

et γ' est le paramètre de Grüneisen dans l'état non déformé (en effet $\gamma_{ij} = \gamma \delta_{ij}$ pour un cristal cubique).

Il faut signaler que l'équation du quatrième ordre est en fait une modification au même ordre de l'équation d'état de Mie-Grüneisen :

$$(10) \quad P = - \frac{d\varphi}{dV} + \gamma \frac{U_s}{V},$$

équation établie au troisième ordre.

2. Calcul des constantes de l'équation du quatrième ordre

Les constantes V' , K' , γ' , λ , Γ et Λ sont solutions d'un système non linéaire de six équations à six inconnues obtenu en écrivant.

1° l'équation (9) dans l'état zéro défini par $P = 0$, $T = T_0 = 300$ K (qui détermine implicitement V');

2° les dérivées partielles premières de (9) par rapport aux trois paramètres d'état;

3° la dérivée partielle seconde de (9) par rapport à P et

4° en formant les combinaisons appropriées de ces dérivées partielles, calculées dans l'état zéro, on établit les expressions donnant les autres constantes.

Le système obtenu est le suivant [2] :

$$(11) \quad \left\{ \begin{array}{l} 0 = A_0 - \frac{3}{2} \Gamma A_0^2 + \frac{3}{2} \Lambda A_0^3 - \frac{U'_{s0}}{V' K'} \left\{ \frac{\gamma'}{3} + \left[\lambda - \gamma'^2 \left(1 - \frac{\Gamma C'_{r0}}{U'_{s0}} \right) \right] A_0 \right\}, \\ K' = K'_0 \left(\frac{V_0}{V'} \right)^{-1/3} \left\{ 1 - 3 \Gamma A_0 + \frac{9}{2} \Lambda A_0^2 - \frac{U'_{s0}}{V' K'} (\lambda - \gamma'^2) \right\}^{-1}, \\ \gamma' = \frac{V' K_0 \alpha_0}{C'_{r0}} \left(\frac{V_0}{V'} \right)^{1/3} \left\{ 1 + 3 \left[\frac{\lambda}{\gamma'} + \gamma' \frac{d \ln C'_r}{d \ln T} \right]_0 A_0 \right\}^{-1}, \\ \lambda = \frac{V'}{C'_{r0}} \left(\frac{V_0}{V'} \right)^{-1/3} \left\{ \alpha_0 K_0 \left(K'_0 - \frac{1}{3} \right) + \left[\frac{\partial K^s}{\partial T} \right]_0 \right\} + \gamma'^2, \\ \Gamma = \frac{K_0}{K'} \left(\frac{V_0}{V'} \right)^{-1} \left(\frac{\partial K}{\partial P} \right)_{T_0} + 3 \Lambda A_0, \\ \Lambda = \frac{K_0}{K'} \left(\frac{V_0}{V'} \right)^{-5/3} \\ \quad \times \left\{ K_0 \left(\frac{\partial^2 K}{\partial P^2} \right)_{T_0} + \left(\frac{\partial K}{\partial P} \right)_{T_0} \left[\left(\frac{\partial K}{\partial P} \right)_{T_0} + 1 \right] - \frac{1}{9} \right\}. \end{array} \right.$$