

Zeitschrift: Helvetica Physica Acta
Band: 42 (1969)
Heft: 3

Artikel: Elasticité des métaux paramagnétiques
Autor: Fischer, Ø. / Peter, M. / Steinemann, S.
DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-114077>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

Download PDF: 16.01.2026

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

Elasticité des métaux paramagnétiques

par **O. Fischer et M. Peter**

Institut de Physique Expérimentale de l'Université de Genève

et **S. Steinemann**

Institut Dr. Reinhard Straumann, Waldenburg et Institut de Physique Expérimentale
de l'Université de Lausanne

(24 IX 68)

Abstract. The kinetic energy of itinerant electrons gives a definite contribution to the elasticity of metals. The free energy of itinerant electrons and their chemical potential is examined in a Stoner model and expressions for the susceptibility, compression modulus and thermal dilatation are derived. The 'internal pressure' of an equation of state for simple metals is explained by a same model. The main contribution of the band structure and exchange interaction appears for volume conserving shears and is demonstrated for the whole series of transition metals and their alloys; correlations between shear modulus and susceptibility refer in fact to the same contribution of band structure and exchange interaction.

Introduction

La propriété principale des métaux est l'existence d'une forte densité d'électrons itinérants. Les propriétés caractéristiques des métaux, telles que la réflectivité optique, les conductibilités thermique et électrique, la chaleur spécifique et la susceptibilité magnétique, sont assez directement reliées à la présence de ces électrons itinérants. La description théorique de ces phénomènes est rendue facile par le fait que seuls les électrons dont l'énergie est très proche de l'énergie de Fermi interviennent. La description complète des propriétés thermodynamiques peut être donnée par des fonctions thermodynamiques telles que l'énergie libre. Mais cette énergie est plus difficile à calculer, puisque elle dépend des propriétés du réseau ionique, de l'ensemble des électrons itinérants, et des interactions réseau-électrons.

En premier chapitre du présent travail, nous passons en revue l'énergie libre pour un modèle simplifié du gaz électronique. Sont utilisés: l'énergie cinétique, le paramagnétisme des spins, une énergie d'échange simplifiée et une température finie. Au chapitre II, ce modèle est complété en ajoutant une pression interne qui représente l'énergie de cohésion du réseau, et nous montrons que ce modèle donne une description utile de certaines propriétés des métaux alcalins, donc des métaux les plus simples. Les métaux de transition ont une structure de bande complexe et anisotrope, de façon qu'un tel modèle semble perdre son utilité. Toutefois, en admettant des sous-bandes anisotropes, le modèle prédit des corrélations entre la susceptibilité magnétique et les propriétés élastiques. Au chapitre III, nous élaborons ces corrélations et les mettons en évidence pour les éléments de transition et certains de leurs alliages. La corrélation entre module de cisaillement et susceptibilité, précédemment reconnue pour les alliages du Pd [5], réapparaît pour les alliages du Pt et pour les alliages et composés possédant de 3 à 5 électrons de valence, donc essentiellement là où la susceptibilité de spin est

importante, que celle-ci soit due à une haute densité d'état ou à une forte interaction d'échange. La corrélation est particulièrement nette pour les dérivées par rapport à la température des valeurs de susceptibilité et des constantes élastiques, puisque ces dérivées dépendent principalement du mécanisme décrit par notre modèle, tandis que les valeurs intégrales contiennent aussi de grandes contributions provenant du réseau, contributions qui dépassent le cadre de la présente discussion.

L'utilité du modèle réside dans la corrélation expérimentalement bien documentée à laquelle il a conduit. Il a suggéré de nouveaux travaux expérimentaux et il pourra être comparé avec des calculs plus élaborés concernant les propriétés élastiques des métaux cristallins ou pseudo-isotropes.

1. Gaz d'électrons libres et son module de compression

Notre discussion se basera sur le modèle simple de STONER [1]. Les effets de la structure de bande seront décrits de façon approximative au moyen d'une masse effective, ce qui permettra d'inclure les métaux dont la densité d'état dévie fortement de celle du gaz d'électrons libres à cause d'une structure de bande complexe. Nous tiendrons aussi compte d'une énergie d'échange qui sera introduite comme constante J entre toutes les paires d'électrons de spin égal.

L'énergie libre est donnée dans ce modèle par

$$\begin{aligned} F(T, H, J) = & n_+ z_+ + n_- z_- - \frac{1}{2} J n_+^2 - \frac{1}{2} J n_-^2 \\ & - k T \int N(E) \ln \left[1 + \exp \left\{ \frac{z_+ - (E - \mu_0 H)}{k T} \right\} \right] dE \\ & - k T \int N(E) \ln \left[1 + \exp \left\{ \frac{z_- - (E + \mu_0 H)}{k T} \right\} \right] dE . \end{aligned} \quad (1)$$

H est le champ magnétique externe, le moment magnétique de l'électron est donné par $\mu_0 = (g/2) \beta$, β est le magnéton de Bohr. n_+ et n_- sont les nombres d'électrons de spin positif et de spin négatif et z_{\pm} est l'énergie de Fermi pour les électrons avec spin positif (+) respectivement spin négatif (-).

$$\begin{aligned} n_{\pm} = & n_0 \pm p = \int N(E) f_{\pm}(E \mp \mu_0 H) dE \\ n_+ + n_- = & 2 n_0 = \frac{Z}{V} . \end{aligned}$$

Z est le nombre total d'électrons et V est le volume de l'échantillon. La densité d'état est celle d'une sorte de spin. $f_{\pm}(E)$ est la fonction de Fermi-Dirac

$$f_{\pm}(E) = \frac{1}{\exp \{(E - z_{\pm})/k T\} + 1} .$$

Dans (1) l'énergie libre est décrite comme étant la somme des énergies libres des gaz à spin positif et à spin négatif, ce qui est possible puisque nous considérons ici l'équilibre chimique de deux gaz électroniques sans autre interaction que celle d'échange. Le potentiel chimique μ est donné par

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial n_{\pm}} \right)_T = z_{\pm} - J n_{\pm} . \quad (2)$$

Pour les calculs suivants, il sera mieux de ne plus tenir compte explicitement de la séparation des deux gaz, ce qui amène à remplacer z_{\pm} par une nouvelle énergie de Fermi ζ définie par

$$\mu = \zeta - J n_0 . \quad (3)$$

Aussi, la fonction de Fermi-Dirac est définie pour la suite

$$f(E) = \frac{1}{\exp\{(E-\zeta)/kT\} + 1} .$$

L'énergie libre est maintenant donnée par

$$\begin{aligned} F(T, H, J) &= 2 n_0 \zeta - J n_0^2 + J p^2 - 2 \int f(E) \left[\int_0^E N(\varepsilon) d\varepsilon \right] dE \\ &\quad - (\mu_0 H + J p)^2 \int_0^\infty \frac{\partial^2 f}{\partial E^2} \left[\int_0^E N(\varepsilon) d\varepsilon \right] dE . \end{aligned} \quad (4)$$

Pour arriver à (4), deux intégrations partielles et ensuite un développement jusqu'au 2ème ordre en $(\mu_0 H + J p)$ est fait.

Pour pouvoir calculer le dernier terme, il est nécessaire de connaître l'aimantation du gaz:

$$\begin{aligned} M &= 2 \mu_0 p = \mu_0 \int [f(E - \mu_0 H - J p) - f(E + \mu_0 H + J p)] N(E) dE \\ &\approx -2 \mu_0 \int \frac{\partial f}{\partial E} N(E) dE (\mu_0 H + J p) . \end{aligned}$$

A partir de là, nous obtenons le résultat de Stoner

$$\begin{aligned} M(T, J, H) &= \chi(T, J) H \\ \chi(T, J) &= \frac{\chi_0(T)}{1 - (J/2 \mu_0^2) \chi_0(T)} . \end{aligned} \quad (5)$$

La susceptibilité de Pauli $\chi_0(T)$ est donnée par

$$\chi_0(T) = -2 \mu_0^2 \int \frac{\partial f}{\partial E} N(E) dE . \quad (6)$$

Si en formule (4) le terme $J p^2$ est combiné avec le dernier terme, nous obtenons

$$F(T, H, J) = F(T, H = 0, J = 0) - J n_0^2 - \frac{1}{2} \frac{\chi_0(T)}{1 - (J/2 \mu_0^2) \chi_0(T)} H^2$$

$F(T, H = 0, J = 0)$ est la somme du premier et du quatrième terme en (4). Ce résultat est maintenant développé en $T^2, H^2, (TH)^2$. On sait que [1]

$$F(T, H = 0, J = 0) = U_0(\zeta_0) - \frac{(\pi k T)^2}{3} N(\zeta_0)$$

$$\chi_0(T) = 2 \mu_0^2 N(\zeta_0) \left[1 + \frac{(\pi k T)^2}{6} L(\zeta_0) \right]$$

où $\zeta_0 = \zeta(T = 0, H = 0)$, et

$$U_0(\zeta_0) = 2 \int_0^{\zeta_0} N(E) E dE$$

$$L(\zeta_0) = \frac{1}{N(\zeta_0)} \left(\frac{\partial^2 N}{\partial E^2} \right)_{E=\zeta_0} - \frac{1}{N^2(\zeta_0)} \left(\frac{\partial N}{\partial E} \right)_{E=\zeta_0}^2$$

ce qui donne pour l'énergie libre

$$F(T, H, J) = U_0(\zeta_0) - \frac{(\pi k T)^2}{3} N(\zeta_0) - J n_0^2 - \frac{\mu_0^2 N(\zeta_0)}{1 - J N(\zeta_0)} H^2$$

$$- \frac{(\pi k)^2}{6} \frac{\mu_0^2 N(\zeta_0) L(\zeta_0)}{[1 - J N(\zeta_0)]^2} T^2 H^2. \quad (7)$$

La chaleur spécifique et la susceptibilité deviennent

$$C_V = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = \frac{2}{3} (\pi k)^2 N(\zeta_0) T + \frac{(\pi k)^2}{3} \frac{\mu_0^2 N(\zeta_0) L(\zeta_0)}{[1 - J N(\zeta_0)]^2} H^2 T \quad (8)$$

$$\chi(T, J) = -\frac{\partial^2 F}{\partial H^2} = \frac{2 \mu_0^2 N(\zeta_0)}{1 - J N(\zeta_0)} + \frac{(\pi k)^2}{3} \frac{\mu_0^2 N(\zeta_0) L(\zeta_0)}{[1 - J N(\zeta_0)]^2} T^2. \quad (9)$$

Pour pouvoir comparer le module de cisaillement calculé en 3ème chapitre avec la susceptibilité, il est utile de se rappeler que l'aimantation est produite parce que la bande d'énergie des électrons à spin positif est déplacée vers les énergies plus basses et la bande d'énergie des électrons à spin négatif vers des énergies plus élevées, de sorte qu'il y a transfert d'électrons pour rétablir l'équilibre chimique entre le gaz à spin positif et le gaz à spin négatif.

De la formule (7) peut être déduit le module de compression et le coefficient de dilatation du gaz électronique. Pour ce faire, il faut cependant connaître la dépendance en volume des différentes grandeurs. Il est supposé que J et m^* (masse effective) sont indépendants du volume, et comme simplification supplémentaire une «bande standard», c'est-à-dire $N(E) \sim E^{1/2}$, est employée. Cette bande standard décrit aussi des trous dans le cas d'une bande presque remplie et $2 n_0$ donnera alors le nombre des trous par unité de volume.

Pour une bande standard, nous aurons

$$N(\zeta_0) = \frac{3}{2} \frac{n_0}{\zeta_0} \quad U(\zeta_0) = \frac{6}{5} n_0 \zeta_0 \quad L(\zeta_0) = -\frac{1}{2} \frac{1}{\zeta_0^2}.$$

De plus $\zeta_0 \sim V^{-2/3}$, et ainsi $N(\zeta_0) \sim V^{-1/3}$, $U(\zeta_0) \sim V^{-5/3}$

Le module de compression isotherme devient ($H = 0$)

$$K(T) = V \left(\frac{\partial^2(FV)}{\partial V^2} \right)_T$$

$$K(T) = 2 n_0^2 \left(\frac{1}{N(\zeta_0)} - J \right) + \frac{2}{27} (\pi k T)^2 N(\zeta_0). \quad (10)$$

Dans le cas de mesures ultrasoniques, on mesure cependant essentiellement le module de compression adiabatique. Celui-ci se calcule d'après les relations

$$U(S) = F(T(S)) - T(S) \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V \quad S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V$$

ce qui donne

$$K_S = V \left(\frac{\partial^2(UV)}{\partial V^2} \right)_S = 2 n_0^2 \left(\frac{1}{N(\zeta_0)} - J \right) + \frac{10}{27} (\pi k T)^2 N(\zeta_0). \quad (11)$$

Le coefficient de dilatation est

$$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = \frac{1}{K_T} \left(\frac{\partial p_e}{\partial T} \right)_V.$$

La pression devient alors

$$p_e = - \left(\frac{\partial(FV)}{\partial V} \right)_T = \frac{2}{3} U_0(\zeta_0) - J n_0^2 + \frac{2}{9} (\pi k T)^2 N(\zeta_0). \quad (12)$$

Avec (10), nous obtenons pour α

$$\alpha = \frac{2}{9} \frac{N^2(\zeta_0)}{1 - J N(\zeta_0)} \frac{(\pi k)^2}{n_0^2} T.$$

Il résulte ainsi que χ et α sont proportionnels au facteur de Stoner $1/1 - J N(\zeta_0)$ et que K_T et K_S sont proportionnels à l'inverse du facteur de Stoner; par contre, le facteur de Stoner n'intervient pas pour C_V . BERK et SCHRIEFFER [2] ont montré qu'en tenant compte de la dépendance en fréquence de l'interaction d'échange, on peut obtenir une contribution en C_V qui, pour des substances à grand facteur de Stoner, est de la forme

$$- NJ \ln(1 - JN) T.$$

Cette contribution peut être mise en évidence dans certaines séries d'alliages des éléments de transition où le facteur de Stoner en fonction du nombre atomique moyen accuse des maxima prononcés. C'est dans les alliages de cette sorte que l'identification de la contribution électronique en C_V , χ , K et α est bien facilitée. Dans le cas de la chaleur spécifique et de la susceptibilité, la contribution électronique est évidente, et en effet dans les séries Ph-Pd-Ag [3] et Ir-Pt-Au [3], on trouve des maxima prononcés qui peuvent être mis en relation avec les maxima du facteur de Stoner.

Par contre, nous n'avons pas connaissance de mesures donnant une indication claire sur la contribution électronique au module de compression et au coefficient de dilatation. Le coefficient de dilatation de différents métaux à basses températures a été étudié par ANDRES [4]; il trouve que par analogie avec le cas de la chaleur spécifique, le coefficient de dilatation du gaz électronique peut être identifié à des très basses températures. Ceci donne l'espoir que cette autre contribution du gaz électronique pourra également être démontrée pour les séries d'alliages indiquées ci-dessus.

Le module de compression de la série d'alliages Rh-Pd-Ag a été étudié par BELMAHI et al. [5]. Pour le module de compression, ils n'ont pas trouvé de minimum correspondant au maximum de la susceptibilité. Par contre, ils ont observé un faible minimum dans la dérivée logarithmique par rapport à la température. Pour une bande standard, on trouve d'après (9) et (10) la relation

$$\chi = \frac{4 n_0^2 \mu_0^2}{K_T}. \quad (14)$$

Le module de compression adiabatique K_S ne montre pas, à température finie, une proportionnalité directe à $1/\chi$, mais on peut écrire une relation entre les dérivées logarithmiques de la façon suivante

$$k = \frac{1}{K} \left(\frac{dK}{dT} \right)_V = - q \frac{1}{\chi} \left(\frac{d\chi}{dT} \right)_V. \quad (15)$$

Il faut alors mettre $q = 1$ pour K_T et $q = 5$ pour K_S . $(\partial\chi/\partial T) < 0$ pour la série des alliages Rh-Pd-Ag, de sorte que la formule ci-dessus prédit pour la quantité k un maximum et non un minimum. Il est possible que le minimum vu par BELMAHI et al. soit causé par la contribution électronique non pas au module de compression mais au coefficient de dilatation, étant donné que ces auteurs se sont basés sur une mesure de vitesse du son. Ce point est en train d'être vérifié par des mesures du coefficient de dilatation.

Pour terminer ce paragraphe, indiquons que pour toute mesure des coefficients de température des grandeurs physiques, il faut tenir compte de la dépendance explicite en température du volume; c'est ainsi que pour n'importe quelle grandeur B

$$\frac{dB}{dT} = \left(\frac{\partial B}{\partial T} \right)_V + \left(\frac{\partial B}{\partial V} \right)_T \frac{dV}{dT}.$$

Dans les expressions (7) à (11) et (13), nous ne pouvons identifier directement que $(\partial B/\partial T)_V$ mais dans un métal réel le deuxième terme de dB/dT est négligeable que si ce terme est petit par rapport au premier. Ceci est probablement le cas dans les métaux de transition tels que le Pd, puisque dans ces métaux la densité d'état du gaz à électrons- d est forte, et par conséquent la dépendance en température intrinsèque aussi. Par contre, dans le cas des alcalins à faible densité d'état, le terme proportionnel en dV/dT devient important. C'est pour cette raison que l'on obtient par exemple que la susceptibilité de masse du Na augmente avec T , bien que $(\partial\chi/\partial T)_V < 0$ [7].

2. Gaz électronique dans un métal et l'équation d'état

Dans les métaux alcalins, le gaz électronique apporte une contribution essentielle à l'énergie. On obtient une bonne approximation pour le module de compression en ne tenant compte que de la contribution électronique. Les forces cohésives du réseau ne jouent que le rôle d'une pression extérieure qui serait pratiquement indépendante du volume. Ceci a conduit BORELIUS [8] à écrire une équation d'état pour les métaux alcalins de la forme suivante

$$(\rho_i + \rho)(\beta + \Delta V) = \rho_i \beta. \quad (16)$$

Dans cette expression, ρ_i est la pression des forces cohésives dirigées vers l'intérieur et ρ la pression extérieure. Ces deux forces sont en équilibre avec la pression du gaz d'électrons ρ_e . L'équation (16) peut, pour cette raison, être interprétée comme étant l'équation d'état du gaz électronique dans le volume $\beta + \Delta V$. Pour $\beta = V_0$, V_0 étant le volume d'équilibre, nous trouvons l'équation pour une isotherme du gaz idéal. Autrement, il s'agit d'une isotherme pour un gaz Van der Waal avec $\epsilon = V_0 - \beta$.

Si maintenant on introduit $y = -\Delta V/\rho$ V_0 et $x = -\Delta V/V_0$ on peut représenter la relation entre y et x qui est donnée par (18), et on trouve la droite donnée en figure 1.

Pour une substance mesurée, on choisit une droite qui donne la meilleure approximation aux valeurs expérimentales et on peut ainsi déterminer β et ρ_i ainsi que le module de compression

$$\frac{\beta}{V_0} = x (y = 0); \quad \rho_i = \left(-\frac{dx}{dy} \right)_{x=0} \quad K_0 = \frac{1}{y(x=0)}. \quad (17)$$

Si l'on se réfère aux courbes de compression mesurées par BRIDGMANN (1935 [9]–1948 [10]), on voit que l'équation (16) est une bonne approximation seulement pour les basses pressions. A haute pression, on trouve des déviations marquées. Du point de vue théorique, ceci n'est pas étonnant puisqu'on ne s'attend pas à une équation de Van der Waal pour un gaz d'électrons. En effet, la situation peut être considérablement améliorée si l'on part de l'équation d'état du gaz d'électrons libres en gardant toutefois l'idée du paramètre ε . Ce paramètre ε peut être interprété comme étant un covolume, mais il est également possible de l'introduire comme dépendance en masse effective du volume.

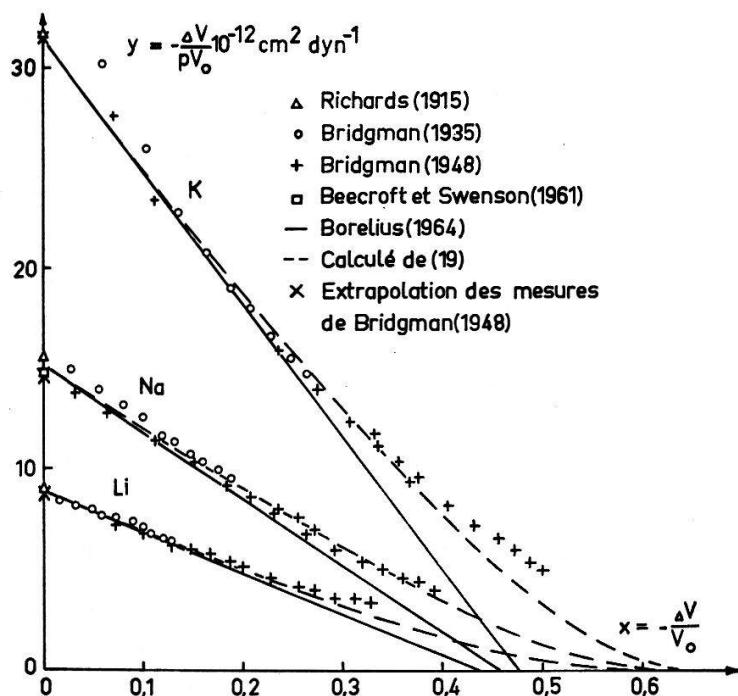


Figure 1

Equation d'état des métaux alcalins (formules 16 et 17).

Dans la discussion qui suivra, nous allons omettre le terme d'échange, ou plutôt il sera considéré comme incorporé de façon approximative dans la grandeur p_i . La faute ainsi commise sera discutée plus loin.

Pour $H = 0$, l'énergie libre par unité de volume est donnée par les deux premiers termes en (7).

Nous introduisons maintenant dans $U_0(\zeta_0)$ et $N(\zeta_0)$ les valeurs pour la bande standard, et la masse effective dépendra du volume de la façon suivante

$$m^*(V) = m_0^* \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \left(\frac{V - \varepsilon}{V_0 - \varepsilon} \right)^{2/3} \quad (18)$$

m_0^* sera la masse effective pour un volume standard V_0 ; nous obtenons alors l'équation d'état suivante (en posant $p_i + p = p_e$)

$$(p_i + p) = \frac{V_0}{V_0 - \varepsilon} \left[A \left(\frac{V_0 - \varepsilon}{V - \varepsilon} \right)^{5/3} + C \left(\frac{V_0 - \varepsilon}{V - \varepsilon} \right)^{1/3} T^2 \right] \quad (19)$$

avec

$$A = \frac{4}{5} n_0 \zeta_0 \quad C = \frac{2(\pi k)^2}{9} N_0(\zeta_0) . \quad (20)$$

L'indice 0 indique les grandeurs qui sont à prendre pour $V = V_0$. Par le dernier terme, nous avons introduit la température dans notre équation d'état. Même à température ambiante, ce terme sera très petit par rapport aux autres termes. Pour cette raison, la dépendance en température de l'équation d'état sera donnée par la dépendance en température de l'énergie du réseau, ce qui veut dire que la pression cohésive dépend de la température: $p_i = p_i(T)$. Par contre, de même que Borelius, nous négligerons dans p_i la dépendance du volume.

Le comportement isotherme du métal est ainsi identifié avec le comportement de son gaz électronique. Par contre, c'est l'énergie du réseau qui est la cause de la dépendance en température des grandeurs physiques.

En omettant le dernier terme de l'équation (19), nous nous trouvons en présence de seulement deux paramètres indépendants. Ceux-ci peuvent être déterminés dans notre équation si l'on regarde la tangente de $y(x)$ au point $y(0)$ (Fig. 1). C'est ainsi que nous pouvons calculer la courbe de compression avec notre équation. Le résultat est également indiqué en Figure 1. La concordance avec les mesures est maintenant beaucoup améliorée. Toutefois les déviations subsistent aux très hautes pressions.

Il est maintenant possible de calculer K à partir de la valeur théorique de A donnée par (20) et de la valeur expérimentale pour ϵ . Le taux de compression sera (19)

$$K_0 = \frac{5}{3} \left(\frac{V_0}{V_0 - \epsilon} \right)^2 A .$$

Pour l'énergie de Fermi ζ_0 nous prenons les valeurs de HAM [12] corrigées pour la dilatation thermique à 0 °K et 297 °K avec l'hypothèse que $\zeta_0 \sim 1/V^{2/3}$ (Tableau 1). Le résultat pour les modules est ensuite donné. Comme point de comparaison, nous avons aussi noté les modules de compression tirés des mesures faites par BRIDGMAN en 1948 [15].

Tableau 1
Modules de compression

Elément	Li	Na	K
n_0	$4,6 \cdot 10^{22}$	$2,54 \cdot 10^{22}$	$1,32 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$
ζ_0	3,33	3,12	2,12 eV
$(V_0 - \epsilon)/V_0$	0,587	0,614	0,640
$K_{\text{calc.}}$	47,5	22,2	$7,29 \cdot 10^{10} \text{ dyn/cm}^2$
$K_{\text{mes.}}$	11,5	6,90	$3,18 \cdot 10^{10} \text{ dyn/cm}^2$
$K'_{\text{calc.}}$	5,8	4,82	$2,23 \cdot 10^{10} \text{ dyn/cm}^2$

La concordance n'est que qualitative, les valeurs théoriques sont 2 à 4 fois trop grandes. Cette discordance n'est pas étonnante puisque l'énergie d'échange a été négligée mais en réalité elle fait une contribution importante à l'énergie du gaz électronique et en général donc aussi à K . Pour une discussion du point de vue qualitatif, nous pouvons prendre dans les alcalins les énergies d'échange calculées par la méthode HARTREE-FOCK [16]. Cette énergie d'échange est proportionnelle à

$(V_0/V)^{1/3}$ et en introduisant le paramètre ε , nous obtenons dans la parenthèse du côté droit de notre équation d'état

$$- B \left(\frac{V_0 - \varepsilon}{V - \varepsilon} \right)^{4/3}.$$

Dans ce cas, $B \lesssim A$. Pour le calcul du module de compression, ce terme donne effectivement une correction dans le sens voulu; d'autre part, la forme de la courbe de compression n'est pas fortement changée puisque la dépendance en V des deux termes est presque identique. Le tableau contient aussi une valeur $K'_{\text{calc.}}$, calculé en tenant compte de l'énergie d'échange. La concordance est maintenant bien améliorée. Il subsiste cependant une déviation relativement forte pour Li; c'est probablement une conséquence du fait que le Li, contrairement au Na, K, ne possède pas de surface de Fermi sphérique. Finalement, nous admettons que la situation pourrait encore être améliorée si l'on tient compte de l'énergie de corrélation.

Jusqu'à maintenant, nous avons pris comme point de départ de notre discussion l'idée simple d'une pression électronique équilibrée par la pression cohésive du réseau. Un calcul plus complet permettant de déterminer le volume d'équilibre V_0 aura pour base une expression pour l'énergie tenant compte des interactions avec les ions à pression externe zéro. L'énergie du réseau peut être négligée si l'on maintient l'hypothèse que le minimum d'énergie est très plat, de façon que les contributions à p et K seront faibles.

C'est en se basant sur ces délibérations que BARDEEN [13] a proposé une équation d'état pour le Na et le Li en 1938; à l'aide de la méthode Wigner-Seitz, il calcule l'énergie du gaz électronique et il trouve

$$W = A'(V_0/V) + B'(V_0/V)^{2/3} - C'(V_0/V)^{1/3}. \quad (21)$$

Le deuxième terme à droite est l'énergie cinétique et les deux autres termes correspondent à l'énergie potentielle et à l'énergie d'échange des électrons. De la formule (21) on trouve, avec la condition $(\partial W / \partial V)_{V=V_0} = 0$, l'équation d'état

$$p V_0 = \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{5/3} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{4/3} \right] \left[2 A' + \frac{2}{3} B' + A' \left(\left(\frac{V_0}{V} \right)^{1/3} - 1 \right) \right]. \quad (22)$$

La dépendance en volume du facteur entre parenthèses carrées est négligeable. Pour cette raison, cette équation d'état a une forme très semblable à notre équation (19), pourvu que dans cette dernière nous introduisions le terme d'échange. Toutefois, deux différences essentielles subsistent. D'une part, il n'est pas tenue compte de la dépendance en volume des forces cohésives en (22), et d'autre part BARDEEN n'a pas introduit l'idée de covolume ou de masse dépendante du volume.

Comme test de son équation d'état, BARDEEN a comparé les isothermes déterminés à partir de (22) avec les mesures de BRIDGMAN de 1935. Il a ainsi adapté ses paramètres à la compressibilité mesurée par BRIDGMAN pour $p = 0$. Il trouve que les pressions calculées à partir de (22) sont légèrement trop faibles, ce qui signifie que dans la Figure 1 sa courbe se situerait en-dessus de la courbe mesurée. Il est probable que l'introduction des covolumes ε dans la théorie de BARDEEN conduise à une meilleure concordance avec les valeurs expérimentales.

ANIMALU et HEINE [14] ont introduit dans le calcul de l'énergie électronique un «potentiel écranté» tenant compte des dimensions finies du noyau ionique. Dans ce

calcul, l'équivalent d'un covolume est donc introduit; nous ne voulons cependant pas entrer ici dans une discussion de ces calculs plus exacts.

La dépendance en température du module de compression nous fournit un autre test pour notre équation d'état. BEECROFT et SWENSON [17] ont mesuré la dépendance en température du module de compression du Na. Dans la Figure 2, nous reportons le résultat des mesures [18] ainsi que le module de compression $K(T)$ calculé à l'aide de (19) en prenant pour $K(T = 293)$ la valeur $6,7 \cdot 10^{10}$ dyn/cm².

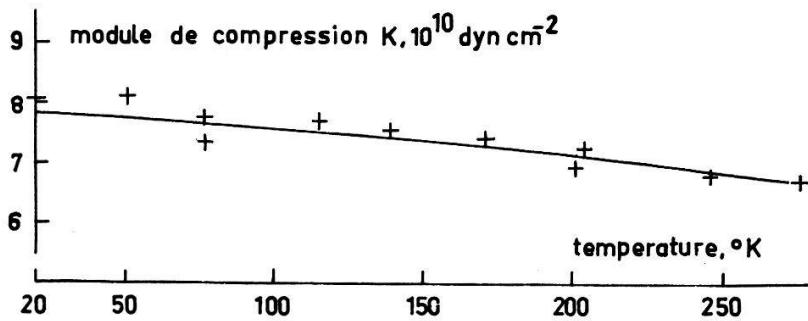


Figure 2

Module de compression de la Na en fonction de température selon les mesures de BEECROFT et SWENSON [17, 18] et calculé à l'aide de la formule (22) avec $K(293^\circ\text{K}) = 6,71 \cdot 10^{10}$ dyn cm⁻² et $(V_0 - \epsilon)/V_0 = 0,614$.

Pour le calcul, nous prenons le volume molaire en fonction de la température indiqué dans le travail précité de Beecroft et Swenson. La concordance est très satisfaisante entre les valeurs ainsi prédites et les valeurs expérimentales, ce qui peut être compris comme une confirmation qualitative de l'importante contribution électronique au module de compression dans les alcalins.

Ajoutons pour terminer que notre équation d'état n'est pas de la forme Mie-Grüneisen. Nous pouvons, il est vrai, introduire la forme

$$F(V, T) = F_e(V) + T f_g \left(\frac{\theta(V)}{T} \right)$$

où $F_e(V)$ est l'énergie totale libre des électrons et $T \cdot f_g(\theta/T)$ l'énergie totale libre du réseau. La force cohésive $\rho_i(T)$ est maintenant la dérivée du 2ème terme par rapport à V . Mais pour que ρ_i soit indépendant en volume de toutes les températures, il faut que la température de Debye change sa dépendance en volume dans la région où $f_g(\theta/T)$ modifie son comportement en température, c'est-à-dire aux environs de la température de Debye. Pour cette raison, le paramètre de Grüneisen γ_G défini par

$$\gamma_G = - \frac{\partial \log \theta}{\partial \log V}$$

va dépendre de la température. Pour le Na, on peut calculer le paramètre de Grüneisen en fonction de la température à l'aide des mesures de Beecroft et Swenson. On trouve en effet que γ_G dépend de la température, ce qui indique que le Na, ainsi que d'autres métaux alcalins, ne possède probablement pas d'équation d'état du type Mie-Grün-eisen.

3. Module de cisaillement

Pour obtenir des indications sur le module de cisaillement, il faut tenir compte du réseau réel et par conséquent de la structure de bande. Une distorsion du réseau modifie en général l'énergie du gaz d'électrons, ce qui conduit à une contribution aux modules élastiques. Elle est discutée par LEIGH [19] pour les conditions $T = 0$, $J = 0$ et BERNSTEIN [20] l'a complétée en incluant le développement en série de l'énergie jusqu'à l'ordre T^2 . Nous présentons dans ce qui suit l'extension des calculs de Leigh pour des températures quelconques et des effets d'échange; ensuite, les effets du gaz d'électrons sur les modules sont examinés pour les métaux de transition.

Les modules élastiques sont obtenus par la deuxième dérivée de l'énergie libre par rapport au volume ou aux cisaillements. Les derniers conservent le volume en premier ordre, ou bien des déformations de second ordre sont introduites pour compenser un petit changement de volume résultant des cisaillements (voir HUNTINGTON [21]). Sous ces conditions de constance de volume, les modules de cisaillement isothermes et adiabatiques s'avèrent être identiques et il suffit d'évaluer

$$G = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \gamma^2} \right)_T.$$

Les distorsions de la zone de Brillouin sont reliées aux déformations du réseau direct et la figure 3 montre l'exemple du réseau cubique à faces centrées pour les deux cisaillements $G = 1/2 (c_{11} - c_{12})$ et $G = c_{44}$. Une traction en direction [001] et compression dans les directions perpendiculaires du cristal, conservant le volume (le cisaillement γ changeant la forme est simplement la somme de l'allongement relatif en direction de la traction et du raccourcissement en directions perpendiculaires), produit pour la zone de Brillouin une inclinaison des faces hexagonales, tandis que les faces carrées s'approchent ou s'éloignent de l'origine distinctement pour les deux faces relatives à [001] ou les quatre faces en directions perpendiculaires. La compression en direction [111] du réseau réciproque, donc la déformation qui correspond à $G = c_{44}$ de l'autre côté, donne des distances variables des faces hexagonales depuis l'origine et peu de déplacement mais inclinaison des faces carrées.

Une distorsion de la zone de Brillouin affecte peu les états électroniques éloignés de ces discontinuités d'énergie, mais il ne sera pas de même si ces états se situent près de la surface de la zone de Brillouin. Pour cette raison, il faut s'attendre à une

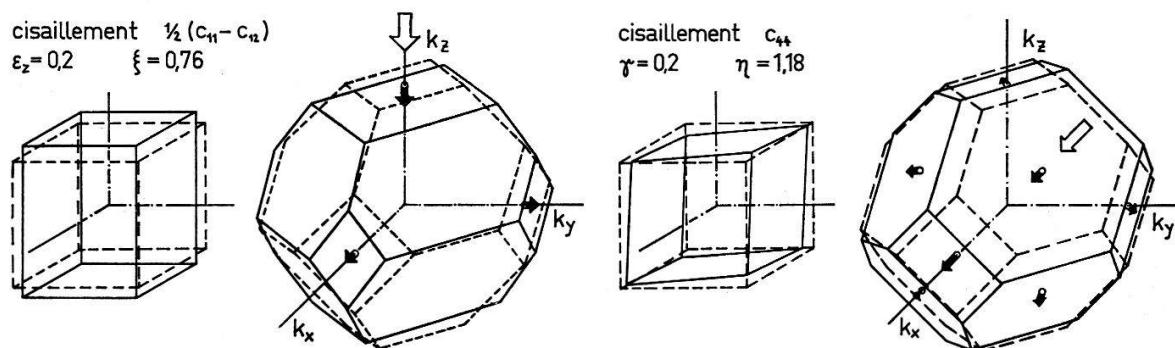


Figure 3

Les cisaillements indépendants $G = 1/2 (c_{11} - c_{12})$ et $G = c_{44}$ d'un cube et les distorsions correspondantes de la première zone de Brillouin pour le réseau cubique à faces centrées.

contribution marquée aux modules de cisaillement si l'énergie de Fermi est de l'ordre des énergies liées à la zone de Brillouin. Le détail de l'interaction dépend évidemment des propriétés topologiques de la surface de Fermi. L'exemple d'une situation favorable est le Pd qui possède une bande d'électrons-d presque remplie. Des observations expérimentales [22, 23], qui s'appuient sur les calculs de bande de FLETCHER [24] pour le Ni et de ALLAN [25] pour le Ni, Pd et Pt, montrent en effet que des poches de trous d'électrons-d se situent sur les surfaces carrées.

Dans le modèle de LEIGH [19], repris pour cette étude, il est supposé que les états électroniques voisins d'une face de la zone de Brillouin se déplacent comme cette face dans l'échelle des énergies. Aussi, les énergies des faces du même type dépendent d'une même fonction de ϱ_{ij} , où ϱ_{ij} signifie la distance de ces faces de la zone de Brillouin depuis l'origine. L'indice i se réfère aux différents types de face et j numérote les différentes paires de face d'une même type. Toutes les distances ϱ_{ij} sont donc fonction du cisaillement γ considéré et les états électroniques y relatifs forment des bandes partielles d'un ensemble de structure électronique. La distorsion de la zone Brillouin produit en conséquence un déplacement des électrons et réarrangement qui est sélectif envers le genre de cisaillement. Ce modèle ressemble aussi fortement à celui utilisé récemment par BARISIC et LABBÉ [26] pour calculer les constantes élastiques des composés du type V₃Si.

En supprimant les termes relatifs aux électrons non-affectés par la distorsion (zones intérieures), l'énergie libre devient

$$F = \sum_{ij} n_{ij} z_{ij} - \frac{1}{4} J \sum_{ij} n_{ij}^2 - k T \sum_{ij} \int_{E_{ij}}^{\infty} N_{ij} (E - E_{ij}) \times \ln \left(1 + \exp \left\{ \frac{z_{ij} - E}{k T} \right\} \right) dE . \quad (23)$$

Le paramètre E_{ij} décrit le fond de la bande partielle associée à la face ij de la zone de Brillouin et de même n_{ij} est son nombre partiel d'électrons et $N_{ij} (E - E_{ij})$ la densité d'état partielle. Il est utilisé l'hypothèse que l'énergie d'échange, exprimé par le second terme de l'énergie libre, soit considérable seulement pour les électrons appartenant aux faces i ; ceci se justifie, car l'échange est en général d'autant plus fort si le transfert d'impulsion est petit. L'énergie d'échange entre deux électrons de la même bande partielle sera donc plus grande que celle entre des électrons appartenant à des bandes différentes. Le facteur 1/4 du terme d'échange provient enfin de la notion que n_{ij} et $N_{ij} (E - E_{ij})$ comprennent les électrons des deux sortes de spin.

L'évaluation de la contribution des électrons aux modules de cisaillement suit les mêmes voies que le calcul précédent de la susceptibilité. Dans les deux cas, la contrainte extérieure, soit mécanique ou magnétique, provoque un déplacement des bandes partielles et ce déplacement conduit à un transfert d'électrons entre bandes partielles qui a pour conséquence un changement d'énergie.

Le potentiel chimique à l'équilibre est indépendant de ij

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial n_{ij}} \right)_T = z_{ij} - \frac{1}{2} J n_{ij} \quad (24)$$

où z_{ij} est le potentiel chimique pour $J = 0$, analogue au paramètre z_{\pm} de la formule (2). Le nombre de particules est

$$n_{ij} = \int_{E_{ij}}^{\infty} N_{ij} (E - E_{ij}) F_{ij}(E) dE \quad (25)$$

avec

$$F_{ij}(E) = \frac{1}{\exp \{(E - z_{ij})/k T\} + 1}.$$

La dérivée de (25) par rapport au cisaillement vaut

$$\frac{\partial n_{ij}}{\partial \gamma} = \int_{E_{ij}}^{\infty} N_{ij} (E - E_{ij}) \frac{\partial F_{ij}}{\partial E} dE \left(\frac{\partial E_{ij}}{\partial \gamma} - \frac{\partial z_{ij}}{\partial \gamma} \right). \quad (26)$$

Parce que E_{ij} est supposé n'être fonction que de ϱ_{ij} et parce que le volume est conservé

$$\sum_j \left(\frac{\partial E_{ij}}{\partial \gamma} \right)_0 = 0 \quad (27)$$

pour des raisons de symétrie et en position d'équilibre, désigné par l'indice 0. En outre, le nombre de particules étant indépendant de γ , il est

$$\sum_j \left(\frac{\partial n_{ij}}{\partial \gamma} \right)_0 = 0 \quad (28)$$

et avec (26)

$$\sum_j \left(\frac{\partial z_{ij}}{\partial \gamma} \right)_0 = 0 \quad (29)$$

et avec (24)

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial \gamma} \right)_0 = 0 \quad (30)$$

comme trouvé par LEIGH [19]. Mais l'inclusion de l'échange donne un nouvelle relation pour le potentiel

$$\left(\frac{\partial z_{ij}}{\partial \gamma} \right)_0 = \frac{1}{2} J \left(\frac{\partial n_{ij}}{\partial \gamma} \right)_0 \quad (31)$$

et les modules de cisaillement deviennent

$$\begin{aligned} G &= \frac{\partial^2 F}{\partial \gamma^2} = \sum_{ij} n_{ij} \left(\frac{\partial^2 E_{ij}}{\partial \gamma^2} \right)_0 + \sum_{ij} \left(\frac{\partial n_{ij}}{\partial \gamma} \right)_0 \left(\frac{\partial E_{ij}}{\partial \gamma} \right)_0 \\ &= \sum_{ij} n_{ij} \left(\frac{\partial^2 E_{ij}}{\partial \gamma^2} \right)_0 + \sum_{ij} \frac{\int N_{ij} (E - E_{ij}) (\partial F_{ij}/\partial E) dE}{1 + (1/2) J \int N_{ij} (E - E_{ij}) (\partial F_{ij}/\partial E) dE} \left(\frac{\partial E_{ij}}{\partial \gamma} \right)_0^2. \end{aligned} \quad (32)$$

Le premier terme provient du changement de l'énergie des bandes électroniques partielles et le deuxième terme est dû au transfert d'électrons entre ces différentes bandes. Dans le cas d'une bande remplie, le deuxième terme disparaît, pendant que le premier apporte toujours sa contribution. Le résultat s'applique aussi bien à des trous qu'à des électrons, cependant n_{ij} doit toujours être interprété en nombre d'électrons du fait qu'ils contribuent au premier terme pour une bande remplie.

Il est maintenant particulièrement intéressant de rechercher les corrélations entre modules de cisaillement et susceptibilité. La dernière est calculée pour un même modèle incluant l'échange, analogue à ce qui est décrit en chapitre 1, et donne

$$\chi = - \sum_{ij} \frac{\mu_0^2 \int N_{ij} (E - E_{ij}) (\partial F_{ij}/\partial E) dE}{1 + (1/2) \int N_{ij} (E - E_{ij}) (\partial F_{ij}/\partial E) dE}. \quad (33)$$

Exprimant $(\partial E_{ij}/\partial \gamma)_0$ par une valeur moyenne $(\partial E/\partial \gamma)_0$, il apparaît que le deuxième terme de la formule (32) est proportionnel à la susceptibilité sous les mêmes conditions. Combinant (32) et (33)

$$G(T) = \sum_{ij} n_{ij} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \gamma^2} \right)_0 - \frac{1}{\mu_0^2} \left(\frac{\partial E}{\partial \gamma} \right)_0^2 \chi(T) \quad (34)$$

et

$$\frac{dG}{dT} = \sum_{ij} \frac{\partial n_{ij}}{\partial T} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \gamma^2} \right)_0 - \frac{1}{\mu_0^2} \left(\frac{\partial E}{\partial \gamma} \right)_0^2 \frac{d\chi}{dT} \quad (35)$$

dont les premiers termes sont petits, car $(\partial^2 E/\partial \gamma^2)_0$ est faible près de la position d'équilibre et la dérivée $\partial n_{ij}/\partial T$ est nulle pour les bandes remplies.

Une contribution importante des électrons aux modules de cisaillement peut être attendue dans le cas d'une densité d'état élevée ou d'un grand facteur de Stoner. Remarquons aussi que le deuxième terme des modules (32) ne dépend que du comportement des états près de l'énergie de Fermi et ce terme est donc fort insensible à l'hypothèse quelque peu artificielle que la bande d'énergie suit le mouvement des surfaces de la zone de Brillouin jusqu'à une certaine profondeur (voir aussi réf. [27]).

La condition ci-dessus est réalisée dans les métaux de transition. Pour les alliages Rh-Pd-Ag, BELMAHI et al. [5] n'ont pas pu mettre en évidence directement la contribution des électrons au module de cisaillement G mais la relation (35) entre les coefficients de température était satisfaite.

Nous allons maintenant examiner ces relations pour l'ensemble des métaux de transition. La littérature scientifique et technique peut fournir assez de données pour la susceptibilité χ et son coefficient de température, le module élastique E , le module de compression K et leurs coefficients de température $e = (1/E)/(dE/dT)$ et $k = (1/K)/(dK/dT)$. Pour les dernières ont été utilisées seulement les mesures qui ont été obtenues de façon directe par le genre d'expérience employé (E à partir de mesures statiques ou de vibrations longitudinales ou de flexion de barres, K à partir des constantes monocrystallines obtenues par des techniques d'oscillations ou d'impulsions, etc. mais non pas les grandeurs calculées à l'aide des relations pour les polycristallins isotropes p.ex.). Des mesures directes sur le module de cisaillement sont rares, car ce n'est pas une grandeur qu'intéresse l'ingénieur. Il faut donc tout d'abord clarifier les relations entre E et G .

Pour le solide polycristallin sans texture, la relation quasi-isotrope entre E , G et K est

$$E = \frac{9KG}{3K+G} = 3G - \frac{G^2}{K} + \frac{G^3}{3K^2} - \frac{G^4}{9K^3} + \dots$$

et entre leurs coefficients de température elle est

$$e = \frac{d}{dT} \ln E = \frac{d}{dT} \left(\ln \frac{9KG}{3K+G} \right) = \frac{E}{3G} g + \frac{E}{9K} k \approx \left(1 - \frac{G}{3K} \right) g + \frac{G}{3K} k$$

si on utilise pour la dernière expression encore le développement en série de E . $G/3K$ ne dépasse pas environ 0,18 (moyenne env. 0,12) pour les métaux de transition et G^2/K vaut seulement 10% de 3G. Mais il y a un argument plus direct de démontrer que le module d'élasticité E décrit pratiquement le comportement du module de cisaillement, c'est de considérer séparément les parts de dilatation et de cisaillement sans changement de volume sous l'action d'une tension uniaxiale. ZENER [28] utilise cette séparation pour discuter le nombre de Poisson ν des monocristaux, qui est une

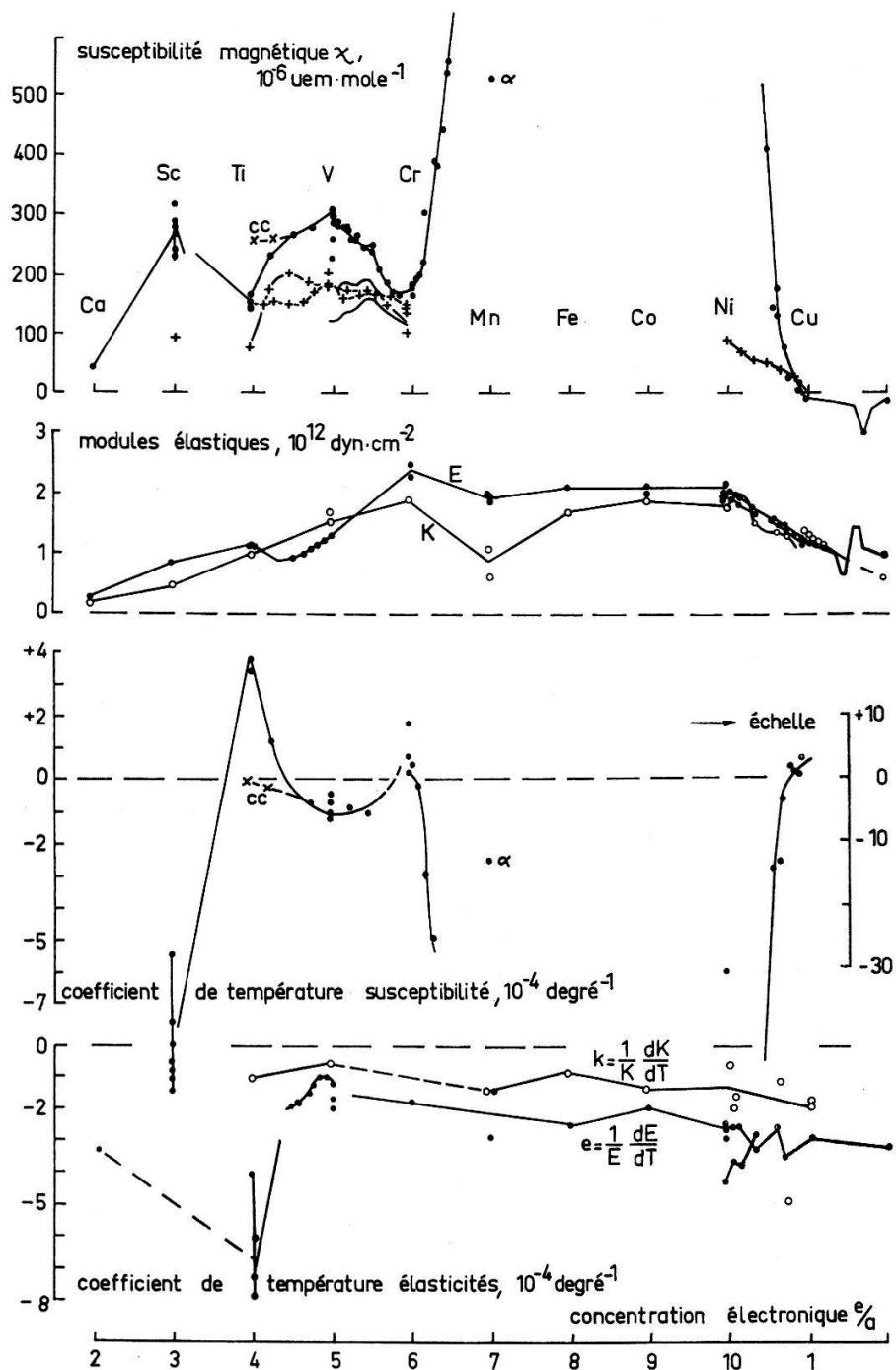


Figure 4

Susceptibilités magnétiques et modules élastiques et leurs coefficients de température des éléments et alliages de la période 4.

mesure des valeurs relatives des K et G . Pour le corps polycristallin quasi-isotrope, le rapport des déformations

$$\frac{\text{déformation sans changement volume}}{\text{dilatation} + \text{def. sans chang. vol.}} = \frac{3K}{3K+2G} = \frac{1+\nu}{2-\nu}$$

est de 0,73 à 0,91, avec une moyenne d'environ 0,8, pour les métaux de transition. La dilatation fait intervenir en particulier des contributions d'énergie électrostatique.

Les Figures 4, 5 et 6 donnent dans un même ordre les susceptibilités χ mesurées à température ambiante et les contributions orbitales χ_{orb} calculées ou mesurées, les

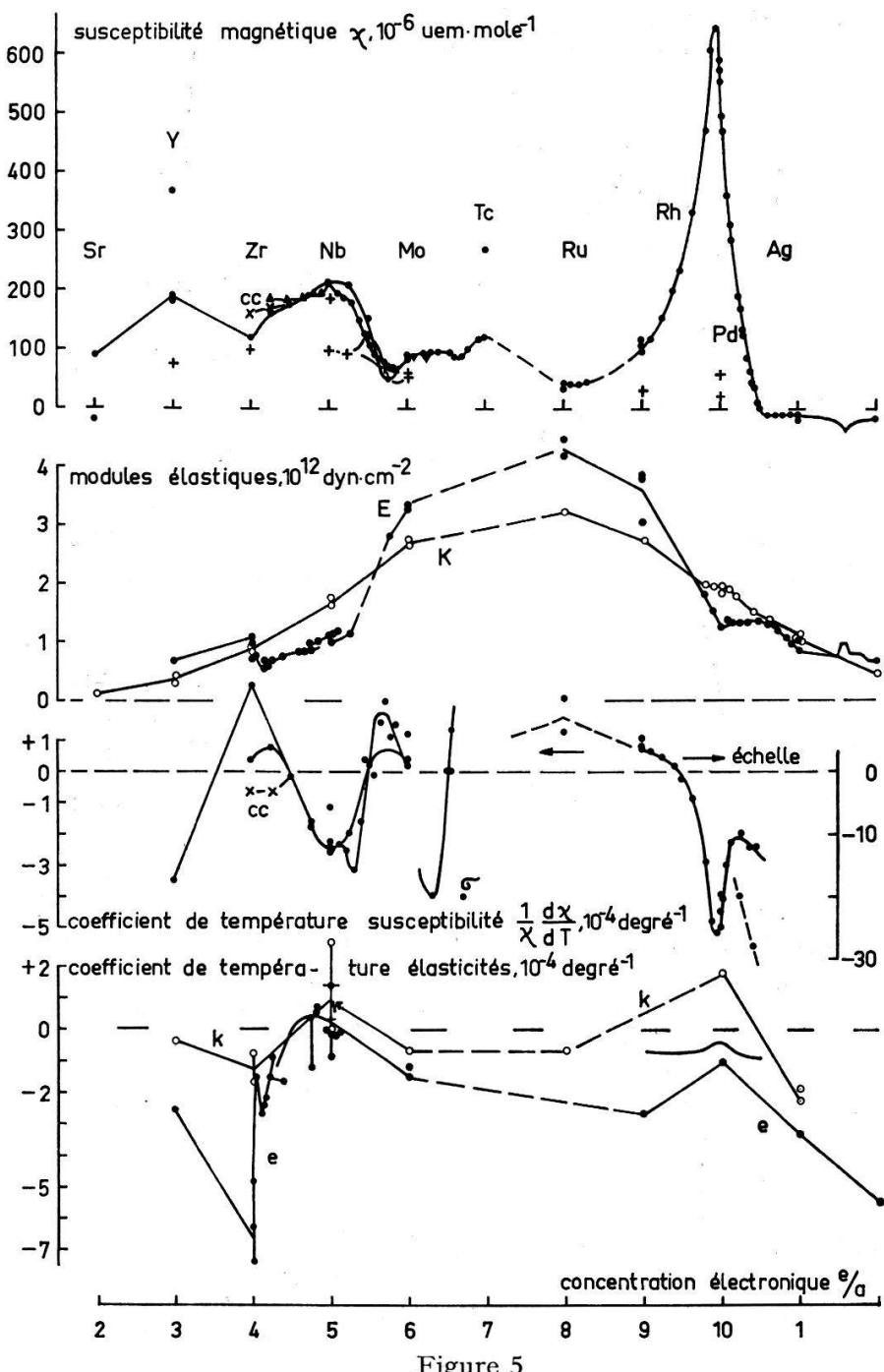


Figure 5

Susceptibilités magnétiques et modules élastiques et leurs coefficients de température des éléments et alliages de la période 5.

modules élastiques K et E à température ambiante, les coefficients de température de χ à température ambiante et les coefficients de température e et k 298 °K en fonction de la concentration électronique e/a pour les éléments de la période 4, 5 et 6 respectivement. Les alliages sont toujours composés d'éléments adjacents d'une même période (p.ex. Ti-V, V-Cr, Ni-Cu, Zr-Nb etc.), sauf pour les systèmes Nb-Ti, Nb-Cr, Nb-W, Mo-Re et V-Nb-Ta qui combinent éléments entre périodes et diffèrent de 0 ou 1 valence. Dans ces conditions, on fait appel au modèle de la bande rigide où les électrons forment une bande commune dont l'occupation est déterminée de façon unique par une concentration électronique moyenne (voir VOGT [29]). Le choix de la température ambiante pour déterminer les coefficients de température est arbitraire mais c'est sans conséquences. La contribution du réseau aux variations des modules élastiques avec la température devient en effet constante déjà en dessous de la température de Debye (voir HUNTINGTON [21]) et cette dernière est supérieure à 300 °K dans quelques cas

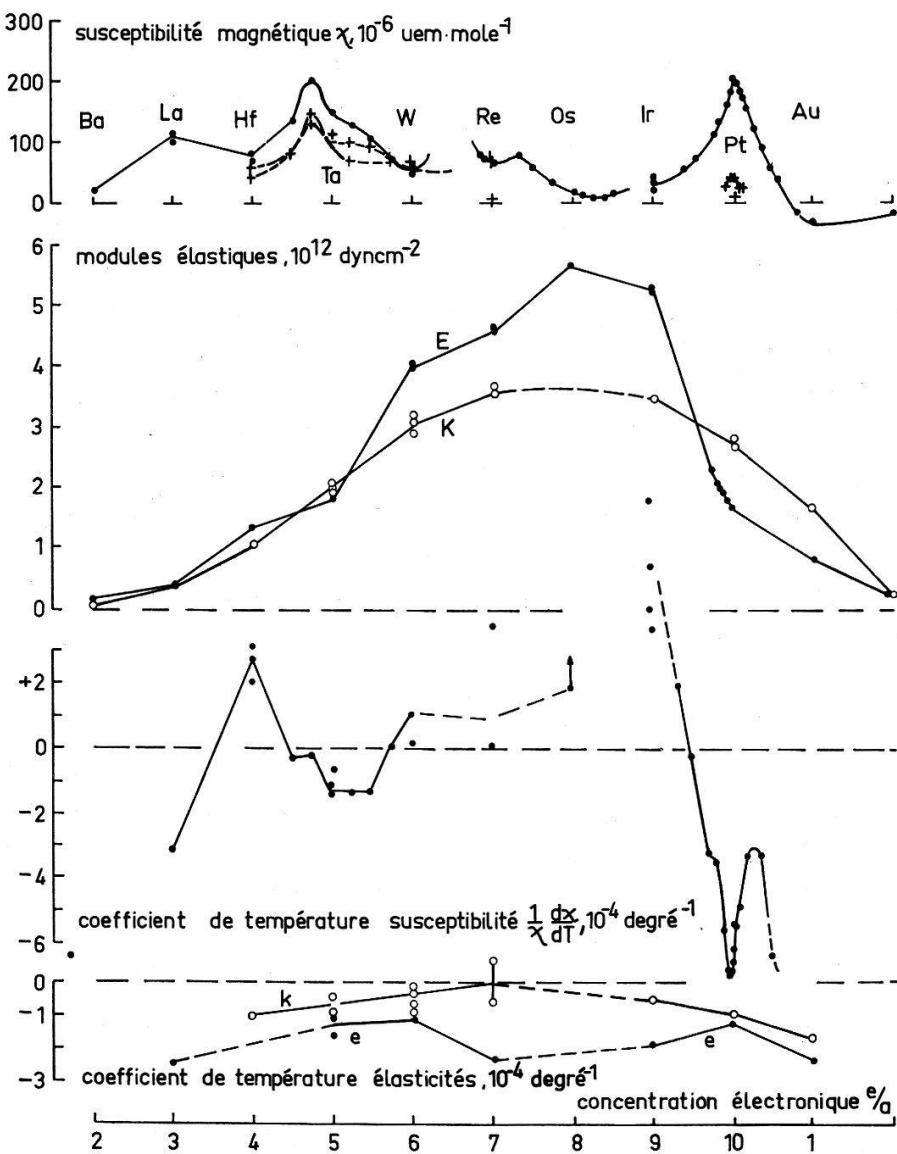


Figure 6

Susceptibilités magnétiques et modules élastiques et leurs coefficients de température des éléments et alliages de la période 6.

d'éléments ou alliages seulement (Ti, V, Cr, Mo, Ru, Rh, W, Re, Os, Ir). La contribution de la structure électronique d'autre part est contenue dans la formule du module de cisaillement (32) et de la susceptibilité (33) pour les températures quelconques par la fonction de Fermi-Dirac.

Ces données sur la susceptibilité et les modules élastiques sont tirées de nombreuses sources (voir bibliographie séparée). Il n'y a pas lieu de regarder ici la qualité de toutes ces données mais il faut remarquer que les matériaux d'essais étaient de différente pureté et que l'état métallurgique (homogénéisation, dégazage, traitement thermique final etc.) ne doit être identique pour les différentes expériences de propriétés magnétiques ou élastiques. Les métaux de transition sont p.ex. fort sensibles aux interstitiels dissous, qui provoquent de nombreux processus de relaxation et ces derniers modifient le comportement du module élastique.

La susceptibilité χ en période 4, 5 et 6 a l'allure identique de pics et vallées. Elle est généralement élevée depuis la concentration électronique $e/a = 3$ jusqu'à 6 et autour de 10. Là se situent les possibles contributions des électrons aux modules élastiques.

Le coefficient de température de la susceptibilité prend des valeurs positives et négatives qui sont expliquées par Stoner (voir WILSON [1]) et KRIESSMAN et CALLEN [30]; la position du niveau de Fermi et le nombre des deux sortes de spin dépendent en effet de la pente et courbure locale de la courbe de densité d'état. Pour que ce comportement du différentiel se manifeste nettement, il faut que la susceptibilité de spin soit suffisante et on admet aussi que la contribution diamagnétique et orbitale ne dépend pas ou peu de la température. $\chi - \chi_{\text{orb}}$ doit dépasser environ 20 uem. mole⁻¹. Cette interprétation est applicable pour les groupes 3, 4, 5 et peut être aussi 7, ou les concentrations électroniques $e/a = 3$ à 5,5 et autour de 7; les expériences de spectroscopie-X d'émission de MERZ et ULMER [31, 32] placent les niveaux de Fermi correctement dans les structures de bande calculées (MATTHEIS [33, 34]; LOUCKS [35]) pour donner les coefficients de température alternant de signe. Pour le Pd et Pt par contre, l'échange est prépondérant (BERK et SCHRIEFFER [2]; JENSEN et ANDRES [36]; EGGS et ULMER [37]) mais cet exhaussement d'échange est aussi fortement dépendant de la température (BRENIG [38]).

Le coefficient de température du module élastique montre pour les mêmes raisons des variations dans les deux sens et la formule (35) exige que les variations de e suivent une courbe en miroir du coefficient de température de χ . L'effet est le plus fort pour les éléments de la période 5 et semble aussi inclure l'Yttrium tout au début des métaux de transition et le Rhénium au milieu pour $e/a = 7$ (les données manquent pour Tc); selon le comportement de χ , la contribution à e serait positive pour Y et Tc et négative pour Re.

Dans les modules élastiques, le module de compression K reflète essentiellement la contribution d'énergie électrostatique interélectronique et doit donc atteindre un maximum au milieu de la bande-d. Grossièrement, le module élastique E suit une même courbe, mais une forte contribution des électrons de bande (terme de transfert en formule) est superposée dans la région des Ti-V, Zr-Nb-Mo, Pd, Ta, Pt, où E décroît subitement pour remonter ensuite. On peut utiliser les coefficients de température $(1/\chi)/(d\chi/dT)$ et e pour calculer le potentiel $(\partial E/\partial \gamma)$; introduit en formule (34), ΔG_{bande} peut aller jusqu'à $0,7 \cdot 10^{12}$ dyn. cm⁻² et est une contribution prépondérante.

Les coefficients de température de la susceptibilité et du module élastique pour la région $e/a = 4\text{--}6$ et des alliages à base d'éléments de la période 5 sont montrés en détail en figure 7. Ces coefficients de température sont réciproques l'un à l'autre suivant la formule (35), si on déduit de celui de l'élasticité le comportement d'un module «normal» (contribution du réseau et électrostatique) qui est d'environ $-3 \cdot 10^{-4}$ degré $^{-1}$ pour Zr et croît à environ $-1 \cdot 10^{-4}$ degré $^{-1}$ pour Mo. Les alliages de Nb-Ti, Nb-Cr, Nb-W et Mo-Re, c.à.d. entre éléments de périodes différentes mais de groupes voisins montrent un même comportement; il est bien connu que la structure de bande est assez semblable entre périodes et les niveaux de Fermi des composantes s'identifient.

La série isoélectronique V-Nb-Ta en figure 8 corrobore également les lois discutées.

Ces effets observés pour les métaux de transition sont indépendants de la structure cristalline; celles-ci sont hexagonales pour les concentrations électroniques $e/a = 3$ à environ 4,2, cubique centré pour $e/a = 4,2\text{--}4,9$ jusqu'à environ 6,5 suivant les systèmes et cubique à faces centrées à e/a supérieur à env. 8,5. Cette observation a une signification particulière pour les éléments du groupe 4 (Ti, Zr, Hf et leurs alliages) où la contribution électronique au module élastique est forte et négative. La décroissance rapide du module à température croissante provoque une instabilité de phase (tous les cisaillements indépendants doivent être positifs!) et est à l'origine du changement de phase hexagonal-cubique à haute température. Remarquons qu'une situation

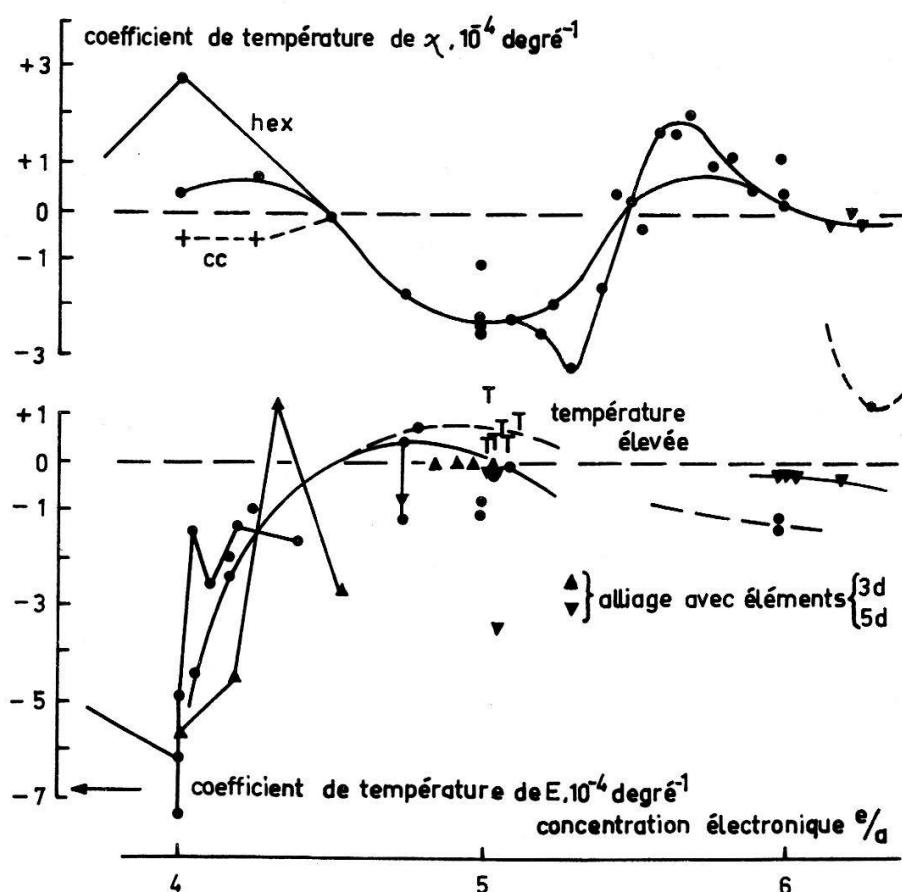


Figure 7

Coefficients de température de la susceptibilité et du module élastique en fonction de la concentration électronique $e/a = 4\text{--}6$ pour les alliages à base d'éléments de la période 5.

semblable se trouve pour les composés du type V_3Si , où une transformation martensitique à basse température (BATTERMAN et BARRETT [39]) est expliquée par la contribution des électrons de conduction qui peuvent stabiliser la phase cubique seulement à haute température (LABBÉ et FRIEDEL [40]).

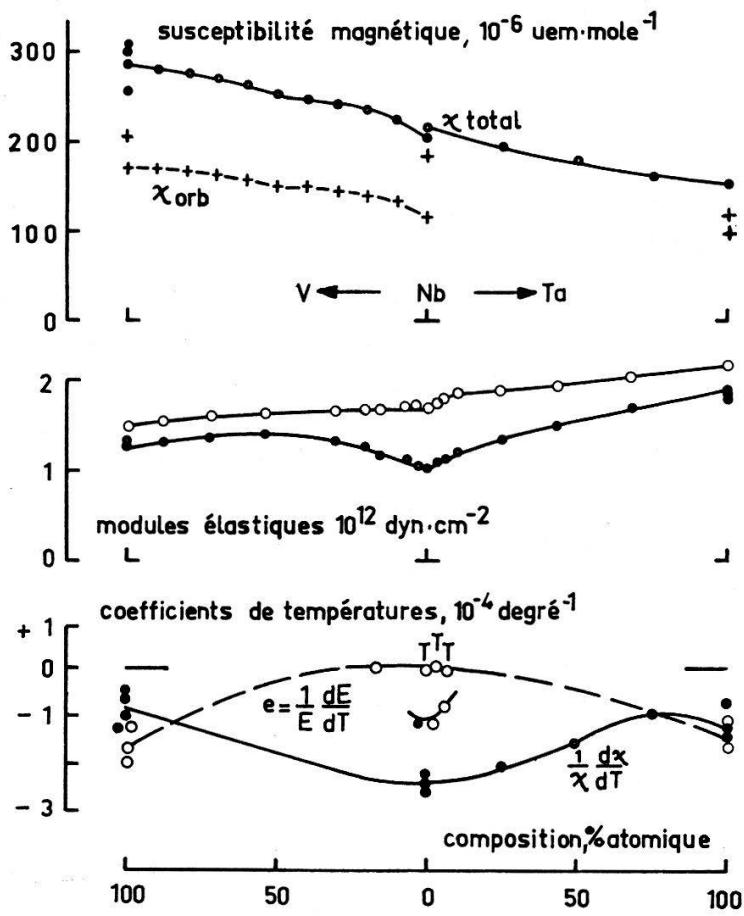


Figure 8

Susceptibilités magnétiques et modules élastiques et leurs coefficients de température pour la série isoélectronique V-Nb-Ta.

De ces données on peut tenter d'obtenir la quantité $(\partial E / \partial \gamma)_0$ qui est un potentiel de déformation. La variation en température de la susceptibilité $d\chi/dT$, obtenue des références citées avec les figures 4 à 8, comprend essentiellement la variation de χ_{spin} . Pour dG/dT de la formule (35) par contre, il faut déduire des valeurs observées la contribution du réseau, d'énergie électrostatique etc., ou simplement la variation d'un module «normal», non affecté d'effets de bande. Un tel module «normal» peut être trouvé dans les mesures sur les monocristaux qui diffèrent nettement l'influence; en effet, les coefficients de température des modules de cisaillement indépendants des métaux nobles et des métaux Mo, Ru, Re, W, Ir sont à peu près identiques mais ce n'est pas le cas pour les métaux Ti, V, Y, Zr, Nb, Pd, Hf, Pt où des règles se trouvent (Tableau 2). Ces différences proviennent de la contribution des bandes partielles, décrite en formule (32) par l'indice i , c.à.d. de la valeur particulière de la densité l'état N_i et du potentiel de déformation $(\partial E_{ij} / \partial \gamma)_0$ correspondant. Les coefficients de température de ces modules «normaux» sont tracés en figure 9 ainsi que les coefficients

Tableau 2
Comportement des modules

Réseau cubique (centré et à faces centrées)	$\left\{ \begin{array}{l} CP = 1/2 (c_{11} - c_{12}) \\ CS = c_{44} \end{array} \right.$	«normal» Coefficient de température plus positif
Réseau hexagonal	$\left\{ \begin{array}{l} CP = (c_{11} + c_{12} + 2c_{33} - 4c_{13}) \\ CS = 1/2 (c_{11} - c_{12}) \\ CT = c_{44} \end{array} \right.$	«normal» Coefficient de température plus négatif (Ti, Zr) et plus positif (Y) «normal»

de température $e = (1/E) (dE/dT)$ observés; les derniers se situent par dessus des premiers et dans d'autres régions de concentration électronique l'inverse se produit. Avec cette différence des coefficients de température et la relation «quasi-isotrope»

$$\frac{dG}{dT} = g G = e \frac{(1 - (E/9 K))}{(1 - (2 E/9 K))} \left(\frac{E}{3} + \frac{E^2}{27 K} + \dots \right) \approx \frac{1}{3 (1 - (2 E/9 K))} e E$$

sont maintenant obtenus les potentiels de déformation $(\partial E/\partial \gamma)_0$. Le premier terme de la formule (35) a été négligé. Les calculs sont approximatifs à deux égards; le module élastique n'est pas décomposé en parts «normal» et «anomal» et le coefficient de

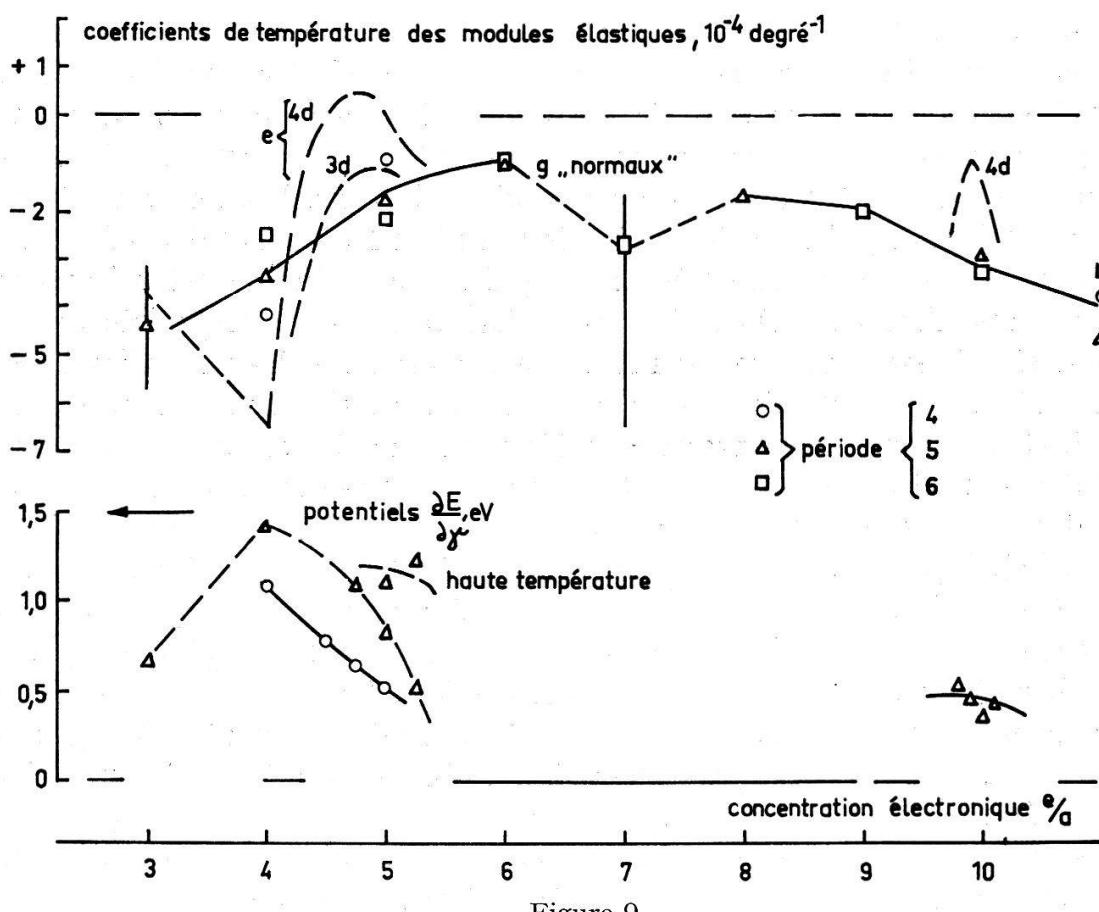


Figure 9

Coefficients de température des modules élastiques des alliages polycristallins et coefficients de température des modules de cisaillement «normaux» des monocristaux et les potentiels de déformation calculés à partir de la formule (35).

température du polycristal isotrope (orientation des cristallites) comprend en partie aussi le comportement du cisaillement «normal». Les potentiels ne sont pas nuls pour les concentrations électroniques $e/a = 3\text{--}5,5$ et autour de 10.

Ces calculs et considérations sur la contribution électronique au module de cisaillement sont valables pourvu que le temps de relaxation accompagnant le transfert des électrons soit infiniment rapide. L'étude des surfaces de Fermi par l'atténuation ultrasonique (exemples Mo, W [41]) ou les oscillations magnéto-acoustiques (exemples W, Re [42, 43]) reflète fidèlement les déformations jusqu'à des fréquences de 1 GHz. L'atténuation, exprimé en frottement interne Q^{-1} , n'est p.ex. que de l'ordre du 10^{-4} à 400 MHz pour le Mo et W (JONES et RAYNE [41]) et linéaire avec la fréquence suivant la théorie de PIPPARD [44].

Discussion

Nous avons vu en chapitre 3 et spécialement en Figures 4 à 6 que la corrélation entre la susceptibilité et l'élasticité apparaît essentiellement dans le module élastique (c.à.d. G , dont E dépend). En effet, le module de compression K est inversément proportionnel à la susceptibilité (formule 14) et E proportionnel à χ (formule 34), mais les constantes de proportionnalité sont $4 n_0^2 \mu_0^2$ et $1/\mu_0^2 (\partial E/\partial \gamma)_0^2$ et dans bien des cas, ce dernier facteur est plus important. Ainsi la discussion peut se concentrer sur le module de cisaillement.

ISENBERG [45], BOLEF [46] et FEATHERSTON et NEIGHBOURS [47] discutent les modules élastiques des métaux de transition à structure cubique centré à l'aide d'un modèle «d'électrons-d localisés». Mais les études de la diffusion inélastique des neutrons font supposer l'existence de forces de grande portée (Nb NAKAGAWA et Woods [48]; Mo Woods et CHEN [49]; article de revue [50]). Les courbes expérimentales de dispersion ont été analysées par le modèle de Born-von Karman et il s'avérait nécessaire de tenir compte des voisins très lointains. La signification de telles forces entre voisins distants n'est pas très claire mais n'est certes pas compatible avec des électrons-d «localisés». En outre, les auteurs remarquent que des anomalies de Kohn peuvent expliquer les particularités des courbes de dispersion pour le Nb. Woods et POWELL [51] trouvent que l'alliage riche en Nb donne une dispersion semblable au Nb pur et l'alliage de Mo reflète le comportement du métal de base et concluent que ces alliages désordonnés ont des structures électroniques et phononiques ordonnées (bande rigide). L'interprétation de tout cela par la contribution des électrons est réaliste et compatible avec nos résultats sur les modules élastiques, en particulier si on remarque encore que le modèle de Born-von Karman nécessite l'emploi de constantes de forces jusqu'aux 10èmes voisins pour le Nb et jusqu'aux 3èmes pour le Mo pour accorder les résultats; le transfert du moment est évidemment plus fort pour une susceptibilité élevée et en outre, le potentiel de déformation est grand pour le Nb et nul pour le Mo.

La distorsion de la surface de Fermi sous pression hydrostatique (TEMPLETON [52]) et traction uniaxiale (SHOENBERG et WATTS [53]) dans les métaux nobles, obtenue par l'effet de Haas-van Alphen, ne suit pas simplement l'échelle imposée par le changement de la zone de Brillouin, comme montre aussi JAN [54] à l'aide du modèle de Ziman. Notre modèle pour les modules élastiques tient compte d'un tel fait en laissant ouvert

les paramètres dans les deux termes de la formule (32). La distorsion de la zone de Brillouin ne peut pas directement imposer une échelle de distorsion pour la surface de Fermi (qui conserve le nombre de particules), car l'existence d'un potentiel de déformation de grandeur variable et l'anisotropie détruisent effectivement la proportionnalité. Pour en savoir davantage, il faudrait faire les calculs de la structure de bande sous contrainte.

Nous avons ainsi établi des relations générales entre la structure électronique et une contribution spéciale à l'élasticité des métaux de transition, relations au même rang que la chaleur électronique ou la température de transition supraconducteur p.ex. Pour vérifier ces relations par l'expérience et dégager les effets de bande il était essentiel d'utiliser le nouvel élément de la dérivée par rapport à la température, dans laquelle les contributions électroniques jouent un rôle essentiel. On doit conclure que ces études d'élasticité constituent aussi une intéressante méthode pour l'étude des structures électroniques, car ces mesures élastiques sont indépendantes du libre parcours des électrons et applicables pour des corps polycristallins. Pour pouvoir prouver ces relations, il était évidemment nécessaire de disposer de beaucoup de données sur des substances suffisamment exemptes de gaz; cela est aujourd'hui le cas.

Bibliographie

- [1] Voir: A. H. WILSON, *The Theory of Metals* (Cambridge 1958).
- [2] N. F. BERK et J. R. SCHRIEFFER, Phys. Rev. Lett. 17, 433 (1966).
- [3] D. W. BUDWORTH, F. E. HOARE et J. PRESTON, Proc. Roy. Soc. A 257, 250 (1960).
- [4] K. ANDRES, Phys. Kondens. Mat. 2, 294 (1964).
- [5] O. BELMAHI, M. MERCK, E. PERRÉARD, M. PETER, E. WALKER et J. R. SCHRIEFFER, Helv. phys. Acta 39, 338 (1966).
- [6] Voir: LANDOLT-BÖRNSTEIN, *Zahlenwerte und Funktionen*, IV. Band: *Technik*, 4. Teil: *Wärmetechnik*, a) *Wärmetechnische Messverfahren. Thermodynamische Eigenschaften homogener Stoffe* (Springer-Verlag 1967).
- [7] Voir: LANDOLT-BÖRNSTEIN, *Zahlenwerte und Funktionen*, II. Band: *Eigenschaften der Materie*, 9. Teil: *Magnetische Eigenschaften 1* (Springer-Verlag 1962).
- [8] G. BORELIUS, Ark. Fys. 28, 499 (1964).
- [9] P. W. BRIDGMAN, Proc. Amer. Acad. 70, 95 (1935).
- [10] P. W. BRIDGMAN, Proc. Amer. Acad. 76, 61, 75 (1948).
- [11] T. W. RICHARDS, J. Amer. Chem. Soc. 37, 1642 (1915).
- [12] F. S. HAM, Phys. Rev. 128, 82, 2524 (1962).
- [13] J. BARDEEN, J. Chem. Phys. 6, 367, 372 (1938).
- [14] A. O. E. ANIMALU et V. HEINE, Phil. Mag. 12, 1249 (1965).
- [15] K. A. GSCHNEIDER, *Physical Properties and Interrelationships*, Solid State Phys. (ed. F. SEITZ et D. TURNBULL) 16, 275 (1964) (Academic Press, New York and London).
- [16] Voir: CH. KITTEL, *Quantum Theory of Solids* (Wiley 1963).
- [17] R. I. BEECROFT et C. A. SWENSON, J. Phys. Chem. Solids 18, 329 (1961).
- [18] Les résultats des mesures représentés à la Figure 2 ne correspondent pas tout-à-fait à ceux de [17]. SWENSON (Comm. privées à K. A. GSCHNEIDER [15]) a trouvé une erreur dans l'étalonnage. Pour $T = 293^\circ\text{K}$ il donne comme valeur corrigée $K = 6,71 \cdot 10^{10} \text{ dyn/cm}^2$. Nous avons corrigé les autres résultats dans le même sens en supposant que la valeur corrigée pour $T = 293^\circ\text{K}$ correspond à la valeur moyenne des trois résultats donnés en [17] pour cette température.
- [19] R. S. LEIGH, Phil. Mag. 42, 139 (1951).
- [20] B. T. BERNSTEIN, Phys. Rev. 132, 50 (1963).
- [21] H. B. HUNTINGTON, *The Elastic Constants of Crystals*, Solid State Phys. (éd. F. SEITZ et D. TURNBULL) 7, 213 (1958) (Academic Press, New York and London).

- [22] J. J. VUILLEMIN et M. G. PRIESTLY, Phys. Rev. Lett. 14, 307 (1965).
- [23] N. E. ALEKSEEVSKII, G. E. KARSTENS et V. V. MOZHAEV, Soviet Phys. JETP 19, 1333 (1964).
- [24] G. C. FLETCHER, Proc. Phys. Soc. 65, 192 (1952).
- [25] G. ALLAN, Thèse, Fac. Sci. Orsay (1967).
- [26] S. BARISIC et J. LABBÉ, J. Phys. Chem. Solids 28, 2477 (1967).
- [27] Dans les résultats, nous ne trouvons que des dérivées de E_{ij} par rapport à γ . Comme nous supposons que la bande garde sa forme lors de la déformation du réseau et qu'elle n'est que décalée, nous pouvons considérer E_{ij} comme n'importe quelle énergie choisie de façon fixe aux environs de la surface $i j$. Il n'est en particulier pas nécessaire que le bord de la bande se trouve aux environs de la surface.
- [28] C. M. ZENER, *Elasticity and Anelasticity of Metals* (Univ. Chicago Press 1948).
- [29] E. VOGT, Z. angew. Phys. 21, 287 (1966).
- [30] C. J. KRIESSMAN et H. B. CALLEN, Phys. Rev. 94, 837 (1954).
- [31] H. MERZ et K. ULMER, Z. Phys. 210, 92 (1968).
- [32] H. MERZ et K. ULMER, Z. Phys. 212, 435 (1968).
- [33] L. F. MATTHEIS, Phys. Rev. 139, A1893 (1965).
- [34] L. F. MATTHEIS, Phys. Rev. 151, 450 (1966).
- [35] T. L. LOUCKS, Phys. Rev. 159, 544 (1967).
- [36] M. A. JENSEN et K. ANDRES, J. appl. Phys. 38, 1255 (1967).
- [37] J. EGGS et K. ULMER, Z. Phys. 213, 293 (1968).
- [38] W. BRENIG, Plenarvortrag 32. Physikertag 1967 Berlin, Verhandlungen DPG (1967), p. 38.
- [39] B. W. BATTERMAN et C. S. BARRETT, Phys. Rev. Lett. 13, 390 (1964).
- [40] J. LABBÉ et J. FRIEDEL, J. Phys. 27, 153, 303 (1966).
- [41] C. K. JONES et J. A. RAYNE, Phys. Lett. 13, 282 (1964).
- [42] J. A. RAYNE et H. SELL, Phys. Rev. Lett. 8, 199 (1962).
- [43] C. K. JONES et J. A. RAYNE, Phys. Rev. 139, A1876 (1965).
- [44] A. B. PIPPARD, Proc. Roy. Soc. A 257, 165 (1960).
- [45] I. ISENBERG, Phys. Rev. 83, 637 (1951).
- [46] D. I. BOLEF, J. appl. Phys. 32, 100 (1961).
- [47] F. H. FEATHERSTON et J. R. NEIGHBOURS, Phys. Rev. 130, 1324 (1963).
- [48] Y. NAKAGAWA et A. D. B. WOODS, *Lattice Dynamics*, Proc. Int. Conf. Copenhagen Aug. 5–9, 1963 (ed. R. F. WALLIS) (Pergamon Press 1965), p. 39.
- [49] A. D. B. WOODS et S. H. CHEN, Solid State Comm. 2, 233 (1964).
- [50] A. D. B. WOODS, Symposium on Inelastic Scattering of Neutrons by Condensed Systems, Brookhaven National Laboratory Sept. 20–22 (1965).
- [51] A. D. B. WOODS et B. M. POWELL, Phys. Rev. Lett. 15, 778 (1965).
- [52] I. M. TEMPLETON, Proc. Roy. Soc. A 292, 413 (1966).
- [53] D. SHOENBERG et B. R. WATTS, Phil. Mag. 13, 1275 (1967).
- [54] J. P. JAN, J. Phys. Chem. Solids 29, 561 (1968).

Origine des données contenues en figures 4 à 9

- A) Susceptibilité des métaux purs: Ca O12; Sc B39, NTS 63, VG 63, AGP64, CP64; Ti K39, SK41, KTW61, KW65; V K39, K53, CGP59, BT61, KTW61, KW65; Cr MK52, WK64; Mn KM53; Cu LB62; Zn LB62; Sr O12, RS41; Y B39, CP64, GP68; Zr K39, SK41, KTW61; Nb K53, KTW61; Mo K53, KTW61; Tc NBS54; Ru GB31, KTW61, WK67; Rh GB31, HW51, HM52, KTW61, WK67; Pd HW51, HM52, KTW61, WK67; Ag LB62; Cd LB62; Ba L33; La B39, L57; Hf KM53, KTW61, VG64; Ta HW51, K53, KTW61; W K53, KTW61; Re PC33, NBS54, KTW61; Os GB31, WK67; Ir GB31, HM52, KTW61, WK67; Pt HW51, HM52, KTW61, WK67; Au LB62; Hg LB62.
- B) Susceptibilité des alliages: Sc-Ti AGP64; Ti-V TTW62; V-Cr CGP60, TTW62; Cr-Mn TTW62, LMRRST67; Ni-Cu KS43, STK63; Cu-Zn LB62; Zr-Nb TTW62; Nb-Ti JPM61; V-Nb LSV67; Nb-Ta TTW62; Nb-Mo JPM61, JM62, TTW62; Mo-Tc LVP64; Mo-Re JM62, LMRRST67; Ru-Rh B68; Rh-Pd BHP60; Pd-Ag S32, W52, HMW53; Ag-Cd LB62; Hf-Ta TTW62; Ta-W TTW62; W-Re B68; Re-Os B68; Os-Ir B68; Ir-Pt BHP60; Pt-Au BHP60.

- C) Contribution orbitale à la susceptibilité: Sc GP65; V HB66; Cr STK62, DL63; Y GPT65; Zr SK64; Nb BH68; Rh SJW65; Pd WK67, BH68; Ta BH68; Pt WK67; Ti-V-Cr STK63b, B64, M65; Ni-Cu STK63a, M65; Nb-Mo VLSK63; Hf-Ta-W-Re KS66; Ir-Pt-Au SK64.

Références pour les parts A), B) et C): AGP64 R. A. ANDERSON, W. E. GARDNER et J. PENFOLD, Proc. Int. Conf. Magnetism Nottingham 1964, Inst. Phys. et Phys. Soc., London, p. 186; B39 H. BOMMER, Z. Elektrochem. 45, 357 (1939); B64 J. BUTTERWORTH, Proc. Phys. Soc. 83, 71 (1964); B68 J. G. BOOTH, Phil. Mag. 17, 205 (1968); BH68 D. BALDOCK et R. HUGUENIN, sera publié (1968); BHP60 D. W. BUDWORTH, F. E. HOARE et J. PRESTON, Proc. Roy. Soc. A 257, 250 (1960); BT61 J. P. BURGER et M. A. TAYLOR, Phys. Rev. Lett. 6, 185 (1961); CGP59 B. G. CHILDS, W. E. GARDNER et J. PENFOLD, Phil. Mag. 4, 1126 (1959); CGP60 B. G. CHILDS, W. E. GARDNER et J. PENFOLD, Phil. Mag. 5, 1267 (1960); CP64 V. I. CHECHERNIKOV et I. POP, Izv. Akad. Nauk. SSSR, Ser. fiz. 28, 748 (1964); CP64 V. I. CHECHERNIKOV et I. POP, Zh. Eksp. Theor. Fiz. USSR 46, 1226 (1964); DL 63 J. S. DENBIGH et W. M. LOMER, Proc. Phys. Soc. 82, 156 (1963); GB31 A. N. GUTHRIE et L. T. BOURLAND, Phys. Rev. 37, 303 (1931); GP65 W. E. GARDNER et J. PENFOLD, Phil. Mag. 11, 549 (1965); GP68 W. E. GARDNER et J. PENFOLD, Phys. Lett. 26A, 204 (1968); GPT65 W. E. GARDNER, J. PENFOLD et M. A. TAYLOR, Proc. Phys. Soc. 85, 963 (1965); HB66 R. HUGUENIN et D. BALDOCK, Phys. Rev. Lett. 16, 795 (1966); HM52 F. E. HOARE et J. C. MATTHEWS, Proc. Roy. Soc. A 212, 137 (1952); HMW53 F. E. HOARE, J. C. MATTHEWS et J. C. WALLING, Proc. Roy. Soc. A 216, 502 (1953); HW51 F. E. HOARE et J. C. WALLING, Proc. Phys. Soc. B64, 337 (1951); JM62 D. W. JONES et A. D. McQUILLAN, J. Phys. Chem. Solids 23, 1441 (1962); JPQ61 D. W. JONES, N. PESSALL et A. D. McQUILLAN, Phil. Mag. 6, 455 (1961); K39 L. KLEMM, Z. Elektrochem. 45, 354 (1939); K53 C. J. KRIESSMAN, Rev. Mod. Phys. 25, 122 (1953); KC54 C. J. KRIESSMAN et H. B. CALLEN, Phys. Rev. 94, 837 (1954); KM53 C. J. KRIESSMAN et T. R. MC GUIRE, Phys. Rev. 90, 374 (1953); KS43 A. R. KAUFMANN et C. STARR, Phys. Rev. 63, 445 (1943); KS66 A. KATSUKI et M. SHIMIZU, J. Phys. Soc. Japan 21, 279 (1966); KTW61 H. KOJIMA, R. S. TEBBLE et D. E. G. WILLIAMS, Proc. Roy. Soc. A 260, 237 (1961); KW65 R. KOHLHAAS et W. D. WEISS, Z. Naturforsch. 20a, 1227 (1965); L33 C. T. LANE, Phys. Rev. 44, 43 (1933); L57 J. M. LOCK, Proc. Phys. Soc. B70, 476, 566 (1957); LB62 LANDOLT-BÖRNSTEIN: *Zahlenwerte und Funktionen*, II. Band *Eigenschaften der Materie*, 9. Teil *Magnetische Eigenschaften 1* (Springer-Verlag 1962); LMRRST67 D. A. LEVINA, YU. V. MILMAN, A. N. RAKITSKY, A. P. RACHEK, V. I. SILANTYEV et V. I. TREFILOV, Ukrain. fiz. Zh. 12, 1264 (1967); LSV67 D. J. LAM, J. J. SPOKAS et D. O. VANOSTENBURG, Phys. Rev. 156, 735 (1967); LVP64 D. J. LAM, D. O. VANOSTENBURG et D. W. PRACHT, J. appl. Phys. 35, 976 (1964); M65 N. MORI, J. Phys. Soc. Japan 20, 1383 (1965); MK52 T. R. MC GUIRE et C. J. KRIESSMAN, Phys. Rev. 85, 452 (1952); NBS54 C. M. NELSON, G. E. BOYD et W. T. SMITH, J. Amer. Chem. Soc. 76, 348 (1954); NTS63 O. P. NAUMKIN, V. F. TEREKHOVA et YE. M. SAVITSKIY, Fiz. metal. metalloved 16, 663 (1963); O12 M. OWEN, Ann. Phys. 37, 617 (1912); PC33 N. PERAKIS et L. CAPATOS, Compt. rend. 196, 611 (1933); RS41 S. R. RAO et K. SAVITHRI, Proc. Ind. Acad. Sci. 14A, 584 (1941); S32 B. SVENSSON, Ann. Phys. 14, G99 (1932); SJW65 J. A. SEITCHIK, V. JACCARINO et J. H. WERNICK, Phys. Rev. 138, A148 (1965); SK41 C. F. SQUIRE et A. R. KAUFMANN, J. Chem. Phys. 9, 673 (1941); SK64 M. SHIMIZU et A. KATSUKI, J. Phys. Soc. Japan 19, 1135 (1964); SK64 M. SHIMIZU et A. KATSUKI, J. Phys. Soc. Japan 19, 1856 (1964); STK62 M. SHIMIZU, T. TAKAHASHI et A. KATSUKI, J. Phys. Soc. Japan 17, 1740 (1962); STK63a M. SHIMIZU, T. TAKAHASHI et A. KATSUKI, J. Phys. Soc. Japan 18, 801 (1963); STK63b M. SHIMIZU, T. TAKAHASHI et A. KATSUKI, J. Phys. Soc. Japan 18, 1192 (1963); TTW62 S. TANIGUCHI, R. S. TEBBLE et D. E. G. WILLIAMS, Proc. Roy. Soc. 265A, 502 (1962); VG63 N. V. VOLKENSTEYN et E. V. GALOSHINA, Fiz. metal. metalloved 16, 298 (1963); VG64 N. V. VOLKENSTEYN et E. V. GALOSHINA, Fiz. metal. metalloved 18, 784 (1964); VLSK63 D. O. VANOSTENBURG, D. J. LAM, M. SHIMIZU et A. KATSUKI, J. Phys. Soc. Japan 18, 1744 (1963); W52 J. WUCHER, Ann. Phys. 7, 318 (1952); WK64 W. D. WEISS et R. KOHLHAAS, Z. Naturforschg. 19a, 1631 (1964); WK67 W. D. WEISS et R. KOHLHAAS, Z. angew. Phys. 23, 175 (1967).

- D) Modules élastiques des métaux purs polycristallins et monocrystallins: Ca K48; Sc G64; Ti K48, BR60, AB64, FR64, LB65; V A60, B61, AB64, LB64; Cr AB64; Mn K48, R68a; Fe K48, RC61; Co K48, M55, FD67; Ni K48, ANS60, AB64, LB64; Cu K48, NS54, OG55, R58, CH66; Zn K48; Y SCS57, SG60, LB65; Zr K48, M60, AB64, FR64; Nb B61, C62, AB65, ADB66; Mo K48, FN63, AB64; Ru LB64, FD67; Rh K48; Pd K48, R60; Ag K48, NA58, CH66;

Cd K48; Ba K48; La K48; Hf FR64; Ta K48, B61, FN63, AB64, S66; W K48, M60, B62, FN63, AB64, LG65; Re LB64, SS65, FD67; Os LB64; Ir K48, MRJ66, R68b; Pt K48, MRJ65; Au K48, NA58, CH66; Hg G64.

- E) Modules élastiques d'alliages: Ti-V LB64; Ni-Cu PKF57, OF66; Cu-Zn KR48, NS54, R58; Zr-Nb BRS57, AAP66, NGH66, H67; Nb-Ti FB64, TUM64; Nb-V NC66, H67; Nb-Ta TUM64, NC66, H67; Nb-Mo TUM64, MS68; Nb-Cr TUM64; Mo-Re UT64; Nb-W TUM64, H67; Rh-Pd BMPPWS66; Pd-Ag KR48, BMPPWS66; Ag-Cd KR48, BS56; Ir-Pt KR48.

Références pour les parts D) et E): A60 G. A. ALERS, Phys. Rev. 119, 1532 (1960); AAP66 H. ALBERT, F. ASSMUS et I. PFEIFFER, Solid State Comm. 4, 519 (1966); AB64 P. E. ARMSTRONG et H. L. BROWN, Trans. Met. Soc. AIME 230, 962 (1964); AB65 P. E. ARMSTRONG et H. L. BROWN, Trans. ASM 58, 30 (1965); ADB66 P. E. ARMSTRONG, J. M. DICKINSON et H. L. BROWN, Trans. Met. Soc. AIME 236, 1404 (1966); ANS60 G. A. ALERS, J. R. NEIGHBOURS et H. SATO, J. Phys. Chem. Solids 13, 40 (1960); B61 D. I. BOLEF, J. appl. Phys. 32, 100 (1961); B62 B. T. BERNSTEIN, J. appl. Phys. 33, 2140 (1962); BMPPWS66 O. BELMAHI, M. MERCK, E. PERRÉARD, M. PETER, E. WALKER et J. R. SCHRIEFFER, Helv. phys. Acta 39, 338 (1966); BR60 K. BUNGARDT et K. RUEDINGER, Metall 14, 988 (1960); BRS57 YU. F. BYCHKOV, A. N. ROZANOV et D. M. SKOROV, Zh. Atomic Energi USSR 2, 146 (1957); BS56 R. BACON et C. S. SMITH, Acta Metallurgica 4, 337 (1956); C62 K. J. CARROLL, Bull. Amer. Phys. Soc. 7, 123 (1962) et J. appl. Phys. 36, 3689 (1965); CH66 Y. A. CHANG et L. HIMMEL, J. appl. Phys. 37, 3567 (1966); FB64 S. G. FEDOTOV et P. K. BELOUSOV, Fiz. metal. metalloved 17, 732 (1964); FD67 E. S. FISHER et D. DEVER, Trans. Met. Soc. AIME 239, 48 (1967); FN63 F. H. FEATHERSTON et J. R. NEIGHBOURS, Phys. Rev. 130, 1324 (1963); FR64 E. S. FISHER et C. J. RENKEN, Phys. Rev. 135, A482 (1964); G64 K. A. GSCHNEIDER, Solid State Phys. (ed. F. SEITZ et D. TURNBULL) 16, 275 (1964); H67 B. HARRIS, J. Less-Common Metals 12, 247 (1967); K48 W. KOESTER, Z. Metallkunde 39, 1 (1948); KR48 W. KOESTER et W. RAUSCHER, Z. Metallkunde 39, 111 (1948); LB64 LANDOLT-BÖRNSTEIN, *Zahlenwerte und Funktionen*, IV. Band Technik, 2. Teil *Stoffwerte und Verhalten von metallischen Werkstoffen*, Bandteil b) (1964); LB65 LANDOLT-BÖRNSTEIN, *Zahlenwerte und Funktionen*, IV. Band Technik, 2. Teil *Stoffwerte und Verhalten von metallischen Werkstoffen*, Bandteil c) (1965); LG65 R. LOWRIE et A. M. GONAS, J. appl. Phys. 36, 2189 (1965); M55 H. J. McSKIMIN, J. appl. Phys. 26, 406 (1955); M60 A. MYERS, Phil. Mag. 5, 927 (1960); MRJ65 R. E. MACFARLANE, J. A. RAYNE et C. K. JONES, Phys. Lett. 18, 91 (1965); MRJ66 R. E. MACFARLANE, J. A. RAYNE et C. K. JONES, Phys. Lett. 20, 234 (1966); MS68 I. MILNE et R. E. SMALLMAN, Trans. Soc. AIME 242, 120 (1968); NA58 J. R. NEIGHBOURS et G. A. ALERS, Phys. Rev. 111, 707 (1958); NC66 M. M. NEDYUKHA et V. G. CHERNYY, Fiz. metal. metalloved 22, 114 (1966); NGH66 C. W. NELSON, D. F. GIBBONS et R. F. HEHEMANN, J. appl. Phys. 34, 4677 (1966); NS54 J. R. NEIGHBOURS et C. S. SMITH, Acta Metallurgica 2, 591 (1954); OF66 A. F. ORLOV et S. G. FEDOTOV, Fiz. metal. metalloved 22, 137 (1966); OG55 W. C. OVERTON et J. GAFFNEY, Phys. Rev. 98, 969 (1955); PKF57 V. A. PAVLOV, N. F. KRIUTCHKOV et I. D. FEDOTOV, Fiz. metal. metalloved 5, 374 (1957); R58 J. A. RAYNE, Phys. Rev. 112, 1125 (1958); R60 J. A. RAYNE, Phys. Rev. 118, 1545 (1960); R68a M. ROSEN, Phys. Rev. 165, 357 (1968); R68b J. A. RAYNE, communication personnelle (1968); RC61 J. A. RAYNE et B. S. CHANDRASEKHAR, Phys. Rev. 122, 1714 (1961); S66 N. SOGA, J. appl. Phys. 37, 3416 (1966); SCS57 J. F. SMITH, C. E. CARLSON et F. H. SPEDDING, J. Metals Trans. AIME 209, 1212 (1957); SG60 J. F. SMITH et J. A. GJEVRE, J. appl. Phys. 31, 645 (1960); SS65 M. L. SHEPARD et J. F. SMITH, J. appl. Phys. 36, 1447 (1965); TUM64 N. D. TARASOV, R. A. ULYANOV et YA. D. MIKHAYLOV, Fiz. metal. metalloved 18, 740 (1964); UT64 R. A. ULJANOV et N. D. TARASOV, Tsvetnaya Met. No. 2, 140 (1964).