

de même, on aurait :

$$\frac{\partial F_3^4}{\partial P} = -4(1 + 2 A_3)^2 K_3 \quad (24c)$$

$K_1 = -\frac{1}{F_1} \frac{\partial F_1}{\partial P}$ et $K_3 = -\frac{1}{F_3} \frac{\partial F_3}{\partial P}$ sont respectivement les coefficients de compressibilité linéaire orthogonalement et parallèlement à l'axe de répétition du cristal.

Des égalités :

$$A_{11} = \frac{1}{2}(F_{11}^2 - 1) \quad \text{et} \quad A_{33} = \frac{1}{2}(F_{33}^2 - 1),$$

il résulte que :

$$\frac{\partial A_1}{\partial P} = \frac{\partial A_{11}}{\partial P} = F_{11} \frac{\partial F_{11}}{\partial P} = -F_{11}^2 K_1 = -(1 + 2 A_1) K_1 \quad (24d)$$

$$\frac{\partial A_3}{\partial P} = -(1 + 2 A_3) K_3. \quad (24e)$$

Compte tenu de (24), (23) devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(B_{11} + B_{12})}{\partial P} &= (B_{11} + B_{12}) K - 4(B_{11} + B_{12}) K_1 - \\ &- \frac{V_0}{V} F_1^4 (J(1 + 2 A_1) K_1 + L(1 + 2 A_3) K_3). \end{aligned} \quad (25a)$$

En dérivant (21b) et (21c) par rapport à la pression, on obtient de même :

$$\begin{aligned} \frac{\partial B_{13}}{\partial P} &= 1 + K(B_{13} - P) - 2(K_1 + K_3)(B_{13} - P) - \\ &- \frac{V_0}{V} F_1^2 F_3^2 (L(1 + 2 A_1) K_1 + M(1 + 2 A_3) K_3) \end{aligned} \quad (25b)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial B_{33}}{\partial P} &= -1 + K(B_{33} + P) - 4 K_3(B_{33} + P) - \\ &- \frac{V_0}{V} F_3^4 (2 M(1 + 2 A_1) K_1 + N(1 + 2 A_3) K_3). \end{aligned} \quad (25c)$$

Les formules (25) évaluées dans la configuration de référence donnent alors :

$$\begin{aligned} JK_1^0 + LK_3^0 &= \\ &= (K^0 - 4 K_1^0)(B_{11}^0 + B_{12}^0) - \left(\frac{\partial(B_{11} + B_{12})}{\partial P}\right)^0 \end{aligned} \quad (26a)$$

$$\begin{aligned} LK_1^0 + MK_3^0 &= \\ &= 1 + (K^0 - 2(K_1^0 + K_3^0)) B_{13}^0 - \left(\frac{\partial B_{13}}{\partial P}\right)^0 \end{aligned} \quad (26b)$$

$$\begin{aligned} 2 MK_1^0 + NK_3^0 &= \\ &= -1 + (K^0 - 4 K_3^0) B_{33}^0 - \left(\frac{\partial B_{33}}{\partial P}\right)^0. \end{aligned} \quad (26c)$$

Les égalités (26) montrent que les constantes J, L, M, N sont reliées aux modules élastiques $B_{11}^0 + B_{12}^0, B_{13}^0, B_{33}^0$ à pression nulle et à leurs dérivées par rapport à la pression, évaluées à pression nulle.

6. Applications numériques. — Nous nous proposons, à partir de l'équation d'état (15), de donner les variations de la pression en fonction du taux de compression volumique V/V_0 à température ambiante.

L'équation d'état (15) fait intervenir les trois variables $V/V_0, A_1, A_3$, liées entre elles par deux relations indépendantes. On a d'une part [2] :

$$\det(\mathbf{F}) = V/V_0$$

d'où :

$$(V/V_0)^2 = (1 + 2 A_1)^2 (1 + 2 A_3) \quad (27a)$$

que l'on notera :

$$g(A_1, A_3) = 0. \quad (27b)$$

D'autre part, le tenseur des contraintes étant supposé sphérique, on a $\sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_{33}$.

Le tenseur (\mathbf{F}) étant diagonal, l'éq. (7) entraîne :

$$\sigma_{11} = \frac{V_0}{V} F_{11}^2 \left(\frac{\partial W}{\partial A_{11}}\right) \quad (28a)$$

$$\sigma_{33} = \frac{V_0}{V} F_{33}^2 \left(\frac{\partial W}{\partial A_{33}}\right). \quad (28b)$$

Compte tenu de (12) et (13), les éq. (28) permettent de déduire, de $\sigma_{11} = \sigma_{33}$, la relation suivante entre A_1 et A_3 :

$$\begin{aligned} (x - 2y) A_1 + \left(2x + \frac{J}{2} - L\right) A_1^2 + J A_1^3 + \\ + (y - z) A_3 + \left(-2z + \frac{M}{2} - \frac{N}{2}\right) A_3^2 - N A_3^3 \\ + (-2y + L - 2M) A_1 A_3 - 3 M A_1 A_3^2 = 0 \end{aligned} \quad (29a)$$

où l'on a utilisé la notation de Voigt. Cette relation sera notée :

$$h(A_1, A_3) = 0. \quad (29b)$$

L'égalité $\sigma_{11} = \sigma_{22}$ se traduit par une identité en tenant compte de $A_1 = A_2$ et des relations (12) entre les constantes élastiques.

Pour chaque valeur donnée de V/V_0 , les éq. (27) et (29) constituent un système non linéaire permettant de déterminer A_1 et A_3 . Nous avons résolu ce système par la méthode classique d'approximations successives de Newton-Raphson. A la k -ième itération, cette méthode conduit au système linéaire suivant,

pour déterminer les écarts $\Delta A_1^{(k)} = A_1^{(k+1)} - A_1^{(k)}$ et $\Delta A_3^{(k)} = A_3^{(k+1)} - A_3^{(k)}$:

$$\left[\frac{\partial g}{\partial A_1} (A_1^{(k)}, A_3^{(k)}) \right] \Delta A_1^{(k)} + \left[\frac{\partial g}{\partial A_3} (A_1^{(k)}, A_3^{(k)}) \right] \Delta A_3^{(k)} = -g(A_1^{(k)}, A_3^{(k)}) \quad (30a)$$

$$\left[\frac{\partial h}{\partial A_1} (A_1^{(k)}, A_3^{(k)}) \right] \Delta A_1^{(k)} + \left[\frac{\partial h}{\partial A_3} (A_1^{(k)}, A_3^{(k)}) \right] \Delta A_3^{(k)} = -h(A_1^{(k)}, A_3^{(k)}) \quad (30b)$$

Pour chaque valeur de V/V_0 , on détermine des valeurs de départ $A_1^{(0)}$ et $A_3^{(0)}$ par un procédé graphique, sachant que, d'après (27a), $A_1^{(0)}$ doit appartenir à l'intervalle $(\frac{1}{2}(V/V_0 - 1); 0)$ et $A_3^{(0)}$ à l'intervalle $(\frac{1}{2}((V/V_0)^2 - 1); 0)$.

Nous avons déterminé A_1 et A_3 avec une précision de 10^{-4} . Cette précision est obtenue dès que

$$|\Delta A_1^{(k)}| \leq 10^{-4} \quad \text{et} \quad |\Delta A_3^{(k)}| \leq 10^{-4}.$$

En général, deux ou trois itérations sont suffisantes pour obtenir ce résultat.

L'éq. (15) permet ensuite de calculer $P(V/V_0)$ en reportant les valeurs de A_1 et de A_3 obtenues par la méthode précédente.

Nous avons confronté notre courbe de compressibilité théorique avec quelques courbes de compressibilité expérimentales. La comparaison est faite pour deux métaux du système hexagonal très différents du point de vue de l'anisotropie : le magnésium (faiblement anisotrope) et le zinc (fortement anisotrope) ainsi qu'à un corps représentatif du système rhomboédrique : le quartz.

La figure 1 montre, pour le magnésium, les valeurs expérimentales de $P(V/V_0)$ obtenues par Bridgman [11] et Drickamer [12], ainsi que celles déduites de mesures d'ondes de choc par Rice [13]. La courbe de compressibilité théorique, tracée en trait plein, a été calculée en utilisant les valeurs des constantes élastiques des deuxième et troisième ordres mesurées dans les conditions normales par Naimon [14]. La courbe théorique est en bon accord avec les valeurs de Drickamer pour les valeurs de V/V_0 comprises dans l'intervalle (0,8; 1) et avec les valeurs de Rice jusqu'à $V/V_0 = 0,75$ ce qui correspond à une pression de 150 kbar.

La figure 2 montre les résultats expérimentaux obtenus, pour le zinc, par Mc Whan [15], Lynch et Drickamer [16] et Bridgman [17]. La courbe de compressibilité théorique a été obtenue en utilisant les valeurs des constantes élastiques du second ordre mesurées par Alers [18] et celles des constantes élastiques du troisième ordre mesurées par Swartz [19]. Pour des compressions telles que $1 > V/V_0 > 0,85$, les valeurs théoriques de la pression se situent entre les diverses valeurs expérimentales.

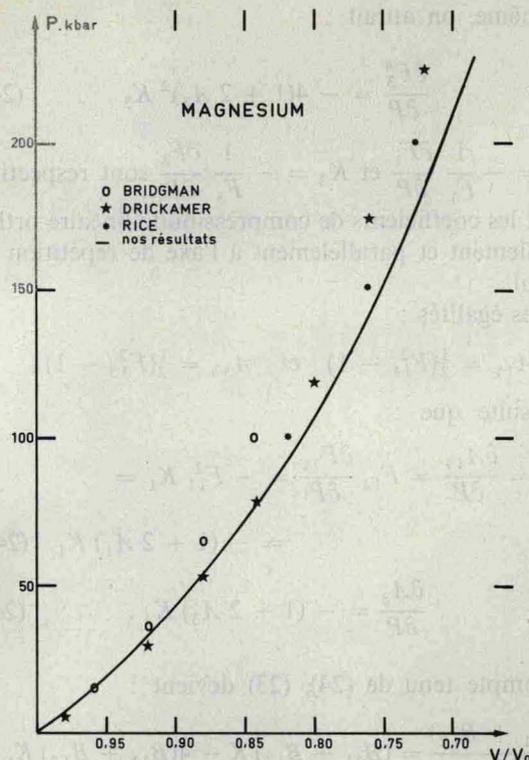


FIG. 1.

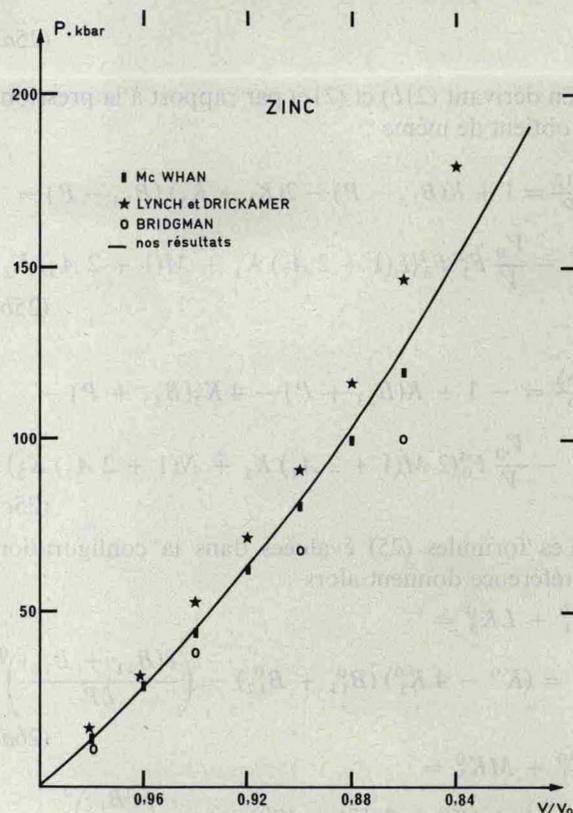


FIG. 2.

La figure 3 montre, pour le quartz, les résultats expérimentaux de Mc Whan [20] et ceux obtenus à partir des ondes de choc par Wackerle [21]. Pour