

Classification
 Physics Abstracts
 7.400 — 7.420 — 7.220

ÉTUDE D'UNE ÉQUATION D'ÉTAT AU TROISIÈME ORDRE. APPLICATION AU MAGNÉSIUM, AU ZINC ET AU QUARTZ

M. DELANNOY

Centre Scientifique et Polytechnique, place du 8 Mai 1945, 93206 Saint-Denis, France

G. PERRIN

Université de Rennes, B.P. 25 A, 35031 Rennes Cedex, France

(Reçu le 29 octobre 1975, révisé le 5 février 1975 et le 20 mai 1975, accepté le 19 juin 1975)

Résumé. — En utilisant la théorie des déformations finies d'un solide élastique en évolution isotherme, on détermine un modèle d'équation d'état valable pour les solides cristallins du système hexagonal et pour ceux du système rhomboédrique. Cette équation d'état est obtenue en développant l'énergie de déformation en série de Taylor du troisième ordre par rapport au tenseur qui mesure la déformation à partir de l'état naturel (pression $P = 0$, température $T = T^0$). On peut interpréter les groupements de constantes élastiques des deuxième et troisième ordres qui apparaissent dans cette équation à l'aide des modules élastiques usuels et de leurs dérivées par rapport à la pression. Enfin, on utilise l'équation d'état du troisième ordre pour calculer les courbes de compressibilité à température ambiante du magnésium, du zinc et du quartz et on les compare aux courbes expérimentales.

Abstract. — Using the theory of finite deformation of an elastic solid in isothermal evolution, we determine an equation of state for the case of hexagonal and trigonal crystals. This equation of state is obtained by expanding the strain energy as a Taylor series, truncated at the third-order, in the tensor which measure the strain from the natural state (pressure $P = 0$, temperature $T = T^0$). We can interpret the combinations of second and third-order elastic constants in terms of usual elastic moduli and of their pressure derivatives. Finally, using the third-order equation of state, we calculate room-temperature isotherms for magnesium, zinc and quartz, and we compare our results with the experimental values.

1. **Introduction.** — L'étude des déformations finies d'un solide cristallin, assimilé à un milieu continu, est un problème difficile en raison du nombre important de données et d'inconnues qui entrent en jeu. L'énergie potentielle de déformation fait intervenir au moins des termes du troisième ordre par rapport aux déformations et l'expression de cette énergie devient très difficile à formuler si l'on n'envisage pas des cristaux possédant un haut degré de symétrie. L'objet de ce travail est l'étude du comportement à haute pression des solides cristallins appartenant aux systèmes hexagonal et rhomboédrique. Dans un tel cas, on sait que les transformations, dues à de hautes pressions, qui interviennent dans les caractéristiques mécaniques du solide, sont plus importantes que celles dues aux contraintes de cisaillement; le tenseur des contraintes peut donc être considéré comme un tenseur purement sphérique.

Après quelques rappels sur la thermoélasticité des déformations finies d'un solide élastique et sur la symétrie des systèmes hexagonal et rhomboédrique,

nous avons formé une équation d'état valable à la fois pour les cristaux du système hexagonal et du système rhomboédrique. Cette équation d'état permet de déterminer, pour chaque solide cristallin des deux systèmes étudiés, la courbe de compressibilité isotherme à température ambiante.

Nous avons choisi d'appliquer l'équation d'état obtenue au magnésium, au zinc et au quartz, et nous avons comparé nos résultats avec les valeurs expérimentales trouvées dans la littérature.

2. **Rappel sur les équations de la thermoélasticité.** — La théorie classique de la thermoélasticité non linéaire est un point de départ naturel pour traduire mathématiquement le comportement mécanique d'un solide cristallin en déformations finies. Cette théorie est un modèle physiquement réaliste [1] pour les déformations réversibles des cristaux soumis à de hautes pressions.

Considérons un solide cristallin en compression hydrostatique et prenons comme configuration de

référence l'état naturel du solide, qui correspond à une pression nulle et à une température absolue uniforme T_0 . Soient respectivement a_i et x_i , l'indice variant de 1 à 3, les coordonnées, par rapport à un même repère orthonormé, d'une particule, dans la configuration de référence et dans la configuration après déformation définie par la pression P et par la température absolue T .

La déformation est décrite par le tenseur symétrique de Green-Lagrange (\mathbf{A}), de composantes :

$$A_{ij} = \frac{1}{2}(F_{ki} F_{kj} - \delta_{ij}) \quad (1)$$

où $F_{ij} = \partial x_i / \partial a_j$ sont les composantes du gradient de la déformation. Nous utilisons toujours la convention d'Einstein impliquant une sommation sur les indices muets répétés.

Soit $f(T, \mathbf{A})$, l'énergie libre spécifique, le premier principe de la thermodynamique permet d'écrire [1] :

$$df(T, \mathbf{A}) = -s dT + \omega \quad (2)$$

où s est l'entropie spécifique et ω le travail élémentaire reçu au cours de la déformation.

Le second principe de la thermodynamique se traduit par l'inégalité :

$$-\frac{1}{T} \mathbf{q} \cdot \text{grad } T \geq 0 \quad (3)$$

où \mathbf{q} est le vecteur courant de chaleur.

On montre que [2] :

$$\omega = \pi_{ij} dA_{ij} \quad (4)$$

où (π) est le tenseur symétrique de Piola-Kirchoff, relié au tenseur des contraintes de Cauchy (σ) par :

$$\pi_{ij} = V \frac{\partial a_i}{\partial x_p} \frac{\partial a_j}{\partial x_q} \sigma_{pq} \quad (5)$$

où V est le volume spécifique dans la configuration déformée.

On déduit alors des égalités (2) et (4) :

$$\pi_{ij} = \left(\frac{\partial f}{\partial A_{ij}} \right)_T \quad (6)$$

(6) représente l'équation d'état d'un solide cristallin sous sa forme la plus générale.

On peut également, en utilisant l'éq. (5), exprimer cette équation d'état à l'aide du tenseur de Cauchy (σ) :

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V} F_{ik} F_{jl} \left(\frac{\partial f}{\partial A_{kl}} \right)_T \quad (7)$$

En compression hydrostatique, on a $\sigma_{ij} = -P\delta_{ij}$; par suite :

$$-P\delta_{ij} = \frac{1}{V} F_{ik} F_{jl} \left(\frac{\partial f}{\partial A_{kl}} \right)_T$$

d'où :

$$-P\delta_{ii} = \frac{1}{V} F_{ik} F_{il} \left(\frac{\partial f}{\partial A_{kl}} \right)_T$$

ce qui s'écrit encore, compte tenu de $\delta_{ii} = 3$ et $\delta_{kl} + 2A_{kl} = F_{ik} F_{il}$:

$$P = -\frac{1}{3V} (\delta_{kl} + 2A_{kl}) \left(\frac{\partial f}{\partial A_{kl}} \right)_T \quad (8)$$

3. Etude des systèmes hexagonal et rhomboédrique.

— L'état cristallin est caractérisé par son ordre; toutes les particules qui forment le cristal sont régulièrement disposées, ce qui conduit à l'existence d'une symétrie cristalline et par suite à des propriétés d'anisotropie.

La symétrie d'un cristal est définie par les déplacements qui amènent ce cristal à coïncider avec lui-même. Le système hexagonal est caractérisé par un axe de répétition d'ordre six, et le système rhomboédrique par un axe de répétition d'ordre trois [3]. Dans les phénomènes macroscopiques, un cristal se conduit comme un milieu homogène et les propriétés physiques macroscopiques du cristal ne dépendent que des directions, la symétrie du cristal étant reliée à la symétrie de ses propriétés physiques par le principe de Neumann [4].

La déformation d'un cristal ne constitue pas l'une de ses propriétés physiques caractéristiques, elle constitue la réponse du cristal à une sollicitation extérieure. La déformation produite par une contrainte mécanique ne possède donc pas nécessairement la symétrie du cristal. Cependant, pour un cristal des systèmes hexagonal ou rhomboédrique en compression hydrostatique, l'ellipsoïde associé au tenseur des déformations de Green-Lagrange est de révolution autour de l'axe de répétition [4].

Dans la suite, nous utiliserons toujours le repère orthonormé direct $R(0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3)$ tel que $(0, \mathbf{x}_3)$ soit dirigé suivant l'axe de répétition d'ordre six dans le cas du système hexagonal et suivant l'axe de répétition d'ordre trois dans le cas du système rhomboédrique. Les seules composantes non nulles dans R du tenseur de Green-Lagrange (\mathbf{A}) sont alors : A_{11} , $A_{22} = A_{11}$, A_{33} .

4. Equation d'état au troisième ordre pour les solides appartenant aux systèmes hexagonal et rhomboédrique.

— Nous supposons désormais que l'évolution du solide cristallin est isotherme; la température T reste constante au cours de la déformation, soit $T = T_0$ (température ambiante). Dans ces conditions, l'énergie libre f ne dépend que des composantes du tenseur des déformations de Green-Lagrange, et il en est évidemment de même des formules traduisant l'équation d'état (8). On peut alors introduire la fonction $W(\mathbf{A})$, définie par :

$$W(\mathbf{A}) = \frac{1}{V_0} f(T_0, \mathbf{A})$$