

$W$  est l'énergie de déformation rapportée à l'unité de volume de la configuration de référence. La connaissance de cette fonction suffit pour décrire le comportement mécanique du solide. Les effets mécaniques et thermiques sont découplés, les premiers pouvant être étudiés indépendamment des seconds. D'autre part l'inégalité traduisant le second principe est automatiquement satisfaite.

L'énergie de déformation  $W(\mathbf{A})$  peut être développée en série de Taylor autour de la configuration de référence sous la forme :

$$W(\mathbf{A}) = W(0) + \frac{1}{2!} C_{ijkl} A_{ij} A_{kl} + \frac{1}{3!} C_{ijklmn} A_{ij} A_{kl} A_{mn} \quad (9)$$

le développement s'arrêtant au troisième ordre dans l'approximation où nous nous plaçons.

Le terme linéaire n'intervient pas dans ce développement, car on tient compte du fait que la configuration de référence est une configuration d'équilibre pour laquelle l'énergie  $W$  est minimale par rapport à la déformation.

On a :

$$C_{ijkl} = \left. \frac{\partial^2 W}{\partial A_{ij} \partial A_{kl}} \right|_0 \quad (10)$$

constantes élastiques thermodynamiques du second ordre dans la configuration de référence et :

$$C_{ijklmn} = \left. \frac{\partial^3 W}{\partial A_{ij} \partial A_{kl} \partial A_{mn}} \right|_0 \quad (11)$$

constantes élastiques thermodynamiques du troisième ordre dans la configuration de référence.

Pour un cristal du système hexagonal ou du système rhomboédrique, on a [5], en utilisant la notation générale de Voigt :

$$\begin{aligned} C_{22} &= C_{11}; & C_{23} &= C_{13}; \\ C_{122} &= C_{111} - C_{222} + C_{112}; & \\ C_{223} &= C_{113}; & C_{233} &= C_{133}. \end{aligned} \quad (12)$$

(Le schéma pour remplacer un couple d'indices par un seul indice est classique [6] : (11)  $\rightarrow$  1; (22)  $\rightarrow$  2; (33)  $\rightarrow$  3; (23) = (32)  $\rightarrow$  4; (31) = (13)  $\rightarrow$  5; (12) = (21)  $\rightarrow$  6.)

Le tenseur de Green-Lagrange ( $\mathbf{A}$ ) étant diagonal, l'énergie de déformation  $W$  a pour expression :

$$\begin{aligned} W &= W(0) + \frac{1}{2}(C_{11} A_1^2 + C_{22} A_2^2 + C_{33} A_3^2) + \\ &+ (C_{12} A_1 A_2 + C_{13} A_1 A_3 + C_{23} A_2 A_3) \\ &+ \frac{1}{6}(C_{111} A_1^3 + C_{222} A_2^3 + C_{333} A_3^3) \\ &+ \frac{1}{2}(C_{112} A_1^2 A_2 + C_{113} A_1^2 A_3 + C_{221} A_2^2 A_1 \\ &+ C_{223} A_2^2 A_3 + C_{331} A_3^2 A_1 + C_{332} A_3^2 A_2) \\ &+ C_{123} A_1 A_2 A_3. \end{aligned} \quad (13)$$

L'équation d'état générale (8) s'écrit :

$$P = - \frac{V_0}{3V} (\delta_{kl} + 2 A_{kl}) \frac{\partial W}{\partial A_{kl}} \quad (14)$$

où les trois composantes non nulles du tenseur de Green-Lagrange doivent être considérées comme indépendantes dans la dérivation, la relation  $A_1 = A_2$  n'étant utilisée qu'ensuite.

Compte tenu de (12) et (13), (14) donne l'équation d'état au troisième ordre :

$$\begin{aligned} P &= - \frac{V_0}{3V} \left[ 2(x+y) A_1 + (4x+J+L) A_1^2 + \right. \\ &+ 2JA_1^3 + (2y+z) A_3 + \left( 2z + M + \frac{N}{2} \right) A_3^2 \\ &+ NA_3^3 + 2(4y+L+M) A_1 A_3 \\ &\left. + 6LA_1^2 A_3 + 6MA_1 A_3^2 \right] \quad (15) \end{aligned}$$

en posant :

$$\begin{aligned} x &= C_{11} + C_{12}; & y &= C_{13}; & z &= C_{33}; \\ J &= 2C_{111} + 3C_{112} - C_{222}; \\ L &= C_{113} + C_{123}; \\ M &= C_{133}; & N &= C_{333}. \end{aligned}$$

**5. Relations entre les constantes physiques  $x, y, z, J, L, M, N$  et les modules élastiques usuels.** — Les modules élastiques d'un solide sont définis, de manière usuelle, comme les coefficients qui relient les variations de la contrainte aux variations de la déformation au voisinage d'une configuration d'équilibre que l'on peut prendre quelconque; ces coefficients élastiques sont ceux que l'on mesure expérimentalement.

Dans ce paragraphe, la position d'une particule du solide est notée  $a$  dans la configuration naturelle,  $x$  dans la configuration d'équilibre correspondant à la pression  $P$  et enfin  $x'$  dans la configuration déduite de la précédente par une petite déformation.

Les tenseurs de Green-Lagrange ( $\mathbf{A}$ ) et ( $\mathbf{A}'$ ) mesurent la déformation respectivement de  $a$  à  $x$  et de  $a$  à  $x'$ , on a :

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \frac{1}{2} (F_{ki} F_{kj} - \delta_{ij}); & F_{ij} &= \frac{\partial x_i}{\partial a_j} \\ A'_{ij} &= \frac{1}{2} (F'_{ki} F'_{kj} - \delta_{ij}); & F'_{ij} &= \frac{\partial x'_i}{\partial a_j}. \end{aligned}$$

D'autre part, on introduit le tenseur des petites déformations ( $\epsilon$ ) de composantes :

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{où } u_i = x'_i - x_i.$$

Les modules élastiques isothermes sont alors définis par :

$$B_{ijkl}(x) = \frac{\partial \sigma'_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} \quad (16)$$

où les dérivées sont évaluées dans la configuration d'équilibre  $x$ . Les  $\sigma'_{ij}$  sont les composantes du tenseur des contraintes dans la configuration  $x'$ . On a donc :

$$\sigma'_{ij} = \frac{V_0}{V'} F'_{im} F'_{jn} \frac{\partial W}{\partial A'_{mn}} \quad (17)$$

$V_0$  et  $V'$  sont respectivement les volumes spécifiques dans les configurations  $a$  et  $x'$ . On montre (voir Annexe) que :

$$\frac{\partial(V_0/V')}{\partial \varepsilon_{kl}} = - \frac{V_0}{V'} \delta_{kl} \quad (18a)$$

( $V$  est le volume spécifique dans la configuration  $x$ )

$$\frac{\partial F'_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} = \frac{1}{2} (F_{ij} \delta_{ik} + F_{kj} \delta_{il}) \quad (18b)$$

$$\frac{\partial A'_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} = F_{ki} F_{lj} \quad (18c)$$

où toutes les dérivées sont évaluées dans la configuration  $x$ .

En utilisant (17) et (18) dans (16), on obtient :

$$B_{ijkl}(x) = -P(-\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ij} \delta_{ik} + \delta_{il} \delta_{kj}) + \frac{V_0}{V'} F_{im} F_{jn} F_{kp} F_{lq} \frac{\partial^2 W}{\partial A_{mn} \partial A_{pq}} \quad (19)$$

$P$  est la pression hydrostatique telle que :

$$\sigma_{ij}(x) = -P \delta_{ij}.$$

L'expression (19) pour les modules élastiques a déjà été donnée dans la littérature sous différentes formes ; Leibfried et Ludwig [7] (Section 4) donnent une formule où le tenseur ( $\mathbf{F}$ ) n'intervient pas. Ceci résulte du fait que la configuration de référence  $a$  choisie correspond à une pression  $P$  non nulle et qu'ils ont considéré seulement des petites déformations à partir de cette configuration. Wallace [8] obtient (19) sous une forme où le tenseur ( $\mathbf{F}$ ) n'est pas apparent, ce qui est dû uniquement à une notation différente. Birch [9], enfin, présente des formules pour les modules élastiques dont toutes les précédentes sont des variantes.

Les modules élastiques  $B_{ijkl}$  donnés par (19) sont tels que :

$$B_{ijkl} = B_{klij} = B_{jikl} = \dots;$$

ce qui permet d'écrire ces modules avec la notation de Voigt.

Avec l'expression (13) de l'énergie de déformation  $W$  au troisième ordre on a encore :

$$B_{ijkl} = -P(-\delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ij} \delta_{ik} + \delta_{il} \delta_{kj}) + \frac{V_0}{V'} F_{im} F_{jn} F_{kp} F_{lq} (C_{mnpq} + C_{mnpqrs} A_{rs}). \quad (20)$$

Dans le cas d'un cristal du système hexagonal ou rhomboédrique en compression hydrostatique, les seules composantes non nulles du tenseur ( $\mathbf{F}$ ) dans le repère  $R$  précédemment défini sont :  $F_{11}$  ;  $F_{22} = F_{11}$  ;  $F_{33}$ . Par suite, en utilisant la notation de Voigt :

$$B_{11} + B_{12} = \frac{V_0}{V'} F_1^4 (x + JA_1 + LA_3) \quad (21a)$$

$$B_{13} = \frac{V_0}{V'} F_1^2 F_3^2 (y + LA_1 + MA_3) + P \quad (21b)$$

$$B_{33} = \frac{V_0}{V'} F_3^4 (z + 2MA_1 + NA_3) - P \quad (21c)$$

$F_1$  et  $F_3$  mesurent respectivement les taux d'allongement orthogonalement et parallèlement à l'axe de répétition du cristal.

Les formules précédentes évaluées dans la configuration de référence s'écrivent :

$$B_{11}^0 + B_{12}^0 = x \quad (22a)$$

$$B_{13}^0 = y \quad (22b)$$

$$B_{33}^0 = z \quad (22c)$$

l'indice supérieur « 0 » exprime que la quantité correspondante est évaluée à pression nulle.

De façon générale, on sait que l'on peut relier les constantes élastiques du troisième ordre aux dérivées par rapport à la pression des modules élastiques [10]. En dérivant (21a) par rapport à la pression, on obtient :

$$\frac{\partial(B_{11} + B_{12})}{\partial P} = V_0 \frac{\partial}{\partial P} \left( \frac{1}{V'} \right) F_1^4 (x + JA_1 + LA_3) + \frac{V_0}{V'} \frac{\partial}{\partial P} (F_1^4) (x + JA_1 + LA_3) + \frac{V_0}{V'} F_1^4 \left( x + J \frac{\partial A_1}{\partial P} + L \frac{\partial A_3}{\partial P} \right). \quad (23)$$

Or on a :

$$\frac{\partial}{\partial P} \left( \frac{1}{V'} \right) = K \cdot \frac{1}{V'} \quad (24a)$$

$K = -\frac{1}{V'} \frac{\partial V'}{\partial P}$  est le module de compressibilité isotherme et aussi :

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_1^4}{\partial P} &= 4 F_1^3 \frac{\partial}{\partial P} F_1 = -4 F_1^4 \cdot \frac{1}{F_1} \frac{\partial F_1}{\partial P} = \\ &= -4(1 + 2A_1)^2 K_1 \end{aligned} \quad (24b)$$