

T0051
1969/DS

N° d'ordre A. O. 3696

THÈSE

présentée

A LA FACULTÉ DES SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS - SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Alex WAITAL

MAITRE - ASSISTANT

DEUXIÈME THÈSE

Centre National de la Recherche Scientifique
Laboratoire de Mécanique
et de Physique des Solides
Centre de Recherches sur les
Très Basses Températures
BIBLIOTHÈQUE

Réduction des Tenseurs Cristallographiques

Soutenues le 19 Décembre 1969, devant la Commission d'Examen

MM. L NÉEL

E. F. BERTAUT

P. DUCROS

M. MAREZIO

Président

Examineurs

Table des Matières

<u>Introduction</u>	1
<u>Chapitre I : Les classes de symétrie d'orientation et les classes magnétiques</u>	4
A - <u>Les classes de symétrie d'orientation</u>	4
1) Les opérations de symétrie et la notion de groupe	4
2) Les groupes ponctuels	4
3) Représentation des groupes : Rappel des théorèmes fondamentaux de la théorie des groupes.	11
4) Représentations irréductibles des groupes ponctuels	21
B - <u>Les classes magnétiques</u>	26
1) L'opération renversement du temps	26
2) Les groupes magnétiques associés aux représentations irréductibles de dimension un du groupe cristallographique correspondant.	27
<u>Chapitre II : Notions sur les tenseurs</u>	
A - <u>Notions générales sur les tenseurs en repères orthonormes</u>	32
1) Définition	32
2) Algèbre des tenseurs	33
3) Tenseurs cristallographiques	35
4) Tenseurs axiaux	37
B - <u>Représentation tensorielle des grandeurs physiques</u>	38
1) Tenseur représentatif d'une propriété physique	38
2) Symétrie intrinsèque des propriétés physiques	40

<u>Chapitre III : Méthodes de réductions des tenseurs</u>	41
<u>1) Introduction</u>	41
2) Méthodes classiques de calcul de a_1	42
3) Simplification et généralisation de la méthode de JAHN	43
a) Cas des tenseurs polaires	43
b) Cas des tenseurs axiaux	46
c) Cas des tenseurs magnétiques dans le domaine paramagnétique	47
d) Algèbre des représentations irréductibles	47
e) Cas des tenseurs dans la symétrie des 90 groupes magnétiques	53
<u>4) Conclusion</u>	

INTRODUCTION

Les propriétés physiques d'un solide peuvent se représenter quantitativement par des constantes qui expriment la relation entre la grandeur d'une excitation et la grandeur de la réponse correspondante.



L'étude des propriétés du solide peut se faire dans deux directions principales :

α) Prévoir les conditions d'existence de telle ou telle propriété physique et dénombrer les constantes décrivant la propriété du solide,

β) Relier les constantes physiques macroscopiques aux propriétés microscopiques du solide.

Nous nous limitons à l'approche α), ce qui donne à cette étude un caractère purement phénoménologique.

L'effet de la symétrie d'un cristal sur ses propriétés physiques peut être étudié en acceptant comme postulat fondamental de la physique cristalline le principe de Neuman (ou de Curie) qui s'énonce ainsi :

"Les éléments de symétrie de toute propriété physique d'un cristal doivent inclure les éléments de symétrie de la classe de symétrie d'orientation du cristal".

C'est dire que les éléments de symétrie des propriétés physiques doivent contenir ceux de la classe de symétrie d'orientation (les propriétés physiques possèdent souvent plus de symétrie que la classe, ex. isotropie optique des cristaux cubiques).

Dans le contexte de ce travail, il faut aussi étendre la notion de classe de symétrie d'orientation, qui ne se limite plus aux 32 classes cristallographiques. En effet, une propriété physique telle que le piézo-magnétisme n'existerait pas si l'on ne considérait que les 32 classes usuelles. Le terme *"classe d'orientation de symétrie"* signifiera donc la classe de symétrie appropriée à la nature de la propriété physique, soit une des 32 classes usuelles, soit une des 90 classes magnétiques.

Soit A une excitation d'un cristal de symétrie G, B la réponse : les grandeurs physiques A et B sont représentées par des tenseurs d'ordres respectifs p et q, leur couplage s'exprime par une relation tensorielle de la forme :

$$B_{ijk\dots} = \sum_{lmn\dots} a_{ijk\dots lmn\dots} A_{lmn\dots}$$

Le tenseur a , d'ordre $p + q$, est caractéristique du cristal (Il peut aussi posséder une symétrie intrinsèque).

Il s'agit d'étudier les restrictions que lui impose la symétrie G . La théorie des groupes nous offre un outil puissant pour cela.

Le *premier chapitre* consistera en un rappel de la symétrie axé sur la théorie des groupes.

Dans le *chapitre II*, nous rappellerons quelques propriétés tensorielles d'un point de vue mathématique et physique.

Dans le *chapitre III*, nous exposerons les méthodes de réduction des tenseurs, en explicitant particulièrement une méthode dérivée des travaux de Jahn.

Tous les théorèmes nécessaires à la compréhension du texte seront donnés sans démonstration, notre ambition étant de donner un outil de travail aux cristallographes désireux de savoir rapidement et aisément si tel effet physique est possible ou non dans un cristal de symétrie donné, et désireux de connaître le nombre des constantes décrivant la propriété du solide.

CHAPITRE I

LES CLASSES DE SYMETRIE D'ORIENTATION ET LES CLASSES MAGNETIQUES

A - LES CLASSES DE SYMETRIE D'ORIENTATION

I - OPERATION DE SYMETRIE ET LA NOTION DE GROUPE DE SYMETRIE

La symétrie d'un corps est déterminée par l'ensemble des déplacements qui amènent ce corps à coïncider avec lui-même.

On appelle ces déplacements des transformations de symétrie ; on distingue trois types essentiels de transformations :

- 1) la rotation,
- 2) la réflexion (ou symétrie plane),
- 3) la translation

Ces éléments de symétrie ne peuvent se grouper que selon des règles géométriques bien définies.

En dénombrant de façon complète les possibilités de combinaison des deux premiers types de symétrie, on arrive à 32 groupements, que l'on appelle les 32 classes de symétrie d'orientation des cristaux ou groupes ponctuels.

L'ensemble de tous les opérateurs de symétrie appartenant à une classe forme un groupe fini au sens des mathématiques.

II - LES GROUPES PONCTUELS

Dans ce paragraphe, nous énumérons les différents groupes ponctuels

(sans les construire) et nous explicitons les opérateurs de symétrie.

A) Les groupes propres

a) groupes C_n (groupes cycliques)

Le groupe C_n est le groupe des rotations autour d'un axe de symétrie n-aire ; il est cyclique.

b) groupes D_n (groupes diédriques)

On associe à un axe de symétrie n-aire un axe binaire orthogonal.

c) groupes T (groupes du tétraèdre)

Le système d'axes de ce groupe est le système d'axes de symétrie du tétraèdre.

d) groupes O (groupes de l'octaèdre)

Le système d'axes de ce groupe est celui des axes de symétrie du cube.

Tous ces groupes ne possèdent que des axes de symétrie ; ce sont des groupes propres.

B) A partir des 11 groupes précédents qui sont des groupes propres, on peut construire 11 autres groupes, en formant le produit direct d'un de ces groupes propres avec le groupe \bar{I} qui consiste en deux éléments E et i : (E : élément identité ; i : centre d'inversion).

TABLEAU I

=====

N°	Symbole		Eléments de symétrie
	International	Schönflies	
1	1	C_1	E
2	2	C_2	E C_2
3	3	C_3	E $2C_3$
4	4	C_4	E $2C_4$ C_2
5	6	C_6	E $2C_6$ $2C_3$ C_2
6	222	D_2	E C_2 C'_2 C''_2
7	32	D_3	E $2C_3$ $3C_2$
8	422	D_4	E $2C_4$ C_2 $2C'_2$ $2C''_2$
9	622	D_6	E $2C_6$ $2C_3$ C_2 $3C'_2$ $3C''_2$
10	23	T	E $8C_3$ $3C_2$
11	432	O	E $8C_3$ $3C_2$ $6C_2$ $6C_4$

C_1 C_2 C_3 C_4 C_6 D_2 D_3 D_4 D_6 T O

C_1 C_{2h} C_{3i} C_{4h} C_{6h} D_{2h} D_{3d} D_{4h} D_{6h} T_h O_h

Nota :

On peut montrer que tous les éléments de symétrie peuvent se ramener à 2 types, soit des simples rotations, soit des rotation-réflexions, qui se notent S_n . Notant la réflexion dans un plan perpendiculaire à l'axe donné par σ_h , on peut écrire par définition :

$$S_n = C_n \sigma_h = \sigma_h C_n$$

On a d'autre part :

$$I = S_2 = C_2 \sigma_h = C_i$$

C) Les 11 groupes propres peuvent être considérés comme des sous-groupes des groupes centro-symétriques. En plus, il y a 10 groupes qui ne contiennent pas i explicitement ; ce sont :

C_s C_{2v} S_4 C_{4v} D_{2d} C_{3v} C_{3h} D_{3h} C_{6v} T_d

Remarques :

D'autres méthodes de construction des groupes cristallographiques sont également possibles. Pour la compréhension des symboles de SCHOENFLIES, nous indiquons brièvement comment on peut les dériver géométriquement.

a) Groupes C_{nh}

Ces groupes s'obtiennent en associant à un axe de symétrie n -aire un plan de symétrie perpendiculaire σ_h .

Le groupe le plus simple, C_{1h} , contient en tout deux éléments E et σ_h ; on le note C_s .

Si n est pair, le groupe contient un centre de symétrie.

b) Groupes C_{nv}

Ces groupes s'obtiennent en associant à un axe de symétrie n - aire un plan de symétrie σ_v contenant cet axe.

c) Groupes D_{nh}

Ces groupes s'obtiennent en ajoutant au système d'axes du groupe D_n , un plan de symétrie horizontal σ_h , contenant les n axes binaires. Remarquons que $D_{nh} = D_n \times C_s$; si n est pair, $D_{2p,h} = D_{2p} \times C_i$.

d) Groupes D_{nd}

Ces groupes s'obtiennent en ajoutant au système d'axes du groupe D_n , les plans verticaux bissecteurs des axes horizontaux binaires. Remarquons que $D_{2p+1,d} = D_{2p+1} \times C_i$.

e) Groupe T_d

Ce groupe contient toutes les transformations de symétrie du tétraèdre.

f) Groupe T_h

Il se déduit de T en ajoutant un centre de symétrie

$$T_h = T \times C_i$$

g) Groupe O_h

C'est le groupe de toutes les transformations de symétrie du cube ; $O_h = O \times C_i$.

Dans le *tableau II* sont tabulés les 32 groupes avec leurs éléments de symétrie.

TABLEAU II

=====

Système	No.	Symbole	
		International	Schönflies
Triclinique	1	$\bar{1}$	C ₁
	2	$\bar{1}$	C _i
Monoclinique	3	m	C ₂
	4	2	C _{2v}
	5	2/m	C _{2h}
Orthorhombique	6	2mm	C _{2v}
	7	222	D ₂
	8	mmm	D _{2h}
	9	$\bar{4}$	C ₄
Quadratique	10	$\bar{4}$	S ₄
	11	4/m	C _{4h}
	12	4mm	C _{4v}
	13	$\bar{4}2m$	D _{2d}
	14	422	D ₄
	15	4/mmm	D _{4h}
	Rhombohedrique	16	$\bar{3}$
17		$\bar{3}$	C _{3i}
18		3m	C _{3v}
19		$\bar{3}2$	D ₃
20		$\bar{3}m$	D _{3d}
Hexagonal		21	$\bar{6}$
	22	6	C ₆
	23	6/m	C _{6h}
	24	$\bar{6}m2$	D _{3h}
	25	6mm	C _{6v}
	26	622	D ₆
	27	6/mmm	D _{6h}
	Cubique	28	23
29		$\bar{m}3$	T _h
30		$\bar{4}3m$	T _d
31		432	O
32		$\bar{m}3m$	O _h

TABLEAU II (suite)

=====

No.	Element de symétrie
1	E
2	E_i
3	$E\sigma_h$
4	$E C_2$
5	$E C_2 i \sigma_h$
6	$E C_2 \sigma_v' \sigma_v''$
7	$E C_2 C_2' C_2''$
8	$E C_2 C_2' C_2'' i \sigma_h \sigma_v' \sigma_v''$
9	$E 2C_4 C_2$
10	$E 2S_4 C_2$
11	$E 2C_4 C_2 i 2S_4 \sigma_h$
12	$E 2C_4 C_2 2\sigma_v' 2\sigma_v''$
13	$E C_2 C_2' C_2'' \sigma_v' 2S_4 \sigma_v''$
14	$E 2C_4 C_2 2C_2' 2C_2''$
15	$E 2C_4 C_2 2C_2' 2C_2'' i 2S_4 \sigma_h 2\sigma_v' 2\sigma$
16	$E 2C_3$
17	$E 2C_3 i 2S_6$
18	$E 2C_3 3\sigma_v$
19	$E 2C_3 3C_2$
20	$E 2C_3 3C_2 i 2S_6 3\sigma_v$
21	$E 2C_3 \sigma_h 2S_3$
22	$E 2C_6 2C_3 C_2$
23	$E 2C_6 2C_3 C_2 i 2S_3 2S_6 \sigma_h$
24	$E 2C_3 3C_2 \sigma_h 2S_3 3\sigma_v$
25	$E 2C_6 2C_3 C_2 3\sigma_v' 3\sigma_v''$
26	$E 2C_6 2C_3 C_2 3C_2' 3C_2''$
27	$E 2C_6 2C_3 C_2 3C_2' 3C_2'' i 2S_3 2S_6 \sigma_h 3\sigma_v' 3\sigma_v$
28	$E 8C_3 3C_2$
29	$E 8C_3 3C_2 i 8S_6 3\sigma$
30	$E 8C_3 3C_2 6\sigma 6S_4$
31	$E 8C_3 3C_2 6C_2 6C_4$
32	$E 8C_3 3C_2 6C_2 6C_4 i 8S_6 3\sigma 6\sigma 6S_4$

III - REPRESENTATIONS DES GROUPES

=====

a) Soit ψ_i , une fonction dans l'espace de configuration du système physique donné ; lors de la transformation des coordonnées correspondant à l'élément G d'un groupe de symétrie ($g =$ ordre du groupe) et en appliquant successivement les g transformations du groupe, on obtient à partir de ψ_i , dans le cas général, f fonctions linéairement indépendantes $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_f$ ($f \leq g$, certaines fonctions peuvent être linéairement dépendantes). Chacune des fonctions ψ_i ($i = 1 \dots f$) s'exprime dans la transformation G par une combinaison linéaire de la forme

$$\sum_{k=1}^f G_{ki} \psi_k$$

les G_{ik} étant des constantes dépendant de la transformation G . L'ensemble de ces constantes G_{ik} forme la matrice de transformation qui opère sur un espace E_f à f dimensions. Il est commode de considérer les éléments G du groupe comme des opérateurs agissant sur les ψ_i .

$$G\psi_i = \sum_k G_{ki} \psi_k$$

Les fonctions ψ_i peuvent être considérées comme les composantes d'un vecteur dans un espace à f dimensions.

Au produit de 2 éléments G et H du groupe correspond la matrice produit des matrices G et H

$$(GH)_{ik} = \sum_l G_{il} H_{lk}$$

Remarque :

Nous avons écrit

$$G\psi_i = \sum_k G_{ki} \psi_k$$

et non
$$G\psi_i = \sum_k G_{ik} \psi_k$$

Les matrices de transformation des fonctions de base entre elles sont les transposées des matrices de la représentation. Cette écriture est essentielle si l'on veut conserver

$$\Gamma(GH) = \Gamma(G) \cdot \Gamma(H)$$

H étant la transformation effectuée en premier.

L'ensemble des matrices de tous les éléments du groupe forme une représentation du groupe.

L'ensemble des fonctions ψ_i ($i = 1 \dots f$) constitue la base de la représentation. Le nombre f de ces fonctions est la dimension de la représentation.

Si la base de représentation du groupe est réalisée à l'aide de fonctions orthonormées, ce qui est toujours possible, on montre que les opérateurs G sont unitaires.

$$\tilde{G} = G^{-1}$$

b) Soumettons les fonctions $\psi_1 \dots \psi_f$, à une transformation linéaire unitaire, on obtient un nouvel ensemble de fonction ψ'_i ;

$$\psi'_i = S\psi_i$$

L'ensemble des fonctions ψ'_i constitue une base de la représentation équivalente à l'ensemble ψ_i .

Les matrices de représentations équivalentes sont liées entre elles par la relation :

$$G' = S^{-1} G S$$

La somme des éléments diagonaux (trace) $\chi(G)$ est un invariant et on a toujours $\chi(E) = f$.

c) Soit une certaine représentation de dimension f , il se peut qu'à la suite d'une transformation linéaire, les fonctions de la base se partagent en jeux de $f_1, f_2 \dots$ fonctions ($f_1 + f_2 + \dots = f$) de telle sorte que, lors de l'action des éléments du groupe, les fonctions de chaque jeu se transforment exclusivement entre elles.

La représentation donnée est dite réductible.

Si le nombre des fonctions de la base se transformant entre elles, ne peut être réduit par aucune transformation linéaire, la représentation réalisée avec ces fonctions est dite irréductible.

Toute représentation réductible peut être décomposée en représentations irréductibles.

Si différents jeux de fonctions se transforment suivant une seule et même représentation irréductible, on dit alors que la représentation irréductible est contenue dans la représentation réductible autant de fois qu'il y a de tels jeux.

d) On rappelle les principales propriétés des représentations irréductibles :

1/ Le nombre des représentations irréductibles est égal au nombre r de ses classes,

2/ Les éléments matriciels de représentations irréductibles vérifient un certain nombre de relations d'orthogonalité

$$\sum_G G_{ik}^{(\alpha)} G_{lm}^{(\beta)*} = \frac{g}{f_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{il} \delta_{km} \quad (1)$$

$G_{ik}^{(\alpha)}$: élément de la matrice de la représentation irréductible α

g : ordre du groupe

f_α : dimension de la représentation α

δ : symbole de Kronecker

En particulier :

$$\sum_G \chi^{(\alpha)}(G) \chi^{(\beta)}(G)^* = g \delta_{\alpha\beta} \quad (2)$$

et si $\alpha = \beta$

$$\sum_G |\chi^{(\alpha)}(G)|^2 = g \quad (3)$$

3/ La relation (2) permet très simplement la décomposition de représentations réductibles en représentations irréductibles, connaissant les caractères des unes et des autres.

Soit $\chi(G)$ les caractères d'une représentation réductible de dimension f , et soient $a_1 \dots a_r$ les multiplicités des représentations irréductibles qu'elle contient :

$$\sum_{\beta=1}^r a_{\beta} f_{\beta} = f$$

$$\chi(G) = \sum_{\beta=1}^r a_{\beta} \chi^{(\beta)}(G)$$

En multipliant par $\chi^{(\alpha)}(G)^*$ et en sommant sur G , on obtient :

$$a_{\alpha} = \frac{1}{g} \sum_G \chi(G) \chi^{(\alpha)}(G)^* \quad (4)$$

Si l'on considère la représentation irréductible triviale Γ_1 (une seule fonction de base invariante dans toutes les transformations du groupe), alors, tous les caractères sont égaux à l'unité dans cette représentation et :

$$a_1 = \frac{1}{g} \sum_G \chi(G) \quad (5)$$

4/ Si l'on considère la représentation réalisée par $f = g$ fonctions, telle que les g fonctions g_{ψ} sont linéairement indépendantes, on dit que l'on a affaire à la représentation régulière. Les matrices de cette représentation ne contiennent pas d'éléments diagonaux sauf la matrice correspondant à l'élément unité.

$$\chi(G) = 0 \text{ pour } G \neq E$$

$$\chi(E) = g.$$

On en déduit aisément :

$$a_{\alpha} = f_{\alpha}$$

$$f_1^2 + f_2^2 + \dots + f_r^2 = g$$

Pour les groupes abéliens $f_1 = f_2 = \dots = f_r = 1$

5/ a) Soient deux différents jeux de fonctions $\psi_1^{(\alpha)} \dots \psi_{f_\alpha}^{(\alpha)}$ et $\psi_1^{(\beta)} \dots \psi_{f_\beta}^{(\beta)}$ servant de base à 2 représentations irréductibles du groupe.

En formant les produits $\psi_1^{(\alpha)} \psi_k^{(\beta)}$, on obtient un jeu de $f_\alpha f_\beta$ fonctions pouvant servir de base à une nouvelle représentation de dimension $f_\alpha f_\beta$. On l'appelle produit direct des deux premières. On a :

$$G\psi_1^{(\alpha)} = \sum_i G_{1i}^{(\alpha)} \psi_1^{(\alpha)}$$

$$G\psi_k^{(\beta)} = \sum_m G_{mk}^{(\beta)} \psi_m^{(\beta)}$$

d'où :

$$G\psi_1^{(\alpha)} \psi_k^{(\beta)} = \sum_{im} G_{1i}^{(\alpha)} G_{mk}^{(\beta)} \psi_1^{(\alpha)} \psi_m^{(\beta)} \quad (6)$$

On en déduit pour les caractères

$$(\chi^{(\alpha)} \cdot \chi^{(\beta)}) (G) = \chi^{(\alpha)} (G) \cdot \chi^{(\beta)} (G) \quad (7)$$

b) Les deux représentations irréductibles peuvent coïncider. On a alors deux différents jeux de fonctions : $\psi_1 \dots \psi_f$ et $\phi_1 \dots \phi_f$ réalisant une seule

et même base de représentation et le produit direct de la représentation est réalisé par f^2 fonctions $\psi_i \phi_k$,

On a :

$$(\chi \cdot \chi)(G) = (\chi(G))^2$$

Cette représentation peut être décomposée en deux représentations de dimension moindre (qui peuvent être aussi réductibles). L'une d'elles est réalisée par $\frac{f(f+1)}{2}$ fonctions $\psi_i \phi_k + \psi_k \phi_i$, et l'autre par $\frac{f(f-1)}{2}$ fonctions $\psi_i \phi_k - \psi_k \phi_i$. La première est dite produit symétrique de la représentation par elle-même et la seconde produit antisymétrique.

On notera par $\{\chi^2\}(G)$ le caractère du produit symétrique, et par $\{\bar{\chi}^2\}(G)$ le caractère du produit antisymétrique.

De (6), on déduira les très importantes formules :

$$\{\chi^2\}(G) = \frac{1}{2} \chi(G)^2 + \frac{1}{2} \chi(G^2) \quad (8)$$

$$\{\bar{\chi}^2\}(G) = \frac{1}{2} \chi(G)^2 - \frac{1}{2} \bar{\chi}(G^2) \quad (9)$$

De la même façon, on peut calculer les produits symétrique et antisymétrique de puissance plus élevée.

$$\{\chi^3\}(G) = \frac{1}{3} \chi(G^3) + \frac{1}{2} \chi(G^2) \chi(G) + \frac{1}{6} \chi^3(G)$$

$$\{\chi^3\}(G) = \frac{1}{3} \chi(G^3) - \frac{1}{2} \chi(G^2) \chi(G) + \frac{1}{6} \chi^3(G)$$

c) Les représentations envisagées ici sont réelles. Si la représentation réductible contient $\Gamma^{(\alpha)}$ complexe (de dimension 1) et non équivalente à sa conjuguée $\bar{\Gamma}^{(\alpha)}$, elle contient $\bar{\Gamma}^{(\alpha)}$ donc la somme réelle $E = \Gamma_{\alpha} + \bar{\Gamma}_{\alpha}$ physiquement irréductibles.
 $\Gamma^{(\alpha)}$, $\Gamma^{(\beta)}$ étant deux représentations irréductibles

$$\Gamma^{(\alpha)} \Gamma^{(\beta)} = \sum_{\gamma} g_{\alpha\beta}^{\gamma} \Gamma^{(\gamma)}$$

D'après (2) et (5) :

$$g_{\alpha\beta}^1 = 0 \quad \text{si } \alpha \neq \beta \quad \text{ou } \alpha = \beta \quad \text{et } \Gamma^{(\alpha)} \text{ complexe}$$

$$g_{\alpha\beta}^1 = 1 \quad \text{si } \alpha = \beta, \quad \Gamma^{(\alpha)} \text{ réelle.}$$

Par conséquent :

α) La décomposition du produit direct de deux différentes représentations irréductibles en parties irréductibles ne contient jamais la représentation unité Γ_1 .

β) E^2 contient deux fois Γ_1 .

γ) Le produit direct d'une représentation irréductible réelle de dimension 1 par elle-même contient une fois Γ_1 .

ε) Soit Γ une représentation réductible :

$$\Gamma = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \Gamma^{(\alpha)}$$

On veut décomposer (Γ^2) , (Γ^3) respectivement carré et cube symétrique de la représentation en représentations irréductibles. Pour cela, on peut utiliser les formules de LYUBARSKI et LOMONT :

$$(\Gamma^2) = \sum (\Gamma_{\alpha}^2) + \sum_{\alpha < \beta} \Gamma_{\alpha} \Gamma_{\beta} \quad (10)$$

$$(\Gamma^3) = \sum_{\alpha} (\Gamma_{\alpha}^3) + \sum_{\alpha} \sum_{\alpha < \beta} \Gamma_{\alpha} (\Gamma_{\beta}^2) + \sum_{\alpha < \beta < \gamma} \Gamma_{\alpha} \Gamma_{\beta} \Gamma_{\gamma}$$

$$d) (\chi_{\alpha}^2)(G) = \frac{1}{2} \chi_{\alpha}(G)^2 + \frac{1}{2} \chi_{\alpha}(G^2)$$

Or, d'après le théorème de FROBENIUS et SCHUR,

$$\sum_{\mathbb{R}} \chi_{\alpha}(G^2) = g \quad \text{si } \Gamma_{\alpha} \text{ est réelle.}$$

$$\sum_{\mathbb{R}} \chi_{\alpha}(G^2) = 0 \quad \text{si } \Gamma_{\alpha} \text{ est complexe.}$$

D'où

(Γ_α^2) contient une fois Γ_1 si Γ_α est réelle,

$$e) (E^2) = ((\Gamma_\alpha + \bar{\Gamma}_\alpha)^2) = (\Gamma_\alpha^2) + (\bar{\Gamma}_\alpha^2) + \Gamma_\alpha \bar{\Gamma}_\alpha$$

(E^2) contient une fois Γ_1 .

f) (Γ^2) contient donc Γ_1 , un nombre de fois égal au nombre de ses composantes physiquement irréductible alors que Γ^2 contient Γ_1 , un nombre de fois égal au nombre de ces composantes irréductibles réelles ou non.

IV - REPRESENTATION IRREDUCTIBLE DES GROUPES PONCTUELS

=====

Les considérations précédentes sur les représentations des groupes permettent aisément la construction du tableau des caractères des représentations irréductibles des groupes ponctuels.

1/ Les représentations à une dimension se notent A et B, celles à 2 dimensions E (ne pas confondre avec l'élément identité), celles à 3 dimensions F;

Les fonctions de base de représentation A sont symétriques et celles des représentations B sont antisymétriques vis à vis des rotations autour d'un axe n-aire.

$C_1 ; 1$	E
A	1

$C_i ; \bar{1}$	E	I
$C_2 ; 2$	E	C_2
$C_s ; m$	E	σ_h
A_g	A; z	A'; x, y
$A_u ; x, y, z$	B; x, y, A''; z	
	1	1
	1	-1

$C_3 ; 3$	E	C_3	C_3^2
A; z	1	1	1
E; x±iy	1	ϵ^2	ϵ^2
	1	ϵ^2	ϵ

$C_{2h} ; \frac{2}{m}$	$C_{2v} ; 2mm$	$V \equiv D_2$ 222	E	C_2	σ_h	I
			E	C_2	σ_v	σ'_v
			E	C_2^z	C_2^y	C_2^x
A_g	$A_1 ; z$	A	1	1	1	1
B_g	$B_2 ; y$	$B_3 ; x$	1	-1	-1	1
A_u	A_2	$B_1 ; z$	1	1	-1	-1
$B_u ; x, y$	$B_1 ; x$	$B_2 ; y$	1	-1	1	-1

$C_{3v} ; 3m$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
$D_3 ; 32$	E	$2C_3$	$3U_2$
$A_1 ; A_1$	1	1	1
$A_2 ; A_2 ; z$	1	1	-1
E; x, y	2	-1	0

TABLEAU III

=====

$C_6 ; 6$	E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5
A; z	1	1	1	1	1	1
B	1	-1	1	-1	1	-1
E ₁	1	ω^2	$-\omega$	1	ω^2	$-\omega$
	1	$-\omega$	ω^2	1	$-\omega$	ω^2
E ₂ ; x±iy	1	ω	ω^2	-1	$-\omega$	$-\omega^2$
	1	$-\omega^2$	$-\omega$	-1	ω^2	ω

$C_4 ; 4$		E	C_4	C_2	C_4^3
	$S_4 ; \bar{4}$	E	S_4	C_2	S_4^3
A; z	A	1	1	1	1
B	B; z	1	-1	1	-1
E; x±iy	E; x±iy	1	i	-1	-i
		1	-i	-1	i

$C_{4v} ; 4mm$	$D_4 ; 422$	$D_{2d} ; \bar{4}2m$	E	C_2	$2C_4$	$2\sigma_v$	$2\sigma'_v$
			E	C_2	$2C_4$	$2U_2$	$2U'_2$
			E	C_2	$2S_4$	$2U_2$	$2\sigma_d$
A ₁ ; z	A ₁	A ₁	1	1	1	1	1
A ₂	A ₂ ; z	A ₂	1	1	1	-1	-1
B ₁	B ₁	B ₁	1	1	-1	1	-1
B ₂	B ₂	B ₂ ; z	1	1	-1	-1	1
E; x, y	E; x, y	E; x, y	2	-2	0	0	0

TABLEAU III (suite)

=====

$D_6 ; 622$			E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3U_2$	$3U'_2$
$C_{6v} ; 6mm$			E	C_2	$2C_3$	$2C_6$	$3\sigma_v$	$3\sigma'_v$
$D_{3h} ; \bar{6}m2$			E	σ_h	$2C_3$	$2S_3$	$3U_2$	$3\sigma'_v$
A_1	$A_1 ; z$	A'_1	1	1	1	1	1	1
$A_2 ; z$	A_2	A'_2	1	1	1	1	-1	-1
B_1	B_2	A''_1	1	-1	1	-1	1	-1
B_2	B_1	$A''_2 ; z$	1	-1	1	-1	-1	1
E_2	E_2	$E' ; x,y$	2	2	-1	-1	0	0
$E_1 ; x,y$	$E_1 ; x,y$	E''	2	-2	-1	1	0	0

$O ; 432$		E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_2$	$6C_4$
$T_d ; \bar{4}3m$		E	$8C_3$	$3C_2$	$6\sigma_d$	$6S_4$
A_1	A_1	1	1	1	1	1
A_2	A_2	1	1	1	-1	-1
E	E	2	-1	2	0	0
F_2	$F_2 ; x,y,z$	3	0	-1	1	-1
$F_1 ; x,y,z$	F_1	3	0	-1	-1	1

$T ; 23$	E	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3^2$
A	1	1	1	1
E	1	1	ϵ	ϵ^2
			ϵ^2	ϵ
$F ; x,y,z$	3	-1	0	0

TABLEAU III (suite)
=====

Les indices g et u indiquent la symétrie dans l'inversion. Les fonctions de symétrie différentes vis à vis de la réflexion σ_h sont spécifiées par le nombre d'accent (un ou deux).

2/ On a indiqué la représentation suivant laquelle se transforment les coordonnées elles-mêmes.

3/ Les caractères des représentations des groupes isomorphes ont été tabulés ensemble :

$$4/ \epsilon = e^{2\pi i/3}, \quad \omega = e^{2\pi i/6} = -\omega^4$$

5/ Les caractères des groupes centrosymétriques se déduisent aisément comme produit direct des groupes tabulés avec le groupe $\bar{1}$. (En plus $C_{3h} = C_3 \times C_s$).

$D_{3d} ; \bar{3}m$	E	$2C_3$	$3C_2$	I	$2S_6$	$3\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	-1	1	i	-1
E_g	2	-1	0	2	-1	0
A_{1u}	1	1	1	-1	-1	-1
A_{2u}	1	1	-1	-1	-1	1
E_u	2	-1	0	-2	1	0

B - LES CLASSES MAGNETIQUES

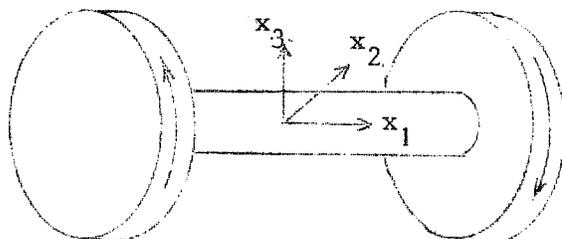
I - L'OPERATION RENVERSEMENT DU TEMPS R

Les opérations conventionnelles de symétrie (rotations et rotations réflexions) permettent la construction des 32 groupes ponctuels.

Cependant, il est apparu nécessaire d'élargir ce concept de la symétrie pour expliquer certaines propriétés magnétiques des cristaux.

En plus de l'arrangement spatial des atomes dans un groupe ponctuel, l'orientation des moments magnétiques est de grande importance.

Considérons la figure suivante :



Si les flèches indiquant les spins sont ignorées, X_2X_3 est un plan de symétrie et X_3 est un axe d'ordre 2.

Si on tient compte des spins, X_3 est toujours un axe d'ordre 2 mais X_2X_3 n'est plus un plan de réflexion.

Pour amener en coïncidence la structure dans le plein sens du terme, il est nécessaire de faire suivre la réflexion par une nouvelle opération de symétrie, appelée renversement des spins ou renversement du temps R.

On appellera anti-opérateur ou anti-élément, l'opération combinée consistant en une opération de symétrie conventionnelle suivie par R, et elle sera primée pour la distinguer ou soulignée.

Soit R_i un élément de symétrie conventionnel, l'anti-opérateur sera défini par

$$\begin{aligned} R_i' &= RR_i = R_i R ; \\ R^2 &= 1 \end{aligned}$$

Ces nouveaux éléments de symétrie augmentent considérablement le nombre des groupes possibles ; les 32 classes cristallines donnent ainsi naissance à 90 classes magnétiques.

II - SOIT UNE CLASSE CRISTALLINE ET SOIT E, R_i SES ELEMENTS DE SYMETRIE

$$\text{Si } R_1 R_2 = R_3, \text{ alors } R_1' R_2' = R_3' = R_1 R_2' \text{ et } R_1' R_2' = R_3$$

Il faut qu'en remplaçant certaines opérations de symétrie par des anti-opérateurs, on obtienne encore un ensemble d'éléments qui forme un groupe.

Le nouveau groupe obtenu s'appelle une variante du groupe ponctuel.

A partir d'un groupe ponctuel, il est possible d'obtenir plus d'une variante par le jeu des remplacements des opérateurs conventionnels par des anti-opérateurs. Une méthode particulièrement simple permet d'établir la liste complète des groupes magnétiques par l'inspection de leurs représentations irréductibles. En effet, soit G un groupe cristallographique, Γ_α une représentation réelle irréductible de dimension 1 de G . Le noyau de Γ_α est un sous-groupe invariant H_α d'indice 2 de G ; on peut donc associer à Γ_α un groupe magnétique G_α , obtenu en remplaçant les opérateurs de $G-H_\alpha$ par les anti-opérateurs correspondants (à la représentation triviale Γ_1 est associé le groupe trivial G).

Le *tableau suivant* donne les 90 classes magnétiques.

TABLEAU IV
=====

Symbole	Elements de symétrie
1	E
$\bar{1}$	E_i
$\bar{1}$	+ -
m	E_{σ_h}
\bar{m}	+ -
2	$E C_2$
$\bar{2}$	+ -
2/m	$E C_2 i \sigma_h$
$\bar{2}/m$	+ - - ++
2/ \bar{m}	+ + - -
$\bar{2}/\bar{m}$	+ - +- -
2mm	$E C_2 \sigma'_v \sigma''_v$
$\bar{2}mm$	+ - +- -
2mm	+ + - -
222	$E C_2 C'_2 C''_2$
$\bar{2}22$	+ - - +
mmm	$E C_2 C'_2 C''_2 i \sigma_h \sigma'_v \sigma''_v$
$\bar{m}mm$	+ + - - - - + +
$\bar{m}mm$	+ + + + - - - -
$\bar{m}mm$	+ + - - + + - -
4	$E 2C_4 C_2$
$\bar{4}$	+ - +
$\bar{4}$	$E 2S_4 C_2$
$\bar{4}$	+ - +
4/in	$E 2C_4 C_2 i 2S_4 \sigma_h$
$\bar{4}/m$	+ - + - + -

TABLEAU IV (suite)
 =====

$4/m$	+ + + - - -
$4/m$	+ - + + - +
$4mm$	E $2C_4$ C_2 $2\sigma'_V$ $2\sigma''_V$
$4mm$	+ + + - -
$4mm$	+ - + + -
$\bar{4}2m$	E C_2 C'_2 C''_2 σ'_V $2S_4$ σ''_V
$\bar{4}2m$	+ + + + - - -
$\bar{4}2m$	+ + - - + - +
$\bar{4}2m$	+ + - - - + -
422	E $2C_4$ C_2 $2C'_2$ $2C''_2$
422	+ + + - -
422	+ - + + -
$4/mmm$	E $2C_4$ C_2 $2C'_2$ $2C''_2$ i $2S_4$ σ_h $2\sigma'_V$ $2\sigma''_V$
$4/mmm$	+ - + - + - + - + -
$4/mmm$	+ + + - - - - + +
$4/mmm$	+ + + - - + + + - -
$4/mmm$	+ + + + + - - - -
$4/mmm$	+ - + + - + - + + -
3	E $2C_3$
$\bar{3}$	E $2C_3$ i $2S_6$
$\bar{3}$	+ + - -
$3m$	E $2C_3$ $3\sigma_V$
$3m$	+ + -
32	E $2C_3$ $3C_2$
32	+ + -
$\bar{3}m$	E $2C_3$ $3C_2$ i $2S_4$ $3\sigma_V$

TABLEAU IV (suite)
=====

$\bar{3}m$	+ + - + + -
$\bar{3}m$	+ + - - - +
$\bar{3}m$	+ + + - - -
$\bar{6}$	E $2C_3$ σ_h $2S_3$
$\bar{6}$	+ + - -
6	E $2C_6$ $2C_3$ C_2
6	+ - + -
$6/m$	E $2C_6$ $2C_3$ C_2 i $2S_3$ $2S_6$ σ_h
$6/m$	+ + + + - - - -
$6/m$	+ - + - - + - +
$6/m$	+ - + - + - + -
$\bar{6}m2$	E $2C_3$ $3C_2$ σ_h $2S_3$ $3\sigma_v$
$\bar{6}m2$	+ + - + + -
$\bar{6}m2$	+ + - - - +
$\bar{6}m2$	+ + + - - -
$6mm$	E $2C_6$ $2C_3$ C_2 $3\sigma_v^I$ $3\sigma_v^{II}$
$6mm$	+ + + + - -
$6mm$	+ - + - - +
622	E $2C_6$ $2C_3$ C_2 $3C_2^I$ $3C_2^{II}$
622	+ + + + - -
622	+ - + - + -
$6/mmm$	E $2C_6$ $2C_3$ C_2 $3C_2^I$ $3C_2^{II}$ i $2S_2$ $2S_6$ σ_h $3\sigma_v^I$ $3\sigma_v^{II}$
$6/mmm$	+ + + + - - - - - + +
$6/mmm$	+ + + + - - + + + - -
$6/mmm$	+ + + + + + - - - - -
$6/mmm$	+ - + - - + - + - + + -
$6/mmm$	+ - + - + - + - + - + -
23	E $8C_3$ $3C_2$

TABLEAU IV (suite)

=====

m3	E 8C ₃ 3C ₂ i 8S ₆ 3σ
<u>m3</u>	+ + + - - -
<u>43m</u>	E 8C ₃ 3C ₂ 6σ 6S ₄
<u>43m</u>	+ + + - -
432	E 8C ₃ 3C ₂ 6C ₂ 6C ₄
<u>432</u>	+ + + - -
m3m	E 8C ₃ 3C ₂ 6C ₂ 6C ₄ i 8S ₆ 3σ 6σ 6S ₄
<u>m3m</u>	+ + + + + - - - - -
<u>m3m</u>	+ + + - - + + + - -
<u>m3m</u>	+ + + - - - - - + +

CHAPITRE II

NOTIONS SUR LES TENSEURS

A - NOTIONS GÉNÉRALES SUR LES TENSEURS EN REPERES ORTHONORMES

L'espace, dans lequel nous définirons les tenseurs, sera un espace physique. Ce sera donc un espace vectoriel réel, strictement euclidien, dans lequel nous choisirons une base orthonormée. Dans ces conditions, on pourra ne pas distinguer les coordonnées covariantes et contravariantes.

I - DEFINITION :

a) Un tenseur d'ordre n dans un espace à 3 dimensions est un ensemble de 3^n coordonnées (composantes) $t_{ijkl\dots}$ dépendant de n indices variant de 1 à 3 et se transformant dans un changement de base par une transformation de la forme

$$t_{ijk\dots}(x') = a_{il} a_{jm} a_{kn} t_{lmn\dots}(x)$$

où $x'_i = a_{ij} x_j$ (a_{ij} = élément de la matrice de changement de base).

et $t_{lmn\dots}(x)$ sont les composantes du tenseur dans le repère considéré.

Nota :

Nous employons la convention de l'indice muet.

b) exemples :

- Un scalaire (ou tenseur d'ordre zéro) est un être à une composante invariante dans un changement de base a_{ij} .
- Un vecteur (ou tenseur d'ordre 1) est un être à 3 composantes x_i se transformant dans un changement de base suivant la loi

$$x'_i = a_{ij} x_j$$

- Un tenseur de rang 2 est être à 3^2 composantes se transformant suivant la loi :

$$t'_{ij} = a_{ik} a_{jl} t_{kl}$$

II - ALGÈBRE DES TENSEURS :

a) Produit tensoriel de 2 vecteurs :

Soit 2 vecteurs \vec{X} et \vec{Y} . Posons $t_{ij} = X_i Y_j$

Dans un changement de base a_{ij} :

$$t'_{kl} = X'_k Y'_l = (a_{ki} X_i) (a_{lj} Y_j)$$

$$t'_{kl} = a_{ki} a_{lj} X_i X_j = a_{ki} a_{lj} t_{ij}$$

t_{ij} est la représentative d'un tenseur $T = \vec{X} \otimes \vec{Y}$ produit tensoriel de 2 vecteurs \vec{X} et \vec{Y} .

On peut donc dire qu'un tenseur d'ordre n se transforme dans un changement de base comme le produit tensoriel de n vecteurs, c'est-à-dire comme l'être de composantes $x_i y_j z_k \dots$

exemple : tenseur d'ordre 3. C'est un être à 27 composantes T_{ijk} tel que :

$$t'_{lmn} = a_{li} a_{mj} a_{nk} t_{ijk}$$

$$\text{Produit tensoriel } \vec{X} \otimes \vec{Y} \otimes \vec{Z} : t_{ijk} = X_i Y_j Z_k$$

b) la somme ou la différence de 2 tenseurs de même rang est un tenseur de même rang.

c) Produit tensoriel de 2 tenseurs :

Soit un tenseur A d'ordre p et un tenseur B d'ordre q . Considérons l'être

$$C_{ijk\dots\lambda\mu\nu} = A_{ijk\dots} B_{\lambda\mu\nu\dots}$$

On vérifie immédiatement que ces composantes sont celles d'un tenseur C d'ordre $p+q$ dit produit tensoriel ou extérieur des tenseurs A et B

$$C = A \otimes B.$$

III - TENSEURS CRISTALLOGRAPHIQUES (OU DE GROUPE)

=====

Les matrices des opérations de symétrie d'un cristal forment une représentation du groupe ponctuel du cristal.

Les matrices de transformation des composantes d'un tenseur forment aussi une représentation matricielle du même groupe. Les composantes du tenseur peuvent être considérées comme les composantes d'un vecteur dans un espace à n dimensions.

Soit un être A à n composantes ϕ_n d'un espace vectoriel E_n à n dimensions, dont les vecteurs se transforment linéairement dans les opérations G d'un groupe ponctuel.

$$G\phi_i = \sum_{k=1}^n G_{ki} \phi_k$$

L'être A est dit "tenseur du groupe".

La représentation d'ordre n est réductible, c'est-à-dire qu'à la suite d'une transformation linéaire, les fonctions ϕ_n se partagent en différents jeux de n_1, n_2, \dots ($n_1 + n_2 + \dots = n$) fonctions de telle sorte que, lors de l'action des éléments du groupe, les fonctions de chaque jeu se transforment exclusivement entre elles. Différents jeux de fonctions peuvent se transformer suivant une seule et même représentation irréductible ; la représentation irréductible est dite alors être contenue dans la représentation réductible autant de fois qu'il y a de tels jeux.

a) le groupe des rotations

Il s'agit des rotations de l'espace réel à trois dimensions laissant l'origine invariante. Il s'agit d'un groupe infini. On montre que les représentations

irréductibles D_j d'un tel groupe sont caractérisées par des opérateurs agissant dans un espace à $2j+1$ dimensions.

$$\chi^{(j)}(\phi) = \frac{\sin(j+\frac{1}{2})\phi}{\sin\frac{\phi}{2}}$$

Ainsi, dans le groupe des rotations, un scalaire se transforme suivant la D_0 , un vecteur suivant la D_1 .

On peut de même définir une algèbre des représentations irréductibles du groupe des rotations, par exemple :

$$D_1^2 = D_0 + D_1 + D_2$$

et, plus généralement :

$$D_j D_{j'} = \sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} D_J$$

b) Les tenseurs d'ordre n ont été définis par rapport à un changement de base, où, ce qui revient au même, par rapport à une opération de rotation. On peut donc définir un tenseur d'ordre n comme un être à 3^n composantes qui se transforme, soit suivant le produit tensoriel de n vecteurs, soit suivant la représentation $(D_1)^n$ du groupe des rotations.

La représentation $(D_1)^n$ définie sur un espace de 3^n dimensions est réductible suivant les représentations irréductibles D_j .

Si l'on a affaire à un tenseur de groupe, il faudra encore réduire les D_j suivant les représentations irréductibles du groupe ponctuel.

IV - TENSEURS AXIAUX

a) Pseudo-scalaire

Le produit mixte de trois vecteurs est un pseudo-scalaire ; son signe dépend de l'orientation de l'espace.

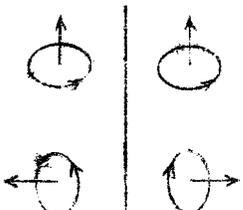
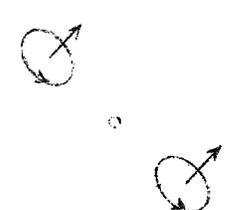
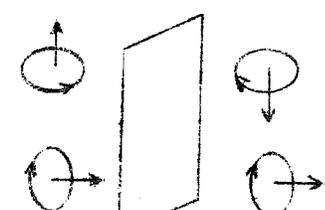
b) Vecteurs axiaux

Considérons le produit vectoriel $\vec{p} \wedge \vec{q}$ de 2 vecteurs \vec{p} et \vec{q} de composantes p_i et q_i

$$r_1 = p_2 q_3 - q_2 p_3 ; r_2 = p_3 q_1 - p_1 q_3 ; r_3 = p_1 q_2 - p_2 q_1$$

Il est facile de voir que les r_i ne se transforment pas dans un changement de base comme les composantes d'un vecteur, mais suivant la loi $r'_i = \pm a_{ij} r_j$; le signe + correspondant à une transformation qui conserve le sens des axes ($|a_{ij}| = 1$, c'est-à-dire des rotations), le signe - correspondant à des rotations réflexions ($|a_{ij}| = -1$).

Nous donnons quelques exemples de transformations de vecteurs axiaux.

Rotation d'ordre 2	Inversion	Reflexion
		

c) Tenseurs axiaux

On appellera composantes d'un tenseur axial d'ordre n , un ensemble de 3^n composantes $t_{ijkl\dots}$ se transformant dans un changement de base selon :

$$t'_{ijk\dots}(x') = \pm a_{il} a_{jm} a_{kn} t_{lmn\dots}(x)$$

le signe + correspondant à une rotation, le signe - à une rotation-réflexion. Les tenseurs qui ne sont pas axiaux seront dits polaires.

B - REPRESENTATION TENSORIELLE DES GRANDEURS PHYSIQUES

I - TENSEUR REPRESENTATIF D'UNE PROPRIETE PHYSIQUE

a) Un vecteur est un être qui, par rapport à un système d'axes x_i possède 3 composantes p_i qui se transforment selon la loi

$$p'_i = a_{ij} p_j.$$

Soit les 3 nombres p_j associés à un certain repère.

Si l'on précise que ces 3 nombres sont les composantes d'une grandeur physique, la loi ci-dessus nous permet de déterminer ces nombres dans n'importe quel repère déduit du précédent par une opération de symétrie : il faut souligner que les composantes d'un vecteur sont les composantes d'une grandeur physique qui reste identique lors de tout changement de base.

b) De même, la représentative d'une grandeur physique peut être un tenseur. La règle de transformation des composantes d'un tenseur permet de trouver les composantes dans n'importe quelle base. Quand on change de base, la grandeur physique ne bouge pas ; seule sa représentation est modifiée.

c) Une propriété physique reliant deux grandeurs physiques A et B définies comme tenseurs, sera également représentée par un tenseur. Si A est d'ordre p et B d'ordre q, la propriété physique a sera représentée par un tenseur d'ordre p+q. En effet, il est facile de montrer que les composantes $a_{ijk\dots lmn\dots}$ se transforment comme les composantes d'un tenseur d'un rang p+q, lors d'un changement de base.

d) Les grandeurs physiques A ou B peuvent être de nature différente: Par exemple, B peut être un champ magnétique. La propriété physique a sera représentée par un tenseur dit magnétique. Dans les équations de transformation d'un tel tenseur, lors d'un changement de base, il faudra aussi faire intervenir l'opération renversement du temps, c'est-à-dire les anti-opérateurs de symétrie. Par exemple, considérons le cas d'un vecteur axial tel que \vec{H} , champ magnétique. Lors d'un changement de base, la transformation des composantes H_i est la suivante :

$$H'_i = \pm a_{ij} H_j$$

Faisons maintenant intervenir l'opération renversement du temps R. Pour comprendre l'effet de R sur \vec{H} , on peut considérer comment agit R sur un système physique équivalent au champ magnétique.

Le champ magnétique peut être considéré comme dû à un courant électrique, et un renversement du sens du courant renverse le sens du vecteur magnétique.

Par conséquent, la transformation des composantes de \vec{H} sous l'action d'un anti-opérateur peut s'écrire:

$$H_i' = -(\pm a_{ij}) H_j$$

On peut généraliser cette notion à un tenseur magnétique d'ordre n.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Tenseur polaire} \\ \text{Tenseur axial} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} P_{ijk\dots}' = a_{il} a_{jm} a_{kl\dots} P_{lmn\dots} \\ P_{ijk\dots}' = \pm a_{il} a_{jm} a_{kl\dots} P_{lmn\dots} \end{array}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Tenseur polaire magnétique} \\ \text{Tenseur axial magnétique} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} P_{ijk\dots}' = -a_{il} a_{jm} a_{hl\dots} P_{lmn\dots} \\ P_{ijk\dots}' = -(\pm a_{il} a_{jm} a_{kl\dots} P_{lmn\dots}) \end{array}$$

II - SYMETRIE INTRINSEQUE DES PROPRIETES PHYSIQUES

Des considérations thermodynamiques permettent souvent d'attribuer aux tenseurs représentatifs des grandeurs physiques une symétrie intrinsèque.

Ainsi, par exemple, le tenseur de susceptibilité magnétique χ est symétrique : $\chi_{ij} = \chi_{ji}$. Ici, les composantes du tenseur peuvent être considérées comme les composantes d'un vecteur dans un espace à 6 dimensions, alors que, pour un tenseur d'ordre 2, le plus général, ses composantes sont les composantes d'un vecteur dans un espace à 9 dimensions. Ces notions se généralisent facilement à des tenseurs d'ordre n, et la connaissance de la symétrie intrinsèque du tenseur est absolument nécessaire pour la réduction de ce tenseur dans le groupe cristallographique.

CHAPITRE III

METHODES DE REDUCTIONS DES TENSEURS

I - INTRODUCTION

Comme il a été vu, les composantes d'un tenseur décrivent une propriété physique du cristal. Elles doivent rester invariantes dans toutes les opérations de symétrie du cristal.

D'autre part, on peut aussi considérer que les composantes d'un tenseur forment une représentation du groupe ponctuel du cristal.

Ainsi, seules les combinaisons linéaires des composantes du tenseur qui demeurent invariantes dans les opérations de symétrie du cristal, peuvent avoir des valeurs numériques non nulles.

- Si une composante du tenseur ou une combinaison linéaire de ces composantes est invariante dans toutes les symétries du groupe, cela signifie que la représentative tensorielle du groupe contient la représentation identité Γ_1 . Plus généralement, le nombre de coefficients indépendants du tenseur est égal au nombre d'interventions a_1 de Γ_1 dans la réduction de la représentation tensorielle.

Soit la relation tensorielle :

$$B_{ijk\dots} = a_{ijk\dots lmn\dots} A_{lmn\dots}$$

Si Γ_A et Γ_B sont les représentations suivant lesquelles se transforment les tenseurs A et B, le tenseur a se transforme suivant la représentation $\Gamma_A = \Gamma_A \cdot \Gamma_B$ ou $(\Gamma_A \cdot \Gamma_B)$ selon qu'il présente ou non une symétrie intrinsèque supérieure à celle de A et de B.

Le problème fondamental qui intervient dans la réduction des tenseurs est donc le calcul de a_1 , nombre de fois que la représentation identité est contenue dans la représentation tensorielle du groupe.

II - METHODES CLASSIQUES DU CALCUL DE a_1

Les deux définitions que nous avons données pour la définition des tenseurs cristallographiques conduisent à deux méthodes différentes de calcul pour a_1 .

a) Méthode de Bhagavantam

Les composantes du tenseur sont considérées comme les composantes d'un vecteur dans un espace à n dimensions (ou de dimensions inférieures selon la symétrie intrinsèque du tenseur). On calcule les caractères $\chi_a(R)$ de la représentation Γ_a .

$$a_1 = \frac{1}{g} \sum_R \chi_a(R)$$

Cette méthode est absolument générale et est aussi valable pour les tenseurs magnétiques, mais nécessite chaque fois un calcul fastidieux des caractères des représentations tensorielles.

b) Méthode de Jahn :

On a vu que les tenseurs d'ordre n se transforment suivant la représentation $(D_1)^n$ du groupe des rotations.

Pour calculer a_1 , il faut donc réduire la représentation $\Gamma_a = (D_1)^n$ suivant les représentations D_j du groupe des rotations et réduire les D_j suivant les représentations Γ_α de chaque groupe ponctuel.

$$\Gamma_a = \sum_j a_j D_j$$

$$D_j = \sum_\alpha p_j^\alpha \Gamma_\alpha$$

La méthode que Jahn a développée est difficile, et n'englobe pas le cas des tenseurs magnétiques.

III - SIMPLIFICATION ET GENERALISATION DE LA METHODE DE JAHN

a) Tenseurs dans la symétrie des 32 groupes ponctuels

Soit V , la représentation vectorielle polaire du groupe des rotations ; un tenseur polaire quelconque se transformera suivant la représentation V^n .

Les caractéristiques tensorielles de quelques phénomènes physiques sont résumées dans le *tableau suivant* :

TABLEAU I

=====

Effet	Γ_A	Γ_B	Γ_a
Pyroélectricité			V
Susceptibilité électrique, magnétique Conduction thermique, électrique	V	V	(V ²)
Piézoélectricité	(V ²)	V	V(V ²)
Elasticité	(V ²)	(V ²)	((V ²) ²)
Photoélasticité Electrostriction, magnétostriction	(V ²)	(V ²)	(V ²) ²
Pouvoir rotatoire			ϵ
Activité optique			$\epsilon(V^2)$
Pyromagnétisme			\tilde{V}
Effet magnétoélectrique	V	\tilde{V}	V \tilde{V}
Piézomagnétisme	(V ²)	\tilde{V}	$\tilde{V}(V^2)$

On simplifie la méthode de Jahn de la manière suivante :

Au lieu d'envisager le groupe des rotations et de réduire ensuite la symétrie dans le groupe ponctuel, il est plus simple de réduire directement V , puis Γ_a dans le groupe ponctuel G , mais sans utiliser directement la théorie des caractères.

Tous les théorèmes nécessaires pour la linéarisation des produits de représentations irréductibles ont été donnés dans le *chapitre I*.

α) Si a ne présente pas une symétrie intrinsèque à celle de A et B , $\Gamma_a = \Gamma_A \cdot \Gamma_B$, il faut donc linéariser un produit dans l'algèbre des représentations Γ_α du groupe G (cette algèbre est la même pour les groupes isomorphes, mais V , donc Γ_a , dépend du groupe). Les produits s'effectuent comme en algèbre ordinaire.

β) Si la symétrie intrinsèque de a est supérieur à celles de A et B , et si $\Gamma_A = \Gamma_B$, on peut utiliser les formules (10).

Exemple : Effet piézoélectrique dans le groupe 32 (D_3) (quartz). Cet effet est caractérisé par $V(V^2)$

$$V = A_2 + E$$

$$(V^2) = (A_2^2) + (E^2) + A_2E$$

$$= 2A_1 + 2E$$

$$V \cdot (V^2) = 2A_1 + 4A_2 + 6E$$

L'effet piézoélectrique est donc possible dans la symétrie 32 et de deux manières différentes ($A_1 = \Gamma_1$).

L'algèbre des représentations du groupe est résumée dans le tableau ci-dessous. La construction d'un tel tableau est immédiate lorsque l'on connaît les caractères des différentes représentations irréductibles.

	A_1	A_2	E
A_1	A_1	A_2	E
A_2	A_2	A_1	E
E	E	E	$A_1 + A_2 + E$

b) Cas des tenseurs axiaux :

La méthode de Jahn simplifiée permet aussi d'étudier les effets caractérisés par des tenseurs axiaux.

Soit ϵ , la représentation axiale de G :

- si G est propre, $\epsilon = \Gamma_1$
- si G est Impropre, ϵ est la représentation réelle de dimension 1 dont le noyau (ensemble des opérateurs de caractère +1) est le sous groupe invariant des éléments propres.
- si G est centrosymétrique, $\epsilon = \Gamma_{1u}$

Nota : (l'énumération des classes cristallines dans le *chapitre I* est la même que ci-dessus afin de faciliter la recherche des représentations).

Exemple : Activité optique dans le groupe $3m \cdot (C_{3V})$. Cet effet est caractérisé par $\epsilon(V^2)$.

$$\begin{aligned} V &= A_1 + E \\ (V^2) &= 2A_1 + 2E \\ \epsilon &= A_2 \\ \epsilon(V^2) &= 2A_2 + 2E, \text{ donc l'effet est interdit} \end{aligned}$$

(on remarquera que les groupes C_{3V} et D_3 sont des groupes isomorphes donc l'algèbre des représentations est la même).

c) Cas des tenseurs magnétiques dans le domaine paramagnétique :

La méthode s'applique aussi aux tenseurs magnétiques dans le domaine paramagnétique. La symétrie magnétique est alors $G \times R$, R désignant l'opération renversement du temps. Un vecteur magnétique \vec{H} se transforme suivant la représentation vectorielle \hat{V} . On a $\hat{V} = \epsilon V = \{V^2\}$ (carré antisymétrique de V)

On remarque que la représentation \hat{V} d'un groupe impropre est identique à la représentation V du groupe propre correspondant. L'énergie du cristal dans l'état paramagnétique ne peut contenir de termes impairs en \vec{H} . Pour étudier les termes pairs, on peut ignorer le renversement du temps ($R^2 = 1$) et la notion de tenseurs magnétiques et n'utiliser que la symétrie cristallographique G . Ainsi, par exemple, les tenseurs de susceptibilité magnétique et électrique ont la même forme quel que soit le groupe G .

d) Algèbre des représentations irréductibles

Dans le *tableau suivant*, on a résumé les résultats essentiels de l'algèbre des groupes ponctuels. On se limite aux groupes propres ; les groupes impropres leur sont isomorphes et admettent donc les mêmes représentations.

Les groupes centrosymétriques en sont les produits directs par le groupe $(1, \bar{1})$ et leurs représentations paires ou impaires se déduisent immédiatement de celles des groupes propres.

Dans le *tableau II a*, on a tabulé Γ_α^2 , (Γ_α^2) , $\{\Gamma_\alpha^2\}$ (Γ_α^3) ; Γ_α étant de dimension supérieure à 1.

Dans le *tableau II b*, on a tabulé les produits $\Gamma_\alpha \times \Gamma_\beta$, Γ_α et Γ_β étant de dimension supérieure à 1.

Dans le *tableau III*, on a tabulé la linéarisation de quelques phénomènes physiques pour les groupes mmm , $\bar{3}m$, $6mm$ et $\frac{4}{m}$.

Remarques : Tous ces tableaux ont été construits facilement, à l'aide des théorèmes fondamentaux de la théorie des groupes et de la connaissance des représentations irréductibles des groupes ponctuels et de la nature de la propriété physique.

Exemple détaillé de calcul : Soit un effet, supposé physique, caractérisé par $V \cdot (\hat{V}^3)$ dans le groupe mmm ; $(D_{2h}) \cdot D_{2h}$ est le groupe centrosymétrique qui correspond au groupe propre D_2 .

Dans le groupe D_2 : 222

$$\hat{V} = V$$

$$V = B_1 + B_2 + B_3$$

Dans le groupe D_{2h} : mmm

$$V = B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$$

$$\hat{V} = B_{1g} + B_{2g} + B_{3g}$$

TABLEAU II.
Algèbre des représentations des groupes propres.

Tableau II a.

Carrés et cubes symétriques et antisymétriques des représentations de dimension supérieure à 1.

G	F_0	F_2^2	$[F_2^2]$	$\{F_2^2\}$	F_2^3	$[F_2^3]$	$\{F_2^3\}$
3	E	2A + E	A + E	A	2A + 3E	2A + E	A ₁
4	E	2A + 2B	A + 2B	A	4E	2B + E'	A ₁
6	E'	2A + E''	A + E''	A	2B + 3E''	2A + E''	A ₂
3 ₂	E	A ₁ + A ₂ + E	A ₁ + E	A ₂	A ₁ + A ₂ + 3E	A ₁ + A ₂ + E	A
4 ₂₂	E	A ₁ + A ₂ + B ₁ + B ₂	A ₁ + B ₁ + B ₂	A ₂	A ₁ + A ₂ + 3E	A ₁ + A ₂ + E	A
0 ₂₂	E ₁	A ₁ + A ₂ + E ₂	A ₁ + E ₂	A ₂	4E	2E	A ₁
2 ₃	E	2A + E	A + E	A	2A + 3E	2A + E	A
4 ₃₂	T	A + E + 2T	A + E + T	T	2A + 2E + 7T	3 + AT	A ₁
	E	A ₁ + A ₂ + E	A ₁ + E	A ₂	A ₁ + A ₂ + 3E	A ₁ + A ₂ + E	A ₁
	T ₁	A ₁ + E + T ₁	A ₁ + E + T ₁	T ₁	A ₁ + 2E + 4T ₁ + 3T ₂	A ₁ + 2T ₁ + T ₂	A ₁
	T ₂	A ₁ + E + T ₂	A ₁ + E + T ₂	T ₂	A ₁ + A ₂ + 2E + 3T ₁ + 4T ₂	A ₁ + T ₁ + 2T ₂	A ₂

TABLEAU IIb
 =====

G	$\Gamma_{\alpha} \times \Gamma_{\beta}$
6	$E'E'' = 2B + E'$
622	$E_1E_2 = B_1 + B_2 + E_1$
23	$ET = 2T$
432	$ET_1 = T_1 + T_2$ $ET_2 = T_1 + T_2$ $T_1T_2 = A_2 + E + T_1 + T_2$

TABLEAU III

Symétrie de quelques phénomènes physiques dans les groupes mmm , $\bar{3}m$, $6mm$ et $\frac{1}{m}$.

I_a	NOMBRE MAXIMUM DE COEFFICIENTS	mmm	$\frac{4}{m} mmm$	$\bar{3}m$	$6mm$
V	3	$B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$A_{2u} + E_u$	$A_{2u} + E_u$	$A_1 + E_1$
V^2	3	$B_{1g} + B_{2g} + B_{3g}$	$A_{2g} + E_g$	$A_{2g} + E_g$	$A_2 + E_2$
$[V^2]_{12} = [V^2]_{21}$	0	$3A_{1g} + B_{1g} + B_{2g} + B_{3g}$	$2A_{1g} + B_{1g} + B_{2g} + E_g$	$2(A_{1g} + E_g)$	$2A_1 + E_1 + E_2$
$V \cdot V$	9	$3A_{1u} + 2(B_{1u} + B_{2u} + B_{3u})$	$2A_{1u} + A_{2g} + B_{1g} + B_{2g} + 2E_g$	$3(A_{1u} + E_u)$	$A_1 + 2A_2 + 2E_1 + E_2$
$\epsilon [V^2]$	6	$3A_{1u} + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u}$	$2A_{1u} + B_{1u} + B_{2u} + E_u$	$2(A_{1u} + E_u)$	$2A_2 + E_1 + E_2$
$V [V^2]$	18	$3A_{1u} + 5(B_{1u} + B_{2u} + B_{3u})$	$A_{1u} + 3A_{2u} + 2B_{1g} + 5E_u + 2B_{1u}$	$2A_{1u} + 4A_{2u} + 6E_u$	$3A_1 + A_2 + B_1 + B_2 + 4E_1 + 2E_2$
$V^2 [V^2]$	18	$3A_{1g} + 5(B_{1g} + B_{2g} + B_{3g})$	$A_{1g} + 3A_{2g} + 2B_{1g} + 2B_{2g} + 5E_g$	$2A_{1g} + 4A_{2g} + 6E_g$	$A_1 + 3A_2 + 4E_1 + 2E_2$
$V^3 [V^2]$	10	$A_0 + 3(B_{1g} + B_{2g} + B_{3g})$	$2A_{2g} + B_{1g} + B_{2g} + 3E_g$	$A_{1g} + 3A_{2g} + 3E_g$	$2A_2 + B_1 + B_2 + 2E_1 + E_2$
$[V^2]_{12}^2$	21	$9A_{1g} + 4(B_{1g} + B_{2g} + B_{3g})$	$6A_{1g} + A_{2g} + 3B_{1g} + 3B_{2g} + 4E_g$	$6A_{1g} + A_{2g} + 7E_g$	$5A_1 + B_1 + B_2 + 3E_1 + 4E_2$

On a :

$$(\check{V}^3) = \sum_{i=1,2,3} (B_{ig}^3) + \sum_i \sum_{j=1} B_{ig} (B_{jg}^2) + B_{1g} B_{2g} B_{3g}$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1,2,3} (B_{ig}^3) &= (B_{1g}^3) + (B_{2g}^3) + (B_{3g}^3) \\ &= B_{1g} + B_{2g} + B_{3g} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_i \sum_{j=1} B_{ig} (B_{jg}^2) &= B_{1g} (B_{2g}^2) + B_{1g} (B_{3g}^2) + B_{2g} (B_{1g}^2) \\ &\quad + B_{2g} (B_{3g}^2) + B_{3g} (B_{1g}^2) + B_{3g} (B_{2g}^2) \\ &= B_{1g} (A_g^2) + B_{1g} (A_g^2) + B_{2g} (A_g^2) \\ &\quad + B_{2g} (A_g^2) + B_{3g} (A_g^2) + B_{3g} (A_g^2) \end{aligned}$$

$$\sum_i \sum_{j=1} B_{ig} (B_{jg}^2) = 2 B_{1g} + 2 B_{2g} + 2 B_{3g} \left[(A_g^2) = A_g \right]$$

$$B_{1g} B_{2g} B_{3g} = B_{3g}^2 = A_g$$

D'où

$$(\check{V}^3) = A_g + 3(B_{1g} + B_{2g} + B_{3g})$$

$$V \cdot (\check{V}^3) = (A_g + 3(B_{1g} + B_{2g} + B_{3g})) (B_{1u} + B_{2u} + B_{3u})$$

$$= 9 A_u + 7(B_{1u} + B_{2u} + B_{3u})$$

Le *tableau V* se construit aisément à l'aide du *tableau IV* des caractères des représentations irréductibles.

Donc cet effet est impossible dans la classe mmm.

On peut vérifier les calculs par comparaison des dimensions de $V(\tilde{V}^3)$ et de $9 A_u + 7(B_{1u} + B_{2u} + B_{3u})$ qui doivent ici être égales à $3 \times 10 = 30$.

e) Cas des tenseurs dans la symétrie des 90 groupes magnétiques

Certains effets (piezomagnétisme, effet magnétoélectrique par exemple) sont interdits dans les cristaux paramagnétiques. Ces effets deviennent possibles et sont effectivement observés dans certains cristaux ordonnés magnétiquement.

Une généralisation de la méthode de Jahn permet d'étudier les "effets interdits". Cette méthode est basée sur la construction des groupes magnétiques énoncé dans le *chapitre I* : à chaque groupe magnétique, on peut faire correspondre une représentation irréductible réelle d'ordre 1.

α) soit alors T un tenseur axial ou polaire, non magnétique, se transformant suivant la représentation Γ_T . Γ_T est insensible à un éventuel ordre magnétique.

β) Si T est magnétique, et si Γ_T contient \tilde{V} à une puissance paire, Γ_T est, comme nous l'avons vu, aussi insensible à un éventuel ordre magnétique.

γ) Au contraire, si Γ_T contient \tilde{V} à une puissance $2n + 1$, T décrit un effet interdit dans l'état paramagnétique. Si le cristal s'ordonne dans le groupe G_α , T se transforme suivant la représentation

TABLEAU IV

D_{2h} ; mmm	E	C_2^Z	C_2^Y	C_2^X	$(E \cdot \bar{1})$	$(C_2^Z \cdot \bar{1})$	$(C_2^Y \cdot \bar{1})$	$(C_2^X \cdot \bar{1})$
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1
B_{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
B_{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1
B_{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1

TABLEAU V
 =====

	A _g	B _{3g}	B _{1g}	B _{2g}	A _u	B _{3u}	B _{1u}	B _{2u}
A _g	A _g	B _g	B _{1g}	B _{2g}	A _u	B _{3u}	B _{1u}	B _{2u}
B _{3g}	B _{3g}	A _g	B _{2g}	B _{1g}	B _{3u}	A _u	B _{2u}	B _{1u}
B _{1g}	B _{1g}	B _{2g}	A _g	B _{3g}	B _{1u}	B _{2u}	A _u	B _{3u}
B _{2g}	B _{2g}	B _{1g}	B _{3g}	A _g	B _{2u}	B _{1u}	B _{3u}	A _u
A _u	A _u	B _{3u}	B _{1u}	B _{2u}	A _g	B _{3g}	B _{1g}	B _{2g}
B _{3u}	B _{3u}	A _u	B _{2u}	B _{1u}	B _{3g}	A _g	B _{2g}	B _{1g}
B _{1u}	B _{1u}	B _{2u}	A _u	B _{3u}	B _{1g}	B _{2g}	A _g	B _{3g}
B _{2u}	B _{2u}	B _{1u}	B _{3u}	A _u	B _{2g}	B _{1g}	B _{3g}	A _g

$$\Gamma_{\alpha}^{2n+1} \Gamma_T \equiv \Gamma_{\alpha} \Gamma_T \quad (\Gamma_{\alpha}^{2n} = 1)$$

puisque un vecteur magnétique se transforme suivant \hat{V}_{α} dans le groupe G_{α} . L'effet devient donc possible si $\Gamma_T \Gamma_{\alpha}$ contient Γ_1 , c'est-à-dire si Γ_T contient Γ_{α} .

On étudie donc simultanément toutes les classes magnétiques dérivant d'une même classe cristalline. L'effet décrit par T et interdit éventuellement dans l'état paramagnétique est possible dans les classes G_{α} telle que Γ_{α} soit contenue dans Γ_T .

Cette méthode est particulièrement simple, puisqu'après avoir introduit la représentation Γ_{α} associée au groupe magnétique G_{α} , on utilise seulement les opérations de symétrie cristallographique.

Exemples :

1) Pyroélectricité et pyromagnétisme.

Si V contient Γ_1 , G est pyroélectrique ;

Si V " Γ_{α} , G est pyromagnétique.

2) Effet piézomagnétique dans la classe $\frac{2}{m}$:

L'effet piézomagnétique est caractérisé par $\hat{V}_{\Gamma_{\alpha}}(V^2)$;

$$V = A_u + 2 B_u$$

$$\hat{V} = A_g + 2 B_g$$

$$\hat{V}(V^2) = 8 A_g + 10 B_g$$

Γ_α	E	2z	$\bar{1}$	m	G_α
A_g	1	1	1	1	$\frac{2}{m}$
B_g	1	-1	1	-1	$\frac{2'}{m'}$
A_u	1	1	-1	-1	$\frac{2}{m'}$
B_u	1	-1	-1	1	$\frac{2'}{m'}$

L'effet est donc possible dans les classes $\frac{2}{m}$ (8 invariants) et $\frac{2'}{m'}$ (10 invariants), interdit dans les classes $\frac{2}{m'}$ et $\frac{2'}{m}$.

IV - CONCLUSION

Les quelques exemples physiques choisis mettent en évidence la simplicité de la méthode pour la réduction des tenseurs cristallographiques. Cette méthode permet en outre de traiter simultanément une propriété physique attachée à l'ensemble des groupes magnétiques dérivant d'un même groupe cristallographique.

En plus, si l'on considère des effets non linéaires, par exemple :

$$J_i = \sigma_{ij} E_j + \sigma_{ijk} E_j E_k + \sigma_{ijkl} E_j E_k E_l + \dots$$

la réduction des différents tenseurs se fait pas à pas. Les résultats obtenus dans la réduction du tenseur d'ordre n-1 ou n-2 sont utilisés pour la réduction du tenseur d'ordre n.

Bibliographie

=====

- ASCHER, E (1966) .- Helv. Phys. Acta. 39, 40.
- BERTAUT, E.F. (1968). Acta Cryst. A24, 217
- BHAGAVANTAN, S. (1966) . - Crystal symmetry and physical properties, Academic Press.
- BIRSS, R.R. (1964) . - Symmetry and Magnetism, North Holland.
- FUMI, F.G. (1952) .- Acta Cryst. 5, 44.
- JAHN, H.A. (1949) .- Acta Cryst. 2, 30.
- LANDAU et LIFCHITZ (1967) .- Mécanique quantique, Editions de Moscou
- LOMONT, T.S. (1959) .- The applications of finite groups, Academic Press.
- LYUBARSKI, G.Y. (1960) .- The applications of group theory in Physics
Pergamon Press
- SCHIEBER, A. (1968) .- Magneto chemistry, North Holland.
- SHTRIKMAN, S. (1962) .- Bull. Am. Phys. Soc, 7, 279.
- SIVARDIERE, J. (à paraître au Bull. Soc. fr. Minéral. Cristallogr.)
- SIVARDIERE, J. et WAIN TAL, A. (1969) .- Bull. Soc. fr. Minéral. Cristallogr.
- TINCHLAM, M. (1964) .- Group theory and quantum mechanics, Mac graw Hill.
- ZHELUDEV, I.S. et SHUVALOV, L. A. (1956), Sov. Crist. 1, 681.
-
- Cours de Cristallographie de P. DUCROS (non publié)
 - Cours de théorie des groupes de E.F. BERTAUT (non publié)
 - Eléments de théorie des groupes de D. DAUTREPPE (non publié)
 - Rapport C.E.A. sur les tenseurs de J. SIVARDIERE (non publié)
 - Rapport C.E.A. sur la théorie des groupes de J. SIVARDIERE (non publié)
 - Polycopie de Mécanique quantique de Y. AYANT (non publié)