

– Chapitre V – Symétries

Un objet est dit symétrique s'il peut être superposé à lui-même par l'application d'une transformation de l'espace autre que l'identité.

L'étude des symétries à l'échelle macroscopique permet de discuter les caractéristiques d'anisotropie des propriétés physiques dans un matériau. A l'échelle microscopique, l'identification des symétries simplifie la description structurale des assemblées d'atomes.

Dans ce chapitre, nous introduirons deux types de symétrie :

- Les **symétries d'orientation**, qui agissent sur des directions. Ce sont elles qui permettent, entre autres, de discuter la dépendance directionnelle des propriétés physiques.
- Les **symétries de position**, qui agissent sur des points. Celles-ci sont formées par la combinaison de symétries de translation et d'orientation, et doivent être introduites pour décrire les positions atomiques dans les cristaux périodiques.

Nous montrerons ensuite comment ces symétries peuvent conditionner l'apparition de phénomènes physiques, et comment celles-ci permettent de comprendre l'anisotropie des propriétés physiques.

I. Symétries d'orientation

I-1. Opérations de symétrie d'orientation

Les **opérations de symétrie d'orientation** sont des isométries (transformations de l'espace conservant les longueurs) laissant au moins un point invariant¹.

→ Ces opérations excluent toute composante de translation, et conviennent à la description d'objets finis comme les molécules.

→ En plaçant l'origine d'un vecteur sur un point invariant par symétrie d'orientation, on peut déterminer les vecteurs équivalents par symétrie, et ainsi étudier les directions équivalentes au sein d'un objet.

L'opération de symétrie d'orientation la plus simple est l'**identité**, qui transforme un point quelconque en lui-même. L'identité est la seule transformation qui puisse superposer un objet asymétrique sur lui-même. Les autres opérations de symétrie d'orientation sont les **rotations**, les **réflexions**, l'**inversion** et les **roto-inversions** (uniquement à 3D).

Un **élément de symétrie** est le support d'une opération de symétrie. Il est constitué de l'ensemble des points invariants par l'application de l'opération de symétrie. L'**ordre** ou **degré de symétrie** n de l'élément de symétrie correspond au nombre de points distincts obtenus par applications successives de l'opération de symétrie correspondante, en commençant par un point en dehors de l'élément de symétrie.

¹ Les coordonnées d'un point invariant ne changent pas par application de la transformation :
 $(x, y, z) \rightarrow (x' = x, y' = y, z' = z)$

I-1-a. Rotation (rotation propre)

Les rotations sont caractérisées par un axe de rotation \vec{u} et par la valeur de l'angle de rotation φ [Figure 1a].

L'opération de symétrie de rotation peut être représentée à l'aide d'une matrice de dimensions 3×3 , notée $R(\vec{u}, \varphi)$. Dans le repère orthonormé $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$, l'effet d'une rotation d'angle φ autour de \vec{u}_z sur un point de coordonnées (x, y, z) s'écrit :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = R(\vec{u}_z, \varphi) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

Les rotations étant des isométries, la valeur absolue du déterminant de $R(\vec{u}, \varphi)$ vaut 1 quels que soient \vec{u} et φ .

Les rotations transforment le trièdre direct $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$ en un autre trièdre direct $(\vec{u}_x', \vec{u}_y', \vec{u}_z')$, et ne changent donc pas l'orientation de l'espace. Ce sont des **opérations propres de symétrie**. Cela se traduit par une valeur positive déterminant de $R(\vec{u}, \varphi)$: +1.

L'élément de symétrie est l'axe de rotation porté par \vec{u} . Celui-ci peut être d'ordre fini n (rotations d'angle $2\pi/n$) ou infini (symétrie de révolution). A deux dimensions, l'élément de symétrie est un point.

I-1-b. Inversion

L'inversion est une opération de symétrie qui transforme un vecteur en son opposé [Figure 1b].

La matrice associée est notée I . Dans le repère orthonormé $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$, l'effet d'une inversion par rapport au point origine O s'écrit :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = I \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

Le déterminant de I vaut -1 . L'inversion transforme le trièdre direct $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$ en un trièdre indirect $(\vec{u}_x', \vec{u}_y', \vec{u}_z')$, et constitue donc une **opération impropre de symétrie**.

L'inversion ne laisse qu'un point invariant. A deux ou trois dimensions, l'élément de symétrie est ce point. L'ordre de l'élément de symétrie est de 2.

I-1-c. Roto-inversion (rotation impropre)

Il s'agit d'une rotation $R(\vec{u}, \varphi)$ immédiatement suivie de l'inversion I [Figure 1c]. Par convention, on n'utilise que les roto-inversions construites à partir de rotations propres d'ordre fini n .

La matrice associée est notée $\bar{R}(\vec{u}, \varphi) = I.R(\vec{u}, \varphi) = R(\vec{u}, \varphi)I$. Dans le repère orthonormé $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$, l'effet d'une roto-inversion d'angle φ , d'axe \vec{u}_z et de centre O s'écrit :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \bar{R}(\vec{u}_z, \varphi) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & -\cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

Le déterminant de $\bar{R}(\vec{u}, \varphi)$ vaut -1 . Les roto-inversions transforment le trièdre direct $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$ en un trièdre indirect $(\vec{u}_x', \vec{u}_y', \vec{u}_z')$, et constituent donc des **opérations impropres de symétrie**.

L'élément de symétrie est le point correspondant au centre d'inversion associé à I . L'ordre d'un axe de roto-inversion dépend de l'angle de rotation $2\pi/n$:

- Si n est pair, alors l'ordre de l'axe est n .
- Si n est impair, alors l'ordre de l'axe est $2n$.

I-1-d. Réflexion

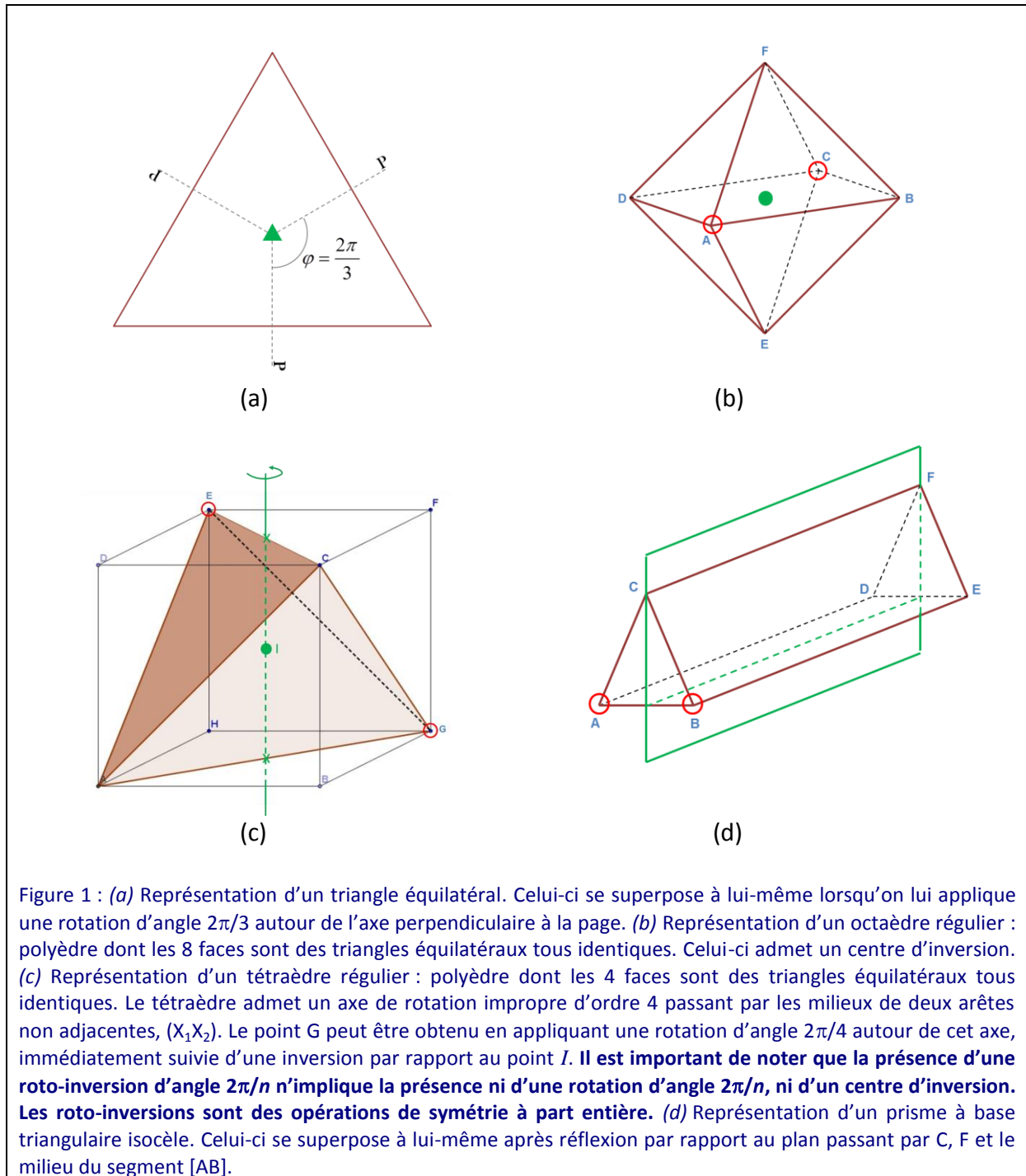
La réflexion est un cas particulier de roto-inversion, impliquant une rotation d'angle $2\pi/2$ immédiatement suivie d'une inversion [Figure 1d].

La transformation en réflexion se fait par rapport à un plan miroir. Elle est représentée par la matrice $\sigma(\vec{u}_1, \vec{u}_2)$, où \vec{u}_1 et \vec{u}_2 sont 2 vecteurs non-colinéaires définissant le plan de réflexion. Dans le repère orthonormé $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$, l'effet d'une réflexion par rapport au plan (\vec{u}_x, \vec{u}_y) passant par l'origine s'écrit :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \sigma(\vec{u}_x, \vec{u}_y) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

En tant que roto-inversion particulière, la réflexion est une **opération impropre de symétrie**. Le déterminant de $\sigma(\vec{u}_1, \vec{u}_2)$ vaut donc nécessairement -1 .

L'élément de symétrie d'une réflexion est le plan perpendiculaire à l'axe de rotation d'angle π et passant par le centre d'inversion. A deux dimensions, il s'agit d'une droite. L'ordre d'un plan ou d'une droite miroir est de 2.



I-2. Groupe ponctuel

I-2-a. Définition et propriétés

Nous nous intéressons maintenant à l'ensemble $\{O_i\}$ des opérations de symétrie d'orientation s'appliquant à un objet. Cet ensemble possède les caractéristiques mathématiques d'un **groupe**² :

- **Loi de composition interne** basée sur le produit des opérateurs de symétrie.
→ Si l'ensemble contient les éléments X et Y , alors il contient aussi le produit XY .

En effet, l'application de X superpose la figure sur elle-même et transforme le point M au point M' . L'application de Y superpose à nouveau la figure sur elle-même et transforme le point M' au point M'' . Il doit donc exister une opération de symétrie XY superposant la figure sur elle-même et transformant le point M au point M'' .

- **Associativité** : $(XY)Z = X(YZ)$
- L'ensemble contient un **élément neutre** : il s'agit de l'identité notée E , telle que $E.X = X = X.E$.

Toute figure reste invariante par application de l'identité.

- Tout élément de l'ensemble X a son inverse X^{-1} tel que : $X.X^{-1} = E = X^{-1}.X$. X^{-1} est aussi appelé **élément symétrique** de X .

En effet, si l'application de X superpose la figure à elle-même et transforme le point M au point M' , alors il doit exister une opération de symétrie X^{-1} superposant la figure à elle-même et transformant le point M' au point M .

L'**ordre du groupe** $\{O_i\}$ est égal au nombre de ses éléments. On appelle **position générale** les coordonnées d'un point M se situant en dehors de tout élément de symétrie. Lorsqu'on applique l'ensemble des opérations de symétrie du groupe au point M , on obtient n positions générales équivalentes où n est l'ordre du groupe.

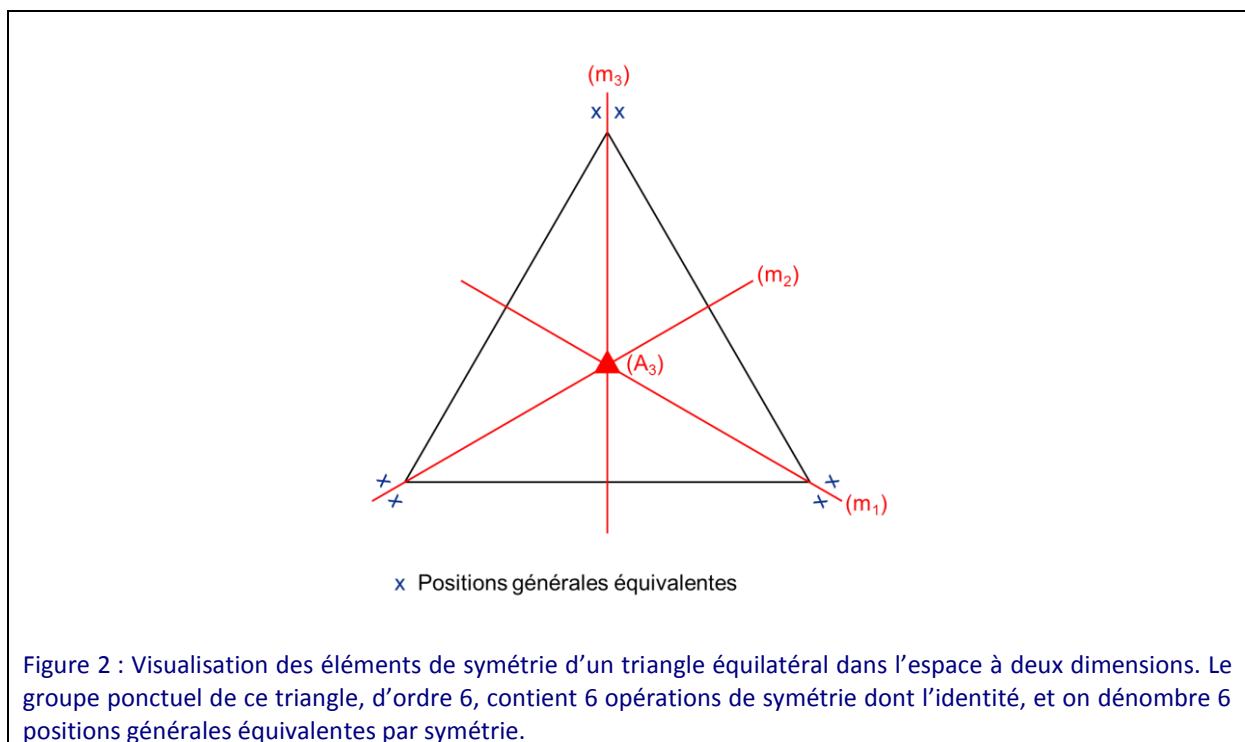
On peut montrer que les éléments de symétrie du groupe $\{O_i\}$ concourent en un point. Ce point, invariant par l'application de n'importe quelle opération de $\{O_i\}$, peut être vu comme l'origine d'une demi-droite, pour laquelle on recherche les orientations équivalentes via l'étude des symétries d'orientation. L'existence d'un point de concourance des éléments de symétrie d'orientation du groupe $\{O_i\}$ est à l'origine de l'appellation **groupe ponctuel** de symétrie.

² Les mathématiciens étendent la notion de groupe bien au-delà des symétries. Ainsi, l'ensemble des nombres entiers relatifs forme un groupe muni d'une loi de composition interne associative basée sur l'addition, et d'un élément neutre (0). En outre, chaque entier n possède un élément symétrique, $-n$, tel que $n + (-n) = 0$

Prenons l'exemple d'un triangle équilatéral dans l'espace à deux dimensions [Figure 2]. Les éléments de symétrie sont le point (A_3) [support d'une rotation d'angle $2\pi/3$] et les trois droites (m_1), (m_2), (m_3) [supports de réflexion]. Les opérations de symétrie correspondantes sont la rotation d'angle $2\pi/3$ notée $R(2\pi/3)$, la rotation d'angle $4\pi/3$ notée $R^2(2\pi/3)=R(4\pi/3)$, l'identité notée E , et les trois réflexions σ_1 , σ_2 et σ_3 .

La table de multiplication des opérations de symétrie présentée dans le Tableau 1 permet de vérifier la structure de groupe de l'ensemble formé par les opérations de symétrie de la figure : tout produit d'opérations du groupe est une opération de ce groupe. Remarquons aussi que le produit d'opérations de symétrie n'est pas commutatif en général.

Le nombre de positions générales équivalentes est de 6, chacune étant générée par une des 6 opérations de symétrie du groupe.



\curvearrowright	$R(2\pi/3)$	$R(4\pi/3)$	E	σ_1	σ_2	σ_3
$R(2\pi/3)$	$R(4\pi/3)$	E	$R(2\pi/3)$	σ_2	σ_3	σ_1
$R(4\pi/3)$	E	$R(2\pi/3)$	$R(4\pi/3)$	σ_3	σ_1	σ_2
E	$R(2\pi/3)$	$R(4\pi/3)$	E	σ_1	σ_2	σ_3
σ_1	σ_3	σ_2	σ_1	E	$R(4\pi/3)$	$R(2\pi/3)$
σ_2	σ_1	σ_3	σ_2	$R(2\pi/3)$	E	$R(4\pi/3)$
σ_3	σ_2	σ_1	σ_3	$R(4\pi/3)$	$R(2\pi/3)$	E

Tableau 1 : Table de multiplication des opérations de symétrie du triangle équilatéral (Ét ligne x Ét colonne)

I-2-b. Notation des groupes ponctuels : convention de Hermann-Mauguin

Le système de notation des groupes ponctuels d'Hermann-Mauguin se base sur le degré de symétrie des éléments et leurs directions.

Notation des éléments de symétrie :

Axe de rotation propre d'ordre n	n
Roto-inversion impliquant une rotation propre d'angle $2\pi/n$	\bar{n}
Plan miroir	m

Une fois nommés, les éléments de symétrie sont associés à une direction : l'axe de rotation pour les rotations et roto-inversions, la normale au plan miroir pour les réflexions.

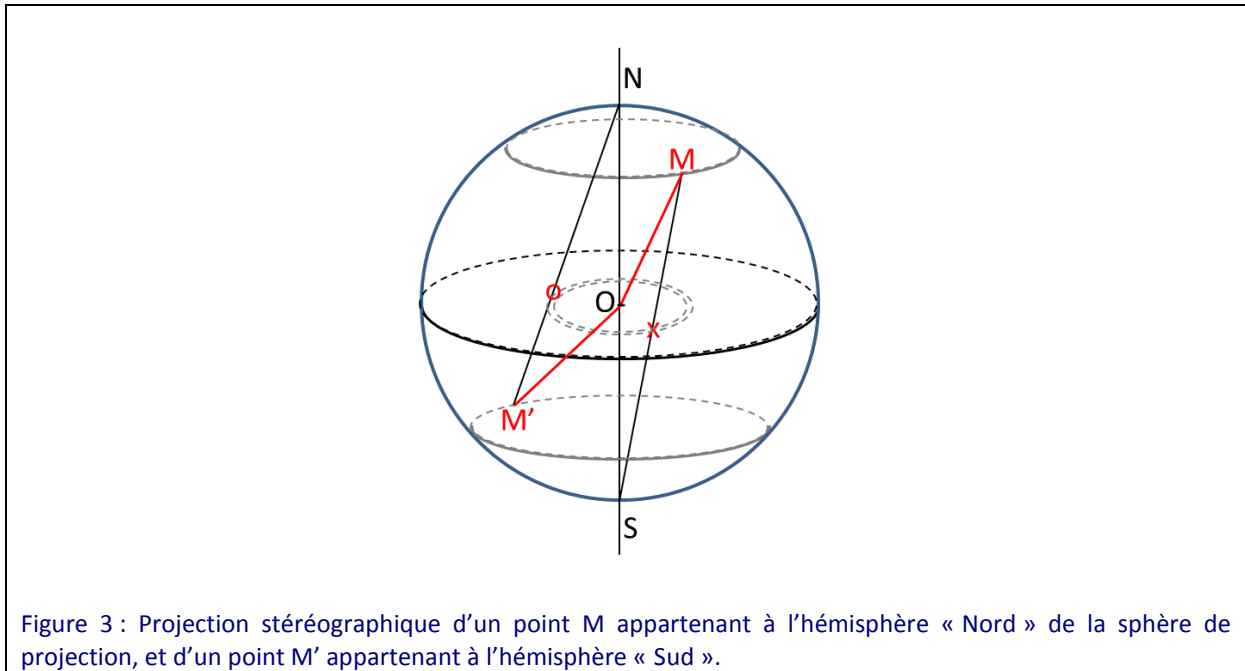
Le symbole du groupe ponctuel s'obtient en indiquant jusqu'à trois éléments de symétrie, classés par degré de symétrie décroissant. Si un axe n et un miroir m coexistent dans une même direction, on adopte la notation $\frac{n}{m}$.

Reprenons l'exemple du groupe du triangle équilatéral. L'élément d'ordre le plus élevé est l'axe de rotation propre d'ordre 3, noté 3. Viennent ensuite les droites support des réflexions σ_1 , σ_2 et σ_3 (ordre 2), notées m . Les trois droites support sont équivalentes par rotation d'angle $2\pi/3$, et correspondent donc à une seule direction. Le groupe d'espace s'écrit $3m$.

I-2-c. Représentation graphique des groupes ponctuels : projection stéréographique

La projection stéréographique permet de visualiser les éléments de symétrie et les directions équivalentes au sein d'un groupe ponctuel de l'espace à trois dimensions, sur une représentation plane.

Soit une sphère de centre O et de rayon R . L'ensemble des directions est représenté par les demi-droites OM , M étant un point sur la sphère. Soit NS un des diamètres de la sphère. Si le point M se trouve dans l'hémisphère du point N , sa projection stéréographique est l'intersection du segment $[SM]$ avec le plan équatorial normal à NS ; on la repère par une croix. Si M se trouve dans l'hémisphère du point S , sa projection stéréographique est l'intersection du segment $[NM]$ avec le plan équatorial normal à NS ; on la repère par un rond. [Figure 3].



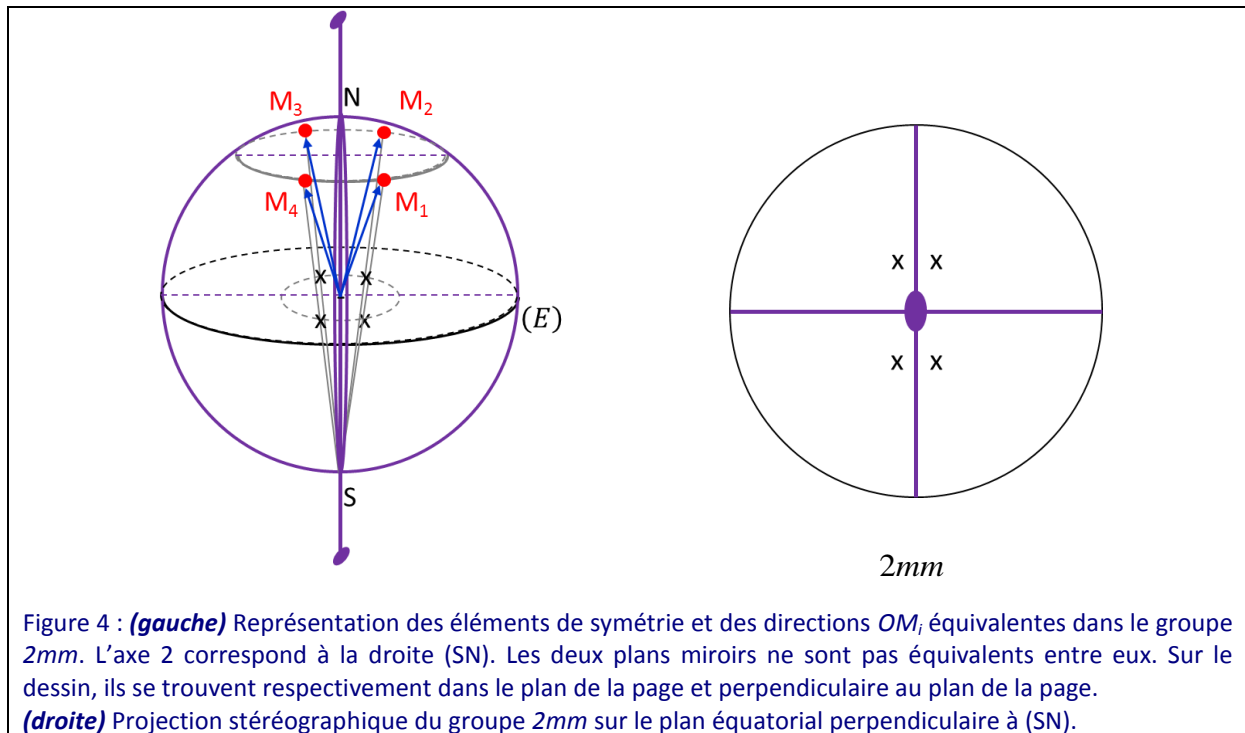
La projection stéréographique d'un groupe ponctuel s'obtient en suivant la méthodologie suivante :

- Choix de l'axe NS de sorte à ce qu'il coïncide avec la direction associée à l'élément de symétrie de plus haut degré du groupe.
- Projection des éléments de symétrie. Les plans miroirs sont représentés par des traits épais, tandis que les directions des axes sont repérées avec les symboles suivants :

2	3	$\bar{3}$	4	$\bar{4}$	5	$\bar{5}$	6	$\bar{6}$

- Projection des points M_i correspondant aux directions équivalentes par symétrie.

A titre d'exemple, la construction de la projection stéréographique du groupe ponctuel $2mm$ est présentée en Figure 4.



II. Symétrie dans les cristaux périodiques

Un cristal périodique parfait est un objet de dimensions infinies caractérisé par des symétries de translation, et susceptible d'admettre des symétries d'orientation.

Nous verrons dans ce paragraphe qu'un nombre limité d'opérations de symétrie d'orientation est compatible avec l'existence d'un réseau périodique. Les éléments de symétrie correspondants présentent en outre la particularité de se répéter à tous les nœuds du réseau : les éléments de symétrie d'un cristal ne se coupent donc pas en un point comme dans le cas des figures finies. Enfin, les combinaisons entre opérations de symétrie de translation et d'orientation donnent naissance à deux nouveaux types d'opérations de symétrie : les translations hélicoïdales et les réflexions avec glissement.

Les opérations de symétrie admises dans les cristaux périodiques et mentionnées ci-dessus sont appelées **symétries de position**. L'ensemble des opérations de symétrie d'un cristal forme le **groupe d'espace** de ce cristal.

II-1. Symétries d'orientation compatibles avec la périodicité cristalline

II-1-a. Rotations propres

Soit un réseau cristallin et un axe de rotation propre passant par le nœud situé à l'origine. Nous recherchons les valeurs de l'angle de rotation permettant la transformation d'un vecteur translation du réseau en un autre vecteur translation du réseau.

Commençons par établir le fait qu'un axe de symétrie n est toujours orthogonal à un plan réticulaire :

- $n \geq 3$: si on applique cette rotation à un vecteur \vec{t}_i quelconque du réseau, au moins 3 nœuds seront générés, ce qui définit un plan réticulaire perpendiculaire à l'axe n [Figure 5a].
- $n = 2$: si un axe d'ordre 2 $(A_2)^o$ passe par le nœud à l'origine, alors un autre axe d'ordre 2 $(A_2)^i$ passe par le nœud situé à l'extrémité du vecteur \vec{t}_i . Un nœud M qui n'est pas situé dans le plan défini par les deux axes se transformera en M^o et M^i par rotation autour de $(A_2)^o$ et $(A_2)^i$, respectivement. Les points M , M^o et M^i définissent un plan réticulaire perpendiculaire aux axes $(A_2)^o$ et $(A_2)^i$ [Figure 5b].

On se place maintenant dans un plan réticulaire. Soient $(A_n)^i$ et $(A_n)^j$ deux axes d'ordre n passant par les nœuds i et j , nœuds premiers voisins sur la rangée qu'ils définissent et liés par le vecteur du réseau \vec{t}_{ij} . En appliquant l'opération de symétrie $R^i(2\pi/n)$ à \vec{t}_{ij} et $[R^j(2\pi/n)]^{-1}$ à $-\vec{t}_{ij}$, on obtient deux points P et P' tels que [Figure 5c] :

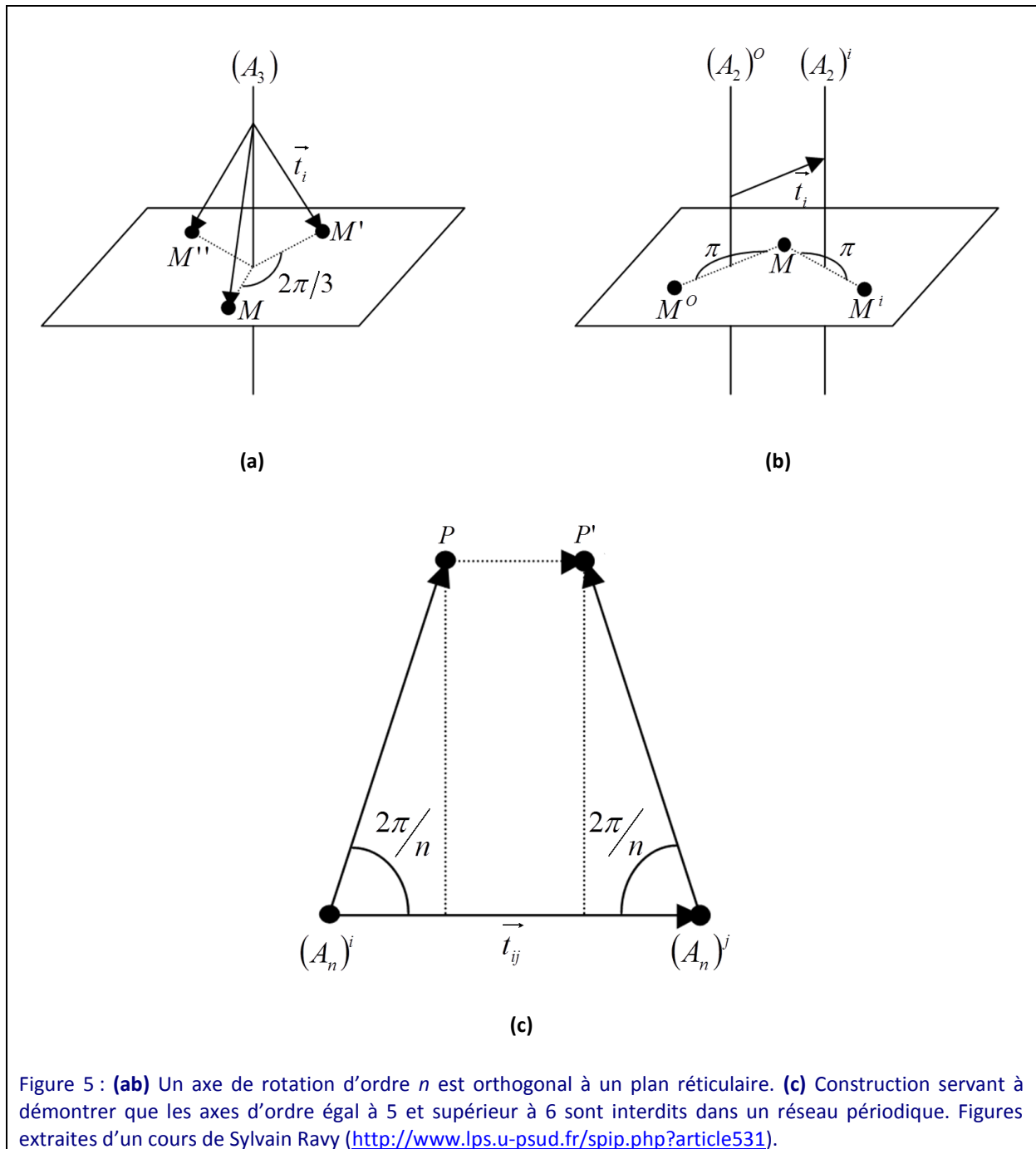
$$\overrightarrow{PP'} = \vec{t}_{ij} - 2\vec{t}_{ij} \cos(2\pi/n)$$

\vec{t}_{ij} étant le vecteur le plus court sur la rangée définie par i et j , la condition de périodicité s'écrit $\overrightarrow{PP'} = m \vec{t}_{ij}$. Soit :

$$\overrightarrow{PP'} = \cos(2\pi/n) \vec{t}_{ij} = \frac{1-m}{2} \vec{t}_{ij} = \frac{p}{2} \vec{t}_{ij}$$

L'ensemble des valeurs de p telles que $-1 \leq p/2 \leq 1$ définissent chacune un angle de rotation compatible avec la périodicité du réseau. Ceux-ci, au nombre de 5, correspondent à des axes de rotation propre d'ordres 1, 2, 3, 4 ou 6 :

$p = 2$	$\cos(2\pi/n) = 1$	$2\pi/n = 0$	axe 1 (identité)
$p = 1$	$\cos(2\pi/n) = 1/2$	$2\pi/n = 2\pi/6$	axe 6
$p = 0$	$\cos(2\pi/n) = 0$	$2\pi/n = \pi/2$	axe 4
$p = -1$	$\cos(2\pi/n) = -1/2$	$2\pi/n = 2\pi/3$	axe 3
$p = -2$	$\cos(2\pi/n) = -1$	$2\pi/n = 2\pi/2$	axe 2



II-1-b. Centre d'inversion

Un réseau admet un centre d'inversion en chacun de ses nœuds : en effet, si \vec{t}_i est un vecteur du réseau, alors $-\vec{t}_i$ est également un vecteur de ce réseau.

II-1-c. Roto-inversions

Le produit de l'inversion par les rotations propres compatibles avec la périodicité cristalline permet d'établir la liste des axes de rotation impropres qui peuvent être rencontrés dans un réseau : axes $\bar{1}$ (inversion), $\bar{2}$ (réflexion), $\bar{3}$, $\bar{4}$ ou $\bar{6}$.

II-2. Composition des symétries de translation et des symétries d'orientation

Dans un cristal périodique, l'opération de symétrie la plus générale permettant de passer d'un point à un point équivalent peut être décrite comme étant le produit d'une opération de symétrie ponctuelle O par une translation de vecteur $\vec{t} = x_i \vec{a} + y_i \vec{b} + z_i \vec{c}$. Cette opération générale est notée (O, \vec{t}) . L'action de cette opération sur un point de coordonnées (x, y, z) dans la base orthonormée $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$ s'écrit :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = O \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} t_x \\ t_y \\ t_z \end{pmatrix}$$

Une translation pure est notée (E, \vec{t}) , tandis qu'une rotation pure, propre ou improprie, est notée $(O, \vec{0})$.

Dans ce paragraphe, nous cherchons à vérifier s'il existe des opérations de symétrie (O, \vec{t}) applicables aux cristaux périodiques, qui ne soient ni des translations pures, ni des opérations de symétrie d'orientation. En particulier, ces opérations ne doivent pas laisser de point invariant : dans le cas contraire, celles-ci se rapporteraient à des opérations de symétrie d'orientation.

II-2-a. Composition d'une rotation propre avec une translation

Nous considérerons deux cas : 1) \vec{t} perpendiculaire à l'axe de rotation supposé suivant (O_z) , et 2) \vec{t} parallèle à l'axe de rotation supposé suivant (O_z) .

Cas 1) : opération de symétrie $(R(\vec{u}_z, \varphi), \vec{t}_\perp)$.

Ecrivons les coordonnées du point M' transformé de M :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \cos \varphi - y \sin \varphi + x_i \\ x \sin \varphi + y \cos \varphi + y_i \\ z \end{pmatrix}$$

S'ils existent, les points invariants par l'application de $(R(\vec{u}_z, \varphi), \vec{t}_\perp)$ vérifient l'équation :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} x = x \cos \varphi - y \sin \varphi + z_i \\ y = x \sin \varphi + y \cos \varphi + z_i \\ z = z \end{cases}$$

La résolution du système d'équations ci-dessus montre qu'il existe une infinité de points invariants par application de l'opération $(R(\vec{u}_z, \varphi), \vec{t}_\perp)$. Ceux-ci sont répartis le long d'un axe parallèle à (Oz) ³. L'opération $(R(\vec{u}_z, \varphi), \vec{t}_\perp)$ correspond donc à une rotation propre, et ne constitue pas un nouveau type de symétrie.

Cas 2) : opération de symétrie $(R(\vec{u}_z, \varphi), \vec{t}_\parallel)$.

Ecrivons les coordonnées du point M' transformé de M :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ z_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \cos \varphi - y \sin \varphi \\ x \sin \varphi + y \cos \varphi \\ z + z_i \end{pmatrix}$$

S'ils existent, les points invariants par l'application de $(R(\vec{u}_z, \varphi), \vec{t}_\parallel)$ vérifient l'équation :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} x = x \cos \varphi - y \sin \varphi \\ y = x \sin \varphi + y \cos \varphi \\ z = z + z_i \Leftrightarrow z_i = 0 \end{cases}$$

La troisième équation du système montre que si le vecteur \vec{t}_\parallel est non nul, l'opération de symétrie $(R(\vec{u}_z, \varphi), \vec{t}_\parallel)$ ne laisse aucun point invariant. Nous venons donc de définir une nouvelle opération de symétrie, qui n'est pas une opération de symétrie d'orientation, appelée **translation hélicoïdale**.

En appliquant n fois l'opération $(R(2\pi/n), \vec{t}_\parallel)$, on obtient la translation pure $(E, n\vec{t}_\parallel)$. Le vecteur $n\vec{t}_\parallel$ doit être une translation du réseau $p\vec{t}_i$, où p est un entier et \vec{t}_i le vecteur de translation le plus court dans la direction de l'axe de rotation. Le vecteur translation d'une translation hélicoïdale s'écrit donc nécessairement sous la forme $\frac{p\vec{t}_i}{n}$. On peut par ailleurs

³ Coordonnées de cet axe dans le plan (xOy) , pour $\varphi \neq 0$:

$$\left(\frac{x_i [2(1 - \cos \varphi) - \sin^2 \varphi] - y_i [\sin \varphi (1 - \cos \varphi)]}{2(1 - \cos \varphi)^2}, \frac{x_i \sin \varphi + y_i [1 - \cos \varphi]}{2(1 - \cos \varphi)} \right)$$

poser $p < n^4$. Le symbole associé à la translation hélicoïdale $\left(R(2\pi/n), \frac{p\vec{t}_i}{n} \right)$ est n_p . Le

Tableau 2 donne la liste des translations hélicoïdales possibles et leurs symboles. La Figure 6 donne un premier aperçu de l'effet d'une translation hélicoïdale 4_3 sur une position atomique. La Figure 7 permet de visualiser l'effet d'une translation hélicoïdale 4_1 au sein d'un cristal de cristobalite.

2_1	3_1	3_2	4_1	4_2	4_3	6_1	6_2	6_3	6_4	6_5

Tableau 2 : Liste des axes hélicoïdaux et symboles associés.

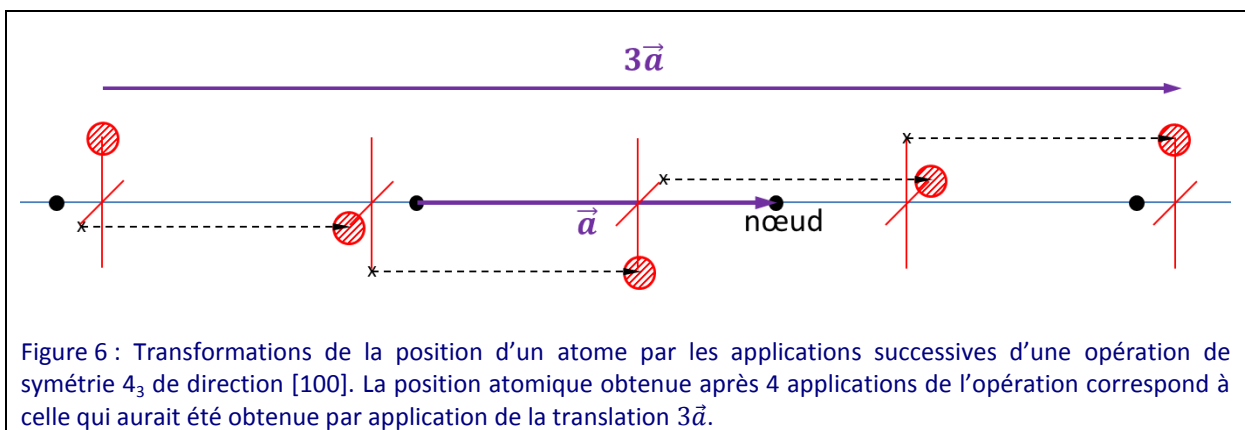


Figure 6 : Transformations de la position d'un atome par les applications successives d'une opération de symétrie 4_3 de direction $[100]$. La position atomique obtenue après 4 applications de l'opération correspond à celle qui aurait été obtenue par application de la translation $3\vec{a}$.

⁴ En effet, si $p > n$, le point M' équivalent au point M par application de $\left(E, n\vec{t}_i \right)$ se trouve traduit d'un vecteur $\frac{p\vec{t}_i}{n}$. Or, M' est strictement équivalent aux points traduits de $\frac{(p-mn)\vec{t}_i}{n}$, où m est l'entier le plus grand vérifiant $mn < p$. On écrit donc la translation hélicoïdale $\left(R(2\pi/n), \frac{(p-mn)\vec{t}_i}{n} \right)$. Le point M' peut alors être obtenu en appliquant mn fois cette opération.

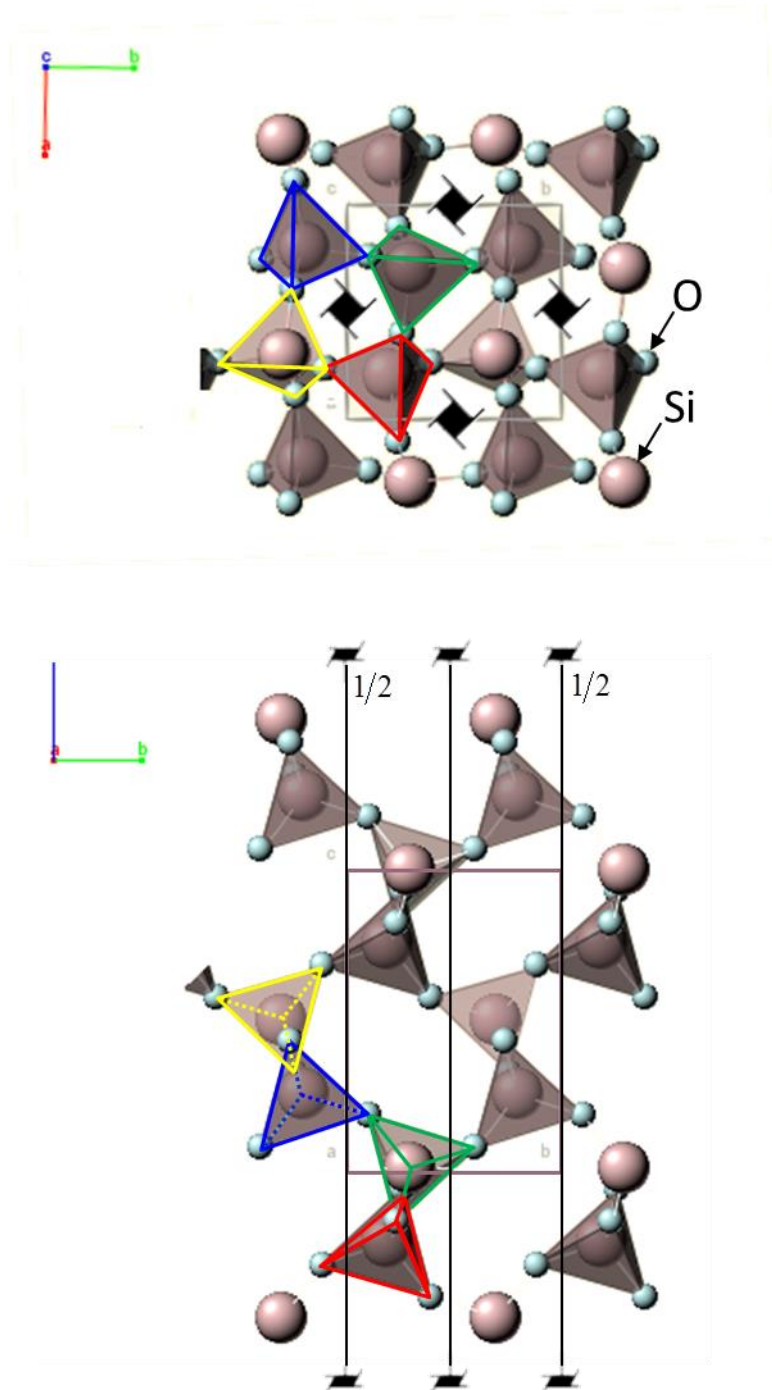


Figure 7 : Maille cristallographique de la cristobalite, l'une des formes cristallines de la silice SiO_2 . Celle-ci est représentée en projection suivant **c** (haut) et **a** (bas). Les axes 4_1 présents dans cette structure ont été représentés. Les tétraèdres SiO_2 surlignés de rouge, vert, bleu et jaune se déduisent les uns des autres par une suite de 3 translations hélicoïdales 4_1 : rotations d'angle $2\pi/4$ immédiatement suivies d'une translation de vecteur $c/4$. Des axes 2_1 peuvent également être trouvés suivant **a** et **b**, à l'altitude $7/8$. Figures réalisées à partir d'animations flash visibles sur le site web <http://www.webmineral.com>.

II-2-b. Composition d'une rotation impropre avec une translation

Nous considérerons deux cas : 1) \vec{t} parallèle à l'axe de rotation supposé suivant (Oz) , et 2) \vec{t} perpendiculaire à l'axe de rotation supposé suivant (Oz) .

Cas 1) : opération de symétrie $(\overline{R}(\vec{u}_z, \varphi), \vec{t}_{//})$.

Ecrivons les coordonnées du point M' transformé de M :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & -\cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ z_i \end{pmatrix}$$

S'ils existent, les points invariants par l'application de $(\overline{R}(\vec{u}_z, \varphi), \vec{t}_{//})$ vérifient l'équation :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} x = -x \cos \varphi + y \sin \varphi \\ y = -x \sin \varphi - y \cos \varphi \\ z = -z + z_i \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x(1 + \cos \varphi) - y \sin \varphi = 0 \\ x \sin \varphi + y(1 + \cos \varphi) = 0 \\ 2z = z_i \end{cases}$$

Le sous-système d'équation liant x et y est homogène et admet au moins une solution ($x=0$ et $y=0$). Ainsi, il existe au moins un point invariant par application de $(\overline{R}(\vec{u}_z, \varphi), \vec{t}_{//})$, dont les coordonnées sont $(0, 0, z_i/2)$. Cette opération correspond à une rotation impropre, et ne constitue pas un nouveau type de symétrie.

Cas 2) : opération de symétrie $(\overline{R}(\vec{u}_z, \varphi), \vec{t}_{\perp})$.

Ecrivons les coordonnées du point M' transformé de M :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & -\cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \cos \varphi + y \sin \varphi + x_i \\ -x \sin \varphi - y \cos \varphi + y_i \\ -z \end{pmatrix}$$

S'ils existent, les points invariants par l'application de $(\overline{R}(\vec{u}_z, \varphi), \vec{t}_{\perp})$ vérifient l'équation :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} x = -x \cos \varphi + y \sin \varphi + x_i \\ y = -x \sin \varphi - y \cos \varphi + y_i \\ z = -z \end{cases}$$

La résolution de ce système d'équations pour $\varphi \neq \pi$ montre qu'il existe au moins un point invariant⁵ par application de l'opération $(\bar{R}(\vec{u}_z, \varphi), \vec{t}_\perp)$. L'opération $(\bar{R}(\vec{u}_z, \varphi \neq \pi), \vec{t}_\perp)$ correspond donc à une rotation impropre, et ne constitue pas un nouveau type de symétrie.

En revanche, pour $\varphi = \pi$ le système d'équations se réduit à :

$$\begin{cases} x = x + x_i \\ y = y + y_i \\ z = -z \end{cases}$$

Ce système n'admet pas de solutions, ce qui signifie que l'opération $(\bar{R}(\pi), \vec{t}_\perp)$ ne laisse aucun point invariant. Cette opération, constituée d'une réflexion immédiatement suivie d'une translation parallèle au plan miroir, est donc une nouvelle opération caractéristique des cristaux appelée **réflexion avec glissement**.

En appliquant deux fois l'opération $(\bar{R}(\pi), \vec{t}_\perp)$, on obtient la translation pure $(E, 2\vec{t}_\perp)$. Le vecteur $2\vec{t}_\perp$ doit être une translation du réseau \vec{t}_i . Le vecteur translation d'une réflexion avec glissement s'écrit donc nécessairement sous la forme $\frac{\vec{t}_i}{2}$. Les vecteurs de glissement

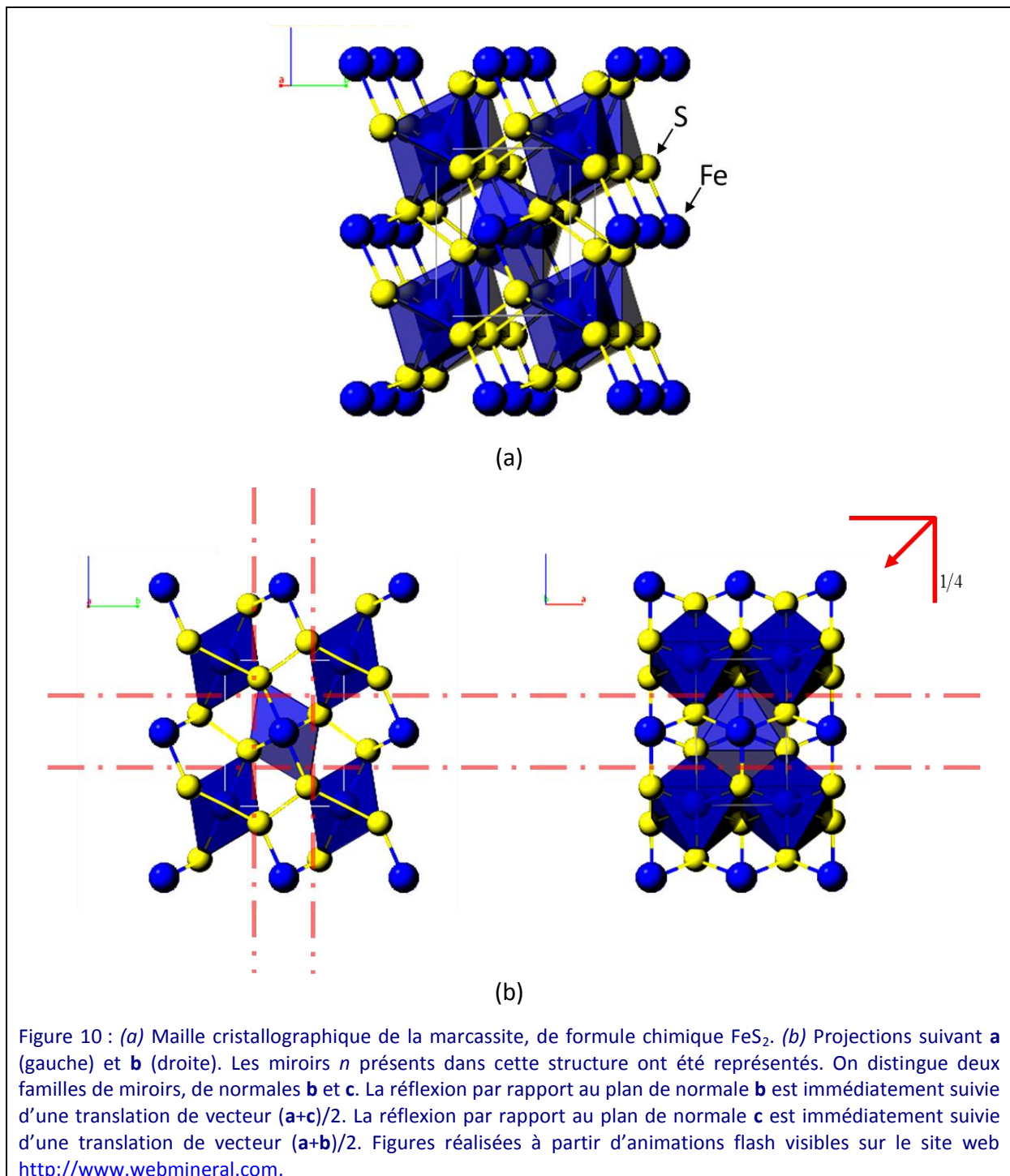
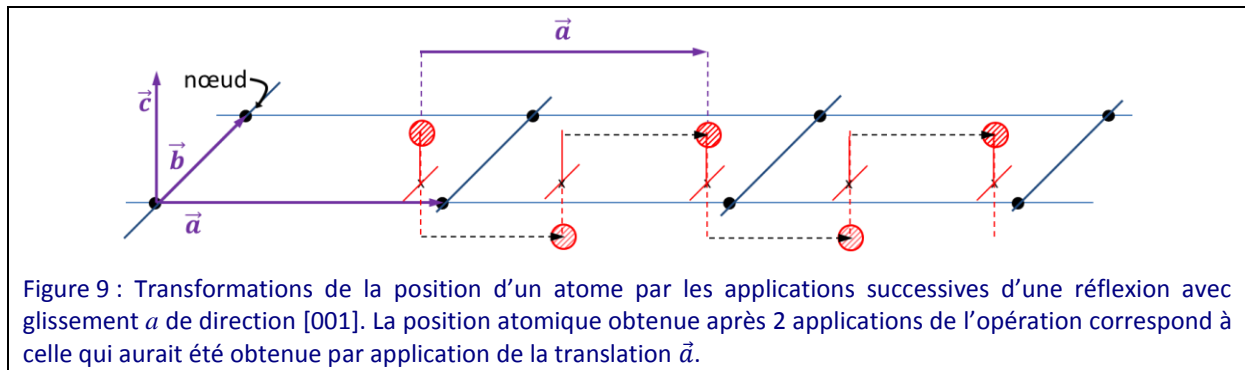
possibles dépendent de l'orientation du plan miroir et du réseau de Bravais. La Figure 8 donne la liste des réflexions avec glissement possibles et leurs symboles. La Figure 9 donne un premier aperçu de l'effet d'une réflexion avec glissement de type *a* sur une position atomique. La Figure 10 permet de visualiser l'effet d'une réflexion avec glissement de type *n* dans un cristal de marcassite.

Symbole	Représentation graphique	Nature de la translation
<i>m</i>	Normal au plan du dessin Parallèle	plan ordinaire, sans translation.
<i>a, b</i>	----- -----	<i>a</i> /2 le long de x ou <i>b</i> /2 le long de y
<i>c</i>	<i>c</i> /2 le long de z ; (<i>a</i> + <i>b</i> + <i>c</i>)/2 le long de [111] en axes rhomboédriques
<i>n</i>	----- -----	(<i>a</i> + <i>b</i>)/2 ou (<i>b</i> + <i>c</i>)/2 ou (<i>a</i> + <i>c</i>)/2 ou (<i>a</i> + <i>b</i> + <i>c</i>) / 2 (quadratique et cubique)
<i>d</i>	----- -----	(<i>a</i> ± <i>b</i>) / 4 ou (<i>b</i> ± <i>c</i>) / 4 ou (<i>c</i> ± <i>a</i>) / 4 ou (<i>a</i> ± <i>b</i> ± <i>c</i>) / 4 (quadratique et cubique)

Les axes a et b sont dans le plan de projection.

Figure 8 : Description et notation des réflexions avec glissement

⁵ Les coordonnées de ce point sont $\left(\frac{x_i(1 + \cos \varphi + \sin \varphi) + y_i(\sin \varphi[1 + \cos \varphi])}{(1 + \cos \varphi)(1 + \cos \varphi + \sin \varphi)}, \frac{-x_i(1 + \sin \varphi) + y_i(1 + \cos \varphi)}{1 + \cos \varphi + \sin \varphi}, 0 \right)$.



II-3. Construction du groupe d'espace d'un cristal

Le **groupe d'espace** d'un cristal est formé par l'ensemble des opérations de symétrie de position le superposant à lui-même.

Les opérations de symétrie de position possibles sont : les rotations propres (incluant l'identité), les rotations impropres (incluant l'inversion et la réflexion par rapport à un plan), les translations pures, les translations hélicoïdales et les réflexions avec glissement.

L'ordre d'un groupe d'espace est toujours infini, du fait de la présence de l'ensemble des translations pures. Les positions générales équivalentes d'un groupe d'espace, indénombrables, sont données en se limitant à une maille cristallographique ; les autres se déduisent par l'application des translations du réseau.

Dans l'espace à 3 dimensions, il existe 230 ensembles d'opérations de symétrie de position présentant une structure de groupe. Le dénombrement initial des 230 groupes d'espace a été réalisé par Fédorov en 1895, puis de manière indépendante par Schönflies.

Comme pour les groupes ponctuels, la convention de notation internationale pour les groupes d'espace se rapporte au système de notation d'Hermann-Mauguin. Pour nommer un groupe d'espace, on note tout d'abord le mode de réseau (P , I , F ou C). Suivent les notations des opérations de symétrie de position précédemment définies, listées par direction dans l'ordre précisé par le [Tableau 3](#).

Système cristallin	Axe primaire	Axe secondaire	Axe tertiaire
Triclinique	--	--	--
Monoclinique	[010]	--	--
Orthorhombique	[100]	[010]	[001]
Tétragonal	[001]	$\langle 100 \rangle$	$\langle 110 \rangle$
Hexagonal	[001]	$\langle 100 \rangle$	$\langle 120 \rangle$
Trigonal (axes hexagonaux)	[001]	$\langle 100 \rangle$	--
Trigonal (axes rhomboédriques)	[111]	$\langle 1\bar{1}0 \rangle$	--
Cubique	$\langle 100 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	$\langle 110 \rangle$

Tableau 3 : Liste des directions successives associées aux symboles d'Hermann-Mauguin des groupes d'espace.

Les 230 groupes d'espace sont répertoriés dans les tables internationales de cristallographie⁶. Un exemple de fiche correspondant au groupe d'espace orthorhombique $P222_1$ est donné en [Figure 11](#). Les indications données dans chaque fiche comprennent :

- La notation d'Hermann-Mauguin du groupe et le numéro correspondant.
- Les diagrammes du groupe d'espace incluant une ou plusieurs projections des supports de symétrie, et une illustration d'un ensemble de positions générales équivalentes au sein d'une maille.
- Les coordonnées des positions générales et positions particulières équivalentes dans une maille. Une position particulière se situe sur un élément de symétrie.

⁶ Référence de la dernière édition en date : « The International Tables for Crystallography », publié pour « The International Union of Crystallography » par Springer (2005).

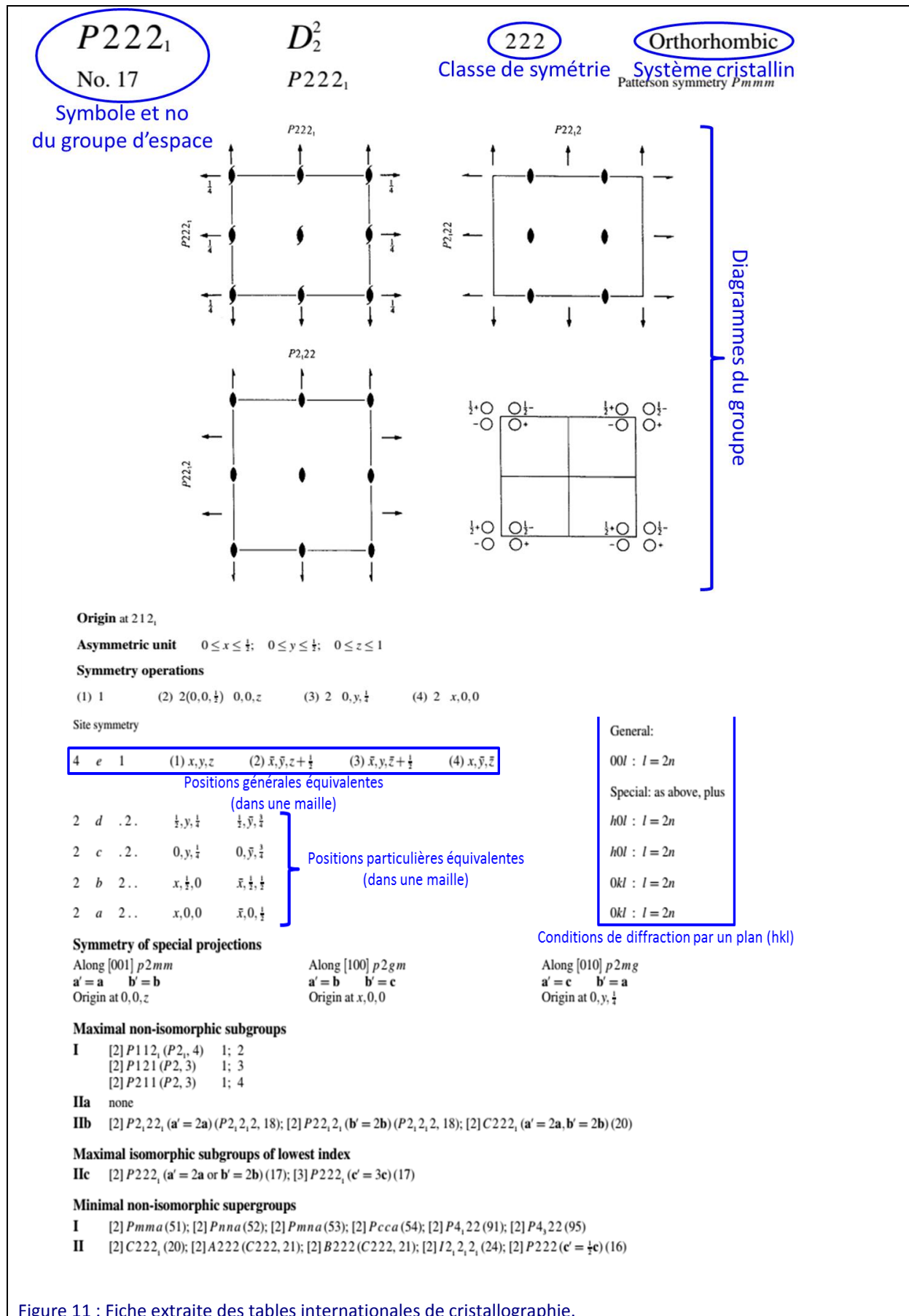


Figure 11 : Fiche extraite des tables internationales de cristallographie.

II-4. Classe de symétrie d'un cristal

La **classe de symétrie** d'un cristal est le groupe ponctuel qui lui est associé. On le déduit du groupe d'espace en remplaçant les translations hélicoïdales et les réflexions avec glissement par les opérations de symétrie ponctuelles dont elles sont dérivées.

Exemple : la classe de symétrie d'un cristal du groupe $P222_1$ est 222 .

Les classes de symétrie permettent de discuter l'anisotropie des propriétés physiques macroscopiques d'un cristal. En effet, la partie translatrice des opérations de symétrie des cristaux est à l'échelle de l'atome, et donc imperceptible au niveau macroscopique.

Les projections stéréographiques des classes de symétrie cristalline, au nombre de 32, sont représentées sur la [Figure 12](#). Les classes de symétrie sont également appelées **groupes ponctuels cristallographiques**.

Les classes de symétrie peuvent être réparties dans 7 **systèmes cristallins** en fonction de leurs symétries ([Tableau 4](#)). A chaque système cristallin est associée une métrique particulière de la maille cristallographique, déjà décrite au chap. III. **Le type de maille conventionnelle utilisé pour décrire un cristal doit être compatible avec ses symétries.**

Dans un même système cristallin, la **classe holoèdre** désigne le groupe ponctuel de plus haute symétrie. Celui-ci décrit la symétrie des réseaux de ce système cristallin. Le cristal, obtenu par l'adjonction d'un motif aux nœuds d'un réseau, peut présenter une symétrie inférieure à ce réseau ([Figure 13](#)), auquel cas sa classe de symétrie est un sous-groupe de la classe holoèdre. Les classes holoèdres sont encadrées dans le [Tableau 4](#) ; les autres classes sont des sous-groupes de la classe holoèdre correspondante.

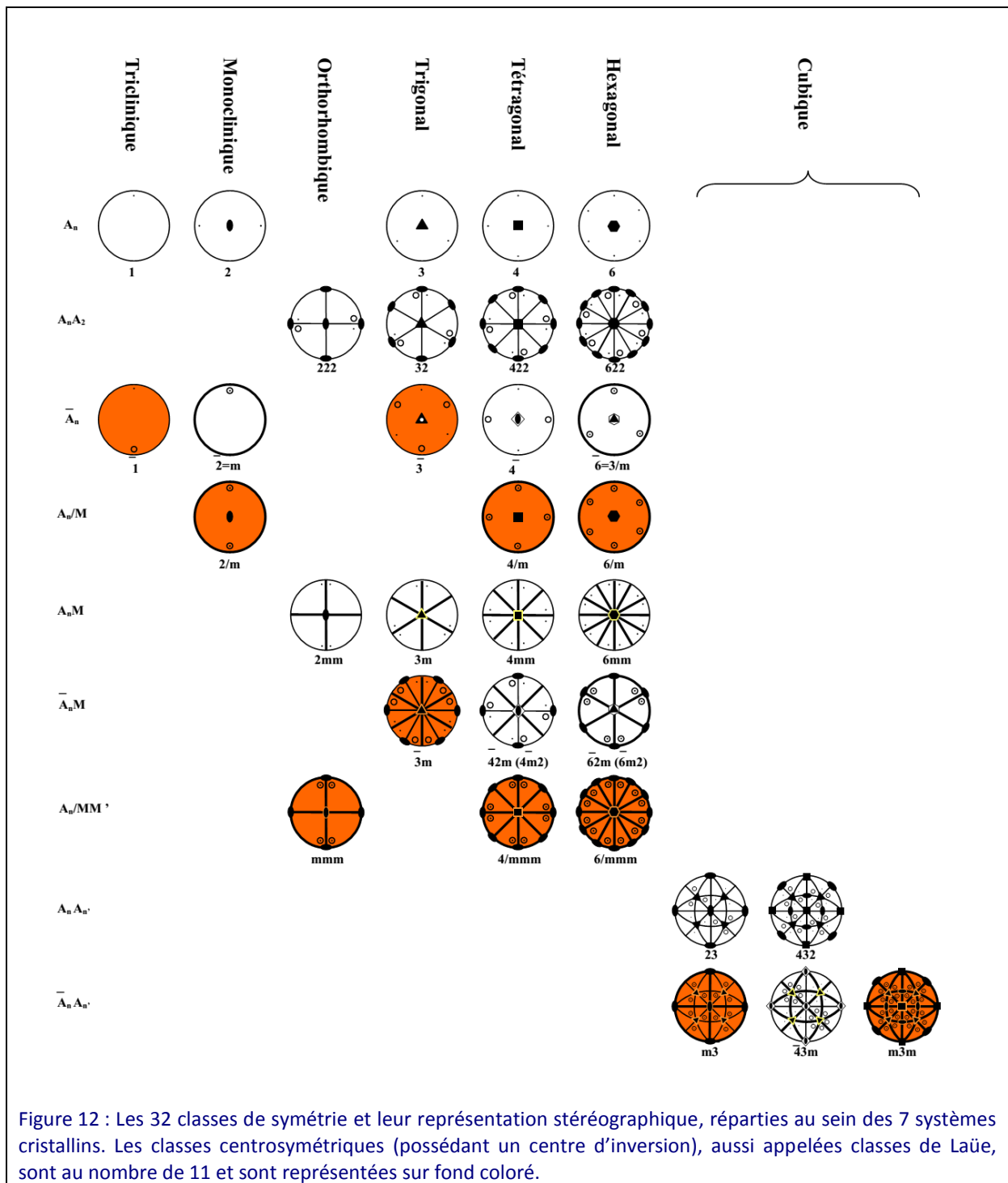
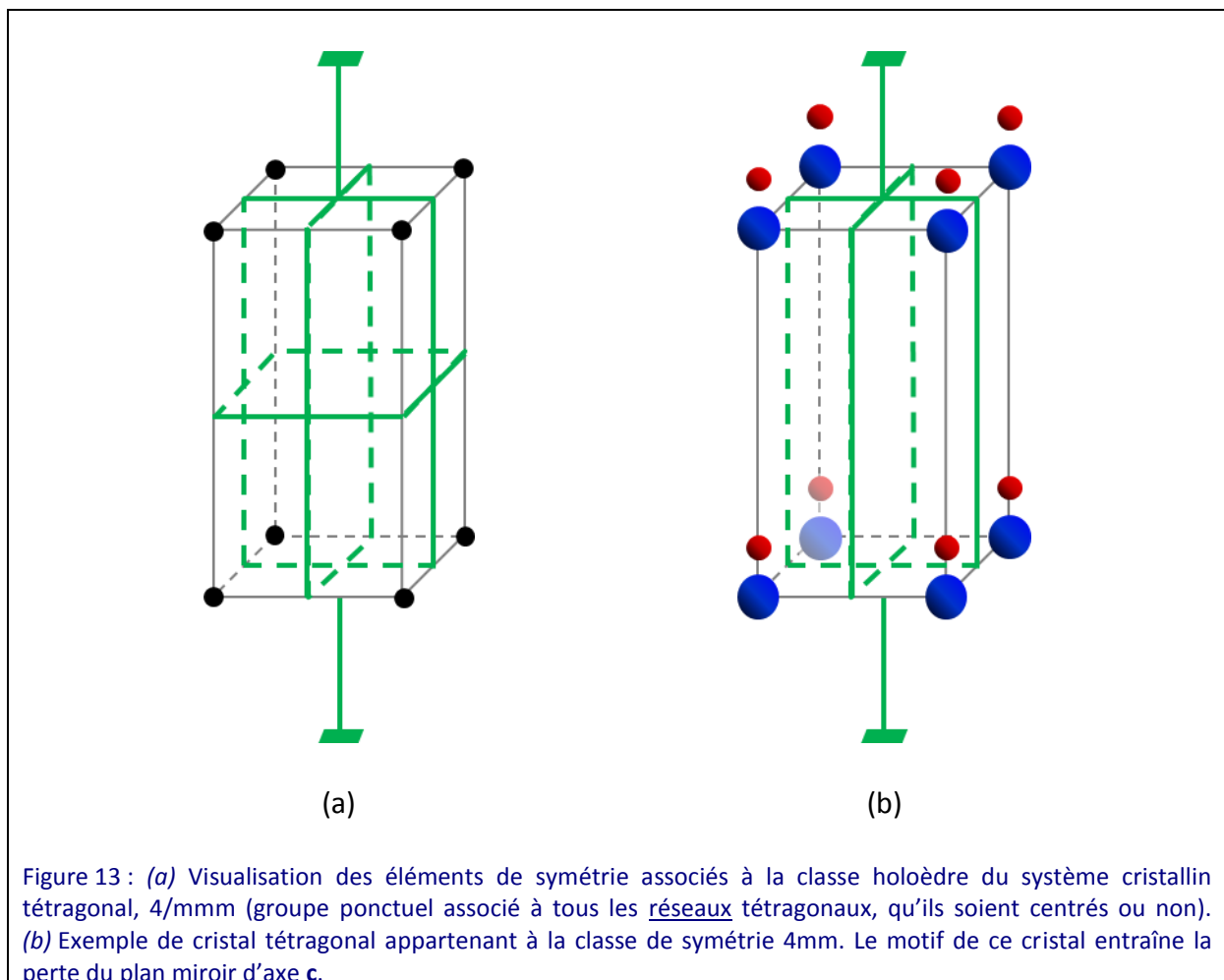


Figure 12 : Les 32 classes de symétrie et leur représentation stéréographique, réparties au sein des 7 systèmes cristallins. Les classes centrosymétriques (possédant un centre d'inversion), aussi appelées classes de Laüe, sont au nombre de 11 et sont représentées sur fond coloré.

Système cristallin	Classes de symétrie	Symétrie(s) caractéristique(s) du système cristallin
Triclinique	$\bar{1}$ 1	Un axe 1 ou $\bar{1}$
Monoclinique	$2/m$ 2, m	Un axe 2 ou $\bar{2}$
Orthorhombique	mmm 222, $mm2$	Trois axes 2 ou $\bar{2} \perp$ entre eux
Trigonal	$\bar{3}m$ 3, $\bar{3}$, 32 , $3m$	Un axe 3 ou $\bar{3}$
Tétragonal	$4/mmm$ 4, $\bar{4}$, $4/m$, $4mm$, 422 , $\bar{4}2m$	Un axe 4 ou $\bar{4}$
Hexagonal	$6/mmm$ 6, $\bar{6}$, $6/m$, $6mm$, 622 , $\bar{6}2m$	Un axe 6 ou $\bar{6}$
Cubique	$m\bar{3}m$ 23, $m\bar{3}$, 432 , $\bar{4}3m$	Deux axes 3 ou $\bar{3}$ non collinéaires

Tableau 4 : Répartition des 32 classes de symétrie dans 7 systèmes cristallins.



III. Symétrie et phénomènes physiques

III-1. Principe de Curie

Le principe de Curie permet de poser les conditions d'apparition d'un phénomène physique et de simplifier sa mise en équation. Il repose sur l'analyse des directions équivalentes dans un milieu matériel et son environnement.

III-1-a. Enoncé du principe

On considère un milieu matériel et son environnement (champ électrique, force appliquée...), formant ce qu'on appelle la *cause*. Soit un phénomène physique résultant appelé *effet*. Le principe de Curie s'énonce de la manière suivante :

« Lorsque certaines causes produisent certains effets, les éléments de symétrie des causes doivent se retrouver dans les effets produits. »

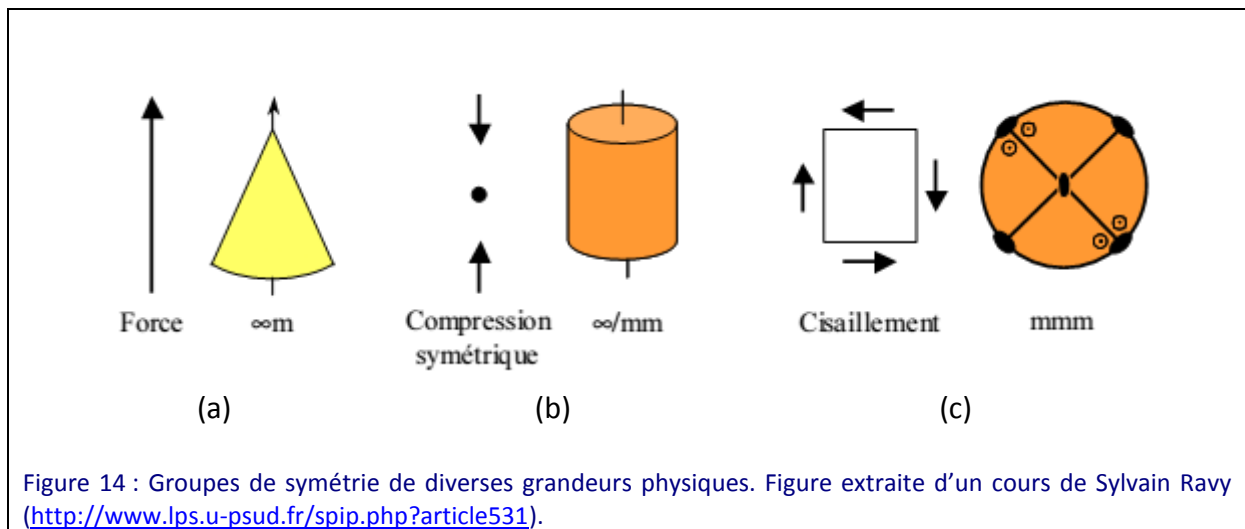
Ce principe revient à dire que les symétries des causes sont incluses dans celles des effets, ou bien que l'effet est plus symétrique que la cause. Mathématiquement, on écrit que le groupe ponctuel associé à la cause, noté G_c , est inclus dans le groupe ponctuel associé à l'effet, noté G_e : $G_c \subset G_e$.

III-1-b. Groupes ponctuels de symétrie des milieux et des grandeurs physiques

Pour appliquer le principe de Curie, il faut être en mesure d'associer un groupe ponctuel aux milieux et aux grandeurs physiques :

- Les **cristaux périodiques** sont simplement associés à leur groupe ponctuel cristallographique ou classe de symétrie.
- Toutes les directions sont équivalentes dans les **liquides monoatomiques**. On leur associe donc le groupe ponctuel de la sphère $\infty/m\infty/m$.
- Les **cristaux liquides** peuvent présenter un ordre orientationnel à longue portée (cf. [Chap. I](#)). Dans ce cas, on associe au milieu le groupe ponctuel du cylindre ∞/m .
- Les **grandeurs scalaires** telles que la température, la pression ou l'énergie ont la symétrie maximale $\infty/m\infty/m$.
- Les **vecteurs polaires**, représentant les grandeurs électriques \vec{E} , \vec{D} et \vec{P} ainsi que les forces, ont la symétrie du cône ∞m [[Figure 14a](#)].

- Les **vecteurs axiaux**, représentant les grandeurs magnétiques \vec{H} , \vec{B} et \vec{M} , ont la symétrie du cylindre tournant ∞/m . En effet, un champ magnétique est généré par une boucle de courant, et il faut tenir compte du sens de parcours du courant.
- Une **contrainte de compression uniaxiale** possède la symétrie du cylindre ∞/m . Une **contrainte de cisaillement** présente la symétrie mmm . [Figure 14b-c].

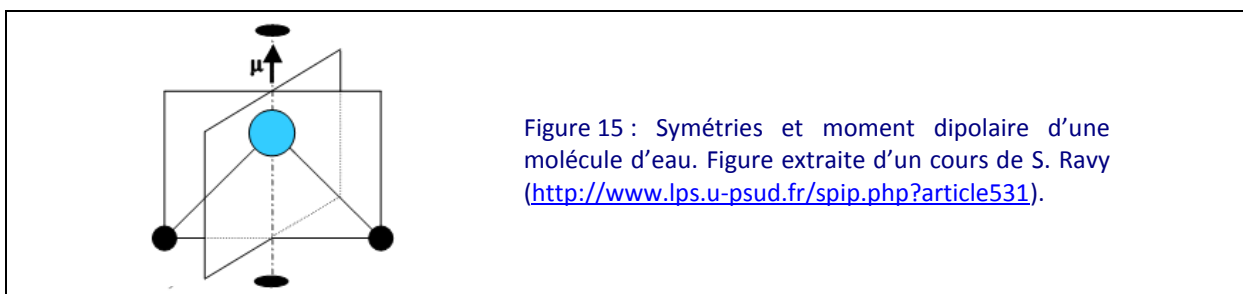


III-1-c. Quelques exemples d'application du principe de Curie

Moment dipolaire d'une molécule d'eau

En appliquant le principe de Curie à ce problème, il est possible de dire si la molécule d'eau peut présenter un moment dipolaire permanent, et de prédire sa direction le cas échéant.

Le groupe ponctuel associé à la molécule (*la cause*) est $2mm$. Ce groupe est inclus dans le groupe ponctuel associé au moment dipolaire (*l'effet*), ∞m , pour peu que l'on oriente l'axe de rotation d'ordre 2 de la molécule dans la même direction que l'axe d'ordre ∞ caractérisant le moment dipolaire. Ainsi, on conclut que la molécule d'eau peut porter un moment dipolaire, et que celui-ci est dirigé parallèlement à l'axe 2 de la molécule d'eau (Figure 15).



Piézoélectricité dans le quartz / la silice

Dans le [Chap. I](#), nous avons fait le constat que deux matériaux de même formule chimique pouvaient ne pas présenter les mêmes propriétés physiques. Ainsi, le SiO_2 quartz, cristallin, peut présenter des propriétés piézoélectriques, contrairement à la forme amorphe. Dans ce paragraphe, nous allons essayer de comprendre l'origine de cette différence de comportement à partir du principe de Curie.

Dans un matériau piézoélectrique, l'application d'une contrainte mécanique provoque l'apparition d'une polarisation macroscopique, et inversement. *La cause* est formée par l'existence du milieu matériel et l'application d'une contrainte. *L'effet* est le vecteur polarisation apparaissant sous contrainte, de symétrie ∞m .

Les groupes ponctuels de symétrie de la silice amorphe et d'une contrainte de compression symétrique sont le groupe ponctuel de la sphère $\infty/m\infty/m'$, et le groupe ponctuel du cylindre fini ∞/m , respectivement. La symétrie de la cause est l'intersection de ces deux groupes, soit ∞/m . Ce groupe n'est pas inclus dans le groupe associé au moment dipolaire, ∞m .

Ainsi, la silice amorphe ne peut présenter de propriétés piézoélectriques.

Le groupe d'espace du quartz est $P3_121$. Le groupe ponctuel associé est le groupe 32 du système cristallin trigonal. L'intersection de ce groupe avec celui de la compression uniaxiale symétrique donne le groupe 2 (on a supposé la contrainte appliquée suivant l'axe 2 du quartz). Or, 2 est inclus dans ∞m : on observe dans le quartz l'apparition d'une polarisation macroscopique dans une direction colinéaire à la contrainte de compression ([Figure 16](#)).

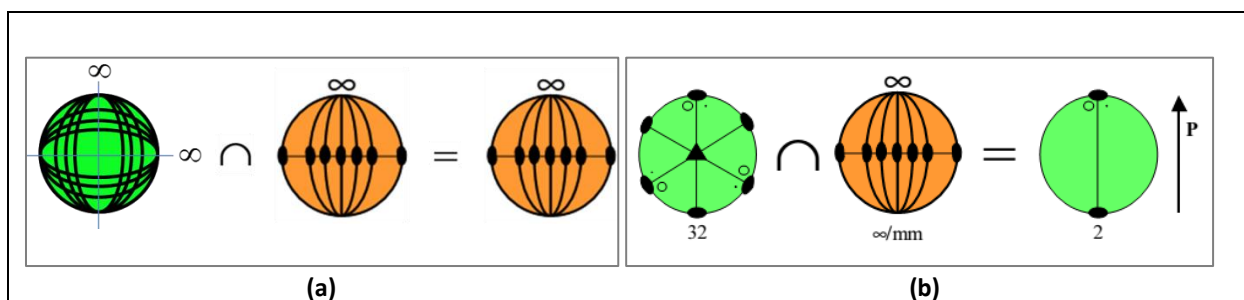


Figure 16 : **(a)** Intersection du groupe ponctuel de la sphère (groupe de symétrie du SiO_2 amorphe) avec le groupe ponctuel du cylindre fini (groupe de symétrie de la contrainte uniaxiale symétrique). Le groupe résultant contient plus de symétries que le groupe d'un vecteur polarisation, ∞m . Ce résultat étant valable quelle que soit l'orientation de la contrainte, l'application du principe de Curie nous permet de conclure que la silice amorphe ne peut présenter des propriétés de piézoélectricité. **(b)** Intersection du groupe ponctuel du quartz, 32, avec le groupe ponctuel d'une contrainte uniaxiale parallèle à un axe 2 du quartz. Le groupe résultant, 2, est un sous-groupe du groupe décrivant un vecteur polarisation, ∞m . L'application du principe de Curie nous permet de conclure que la silice peut présenter des propriétés de piézoélectricité sous sa forme cristalline quartz.

Figure réalisée à partir d'un cours de Sylvain Ravy (<http://www.lps.u-psud.fr/spip.php?article531>).

Symétrie d'une figure de diffraction

Considérons un cristal tétragonal de symétrie $4/m$ aligné selon son axe d'ordre 4 dans un faisceau de rayons X polychromatique.

La cause est l'ensemble formé par le cristal et le faisceau de rayons X. Le groupe de symétrie K de cet ensemble est l'intersection des groupes ponctuels du cristal ($4/m$) et du faisceau (∞m) dans leur orientation particulière, soit $K = 4$. *L'effet*, la diffraction, est caractérisée par un groupe de symétrie contenant au moins tous les éléments de K . La figure de diffraction admettra donc une rotation d'angle $2\pi/4$ autour de l'axe du faisceau de rayons X (Figure 17).

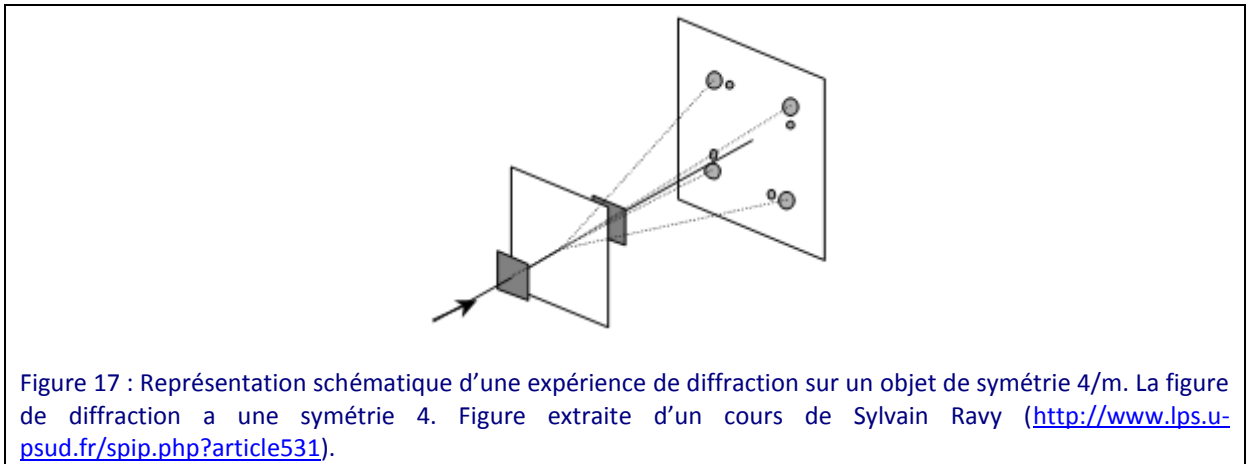


Figure 17 : Représentation schématique d'une expérience de diffraction sur un objet de symétrie $4/m$. La figure de diffraction a une symétrie 4. Figure extraite d'un cours de Sylvain Ravy (<http://www.lps.u-psud.fr/spip.php?article531>).

III-2. Symétrie et anisotropie des propriétés physiques

III-2-a. Représentation tensorielle des propriétés physiques

Une **propriété physique** est une relation entre deux quantités mesurées.

Du point de vue mathématique, le cas le plus simple que l'on puisse examiner implique des quantités mesurées et une propriété physique modélisables par des grandeurs scalaires. Ainsi, la capacité calorifique C permet de calculer l'énergie à fournir pour élever la température d'un milieu de ΔT : $\Delta E = C \Delta T$.

Les grandeurs physiques liées par une propriété peuvent être caractérisées par une direction : celles-ci sont alors modélisées par des vecteurs. Dans le cas général, la propriété physique du milieu dépend de la direction de ces vecteurs et doit être modélisée par un **tenseur**. Prenons l'exemple de la conductivité électrique, liant la densité de courant \vec{j} et le champ électrique appliqué \vec{E} . La relation s'écrit :

$$\begin{pmatrix} j_x \\ j_y \\ j_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \Leftrightarrow \vec{j} = \underline{\underline{\sigma}} \vec{E} \Leftrightarrow j_i = \sum_k \sigma_{ik} E_k$$

L'expression de gauche explicite la forme matricielle du tenseur de conductivité. Sous sa forme contractée, on note celui-ci $\underline{\underline{\sigma}}$, le nombre de traits indiquant le rang n du tenseur ($n = 2$ ici).

Certaines grandeurs physiques peuvent dépendre de 2 directions. Nous citerons l'exemple de la contrainte mécanique, qui est une force \vec{F} appliquée sur une surface de normale \vec{n}_S . De manière générale, deux grandeurs physiques dépendant au total de n directions vont être liées par un tenseur de rang n (Tableau 5).

Propriété physique	Grandeur physique 1	Grandeur physique 2	relation tensorielle	rang du tenseur ppté
Chaleur spécifique	Quantité de chaleur	Variation de température	$\Delta E = C \Delta T$	0
Pyroélectricité	Variation de température	Variation de la polarisation	$\Delta \underline{P} = \underline{p} \Delta T$	1
Susceptibilité diélectrique	Champ électrique	Polarisation	$\underline{P} = \varepsilon_0 \underline{\chi} \underline{E}$	2
Conductivité électrique	Champ électrique	Courant d'électrons	$\underline{j} = \underline{\sigma} \underline{E}$	2
Conductivité thermique	Gradient de température	Flux de chaleur	$\underline{j} = \underline{\sigma} \underline{grad} T$	2
Dilatation thermique	Température	Déformation	$\underline{\varepsilon} = \underline{\alpha} T$	2
Piézoélectricité	Contrainte	Polarisation	$\underline{P} = \underline{d} \underline{\sigma}$	3
Modules d'élasticité	Contrainte	Déformation	$\underline{\varepsilon} = \underline{S} \underline{\sigma}$	4

Tableau 5 : Exemples de propriétés physiques pouvant être modélisées par un tenseur polaire de rang n . La relation tensorielle caractérisant chaque propriété physique est donnée avec les notations suivantes : les vecteurs (tenseurs de rang 1) sont soulignés d'un trait, les tenseurs de rang 2 et 3 sont soulignés de 2 et 3 traits, respectivement. Les grandeurs scalaires sont assimilables à des tenseurs de rang nul et sont représentés non soulignées.

III-2-b. Loi de Curie appliquée aux tenseurs : méthode de Neumann

En vertu du principe de Curie, les propriétés physiques doivent posséder les symétries du milieu dans lequel elles sont observées. Ainsi, un tenseur doit être invariant par l'application de toutes les opérations de symétrie d'orientation du milieu.

Cette condition se traduit par les équations :

$$O_i t = t,$$

où O_i est la matrice de transformation associée à la $i^{\text{ème}}$ opération du groupe ponctuel du milieu, et où t est le tenseur représentant la propriété physique.

La résolution de ce système d'équations permet d'établir des relations entre les différentes composantes du tenseur. On obtient alors une **forme réduite** du tenseur, tenant compte de l'équivalence des directions dans le milieu. Cette méthode de réduction des tenseurs est appelée **méthode de Neumann**.

Cas des tenseurs de propriétés physiques d'ordre 2

On peut montrer que la réduction de ces tenseurs dans les 32 groupes ponctuels cristallographiques amène à seulement trois formes possibles [repère orthonormé $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$]⁷ :

$$\begin{pmatrix} t_{11} & 0 & 0 \\ 0 & t_{22} & 0 \\ 0 & 0 & t_{33} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} t_{11} & 0 & 0 \\ 0 & t_{11} & 0 \\ 0 & 0 & t_{33} \end{pmatrix}, \text{ et } \begin{pmatrix} t_{11} & 0 & 0 \\ 0 & t_{11} & 0 \\ 0 & 0 & t_{11} \end{pmatrix}$$

Dans le cas où $t_{11} = t_{22} = t_{33}$, le tenseur t de la propriété physique se réduit à un scalaire. Le milieu est alors dit **isotrope** pour cette propriété physique. Les cristaux isotropes appartiennent au système cristallin cubique.

Dans les deux autres cas, le milieu est dit **anisotrope** :

- La forme de tenseur telle que $t_{11} = t_{22} \neq t_{33}$ est caractéristique des cristaux **uniaxes**, appartenant aux systèmes cristallins tétragonal, trigonal et hexagonal.
- La forme de tenseur la plus générale, telle que $t_{11} \neq t_{22} \neq t_{33}$, est rencontrée dans les cristaux dits **biaxes**. Il s'agit des cristaux appartenant aux systèmes cristallins triclinique, monoclinique et orthorhombique.

On voit que l'étude des symétries permet de **comprendre et prédire l'anisotropie des propriétés physiques**. Nous pouvons citer en exemple l'anisotropie de la conductivité électrique dans le graphite (Figure 18a) et le phénomène de biréfringence dans les matériaux non-cubiques (Figure 18b).

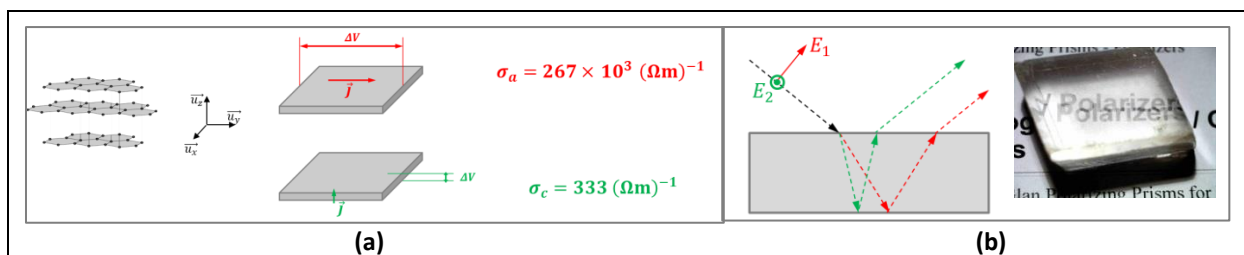


Figure 18 : **(a)** La conductivité du graphite dépend fortement de la direction de mesure. Rappelant que le graphite est un cristal du système hexagonal et que le tenseur de conductivité électrique est un tenseur d'ordre 2, on peut démontrer que les valeurs de la conductivité suivant \vec{u}_x et \vec{u}_y sont égales et diffèrent de la valeur de la conductivité suivant \vec{u}_z . [Valeurs de conductivité tirées de l'article « *Electrical Conductivities of Natural Graphite Crystals* », *Phys. Rev.* **95** 22 (1954), par W. Primak et L.H. Fuchs].

(b) Phénomène de biréfringence dans un cristal naturel de calcite (système trigonal → cristal uniaxe). Le dédoublement de l'image est dû à la différence d'indice optique effectif pour les composantes E_1 et E_2 de la lumière incidente. Ces deux composantes de polarisation n'ont pas le même angle de réfraction, ce qui explique la formation de deux images. Les indices optiques se calculent à partir du tenseur de susceptibilité diélectrique d'ordre 2 : la biréfringence ne peut donc être observée que dans des cristaux non-cubiques, générant des tenseurs dont les éléments diagonaux ne sont pas tous égaux. [Photographie : <http://ressources.univ-lemans.fr/>]

⁷ Ce repère est ici choisi relativement à la maille cristallographique $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$, de sorte que le tenseur soit diagonal.