(iv) m.s.d.B. lies on a quartic surface in direct space [equation (12)];

(v) r.m.s.d.B. lies on an ellipsoid in direct space [equation (13)];

(vi) constant temperature factor lies on an ellipsoid in reciprocal space [equation (15)];

(vii) $(\text{r.m.s.d.A})^{-1}$ lies on an ellipsoid in reciprocal space [equation (14)].

Ellipsoids (i) and (v) are members of the same family of surfaces defined by equation (2). Ellipsoids (vi) and (vii) are both members of another family of surfaces [equations (14) and (15)].

The author would like to record his gratitude and indebtedness to Mr P. Bradfield and Dr G. S. Pawley for several helpful discussions and to the former for carrying through some lengthy derivations of which only the results have been presented above. The author is grateful to the Science Research Council for the support of a Research Studentship during this work.

References

LIPSON, H. & COCHRAN, W. (1966). *The Crystalline State*, Vol. III. London: Bell.

NILSSON, A., LIMINGA, R. & OLOVSSON, I. (1968). *Acta Chem. Scand.* **22**, 719.

NYE, J. F. (1957). *Physical Properties of Crystals*. Oxford: Clarendon Press.

SIROTA, N. N., OLEKHNOVICH, A. I. & OLEKHNOVICH, N. M. (1968). *Acta Cryst.* A**24**, 639.

Acta Cryst. (1969). A**25**, 526

Méthode Générale d'Etude des Couplages entre Polarisation, Aimantation et Tensions dans les Cristaux

PAR J. SIVARDIERE

Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble, Rue des Martyrs, Grenoble, France

(*Reçu le* 16 *décembre* 1968)

An extension of Bertaut's macroscopic theory of magnetic and magnetoelectric couplings is presented. The components of electric and magnetic moments and the stress tensor are classified according to the irreducible representations of the crystal's magnetic group; couplings are possible only within a representation.

Couplages dans les cristaux paramagnétiques

Soit $\mathbf{T}_A$ un tenseur d'ordre n représentant une grandeur physique A, ses 3^n composantes se transforment dans une rotation suivant la représentation $\Gamma_A = \mathbf{V}^n$ ou $\tilde{\mathbf{V}}^n$, $\mathbf{V}$ et $\tilde{\mathbf{V}}$ étant respectivement les représentations vectorielles polaire et axiale du groupe des rotations (dans un cristal paramagnétique, donc invariant dans le renversement du temps, une grandeur magnétique A couplée à d'autres grandeurs non magnétiques intervient nécessairement un nombre pair p de fois, et par suite $\mathbf{V}^{np} = \tilde{\mathbf{V}}^{np}$). Soit G le groupe ponctuel du cristal; Γ_A est réductible suivant les représentations irréductibles Γ_α de G et par suite on peut classer les composantes de $\mathbf{T}_A$, ou des combinaisons linéaires de ces composantes, suivant les représentations Γ_α.

Une manière simple d'effectuer cette classification consiste à utiliser la méthode de l'opérateur de projection (Melvin, 1956), quelles que soient les dimensions des représentations Γ_α, après avoir déterminé les propriétés de transformation des composantes de $\mathbf{T}_A$, A étant la polarisation $\mathbf{P}$, le tenseur des contraintes $\overline{\overline{\sigma}}$, le tenseur des déformations $\overline{\overline{\mathbf{d}}}$. Le théorème d'Unsöld (Tinkham, 1964) fournit alors des invariants tensoriels d'ordre 2 couplant deux grandeurs A et B: ce sont les produits scalaires des vecteurs de base d'une même représentation extraits respectivement de l'espace des coordonnées des tenseurs $\mathbf{T}_A$ et $\mathbf{T}_B$; *le terme énergétique* $T_{Aijk} \cdot T_{Blmn}$ *est invariant dans G si* T_{Aijk} *et* T_{Blmn} *appartiennent à la même représentation.*

Le nombre d'invariants indépendants couplant les grandeurs A et B est égal au nombre d'interventions de la représentation identité Γ_1 de G dans la réduction de $\Gamma_A \times \Gamma_B$, ou encore au nombre de composantes irréductibles réelles communes à Γ_A et Γ_B (Sivardière & Waintal, 1969, à paraître).

La méthode ci-dessus généralise la théorie des couplages ferro et antiferro électriques et magnétiques développée par Bertaut (Bertaut, 1968). Elle permet de déterminer les couplages physiques autorisés par la symétrie G, c'est-à-dire de construire une fonction thermodynamique (énergie libre F) invariante dans G, combinaison linéaire des invariants indépendants d'Unsöld:

$$F = \sum_{ijk,lmn} Ta_{ijk,lmn}\, T_{A_{ijk}}\, T_{B_{lmn}}\,.$$

Par des dérivations convenables, tenant compte de la symétrie intrinsèque du tenseur $\mathbf{T}_a$ (souvent supérieure à celle du tenseur $\mathbf{T}_A \times \mathbf{T}_B$), on en déduit l'expression du tenseur $\mathbf{T}_a$ décrivant les couplages entre les grandeurs A et B: piézoélectricité, élasticité, photoélasticité, ... (Fumi, 1952; Birss, 1964; Bhagavantam, 1966). En particulier on peut obtenir simultanément les tenseurs de l'effet piezoélectrique direct et inverse.

Pour l'effet direct (apparition d'une polarisation sous l'effet de contraintes), l'énergie libre:

$$F = \sum_{ijk} p_{ijk}\sigma_{ij}P_k\,,$$

est égale à l'énergie électrique emmagasinée, $\Sigma\, P_k^2$, d'où:

$$P_k = \sum_{ij} d_{ijk}\sigma_{ij}\,;$$

pour l'effet inverse, F est égale à l'énergie élastique acquise dans un champ électrique:

$$\sum_i \sigma_{ii}^2 + 2\sum_{ij}\sigma_{ij}^2\,,$$

d'où

$$\sigma_{ii}^2 = \sum_i p_{iik}P_k$$

et

$$\sigma_{ij}(i \neq j) = \tfrac{1}{2}\sum_k p_{ijk}P_k\,.$$

La méthode est illustrée par des exemples choisis dans les groupes ponctuels $2mm$ et 32, et dans le groupe des rotations. Les Tableaux 1 et 2 résument les éléments de symétrie des groupes $2mm$ et 32, leurs caractères dans les diverses représentations irréductibles ainsi que les composantes de tenseurs physiques qui se transforment dans ces représentations. La notation des tenseurs est celle adoptée par Bhagavantam (1966).

Exemple 1. *Classe 2mm*

Grâce au Tableau 1, on peut former 5 invariants piézoélectriques indépendants: $\sigma_{xx}P_z$, $\sigma_{yy}P_z$, $\sigma_{zz}P_z$, $\sigma_{zx}P_x$, $\sigma_{yz}P_y$. Le tenseur piézoélectrique contient donc 5 coefficients distincts:

$$\begin{array}{c} \\ P_x \\ P_y \\ P_z \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{cccccc} \sigma_{xx} & \sigma_{yy} & \sigma_{zz} & \sigma_{y2} & \sigma_{2x} & \sigma_{xy} \end{array} \\
\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & P_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P_{24} & 0 & 0 \\ P_{31} & P_{32} & P_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
\end{array}$$

$$\begin{cases} P_x = P_{15}\sigma_{zx} \\ P_y = P_{24}\sigma_{yz} \\ P_z = P_{31}\sigma_{xx} + P_{32}\sigma_{yy} + P_{33}\sigma_{zz} \end{cases}$$

(les tenseurs des effets direct et inverse sont ici identiques).

Grâce au même tableau, on forme 9 invariants élastiques, σ_{ij}^2, $\sigma_{xx}.\sigma_{yy}$, et 12 coefficients photoélastiques $(\sigma_{ij}d_{ij})$ indépendants. D'où le tenseur d'élasticité:

$$\begin{array}{c} \\ \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{cccccc} \sigma_{xx} & \sigma_{yy} & \sigma_{zz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zx} & \sigma_{xy} \end{array} \\
\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix}
\end{array},$$

et le tenseur de photoélasticité:

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix}.$$

Exemple 2. *Classe* 32 (*z est parallèle à l'axe* 3, *x parallèle à un axe* 2)

Grâce au Tableau 2 on peut former 2 invariants piézoélectriques indépendants: $(\sigma_{xx}-\sigma_{yy})P_x - 2\sigma_{xy}P_y$ et $\sigma_{yz}P_x - \sigma_{zx}P_y$. D'où le tenseur de l'effet piézoélectrique direct:

$$\begin{pmatrix} P_{11} & -P_{11} & 0 & P_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -P_{14} & -2P_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

et le tenseur de l'effet piézoélectrique inverse:

$$\begin{pmatrix} P'_{11} & -P'_{11} & 0 & P'_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -P'_{14} & -P'_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

La quantité suivante est une combinaison linéaire d'invariants élastiques (énergie élastique):

Tableau 1. *Classe 2mm et classes magnétiques associées*

Γ_α	$\in$	2_z	m_{xz}	m_{yz}	$\mathbf{P}$	$\overline{\overline{\sigma}}$	$\overline{\overline{\mathrm{d}}}$	$2mm$	$2m'm'$	$2'mm'$
A_1	1	1	1	1	P_z	$\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$	d_{xx}, d_{yy}, d_{zz}	J_z	M_z	J_x, M_y
B_1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$		σ_{xy}	d_{xy}	M_z	J_z	J_y, M_x
B_2	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	P_x	σ_{2x}	d_{zx}	J_x, M_x	J_y, M_x	J_z
B_3	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1	P_y	σ_{yz}	d_{yz}	J_y, M_y	J_x, M_y	M_z

Tableau 2. *Classes* 32 *et* 32′

Γ_α	ε	$2C_3$	$3C_2$	$\mathbf{P}$	$\overline{\overline{\sigma}}$		$\overline{\overline{\mathrm{d}}}$		32		32′	
A_1	1	1	1		$\sigma_{xx}+\sigma_{yy}$	σ_{zz}	$d_{xx}+d_{yy}$	d_{zz}			J_z	M_z
A_2	1	1	$\bar{1}$	P_z					J_z	M_z		
E	2	$\bar{1}$	0	$\begin{pmatrix} P_x \\ P_y \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{xx}-\sigma_{yy} \\ -2\sigma_{xy} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \sigma_{yz} \\ -\sigma_{zx} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} d_{xx}-d_{yy} \\ -2d_{xy} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} d_{yz} \\ -d_{zx} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} M_x \\ M_y \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -J_y \\ +J_x \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -M_y \\ +M_x \end{pmatrix}$

$$a(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})^2+b\sigma_{zz}^2+c(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})\sigma_{zz}$$
$$+d[(\sigma_{xx}-\sigma_{yy})^2+4\sigma_{xy}^2]+e(\sigma_{yz}^2+\sigma_{zx}^2)$$
$$+f[(\sigma_{xx}-\sigma_{yy})\sigma_{yz}+2\sigma_{xy}\sigma_{zx}]\,.$$

Posons: $a+d=c_{11}$, $2(a-d)=2c_{12}$, $c=c_{13}$, $f=c_{14}$, $e=c_{44}$, $b=c_{33}$. Le tenseur d'élasticité s'écrit:

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & -c_{14} & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ c_{14} & -c_{14} & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & c_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{14} & c_{11}-c_{12} \end{pmatrix}.$$

Le tenseur d'élasticité a la même forme dans les classes 32, $3m$ et $\bar{3}m$. Effectivement on a pour ces classes: $[\mathbf{V}^2]=2A_{1(g)}+2E_{(g)}$ et la répartition des fonctions de base est la même; on forme donc les mêmes invariants élastiques. Le tenseur piézoélectrique y a au contraire des formes différentes car: $V_{32}=A_2+E$, $V_{3m}=A_1+E$ et $V_{\bar{3}m}=A_{2u}+E_u$.

Exemple 3. *Elasticité des corps isotropes, solides ou liquides*

Un corps isotrope est invariant dans le groupe des rotations. Un tenseur symétrique d'ordre deux se transforme suivant la représentation $[\mathbf{V}^2]=D_0+D_2$ de ce groupe. On peut exprimer les fonctions de base Y_o^0 et Y_m^2 de ces représentations en coordonnées cartésiennes, et on en déduit comment se transforment les composantes du tenseur σ_{ij} des tensions et du tenseur d_{ij} des déformations (Tableau 3). On peut alors écrire l'expression la plus générale des couplages élastiques, qui dépend de deux coefficients α_0 et α_2. $\lambda=\alpha_0-\alpha_2/2$ et $\mu=3\alpha_2/4$ sont respectivement le coefficient de Lamé et le module de Coulomb (la viscosité d'un fluide est décrite de la même manière par deux coefficients, les coefficients de Navier). Le tenseur d'élasticité d'un corps isotrope s'écrit donc:

$$\begin{pmatrix} \lambda+2 & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda+2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda+2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{pmatrix}.$$

En symétrie cubique 0, la représentation D_2 est réductible suivant $E+T_2$, il y a donc trois coefficients d'élasticité (seule une hypothèse physique comme celle de Cauchy réduit leur nombre). Considérons au contraire la susceptibilité électrique: dans un corps isotrope, un vecteur polaire se transformant suivant l'unique représentation D_1, la susceptibilité dépend d'un seul coefficient.

Remarques diverses

(i) Dans un système rhomboédrique ou hexagonal, on a intérêt à choisir un repère orthogonal pour décrire les différents tenseurs sinon la représentation vectorielle n'est pas unitaire, et on doit envisager la variance des tenseurs.

(ii) Les composantes χ_{ij} du tenseur susceptibilité électrique se transforment comme les composantes σ_{ij}. Pour le groupe 32, seules les composantes χ_{xx}, χ_{yy} et χ_{zz} sont non nulles, puisque seules elles se transforment dans la représentation identité.

D'autre part $\chi_{xx}-\chi_{yy}=0$, cette quantité n'étant pas invariante, et par suite: $\chi_{xx}=\chi_{yy}\neq\chi_{zz}$. (Naturellement on n'a pas nécessairement: $\sigma_{xx}-\sigma_{yy}=0$ puisque le tenseur $\overline{\overline{\sigma}}$ représente une excitation extérieure qui abaisse la symétrie du cristal et est indépendant de la symétrie initiale du cristal; le tenseur $\overline{\overline{\chi}}$ caractérise au contraire le cristal).

(iii) La symétrie intrinsèque des grandeurs A, B, ... peut être introduite avant ou après le processus de classement. Ainsi $\overline{\overline{\sigma}}$ est symétrique; puisque: $\mathbf{V}^2=[\mathbf{V}^2]+\{\mathbf{V}^2\}$, on peut d'abord supposer χ quelconque, σ_{ij} se transforme comme le produit X_iX_j; la condition $\sigma_{ij}=\sigma_{ji}$ supprime alors l'intervention de $\{\mathbf{V}^2\}$. Plus généralement la symétrie intrinsèque implique la nullité des combinaisons linéaires de composantes T_{Aijk} associées à certaines Γ_α.

(iv) Les couplages élastiques sont du type $\sigma_{ij}\sigma_{kl}$, les couplages photoélastiques du type $\sigma_{ij}\chi_{kl}$.

Effectivement le tenseur élastique se transforme suivant $\{[\mathbf{V}^2]^2\}$, le tenseur photoélastique suivant $[\mathbf{V}^2]^2$. Par suite les deux tenseurs n'ont des formes identiques que si toute représentation Γ_α qui figure dans la réduction de $[\mathbf{V}^2]$ suivant les représentations de G y figure une seule fois: c'est le cas pour le groupe des rotations et les groupes cubiques.

Autre point de vue

Si un cristal de classe G est piézoélectrique, c'est que sous l'effet de certaines pressions ou de certains cisaillements σ_{ij}, sa classe devient H, sous-groupe de G, pyroélectrique. Il s'agit d'une simple conséquence du principe de Curie.

Si σ_{ij} et P_k se transforment dans la représentation Γ_α de dimension d de G ($\sigma_{ij}P_k$ est invariant dans G), le sous-groupe $H(\sigma_{ij})$, dont les représentations irréductibles sont notées Δ_β, est tel que la restriction de Γ_α

Tableau 3. *Fonctions de base des représentations D_0 et D_2 du groupe des rotations*

D_0	$x^2+y^2=z^2$	$\sigma_{xx}+\sigma_{yy}+\sigma_{zz}$	$d_{xx}+d_{yy}+d_{zz}$
	$\sqrt{\frac{3}{8}}\,(x+iy)^2$	$\sqrt{\frac{3}{8}}\,(\sigma_{xx}+2i\sigma_{xy}-\sigma_{yy})$	$\sqrt{\frac{3}{8}}\,(d_{xx}+2id_{xy}-d_{yy})$
	$\sqrt{\frac{3}{2}}\,(x+iy)z$	$\sqrt{\frac{3}{2}}\,(\sigma_{xz}+i\sigma_{yz})$	$\sqrt{\frac{3}{2}}\,(d_{xz}+id_{yz})$
D_2	$\frac{1}{2}\,(2z^2-x^2-y^2)$	$\frac{1}{2}\,(2\sigma_{zz}-\sigma_{xx}-\sigma_{yy})$	$\frac{1}{2}\,(2d_{zz}-d_{xx}-d_{yy})$
	$\sqrt{\frac{3}{2}}\,(x-iy)z$	$\sqrt{\frac{3}{2}}\,(\sigma_{xz}-i\sigma_{yz})$	$\sqrt{\frac{3}{2}}\,(d_{xz}-id_{yz})$
	$\sqrt{\frac{3}{8}}\,(x-iy)^2$	$\sqrt{\frac{3}{8}}\,(\sigma_{xx}-2i\sigma_{xy}-\sigma_{yy})$	$\sqrt{\frac{3}{8}}\,(d_{xx}+2id_{xy}-d_{yy})$

à ce sous-groupe contienne d_α fois la représentation identité Δ_1. En effet les composantes σ_{ij} des contraintes appliquées doivent être invariantes dans le groupe de symétrie du cristal; en particulier $H(\Gamma_1)=G$. Si toutes les composantes σ_{ij} appartenant à Γ_α ne sont pas appliquées, la réduction de symétrie peut être moins forte.

Exemples

(i) Groupe $2mm$

Les réductions de symétrie sous l'effet des contraintes sont les suivantes: $H(B_1)=2$, $H(B_2)=m_{xz}$, $H(B_3)=m_{yz}$. Seuls les groupes m_{xz} et m_{yz} sont pyroélectriques.

(ii) Groupe 32

Si le tenseur $\overline{\overline{\sigma}}$ est diagonal, la symétrie 32 n'est pas réduite; si $\overline{\overline{\sigma}}$ est quelconque, aucune symétrie ponctuelle ne subsiste. Si seuls les coefficients σ_{xx} et σ_{yy} ne sont pas nuls, la symétrie devient $H=2_x$, et effectivement la restriction de la représentation E aux éléments de H est réductible et contient une fois la représentation identité Δ_1 de H (σ_{xy} se transforme suivant $\Delta_\beta \neq \Delta_1$ mais est supposé nul).

Remarque

Supposons qu'un cristal subisse une réduction de symétrie; si une propriété physique relie deux grandeurs se transformant suivant Γ_A et Γ_B et si le nombre de composantes irréductibles communes à Γ_A et Γ_B augmente quand on passe du groupe au sous-groupe, le nombre de coefficients du tenseur correspondant augmente. Ainsi, la susceptibilité électrique est décrite par un coefficient en symétrie isotrope et cubique (432), et par deux coefficients en symétrie quadratique (422): effectivement, la représentation D_1 restreinte à 432 et 422 est irréductible (T_1) ou réductible (A_2+E).

La réduction de symétrie envisagée ci-dessus peut être spontanée (transformation allotropique), ou imposée par une action extérieure. Dans ce dernier cas, la méthode des représentations permet de prévoir les effets morphiques envisagés par Nye (Nye, 1961) et les couplages qui leur donnent naissance.

Considérons par exemple un cristal de symétrie 2_zmm. Si on applique le champ E_x, la symétrie devient m_{xz}; E_x induit le cisaillement d_{xz} mais dans le groupe m_{xz}, les couplages E_xd_{xx}, E_xd_{yy} et E_xd_{zz} sont autorisés, alors qu'ils sont interdits dans le groupe initial, comme le montre le Tableau ci-dessous:

$2_z mm$	m_{xz}	$\mathbf{E}$	$\overline{\overline{\mathbf{d}}}$
$A_1, B_1 \rightarrow$	A'	E_x, E_z	$d_{xx}, d_{yy}, d_{zz}, d_{xz}$
$B_1, B_3 \rightarrow$	A''	E_y	d_{xy}, d_{yz}

Il peut donc apparaître de nouvelles constantes piézoélectriques par suite de la réduction de symétrie. Naturellement, le tenseur de l'effet piézoélectrique ne tient pas compte des effets morphiques, qui sont du second ordre, puisque par définition il relie linéairement l'excitation $\mathbf{E}$ et la réponse $\overline{\overline{\mathbf{d}}}$ du cristal.

Couplages dans les cristaux ordonnés magnétiquement

Soit G_m le groupe magnétique du cristal dans l'état ordonné; on sait que G_m est caractérisé soit par la donnée d'un sous-groupe invariant d'indice 2 du groupe ponctuel G, soit par la donnée d'une représentation Γ_m réelle de dimension 1 de G (Sivardière, 1969, à paraître).

G_m et G sont isomorphes et ont donc les mêmes représentations irréductibles. Si A est une grandeur magnétique, les composantes de $\mathbf{T}_A$ se transforment dans le groupe G_m, alors que si A n'est pas magnétique, les composantes de $\mathbf{T}_A$ se transforment dans G. Pour utiliser la méthode précédente, on doit donc classer les composantes de $\mathbf{T}_A$ suivant les représentations irréductibles de G_m ou de G, suivant que A est, ou n'est pas, magnétique.

On peut commencer par classer les composantes de $\mathbf{T}_A$ suivant les représentations de G; si A est magnétique et si T_{Aijk} se transforme suivant la représentation Γ_α de G, cette composante se transforme suivant la représentation (de même dimension) $\Gamma_m\Gamma_\alpha$ de G_m. On étudie alors simplement toutes les classes magnétiques G_m associées au groupe ponctuel G.

Ainsi l'aimantation $\mathbf{M}$ se transforme suivant la représentation axiale $\tilde{\mathbf{V}}$ dans le groupe G et suivant $\Gamma_m\tilde{\mathbf{V}}$ dans le groupe G_m. De même la densité de courant spontané $\mathbf{J}$ (Ascher, 1966) se transforme suivant $\mathbf{V}$ dans le groupe G et suivant $\Gamma_m\mathbf{V}$ dans le groupe G_m. (D'après le théorème de Bloch, $\mathbf{J}=0$ dans les groupes paramagnétiques; $\mathbf{J}$ est différent de zéro dans les 31 groupes magnétiques G_m tels que $\Gamma_m\mathbf{V}$ contienne la représentation identité du groupe G correspondant.)

Les couplages entre composantes de la polarisation, de l'aimantation, de la densité de courant spontané, du tenseur des contraintes, ... ne sont possibles qu'à l'intérieur d'une même représentation du groupe magnétique. On peut prévoir alors les couplages magnétoélectriques, piézoélectriques ... et en particulier envisager les configurations antiferroélectriques et antiferromagnétiques.

A titre d'exemple, nous avons indiqué dans les Tableaux 1 et 2 les propriétés de transformation de l'aimantation $\mathbf{M}$ et de la densité de courant spontané $\mathbf{J}$ dans les classes magnétiques associées aux groupes ponctuels $2mm$ et 32.

Exemple 1

Dans la classe $2mm$, on trouve 2 invariants magnétoélectriques et 3 invariants piézomagnétiques.

Dans la classe $2m'm'$, associée à la représentation B_1 de $2mm$, on trouve 3 invariants magnétoélectriques; le tenseur piézomagnétique y a la même forme que le tenseur piézoélectrique dans la classe $2mm$, puisque les composantes de la polarisation se transforment dans la classe $2mm$ comme les composantes de l'aimantation dans la classe $2m'm'$.

Dans la classe $2m'm'$, associée à la représentation B_2 de $2mm$, on trouve de même 2 invariants magnétoélectriques et 5 invariants piézomagnétiques; un courant spontané est autorisé suivant **x**, le tenseur de London est diagonal, et on prévoit les couplages J_xE_z, J_zE_x, J_xM_y, J_yM_x, $J_x\sigma_{xx}$, $J_x\sigma_{yy}$, $J_x\sigma_{zz}$, $J_y\sigma_{xy}$, $J_z\sigma_{zx}$.

Exemple 2

Dans la classe 32, comme dans toutes les classes propres triviales, les tenseurs piézoélectrique et piézomagnétique ont même symétrie (2 coefficients). Dans la classe 32′, on trouve 4 invariants piézomagnétiques: $(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})F_z$, $\sigma_{zz}F_z$, $(\sigma_{xx}-\sigma_{yy})F_x-2\sigma_{xy}F_y$, $\sigma_{yz}F_x-\sigma_{zx}F_y$, d'où le tenseur piézomagnétique:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & P_{15} & -2P_{22} \\ -P_{22} & P_{22} & 0 & P_{15} & 0 & -2P_{11} \\ P_{31} & P_{31} & P_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Dans la classe 32, on trouve 2 invariants magnétoélectriques: $F_xP_x+F_yP_y$, F_zP_z; dans la classe 32′, le seul invariant est: $F_xP_y-F_yP_x$. Dans la classe 32′, un courant spontané est autorisé suivant **z**, les tenseurs piézomagnétique et piézoconductif ont la même forme.

Remarques

(i) Si la structure magnétique du cristal se transforme dans une représentation Γ_α réelle de dimension 1 de G, elle est invariante dans le groupe magnétique G_α; si Γ_α est complexe ou de dimension supérieure à 1, la méthode précédente ne peut s'appliquer qu'après une réduction de symétrie: le groupe magnétique H_m est associé à un sousgroupe H de G (Sivardière, 1969),

(ii) Les groupes 32 et $3m$ sont isomorphes et ont mêmes représentations irréductibles. **M** étant un vecteur axial, invariant par inversion, la représentation $\tilde{\mathbf{V}}$ est la même dans ces deux groupes; il en est de même de $[\mathbf{V}^2]$, invariante par inversion. Par conséquent, le tenseur piézomagnétique a la même forme dans les classes 32 et $3m$ d'une part, 32′ et $3m'$ d'autre part. Notons que les représentations **V** et $\Gamma_m\tilde{\mathbf{V}}$ de $3m$ ($\Gamma_m=A_2=\varepsilon$) sont identiques, donc le tenseur piézomagnétique dans $3m'$ est identique au tenseur piézoélectrique dans $3m$.

Généralisation

En classant suivant les représentations du groupe magnétique les composantes des tenseurs P_iP_j, F_iF_j, P_iF_j, $P_iP_jP_k$, ... on pourrait étudier par la méthode précédente tous les couplages entre la polarisation, l'aimantation et les contraintes envisagés par Lyubimov (Lyubimov, 1968).

Conclusion

La méthode des représentations peut être utilisée pour construire toutes sortes de quantités invariantes dans les groupes ponctuels cristallographiques et magnétiques: énergie libre décrivant les couplages entre polarisation, aimantation, courants spontanés et contraintes, mais aussi énergie mise en jeu dans les phénomènes d'optique cristalline, énergie dissipée dans les phénomènes irréversibles, énergie du champ cristallin et énergie d'anisotropie magnétocristalline.

Je remercie Monsieur le Professeur E. F. Bertaut de l'intérêt qu'il a porté à ce travail, et des conseils qu'il m'a prodigués au cours de la rédaction.

Références

ASCHER, E. (1966). *Helv. phys. acta*, **39**, 40.
BERTAUT, E. F. (1968). *Acta Cryst.* A**24**, 217.
BHAGAVANTAM, S. (1966). *Crystal Symmetry and Physical Properties*. New York: Academic Press.
BIRSS, R. R. (1964). *Symmetry and Magnetism*. Amsterdam: North Holland Publishing Co.
FUMI, F. G. (1952). *Acta Cryst.* **5**, 44.
LYUBIMOV, V. N. (1968). *Sov. Cryst.* **12**, 612.
MELVIN, M. A. (1956). *Rev. Mod. Phys.* **28**, 18.
NYE, J. F. (1961). *Propriétés Physiques des Cristaux*, p. 269. Paris: Dunod.
SIVARDIERE, J. (1969). *Bull. Soc. Franç. Minér. Crist.* A paraître.
SIVARDIERE, J. & WAINTAL, A. (1969). *Bull. Soc. Franç. Minér. Crist.* A paraître.
TINKHAM, M. (1964). *Group Theory and Quantum Mechanics*. New York: McGraw-Hill.