</i>	85 (210) At Astatine 210 2.2 <i>h</i>	86 (222) Rn Radon 222 <i>i</i>
87 Fr Francium 223 0.7 <i>a</i>	88 Ra Radium 226 0.9 <i>b</i>	89 - 103 Ac-Lr Actinide	104 (267) Rf Rutherfordium 267 <i>d</i>	105 (268) Db Dubnium 268 <i>d</i>	106 (271) Sg Seaborgium 271 <i>d</i>	107 (272) Bh Bohrium 272 <i>d</i>	108 (277) Hs Hassium 277 <i>d</i>	109 (276) Mt Meitnerium 276 <i>d</i>	110 (281) Ds Darmstadtium 281 <i>d</i>	111 (280) Rg Roentgenium 280 <i>d</i>	112 (285) Cn Copernicium 285 <i>d</i>	113 (284) Nh Nihonium 284 <i>d</i>	114 (289) Fl Flerovium 289 <i>c</i>	115 (288) Mc Moscovium 288 <i>e</i>	116 (292) Lv Livermorium 292 <i>c</i>	117 (294) Ts Tennessine 294 <i>h</i>	118 (294) Og Oganesson 294 <i>i</i>
57 La Lanthanum 138.91 1.1 <i>e</i>	58 Ce Cerium 140.12 1.1 <i>e</i>	59 Pr Praseodymium 140.91 1.1 <i>e</i>	60 Nd Neodymium 144.24 1.1 <i>e</i>	61 (145) Pm Promethium 145 1.1 <i>e</i>	62 Sm Samarium 150.36 1.2 <i>e</i>	63 Eu Europium 151.96 1.1 <i>e</i>	64 Gd Gadolinium 157.25 1.2 <i>e</i>	65 Tb Terbium 158.93 1.1 <i>e</i>	66 Dy Dysprosium 162.50 1.2 <i>e</i>	67 Ho Holmium 164.93 1.2 <i>e</i>	68 Er Erbium 167.26 1.2 <i>e</i>	69 Tm Thulium 168.93 1.3 <i>e</i>	70 Yb Ytterbium 173.05 1.1 <i>e</i>	71 Lu Lutetium 174.97 1.1 <i>e</i>			
89 (227) Ac Actinium 227 1.1 <i>j</i>	90 Th Thorium 232.04 1.3 <i>j</i>	91 Pa Protactinium 231.04 1.5 <i>j</i>	92 U Uranium 238.03 1.4 <i>j</i>	93 (237) Np Neptunium 237 1.4 <i>j</i>	94 (244) Pu Plutonium 244 1.3 <i>j</i>	95 (243) Am Americium 243 1.3 <i>j</i>	96 (247) Cm Curium 247 1.3 <i>j</i>	97 (247) Bk Berkelium 247 1.3 <i>j</i>	98 (251) Cf Californium 251 1.3 <i>j</i>	99 (252) Es Einsteinium 252 1.3 <i>j</i>	100 (257) Fm Fermium 257 1.3 <i>j</i>	101 (258) Md Mendelevium 258 1.3 <i>j</i>	102 (259) No Nobelium 259 1.3 <i>j</i>	103 (262) Lr Lawrencium 262 <i>j</i>			