

MÉCANIQUE DES SOLIDES. — *Équation d'état au troisième ordre pour les solides cristallins appartenant aux systèmes qui ont un axe de symétrie principal.* Note de M^{lle} Michèle Delannoy et M. Gérard Perrin, présentée par M. Paul Germain.

On étudie un développement en série de Taylor (au troisième ordre par rapport aux composantes du tenseur des déformations de Green-Lagrange) de la pression s'exerçant sur un solide cristallin. On obtient une équation d'état dont l'expression analytique a la même forme pour les cristaux des systèmes hexagonal, rhomboédrique et quadratique. La formulation générale est ensuite appliquée au calcul des courbes de compressibilité isotherme du zinc, du quartz et de l'étain.

Dans une précédente Note ⁽¹⁾ nous avons étudié une équation d'état au troisième ordre pour les solides cristallins appartenant uniquement au système hexagonal. Nous avons pour but de généraliser ce modèle d'équation d'état à tous les systèmes cristallins qui possèdent un axe de symétrie principal d'ordre supérieur ou égal à 3; dans ces systèmes chaque axe de symétrie (autre que l'axe principal) est orthogonal à l'axe principal, de plus chaque plan de symétrie passe par cet axe ou lui est orthogonal ⁽²⁾. Le fondement d'une théorie au troisième ordre est contenu dans le développement suivant de l'énergie libre f du cristal :

$$(1) \quad f(\bar{A}, T) = f(0, T) + \frac{\bar{V}}{2!} \bar{C}_{ijkl} \bar{A}_{ij} \bar{A}_{kl} + \frac{\bar{V}}{3!} \bar{C}_{ijklmn} \bar{A}_{ij} \bar{A}_{kl} \bar{A}_{mn} - \bar{\gamma}_{ij} \bar{A}_{ij} \bar{e}_{vib}(T),$$

les indices i, j, \dots variant de 1 à 3. \bar{C}_{ijkl} et \bar{C}_{ijklmn} sont les constantes élastiques des deuxième et troisième ordres évaluées dans la configuration naturelle du solide (notée partout avec une barre) pour laquelle le volume spécifique est \bar{V} . Les $\bar{\gamma}_{ij}$ sont les composantes du tenseur de Grüneisen ($\bar{\gamma}$); $\bar{e}_{vib}(T)$ est l'énergie interne spécifique due aux vibrations des particules autour de la configuration naturelle, fonction uniquement de la température absolue T . Enfin, les \bar{A}_{ij} sont les composantes du tenseur de Green-Lagrange (\bar{A}) mesurant la déformation de la configuration naturelle (pression $P = 0$, température $T = 0$) à la configuration d'équilibre (pression P , température T). On a

$$\bar{A}_{ij} = \frac{1}{2} (\bar{F}_{ki} \bar{F}_{kj} - \delta_{ij}),$$

où les \bar{F}_{ij} sont les éléments de la matrice gradient de la déformation (\bar{F}). L'égalité (1) est valable pour les cristaux de toutes symétries. La pression d'équilibre P est ensuite donnée par l'équation

$$(2) \quad P = -\frac{1}{3\bar{V}} (\delta_{ij} + 2\bar{A}_{ij}) \left(\frac{\partial f}{\partial \bar{A}_{ij}} \right)_T,$$

qui résulte de l'application du premier principe de la thermodynamique.

L'expression (1) permet également d'obtenir, en fonction de la déformation et de la température, les modules élastiques isothermes du solide cristallin sous la forme ⁽³⁾ :

$$(3) \quad C_{ijkl}(\bar{A}, T) = -P \delta_{ijkl} + \frac{\bar{V}}{V} \bar{F}_{im} \bar{F}_{jn} \bar{F}_{kp} \bar{F}_{lq} (\bar{C}_{mnpq} + \bar{C}_{mnpqrs} \bar{A}_{rs}),$$

avec

$$\delta_{ijkl} = -\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ij} \delta_{ik} + \delta_{il} \delta_{jk}.$$

1. ÉQUATION D'ÉTAT AU TROISIÈME ORDRE POUR LES CRISTAUX DES SYSTÈMES RHOMBOÉDRIQUE ET HEXAGONAL. — Les systèmes rhomboédrique et hexagonal sont caractérisés respectivement par un axe de symétrie principal d'ordre 3 et d'ordre 6. Dans ce paragraphe les composantes des tenseurs sont rapportées à la base orthonormée directe $\mathcal{B}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3)$ telle que \mathbf{x}_3 soit colinéaire à l'axe d'ordre 3 ou d'ordre 6. On sait que la symétrie d'un cristal est reliée à la symétrie de ses propriétés physiques par le principe de Neumann. Ainsi,

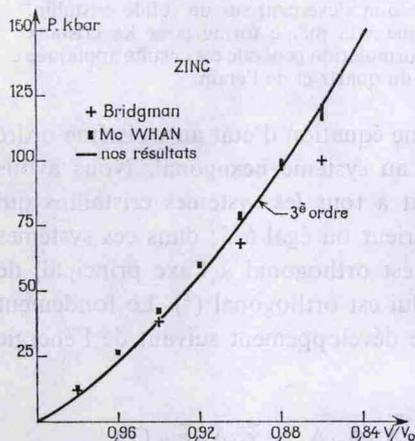


Fig. 1

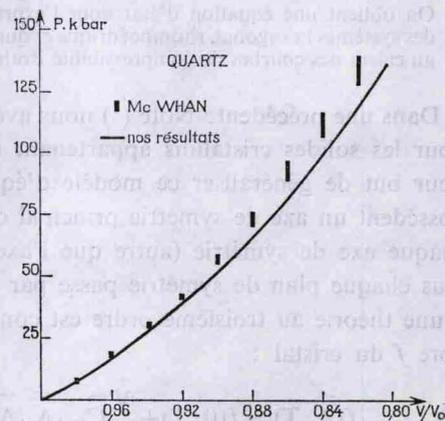


Fig. 2

pour un cristal du système hexagonal ou rhomboédrique, on a les relations suivantes entre les constantes élastiques ⁽⁴⁾ :

$$\begin{aligned} \bar{C}_{22} &= \bar{C}_{11}; & \bar{C}_{23} &= \bar{C}_{13}; & \bar{C}_{122} &= \bar{C}_{111} - \bar{C}_{222} + \bar{C}_{112}; \\ \bar{C}_{223} &= \bar{C}_{113}; & \bar{C}_{233} &= \bar{C}_{133}, \end{aligned}$$

en utilisant la notation générale de Voigt.

D'autre part, en compression uniforme, les seules composantes non nulles dans \mathcal{B} des tenseurs de Green-Lagrange (\bar{A}) et de Grüneisen ($\bar{\gamma}$) sont respectivement : $\bar{A}_1, \bar{A}_2 = \bar{A}_1, \bar{A}_3$ et $\bar{\gamma}_1, \bar{\gamma}_2 = \bar{\gamma}_1, \bar{\gamma}_3$. Les formules (1) et (2), compte tenu de ce qui précède, conduisent à l'équation d'état, valable à la fois pour les cristaux du système hexagonal et du système rhomboédrique :

$$\begin{aligned} (4) \quad P = & -\frac{\bar{V}}{3\bar{V}} \left(2(\bar{x} + \bar{y})\bar{A}_1 + (4\bar{x} + \bar{W} + \bar{X})\bar{A}_1^2 + 2\bar{W}\bar{A}_1^3 + (2\bar{y} + \bar{z})\bar{A}_3 \right. \\ & + \left(2\bar{z} + \bar{Y} + \frac{\bar{Z}}{2} \right) \bar{A}_3^2 + \bar{Z}\bar{A}_3^3 + 2(4\bar{y} + \bar{X} + \bar{Y})\bar{A}_1\bar{A}_3 + 6\bar{X}\bar{A}_1^2\bar{A}_3 \\ & \left. + 6\bar{Y}\bar{A}_1\bar{A}_3^2 - \frac{\bar{e}_{\text{vib}}(T)}{\bar{V}} [2\bar{\gamma}_1(1 + 2\bar{A}_1) + \bar{\gamma}_3(1 + 2\bar{A}_3)] \right). \end{aligned}$$

où l'on a posé

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \bar{C}_{11} + \bar{C}_{12}; & \bar{y} &= \bar{C}_{13}; & \bar{z} &= \bar{C}_{33}; \\ \bar{W} &= 2\bar{C}_{111} + 3\bar{C}_{112} - \bar{C}_{222}; & \bar{X} &= \bar{C}_{113} + \bar{C}_{123}; & \bar{Y} &= \bar{C}_{133}; & \bar{Z} &= \bar{C}_{333}. \end{aligned}$$