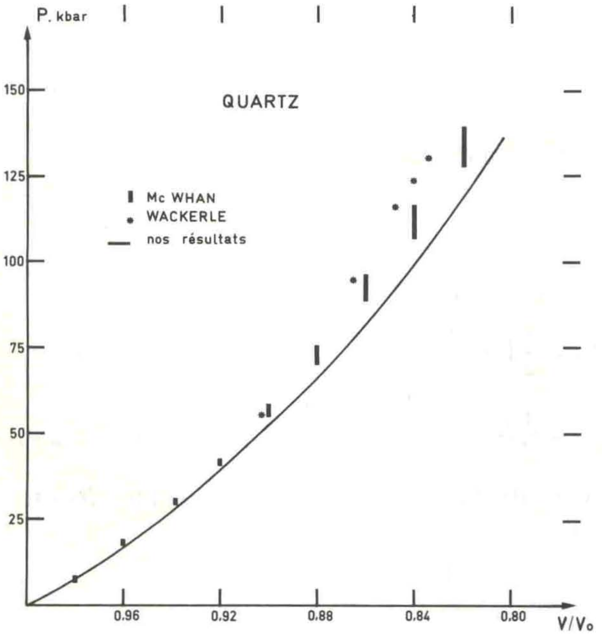

FIG. 3.

tracer la courbe de compressibilité théorique, nous avons utilisé les valeurs des constantes élastiques du second ordre mesurées par Mc Skimin [22] et celles du troisième ordre mesurées par Thurston [23]. Les résultats obtenus sont moins satisfaisants que pour les deux corps précédents. Néanmoins l'écart entre les valeurs théoriques et expérimentales n'excède pas 15 % pour $V/V_0 = 0{,}85$, ce qui correspond à une pression de l'ordre de 100 kbar.

TABLEAU I

Valeurs des groupements de constantes élastiques intervenant dans l'équation (15), *déduites des résultats expérimentaux* (*exprimés en* 10^{12} dyn/cm^2).

Corps	x	y	z	J	L	M	N
Mg	0,827	0,204	0,603	– 9,96	– 4,60	– 8,60	– 7,26
Zn	1,895	0,520	0,630	– 24,30	– 5,30	– 3,50	– 7,20
SiO_2	0,932	0,117	1,056	– 11,23	– 2,82	– 3,12	– 8,15

Nous avons pu également évaluer les compressibilités isothermes à pression nulle intervenant au paragraphe 5. Ces coefficients sont donnés par :

$$K_1^0 = -\left(\frac{1}{F_1}\frac{\mathrm{d}F_1}{\mathrm{d}P}\right)^0 = -\left(\frac{\mathrm{d}A_1}{\mathrm{d}P}\right)^0$$

$$K_3^0 = -\left(\frac{1}{F_3}\frac{\mathrm{d}F_3}{\mathrm{d}P}\right)^0 = -\left(\frac{\mathrm{d}A_3}{\mathrm{d}P}\right)^0$$

$$K^0 = -\left(\frac{1}{V}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}P}\right)^0 = -\left(\frac{\mathrm{d}(V/V_0)}{\mathrm{d}P}\right)^0 .$$

Pour le calcul des dérivées, nous avons déterminé les valeurs de $A_1(V/V_0)$, $A_3(V/V_0)$, $P(V/V_0)$ au voisinage de $V/V_0 = 1$. Les résultats obtenus sont notés dans un tableau, ainsi que les valeurs expérimentales de Naimon [14] pour le magnésium, de Alers [18] pour le zinc et de Mc Skimin [22] pour le quartz. Nous avons noté également les écarts ΔX en % entre les valeurs expérimentales et théoriques :

$$\Delta X = 100\,\frac{X_{\text{exp}} - X_{\text{théor}}}{X_{\text{exp}}} .$$

TABLEAU II

Etude des coefficients de compressibilité isotherme (*exprimés en* 10^{-13} cm^2 dyn^{-1})

Corps	K_1^0 théor	K_1^0 exp	$\Delta(K_1^0)$ %	K_3^0 théor	K_3^0 exp	$\Delta(K_3^0)$ %	K^0 théor	K^0 exp	$\Delta(K^0)$ %
Mg	9,50	9,62	1,2	9,97	10,06	0,89	28,97	29,3	1,1
Zn	1,68	1,63	– 3,1	12,79	13,93	8,2	16,15	17,2	6,1
SiO_2	9,53	9,82	3,0	7,12	7,26	1,9	26,18	26,94	2,8

Pour les trois corps étudiés, l'accord entre les résultats théoriques et les résultats expérimentaux peut être considéré comme satisfaisant.

7. **Conclusions.** — Nous avons étudié un modèle d'équation d'état au troisième ordre valable aussi bien pour les solides cristallins du système hexagonal que pour ceux du système rhomboédrique, quelle que soit leur nature. Pour obtenir un modèle d'équation d'état plus général, il conviendrait de prendre en compte les effets thermiques en choisissant comme état de référence l'état correspondant à une pression et une température absolue nulles. Il faudrait alors faire intervenir l'énergie libre de vibration du solide et, en conséquence, les coefficients de Grüneisen liés à l'anharmonicité des vibrations du réseau cristallin. Néanmoins une théorie au troisième ordre reste limitée puisqu'elle ne fait pas intervenir explicitement la température dans l'énergie libre de vibration. Pour cela, il est nécessaire d'effectuer le développement au quatrième ordre de l'énergie libre (y compris l'énergie libre de vibration) par rapport au tenseur des déformations. Ceci a déjà fait l'objet de différentes études dans le cas des solides cristallins du système cubique (Thomsen [24], Perrin [25], Delannoy [26]) et nous envisageons de généraliser une théorie du quatrième ordre aux solides cristallins de plus basse symétrie.

Néanmoins, le modèle d'équation d'état que nous avons étudié ici, permet de calculer la courbe de compressibilité à température ambiante, ce qui constitue déjà un résultat intéressant du point de vue de la comparaison avec l'expérience.

Remerciements. — Les auteurs remercient vivement Monsieur le Professeur P. Germain, membre de l'Institut, pour les encouragements qu'il leur a toujours prodigués.

ANNEXE

On reprend les notations du paragraphe 5 :

$$x'_i = x_i + u_i \tag{A.1}$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{ij} + u_{ji})\,; \quad u_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \tag{A.2}$$

De plus, on introduit le tenseur antisymétrique de composantes :

$$\omega_{ij} = \frac{1}{2}(u_{ij} - u_{ji}). \tag{A.3}$$

De l'égalité (A.1), on déduit les relations :

$$F'_{ij} = \frac{\partial x'_i}{\partial a_j} = \frac{\partial x_i}{\partial a_j} + \frac{\partial u_i}{\partial x_p}\frac{\partial x_p}{\partial a_j} = F_{ij} + u_{ip}F_{pj} \tag{A.4}$$

$$\frac{\partial F'_{ij}}{\partial u_{mn}} = F_{pj}\,\delta_{im}\,\delta_{pn} = F_{nj}\,\delta_{im}. \tag{A.5}$$

En utilisant (A.2) et (A.3), on obtient :

$$u_{mn} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{mn} + \varepsilon_{nm} + \omega_{mn} - \omega_{nm}) \tag{A.6}$$

et, d'après (A.5) et (A.6) :

$$\frac{\partial F'_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} = \frac{\partial F'_{ij}}{\partial u_{mn}}\frac{\partial u_{mn}}{\partial \varepsilon_{kl}} = F_{nj}\,\delta_{im}\cdot\frac{1}{2}(\delta_{mk}\,\delta_{nl} + \delta_{nk}\,\delta_{ml})$$

soit encore :

$$\frac{\partial F'_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} = \frac{1}{2}(F_{lj}\,\delta_{ik} + F_{kj}\,\delta_{il}). \tag{A.7}$$

On a d'autre part :

$$A'_{ij} = \frac{1}{2}(F'_{mi}\,F'_{mj} - \delta_{ij}).$$

D'après (A.4), on obtient les relations :

$$A'_{ij} = \frac{1}{2}[(F_{mi} + u_{mn}F_{ni})(F_{mj} + u_{mn}F_{nj}) - \delta_{ij}]$$

$$A'_{ij} = \frac{1}{2}(F_{mi}\,F_{mj} - \delta_{ij}) + \frac{1}{2}(F_{mi}\,F_{nj}\,u_{mn} + F_{mj}\,F_{ni}\,u_{mn})$$

en négligeant le terme $u^2_{mn}\,F_{ni}\,F_{nj}$ (en petites déformations $|\,u_{mn}\,| \ll 1$)

$$A'_{ij} = A_{ij} + F_{mi}\,F_{nj}\,\delta_{mn}$$

$$\frac{\partial A'_{ij}}{\partial \varepsilon_{kl}} = F_{mi}\,F_{nj}\,\delta_{mk}\,\delta_{nl} = F_{ki}\,F_{lj}. \tag{A.8}$$

En théorie des petites déformations, on a [27] :

$$\frac{V'}{V} = \text{dét}\left(\frac{\partial x'_i}{\partial x_j}\right) = 1 + \varepsilon_{ii}$$

donc :

$$\frac{\partial V'}{\partial \varepsilon_{kl}} = V\delta_{ik}\,\delta_{il} = V\delta_{kl}$$

et :

$$\frac{\partial\left(\dfrac{V_0}{V'}\right)}{\partial \varepsilon_{kl}} = -\frac{V_0}{V'^2}\cdot\frac{\partial V'}{\partial \varepsilon_{kl}} = -\frac{V_0}{V'^2}\cdot V\delta_{kl}.$$

Dans la configuration d'équilibre x, on a $V' = V$, d'où :

$$\frac{\partial\left(\dfrac{V_0}{V'}\right)}{\partial \varepsilon_{kl}} = -\frac{V_0}{V}\,\delta_{kl}.$$

Bibliographie

[1] THURSTON, R. N., *Physical Acoustics*, vol. 1 (ed. Mason, W. P. Academic Press, New York) 1964.
[2] GERMAIN, P., *Cours de Mécanique des Milieux Continus*, tome I (Masson, Paris) 1973.
[3] BUERGER, M. J., *Elementary Crystallography* (John Wiley & Sons, New York) 1963.
[4] NYE, J. F., *Propriétés Physiques des Cristaux* (Dunod, Paris) 1965.
[5] HEARMON, R. F. S., *Acta Crystallogr.* **6** (1953) 331.
[6] BORN, M., HUANG, K., *Dynamical Theory of Crystal Lattices* (Oxford University Press, London) 1954.
[7] LEIBFRIED, G., LUDWIG, W., *Solid State Phys.* **12** (1961) 275.
[8] WALLACE, D. C., *Phys. Rev.* **162** (1967) 776.
[9] BIRCH, F., *Phys. Rev.* **71** (1947) 809.
[10] THURSTON, R. N., *J. Acoust. Soc. Am.* **41** (1967) 1093.
[11] BRIDGMAN, P. W., *Proc. Am. Acad. Arts Sci.* **76** (1948) 55.
[12] DRICKAMER, H. G., LYNCH, R. W., CLENDENEN, R. L., PEREZ-ALBUERNE, E. A., *Solid State Phys.* **19** (1966) 135.
[13] RICE, M. H., MC QUEEN, R. G., WALSH, J. M., *Solid State Phys.* **6** (1958) 1.
[14] NAIMON, E. R., *Phys. Rev. B* **4** (1971) 4291.
[15] MC WHAN, D. B., *J. Appl. Phys.* **36** (1965) 664.
[16] LYNCH, R. W., DRICKAMER, H. G., *J. Phys. & Chem. Solids* **26** (1965) 63.
[17] BRIDGMAN, P. W., *Proc. Am. Acad. Arts Sci.* **74** (1942) 425.
[18] ALERS, G. A., NEIGHBOURS, J. R., *J. Phys. & Chem. Solids* **7** (1958) 58.
[19] SWARTZ, K. D., ELBAUM, C., *Phys. Rev. B*, **1** (1970) 1512.
[20] MC WHAN, D. B., *J. Appl. Phys.* **38** (1967) 347.
[21] WACKERLE, J., *J. Appl. Phys.* **33** (1962) 922.
[22] MC SKIMIN, H. J., ANDREATCH Jr, P., THURSTON, R. N., *J. Appl. Phys.* **36** (1965) 1624.
[23] THURSTON, R. N., MC SKIMIN, H. J., ANDREATCH Jr, P., *J. Appl. Phys.* **37** (1966) 267.
[24] THOMSEN, L., *J. Phys. & Chem. Solids* **31** (1970) 2003.
[25] PERRIN, G., LACAM, A., *C. R. Hebd. Séan. Acad. Sci. A* **275** (1972) 1007.
[26] DELANNOY, M., LACAM, A., *Phys. Rev. B* **6** (1972) 3593.
[27] LANDAU, L., LIFCHITZ, E., *Théorie de l'Elasticité* (Editions de Moscou) 1967.