

N° d'ordre : 1044

50376
1983
129

50376
1983
129

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE 3^{ème} CYCLE

Mention : Sciences des Matériaux

par

Michel HEDOUX

PARAMETRES D'ORDRE, CHANGEMENTS DE SYMETRIE ET ENERGIES LIBRES DES TRANSITIONS DE PHASES FERROMAGNETIQUES ET ANTIFERROMAGNETIQUES



Soutenu le 10 Juin 1983 devant la Commission d'examen

Président	R.	FOURET	Professeur, Université de Lille 1
Rapporteur	P.	TOLEDANO	Maître-Assistant, Université de Picardie
Examineurs	E.F.	BERTAUT	Directeur de recherche C.N.R.S.
	J.	SIVARDIERE	C.E.N. de Grenoble
	G.	LEBEGUE	Professeur, Université de Picardie

REMERCIEMENTS

Monsieur R. FOURET, Professeur à l'Université de LILLE 1 a bien voulu présider le jury de cette thèse et montrer un intérêt actif à mon travail, je lui en suis profondément reconnaissant.

Je suis très sensible à la présence dans le jury de Monsieur E.F. BERTAUT, Directeur de recherche au Centre National de la Recherche Scientifique et Membre de l'Institut, et de Monsieur J. SIVARDIERE, Directeur de recherche au Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble. Je les remercie respectueusement de l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail.

Je remercie vivement Madame G. LEBEGUE, Professeur à l'Université de Picardie qui après m'avoir accueilli comme membre du groupe de Physique Théorique qu'elle dirige, a permis par la confiance qu'elle m'a accordée, que ce travail soit mené à bien.

C'est Monsieur TOLEDANO qui après m'avoir proposé le sujet de cette thèse, m'a initié à la théorie des groupes et à la physique des transitions de phases. Sans son aide constante et sa disponibilité ce travail n'aurait vu le jour. Qu'il accepte à travers ces lignes, toute la gratitude que je lui dois.

J'ai beaucoup apprécié la collaboration efficace et amicale de Martial CLIN qui a permis de mener à bien les nombreux calculs de cette thèse. Qu'il veuille bien trouver ici l'expression de mon amicale reconnaissance.

Je remercie enfin Madame COIRET, Secrétaire du groupe de Physique Théorique, qui s'est chargée avec compétence de la frappe de ce mémoire.

A mes Parents

S O M M A I R E

	pages
<u>INTRODUCTION</u> :.....	1
<u>CHAPITRE 1</u> : Théories phénoménologiques des transitions de phases magnétiques.....	5
I. Caractère quantique des effets magnétiques et origine microscopique des transitions de phases magnétiques	5
II. La théorie de Landau.....	7
III. Théories phénoménologiques spécifiques.....	11
1. Le Ferromagnétisme.....	11
2. Antiferromagnétisme, Ferromagnétisme faible et Ferrimagnétisme.....	11
3. Hélimagnétisme.....	17
<u>CHAPITRE 2</u> : Conditions d'application de la théorie de Landau aux transitions de phases magnétiques	21
I. Introduction	21
II. Les groupes magnétiques et leurs coreprésentations	21
III. Méthodes de construction des coreprésentations des groupes paramagnétiques	23
IV. Sélection des coreprésentations susceptibles d'être associées à une transition de phases du second ordre	28
V. Méthode d'application de la théorie de Landau à partir d'une phase paramagnétique	29
<u>CHAPITRE 3</u> : Changements de réseaux de Bravais qui accompagnent les transitions para-ferromagnétiques et para- antiferromagnétiques	38

<u>CHAPITRE 4</u> : Energies libres des transitions de phases ferromagnétiques et antiferromagnétiques	51
I. Introduction	51
II. Commentaires sur les tables	52
III. Remarques	52
<u>CHAPITRE 5</u> : Tables de changements de symétrie ferromagnétiques et antiferromagnétiques à partir des 230 groupes paramagnétiques.	60
I. Contenu des tables	60
II. Commentaires sur les tables (5.1) et (5.2)	61
III. Examen des études similaires	62
<u>CHAPITRE 6</u> : Comparaison avec les données expérimentales	113
I. Remarques préliminaires	113
II. Commentaires sur les tables	114
III. La Boracite nikel-iode	115
<u>CONCLUSION</u>	124
<u>ANNEXE 1</u> : Les 36 réseaux de Bravais magnétiques et les 1651 groupes de Shubnikov	127
<u>ANNEXE 2</u> : Communications	140

I N T R O D U C T I O N

L'objet principal de cette thèse est d'établir des tables qui fournissent l'ensemble des changements de symétrie magnétique et des potentiels thermodynamiques associés aux transitions ferromagnétiques et antiferromagnétiques, dans le cadre de la théorie de Landau. Ces tables doivent être utiles aux expérimentateurs qui déterminent des structures magnétiques apparaissant au-dessous d'une phase paramagnétique. Elles peuvent également servir au développement des théories phénoménologiques et microscopiques des transitions magnétiques dont le point de départ est l'énergie libre de Landau du système ou pour les théories microscopiques, le Hamiltonien du système qui s'en déduit directement.

Cette étude doit également permettre de vérifier, par comparaison systématique de nos résultats théoriques avec les données expérimentales, l'applicabilité de la théorie de Landau aux transitions magnétiques. Une telle vérification n'est que très partiellement entreprise dans notre travail (Chapitre 6).

Dans l'article original où il expose la théorie des transitions de phases [1], Landau donne une première indication essentielle concernant l'application de sa théorie aux transitions magnétiques. Il remarque que la symétrie magnétique d'un système doit être décrite par la densité de spins $M(\vec{r})$ en tout point, dont le groupe d'invariance possède, en plus des transformations de symétrie spatiale, l'inversion du temps R, qui change le signe de $M(\vec{r})$. Cette propriété, qui découle de l'inversion du sens de la densité de courant \vec{j} lorsque l'on inverse la variable temps, permet ainsi de distinguer les structures paramagnétiques (qui contiennent R dans leur groupe d'invariance) des structures ferromagnétiques et antiferromagnétiques (qui ne sont pas invariantes par R). S'appuyant sur ces considérations et sur les travaux de Heesch[2] et Shubnikov [3] consacrés à la symétrie des figures colorées, Zamorzaev [4] construit l'ensemble des groupes qui décrivent une distribution de spins colinéaires, compatibles avec la symétrie (groupe spatial) d'un solide ordonné. La liste exhaustive des groupes spatiaux magnétiques est publiée en 1957 par Belov et al [5]. Elle comprend, outre les 230 groupes paramagnétiques, 1421 groupes ferro ou antiferromagnétiques. La représentation stéréographique de ces groupes sera donnée, quelques années plus tard, par Koptsik [6].

La seule connaissance des groupes de symétrie des structures magnétiques ne suffit cependant pas pour appliquer la théorie de Landau aux transitions magnétiques. Les considérations de symétrie contenues dans cette théorie utilisent en effet, les concepts relatifs à la théorie des représentations des groupes

spatiaux, qui sont des groupes unitaires. Ces concepts doivent donc être étendus aux groupes antiunitaires que sont les groupes magnétiques (puisqu'ils contiennent l'opération antiunitaire R). L'extension est faite par Wigner [7] qui définit la notion de coreprésentation d'un groupe antiunitaire. Plusieurs auteurs entreprennent alors de reformuler la théorie de Landau -dont l'énoncé original était adapté aux transitions structurales- en termes de coreprésentations des groupes magnétiques [8-10]. On assiste alors, dans les années soixante au développement de travaux consacrés aux transitions magnétiques, basés sur la théorie de Landau. A titre d'exemples, citons les théories du ferromagnétisme faible et de l'antiferromagnétisme hélicoïdal par Dzyaloshinskii [11,12], la théorie phénoménologique du ferrimagnétisme par Nikitin [13] ou l'étude des transitions magnétostructurales par Smolenskii [14,15] et Kovalev [16,17]. Mentionnons également la détermination systématique des changements de symétrie ponctuelle ferromagnétiques et antiferromagnétiques par Sirotin [18] et Kovalev [19].

Il convient toutefois de souligner que, si l'on excepte le travail de Kovalev [8,20-22], un très petit nombre d'études portant sur les structures magnétiques ont eu recours à la théorie de Landau sous sa forme la plus complète. Les travaux mentionnés ci-dessus, n'utilisent en effet que les considérations thermodynamiques et aspects de symétrie les plus simples contenus dans la théorie. Des raisons objectives et subjectives peuvent être invoquées pour expliquer une telle réticence. Citons pêle-mêle : la difficulté d'interpréter en termes de symétrie les données expérimentales obtenues sur les structures magnétiques (difficulté qui provoqua des polémiques entre théoriciens [23-26]) ; le caractère formel et inadapté des instruments mathématiques -tables de coreprésentations[27] et ouvrages décrivant leur construction [28] - nécessaires pour appliquer la théorie de Landau, la préférence marquée des théoriciens pour exprimer en termes d'interactions microscopiques les effets observés aux transitions magnétiques.

Une autre raison, à nos yeux essentielle, du retard à appliquer complètement la théorie de Landau aux transitions de phases magnétiques, réside dans le fait que ces transitions s'accompagnent souvent d'un réarrangement atomique (qui modifie parfois, comme nous le montrons dans les chapitres 3 et 5, la symétrie spatiale du système). L'étude d'un changement de structure magnétique apparaît donc comme devant être corrélé aux modifications structurales qui lui sont associées. Ceci explique que de nombreux auteurs décrivant des transitions magnétiques le font en termes de groupes spatiaux et de représentations irréductibles. Il est également significatif que le travail que nous présentons dans cette thèse soit, pour de nombreux résultats, déduit d'un travail similaire récent consacré aux

transitions purement structurales [29-32].

La thèse est subdivisée en six chapitres. Au premier chapitre nous formulons la théorie de Landau des transitions ferro et antiferromagnétiques à partir d'une phase paramagnétique et rappelons brièvement les théories phénoménologiques spécifiques qui ont été proposées pour décrire diverses structures magnétiques. Au chapitre 2 nous détaillons la procédure explicite que nous avons employée pour appliquer la théorie de Landau aux coreprésentations irréductibles des 230 groupes paramagnétiques. Plusieurs exemples sont traités. Nos résultats concernant les changements de réseau magnétique, les énergies libres associées aux transitions, et les changements de groupes magnétiques sont donnés sous forme de tables, dans les chapitres 3 , 4 et 5. Un bilan des résultats théoriques obtenus est présenté. Enfin au chapitre 6 , nous effectuons une comparaison rapide de nos résultats avec les données expérimentales obtenues sur les transitions ferromagnétiques et antiferromagnétiques.

REFERENCES

1. L.D.Landau, Collected papers, Ed. D.Ter.Haar, Pergamon. Press (1965)
2. H.Heesch, Z.Kristallogr, 73, 325 (1930)
3. A.V.Shubnikov et al, Colored symmetry, Ed W.T.Holser, Pergamon. Press (1964)
4. A.M.Zamorzaev, Soviet Physics Crystallo, Vol 2, pp 10-15 (1957)
5. N.V.Belov, N.N.Neronova et T.S.Smirnova, Soviet Physics Crystallo, Vol 2, N°3, pp 311-322 (1957)
6. V.A.Koptsik, Tables des représentations stéréographiques des groupes de Shubnikov, (en Russe) (1966)
7. E.P.Wigner, Group theory and its application to the quantum mechanics of atomic spectra, Academic. Press, New-York (1959)
8. O.V.Kovalev, Soviet Physics Solid State, 5, 11, pp 2309-2314 (1964)
9. C.J.Bradley et B.L.Davies, Rev.Mod.Phys, 40, pp 359-379 (1968)
10. J.O.Dimmock et R.G.Wheeler, J.Phys.Chem.Solids, 23, pp 729-741 (1962)
11. I.E.Dzyaloshinskii, Soviet Phys.J.E.T.P, 5, 6, pp 1259-1272 (1957)
12. I.E.Dzyaloshinskii, Soviet Phys.J.E.T.P, 19, pp 960-971 (1964)
13. S.A.Nikitin, Vestn.Mosk.Univ.Fiz.Astron (USSR), N°6, pp 664-670 (en Russe) (1970)
14. G.A.Smolenskii, Soviet Physics.Solid State, Vol 4, N°5, pp 807-809 (1962)
15. A.I.Mitsek et G.A.Smolenskii, Soviet Physics.Solid State, Vol 4, N°12, pp 2620-2627 (1963)
16. O.V.Kovalev, Soviet Physics.Solid State, Vol 14, N°4, pp 826-831 (1972)
17. O.V.Kovalev, Soviet Physics.Solid State, Vol 14, N°1, pp 258-260 (1972)
18. Yu.I.Sirotnin, Soviet Physics.Crystallo, Vol 8, N°2, pp 195-196 (1963)
19. O.V.Kovalev, Soviet Physics.Crystallo, Vol 9, N°6, pp 665-671 (1965)
20. O.V.Kovalev, Soviet Physics.Solid State, Vol 5, N°11, pp 2315-2321 (1964)
21. O.V.Kovalev, Soviet Physics.Solid State, Vol 7, N°1, pp 77-82 (1965)
22. O.V.Kovalev, Fiz.Metal.Metalloved, 17, N°4, pp 490-499 (1964)
23. E.F.Bertaut, Acta Cryst. A24, pp 217-231 (1968)
24. H.Wondratschek et A.Niggli, Z.Kristallogr, 115, 1 (1961)
25. V.E.Naish, Izv.AN SSSR, Ser.Fiz, 27, pp 1496-1504 (1963)
26. Yu.A; Izyumov et V.E.Naish, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 12, pp 239-248 (1979)
27. S.C.Miller et W.F.Love, Tables of irreducible representations of space groups and corepresentations of magnetic space groups, Pruett, Boulder, Col (1967)
28. C.J.Bradley et A.P.Cracknell, The mathematical theory of symmetry in solids, Clarendon Press.Oxford (1972)
29. P.Tolédano et J.C.Toledano, Phys rev B14, 7, pp 3097-3109 (1976)
30. P.Tolédano et J.C.Tolédano, Phys rev B16, 1, pp 386-407 (1977)
31. J.C.Tolédano et P.Tolédano, Phys rev B21, 3, pp 1139-1172 (1980)
32. P.Tolédano et J.C.Tolédano, Phys rev B25, 3, pp 1946-1964 (1982)

C H A P I T R E 1

THEORIES PHENOMÉNOLOGIQUES DES TRANSITIONS DE PHASES MAGNETIQUES

Dans ce chapitre, nous passons en revue les théories phénoménologiques qui ont été proposées pour décrire les divers types de structures magnétiques. Au préalable nous rappelons brièvement plusieurs résultats des théories microscopiques qui justifient les arguments utilisés dans les théories macroscopiques.

I. Caractère quantique des effets magnétiques et origine microscopique des transitions de phases magnétiques

Le théorème de Bohr-Van Leeuwen établit qu'à température finie, quelque soit le champ électromagnétique appliqué, l'aimantation d'un système d'électrons classiques en équilibre thermique, s'annule identiquement. Cette propriété générale qui se démontre à l'aide du formalisme de la mécanique statistique classique oblige donc à interpréter les effets magnétiques mettant en jeu une aimantation non nulle dans le cadre de la mécanique quantique. Ainsi Landau montre-t-il que la quantification des orbites électroniques en présence d'un champ appliqué, produit un effet diamagnétique. De même, le paramagnétisme s'explique en considérant qu'un atome dans un état caractérisé par les nombres quantiques J , L , S possède un moment magnétique dipolaire

$$\vec{\mu} = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{J}$$

où g est le facteur de Landé et μ_B le magnéton de Bohr.

L'interaction d'un assemblage d'atomes avec un champ appliqué conduit alors à l'expression suivante de la susceptibilité magnétique

$$\chi = \frac{N}{kT} \frac{J(J+1)}{12 m^2} g^2 e^2$$

qui varie en accord avec la loi expérimentale du Curie ($\chi \sim \frac{C}{T}$).

L'interprétation de la transition entre l'état paramagnétique et l'état ferromagnétique ou antiferromagnétique fait appel à un terme d'échange dans le hamiltonien du système (lié à l'indiscernabilité des électrons sur leur orbite) qui permet d'expliquer le couplage entre dipôles magnétiques et l'alignement de

ceux-ci. Les caractéristiques de l'état ferromagnétique s'établissent alors en considérant une assemblée de spins S_i localisés aux noeuds i d'un réseau triplement périodique. L'interaction d'échange entre deux sites i et j est représentée par un terme $- J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$.

L'hamiltonien total responsable des propriétés magnétiques est donc

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

Le modèle le plus simple (Heisenberg) consiste à retenir l'interaction entre plus proches voisins. Chaque spin étant dans le champ créé par ses voisins, on peut écrire :

$$H = - \sum_i h_i S_i$$

où

$$h_i = J \sum_{j \text{ voisins de } i} S_j$$

L'hypothèse du champ moyen (Weiss) qui remplace h_i par sa valeur moyenne $\langle h_i \rangle = J \sum_{j \text{ voisins de } i} \langle S_j \rangle$ permet alors d'exprimer l'aimantation ferromagnétique sous la forme

$$M = M_0 (T_c - T)^\beta \quad \text{avec} \quad \beta = \frac{1}{2}$$

et la susceptibilité magnétique comme

$$\left\{ \begin{array}{ll} \chi = \chi_0 (T - T_c)^{-\gamma} & \text{où } \gamma = 1 \quad \text{quand } T > T_c \\ \chi = \chi_0' (T_c - T)^{-\gamma'} & \text{où } \gamma' = 1 \quad \text{quand } T < T_c \end{array} \right.$$

L'hypothèse supplémentaire d'une distribution au hasard des spins sur les sites du réseau permet à Bragg et Williams de calculer l'entropie du système et d'en déduire l'énergie libre :

$$F = - \frac{1}{2} N J q \langle S \rangle^2 + N k T \left\{ \left(\frac{1 + \langle S \rangle}{2} \right) \text{Log} \left(\frac{1 + \langle S \rangle}{2} \right) + \left(\frac{1 - \langle S \rangle}{2} \right) \text{Log} \left(\frac{1 - \langle S \rangle}{2} \right) \right\}$$

où q est le nombre de premiers voisins et $\langle S \rangle$ la valeur moyenne du spin en chaque site.

Dans cette approximation, l'énergie libre est une fonction analytique de la température T et de l'intensité d'aimantation M . Au voisinage de la température de transition T_c , M est petit et il suffit de considérer les premiers termes du développement en puissances de M . Nous obtenons

$$F(T,M) = F(T,0) + \frac{1}{2} a (T - T_c)M^2 + \frac{1}{4} b M^4 \quad (I.1)$$

où

$$a = \frac{\partial^3 F}{\partial M^2 \partial T} \bigg|_{\substack{M=0 \\ T=T_c}} = \frac{4k}{N} \quad \text{et} \quad b = \frac{1}{6} \frac{\partial^4 F}{\partial M^4} \bigg|_{\substack{M=0 \\ T=T_c}} = \frac{16}{3} \frac{kT_c}{N^3}$$

Les considérations précédentes et en particulier l'expression (I.1) permettent de justifier les postulats sur lesquels est fondée la théorie phénoménologique de Landau.

II. La Théorie de Landau

Dans l'article original [1] portant sur la théorie des transitions de phases, Landau remarque que la symétrie du cristal magnétique est déterminée non seulement par la distribution de ces atomes mais aussi par la densité de spins $M(\vec{r})$ en tout point. Le vecteur axial $M(\vec{r})$ peut posséder dans son groupe d'invariance, en plus des transformations de symétrie usuelles, l'inversion du temps R qui change le signe de $M(\vec{r})$ en $-M(\vec{r})$ (correspondant au changement de signe de chaque courant interne \vec{j}). Cette propriété se déduit de l'invariance des équations de la mécanique par rapport au changement simultané du signe du temps et du signe du champ magnétique. Si la distribution du spin possède l'élément R dans son groupe d'invariance, alors $M(\vec{r}) = -M(\vec{r}) = 0$ et le cristal est paramagnétique. Une valeur non nulle de $M(\vec{r})$ peut être également invariante par rapport aux combinaisons de R avec des axes de rotations, des plans de symétrie et des translations. La combinaison de l'opération R avec les opérations appartenant aux 230 groupes spatiaux conduit à 1421 groupes spatiaux magnétiques ou groupes de Shubnikov [2] qui décrivent la symétrie de distribution des spins. Comme le montre Wigner [3], ces groupes formés pour moitié d'éléments unitaires et d'éléments antiunitaires ne peuvent être décrits par les représentations habituelles des groupes mais par des coreprésentations [4] (voir chapitre 2).

En tenant compte des considérations précédentes, on peut reformuler la théorie de Landau en suivant une démarche parallèle à celle utilisée par cet auteur pour la description des transitions de phases structurales [1] .

Considérons la densité de moments magnétiques $M(\vec{r})$. Celle-ci peut être exprimée comme une combinaison linéaire des fonctions de base $\psi_i(\vec{r})$ des coreprésentations irréductibles du groupe $G_0 \times R$ de la phase de haute symétrie [5].

$$M(\vec{r}) = \sum_{\alpha} \sum_i \vec{e}_{\alpha} c_{i\alpha} \psi_i(\vec{r}) \quad (II.1)$$

où \vec{e}_{α} est un vecteur axial unitaire dans la direction α ($\alpha = x, y, z$) et i regroupe les trois indices (k, μ, n) : k dénote un vecteur de l'étoile de la coreprésentation, n se réfère à la n ème coreprésentation irréductible associée au vecteur k et μ représente la μ ème fonction de base d'une coreprésentation irréductible.

Comme nous l'avons indiqué, la densité de moment magnétique $M(\vec{r})$ telle qu'elle est donnée par l'équation (II.1) possède les caractéristiques d'un vecteur axial. Les propriétés de transformation des coefficients $c_{i\alpha}$ sont donc donnés par le produit direct d'une coreprésentation irréductible de $G_0 \times R$ et de la représentation vectorielle axiale. Ce produit direct peut être décomposé en coreprésentations irréductibles de $G_0 \times R$ et la densité de moment magnétique $M(\vec{r})$ s'exprime alors comme une combinaison linéaire des nouvelles fonctions de base $\chi_i(\vec{r})$ avec de nouveaux coefficients. Nous pouvons donc écrire l'équation (II.1) sous la forme :

$$M(\vec{r}) = \sum_i c'_i \chi_i(\vec{r})$$

où les coefficients c'_i sont des combinaisons linéaires des $c_{i\alpha}$. (Par la suite, nous omettons la notation primée).

Parmi les $\chi_i(\vec{r})$ figure la coreprésentation identique ; $M(\vec{r})$ s'écrit alors

$$M(\vec{r}) = M_0(\vec{r}) + \sum'_i c_i \chi_i = M_0(\vec{r}) + \delta M(\vec{r})$$

où le symbole Σ' indique que l'on a exclu de la sommation la coreprésentation identique selon laquelle se transforme $M_0(\vec{r})$.

La fonction $\delta M(\vec{r}) = \sum'_i c_i \chi_i(\vec{r})$ (II.2) détermine le groupe de symétrie G de la phase basse symétrie ($\delta M(\vec{r}) \neq 0$ pour $T < T_c$) qui est un sous-groupe de $G_0 \times R$. Sa valeur étant nulle au point de transition ($M(\vec{r}) = M_0(\vec{r})$), on peut effectuer un développement limité de l'énergie libre de Landau Φ au voisinage de ce point en fonction des c_i sous la forme :

$$\begin{aligned} \Phi(p, T, c_i) = & \Phi_0(p, T) + \sum_n A^{(n)} f_1^{(n)}(c_i) + \sum_n \alpha^{(n)} f_2^{(n)}(c_i) \\ & + \sum_n B^{(n)} f_3^{(n)}(c_i) + \sum_n \beta^{(n)} f_4^{(n)}(c_i) + \dots \end{aligned} \quad (II.3)$$

où les $f_j^{(n)}$ sont des fonctions homogènes de degré j des c_i , et où $A^{(n)}$, $\alpha^{(n)}$, $B^{(n)}$ et $\beta^{(n)}$ sont des fonctions des contraintes externes (p), de la température et des fonctions $\chi_i(\vec{r})$.

Φ est invariante par les éléments du groupe $G_0 \times R$. Cette invariance peut s'exprimer en fixant les fonctions $\chi_i(\vec{r})$ et en opérant sur les coefficients c_i dont on montre qu'ils peuvent constituer une base de l'espace vectoriel support des coreprésentations irréductibles de $G_0 \times R$. L'invariance de $\Phi(p, T, c_i)$ se traduit donc par celle des fonctions $f_j^{(n)}$. Sous l'effet de R , tous les coefficients c_i changent de signe ; par conséquent, il n'y a pas de fonctions $f_j^{(n)}$ d'ordre impair dans l'énergie libre Φ . Remarquons que ce point distingue la théorie de Landau des transitions de phases magnétiques de celle développée pour les transitions de phases structurales. La non-existence d'invariants du troisième degré qui doit être imposée à l'énergie libre d'une transition structurale continue (critère de Landau) est ici obtenue a priori. L'énergie libre de Landau se réduit ainsi à :

$$\Phi(p, T, c_i) = \Phi_0(p, T) + \sum_n \alpha^{(n)} f_2^{(n)}(c_i) + \sum_n \beta^{(n)} f_4^{(n)}(c_i) + \dots$$

L'existence d'une transition continue vers une phase de symétrie distincte décrite par un groupe magnétique G (différent de $G_0 \times R$) permet en répétant les considérations utilisées par Landau de déduire les résultats suivants :

Les transitions du second ordre correspondent aux variations de coefficients c_i associés à une seule coreprésentation irréductible de $G_0 \times R$. Restreint aux coefficients relatifs à cette coreprésentation, Φ s'écrit :

$$\Phi = \Phi_0 + \alpha \eta^2 + \beta \eta^4 f_4(\gamma_i) + \dots \quad (II.4)$$

où l'on a posé $c_i = \eta \gamma_i$ avec $\sum_i \gamma_i^2 = 1$. L'ensemble des c_i forme le paramètre d'ordre de la transition de phases. Remarquons que les valeurs d'équilibre des c_i sont nulles pour $T > T_c$ et non nulles pour $T < T_c$. Le coefficient α du terme quadratique est une fonction de la forme $\alpha = \alpha_0 (T - T_c)$ au voisinage de la température de transition T_c ($\alpha_0 > 0$). Le coefficient β du terme quartique est strictement positif et peut être considéré comme constant.

En résumé, les valeurs de η et γ_i qui minimisent (minimum absolu) Φ permettent donc de déterminer la symétrie de la fonction $\delta M(\vec{r}) = \eta \sum_i \gamma_i \chi_i(\vec{r})$ (obtenue à partir de (II.2)), c'est-à-dire la symétrie G du cristal magnétique apparaissant lors de la transition de phase. Pour obtenir tous les groupes magnétiques possibles, à partir d'un groupe paramagnétique donné, nous devons ainsi considérer les coreprésentations irréductibles des fonctions présentes dans (II.2).

Il faut toutefois remarquer que le nombre de coreprésentations qui doivent être examinées est sensiblement réduit (à un nombre fini) si l'on impose à la phase décrite par le groupe G de posséder une stricte périodicité de translation. Lifshitz a en effet montré [6] que pour garantir l'homogénéité de la phase basse température, seules devaient être considérées les représentations irréductibles associées aux points de la zone de Brillouin dont le groupe d'invariance possède un point central (i.e. l'inversion ou trois axes concourants). Lifshitz montre ainsi qu'un petit nombre de points de haute symétrie de la surface ainsi que le centre des 14 zones de Brillouin doivent être retenus. Les arguments développés par cet auteur sont également applicables aux transitions magnétiques.

Les coreprésentations susceptibles d'être associées à une transition continue vers une phase avec un arrangement strictement périodique de spins, doivent donc satisfaire à la condition de Lifshitz (voir chapitre 2). Il est à remarquer que Takagi [7] a montré que les invariants qui apparaissent par symétrie lorsque cette condition n'est pas satisfaite (invariants de Lifshitz [6]) ne sont pas laissés invariants par R car leurs fonctions de base se transforment en leurs complexes conjuguées. Toutefois si l'on considère des coreprésentations irréductibles dans l'espace réel, les arguments soulevés par Takagi deviennent caducs. Au chapitre 2, nous réexaminons ce point.

Un critère de sélection supplémentaire des coreprésentations pouvant être associées à la formation des structures magnétiques a été proposé par Kovalev [5] et invoqué par plusieurs auteurs [8, 9]. Il indique que la densité magnétique (II.2) est différente de zéro en un point de l'espace où est localisé un atome A , si elle peut s'exprimer à partir des fonctions de base $\chi_i^{(A)}(\vec{r})$ des coreprésentations du groupe $G(A) \times R$ où $G(A)$ est le groupe ponctuel d'invariance du type d'atomes A . Kovalev établit alors le théorème suivant : les coreprésentations du groupe $G_0 \times R$ présentes dans l'équation (II.2) doivent contenir la coreprésentation totalement symétrique du groupe $G(A) \times R$. Remarquons que des règles de sélection équivalentes existent pour les transitions de phases structurales. Elles n'ont d'intérêt que si l'on considère un arrangement particulier d'atomes. Dans le cadre de l'étude générale

que nous nous proposons d'effectuer dans cette thèse, nous n'avons donc pas pris en considération la règle proposée par Kovalev.

III. Théories phénoménologiques spécifiques

1. Le Ferromagnétisme

Dans un matériau ferromagnétique, tous les moments magnétiques des atomes ou ions individuels sont alignés parallèlement à une direction particulière. L'état ferromagnétique est donc caractérisé par l'aimantation M qui peut être prise pour paramètre d'ordre de la transition. L'énergie libre de Landau s'écrit (cas d'une aimantation isotrope) :

$$\Phi(p, T, M) = \Phi_0(p, T) + \alpha(T - T_c) M^2 + CM^4 + \dots$$

Les valeurs de M qui minimisent l'énergie libre sont solutions de l'équation

$$M [\alpha (T - T_c) + 2 CM^2] = 0$$

Cette équation a une solution stable $M = 0$ (état paramagnétique) et deux solutions stables non nulles $M = \pm \frac{\alpha(T_c - T)}{2C}$ (état ferromagnétique)

La susceptibilité isotherme $\chi_T = \frac{\partial M}{\partial H} \Big|_T$ peut être déduite du potentiel thermodynamique $G(T, p, M) = F(T, p, M) - MH$ où H est le champ extérieur appliqué au système. On retrouve bien les expressions données par les modèles microscopiques

$$\chi_T = \frac{1}{2 \alpha(T - T_c)} \quad \text{dans la phase paramagnétique}$$

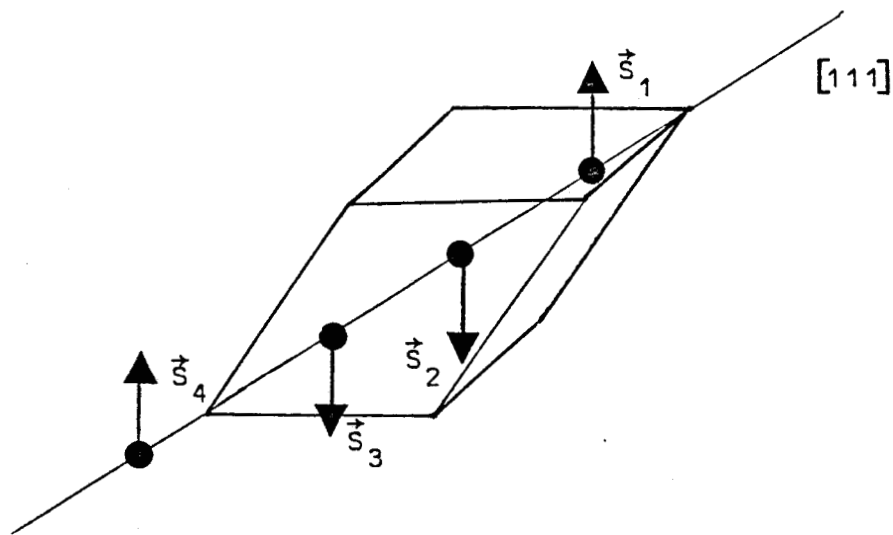
$$\chi_T = \frac{1}{4 \alpha(T_c - T)} \quad \text{dans la phase ferromagnétique}$$

2. Antiferromagnétisme, Ferromagnétisme faible et ferrimagnétisme

Dans un modèle élémentaire de cristal antiferromagnétique, les moments magnétiques sont arrangés parallèlement dans deux sous-réseaux A et B identiques

d'aimantations opposées M_A et M_B . Ainsi le cristal ne possède pas globalement de moment magnétique. Cependant, il peut y avoir non-compensation rigoureuse des aimantations des deux sous-réseaux. Celle-ci peut provenir soit d'une longueur différente des aimantations M_A et M_B (ferrimagnétisme) soit du fait que l'angle entre M_A et M_B diffère légèrement de π (ferromagnétisme faible). On peut alors mesurer dans ces deux cas une petite aimantation résultante. L'application de la théorie de Landau à la description phénoménologique des états antiferromagnétique et ferromagnétique faible est due à DZIALOSHINSKII [10]. Cet auteur considère le cas particulier de l'oxyde de fer- α ($\alpha - Fe_2O_3$).

Ce corps possède la symétrie du groupe D_{3d}^6 et les quatre ions Fe^{3+} sont répartis sur la diagonale de la maille rhomboédrique. Dans l'état antiferromagnétique, la maille magnétique et la maille spatiale coïncident. Les spins des quatre ions ont même grandeur et diffèrent par leur signe ($\vec{S}_1 = -\vec{S}_2 = -\vec{S}_3 = \vec{S}_4$) de telle sorte que leur somme $\sum_i \vec{S}_i = 0$ dans chaque maille.



"Fig. 1: Structure antiferromagnétique de $\alpha-Fe_2O_3$
(seuls les ions Fe^{3+} sont représentés)

Près du point de transition, $\vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_3$ et \vec{S}_4 sont petits et l'énergie libre ϕ peut être développée en puissance de leurs composantes. Dzialoshinskii introduit alors les variables auxiliaires $m = S_1 + S_2 + S_3 + S_4$ et $l = S_1 - S_2 - S_3 + S_4$. Connaissant les coreprésentations irréductibles selon lesquelles les composantes de \vec{m} et \vec{l} se transforment, on peut écrire la forme la plus générale de ϕ permise par la symétrie du cristal (D_{3d}^6). En se limitant aux termes du second degré, on a :

$$\phi = \frac{A}{2} l^2 + \frac{B}{2} m^2 + \frac{\alpha}{2} l_z^2 + \frac{b}{2} m_z^2 + \beta(l_x m_y - l_y m_x) + \frac{C}{4} l^4 \quad (\text{III.2.1})$$

Le minimum de ϕ pour $|\vec{l}|$ constant est déterminé par les équations

$$\begin{aligned} \beta m_x &= \lambda l_x & , & \quad -\beta m_x = \lambda l_y & , & \quad \alpha l_z = \lambda l_z \\ \beta m_x &= \beta l_y & , & \quad B m_y = -\beta l_x & , & \quad (B + b) m_z = 0 \end{aligned}$$

Ce groupe d'équations à deux solutions :

$$(I) \quad \vec{m} = \vec{0} \quad , \quad l_x = l_y = 0$$

$$(II) \quad l_z = m_z = 0 \quad ; \quad m_x = (\beta/B) l_y \quad ; \quad m_y = -(\beta/B) l_x$$

Dans l'état (I), l'aimantation est nulle ; nous sommes en présence d'un état antiferromagnétique.

L'état (II) est un état ferromagnétique faible caractérisé par l'apparition d'un moment magnétique spontané non-nul $m = \frac{|\beta|}{B} l$ en plus de la distribution de spins antiferromagnétique décrite par le vecteur \vec{l} .

La valeur de m reste faible car elle est proportionnelle au rapport d'un terme relativiste β sur un terme d'échange B . L'angle entre les spins $\vec{S}_1, \vec{S}_2, \vec{S}_3$ et \vec{S}_4 qui différencie la structure d'un ferromagnétique faible de celle d'un antiferromagnétique peut être déduit de la minimisation du potentiel thermodynamique ϕ (III.2.1) auquel on a ajouté des invariants d'ordre supérieur à 4. Si l'on se place loin du point de transition, la valeur de \vec{l} n'est plus petite et le développement de ϕ en série de ses puissances n'est plus valable. Il est possible cependant de développer ϕ en puissance du vecteur $\vec{\gamma}$, vecteur unitaire dans la direction de \vec{l} . Ainsi le potentiel thermodynamique s'écrit comme :

$$\begin{aligned} \phi &= \frac{a}{2} \gamma_z^2 + \frac{B}{2} m^2 + q(\gamma_x m_y - \gamma_y m_x) + \frac{b}{2} m_z^2 + \frac{D}{2} (\gamma m)^2 + \frac{d}{2i} \gamma_z [(\gamma_z + i\gamma_y)^3 \\ &- (\gamma_x - i\gamma_y)^3] + \frac{f}{2} m_z [(\gamma_x + i\gamma_y)^3 + (\gamma_x - i\gamma_y)^3] + \frac{e}{2} [(\gamma_x + i\gamma_y)^6 + (\gamma_x - i\gamma_y)^6] \end{aligned} \quad (\text{III.2.2})$$

En utilisant les coordonnées sphériques pour $\vec{\gamma}$, on déduit de (II.2.2) :

$$\begin{aligned} \phi &= \frac{a}{2} \cos^2 \theta + \frac{B}{2} m^2 + q \sin \theta (m_y \cos \phi - m_x \sin \phi) + \frac{b}{2} m_z^2 + \frac{D}{2} [m_z \cos \theta \\ &+ \sin \theta (m_x \cos \phi + m_y \sin \phi)]^2 + d \cos \theta \sin^3 \theta \sin^3 \phi + e \cos 6 \phi \sin^6 \theta \\ &+ f m_z \sin^3 \theta \cos 3 \phi \end{aligned}$$

La minimisation de ϕ par rapport à \vec{m} , permet de trouver les trois états stables dans lesquels $\alpha - \text{Fe}_2\text{O}_3$ peut exister :

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad & \theta = 0, \quad \vec{m} = 0 \\ \text{(II)} \quad & \theta \approx \frac{\pi}{2} - \frac{d}{a}, \quad \phi = \frac{\pi}{2}, \quad m_x = \frac{q}{B}, \quad m_y = m_z = 0 \\ \text{(III)} \quad & \theta = \frac{\pi}{2}, \quad \phi = 0, \quad m_y = -\frac{q}{B}, \quad m_z = -\frac{f}{B}, \quad m_x = 0 \end{aligned}$$

Dans l'état (I), tous les spins sont dirigés le long de l'axe [111] et il n'y a pas de ferromagnétisme. Dans l'état (II), la composante antiferromagnétique des spins est dans l'un des plans de symétrie faisant un petit angle $\phi \sim \frac{d}{a}$ avec le plan (111), le moment magnétique spontané $m_0 = |q|/B$ est dirigé le long d'un axe d'ordre 2 perpendiculaire à la composante antiferromagnétique du spin.

Dans l'état (III), la composante antiferromagnétique du spin est dirigée le long d'un des axes d'ordre 2 ; le moment magnétique spontané est de la même grandeur que dans l'état (II) et se trouve dans le plan de symétrie qui est perpendiculaire à l'axe d'ordre 2 de la composante antiferromagnétique, celle-ci faisant un angle petit $\psi \sim \frac{f}{q}$ avec le plan (111).

Les angles ϕ et ψ apparaissant dans les états (II) et (III) traduisent le non-alignement des spins entre eux. Ils sont, tout comme le moment magnétique spontané \vec{m} , une conséquence directe de la présence des termes d'origine relativiste dans le potentiel thermodynamique.

L'application de la théorie de LANDAU à la description phénoménologique de l'état ferrimagnétique est beaucoup plus récente [11]. NIKITIN considère le cas le plus simple d'un cristal ferrimagnétique subdivisé en deux sous-réseaux d'aimantation l_1 et l_2 antiparallèles. Le potentiel thermodynamique près du point de Curie peut alors se développer en puissance de l'aimantation des deux sous-réseaux :

$$\phi = \frac{a_1}{2} l_1^2 + \frac{b_1}{4} l_1^4 + \frac{a_2}{2} l_2^2 + \frac{b_2}{4} l_2^4 + n l_1 l_2 - (l_1 + l_2)H \quad \text{(III.2.3)}$$

où a_1, a_2, b_1 et b_2 sont des coefficients dépendant de la température et de la pression et où $n l_1 l_2$ représente l'énergie d'interaction entre les deux sous-réseaux. Les coefficients a_1, b_1, a_2, b_2 et n sont pris positifs en accord avec les modèles expérimentaux de ferrimagnétique.

En minimisant (III.2.3) on obtient :

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial l_1} &= a_1 l_1 + b_1 l_1^3 + n l_2 - H = 0 \end{aligned} \right. \quad \text{(III.2.4)}$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial l_2} &= a_2 l_2 + b_2 l_2^3 + n l_1 - H = 0 \end{aligned} \right. \quad \text{(III.2.5.)}$$

Au voisinage du point de Curie θ , les aimantations l_1 et l_2 étant petites, on peut négliger les termes l_1^3 et l_2^3 et en prenant $H = 0$, on obtient un système d'équations linéaires homogène qui possède des solutions non-nulles si

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_1 & n \\ n & a_2 \end{vmatrix} = (\sqrt{a_1 a_2} - n)(\sqrt{a_1 a_2} + n) = 0 \quad (\text{III.2.6})$$

Puisque a_1 , a_2 et n sont positifs, on en déduit qu'au voisinage de θ

$$\delta = \sqrt{a_1 a_2} - n = 0 \quad (\text{III.2.7})$$

De (III.2.4) et (III.2.5), on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} l_1 = -\frac{1}{n} (a_2 l_2 + b_2 l_2^3 - H) \\ l_2 = -\frac{1}{n} (a_1 l_1 + b_1 l_1^3 - H) \end{array} \right. \quad (\text{III.2.8})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} l_1 = -\frac{1}{n} (a_2 l_2 + b_2 l_2^3 - H) \\ l_2 = -\frac{1}{n} (a_1 l_1 + b_1 l_1^3 - H) \end{array} \right. \quad (\text{III.2.9})$$

Quand on reporte (III.2.8) dans (III.2.4) et (III.2.9) dans (III.2.5) en négligeant les termes en puissance supérieure à 3 de l'aimantation et en tenant compte que près de θ , $\sqrt{a_1 a_2} \approx n$, on trouve les équations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} 2 \xi \frac{\sqrt{a_1 a_2} - n}{1 - \xi} l_1 + \frac{b_1 + b_2 \xi^4}{1 - \xi} l_1^3 = H \\ -2 \xi \frac{\sqrt{a_1 a_2} - n}{1 - \xi} \frac{l_2}{\xi} - \frac{b_1 + b_2 \xi^4}{1 - \xi} \frac{l_2^3}{\xi^3} = H \end{array} \right. \quad (\text{III.2.10})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 2 \xi \frac{\sqrt{a_1 a_2} - n}{1 - \xi} l_1 + \frac{b_1 + b_2 \xi^4}{1 - \xi} l_1^3 = H \\ -2 \xi \frac{\sqrt{a_1 a_2} - n}{1 - \xi} \frac{l_2}{\xi} - \frac{b_1 + b_2 \xi^4}{1 - \xi} \frac{l_2^3}{\xi^3} = H \end{array} \right. \quad (\text{III.2.11})$$

où $\xi = \sqrt{\frac{a_{1\theta}}{a_{2\theta}}} > 0$ ($a_{1\theta}$ et $a_{2\theta}$ sont les valeurs respectives de a_1 et a_2 au voisinage du point de Curie).

On en déduit que lorsqu'on fait varier la température du système et le champ extérieur, les aimantations des deux sous-réseaux sont antiparallèles et différentes en grandeur :

$$l_1 = -\frac{l_2}{\xi} \quad (\text{III.2.12})$$

Dans le cas $H = 0$, les équations (III.2.10) et (III.2.11) ont deux solutions distinctes :

$$1) \quad l_1 = 0 \quad , \quad l_2 = 0 \quad \text{(III.2.13)}$$

$$2) \quad l_{1s}^2 = - \frac{2 \xi (\sqrt{a_1 a_2} - n)}{b_1 + b_2 \xi^4} \quad , \quad l_{2s}^2 = - \xi^2 \frac{2 \xi (\sqrt{a_1 a_2} - n)}{b_1 + b_2 \xi^4} \quad \text{(III.2.14)}$$

Les dérivées secondes $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial l_1^2}$, $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial l_2^2}$ et $\frac{\partial^2 \Phi}{\partial l_1 \partial l_2}$ étant positives

(a_1, a_2, b_1, b_2 et n positifs), la stabilité des solutions précédentes dépend du signe de

$$\Delta = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial l_1^2} & \frac{\partial^2 \Phi}{\partial l_1 \partial l_2} \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial l_1 \partial l_2} & \frac{\partial^2 \Phi}{\partial l_2^2} \end{vmatrix}$$

Pour la première solution (III.2.13)

$$\Delta = a_1 a_2 - n^2 \approx 2 n \delta$$

et pour la deuxième solution (III.2.14)

$$\Delta = (a_1 + 3 b_1 l_{1s}^2)(a_2 + 3 b_2 l_{2s}^2) - n^2 \approx - 4 n \delta$$

On voit que si $\delta < 0$ alors l'état d'équilibre caractérisé par la présence d'une aimantation spontanée est stable ($\Delta > 0$) tandis que l'état où $l_1 = l_2 = 0$ n'est pas stable ($\Delta < 0$). Par contre, si $\delta > 0$, alors l'état paramagnétique est stable. Ainsi δ peut se développer en série de puissance de $(T - \theta)$ sous la forme :

$$\delta = A (T - \theta) + \dots \quad \text{(III.2.15)}$$

où $A > 0$.

De (III.2.14) et (III.2.15), on obtient l'aimantation spontanée des deux sous-réseaux et l'aimantation résultante en fonction de la température :

$$l_{1s} = \sqrt{- \frac{2 \xi A (T - \theta)}{b_1 + b_2 \xi^4}} \quad \text{(III.2.16)}$$

$$l_{2s} = -\xi \sqrt{- \frac{2 \xi A (T - \theta)}{b_1 + b_2 \xi^4}} \quad \text{(III.2.17)}$$

$$l_s = (1 - \xi) \sqrt{-\frac{2 \xi A (T - \theta)}{b_1 + b_2 \xi^4}} \quad (\text{III.2.18})$$

En présence d'un champ extérieur, les équations (III.2.4) et (III.2.5) nous donnent

$$\left\{ \begin{array}{l} a_1 l_1 + n l_2 = H \\ n l_1 + a_2 l_2 = H \end{array} \right. \quad (\text{III.2.19})$$

d'où
$$l_1 = \frac{a_2 - n}{a_1 a_2 - n^2} H \quad \text{et} \quad l_2 = \frac{a_1 - n}{a_1 a_2 - n^2} H \quad (\text{III.2.20})$$

En supposant que a_1 et a_2 sont des fonctions linéaires de la température

$$a_1 = a'_1 (T - \theta_1) , \quad a_2 = a'_2 (T - \theta_2) \quad (\text{III.2.21})$$

On trouve à partir de (III.2.20), la loi de NEEL

$$\frac{1}{\chi} = \frac{T}{C} + \frac{1}{\chi_0} - \frac{\sigma}{T - \theta}$$

pour un cristal ferrimagnétique.

En faisant $n = 0$, c'est-à-dire en absence d'interaction entre les deux sous-réseaux, on retrouve pour chaque sous-réseau la loi de Curie-Weiss

$$l_1 = \frac{H}{a'_1 (T - \theta_1)} , \quad l_2 = \frac{H}{a'_2 (T - \theta_2)}$$

pour un cristal ferromagnétique.

3. Hélimagnétisme

Dans un cristal hélimagnétique, les spins sont répartis parallèlement à l'intérieur de couches, de sorte que l'aimantation de deux couches consécutives forment un angle ϕ entre elles.

Dzialoshinskii interprète ce phénomène dans le cas d'un cristal dont le groupe de symétrie est O_h^9 [12]. La structure magnétique du cristal est décrite par deux vecteurs $S^+ = \sigma \cos \frac{\pi}{a} x \cos \frac{\pi}{a} y \cos \frac{\pi}{a} z$ et $S^- = \sigma \sin \frac{\pi}{a} x \sin \frac{\pi}{a} y \sin \frac{\pi}{a} z$ (σ : vecteur axial) qui correspondent respectivement aux spins des sommets et du centre d'une maille cubique centrée. Cette structure magnétique peut être représentée sous la forme de deux sous-réseaux antiferromagnétiques intercalés, le premier formé par les ions des sommets des cubes et le second par les ions des centres.

DZIALOSHINSKII établit alors le potentiel thermodynamique Φ le plus général permis par la symétrie du cristal (O_h^9):

$$\Phi = \Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3 + \Phi_4 \quad (\text{III.3.1})$$

$$\text{où } \Phi_1 = \frac{1}{2} A [(S^+)^2 + (S^-)^2] \quad (\text{III.3.2})$$

$$\Phi_2 = b (S_x^+ \frac{\partial S_y^-}{\partial z} - S_y^- \frac{\partial S_x^+}{\partial z} + \text{permutations circulaires sur } x, y, z) \quad (\text{III.3.3})$$

$$\Phi_3 = \frac{1}{2} B [(\frac{\partial S^+}{\partial x})^2 + (\frac{\partial S^+}{\partial y})^2 + (\frac{\partial S^+}{\partial z})^2 + (\frac{\partial S^-}{\partial x})^2 + (\frac{\partial S^-}{\partial y})^2 + (\frac{\partial S^-}{\partial z})^2] \quad (\text{III.3.4})$$

$$\Phi_4 = \frac{1}{4} C [(S^+)^2 + (S^-)^2]^2 + \frac{1}{2} D (S^+)^2 (S^-)^2 + \frac{1}{2} E (S^+ S^-)^2 \quad (\text{III.3.5})$$

La minimisation de Φ se fait par étapes. D'abord il est nécessaire de minimiser l'invariant d'échange (III.3.5) en postulant que $(S^+)^2 + (S^-)^2 = 2 s^2 =$ constante où s est le spin moyen d'un ion à la température considérée. Ceci conduit à définir la structure magnétique de base. Ensuite la somme des termes (III.3.3) et (III.3.4) est minimisée.

Trois types de structures de base correspondent au minimum de (III.3.5)

- (I) : $S^+ = \sqrt{2}s$, $S^- = 0$ ou $S^- = \sqrt{2}s$, $S^+ = 0$
- (II) : $S^+ = S^- = s$, $S^+ \perp S^-$
- (III) : $S^+ = \pm S^-$

Seul le cas (II) permet l'existence d'une surstructure car les invariants linéaires (III.3.3) sont non-nuls [12]. Dans ce cas, les spins des sommets sont perpendiculaires aux spins des centres. La dépendance de S^+ et S^- par rapport aux coordonnées de l'espace est déterminée par l'équation différentielle linéaire du second ordre obtenue par la variation de la somme des fonctions (III.3.3) et (III.3.4) en laissant constantes les équations (III.3.2) et (III.3.5). La solution réelle de cette équation dans le cas d'un vecteur d'onde \vec{k} de la surstructure parallèle à l'axe [111] a la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} S^+ = s [\mu \cos k(x+y+z) - \nu \sin k(x+y+z)] \cos \frac{\pi}{a} x \cos \frac{\pi}{a} y \cos \frac{\pi}{a} z \\ S^- = s [-\mu \sin k(x+y+z) - \nu \cos k(x+y+z)] \sin \frac{\pi}{a} x \sin \frac{\pi}{a} y \sin \frac{\pi}{a} z \end{array} \right. \quad (\text{III.3.6})$$

où $k = \frac{|b|}{B \sqrt{3}}$ et où μ , ν sont des vecteurs perpendiculaires aux vecteurs unitaires du plan (111).

Ces équations décrivent une surstructure du type hélicoïdal. L'axe de l'hélice est dirigé le long de l'axe [111] d'ordre 3 (direction de \vec{k}). Le vecteur d'onde k de la surstructure qui est proportionnel au rapport d'un terme d'origine relativiste (b) sur un terme d'origine d'échange (B), prend donc une valeur faible. Ceci implique que le pas de l'hélice est très grand (proportionnel à $\frac{1}{k}$).

Références :

1. Collected Papers of L.D. Landau, Gordon and Breach, New-York (1965)
2. N.V. Belov, N.N. Neronova et T.S. Smirnova, Sov. Phys. Crystallography 2, 311 (1957)
3. E.P. Wigner, Group Theory (Academic Press, New-York, 1959)
4. C.J. Bradley and A.P. Cracknell, The Mathematical Theory of symmetry in Solids (Clarendon Press, Oxford, 1972)
5. O.V. Kovalev, Sov. Phys. Sol. State 5, 2309 (1964)
6. E.M. Lifshitz, Zh. Eksp. Teor. Fiziki 11, 255 (1941)
7. Y. Takagi, Phys. Rev. B 17, 2965 (1978)
8. H. Luchian, Sol. State Comm. 28, 147 (1978)
9. J. Solyom, Journal de Physique, supp. au n° 2-3, 32, 471 (1971)
10. I.E. Dzialoshinskii, Sov. Phys. JETP 5, 1259 (1957)
11. S.A. Nikitin, Vestn. Mosk. Univ. Fiz. Astron (USSR), N°6, 664 (1970)
12. I.E. Dzialoshinskii, Sov. Phys. JETP 19, 960 (1964)

CHAPITRE 2

CONDITIONS D'APPLICATION DE LA THEORIE DE LANDAU AUX TRANSITIONS DE PHASES MAGNETIQUES

I. Introduction

Dans ce chapitre, nous décrivons la méthode que nous avons utilisée afin d'appliquer la théorie de Landau aux transitions de phases para-ferromagnétiques et para-antiferromagnétiques. Plusieurs auteurs [1-6] ont précisé les modalités d'application de cette théorie. Ainsi, Cracknell et Sedaghat [1] calculent les carrés antisymétrisés et les cubes antisymétrisés des coreprésentations irréductibles des groupes ponctuels magnétiques. Cracknell, Lorenc et Przystawa [2] étudient les différents critères de sélections des coreprésentations irréductibles des groupes ponctuels et appliquent la théorie de Landau aux transitions para-ferromagnétiques. Dimmock et Wheeler [3] considèrent le cas particulier du groupe $P4_2/mmm1'$ pour lequel ils calculent les coreprésentations irréductibles en chaque point de la zone de Brillouin quadratique P. Sirotin [4] et Kovalev [5] donnent tous les changements possibles de symétrie ponctuelle para-ferromagnétiques. Kovalev [6] étudie les transitions magnétiques susceptibles de se produire à partir du groupe paramagnétique $P6_3/mmc1'$. Les travaux précédents se bornent toutefois à des considérations formelles générales ou se situent dans le cadre d'un modèle particulier. Ainsi dans les références [1, 2, 4, 5] seule la symétrie ponctuelle est prise en compte. De même, dans les références [3, 6], un assemblage particulier d'atomes est considéré.

La méthode utilisée dans cette thèse consiste à appliquer la théorie de Landau dans toute sa généralité aux transitions induites à partir d'une phase paramagnétique. Elle utilise des résultats déjà obtenus pour les transitions de phases structurales [7-10]. Dans les paragraphes suivants nous explicitons cette méthode après avoir brièvement rappelé les concepts de groupe magnétique et de coreprésentation.

II. Les groupes magnétiques et leurs coreprésentations

Les groupes magnétiques sont répartis en quatre classes. Une première classe (type I) est formée par les 230 groupes de Fedorov. Parmi eux, les sous-groupes du groupe infini ∞/m décrivent une structure ferromagnétique. La combinaison

des opérations spatiales de ces 230 groupes cristallographiques et de l'opération inversion du temps R permet de définir les trois autres classes. Les groupes du type II sont les 230 groupes gris de la forme

$$M = G + RG$$

où G est l'un des 230 groupes spatiaux. R apparaît directement parmi les éléments de M. Ce type de groupe est adapté à la description d'un cristal paramagnétique considéré comme invariant par l'inversion du temps. Les groupes du type III (au nombre de 674) possèdent pour réseau l'un des 14 réseaux de Bravais cristallins et peuvent s'écrire

$$M = H + R (G - H)$$

où H est un sous-groupe d'ordre moitié de G. Ces groupes sont compatibles avec l'existence d'un vecteur axial ($\infty / mm'm'$) non-nul représentant l'aimantation spontanée locale ($j \neq 0$). Ils décrivent des structures ferromagnétiques ($\int (r \times j) dV \neq 0$) ou antiferromagnétiques ($\int (r \times j) dV = 0$). Enfin, une quatrième classe (type IV) est formée de groupes (547) associés à l'un des réseaux de Bravais magnétiques (au nombre de 22) [11]. Dans ce dernier cas, seules les translations modifient l'orientation du spin. Les groupes du type IV décrivent exclusivement des structures antiferromagnétiques puisque le moment magnétique élémentaire est nul. Au total, on compte donc 1651 groupes (de Shubnikov) susceptibles de décrire une structure magnétique avec des spins colinéaires.

La notion de coreprésentation s'introduit en utilisant le fait que l'opérateur R est antiunitaire, c'est-à-dire tel que :

$$(R \psi, R \phi) = (\psi, \phi)^*$$

Les groupes contenant R parmi leurs éléments ne possèdent pas de représentations au sens usuel du mot (i.e. formées d'opérations unitaires) mais des coreprésentation. Dans cet être mathématique introduit par Wigner [12], la moitié des éléments est unitaire et l'autre anti-unitaire. L'ensemble des matrices formant une coreprésentation d'un groupe non-unitaire

$$M = H + AH \quad (A : \text{opérateur antiunitaire quelconque})$$

satisfait aux égalités suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} D(R_j) D(R_k) = D(R_j R_k) \\ D(R_j) D(A_k) = D(R_j A_k) \\ D(A_j) D(R_k) = D(A_j R_k) \\ D(A_j) D(A_k) = D(A_j A_k) \end{array} \right. \quad (II.1)$$

où R_j et R_k sont des éléments du sous-groupe unitaire H et A_j et A_k sont des éléments de l'ensemble AH d'opérateurs antiunitaires de M .

Tout comme les représentations d'un groupe, les coreprésentations peuvent être réductibles ou irréductibles. On peut ainsi définir une transformation unitaire d'une coreprésentation

$$D'(R_j) = S^{-1} D(R_j) S \quad , \quad D'(A_j) = S^{-1} D(A_j) S^* \quad (II.2)$$

Si les matrices $D(R_j)$ et $D(A_j)$ de la coreprésentation se transforment par (II.2) en matrices $D'(R_j)$ et $D'(A_j)$ formées de blocs diagonaux alors la coreprésentation est dite réductible sinon c'est une coreprésentation irréductible (CI).

Si $G_{\vec{k}_1}$ est le groupe d'invariance du vecteur \vec{k}_1 associé à une représentation irréductible (RI) du groupe H , le groupe d'invariance $M_{\vec{k}_1}$ du vecteur d'onde correspondant à une CI du groupe M sera $M_{\vec{k}_1} = G_{\vec{k}_1} + R G_{\vec{k}_1}$. Cette propriété nécessite que $G_{\vec{k}_1}$ contienne une opération g telle que $g(\vec{k}_1) = -\vec{k}_1$. Par la suite, nous nous bornons à considérer exclusivement le cas où \vec{k}_1 est équivalent à $-\vec{k}_1$, cette limitation étant justifiée ci-dessous.

III. Méthodes de construction des coreprésentations des groupes paramagnétiques

Plusieurs auteurs [13,14] ont proposé une méthode pour construire la CI d'un groupe magnétique $M = H + AH$ à partir des RI du groupe H . La procédure pour un groupe paramagnétique est la suivante :

Soit R_j un élément du sous-groupe unitaire H et $A_j = R R_j$ un élément de AH . Si $\Delta^i(R_j)$ est une matrice représentative de R_j dans la RI Γ_i de H , la coreprésentation $D\Gamma_i$ de M construite à partir de $\Delta^i(R_j)$ nécessite en premier lieu d'exprimer les matrices :

$$\bar{\Delta}^i(R_j) = \Delta^i(A^{-1} R_j A)^*$$

où A est un élément quelconque de RH (la coreprésentation de M étant indépendante du choix de A, nous prenons A = R dans le cas d'un groupe M paramagnétique)

Si $\Delta^i(R_j)$ et $\bar{\Delta}^i(R_j)$ sont équivalentes, on peut écrire

$$\bar{\Delta}^i(R_j) = \beta^{-1} \Delta^i(R_j) \beta \quad (\text{III.2})$$

Deux possibilités se présentent :

Si $\beta\beta^{**} = \Delta(A^2) = \Delta(R^2)$, la coreprésentation déduite de $\Delta^i(R_j)$ peut être définie de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} D^i(R_j) = \Delta^i(R_j) \\ D^i(A_j) = D^i(RR_j) = \pm \Delta^i(A_j R^{-1}) \beta = \pm \Delta^i(R_j) \beta \end{array} \right. \quad (\text{III.3})$$

Si $\beta\beta^{**} = -\Delta(R^2)$, la coreprésentation déduite de $\Delta^i(R_j)$ se définit comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} D^i(R_j) = \begin{pmatrix} \Delta^i(R_j) & 0 \\ 0 & \Delta^i(R_j) \end{pmatrix} \\ D^i(A_j) = D^i(RR_j) = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta^i(R_j) \beta \\ \Delta^i(R_j) \beta & 0 \end{pmatrix} \end{array} \right. \quad (\text{III.4})$$

Si $\Delta^i(R_j)$ et $\bar{\Delta}^i(R_j)$ ne sont pas équivalentes alors la coreprésentation de M déduite de $\Delta^i(R_j)$ est donnée par :

$$\left\{ \begin{array}{l} D^i(R_j) = \begin{bmatrix} \Delta^i(R_j) & 0 \\ 0 & \bar{\Delta}^i(R_j) \end{bmatrix} \\ D^i(A_j) = \begin{bmatrix} 0 & \Delta^i(R_j) \\ \bar{\Delta}^i(R_j) & 0 \end{bmatrix} \end{array} \right. \quad (\text{III.5})$$

Appliquons maintenant cette méthode à quelques exemples.

Exemple 1 : Coreprésentations irréductibles du groupe P4/mbm1' associées au point Z de la zone de Brillouin

Le point Z de la zone de Brillouin quadratique P est associé à une étoile k_j [15] à une seule branche ($M_{k_j} = D_{4h} \times R$) de coordonnées $(0 \ 0 \ \frac{\pi}{c})$. Les caractères de la représentation irréductible τ_2 de P4/mbm sont données par la table de Zak [16] :

	$(\epsilon \bar{0})(c_4 \bar{0})(c_2 \bar{0})(c_4^3 \bar{0})(u_x \bar{\epsilon})(u_y \bar{\epsilon})(u_{xy} \bar{\epsilon})(u_{-xy} \bar{\epsilon})$										
τ_2	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1			
	$(I \bar{0})(s_4 \bar{0})(s_4^3 \bar{0})(\sigma_z \bar{0})(\sigma_x \bar{\epsilon})(\sigma_y \bar{\epsilon})(\sigma_{xy} \bar{\epsilon})(\sigma_{-xy} \bar{\epsilon})$								$\bar{\epsilon}_1$	$\bar{\epsilon}_2$	$\bar{\epsilon}_3$
τ_2	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1

$$\vec{\epsilon} = (\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0)$$

Nous vérifions que quelque soit l'élément de P4/mbm, on a :

$$\bar{\Delta}(R_j) = \Delta^{**}(R_j) = \Delta(R_j)$$

La condition $\bar{\Delta}(R_j) = \beta^{-1} \Delta(R_j) \beta$ est toujours vérifiée en prenant $\beta = 1$. Compte tenu que $\beta\beta^{**} = 1$, les caractères de la coreprésentation sont donnés par les équations (III.3) :

$$D^i(R_j) = \Delta^i(R_j) \quad \text{et} \quad D^i(A_j) = D^i(RR_j) = \pm \Delta^i(R_j)$$

	$(\epsilon \bar{0})(c_4 \bar{0})(c_2 \bar{0})(c_4^3 \bar{0})(u_x \bar{\epsilon})(u_y \bar{\epsilon})(u_{xy} \bar{\epsilon})(u_{-xy} \bar{\epsilon})$										
τ_2^+	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1			
τ_2^-	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1			
	$(I \bar{0})(s_4 \bar{0})(s_4^3 \bar{0})(\sigma_z \bar{0})(\sigma_x \bar{\epsilon})(\sigma_y \bar{\epsilon})(\sigma_{xy} \bar{\epsilon})(\sigma_{-xy} \bar{\epsilon})$								$\bar{\epsilon}_1$	$\bar{\epsilon}_2$	$\bar{\epsilon}_3$
τ_2^+	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1
τ_2^-	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1
	$(R\epsilon \bar{0})(Rc_4 \bar{0})(Rc_2 \bar{0})(Rc_4^3 \bar{0})(Ru_x \bar{\epsilon})(Ru_y \bar{\epsilon})(Ru_{xy} \bar{\epsilon})(Ru_{-xy} \bar{\epsilon})$										
τ_2^+	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1			
τ_2^-	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1			
	$(RI \bar{0})(RS_4 \bar{0})(RS_4^3 \bar{0})(R\sigma_z \bar{0})(R\sigma_x \bar{\epsilon})(R\sigma_y \bar{\epsilon})(R\sigma_{xy} \bar{\epsilon})(R\sigma_{-xy} \bar{\epsilon})$								$R\bar{\epsilon}_1$	$R\bar{\epsilon}_2$	$R\bar{\epsilon}_3$
τ_2^+	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1
τ_2^-	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	1

Exemple 2 : Coreprésentations irréductibles du groupe P6cc1' associées au point A de la zone de Brillouin

Le point A de la zone de Brillouin hexagonale est associé à une étoile k_1^{**} à une seule branche ($M_{k_1} = D_{6h} \times R$) de coordonnées $(0 \ 0 \ \frac{\pi}{c})$. Les caractères des représentations irréductibles τ_5 et τ_5^{**} sont [16] :

	$(\epsilon \bar{0})$	$(c_3 \bar{0})$	$(c_3^2 \bar{0})$	$(\sigma_1 \bar{\tau})$	$(\sigma_2 \bar{\tau})$	$(\sigma_3 \bar{\tau})$	$(c_2 \bar{0})$	$(c_6 \bar{0})$	$(c_6^5 \bar{0})$	$(\sigma_x \bar{\tau})$	$(\sigma_y \bar{\tau})$	$(\sigma_{xy} \bar{\tau})$	$\bar{\tau}_1$	$\bar{\tau}_2$	$\bar{\tau}_3$
τ_5	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	-1
τ_5^*	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1

$\bar{\tau} = (0, 0, \frac{c}{2})$

La représentation complexe τ_5 associée à sa conjuguée τ_5^{**} constitue une représentation réelle réductible du point de vue mathématique mais physiquement irréductible. D'où la RI $\tau_5 + \tau_5^{**}$ de P6cc :

	$(\epsilon \bar{0})$	$(c_3 \bar{0})$	$(c_3^2 \bar{0})$	$(\sigma_1 \bar{\tau})$	$(\sigma_2 \bar{\tau})$	$(\sigma_3 \bar{\tau})$	$(c_2 \bar{0})$	$(c_6 \bar{0})$	$(c_6^5 \bar{0})$	$(\sigma_x \bar{\tau})$	$(\sigma_y \bar{\tau})$	$(\sigma_{xy} \bar{\tau})$	$\bar{\tau}_1$	$\bar{\tau}_2$	$\bar{\tau}_3$
$\tau_5 + \tau_5^*$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$

$\bar{\tau} = (0, 0, \frac{c}{2})$

Par le changement de base

$$\begin{cases} \eta' = \frac{1}{\sqrt{2}} (\eta + i \xi) \\ \xi' = \frac{1}{\sqrt{2}} (\eta - i \xi) \end{cases}$$

nous obtenons les matrices réelles :

	$(\epsilon \bar{0})$	$(c_3 \bar{0})$	$(c_3^2 \bar{0})$	$(\sigma_1 \bar{\tau})$	$(\sigma_2 \bar{\tau})$	$(\sigma_3 \bar{\tau})$	$(c_2 \bar{0})$	$(c_6 \bar{0})$	$(c_6^5 \bar{0})$	$(\sigma_x \bar{\tau})$	$(\sigma_y \bar{\tau})$	$(\sigma_{xy} \bar{\tau})$	$\bar{\tau}_1$	$\bar{\tau}_2$	$\bar{\tau}_3$
$\tau_5 + \tau_5^*$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$

$\bar{\tau} = (0, 0, \frac{c}{2})$

Quelque soit l'élément R_j du groupe $P6cc$, on a :

$$\bar{\Delta}(R_j) = \Delta(R_j)^{\ast\ast} = \Delta(R_j)$$

et la condition $\bar{\Delta}(R_j) = \beta^{-1} \Delta(R_j) \beta$ est vérifiée en prenant $\beta = \begin{bmatrix} 1 & \\ & 1 \end{bmatrix}$; compte tenu que $\beta\beta^{\ast\ast} = \begin{bmatrix} 1 & \\ & 1 \end{bmatrix}$, les matrices de la CI sont données par les équations (III.3) :

$\{E \vec{0}\}$	$\{C_3 \vec{0}\}$	$\{C_3^2 \vec{0}\}$	$\{\sigma_1 \vec{t}\}$	$\{\sigma_2 \vec{t}\}$	$\{\sigma_3 \vec{t}\}$	$\{C_2 \vec{0}\}$	$\{C_6 \vec{0}\}$	$\{C_6^5 \vec{0}\}$	$\{\sigma_x \vec{t}\}$	$\{\sigma_y \vec{t}\}$	$\{\sigma_{xy} \vec{t}\}$	\vec{t}_1	\vec{t}_2	\vec{t}_3
$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$
$\{RE \vec{0}\}$	$\{RC_3 \vec{0}\}$	$\{RC_3^2 \vec{0}\}$	$\{R\sigma_1 \vec{t}\}$	$\{R\sigma_2 \vec{t}\}$	$\{R\sigma_3 \vec{t}\}$	$\{RC_2 \vec{0}\}$	$\{RC_6 \vec{0}\}$	$\{RC_6^5 \vec{0}\}$	$\{R\sigma_x \vec{t}\}$	$\{R\sigma_y \vec{t}\}$	$\{R\sigma_{xy} \vec{t}\}$	$R\vec{t}_1$	$R\vec{t}_2$	$R\vec{t}_3$
$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$
$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & \\ & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & \\ & 1 \end{pmatrix}$

$\vec{t} = (0, 0, \frac{c}{2})$

Remarquons que les matrices des RI sont toutes réelles, ce qui permet d'écrire à chaque fois l'équation (III.1) dans le cas des CI des groupes paramagnétiques sous la forme

$$\bar{\Delta}^i(R_j) = \Delta^i(R_j)^{\ast} = \Delta^i(R_j)$$

Ainsi les CI sont toujours construites à l'aide des équations (III.3) qui peuvent s'écrire ici :

$$\begin{cases} D^i(R_j) = \Delta^i(R_j) \\ D^i(A_j) = D^i(RR_j) = \pm \Delta^i(R_j) \end{cases}$$

Cette méthode est alors identique à celle employée par Kovalev [17]. Cet auteur note que pour chaque représentation τ du groupe H (sous-groupe unitaire de $M = H + RH$), on obtient deux coreprésentations τ_g et τ_u du groupe M . Pour la coreprésentation τ_g , paire vis-à-vis de l'opérateur R , nous avons la relation $\tau_g(R_j) = \tau_g(RR_j) = \tau(R_j)$ tandis que pour la représentation τ_u , impaire vis-à-vis de R , nous avons la relation $\tau_u(R_j) = -\tau_u(RR_j) = \tau(R_j) (R_j \in H)$.

Cette méthode consiste donc à multiplier par +1 ou par -1 les matrices des éléments unitaires de M pour trouver les matrices des éléments antiunitaires correspondants. C'est cette dernière règle que nous utilisons, en prenant soin de considérer des représentations physiquement irréductibles dans une base réelle.

IV. Sélection des coreprésentations susceptibles d'être associées à une transition de phases du second ordre.

paragraphe précédent, nous avons montré que nous obtenons deux CI τ^+ et τ^- , respectivement paire et impaire vis-à-vis de R , à partir d'une seule RI τ . En outre, nous savons que R inverse le sens de l'aimantation M et qu'une CI traduit le comportement de tous les opérateurs appartenants au groupe d'invariance de M . on en déduit alors que seules les CI τ^- peuvent induire une transition d'une phase paramagnétique vers une phase magnétique (nous omettrons désormais le signe - dans la notation d'une CI). D'autre part, nous avons vu au chapitre 1 que les coreprésentations susceptibles d'être associées à une transition de phases du second ordre doivent vérifier le critère de Lifshitz imposé pour traduire l'homogénéité du cristal dans la phase de basse symétrie. La vérification de ce critère a été effectué dans les références [7,8] et il limite à un nombre fini les CI que nous avons à considérer ainsi que les points de la zone de Brillouin. D'autre part, la quasi-totalité des points de la zone de Brillouin sélectionnés sont tels que $\vec{k}_1 \sim -\vec{k}_1$. Pour un petit nombre de points pour lesquels $\vec{k}_1 \neq -\vec{k}_1$, la prise en compte de la coreprésentation complexe conjuguée (c'est-à-dire d'une CI physiquement irréductible) conduit à une étoile \vec{k}_1 contenant à la fois \vec{k}_1 et $-\vec{k}_1$. Ces considérations justifient à postériori que nous nous soyons toujours placés, pour construire une CI, dans le cas exprimé par les équations (III.3), et que l'on ait écrit le groupe d'invariance du vecteur \vec{k}_1 sous la forme $M_{\vec{k}_1} = G_{\vec{k}_1} + RG_{\vec{k}_1}$. On peut remarquer d'autre part que les représentations irréductibles éliminées par le critère de Landau conduisent à des CI qui vérifient ce critère. Nous les avons donc prises en compte dans notre travail puisqu'elles sont susceptibles

d'induire une transition du second ordre. La liste des RI qui ne vérifient pas la condition de Landau a été dressée dans les références [8,18]. Au total, près de 4000 CI doivent être examinées pour déterminer les transitions de phases du second ordre para-ferromagnétiques et para-antiferromagnétiques.

V. Méthode d'application de la théorie de Landau à partir d'une phase paramagnétique

Afin de trouver toutes les transitions de phases induites par une CI d'un groupe paramagnétique $G_0 \times R$ correspondant à un point de la zone de Brillouin de coordonnées \vec{k}_1 , nous devons effectuer les opérations suivantes :

- 1) Détermination de l'étoile \vec{k}_1^{**}
- 2) Construction des CI à partir des petites CI des groupes d'invariance $M_{\vec{k}_1}^* = G_{\vec{k}_1} + RG_{\vec{k}_1}$ des vecteurs d'onde de la zone de Brillouin.
- 3) Détermination de l'image de la CI, qui est l'ensemble des matrices distinctes de la CI considérée.
- 4) Construction du potentiel thermodynamique associé à cette image.
- 5) Recherche des minima du potentiel précédent (tronqué jusqu'au degré le plus petit induisant un changement de symétrie) afin de déterminer les diverses solutions stables.
- 6) Identification des groupes spatiaux magnétiques correspondant aux solutions stables précédentes.

Les résultats des étapes 3, 4 et 5 se trouvent pour la plupart des cas dans les références [7-10]. Seules les CI de dimension 6 ont dû faire l'objet d'une étude particulière (voir chapitre 4).

Illustrons cette méthode en prenant l'exemple de la coreprésentation τ_3 au point N ($\vec{k}_1 = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 0)$) de la zone de Brillouin cubique I correspondant au groupe de Shubnikov $Im\bar{3}'$.

1) Détermination de l'étoile \vec{k}_1^{**}

Les tables de Zak et Al [16] nous donnent les éléments du groupe spatial $Im\bar{3}'$ (T_h^5). Les 24 opérations spatiales sont :

$$E|000, 3U|000, 4C_3|000, 4C_3^2|000, I|000, 3\sigma|000, 4S_6|000, 4S_6^5|000$$

On en déduit les 48 opérations spatiales du groupe $Im\bar{3}'$:

$E|000$, $3U|000$, $4C_3|000$, $4C_3^2|000$, $I|000$, $3\sigma|000$,
 $4S_6|000$, $4S_6^5|000$, $RE|000$, $3RU|000$, $4RC_3|000$, $4RC_3^2|000$,
 $RI|000$, $3R\sigma|000$, $4RS_6|000$, $4RS_6^5|000$.

Les translations primitives associées à ce groupe symorphique sont :

$$\vec{t}_1 = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, -\frac{a}{2} \right); \vec{t}_2 = \left(-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2} \right); \vec{t}_3 = \left(\frac{a}{2}, -\frac{a}{2}, \frac{a}{2} \right)$$

Les coordonnées du vecteur \vec{k}_1 sont : $\vec{k}_1 = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 0 \right)$

Le groupe d'invariance du vecteur \vec{k}_1 est alors l'intersection de $T_h \times R$ et de $D_{2h}^{(xy)} \times R$, c'est-à-dire $C_{2h}^{(z)} \times R$. On en déduit que le nombre de branches de l'étoile du vecteur \vec{k}_1 est :

$$n = \frac{\text{nombre d'éléments du groupe } T_h \times R}{\text{nombre d'éléments du groupe } C_{2h}^{(z)} \times R} = \frac{48}{8} = 6$$

Les coordonnées des 6 branches de l'étoile s'obtiennent en transformant les coordonnées de \vec{k}_1 , respectivement par six opérations ponctuelles de symétrie de T_h qui , par multiplication des huit éléments de $C_{2h}^{(z)} \times R$ conduisent à retrouver les 48 éléments de $T_h \times R$. On peut par exemple choisir les six opérations suivantes :

$$E \quad U_x \quad C_3^{2xyz} \quad C_3^{xyz} \quad C_3^{xyz} \quad C_3^{2xyz}$$

qui fournissent les six branches de l'étoile \vec{k}_1^*

$$\begin{aligned} E(\vec{k}_1) &= \vec{k}_1 = \left(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, 0 \right) & C_3^{xyz}(\vec{k}_1) &= \vec{k}_4 = \left(\frac{\pi}{a}, 0, -\frac{\pi}{a} \right) \\ U_x(\vec{k}_1) &= \vec{k}_2 = \left(\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a}, 0 \right) & C_3^{xyz}(\vec{k}_1) &= \vec{k}_5 = \left(0, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a} \right) \\ C_3^{2xyz}(\vec{k}_1) &= \vec{k}_3 = \left(\frac{\pi}{a}, 0, \frac{\pi}{a} \right) & C_3^{2xyz}(\vec{k}_1) &= \vec{k}_6 = \left(0, \frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{a} \right) \end{aligned}$$

Les caractères de la petite représentation τ_3 associée au point N sont :

$C_{2h}^{(z)}$	$\{E 000\}\{U_z 000\}\{I 000\}\{\sigma_z 000\}$
τ_3	1 1 -1 -1

2) Construction des matrices des coreprésentations irréductibles

Les matrices associées à la CI sont :

- les matrices des trois translations primitives \vec{t}_1, \vec{t}_2 et \vec{t}_3 et des trois antitranslations $R\vec{t}_1, R\vec{t}_2$ et $R\vec{t}_3$.

- les matrices des 48 opérations du groupe Im3'
- les matrices distinctes obtenues à partir de toutes les combinaisons de matrices prises dans les deux groupes précédents, l'ensemble de ces matrices formant l'image de la CI.

i) Matrices associées aux translations primitives .

La forme générale des matrices est :

$$\vec{t}_i = \begin{bmatrix} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{t}_i} & & & & & \\ & e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{t}_i} & & & & \\ & & e^{i\vec{k}_3 \cdot \vec{t}_i} & & & \\ & & & e^{i\vec{k}_4 \cdot \vec{t}_i} & & \\ & & & & e^{i\vec{k}_5 \cdot \vec{t}_i} & \\ & & & & & e^{i\vec{k}_6 \cdot \vec{t}_i} \end{bmatrix} \quad (i=1,2,3)$$

On obtient ainsi successivement les trois matrices :

$$\vec{t}_1 = \begin{bmatrix} -1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & -1 & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & -1 \end{bmatrix} \quad \vec{t}_2 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & -1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & -1 & & \\ & & & & -1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix} \quad \vec{t}_3 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & -1 & & & & \\ & & -1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & -1 \end{bmatrix}$$

et en associant l'opération R :

$$R\vec{t}_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & -1 & & & & \\ & & -1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & -1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix} \quad R\vec{t}_2 = \begin{bmatrix} -1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & -1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & -1 \end{bmatrix} \quad R\vec{t}_3 = \begin{bmatrix} -1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & -1 & & \\ & & & & -1 & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$



ii) Matrices associées aux 48 opérations spatiales du groupe Im3'

La petite coreprésentation irréductible τ_3 se déduit de la petite RI τ_3 .

On a ici :

$C_{2h}^{(z)} \times R$	$\{E 000\}$	$\{U_z 000\}$	$\{I 000\}$	$\{\sigma_z 000\}$	$\{RE 000\}$	$\{RU_z 000\}$	$\{RI 000\}$	$\{R\sigma_z 000\}$
τ_3	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1

Le principe de construction des CI à partir des petites coreprésentations d'un groupe magnétique est le même que celui de la construction des RI à partir des petites représentations d'un groupe cristallographique [15]. Ainsi nous obtenons la CI τ_3 du groupe de Shubnikov Im3' (Tableau (2.1)). On peut constater que 24 de ces matrices sont distinctes. L'image de la coreprésentation considérée possède 192 éléments que l'on écrit sous la forme synthétique :

$$\left\{ \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{bmatrix} \right\} \times \\
 \times \left\{ \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{bmatrix} \right\} \times \left\{ \begin{bmatrix} -1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & 1 \end{bmatrix} \right\} \times \left\{ \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{bmatrix} \right\}$$

Dans la référence [9], cette image est notée L_8 .

3) Construction du potentiel thermodynamique associé à l'image L_8 .

Les propriétés de symétrie du paramètre d'ordre à six composantes $(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4, \eta_5, \eta_6)$ correspondant à la CI τ_3 et à l'image L_8 , fournit les invariants du quatrième degré suivants :

$$\left(\sum_{i=1}^4 n_i^4 \right); (n_1 n_4 n_2 n_5 + n_1 n_4 n_3 n_6 + n_2 n_5 n_3 n_6); (n_1^2 n_4^2 + n_2^2 n_5^2 + n_3^2 n_6^2);$$

$$\{ (n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_1^2 n_5^2 + n_1^2 n_6^2) + (n_2^2 n_3^2 + n_2^2 n_4^2 + n_2^2 n_6^2) + (n_3^2 n_4^2 + n_3^2 n_5^2) +$$

$$(n_4^2 n_5^2 + n_4^2 n_6^2) + n_5^2 n_6^2 \}$$

Le potentiel thermodynamique s'écrit sous une forme contractée :

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{\alpha}{2} \sum_{i=1,6} n_i^2 + \frac{1}{4} \beta_1 \sum_{i=1,6} n_i^4 + \frac{1}{2} \beta_2 (n_1^2 n_4^2 + n_2^2 n_5^2 + n_3^2 n_6^2) + \frac{1}{2} \beta_3 \left\{ \sum_{i<j=1,6} (n_i^2 n_j^2) - n_1^2 n_4^2 - n_2^2 n_5^2 - n_3^2 n_6^2 \right\} + \beta_4 (n_1 n_4 n_2 n_5 + n_1 n_4 n_3 n_6 + n_2 n_5 n_3 n_6) \quad (IV.1)$$

Si l'on pose $n_i = \rho_i \cos \psi_i$ et $n_{i+3} = \rho_i \sin \psi_i$ ($i=1,3$) alors (IV.1) s'écrit :

$$\Phi = h_2 = \Phi_0 + \frac{\alpha}{2} \sum_{i=1,3} \rho_i^2 + \frac{1}{4} \beta_1 \sum_{i=1,3} \rho_i^4 + \frac{1}{4} \beta_2 \sum_{i=1,3} \rho_i^4 \cos^4 \psi_i + \frac{1}{2} \beta_3 \sum_{i<j=1,3} \rho_i^2 \rho_j^2 +$$

$$+ \frac{1}{4} \beta_4 \sum_{i<j} \rho_i^2 \rho_j^2 \sin 2\psi_i \sin 2\psi_j$$

4) Recherche des minima déterminant les solutions stables.

La discussion du potentiel qui a pour but de déterminer les minima absolus correspondant aux phases stables de basse symétrie s'effectue en annulant les dérivées premières puis en étudiant la positivité des mineurs de la matrice des dérivées secondes. Les six solutions stables ainsi trouvées dans le cas du potentiel h_2 sont [9] :

- Solution I : ($\eta 0 00 00$)
- Solution II : ($\eta \eta 00 00$)
- Solution III : ($\eta 0 \eta 0 \eta 0$)
- Solution IV : ($0 \eta 0 \eta 0 \eta$)
- Solution V : ($\eta \eta \eta \eta \eta \eta$)
- Solution VI : ($\eta \eta \bar{\eta} 00$)

5) Identification des groupes spatiaux magnétiques correspondant aux solutions précédentes

L'identification des groupes magnétiques associés aux solutions précédentes s'effectue en deux étapes :

- détermination du changement de symétrie de translation
- détermination du groupe magnétique

Dans le cas de la Solution I, on vérifie aisément à l'aide des matrices de \vec{t}_1, \vec{t}_2 et \vec{t}_3 que les translations $2\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$ correspondent aux nouvelles translations de la phase basse température, celle-ci contenant également l'antittranslation $R\vec{t}_1$.

Le sous-groupe ponctuel G (sous-groupe maximum de matrices laissant invariante la direction de l'espace support de la CI correspondant à la Solution I) est constitué (si l'on considère les propriétés de transformations des matrices (2.1)),

$$E \quad U_z \quad I \quad \sigma_z$$

La maille élémentaire de la phase de basse symétrie correspond aux nouvelles translations primitives :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{t}'_1 = \vec{t}_2 = \left(\frac{-a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2} \right) \\ \vec{t}'_2 = \vec{t}_3 = \left(\frac{a}{2}, \frac{-a}{2}, \frac{a}{2} \right) \\ \vec{t}'_3 = 2\vec{t}_1 + \vec{t}_2 + \vec{t}_3 = (a, a, 0) \end{array} \right.$$

c'est-à-dire à un réseau Monoclinique B (avec un doublement de la maille paramagnétique).

La translation perdue à la transition s'écrit

$$\vec{t}_1 = \frac{\vec{t}'_3 - \vec{t}'_2 - \vec{t}'_1}{2} = \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{-a}{2} \right)$$

Le réseau de Bravais magnétique obtenu en considérant l'antittranslation $R\vec{t}_1$ est le réseau Monoclinique C_c . Les éléments du groupe spatial obtenus à partir du tableau (2.1) :

$$\{E|000\} ; \{U_z|000\} ; \{I|000\} \times \vec{t}_1 ; \{\sigma_z|000\} \times \vec{t}_1$$

constituent le groupe spatial B2/b auquel correspond le groupe de Shubnikov $C_c 2/c$.

De la même façon, nous obtenons les groupes magnétiques de la phase basse symétrie correspondant aux autres solutions stables. on peut résumer ces résultats comme suit:

- I → $C_c 2/c$ (maille x 2)
- II → $C_a mma$ (maille x 4)
- III → $R_I \bar{3}$ (maille x 8)
- IV → $R\bar{3}'$ (maille x 8)
- V → $Im'3$ (maille x 8)
- VI → $I_a \bar{3}am$ (maille x 8)

Les six solutions stables correspondent à des transitions para-antiferromagnétiques

REFERENCES :

1. A.P.Cracknell et A.K.Sedaghat, *J.Phys.C.Solid state Phys.*, 5, 977 (1972)
2. A.P.Cracknell, J.Lorenc et J.A.Prystawa, *J.Phys.C.Solid State Phys.*, 9, 1731 (1976)
3. J.O.Dimmock et R.G.Wheeler, *Phys.Rev.*, 127, n°2, 391 (1962)
4. Yu.I.Sirotin, *Sov.Phys.Crystallo.*, 8, n°2, 195 (1963)
5. O.V.Kovalev, *Sov.Phys.Crystallo.*, 9, 6, 665 (1965)
6. O.V.Kovalev, *Sov.Phys.Solid State*, 5, n°11, 2315 (1964)
7. P.Tolédano et J.C.Tolédano, *Phys.Rev.* B14 , 7, 3097 (1976)
8. P.Tolédano et J.C.Tolédano, *Phys.Rev.* B16 , 1, 386 (1977)
9. J.C.Tolédano et P.Tolédano, *Phys.Rev.* B21 , 3, 1139 (1980)
10. P.Tolédano et J.C.Tolédano, *Phys.Rev.* B25 , 3, 1946 (1982)
11. N.V.Belov, N.N.Neronova et T.S.Smirnova, *Sov.Phys.Crystallo.*, 2, 311 (1957)
12. E.P.Wigner, *Group Theory*, Academic Press, New-York, 1959
13. C.J.Bradley et A.P.Cracknell, *The Mathematical Theory of symmetry in Solids*, Clarendon Press, Oxford 1972
14. J.O.Dimmock et R.G.Wheeler, *J.Phys.Chem.Solids* 23 , 729 (1962)
15. G.Ya.Lyubarskii, *The Application of Group Theory in Physics*, Pergamon Press, New-York, 1960
16. J.Zak, A.Casher, H.Glück et Y.Gur, *The Irreducible Representations of Space Groups*, Benjamin , New-York, 1969
17. O.V.Kovalev, *Sov.Phys.Solid State*, 5, 2309, (1964)
18. P.Tolédano et G.Pascoli, *Ferroelectrics*, 25, 427 (1980)

C H A P I T R E 3

CHANGEMENTS DE RESEAUX DE BRAVAIS QUI ACCOMPAGNENT LES TRANSITIONS PARA - FERROMAGNETIQUES ET PARA - ANTIFERROMAGNETIQUES

Plusieurs auteurs ont abordé la question des changements de réseaux de Bravais qui peuvent se produire lors des transitions de phases structurales. Lifshitz [1] puis Naish et Syromyatnikov [2] ont établi des tables comportant pour chaque modification de structure :

- le réseau de Bravais de la phase de basse symétrie
- la multiplication de la maille cristalline
- les translations primitives de la phase de basse symétrie en fonction des translations primitives de la phase prototype.

Cependant ces auteurs se bornent à des considérations de symétrie et n'abordent pas l'aspect thermodynamique du problème. Dans la référence [3] des tables complètes des modifications structurales sont données ; elles tiennent compte de la non - stabilité éventuelle des phases de basse symétrie. Dans cette référence, tous les changements de réseaux compatibles avec les branches considérées de chaque étoile sont indiqués. Tous ces résultats sont rappelés dans les premières colonnes des Tableaux (3.1).

Dans le cas des transitions para - ferromagnétiques et para - antiferromagnétiques, il faut également considérer les combinaisons de l'opérateur R avec les translations perdues qui laissent invariante la densité de moment magnétique $M(\vec{r})$ si l'on veut également obtenir les antitranslations associées à chaque changement de symétrie. Ces nouvelles antitranslations doivent satisfaire aux équations :

$$e^{i \vec{k} \cdot R \vec{t}_i} = 1 \quad (i=1,3)$$

Les colonnes (g) et (h) du tableau (3.1) indiquent pour tous les points de la zone de Brillouin , les antitranslations correspondantes et les réseaux de Bravais associés.

Le problème de la détermination des changements de réseau de Bravais magnétiques avait été traité en partie par Izyumov et Al [4] . Ces auteurs considèrent les vecteurs \vec{k} sélectionnés par la condition de Lifshitz. Ils obtiennent les translations des réseaux de basse symétrie, les réseaux de Bravais correspondant ainsi que la multiplication de la maille cristalline élémentaire.

Cependant, le travail effectué par ces auteurs comporte les restrictions suivantes:

1. les changements de réseaux associés à $\vec{k} = 0$ sont absents
2. il n'est pas tenu compte de la non-stabilité des phases de basse symétrie. Certains changements cités par ces auteurs sont associés à des transitions vers une phase de basse symétrie instable au voisinage du point de transition.

3. Pour chaque solution envisagée par ces auteurs ne sont mentionnés que les changements vers le réseau le plus symétrique compatible avec le réseau de la phase prototype. Par exemple, au point H du réseau hexagonal P, nous indiquons que trois changements possibles de réseaux sont prédits par la théorie de Landau (Tableau 3.1.3) :

$$\text{Hex P} \rightarrow \text{Hex P}_C$$

$$\text{Hex P} \rightarrow \text{Mo } C_C$$

$$\text{Hex P} \rightarrow \text{Tri P}_S$$

alors qu'Izyumov et Al mentionnent uniquement le changement de réseau :

$$\text{Hex P} \rightarrow \text{Hex P}_C$$

4. Plusieurs changements de réseaux donnés par ces auteurs sont érronés. Ainsi une confusion semble être faite entre les réseaux P_C et P_C pour l'ensemble des systèmes cristallins.

Le tableau (3.1) résume nos résultats. Ce tableau est subdivisé en six sous-tableaux notés de (3.1.1) à (3.1.6) comportant chacun huit colonnes. La première colonne (a) mentionne les points de la zone Brillouin (centre et surface) avec les deux notations des tables de Zak [5] et Kovalev [6] (dans cet ordre). Dans le cas du réseau triclinique, nous reprenons la convention utilisée dans la référence [3]. Dans la colonne (b), sont indiquées les coordonnées du vecteur \vec{k}_j correspondant au point de la zone de Brillouin situé sur la même ligne, exprimées en fonction des translations primitives du réseau réciproque. La colonne (c) donne le groupe d'invariance $G_{\vec{k}_j}$ du vecteur \vec{k}_j précédent. Le nombre maximum de branches de l'étoile de \vec{k}_j figure dans la colonne (d). Dans la colonne (e) sont indiquées les translations primitives de la phase de basse symétrie en fonctions des translations primitives de la phase paramagnétique prototype. S'il existe plusieurs groupes de translations de basse symétrie

pour un même point, ils sont tous indiqués. Dans la colonne (f) on trouve la multiplication de la maille cristalline élémentaire pour chacun des changements précédents. Les antitranslations sont notées dans la colonne (g) en fonction des translations primitives de la phase prototype. Enfin dans la colonne (h), nous donnons les réseaux de Bravais des phases de basse symétrie, classés par symétrie décroissante.

Des tableaux (3.1.1) à (3.1.6) il ressort que quatre types de situations peuvent se produire. Un premier type de transitions magnétiques comprend les transitions accompagnées d'un réarrangement de spins mais sans modification de la maille structurale, il n'y a donc pas de translations perdues lors de la transition et il existe toujours au moins une antitranslation $R\vec{t}_1$. Dans ce cas la transition est toujours accompagnée d'une multiplication de la maille élémentaire (associée à un point de la surface de la zone de Brillouin) et la nouvelle maille magnétique possède les mêmes vecteurs de base que la maille structurale induite par la RI associée à la CI considérée. Nous pouvons citer comme exemple de cette classe de transitions, le changement de réseau de Bravais orthorhombique P \rightarrow orthorhombique P_c au point Y ($\vec{k} = (0, \frac{1}{2}, 0)$) où il existe l'antitranslation $R\vec{t}_2$. Les translations du réseau de basse symétrie sont $\vec{t}'_1 = \vec{t}_1$, $\vec{t}'_2 = 2\vec{t}_2$, $\vec{t}'_3 = \vec{t}_3$; le changement de réseau est alors accompagné d'un doublement de maille. Une deuxième famille de transitions magnétiques comprend les transitions induites par les CI du centre de la zone de Brillouin. Dans ce cas, il n'y a pas de translations perdues mais il y a perte de toutes les antitranslations. L'apparition d'un ordre magnétique crée un abaissement de la symétrie du motif cristallographique sans qu'il y ait réarrangement des positions atomiques dans la maille. Citons comme exemple, le changement Cubique P \rightarrow Quadratique P en centre de zone (sans modification de la maille élémentaire). La transition a alors lieu entre deux classes magnétiques différentes. Un troisième type de transitions magnétiques contient les transitions où il y a simultanément perte de translations et d'antitranslations ce qui exprime un déplacement des atomes et un réarrangement des spins simultanés. De plus, il apparaît de nouvelles antitranslations $R(\vec{t}_i + \vec{t}_j)$ qui impliquent l'existence d'un réseau antiferromagnétique. Ceci est le cas, par exemple au point L du réseau Cubique F où s'effectuent les changements de réseaux de Bravais :

$$\text{Cub F} \rightarrow \text{Cub F}_S$$

$$\text{Cub F} \rightarrow \text{Qua I}_C$$

$$\text{Cub F} \rightarrow \text{Or F}_S$$

(a) (b) (c) (d) (e) (f) (g) (h)

TRICLINIC P

$\Gamma(k_8)$	000	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} \bar{1}1 \cdot \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} 1$	$\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \right\} 2$	1	-	TriP
$A(k_5)$	$\frac{1}{2}00$		$2\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$		$R\vec{t}_1$	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \right\} \text{TriP}_s$	
$B(k_4)$	$\frac{11}{22}0$		$\vec{t}_1 \pm \vec{t}_2, \vec{t}_3$		$R\vec{t}_1, R\vec{t}_2$		
$Y(k_6)$	$0\frac{1}{2}0$		$\vec{t}_1, 2\vec{t}_2, \vec{t}_3$		$R\vec{t}_2$		
$Z(k_7)$	$00\frac{1}{2}$		$\vec{t}_1, \vec{t}_2, 2\vec{t}_3$		$R\vec{t}_3$		
$E(k_3)$	$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$		$\vec{t}_1 \pm \vec{t}_3, \vec{t}_2$		$R\vec{t}_1, R\vec{t}_3$		
$D(k_1)$	$\frac{111}{222}$		$\vec{t}_1 \pm \vec{t}_2, \vec{t}_1, \vec{t}_3$		$R\vec{t}_1, R\vec{t}_2, R\vec{t}_3$		
$C(k_2)$	$0\frac{11}{22}$		$\vec{t}_2 \pm \vec{t}_3, \vec{t}_1$		$R\vec{t}_2, R\vec{t}_3$		

MONOCLINIC P

$\Gamma(k_7)$	000	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} 2 \\ \bar{1}1 \cdot \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} 1$	$\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \right\} 2$	1	-	MoP, TriP
$A(k_{12})$	$\frac{1}{2}00$		$2\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$		$R\vec{t}_1$	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \right\} \text{MoP}_a$	
$B(k_{14})$	$\frac{11}{22}0$		$\vec{t}_1 \pm \vec{t}_2, \vec{t}_3$		$R\vec{t}_1, R\vec{t}_2$		
$Y(k_{13})$	$0\frac{1}{2}0$		$\vec{t}_1, 2\vec{t}_2, \vec{t}_3$		$R\vec{t}_2$		
$Z(k_{11})$	$00\frac{1}{2}$		$\vec{t}_1, \vec{t}_2, 2\vec{t}_3$		$R\vec{t}_3$		
$E(k_8)$	$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$		$\vec{t}_1 \pm \vec{t}_3, \vec{t}_2$		$R\vec{t}_1, R\vec{t}_3$		
$D(k_{10})$	$\frac{111}{222}$		$\vec{t}_1 \pm \vec{t}_3, \vec{t}_1, \vec{t}_2$		$R\vec{t}_1, R\vec{t}_2, R\vec{t}_3$		
$C(k_9)$	$0\frac{11}{22}$		$\vec{t}_2 \pm \vec{t}_3, \vec{t}_1$		$R\vec{t}_2, R\vec{t}_3$		

MONOCLINIC B¹⁾

$\Gamma(k_6)$	000	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} 2 \\ \bar{1}1 \cdot \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} 1$	$\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \right\} 2$	1	-	MoB, TriP		
$Z(k_8)$	$\frac{11}{22}0$		$\vec{t}_1 \pm \vec{t}_2, \vec{t}_3$		$R\vec{t}_1, R\vec{t}_2$	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \right\} \text{MoC}_c$			
$B-$	$\frac{1-11}{2-22}$		$\vec{t}_1 - \vec{t}_3, \vec{t}_2 + \vec{t}_3, \vec{t}_1 - \vec{t}_2$		$R\vec{t}_1, R\vec{t}_2, R\vec{t}_3$				
$A-$	$\frac{1-1}{2-2}0$		$\vec{t}_1 \pm \vec{t}_2, \vec{t}_3$		$R\vec{t}_1, R\vec{t}_2$				
$Y(k_7)$	$00\frac{1}{2}$		$\vec{t}_1, \vec{t}_2, 2\vec{t}_3$		$R\vec{t}_3$				
$C(k_9)$	$\frac{111}{222}$		$\vec{t}_1 - \vec{t}_3, \vec{t}_2 + \vec{t}_3, \vec{t}_1 - \vec{t}_2$		$R\vec{t}_1, R\vec{t}_2, R\vec{t}_3$				
$F(k_4)$	$\frac{1}{2}00$		$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} 2 \\ \bar{1}1 \cdot \\ \\ \end{array} 2$		$2\vec{t}_1, 2\vec{t}_2, \vec{t}_3$		4	$R(\vec{t}_1 + \vec{t}_2)$	MoC _a
$F^-(k_5)$	$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$				$2\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$		$\vec{t}_1 \pm \vec{t}_2, \vec{t}_3$	2	$R\vec{t}_1$
			$\vec{t}_1 \pm \vec{t}_2 + \vec{t}_3, \vec{t}_1 + \vec{t}_2 - \vec{t}_3$	4	$R(\vec{t}_1 + \vec{t}_2), R\vec{t}_3$		MoC _a		
			$\vec{t}_1 \pm \vec{t}_3, \vec{t}_2$	2	$R\vec{t}_1, R\vec{t}_3$	TriP _s			



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
<u>ORTHORHOMBIC P</u>								
$\Gamma(k_{19})$	000	} $m\bar{m}m1'$	} 1	$\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3$	} 1	-	$OrP, MoCP$	
$Z(k_{22})$	$00\frac{1}{2}$			$\bar{t}_1, \bar{t}_2, 2\bar{t}_3$		} 2	$R\bar{t}_3$	OrP_c
$X(k_{20})$	$\frac{1}{2}00$			$2\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3$			$R\bar{t}_1$	OrP_a
$Y(k_{21})$	$0\frac{1}{2}0$			$\bar{t}_1, 2\bar{t}_2, \bar{t}_3$		$R\bar{t}_2$	OrP_c	
$U(k_{24})$	$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$			$\bar{t}_1 \pm \bar{t}_3, \bar{t}_2$		$R\bar{t}_1, R\bar{t}_3$	} MoC_a, MoP_a	
$T(k_{23})$	$0\frac{11}{22}$			$\bar{t}_2 \pm \bar{t}_3, \bar{t}_1$		$R\bar{t}_2, R\bar{t}_3$		OrA_c
$S(k_{25})$	$\frac{11}{22}0$			$\bar{t}_1 \pm \bar{t}_2, \bar{t}_3$		$R\bar{t}_1, R\bar{t}_2$	OrC_a	
$R(k_{26})$	$\frac{111}{222}$	$\bar{t}_1 + \bar{t}_2, \bar{t}_1 + \bar{t}_3, \bar{t}_2 + \bar{t}_3$	} 2	$R\bar{t}_1, R\bar{t}_2, R\bar{t}_3$	OrF_s	} $TriP_s$		
		$\bar{t}_1 \pm \bar{t}_3, \bar{t}_1 + \bar{t}_2$					MoC_a	

ORTHORHOMBIC C²

$\Gamma(k_{14})$	000	} $m\bar{m}m1'$	} 1	$\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3$	} 1	-	OrC, MoP, MoB	
$Y(k_{15})$	$\frac{1}{2}-\frac{1}{2}0$			$\bar{t}_1 \pm \bar{t}_2, \bar{t}_3$		} 2	$R\bar{t}_1, R\bar{t}_2$	OrA, MoP^x, MoB
$Z(k_{16})$	$00\frac{1}{2}$			$\bar{t}_1, \bar{t}_2, 2\bar{t}_3$			$R\bar{t}_3$	OrP_c
$T(k_{17})$	$\frac{1}{2}-\frac{11}{22}$			$\bar{t}_1 \pm \bar{t}_3, \bar{t}_2 - \bar{t}_3$		$R\bar{t}_1, R\bar{t}_2, R\bar{t}_3$	OrC_c	OrA_a, MoP_b, MoC_c
$S(k_{12})$	$\frac{1}{2}00$	} $\frac{2}{m}1'$	} 2	$2\bar{t}_1, 2\bar{t}_2, \bar{t}_3$	4	$R(\bar{t}_1 + \bar{t}_2)$	OrI_c	
				$2\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3$	2	$R\bar{t}_1$	OrC_a	MoP_a
$R(k_{13})$	$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$			$2\bar{t}_1, \bar{t}_1 \pm \bar{t}_2, \bar{t}_3$	4	$R\bar{t}_3, R(\bar{t}_1 + \bar{t}_2)$	OrF_s	$MoC_a, TriP_s$
				$\bar{t}_2, \bar{t}_1 \pm \bar{t}_3$	2	$R\bar{t}_1, R\bar{t}_3$		

ORTHORHOMBIC F

$\Gamma(k_{14})$	000	} $m\bar{m}m1'$	} 1	$\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3$	} 1	-	OrF	
$Z(k_{15})$	$0\frac{11}{22}$			$\bar{t}_2, \bar{t}_1 - \bar{t}_3, \bar{t}_1$		} 2	$R\bar{t}_2, R\bar{t}_3$	MoB
$X(k_{17})$	$\frac{11}{22}0$			$\bar{t}_1, \bar{t}_2 - \bar{t}_3, \bar{t}_2 + \bar{t}_3 - \bar{t}_1$			$R\bar{t}_1, R\bar{t}_2$	OrC_A
$Y(k_{16})$	$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$			$\bar{t}_3, \bar{t}_1 - \bar{t}_2, \bar{t}_1 + \bar{t}_2 - \bar{t}_3$		} 4	$R\bar{t}_1, R\bar{t}_3$	} OrA_C
T	$\frac{11}{22}1$			$\bar{t}_2, \bar{t}_3 - \bar{t}_1, \bar{t}_3 + \bar{t}_1 - \bar{t}_2$			$R\bar{t}_1, R\bar{t}_2$	
$R(k_{10})$	$\frac{111}{222}$	} $\bar{1}1'$	} 4	$2\bar{t}_1, 2\bar{t}_2, 2\bar{t}_3$	} 8	$R(\bar{t}_1 + \bar{t}_2 + \bar{t}_3)$	OrF_s	
				$2\bar{t}_1, 2\bar{t}_2, 2(\bar{t}_1 - \bar{t}_3)$		} 4	$R\bar{t}_1$	} MoC_a
				$\bar{t}_2 \pm \bar{t}_3, 2\bar{t}_1 + \bar{t}_2 + \bar{t}_3$			$R\bar{t}_3$	
				$\bar{t}_1 \pm \bar{t}_2, 2\bar{t}_3 + \bar{t}_1 + \bar{t}_2$		$R\bar{t}_2$	} $TriP_s$	
				$\bar{t}_1 \pm \bar{t}_3, 2\bar{t}_2 + \bar{t}_1 + \bar{t}_3$		$R\bar{t}_1, R\bar{t}_2, R\bar{t}_3$		
				$\bar{t}_1 \pm \bar{t}_3, \bar{t}_1 + \bar{t}_2$	2			



(a) (b) (c) (d) (e) (f) (g) (h)

ORTHORHOMBIC I

$\Gamma(k_{17})$	000	} $m\bar{m}m1'$	1	$\left\{ \begin{array}{l} \bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1, -\bar{t}_2, \bar{t}_1, \bar{t}_3 \\ \bar{t}_2, -\bar{t}_3, \bar{t}_1, \bar{t}_2 \\ \bar{t}_3, -\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3 \end{array} \right\}$	} 1	-	OrI	
$X(k_{18})$	$\frac{111}{2\bar{2}\bar{2}}$						MoB ²	
$U(k_{14})$	$\frac{1}{2}00$	} $\frac{2}{m}1'$	2	$\left[\begin{array}{l} \bar{t}_1, \bar{t}_3, \bar{t}_2, -\bar{t}_3, \bar{t}_1, -\bar{t}_2 \\ 2\bar{t}_1, \bar{t}_3, -\bar{t}_2, \bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ -\bar{t}_3, \bar{t}_2, 2\bar{t}_1, -\bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1, \bar{t}_3, 2\bar{t}_2, -\bar{t}_1, -\bar{t}_3 \\ \bar{t}_2, \bar{t}_1, \bar{t}_3, -\bar{t}_2, \bar{t}_1, -\bar{t}_3 \\ \bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_1, -\bar{t}_2, 2\bar{t}_3 \\ -\bar{t}_3, \bar{t}_1, \bar{t}_3, -\bar{t}_2, \bar{t}_1, \bar{t}_2 \end{array} \right]$	} 2	$R\bar{t}_1, R\bar{t}_2, R\bar{t}_3$	OrP _I	
$T(k_{13})$	$\frac{1}{2}0-\frac{1}{2}$					4	$R(\bar{t}_1, \bar{t}_2), R(\bar{t}_1, \bar{t}_3)$	OrA _C
$S(k_{15})$	$\frac{11}{2\bar{2}}0$					2	$R\bar{t}_1$	MoC _a
						4	$R(\bar{t}_1, \bar{t}_2), R(\bar{t}_2, \bar{t}_3)$	OrA _C
						2	$R\bar{t}_1, R\bar{t}_3$	MoC _C
						4	$R(\bar{t}_1, \bar{t}_3), R(\bar{t}_2, \bar{t}_3)$	OrC _a
$R(k_{16})$	$\frac{31}{44}-\frac{1}{4}$	2221'	} 4	$\left\{ \begin{array}{l} R(\bar{t}_1, \bar{t}_3) \\ R(\bar{t}_1, -\bar{t}_2) \\ R(\bar{t}_3, -\bar{t}_2) \end{array} \right\}$	} OrF _s			



TETRAGONAL P

$\Gamma(k_{17})$	000		$\left\{ \begin{array}{l} \bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1 \pm \bar{t}_3, -(\bar{t}_2 \pm \bar{t}_3) \\ \bar{t}_1 + \bar{t}_2, \bar{t}_1 - \bar{t}_3, \bar{t}_2 + \bar{t}_3 \\ \bar{t}_2 \pm \bar{t}_3, \bar{t}_1 - \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1 \pm \bar{t}_3, \bar{t}_1 + \bar{t}_2 \end{array} \right\}$	1	-	$\left\{ \begin{array}{l} TetP, OrF, OrC_{xy} \\ MoF, MoP_{xy}, TriF \\ TetI_c \\ OrF_s \\ OrI_c \\ MoC_a \\ TetP_c, OrC_a \\ OrP_c, MoP_a \\ TetP_c, OrP_c \\ OrC_c, MoP_b \\ TetP_c \\ OrP_a, MoP_a \\ TetI_c, MoC_a, OrF_s \\ OrA_c, MoC_a, MoP_a \end{array} \right\}$
$A(k_{20})$	$\frac{111}{222}$	$\frac{4}{mmm}1'$		2	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \right\}$
$M(k_{18})$	$\frac{11}{22}0$		$\left\{ \begin{array}{l} \bar{t}_1 \pm \bar{t}_2, \bar{t}_3 \end{array} \right\}$		$R\bar{t}_1, R\bar{t}_2$	$\left\{ \begin{array}{l} TetP_c, OrC_a \\ OrP_c, MoP_a \end{array} \right\}$
$Z(k_{19})$	$00\frac{1}{2}$		$\left\{ \begin{array}{l} \bar{t}_1, \bar{t}_2, 2\bar{t}_3 \end{array} \right\}$		$R\bar{t}_3$	$\left\{ \begin{array}{l} TetP_c, OrP_c \\ OrC_c, MoP_b \end{array} \right\}$
$X(k_{15})$	$0\frac{1}{2}0$	$mmm1'$	$\left\{ \begin{array}{l} 2\bar{t}_1, 2\bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1, 2\bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1 \pm \bar{t}_2, \bar{t}_3, \bar{t}_1 + \bar{t}_2 + \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1, \bar{t}_3 \pm \bar{t}_2 \end{array} \right\}$	4	$R(\bar{t}_1 + \bar{t}_2)$	$TetP_c$
$R(k_{16})$	$0\frac{11}{22}$			2	2	$R\bar{t}_2$
				4	$R(\bar{t}_1 + \bar{t}_2), R\bar{t}_3$	$TetI_c, MoC_a, OrF_s$
				2	$R\bar{t}_2, R\bar{t}_3$	OrA_c, MoC_a, MoP_a

TETRAGONAL I

$\Gamma(k_{14})$	000		$\left\{ \begin{array}{l} \bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1 \pm \bar{t}_3, \bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1, \bar{t}_3, \bar{t}_1 - \bar{t}_2 \\ \bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_1 - \bar{t}_3 \end{array} \right\}$	1	-	$\left\{ \begin{array}{l} TetI, OrI, TriP \\ OrF \\ MoB \\ MoB_{xy} \end{array} \right\}$
$Z(k_{15})$	$\frac{1-1-1}{2\ 2\ 2}$	$\frac{4}{mmm}1'$		2	$R\bar{t}_1, R\bar{t}_2, R\bar{t}_3$	$TetP_I, OrF_I, OrC_A, MoP_C$
$M(-)$	$\frac{111}{222}$		$\left\{ \begin{array}{l} \bar{t}_1 \pm \bar{t}_3, \bar{t}_2 - \bar{t}_3, \bar{t}_1 - \bar{t}_2 \end{array} \right\}$	4	$\left[\begin{array}{l} R(\bar{t}_1 + \bar{t}_3), R(\bar{t}_1 - \bar{t}_2) \\ R(\bar{t}_3 - \bar{t}_2) \end{array} \right]$	$\left\{ \begin{array}{l} TetI_c, OrI_c, OrF_s \\ TetP_c \end{array} \right\}$
$A(k_{12})$	$\frac{31-1}{44\ 4}$	$\bar{4}2m1'$	$\left\{ \begin{array}{l} 2\bar{t}_1 - \bar{t}_2 + \bar{t}_3, \bar{t}_2 + \bar{t}_3, \bar{t}_3 - \bar{t}_1 \end{array} \right\}$	4	$R(\bar{t}_1 + \bar{t}_3), R(\bar{t}_2 + \bar{t}_3)$	$TetP_c$
$X(k_{13})$	$\frac{11}{22}0$	$mmm1'$	$\left\{ \begin{array}{l} \bar{t}_1 \pm \bar{t}_2, 2\bar{t}_3 - \bar{t}_2 + \bar{t}_1 \\ \bar{t}_3, \bar{t}_1 + \bar{t}_2, \bar{t}_3 + \bar{t}_1 - \bar{t}_2 \\ -\bar{t}_3, \bar{t}_1 - \bar{t}_2 + \bar{t}_3, \bar{t}_1 + \bar{t}_2 \end{array} \right\}$	4	$R\bar{t}_1, R\bar{t}_2$	OrC_A, OrA_C MoC_c
$N(k_{11})$	$\frac{1}{2}00$	$\frac{2}{m}1'$	$\left\{ \begin{array}{l} 2\bar{t}_1, 2\bar{t}_2, 2\bar{t}_3 \\ -\bar{t}_3 \pm \bar{t}_2, 2\bar{t}_1 - \bar{t}_2 + \bar{t}_3 \\ 2\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ 2\bar{t}_1, \bar{t}_2, 2\bar{t}_3 \\ 2\bar{t}_1, 2\bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ 2\bar{t}_3, 2(\bar{t}_1 - \bar{t}_2, \bar{t}_3), \bar{t}_2 \end{array} \right\}$	4	$\left[\begin{array}{l} R(\bar{t}_1 + \bar{t}_2) \\ R(\bar{t}_1 + \bar{t}_2), R(\bar{t}_1 + \bar{t}_3) \\ R\bar{t}_1 \\ R(\bar{t}_1 + \bar{t}_2) \\ R\bar{t}_1 \end{array} \right]$	$TetI_c, OrI_c, MoC_a$ OrA_c, OrC_a, MoC_a $MoC_c, TriP_s$ $TriP_s$ $MoC_a, TriP_s$ MoC_a



(a) (b) (c) (d) (e) (f) (g) (h)

RHOMBOHEDRAL R

$\Gamma(k_7)$	000	} $R\bar{3}m1'$	1	} $\left[\begin{array}{l} \bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1, \bar{t}_1 + \bar{t}_2, \bar{t}_3 \end{array} \right]$	} 1	-	} $\left\{ \begin{array}{l} F, TriP \\ MoB \end{array} \right\}$
$Z(k_8)$	$\frac{111}{222}$						
$A(k_4)$	$\frac{1}{2}00$	} $\frac{2}{m}1'$	3	} $\left[\begin{array}{l} 2\bar{t}_1, 2\bar{t}_2, 2\bar{t}_3 \\ 2\bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ \bar{t}_3 \pm \bar{t}_2, \bar{t}_1, \bar{t}_2 - \bar{t}_3 + \bar{t}_1 \\ \pm \bar{t}_1 \mp \bar{t}_2, \bar{t}_1, \bar{t}_2 - \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1 + \bar{t}_2, \bar{t}_3, \bar{t}_2 \pm \bar{t}_3 \end{array} \right]$	} 6	$R(\bar{t}_1 + \bar{t}_2 + \bar{t}_3)$	} F_1
$X(k_5)$	$\frac{0}{2}\frac{1}{2}$						
		} 2	} 2	} $R\bar{t}_2, R\bar{t}_3$	} R	} $TriP_6$	

HEXAGONAL P

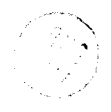
$\Gamma(k_{16})$	000	} $\frac{6}{mmm}1'$	1	} $\left[\begin{array}{l} \bar{t}_1, \bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1 + \bar{t}_2, \bar{t}_1, \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1 + \bar{t}_2, -\bar{t}_2, \bar{t}_3 \end{array} \right]$	} 1	-	} $\left\{ \begin{array}{l} HexP, MoP, TriP \\ OrC, OrA, MoB \end{array} \right\}$
$A(k_{17})$	$00\frac{1}{2}$						
$K(k_{13})$	$\frac{2\bar{1}}{33}0$	} $\bar{6}2m1'$	2	} $\left[\begin{array}{l} \bar{t}_1 - \bar{t}_2, \bar{t}_1, 2\bar{t}_2, \bar{t}_3 \\ \bar{t}_1 - \bar{t}_2, \bar{t}_1, 2\bar{t}_2, 2\bar{t}_3 \end{array} \right]$	} 3	-	} $HexP$
$H(k_{15})$	$\frac{2\bar{1}}{332}$						
$M(k_{12})$	$\frac{1}{2}00$	} $mmm1'$	3	} $\left[\begin{array}{l} \bar{t}_1 \pm \bar{t}_3, \bar{t}_2 \\ \bar{t}_1 \pm \bar{t}_3 + \bar{t}_2, \bar{t}_1 - \bar{t}_3 \end{array} \right]$	} 4	-	} $HexP$
$L(k_{14})$	$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$						
		} 2	} 2	} $R\bar{t}_3$	} $OrP_c, MoP_a, TriP_6$		
							} OrI_c, MoC_a



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
<u>CUBIC P</u>							
$\Gamma(k_{12})$	000	} m3'm	1	} $\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$	1	-	CubP, TetrP, OrP, R
$R(k_{15})$	$\frac{111}{222}$				} $\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_1 + \vec{t}_3, \vec{t}_2 + \vec{t}_3$	2	$R\vec{t}_1, R\vec{t}_2, R\vec{t}_3$
$X(k_{10})$	$0\frac{1}{2}0$	} $\frac{4y}{mmm}1'$	3	} $\left\{ \begin{array}{l} 2\vec{t}_1, 2\vec{t}_2, 2\vec{t}_3 \\ 2\vec{t}_1, \vec{t}_2, 2\vec{t}_3 \\ \vec{t}_1, 2\vec{t}_2, \vec{t}_3 \end{array} \right.$		8	$R(\vec{t}_1 + \vec{t}_2 + \vec{t}_3)$
$M(k_{11})$	$\frac{11}{22}0$				} $\frac{4z}{mmm}1'$	3	} $\left\{ \begin{array}{l} \vec{t}_2 + \vec{t}_1, \vec{t}_3, \vec{t}_1 + \vec{t}_3 - \vec{t}_2 \\ \vec{t}_1 + \vec{t}_2, \vec{t}_3 \end{array} \right.$
		2	$R\vec{t}_2$	TetrP _C , OrP _a , OrC _C			
					4	-	CubI, R, TetrI
					2	$R\vec{t}_1, R\vec{t}_2$	TetrP _C , OrC _a , OrP _C , MoP _C

<u>CUBIC F</u>							
$\Gamma(k_{11})$	000	m3'm	1	$\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$	1	-	CubF, R, TetrI, OrF
$X(k_{10})$	$\frac{11}{22}0$	} $\frac{4y}{mmm}1'$	3	} $\left\{ \begin{array}{l} \vec{t}_1 + \vec{t}_2, \vec{t}_3, \vec{t}_2 + \vec{t}_3 - \vec{t}_1 \\ \vec{t}_2 - \vec{t}_1, \vec{t}_3, \vec{t}_1 + \vec{t}_2 - \vec{t}_3 \end{array} \right.$	4	-	CubP, R, TetrP, MoC
					2	$R\vec{t}_1, R\vec{t}_2$	TetrP _I , OrP _I , OrC _A
$L(k_9)$	$\frac{111}{222}$	} $3_{xyz}m1'$	4	} $\left\{ \begin{array}{l} 2\vec{t}_1, 2\vec{t}_2, 2\vec{t}_3 \\ \vec{t}_3 + \vec{t}_1, \vec{t}_1 + \vec{t}_2 \end{array} \right.$	8	$R(\vec{t}_1 + \vec{t}_2 + \vec{t}_3)$	CubF ₈ , TetrI _C , OrF ₈
					2	$R\vec{t}_1, R\vec{t}_2, R\vec{t}_3$	R _I , TriP ₈
					4	$R\vec{t}_3$	OrC _a , MoC _a
$W(k_8)$	$\frac{311}{424}$	} $4_x2m1'$	6	} $\left\{ \begin{array}{l} 2(\vec{t}_1 + \vec{t}_2 + \vec{t}_3), -2\vec{t}_1 + 2\vec{t}_2 + 2\vec{t}_3 \\ 2\vec{t}_1 - \vec{t}_2, \vec{t}_1 + \vec{t}_3, 2\vec{t}_3 - \vec{t}_2 \end{array} \right.$	32	$R(\vec{t}_1 + \vec{t}_2 + \vec{t}_3)$	CubP _I
					4	$R2\vec{t}_1, R\vec{t}_2, R2\vec{t}_3$	TetrI _C

<u>CUBIC I</u>							
$\Gamma(k_{11})$	000	} m3'm	1	} $\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$	1	-	} $\left\{ \begin{array}{l} \text{CubI, R} \\ \text{TetrI, OrI} \end{array} \right.$
$H(k_{12})$	$\frac{111}{222}$				} $\vec{t}_1 + \vec{t}_3, \vec{t}_1 + \vec{t}_2, \vec{t}_2 + \vec{t}_3$	2	
$P(k_{10})$	$\frac{111}{444}$	} 4_3m	2	} $\left\{ \begin{array}{l} 2\vec{t}_1 + \vec{t}_2 + \vec{t}_3, \vec{t}_3 - \vec{t}_2, \vec{t}_1 - \vec{t}_3 \\ \vec{t}_1 - \vec{t}_2, \vec{t}_1 - \vec{t}_3, 2\vec{t}_1 + \vec{t}_2 + \vec{t}_3 \end{array} \right.$		} 4	} $\left\{ \begin{array}{l} R(\vec{t}_1 + \vec{t}_2), R(\vec{t}_1 + \vec{t}_3), \\ R(\vec{t}_2 + \vec{t}_3) \end{array} \right.$
$N(k_9)$	$\frac{1}{2}00$	} mmm _{xy}	6	} $\left\{ \begin{array}{l} 2\vec{t}_1, 2\vec{t}_2, 2\vec{t}_3 \\ \vec{t}_3 + \vec{t}_2, 2\vec{t}_1, \vec{t}_2 + \vec{t}_3 \\ 2\vec{t}_1 + \vec{t}_2 + \vec{t}_3, \vec{t}_2, \vec{t}_3 \end{array} \right.$	} 8	} $\left\{ \begin{array}{l} - \\ R(\vec{t}_1 + \vec{t}_2 + \vec{t}_3) \\ R(\vec{t}_1 + \vec{t}_3) \end{array} \right.$	} $\left\{ \begin{array}{l} \text{CubI, R} \\ R_I \\ \text{TetrI}_c, \text{OrI}_c \end{array} \right.$
					2	$R\vec{t}_1$	MoC _C , OrC _A



Les translations \vec{t}_1 , \vec{t}_2 et \vec{t}_3 sont perdues ainsi que les anti-translations $R\vec{t}_1$, $R\vec{t}_2$ et $R\vec{t}_3$. Cependant il apparait l'antitranslation $R(\vec{t}_1 + \vec{t}_2 + \vec{t}_3)$ qui correspond à l'existence des réseaux antiferromagnétiques Orthorhombique F_s , Quadratique I_c et Cubique F_s .

Enfin une quatrième classe de transitions comprend des changements s'effectuant en des points de la surface de la zone de Brillouin pour lesquels les réseaux de basse symétrie ne comportent aucune antitranslation. La maille magnétique possède les mêmes vecteurs de base que la maille structurale induite par la RI associée à la CI considérée. Il y a aussi perte de translations qui conduit à un abaissement de la symétrie du motif. Citons comme exemple le changement de réseau cubique $I \rightarrow$ Rhomboédrique R au point N de coordonnées $(\frac{1}{2}, 0, 0)$ qui est accompagné d'une multiplication de la maille élémentaire par 8

En résumé, les deux premières familles de changements de réseaux de Bravais sont associées à des transitions purement magnétiques puisque il n'y a pas de translations perdues. Au contraire, les deux dernières sont associées à des transitions simultanément structurales et magnétiques car les transitions sont accompagnées à la fois d'une perte de translations et d'antitranslations.

Ci-dessous, nous établissons quatre tableaux (3.2.A) - (3.2.D) correspondant respectivement aux quatre types de changements de réseaux décrits précédemment. Chaque tableau comporte trois colonnes. La colonne (a) indique le réseau de Bravais de haute symétrie, la colonne (b) le réseau de Bravais de basse symétrie et la colonne (c) les points de la zone de Brillouin associés aux changements de réseaux de Bravais. Remarquons que les changements de réseaux de Bravais indiqués dans les tableaux (3.2.A) et (3.2.C) sont toujours reliés à des transitions para-antiferromagnétiques tandis que les tableaux (3.2.B) et (3.2.D) contiennent des transitions para-ferromagnétiques et para-antiferromagnétiques. On peut remarquer ainsi que les changements de réseaux du premier type décrits ci-dessus sont prédominants.

(a)	(b)	(c)
TriP	TriP _a	A, U, Y, Z, E, D, C
MoP	MoP _a	A, B, Y
	MoP _b	Z
	MoC _a	E
	MoC _a , TriP _a	D, C
MoB	MoP _c	Z, A
	MoC _c	B, Y, C
	TriP _a	FF*
OrP	OrP _c	Z, Y
	OrP _a	X
	OrC _a	U
	OrA _c	T
	OrC _a	S
	OrF _a , MoC _a , TriP _a	R
OrC	OrP _c	Y
	OrC _c , OrA _a , MoP _b , MoC _c	Z
	OrI _c , OrI _a , MoC _c	T
	MoP _a	S
	MoC _a , TriP _a	R
OrF	OrC _A	Z
	OrA _C	X, Y, T
	MoC _a , TriP _a	R
OrI	OrP _I	X
	MoC _a	U
	MoC _c	T, S

(a)	(b)	(c)
TetrP	TetrI _c , OrF _a , OrI _c , MoC _a	A
	TetrP _c , OrC _a , OrP _c , MoP _a	M
	TetrP _c , OrP _c , OrC _c , MoP _b	Z
	OrP _a , MoP _a	X
TetrI	OrA _c , MoP _a , MoC _a	R
	TetrP _I , OrP _I , OrC _A , MoP _C	M, Z
	OrC _A , OrA _C , MoC _c	X
	MoC _c , MoC _a , TriP _a	N
RhR	RhR _I , MoC _c , TriP _a	Z
	MoC _c , TriP _a	A
	MoP _C , TriP _a	X
HexP	HexP _c , OrA _c , MoC _c , MoP _b , OrC _c , TriP _a	A
	HexP _c , MoC _c , TriP _a	H
	OrP _c , MoP _a , TriP _a	M
	HexP _c , OrI _c , MoC _a , TriP _a	L
CubP	CubF _a , TetrI _c , RhR _I , OrF _a , TriP _a	R
	TetrP _c , OrP _a , OrC _c	X
CubF	TetrP _c , OrC _a , OrP _c , MoP _c	M
	TetrP _I , OrP _I , OrC _A	X
CubI	RhR _I , TriP _a , OrC _a , MoC _a	L
	CubP _I , RhR _I , TetrP _I , OrP _I	H
	OrC _A , MoC _c	N

TABLEAU 3.2.A: Changements de réseaux purement magnétiques sans modification de la maille cristalline (surface de la zone de Brillouin)



(a) (b) (c)

TriP	TriP			
MoP	MoP, TriP			
MoB	MoB, TriP			
OrP	OrP, MoP			
OrC	OrC, OrA, MoB, MoP			
OrF	OrF, MoB			
OrI	OrI, MoB			
TetrP	TetrP, OrP, OrC, MoB, MoP, TriP	Γ		
TetrI	TetrI, OrI, OrF, MoB, TriP			
RhR	RhR, MoB, TriP			
HexP	HexP, OrC, OrA, MoB, MoP, TriP			
CubP	CubP, TetrP, OrP, RhR			
CubF	CubF, RhR, TetrI, OrF			
CubI	CubI, RhR, TetrI, OrI			

TABLEAU 3.2.B: Changements de réseaux purement magnétiques sans modification de la maille cristalline (centre de la zone de Brillouin)

MoB	MoC _a	FF*	RhR	RhR	X
OrC	OrC _a	S	HexP	HexP	K, M
OrF	OrF _a	R	CubP	CubI, RhR, TetrI	M
OrI	OrI _a , MoC _a	R	CubF	CubP, RhR, TetrP	X
TetrP	OrA _c	U, T	CubI	CubI, RhR	N
TetrI	OrC _a	S			
	OrF _a	R			
	TetrPC	X			
	TetrI _c , MoC _a , OrF _a	R			
	TetrI _c , OrI _c , OrF _a	A			
	TetrPC	X			
	TetrI _c , OrI _c , MoC _a , OrA _c	N			
	OrC _a , TriP _a				
RhR	RhR _I	A			
CubP	CubP _I , RhR _I , TetrP _C	X			
CubF	CubF _a , TetrI _c , OrF _a	L			
	CubP _I , TetrI _C	W			
	CubF _B , TetrI _C , OrF _B , MoC _a	P			
	RhR _I , TetrI _C , TetrP _C , OrC _a	N			
	OrI _C				

TABLEAU 3.2.D: Changements de réseaux simultanément structuraux et magnétiques sans nouvelles antitranslations.

TABLEAU 3.2.C: Changements de réseaux simultanément structuraux et magnétiques avec apparition de nouvelles antitranslations



REFERENCES :

1. E.M.Lifshitz, Z.Eksp.Teor.Fisiki 11,255(1941)
2. V.E.Naish et V.N.Syromyatnikov, Sov.Phys.Crystallo., 21,n°6,627(1976)
3. P.Tolédano, Thèse d'état, Université de Picardie (1979)
4. Yu.A.Yzyumov, V.E.Naish et V.N.Syromyatnikov, J.Magn. and Magnet.Material, 12, 249(1979)
5. J.Zak, A.Casher, H.Glück and Y.Gur, The Irreducible Representations of Space Groups Benjamin, New-York, 1969
6. O.V.Kovalev, Irreducible Representations of Space Groups, Gordon and Breach, New-York, 1965

C H A P I T R E 4

ENERGIES LIBRES DES TRANSITIONS DE PHASES FERROMAGNETIQUES ET ANTIFERROMAGNETIQUES

I. Introduction

Dans ce chapitre nous donnons la liste des énergies libres de Landau et des images qui leurs sont associées. Ces données complètent les tableaux de résultats qui figurent au chapitre 5 dans lesquels on peut trouver l'ensemble des changements de symétrie para-ferromagnétiques et para-antiferromagnétiques, ainsi que les images associées aux CI qui induisent les transitions. La construction des potentiels thermodynamiques a été effectuée dans les références [1-4] pour les transitions structurales. Nous avons pu vérifier que ces potentiels étaient globalement identiques pour les transitions magnétiques, à l'exception de certains potentiels associés à des paramètres d'ordre à six composantes.

L'énergie libre de Landau associée à une transition de phases à partir d'une phase paramagnétique, est composée d'invariants pairs du paramètre d'ordre. Ce développement est tronqué à l'ordre le plus bas déterminant une brisure de la symétrie magnétique. Comme on peut le voir dans la table 4.1, l'énergie libre de Landau n'est pas toujours limitée au quatrième degré du paramètre d'ordre pour les coreprésentations actives multidimensionnelles. Il est en effet nécessaire dans certains cas de prendre en compte des invariants du sixième et du douzième degré. Par exemple, pour l'énergie libre associée au paramètre d'ordre à quatre composantes f_8 , les solutions stables I et II nécessitent la prise en compte de termes du quatrième degré, alors que pour exprimer la stabilité des solutions V et VI on doit prendre en compte des termes de degré 6.

D'autre part, le fait que l'on tronque le potentiel thermodynamique du cristal à un ordre donné, explique pourquoi plusieurs images peuvent être associées à une même énergie libre. En effet chaque image traduit la symétrie d'un potentiel thermodynamique pour un nombre infini de termes.

II. Commentaires des tables

Dans les tables 4.1.1 à 4.1.5, on trouve 36 énergies libres distinctes associées à 53 images. Le développement de l'énergie libre est donné explicitement dans la colonne (b), la colonne (a) indique l'appellation adoptée. Les images associées aux différents potentiels thermodynamiques sont mentionnées dans la colonne (c). Les colonnes (d) et (e) donnent respectivement le nombre de solutions stables, et la direction de stabilité dans l'espace des composantes du paramètre d'ordre. Ainsi nous trouvons une énergie libre unidimensionnelle unique associée à une seule solution stable. Le nombre d'énergies libres bidimensionnelles et tridimensionnelles est respectivement 8 et 1, il leur correspond généralement une ou deux solutions stables. Enfin, il existe respectivement 16 énergies libres de dimension 4, et 5 énergies libres de dimension 6 et 8. Pour ces énergies libres, le nombre de solutions stables varie de 1 à 7.

III. Remarques

Certaines solutions stables ne sont pas déterminées par symétrie. Dans ce cas, la direction (dans l'espace des composantes du paramètre d'ordre) qui correspond à un minimum du potentiel thermodynamique n'est pas obtenue algébriquement. Le changement de symétrie est alors déterminé en considérant une direction de stabilité particulière. Cette situation se rencontre dans les potentiels suivants :

$$d_1, d_3, d_5, f_6, f_6', f_7, f_8', f_9, f_9', f_{10}, f_{11}, f_{12}, f_{13}, h_4, h_5, k_1', k_2'$$

Le seul résultat notable de l'introduction de l'opération R dans le groupe d'invariance (paramagnétique) des énergies libres associées aux transitions ferromagnétiques et antiferromagnétiques, est de modifier certaines images et potentiels correspondant à des paramètres d'ordre à trois et six composantes. En effet, outre la disparition déjà mentionnée des invariants impairs (cubiques), la présence de R contribue parfois à réduire le nombre d'invariants anisotropes de degré 4 ou 6. Dans les tables ci-dessous, nous indiquons ces modifications. Elles correspondent à deux situations distinctes. D'une part les images et énergies libres correspondant à des RI

éliminées par le critère de Landau sont ici associées à des énergies libres qui se transforment comme des coreprésentations irréductibles qui satisfont ce critère. D'autre part, certaines images associées à des RI qui vérifient ce critère de Landau sont modifiées par la prise en compte de R .

$$T \times R = T_h$$

$$T_d \times R = O_h$$

$$LL1 \times R = L_4$$

$$LL2 \times R = L_{11}$$

$$LL3 \times R = L_{13}$$

$$LL4 \times R = L_8$$

$$LL5 \times R = L_7$$

$$LL6 \times R = L_8$$

$$LL7 \times R = L_{12}$$

$$LL8 \times R = L_7$$

TABLE 4.2.a

$$O \times R = O_h$$

$$L_5 \times R = L_{11}$$

$$L_6 \times R = L_4$$

TABLE 4.2.b

(Les images associées aux RI ne vérifiant pas le critère de Landau sont données dans la référence [5] où elles sont notées de LL1 à LL8)
 En conclusion, notons que par comparaison avec les transitions structurales, l'ensemble des images associées aux transitions magnétiques s'est enrichi de trois nouvelles images qui sont : L_{11} , L_{12} et L_{13} .

(b)

(c)

(d)

(e)

paramètre d'ordre à 1 composante

$$\frac{1}{2} \alpha n^2 + \frac{1}{4} \beta n^4$$

C₁

1

I(1)

paramètre d'ordre à 2 composantes

$$\frac{1}{2} \alpha (n^2 + \xi^2) + \frac{1}{4} \beta_1 (n^4 + \xi^4) + \frac{1}{2} \beta_2 n^2 \cdot \xi^2$$

C_{4v}

2

{ I(10)
II(11)

$$\frac{1}{2} \alpha (n^2 + \xi^2) + \frac{1}{4} \beta_1 (n^4 + \xi^4) + \frac{1}{2} \beta_2 n^2 \cdot \xi^2 + \beta_3 n \xi (n^2 - \xi^2)$$

C₄

1

I(11)

$$\frac{1}{2} \alpha (n^2 + \xi^2) + \frac{1}{4} \beta (n^2 + \xi^2)^2 + \frac{1}{6} \gamma_1 (n^2 + \xi^2)^3 + \frac{1}{6} \gamma_2 (n^2 - \xi^2)^3$$

C₆

1

I(nξ)

$$\frac{1}{2} \alpha \rho^2 + \frac{1}{4} \beta \rho^4 + \frac{1}{6} \gamma_1 \rho^6 + \frac{1}{6} \gamma_2 \rho^6 \cos 6\psi$$

C_{6v}

2

{ I(10)
II(01)

$$\frac{1}{2} \alpha \rho^2 + \frac{1}{4} \beta \rho^4 + \frac{1}{6} \gamma \rho^6 + \frac{1}{8} \delta_1 \rho^8 + \frac{1}{8} \delta_2 \rho^8 \cos 8\psi + \frac{1}{8} \delta_3 \rho^8 \sin 8\psi$$

C₈

1

I(nξ)

$$\frac{1}{2} \alpha \rho^2 + \frac{1}{4} \beta \rho^4 + \frac{1}{6} \gamma \rho^6 + \frac{1}{8} \delta_1 \rho^8 + \frac{1}{8} \delta_2 \rho^8 \cos 8\psi$$

C_{8v}

2

{ I(10)
II(cos $\frac{\pi}{8}$, sin $\frac{\pi}{8}$)

$$\frac{1}{2} \alpha \rho^2 + \frac{1}{4} \beta \rho^4 + \frac{1}{6} \gamma_1 \rho^6 + \frac{1}{8} \delta \rho^8 + \frac{1}{10} \epsilon \rho^{10} + \frac{1}{12} \nu_1 \rho^{12} + \frac{1}{12} \nu_2 \rho^{12} \cos 12\psi + \frac{1}{12} \nu_3 \rho^{12} \sin 12\psi$$

C₁₂

1

I(nξ)

$$\frac{1}{2} \alpha \rho^2 + \frac{1}{4} \beta \rho^4 + \frac{1}{6} \gamma \rho^6 + \frac{1}{8} \delta \rho^8 + \frac{1}{10} \epsilon \rho^{10} + \frac{1}{12} \nu_1 \rho^{12} + \frac{1}{12} \nu_2 \rho^{12} \cos 12\psi$$

C_{12v}

2

{ I(10)
II(11)

paramètre d'ordre à 3 composantes

$$\frac{1}{2} \alpha \left(\sum_{j=1,3} n_j^2 \right) + \frac{1}{4} \beta_1 \sum_{j=1,3} n_j^4 + \frac{1}{2} \beta_2 \sum_{j < k=1,3} n_j^2 n_k^2$$

T, T_d, T_h, O, O_h

2

{ I(100)
II(111)



(b)

(c)

(d)

(e)

paramètre d'ordre à 4 composantes

$\frac{1}{2} \alpha \left(\sum_{j=1,4} n_j^2 \right) + \frac{1}{4} \beta_1 \sum_{j=1,4} n_j^4 + \frac{1}{2} \beta_2 \left[(n_1^2 n_2^2 + n_3^2 n_4^2) + (n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_4^2) + (n_1^2 n_4^2 + n_2^2 n_3^2) \right]$	<p>115.01.110.1 108.01</p>	<p>2 { I (1 0 0 0) II (1 1 1 1)</p>
$\frac{1}{2} \alpha \left(\sum_{i=1,4} n_i^2 \right) + \frac{1}{4} \beta_1 \sum_{i=1,4} n_i^4 + \frac{1}{2} \beta_2 (n_1^2 n_2^2 + n_3^2 n_4^2) + \frac{1}{2} \beta_3 (n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_4^2 + n_1^2 n_4^2 + n_2^2 n_3^2)$	<p>101.01.80.01 59.1</p>	<p>4 { I (1 0 0 0) II (1 1 0 0) III (1 0 1 0) IV (1 1 1 1)</p>
$\frac{1}{2} \alpha \left(\sum_{i=1,4} n_i^2 \right) + \frac{1}{4} \beta_1 \sum_{i=1,4} n_i^4 + \frac{1}{2} \beta_2 (n_1^2 n_2^2 + n_3^2 n_4^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_4^2 + n_1^2 n_4^2 + n_2^2 n_3^2) + \beta_3 n_1 n_2 n_3 n_4$	<p>109.01.95.1</p>	<p>3 { I (1 0 0 0) II (1 1 1 1) III (1 1 1 1)</p>
$\frac{1}{2} \alpha \left(\sum_{i=1,4} n_i^2 \right) + \frac{1}{4} \beta_1 \sum_{i=1,4} n_i^4 + \frac{1}{2} \beta_2 (n_1^2 n_2^2 + n_3^2 n_4^2) + \frac{1}{2} \beta_3 (n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_4^2) + \frac{1}{2} \beta_4 (n_1^2 n_4^2 + n_2^2 n_3^2)$	<p>82.01.58.01</p>	<p>5 { I (1 0 0 0) II (1 1 0 0) III (1 0 1 0) IV (1 0 0 1) V (1 1 1 1)</p>
$\frac{1}{2} \alpha \left(\sum_{i=1,4} n_i^2 \right) + \frac{1}{4} \beta_1 \sum_{i=1,4} n_i^4 + \frac{1}{2} \beta_2 (n_1^2 n_2^2 + n_3^2 n_4^2) + \frac{1}{2} \beta_3 (n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_4^2) + \frac{1}{2} \beta_4 (n_1^2 n_4^2 + n_2^2 n_3^2) + \frac{1}{2} \beta_5 n_1 n_2 n_3 n_4$	<p>56.1</p>	<p>6 { I (1 0 0 0) II (1 1 0 0) III (1 0 1 0) IV (1 0 0 1) V (1 1 1 1) VI (1 1 1 -1)</p>
$\frac{1}{2} \alpha \sum_{i=1,2} \rho_i^2 + \beta (\rho_1^2 + \rho_2^2)^2 + \text{degre } 6.$	<p>98.1</p>	<p>2 { I (n ξ 0 0) II (n ξ ξ n)</p>
$\frac{1}{2} \alpha \sum_{i=1,2} \rho_i^2 + \beta (\rho_1^2 + \rho_2^2)^2 + \text{degre } 6.$	<p>49.1</p>	<p>1 I (n ξ n' ξ')</p>
$\frac{1}{2} \alpha \sum_{i=1,2} \rho_i^2 + \beta (\rho_1^4 + \rho_2^4); \rho_1^2 \rho_2^2 + \text{degre } 6$	<p>85.1</p>	<p>2 { I (n ξ 0 0) II (n ξ ξ n)</p>



(h)

(c)

(d)

(e)

Paramètre d'ordre à 4 composantes (suite)

$$\frac{1}{2} \alpha \sum_{i=1,2} \rho_i^2 + \beta_1 (\rho_1^4 + \rho_2^4) + \beta_2 \rho_1^2 \rho_2^2 + \beta_3 \rho_1^2 \rho_2^2 \cos 2(\phi_1 - \phi_2) + \text{degre } 12.$$

74.1

6

- I (1 0 0 0)
- II (1 1 0 0)
- III (1 0 1 0)
- IV (0 1 0 1)
- V (1 1 1 -1)
- VI (1 1 -1 1)

$$\frac{1}{2} \alpha \sum_{i=1,2} \rho_i^2 + \beta_1 (\rho_1^4 + \rho_2^4) + \beta_2 \rho_1^2 \rho_2^2 + \beta_3 \rho_1^2 \rho_2^2 \cos 2(\phi_1 - \phi_2)$$

42.1

3

- I (n ξ 0 0)
- II (n ξ n ξ)
- III (n ξ ξ -n)

+ degre 12

$$f_B + \beta \rho_1^2 \rho_2^2 \sin 2(\phi_1 - \phi_2) + \text{degre } 12$$

44.1

3

- I (n ξ 0 0)
- II (n ξ n -ξ)
- III (n ξ -n ξ)

$$f_B + \beta \rho_1^2 \rho_2^2 \sin 2(\phi_1 - \phi_2) + \text{degre } 6$$

48.1

2

- I (n ξ 0 0)
- II (n ξ ξ n)

$$\left[\begin{aligned} & \frac{1}{2} \alpha \left(\sum_{i=1,4} n_i^2 \right) + \frac{1}{4} \beta_1 \sum_{i=1,4} n_i^4 \\ & + \frac{1}{2} \beta_2 (n_1^2 n_2^2 + n_3^2 n_4^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_4^2 + n_1^2 n_4^2 + n_2^2 n_3^2) + \beta_3 n_1 n_2 n_3 n_4 \\ & + \beta_4 (n_1 \xi_1 (n_1 n_2 + \xi_1 \xi_2 + n_2^2 - \xi_2^2 + n_1 \xi_2 - n_2 \xi_1) \\ & \quad - n_2 \xi_2 (n_1 n_2 + \xi_1 \xi_2 - n_1^2 + \xi_1^2 - n_1 \xi_2 + n_2 \xi_1)) \\ & + \beta_5 (n_1 \xi_1 (n_1^2 - \xi_1^2) + n_2 \xi_2 (n_2^2 - \xi_2^2) + n_1 n_2 (n_1^2 - n_2^2) \\ & \quad - \xi_1 \xi_2 (\xi_1^2 - \xi_2^2) + n_1 \xi_2 (n_1^2 - \xi_1^2) - n_2 \xi_1 (n_2^2 - \xi_2^2)) \end{aligned} \right]$$

49.2

1

- I (n ξ ξ ξ)

$$f_g + \beta_1 \rho_1 \rho_2 (\rho_1^2 - \rho_2^2) \cos(\phi_1 - \phi_2) + \beta_2 \rho_1 \rho_2 (\rho_1^2 - \rho_2^2) \sin(\phi_1 - \phi_2)$$

21.1

1

- I (n ξ n' ξ')

+ termes de degre 6



$$\begin{aligned} f_B + \beta_1 \sum_{i=1,2} \rho_i^4 \cos 4\phi_i + \beta_2 \sum_{i=1,2} \rho_i^4 \sin 4\phi_i + \beta_3 \rho_1^2 \rho_2^2 \cos 2(\phi_1 + \phi_2) \\ + \beta_4 \rho_1^2 \rho_2^2 \sin 2(\phi_1 + \phi_2) \end{aligned}$$

26.1

2

- I (n ξ 0 0)
- II (n ξ ξ -n)

12:

(b)

(c)

(d)

(e)

paramètre d'ordre à 4 composantes(suite)

$$f_{12} = \beta_1(\rho_1^3 \rho_2 \cos(3\phi_1 - \phi_2) - \rho_2^3 \rho_1 \cos(3\phi_2 - \phi_1))$$

$$+ \beta_2(\rho_1^3 \rho_2 \sin(3\phi_1 - \phi_2) - \rho_2^3 \rho_1 \sin(3\phi_2 - \phi_1))$$

$$+ \beta_3 \rho_1 \rho_2 (\rho_1^2 - \rho_2^2) \cos(\phi_1 + \phi_2)$$

$$+ \beta_4 \rho_1 \rho_2 (\rho_1^2 - \rho_2^2) \sin(\phi_1 + \phi_2)$$

13.1

1

I (η ξ η' ξ')

paramètre d'ordre à 6 composantes

$$\frac{\alpha}{2} \sum_{i=1,3} \rho_i^2 + \frac{1}{4} \beta_1 \sum_{i=1,3} \rho_i^4 + \frac{1}{4} \beta_2 \sum_{i=1,3} \rho_i^4 \cos 4\psi_i + \frac{1}{2} \beta_3 \sum_{i < j=1,3} \rho_i^2 \rho_j^2$$

• termes de degré 6

$L_1 \cdot L_2 \cdot L_3 \cdot L_5 \cdot L_{11} \cdot L_{12}$

5

I (10 00 00)
II(11 00 00)
III(10 10 10)
IV(01 01 01)
V(11 11 11)

$$h_1 + \beta \sum_{i < j} \rho_i^2 \rho_j^2 \sin 2\psi_i \sin 2\psi_j$$

$L_4 \cdot L_6 \cdot L_8$

6

I(10 00 00)
II(11 00 00)
III(10 10 10)
IV(01 01 01)
V(11 11 11)
VI(11 11 00)

$$h_2 + \beta \sum_{i=1,3} \rho_i^2 \rho_{i+1}^2 (\sin 2\psi_i - \sin 2\psi_{i+1})$$

L_7

7

I (10 00 00)
II(11 00 00)
III(10 10 10)
IV(01 01 01)
V(11 11 11)
VI(11 11 00)
VII(11 11 00)

$$h_2 + \beta_1 \sum_{i,j} \rho_i^2 \rho_j^2 \cos 2\psi_i \cos 2\psi_j + \beta_2 \sum_{i,j} \rho_i^2 \rho_{i+1}^2 (\cos 2\psi_i - \cos 2\psi_{i+1})$$

L_9

6

I (10 00 00)
II(11 00 00)
III(10 10 10)
IV(01 01 01)
V(11 11 11)
VI(ηξ ξ-ξ 00)

$$h_4 + \beta_1 \sum_i \rho_i^4 \sin 4\psi_i + \beta_2 \sum_{i,j} \rho_i^2 \rho_j^2 \sin 2(\psi_i + \psi_j)$$

$$+ \beta_3 \sum_i \rho_i^2 \rho_{i+1}^4 (\sin 2\psi_i - \sin 2\psi_{i+1})$$

L_{10}

3

I (ηξ 00 00)
II(ηξ ξ-η 00)
III(ηξ ηξ ηξ)

$$\frac{1}{2} \alpha (\sum_{i=1}^6 n_i^2) + \gamma_1 (n_1 n_3 n_5 - n_2 n_4 n_5 - n_2 n_3 n_6 - n_1 n_4 n_6)$$

$$+ \gamma_2 (n_2 n_4 n_6 - n_1 n_3 n_6 - n_1 n_4 n_5 - n_2 n_3 n_5)$$

$$+ \frac{1}{4} \beta_1 (\sum_{i=1}^6 n_i^2) + \frac{1}{2} \beta_2 (n_1^2 n_2^2 \cdot n_3^2 n_4^2 \cdot n_5^2 n_6^2)$$

$$+ \frac{1}{2} \beta_3 (n_1^2 n_3^2 \cdot n_2^2 n_4^2 \cdot n_3^2 n_5^2 \cdot n_2^2 n_6^2 \cdot n_1^2 n_4^2 \cdot n_4^2 n_6^2 \cdot n_1^2 n_5^2 \cdot n_1^2 n_6^2 \cdot n_2^2 n_6^2 \cdot n_2^2 n_5^2 \cdot n_4^2 n_5^2)$$

$$+ \beta_4 (n_1^3 n_2 - n_1 n_2^3 \cdot n_3^3 n_4 - n_4 n_3^3 \cdot n_5^3 n_6 - n_6^3 n_5)$$

L_{13}

5

I(10 00 00)
II(11 00 00)
III(10 10 10)
IV(01 01 01)
V(11 11 11)



(b)

(c)

(d)

(e)

paramètre d'ordre à 8 composantes

$\frac{\alpha}{2} \sum_{i=1,4} \rho_i^2 + \frac{1}{4} \beta_1 \rho_i^4 + \frac{1}{2} \epsilon_2 \sum_{i < j} \rho_i^2 \rho_j^2 + \frac{1}{2} \beta_3 \sum_{i,j} \rho_i^2 \rho_j^2 \cos^2(\psi_i - \psi_j)$ $+ \frac{1}{2} \epsilon_4 [\rho_1^2 \rho_2^2 \cos^2(\psi_1 + \psi_2 - \frac{\pi}{3}) + \rho_3^2 \rho_4^2 \cos^2(\psi_3 + \psi_4 - \frac{\pi}{3})$ $+ \rho_1^2 \rho_3^2 \cos^2(\psi_1 + \psi_3 + \frac{\pi}{3}) + \rho_2^2 \rho_4^2 \cos^2(\psi_2 + \psi_4 + \frac{\pi}{3})$ $+ \rho_1^2 \rho_4^2 \cos^2(\psi_1 + \psi_4) + \rho_2^2 \rho_3^2 \cos^2(\psi_2 + \psi_3)]$ $+ \frac{1}{2} \beta_5 [\rho_1^2 \rho_2^2 \cos(\psi_1 + \psi_2 + \frac{\pi}{3}) \cos(\psi_1 - \psi_2) + \rho_3^2 \rho_4^2 \cos(\psi_3 + \psi_4 + \frac{\pi}{3}) \cos(\psi_3 - \psi_4)$ $+ \rho_1^2 \rho_3^2 \cos(\psi_1 + \psi_3 - \frac{\pi}{3}) \cos(\psi_1 - \psi_3) + \rho_2^2 \rho_4^2 \cos(\psi_2 + \psi_4 - \frac{\pi}{3}) \cos(\psi_2 - \psi_4)$ $+ \rho_1^2 \rho_4^2 \cos(\psi_1 + \psi_4) \cos(\psi_1 - \psi_4) + \rho_2^2 \rho_3^2 \cos(\psi_2 + \psi_3) \cos(\psi_2 - \psi_3)]$ <p>* termes de Degré 6</p>	M_1	5	$\left\{ \begin{array}{l} \text{I (10 00 00 00)} \\ \text{II (01 00 00 00)} \\ \text{III (10 00 00 10)} \\ \text{IV (10 10 10 10)} \\ \text{V (01 01 01 01)} \end{array} \right.$
$k_1 + \text{termes de degré 6}$	M_3	3	$\left\{ \begin{array}{l} \text{I (}\eta\xi \text{ 00 00 00)} \\ \text{II (}\eta\xi \text{ 00 00 } \eta\xi\text{)} \\ \text{III (}\eta\xi \text{ } \eta\xi \text{ } \eta\xi \text{ } \eta\xi\text{)} \end{array} \right.$
$k_1 + \rho_1 \rho_2 \rho_3 \rho_4 \left(\sum_{j \neq k=1,2,4} \cos(\psi_1 + \psi_j - \psi_k - \psi_1) \right) + \text{termes de degré 6}$	M_2	6	$\left\{ \begin{array}{l} \text{I (10 00 00 00)} \\ \text{II (01 00 00 00)} \\ \text{III (10 00 00 10)} \\ \text{IV (10 00 00 01)} \\ \text{V (10 10 10 10)} \\ \text{VI (01 01 01 01)} \end{array} \right.$
$k_2 + \text{termes de degré 6}$	M_4	3	$\left\{ \begin{array}{l} \text{I (}\eta\xi \text{ 00 00 00)} \\ \text{II (}\eta\xi \text{ 00 00 } \eta\xi\text{)} \\ \text{III (}\eta\xi \text{ } \eta\xi \text{ } \eta\xi \text{ } \eta\xi\text{)} \end{array} \right.$



REFERENCES

1. P. Tolédano et J.C. Tolédano, Phys. Rev. B14, 7, 3097 (1976)
2. P. Tolédano et J.C. Tolédano, Phys. Rev. B16, 1, 386 (1977)
3. J.C. Tolédano et P. Tolédano, Phys. Rev. B21, 3, 1139 (1980)
4. P. Tolédano et J.C. Tolédano, Phys. Rev. B25, 3, 1946 (1982)
5. G. Pascoli, Thèse de troisième cycle, LILLE 1 (1981)



C H A P I T R E 5

TABLES DE CHANGEMENTS DE SYMETRIE FERROMAGNETIQUES ET ANTIFERROMAGNETIQUES A PARTIR DES 230 GROUPES PARAMAGNETIQUES

Les résultats concernant les changements de symétrie sont donnés dans les tables(5.1)et(5.2). Les tables(5.1)contiennent les transitions ferromagnétiques induites par les CI du centre de la zone de Brillouin,et les tables(5.2)les transitions ferromagnétiques associées à des points de la surface de la zone de Brillouin ainsi que les transitions antiferromagnétiques.

I. Contenu des tables

Les résultats contenus dans les tables(5.1.a)donnent les groupes paramagnétiques (colonne(b)),précédés par leur numéro d'ordre (colonne(a)) tel qu'il est donné par Belov et Al [1]. La colonne (c) indique le (ou les) groupe(s) ferromagnétique(s) stable(s) de basse symétrie,les coreprésentations irréductibles induisant les transitions étant mentionnées entre parenthèses. Nous avons adopté pour les CI une notation identique à celle des RI telles qu'elles figurent dans les tables de Zak et Al [2]. Pour ne pas alourdir la présentation de nos résultats,nous n'y avons pas mentionnés divers renseignements tels que le potentiel thermodynamique associé à la transition ou la dimension du paramètre d'ordre. Ces renseignements figurent dans la table annexe (5.1.b).

Les tables(5.2) contiennent classés par système cristallin l'ensemble des transitions étudiées à l'exception des transitions ferromagnétiques induites par des CI du centre de la zone de Brillouin. Pour chacun des 230 groupes paramagnétiques (colonne(b)) dont le numéro d'ordre figure dans la colonne (a),nous indiquons les groupes de basse symétrie susceptibles d'être atteints (colonne(d)) lors d'une transition du second ordre. La colonne(c) précise le point de la zone de Brillouin associé au changement de symétrie. Les colonnes (e),(f),(g et (h) mentionnent respectivement la dimension du paramètre d'ordre, l'image associée à la CI considérée,la solution stable correspondant au groupe de basse symétrie et enfin la multiplication du volume de la maille élémentaire qui accompagne la transition.

Notons que dans les tables(5.1) et (5.2),nous indiquons par

un point, les CI associées à des RI ne vérifiant pas le critère de Landau. De plus, dans le tableau (5.2) un astérisque distingue les groupes ferromagnétiques.

II. Commentaires sur les tables (5.1) et (5.2)

Les résultats précédents appellent les commentaires suivants: Dans le cadre de la théorie de Landau, la majorité des transitions du second ordre prédites à partir des groupes paramagnétiques sont antiferromagnétiques. Les transitions ferromagnétiques sont pour l'essentiel induites par des CI du centre de la zone de Brillouin, mais il en existe un nombre non-négligeable avec multiplication de la maille élémentaire (c'est-à-dire associées à un point de la surface de la zone de Brillouin). Ces transitions ferromagnétiques impropres[3] n'avaient pas été reconnues jusqu'ici, une idée reçue voulant que les transitions ferromagnétiques soient toujours induites par une CI associée au centre de la zone de Brillouin.

Du point de vue de la symétrie du paramètre d'ordre, on constate que les transitions magnétiques suivent un schéma très semblable à celui obtenu pour les transitions structurales [4-7]. En effet, les potentiels thermodynamiques associés aux transitions magnétiques du second ordre sont à une exception près (le potentiel h_6 associé à l'image L_{13}), identiques à ceux correspondant aux transitions structurales du second ordre. Bien évidemment, les potentiels thermodynamiques associés aux transitions magnétiques du second ordre induites par des CI issues de RI ne vérifiant pas le critère de Landau, sont différents de ceux reliés aux transitions structurales du premier ordre correspondantes.

Une analyse plus détaillée conduit à remarquer que les transitions ferromagnétiques induites par les CI du centre de la zone de Brillouin ne peuvent se produire à partir de phases prototypes décrites par les 13 groupes de Shubnikov des classes 23' et 43'2 soient :

P_{23}' , F_{23}' , I_{23}' , $P_{2_1 3}'$, $I_{2_1 3}'$, $P_{43'2}$, $P_{4_2 3'2}$, $F_{43'2}$, $F_{4_1 3'2}$, $I_{43'2}$, $P_{4_3 3'2}$, $P_{4_1 3'2}$, $I_{4_1 3'2}$.

De la même façon, il n'existe pas de transition ferromagnétique induite par une CI de la surface de la zone de Brillouin pour les groupes suivants :

$P23'$, $F23'$, $Pm3'$, $Pn3'$, $Fm3'$, $Fd3'$, $Pa3'$, $Ia3'$, $P43'2$, $P4_23'2$, $F43'2$, $F4_13'2$, $P4_33'2$, $P\bar{4}3'm$, $F\bar{4}3'm$, $I\bar{4}3'm$, $P\bar{4}3'n$, $F\bar{4}3'c$, $I\bar{4}3'd$, $Pm3'm$, $Pn3'n$, $Pm3'n$, $Pn3'm$, $Fm3'm$, $Fm3'c$, $Fd3'm$, $Fd3'c$, $Im3'm$, $Ia3'd$.

On peut en déduire qu'aucune transition ferromagnétique ne se réalise à partir des 7 groupes suivants :

$P23'$, $F23'$, $P43'2$, $P4_23'2$, $F43'2$, $F4_13'2$, $P4_33'2$

Semblablement, il n'y a pas de transition antiferromagnétique induite par des CI du centre de la zone de Brillouin pour les groupes $P11'$, $P21'$, $P2_11'$, $C21'$, $Pm1'$, $Pc1'$, $Cm1'$, $Cc1'$, $P31'$, $P3_11'$, $P3_21'$, $R31'$.

III. Examen des études similaires

Comme nous l'avons indiqué précédemment, un petit nombre de travaux avaient établi des changements de symétrie ferromagnétiques et antiferromagnétiques particuliers, dans le cadre de la théorie de Landau .Ainsi Kovalev [8] détermine les transitions magnétiques à partir du groupe $P6_3/mmc1'$. Nos résultats concordent en grande partie avec ceux obtenus par cet auteur. Les divergences concernent les points suivants :

1) Kovalev considère des CI associées au point H de la zone de Brillouin hexagonale, qui d'après les résultats de la référence [5] , ne satisfont pas au critère de Lifshitz.

2) Les matrices données dans l'article pour les CI associées au point M de la zone de Brillouin hexagonale sont erronées.

3) Comme nous l'avons déjà mentionné, cet auteur-qui considère la structure hexagonale compacte - élimine des CI qui doivent être prises en compte dans le cadre d'une étude générale.

Le travail effectué par Dimmock et Wheeler [9] présuppose la connaissance du groupe paramagnétique $P4_2/mnm1'$ et des sous-groupes antiferromagnétiques $P4_2'/mnm'$ et $I_c\bar{4}2d$ (que nous trouvons bien dans nos résultats). Ces auteurs se bornent à établir des relations de compatibilité entre les CI de ces groupes. Ce qui leur permet de trouver les points de la zone de Brillouin où de telles modifications de symétrie sont possibles.

Dans les références [10] et [11] Sirotin et Kovalev (respectivement) déterminent les changements de symétrie ponctuelle à partir d'une phase paramagnétique. Dans la référence [10], Sirotin donne les sous-groupes ferromagnétiques. Nous avons constaté un certain nombre d'omissions qui paraissent liées (cet auteur n'indiquant pas la méthode qu'il emploie) au fait que des solutions thermodynamiquement stables sont oubliées. Ces erreurs se retrouvent dans le travail de Kovalev [11] qui détermine également les sous-groupes antiferromagnétiques. Les imprécisions contenues dans ces travaux ont été recensées en détail dans la référence [12] .

Il faut souligner que nous nous sommes bornés ici à examiner les travaux qui se situent dans le cadre de la théorie de Landau. Un certain nombre d'études (Le Corre, Bertaut, Naish, Shuvalov) ont abordé la question des changements de symétrie magnétique en s'appuyant sur des considérations déduites du principe de Curie, ou des arguments géométriques. Nous ne les mentionnons pas dans cette discussion.

- TABLES 5.1.a -

TRICLINIC

1-2	$P11'$	$\left. \begin{matrix} P1 \\ P\bar{1} \end{matrix} \right\} (\tau_1)$
2-5	$P\bar{1}1'$	

MONOCLINIC

3-2	$P21'$	$P2(\tau_1), P2'(\tau_2)$
4-8	$P2_11'$	$P2_1(\tau_1), P2_1'(\tau_2)$
5-14	$C21'$	$C2(\tau_1), C2'(\tau_2)$
6-19	$Pm1'$	$Pm(\tau_1), Pm'(\tau_2)$
7-25	$Pc1'$	$Pc(\tau_1), Pc'(\tau_2)$
8-33	$Cm1'$	$Cm(\tau_1), Cm'(\tau_2)$
9-38	$Cc1'$	$Cc(\tau_1), Cc'(\tau_2)$
10-43	$P2/m1'$	$P2/m(\tau_1), P2'/m'(\tau_2)$
11-51	$P2_1/m1'$	$P2_1/m(\tau_1), P2_1'/m'(\tau_2)$
12-59	$C2/m1'$	$C2/m(\tau_1), C2'/m'(\tau_2)$
13-66	$P2/c1'$	$P2/c(\tau_1), P2'/c'(\tau_2)$
14-76	$P2_1/c1'$	$P2_1/c(\tau_1), P2_1'/c'(\tau_2)$
15-86	$C2/c1'$	$C2/c(\tau_1), C2'/c'(\tau_2)$

ORTHORHOMBIC

16-2	$P2221'$	$P2'2'2(\tau_2, \tau_3, \tau_4)$
17-8	$P222_11'$	$P22'2_1'(\tau_2, \tau_3), P2'2'2_1(\tau_4)$
18-17	$P2_12_121'$	$P2_12_1'2'(\tau_2, \tau_3), P2_1'2_1'2(\tau_4)$
19-26	$P2_12_12_11'$	$P2_1'2_1'2_1(\tau_2, \tau_3, \tau_4)$
20-32	$C222_11'$	$C22'2_1'(\tau_2, \tau_3), C2'2'2_1(\tau_4)$
21-39	$C2221'$	$C22'2'(\tau_2, \tau_3), C2'2'2(\tau_4)$
22-46	$F2221'$	$F2'2'2(\tau_2, \tau_3, \tau_4)$
23-50	$I2221'$	$I2'2'2(\tau_2, \tau_3, \tau_4)$
24-54	$I2_12_12_11'$	$I2_1'2_1'2_1(\tau_2, \tau_3, \tau_4)$

25-58	$Pmm21'$	$Pm'm2'(\tau_2, \tau_4), Pm'm'2(\tau_3)$
26-67	$Pmc2_11'$	$Pm'c'2_1(\tau_3), Pmc'2_1'(\tau_2), Pm'c2_1'(\tau_4)$
27-79	$Pcc21'$	$Pc'c2'(\tau_2, \tau_4), Pc'c'2(\tau_3)$
28-88	$Pma21'$	$Pma'2'(\tau_2), Pm'a'2(\tau_3), Pm'a2'(\tau_4)$
29-100	$Pca2_11'$	$Pca'2_1'(\tau_2), Pc'a'2_1(\tau_3), Pc'a2_1'(\tau_4)$
30-112	$Pnc21'$	$Pnc'2'(\tau_3), Pn'c'2(\tau_2), Pn'c2'(\tau_4)$
31-124	$Pmn2_11'$	$Pmn'2_1'(\tau_2), Pm'n'2_1(\tau_3), Pm'n2_1'(\tau_4)$
32-136	$Pba21'$	$Pb'a2'(\tau_2, \tau_4), Pb'a'2(\tau_3)$
33-145	$Pna2_11'$	$Pna'2_1'(\tau_2), Pn'a'2_1(\tau_3), Pn'a2_1'(\tau_4)$
34-157	$Pnn21'$	$Pn'n2'(\tau_2, \tau_4), Pn'n'2(\tau_3)$
35-166	$Cmm21'$	$Cm'm2'(\tau_2, \tau_4), Cm'm'2(\tau_3)$
36-173	$Cmc2_11'$	$Cmc'2_1'(\tau_2), Cm'c'2_1(\tau_3), Cm'c2_1'(\tau_4)$
37-181	$Ccc21'$	$Cc'c2'(\tau_2, \tau_4), Cc'c'2(\tau_3)$
38-188	$Amm21'$	$Amm'2'(\tau_2), Am'm'2(\tau_3), Am'm2'(\tau_4)$
39-196	$Abm21'$	$Abm'2'(\tau_2), Ab'm'2(\tau_3), Ab'm2'(\tau_4)$
40-204	$Am21'$	$Am'a2'(\tau_2), Am'a'2(\tau_3), Am'a2'(\tau_4)$
41-212	$Ab21'$	$Ab'a2'(\tau_2), Ab'a'2(\tau_3), Ab'a2'(\tau_4)$
42-220	$Fmm21'$	$Fm'm2'(\tau_2, \tau_4), Fm'm'2(\tau_3)$
43-225	$Fdd21'$	$Fd'd2'(\tau_2, \tau_4), Fd'd'2(\tau_3)$
44-230	$Imm21'$	$Im'm2'(\tau_2, \tau_4), Im'm'2(\tau_3)$
45-236	$Iba21'$	$Ib'a2'(\tau_2, \tau_4), Ib'a'2(\tau_3)$
46-242	$Ima21'$	$Im'a2'(\tau_2), Im'a'2(\tau_3), Im'a2'(\tau_4)$



(a)	(b)	(c)
47-250	Pmmm1'	Pm'm'm' $\left\{ \begin{array}{l} (\tau_2, \tau_3, \tau_4) \end{array} \right.$
48-258	Pnnn1'	Pn'n'n' $\left\{ \begin{array}{l} (\tau_2, \tau_3, \tau_4) \end{array} \right.$
49-266	Pccm1'	Pc'c'm'(τ_4), Pc'cm'(τ_2, τ_3)
50-278	Pban1'	Pb'an'(τ_2, τ_3), Pb'a'n(τ_4)
51-290	Pmma1'	Pmm'a'(τ_2), Pm'ma'(τ_3), Pm'm'a(τ_4)
52-306	Pnna1'	Pnn'a'(τ_2), Pn'na'(τ_3), Pn'n'a(τ_4)
53-322	Pmna1'	Pmn'a'(τ_2), Pm'na'(τ_3), Pm'n'a(τ_4)
54-338	Pcca1'	Pcc'a'(τ_2), Pc'ca'(τ_3), Pc'c'a(τ_4)
55-354	Pbam1'	Pb'am'(τ_2, τ_3), Pb'a'm(τ_4)
56-366	Pccn1'	Pc'cn'(τ_2, τ_3), Pc'c'n(τ_4)
57-378	Pbcm1'	Pbc'm'(τ_2), Pb'cm'(τ_3), Pb'c'm(τ_4)
58-394	Pnmm1'	Pnn'm'(τ_2, τ_3), Pn'n'm(τ_4)
59-406	Pmnn1'	Pmm'n'(τ_2, τ_3), Pm'm'n(τ_4)
60-418	Pbcn1'	Pbc'n'(τ_2), Pb'cn'(τ_3), Pb'c'n(τ_4)
61-434	Pbca1'	Pb'c'a(τ_2, τ_3, τ_4)
62-442	Pnma1'	Pnm'a'(τ_2), Pn'ma'(τ_3), Pn'm'a(τ_4)
63-458	Cmcm1'	Cmc'm'(τ_2), Cm'cm'(τ_3), Cm'c'm(τ_4)
64-470	Cmca1'	Cmc'a'(τ_2), Cm'ca'(τ_3), Cm'c'a(τ_4)
65-482	Cmmm1'	Cmm'm'(τ_2, τ_3), Cm'm'm(τ_4)
66-492	Cccm1'	Ccc'm'(τ_2, τ_3), Cc'c'm(τ_4)
67-502	Cmma1'	Cmm'a'(τ_2, τ_3), Cm'm'a(τ_4)
68-512	Ccca1'	Ccc'a'(τ_2, τ_3), Cc'c'a(τ_4)
69-522	Fmmm1'	Fm'm'm(τ_2, τ_3, τ_4)
70-528	Fddd1'	Fd'd'd(τ_2, τ_3, τ_4)
71-534	Immm1'	Im'm'm(τ_2, τ_3, τ_4)
72-540	Ibam1'	Iba'm'(τ_2, τ_3), Ib'a'm(τ_4)
73-549	Ibca1'	Ib'c'a(τ_2, τ_3, τ_4)
74-555	Imma1'	Imm'a'(τ_2, τ_3), Im'm'a(τ_4)

(a)	(b)	(c)
75-2	P41'	P4
76-8	P4 ₁ 1'	P4 ₁
77-14	P4 ₂ 1'	P4 ₂
78-20	P4 ₃ 1'	P4 ₃
79-26	I41'	I4
80-30	I4 ₁ 1'	I4 ₁
81-34	P $\bar{4}$ 1'	P $\bar{4}$ (τ_1), P2'(τ_3, τ_4)
82-40	I $\bar{4}$ 1'	I $\bar{4}$ (τ_1), C2'(τ_3, τ_4)
83-44	P4/m1'	P4/m(τ_1), P2'/m'(τ_3, τ_4)
84-52	P4 ₂ /m1'	P4 ₂ /m(τ_1), P2'/m'(τ_3, τ_4)
85-60	P4/n1'	P4/n(τ_1), P2'/c'(τ_3, τ_4)
86-68	P4 ₂ /n1'	P4 ₂ /n(τ_1), P2'/c'(τ_3, τ_4)
87-76	I4/m1'	I4/m(τ_1), C2'/m'(τ_3, τ_4)
88-82	I4 ₁ /a1'	I4 ₁ /a(τ_1), C2'/c'(τ_3, τ_4)
89-88	P4221'	P42'2'
90-96	P42 ₁ 21'	P42 ₁ '2'
91-104	P4 ₁ 221'	P4 ₁ 2'2'
92-112	P4 ₁ 2 ₁ 21'	P4 ₁ 2 ₁ '2'
93-120	P4 ₂ 221'	P4 ₂ 2'2'
94-128	P4 ₂ 2 ₁ 21'	P4 ₂ 2 ₁ '2'
95-136	P4 ₃ 221'	P4 ₃ 2'2'
96-144	P4 ₃ 2 ₁ 21'	P4 ₃ 2 ₁ '2'
97-152	I4221'	I42'2'
98-158	I4 ₁ 221'	I4 ₁ 2'2'



(a)	(b)	(c)
TETRAGONAL		
99-164	P4mm1'	P4m'm'(τ ₂), (Pm'm2', Cm'm2')(τ ₃)
100-172	P4bm1'	P4b'm'(τ ₂), (Pb'a2', Cm'm2')(τ ₃)
101-180	P4 ₂ cm1'	P4 ₂ c'm'(τ ₂), (Pc'c2', Cm'm2')(τ ₃)
102-188	P4 ₂ nm1'	P4 ₂ n'm'(τ ₂), (Pn'n2', Cm'm2')(τ ₃)
103-196	P4cc1'	P4c'c'(τ ₂), (Pc'c2', Cc'cb')(τ ₃)
104-204	P4nc1'	P4n'c'(τ ₂), (Pn'n2', Cc'c2')(τ ₃)
105-212	P4 ₂ mc1'	P4 ₂ m'c'(τ ₂), (Pm'm2', Cc'c2')(τ ₃)
106-220	P4 ₂ bc1'	P4 ₂ b'c'(τ ₂), (Pb'a2', Cc'c2')(τ ₃)
107-228	I4mm1'	I4m'm'(τ ₂), (Im'm2', Fm'm2')(τ ₃)
108-234	I4cm1'	I4c'm'(τ ₂), (Ib'a2', Fm'm2')(τ ₃)
109-240	I4 ₁ md1'	I4 ₁ m'd'(τ ₂), (Im'm2', Fd'd2')(τ ₃)
110-246	I4 ₁ cd1'	I4 ₁ c'd'(τ ₂), (Ib'a2', Fd'd2')(τ ₃)
111-252	P4̄2m1'	P4̄2'm'(τ ₂), (Cm'm2', P2'2'2')(τ ₃)
112-260	P4̄2c1'	P4̄2'c'(τ ₂), (Cc'c2', P2'2'2')(τ ₃)
113-268	P4̄2 ₁ m1'	P4̄2 ₁ m'(τ ₂), (Cm'm2', P2 ₁ 2 ₁ 2')(τ ₃)
114-276	P4̄2 ₁ c1'	P4̄2 ₁ c'(τ ₂), (Cc'c2', P2 ₁ 2 ₁ 2')(τ ₃)
115-284	P4̄m21'	P4̄m'2'(τ ₂), (Pm'm2', C22'2')(τ ₃)
116-292	P4̄c21'	P4̄c'2'(τ ₂), (Pc'c2', C22'2')(τ ₃)
117-300	P4̄b21'	P4̄b'2'(τ ₂), (Pb'a2', C22'2')(τ ₃)
118-308	P4̄n21'	P4̄n'2'(τ ₂), (Pn'n2', C22'2')(τ ₃)
119-316	I4̄m21'	I4̄m'2'(τ ₂), (Im'm2', F2'2'2')(τ ₃)
120-322	I4̄c21'	I4̄c'2'(τ ₂), (Ib'a2', F2'2'2')(τ ₃)
121-328	I4̄2m1'	I4̄2'm'(τ ₂), (Fm'm2', I2'2'2')(τ ₃)
122-334	I4̄2d1'	I4̄2'd'(τ ₂), (Fd'd2', I2 ₁ 2 ₁ 2 ₁)(τ ₃)

(a)	(b)	(c)
123-340	P4/mmm1'	P4/mn'm'(τ ₂), (Pm'm'm, Cmm'm')(τ ₃)
124-352	P4/mcc1'	P4/mc'c'(τ ₂), (Pc'cm', Ccc'm')(τ ₃)
125-364	P4/nbm1'	P4/nb'm'(τ ₂), (Pb'an', Cmn'a')(τ ₃)
126-376	P4/nnc1'	P4/nn'c'(τ ₂), (Pn'n'n, Ccc'a')(τ ₃)
127-388	P4/mbm1'	P4/mb'm'(τ ₂), (Pb'am', Cmm'm')(τ ₃)
128-400	P4/mnc1'	P4/mn'c'(τ ₂), (Pnn'm', Ccc'm')(τ ₃)
129-412	P4/nmm1'	P4/nm'm'(τ ₂), (Pmm'n', Cmm'a')(τ ₃)
130-424	P4/ncc1'	P4/nc'c'(τ ₂), (Pc'cn', Ccc'a')(τ ₃)
131-436	P4 ₂ /mmc1'	P4 ₂ /mm'c'(τ ₂), (Pm'm'm, Ccc'm')(τ ₃)
132-448	P4 ₂ /mcm1'	P4 ₂ /mc'm'(τ ₂), (Pc'cm', Cmm'm')(τ ₃)
133-460	P4 ₂ /nbc1'	P4 ₂ /nb'c'(τ ₂), (Pb'an', Ccc'a')(τ ₃)
134-472	P4 ₂ /nmm1'	P4 ₂ /nn'm'(τ ₂), (Pn'n'n, Cmm'a')(τ ₃)
135-484	P4 ₂ /mbc1'	P4 ₂ /mb'c'(τ ₂), (Pb'am', Ccc'm')(τ ₃)
136-496	P4 ₂ /mnm1'	P4 ₂ /mn'm'(τ ₂), (Pnn'm', Cmm'a')(τ ₃)
137-508	P4 ₂ /nmc1'	P4 ₂ /nm'c'(τ ₂), (Pmm'n', Ccc'a')(τ ₃)
138-520	P4 ₂ /ncm1'	P4 ₂ /nc'm'(τ ₂), (Pc'cn', Cmm'a')(τ ₃)
139-532	I4/mmm1'	I4/mm'm'(τ ₂), (Im'm'm, Fm'm'm)(τ ₃)
140-542	I4/mcm1'	I4/mc'm'(τ ₂), (Ib'a'm', Fm'm'm)(τ ₃)
141-552	I4 ₁ /amd1'	I4 ₁ /am'd'(τ ₂), (Imm'a', Fd'd'd)(τ ₃)
142-562	I4 ₁ /acd1'	I4 ₁ /ac'd'(τ ₂), (Ib'c'a, Fd'd'd)(τ ₃)



(a)	(b)	(c)
RHOMBOHEDRAL		
143-2	P31'	P3
144-5	P3 ₁ 1'	P3 ₁
145-8	P3 ₂ 1'	P3 ₂
146-11	R31'	R3
147-14	P $\bar{3}$ 1'	P $\bar{3}$ (τ_1), P $\bar{1}$ ($\tau_2 + \tau_3$)
148-18	R $\bar{3}$ 1'	R $\bar{3}$ (τ_1), P $\bar{1}$ ($\tau_2 + \tau_3$)
149-22	P31'2	P312'
150-26	P321'	P32'1
151-30	P3 ₁ 1'2	P3 ₁ 12'
152-34	P3 ₁ 21'	P3 ₁ 2'1
153-38	P3 ₂ 1'2	P3 ₂ 12'
154-42	P3 ₂ 21'	P3 ₂ 2'1
155-46	R321'	R32'
156-50	P3m1'	P3m'1(τ_2), (Cm, Cm')(τ_3)
157-54	P31'm	P31m'(τ_2), (Cm, Cm')(τ_3)
158-58	P3c1'	P3c'1(τ_2), (Cc, Cc')(τ_3)
159-62	P31'c	P31c'(τ_2), (Cc, Cc')(τ_3)
160-66	R3m1'	R3m'(τ_2), (Cm, Cm')(τ_3)
161-70	R3c1'	R3c'(τ_2), (Cc, Cc')(τ_3)
162-74	P $\bar{3}$ 1'm	P $\bar{3}$ 1m'(τ_2), (C2/m, C2'/m')(τ_3)
163-80	P $\bar{3}$ 1'c	P $\bar{3}$ 1c'(τ_2), (C2/c, C2'/c')(τ_3)
164-86	P $\bar{3}$ m1'	P $\bar{3}$ m'1(τ_2), (C2/m, C2'/m')(τ_3)
165-92	P $\bar{3}$ c1'	P $\bar{3}$ c'1(τ_2), (C2/c, C2'/c')(τ_3)
166-98	R $\bar{3}$ m1'	R $\bar{3}$ m'(τ_2), (C2/m, C2'/m')(τ_3)
167-104	R $\bar{3}$ c1'	R $\bar{3}$ c'(τ_2), (C2/c, C2'/c')(τ_3)

(a)	(b)	(c)
HEXAGONAL		
168-110	P61'	P6
169-114	P6 ₁ 1'	P6 ₁
170-118	P6 ₃ 1'	P6 ₃
171-122	P6 ₂ 1'	P6 ₂
172-126	P6 ₄ 1'	P6 ₄
173-130	P6 ₃ 1'	P6 ₃
174-134	P $\bar{6}$ 1'	P $\bar{6}$ (τ_1), Pm($\tau_2 + \tau_3$), Pm'($\tau_3 + \tau_6$)
175-138	P6/m1'	P6/m(τ_1), P2/m($\tau_3 + \tau_4$), P2'/m'($\tau_{11} + \tau_{12}$)
176-144	P6 ₃ /m1'	P6 ₃ /m(τ_1), P2 ₁ /m($\tau_3 + \tau_4$), P2 ₁ '/m'($\tau_{11} + \tau_{12}$)
177-150	P6221'	P62'2'
178-156	P6 ₁ 221'	P6 ₁ 2'2'
179-162	P6 ₃ 221'	P6 ₃ 2'2'
180-168	P6 ₂ 221'	P6 ₂ 2'2'
181-174	P6 ₄ 221'	P6 ₄ 2'2'
182-180	P6 ₃ 221'	P6 ₃ 2'2'
183-186	P6mm1'	P6m'm'(τ_2), (Cm'm2', Cm'm2')(τ_5), Cm'm'2(τ_6)
184-192	P6cc1'	P6c'c'(τ_2), (Cc'c2', Cc'c2')(τ_5), Cc'c'2(τ_6)
185-198	P6 ₃ cm1'	P6 ₃ c'm'(τ_2), (Cm'c2 ₁ ', Cm'c2 ₁ ')(τ_5), Cm'c'2 ₁ (τ_6)
186-204	P6 ₃ mc1'	P6 ₃ m'c'(τ_2), (Cmc'2 ₁ ', Cmc'2 ₁ ')(τ_5), Cm'c'2 ₁ (τ_6)
187-210	P $\bar{6}$ m21'	P $\bar{6}$ m'2'(τ_2), Amm'2'(τ_3), (Am'm'2, Am'm2')(τ_6)
188-216	P $\bar{6}$ c21'	P $\bar{6}$ c'2'(τ_2), Ama'2'(τ_3), (Am'a'2, Am'a2')(τ_6)
189-222	P $\bar{6}$ 2m1'	P $\bar{6}$ 2'm'(τ_2), Amm'2'(τ_3), (Am'm'2, Am'm2')(τ_6)
190-228	P $\bar{6}$ 2c1'	P $\bar{6}$ 2'c'(τ_2), Ama'2'(τ_3), (Am'a'2, Am'a2')(τ_6)
191-234	P6/mmm1'	P6/mm'm'(τ_2), (Cmm'm', Cmm'm')(τ_5), Cm'm'm(τ_6)
192-244	P6/mcc1'	P6/mc'c'(τ_2), (Ccc'm', Ccc'm')(τ_5), Cc'c'm(τ_6)
193-254	P6 ₃ /mcm1'	P6 ₃ /mc'm'(τ_2), (Cm'cm', Cmc'm')(τ_5), Cm'c'm(τ_6)
194-264	P6 ₃ /mmc1'	P6 ₃ /mm'c'(τ_2), (Cmc'm', Cm'cm')(τ_5), Cm'c'm(τ_6)



(a) (b) (c)

CUBIC

200-15	Pm3'	(Pm'm'm,R3)
201-19	Pn3'	(Pn'n'n,R3)
202-23	Fm3'	(Fm'm'm,R3)
203-27	Fd3'	(Fd'd'd,R3) (T ₂) ^o
204-31	Im3'	(Im'm'm,R3)
205-34	Pa3'	(Pb'c'a,R3)
206-38	Ia3'	(Ib'c'a,R3)
215-71	P43'm	(P42'm',R3m')
216-75	F43'm	(I4m'2',R3m')
217-79	I43'm	(I42'm',R3m') (T ₃)
218-82	P43'n	(P42'c',R3c')
219-86	F43'c	(I4c'2',R3c')
220-90	I43'd	(I42'd',R3c')
221-93	Pm3'm	(P4/mm'm',R3m')
222-99	Pn3'n	(P4/nn'c',R3c')
223-105	Pm3'n	(P4 ₂ /mm'c',R3c')
224-111	Pn3'm	(P4 ₂ /nn'm',R3m')
225-117	Fm3'm	(I4/mm'm',R3m')
226-123	Fm3'c	(I4/mc'm',R3c')
227-129	Fd3'm	(I4 ₁ /am'd',R3m')
228-135	Fd3'c	(I4 ₁ /ac'd',R3c')
229-141	Im3'm	(I4/mm'm',R3m')
230-146	Ia3'd	(I4 ₁ /ac'd',R3c')



Classes Magnétiques	CI	Dim. P.O.	Images	Solutions stables
11', $\bar{1}1'$	τ_1	1	C_1	[1]
21', $m1'$, $2/m1'$	τ_1, τ_2			
2221', $mm21'$, $mmm1'$	$\tau_1 + \tau_3$			
41'	τ_1			
$\bar{4}1'$, $4/m1'$	τ_1 $\tau_3 + \tau_4$	2	C_4	[11]
4221'	τ_2	1	C_1	[1]
4mm1', $\bar{4}2m1'$, $4/nmm1'$	τ_2	1	C_1	[1]
	τ_5	2	C_{4v}	[10][11]
31'	τ_1	1	C_1	[1]
$\bar{3}1'$	τ_1			
321'	$\tau_2 + \tau_3$	2	C_6	[nC]
	τ_2			
3m1', $\bar{3}m1'$	τ_2	1	C_1	[1]
	τ_3			
61'	τ_3	2	C_{6v}	[10][01]
61'	τ_1	1	C_1	[1]
$\bar{6}1'$	τ_1			
6221'	$\tau_2 + \tau_3 + \tau_5 + \tau_6$	2	C_6	[nC]
	τ_2			
6mm1', $6/mmm1'$	τ_2	1	C_1	[1]
	$\tau_5 + \tau_6$			
$\bar{6}m21'$	τ_2	2	C_{6v}	[10][01]
	$\tau_3 + \tau_6$			
m3'	τ_2	1	C_1	[1]
$\bar{4}3'm, m3'm$	$\tau_3 + \tau_6$	2	C_{6v}	[10][01]
	τ_4			
m3'	τ_4	3	T_h	[100][111]
$\bar{4}3'm, m3'm$	τ_5	3	O_h	[100][111]

TABLE 5.1.b



- TABLES 5.2 -

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
TRICLINIC							
1-2	P11'	ABY ZE DC	$P_s 1(\tau_1)$	1	C ₁	I	2
2-5	P $\bar{1}$ 1'	Γ	P $\bar{1}$ '(τ_2)	1	C ₁	I	1
		ABY ZE DC	$P_s \bar{1}(\tau_1, \tau_2)$	1	C ₁	I	2
MONOCLINIC							
3-2	P21'	ABY Z EDC	P _a 2(τ_1, τ_2) P _b 2(τ_1), P _b 2 ₁ (τ_2) C _a 2(τ_1, τ_2)	1	C ₁	I	2
4-8	P2 ₁ '	ABY	P _a 2 ₁ (τ_1, τ_2)	1	C ₁	I	2
5-14	C21'	AZ BYC FF*	P _c 2(τ_1), P _c 2 ₁ (τ_2) C _c 2(τ_1, τ_2) (P _s 1, C _a 2)(τ_1)	1 2	C ₁ C _{4v}	I I, II	2 2, 4
6-19	Pm1'	Z ABY EDC	P _b m(τ_1, τ_2) P _a m(τ_1), P _a c(τ_2) C _a m(τ_1, τ_2)	1	C ₁	I	2
7-25	Pc1'	Z Y C	P _b c(τ_1, τ_2) P _a c(τ_1, τ_2) C _a c(τ_1, τ_2)	1	C ₁	I	2
8-33	Cm1'	ZA BYC FF*	P _c m(τ_1), P _A c(τ_2) C _c m(τ_1), C _c c(τ_2) (P _s 1, C _a m)(τ_1)	1 2	C ₁ C _{4v}	I I, II	2 2, 4
9-38	Cc1'	ZA FF*	P _A c(τ_1, τ_2) (P _s 1, C _a c)(τ_1)	1 2	C ₁ C _{4v}	I I, II	2 2, 4



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
10-43	P2/m1'	Γ	$P2/m'(\tau_3), P2'/m(\tau_4)$	1	C_1	I	1	
		Z	$P_b^2/m(\tau_1, \tau_3), P_b^2/m(\tau_2, \tau_4)$	}	1	C_1	I	2
		ABY	$P_a^2/m(\tau_1, \tau_4), P_a^2/c(\tau_2, \tau_3)$					
		EDC	$C_a^2/m(\tau_1 \rightarrow \tau_4)$					
11-51	P2 ₁ /m1'	Γ	$P2_1/m'(\tau_3), P2_1'/m(\tau_4)$	1	C_1	I	1	
		ABY	$P_a^2/m(\tau_1, \tau_4), P_a^2/c(\tau_2, \tau_3)$	1	C_1	I	2	
12-59	C2/m1'	Γ	$C2/m'(\tau_3), C2'/m(\tau_4)$	1	C_1	I	1	
		AZ	$P_c^2/m(\tau_1), P_a^2/c(\tau_2),$ $P_a^2/c(\tau_3), P_c^2/m(\tau_4)$	}	1	C_1	I	2
		BYC	$C_c^2/m(\tau_1, \tau_4), C_c^2/c(\tau_2, \tau_3)$					
		FF"	$(P_s \bar{1}, C_a^2/m)(\tau_1, \tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4	
13-66	P2/c1'	Γ	$P2/c'(\tau_3), P2'/c(\tau_4)$	1	C_1	I	1	
		Z	$P_b^2/c(\tau_1, \tau_3), P_b^2/c(\tau_2, \tau_4)$	}	1	C_1	I	2
		A	$P_a^2/c(\tau_1 \rightarrow \tau_4)$					
		E	$C_a^2/c(\tau_1 \rightarrow \tau_4)$					
14-76	P2 ₁ /c1'	Γ	$P2_1/c'(\tau_3), P2_1'/c(\tau_4)$	1	C_1	I	1	
		A	$P_a^2/c(\tau_1 \rightarrow \tau_4)$	1	C_1	I	2	
		DC	$P_s \bar{1}(\tau_1 + \tau_2, \tau_3 + \tau_4)$	2	C_4	I	2	
15-86	C2/c1'	Γ	$C2/c'(\tau_3), C2'/c(\tau_4)$	1	C_1	I	1	
		AZ	$P_a^2/c(\tau_1, \tau_3), P_a^2/c(\tau_2, \tau_4)$	1	C_1	I	2	
		FF"	$(P_s \bar{1}, C_a^2/c)(\tau_1, \tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4	



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
RTHORHOMBIC							
16-2	P2221'	Γ	$P_{222}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		Z	$P_a^{222}(\tau_1, \tau_4), P_c^{222}(\tau_2, \tau_3)$	}	1	C_1	I
		X	$P_a^{222}(\tau_1, \tau_2), P_a^{222}(\tau_3, \tau_4)$				
		Y	$P_a^{222}(\tau_1, \tau_3), P_a^{222}(\tau_2, \tau_4)$				
		UTS	$C_a^{222}(\tau_1 + \tau_4)$				
		R	$F_s^{222}(\tau_1 + \tau_4)$				
17-8	P222 ₁ 1'	Γ	$P_{222_1}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		X	$P_a^{222_1}(\tau_1, \tau_2), P_a^{2_1 2_1 2}(\tau_3, \tau_4)$	}	1	C_1	I
		Y	$P_a^{222_1}(\tau_1, \tau_3), P_a^{2_1 2_1 2}(\tau_2, \tau_4)$				
		S	$C_a^{222_1}(\tau_1 + \tau_4)$				
18-17	P2 ₁ 2 ₁ 21'	Γ	$P_{2_1 2_1 2}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		Z	$P_c^{2_1 2_1 2}(\tau_1, \tau_4), P_a^{2_1 2_1 2_1}(\tau_2, \tau_3)$	1	C_1	I	2
		R	$C_a^2(\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4)$	}	2	C_4	I
		S	$P_a^2(\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4)$				
19-26	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ 1'	Γ	$P_{2_1 2_1 2_1}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		UTS	$P_a^2(\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4)$	2	C_4	I	2
		R	$P_s^1(\tau_1)$	4	13.1	I	2
20-32	C222 ₁ 1'	Γ	$C_{222_1}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		Y	$P_c^{222_1}(\tau_1), P_a^{2_1 2_1 2}(\tau_2, \tau_3), P_c^{2_1 2_1 2_1}(\tau_4)$	1	C_1	I	2
		S	$(P_a^2, C_a^{222_1})(\tau_1, \tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4
21-39	C2221'	Γ	$C_{222}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		Y	$P_c^{222}(\tau_1), P_a^{222_1}(\tau_2, \tau_3), P_c^{2_1 2_1 2}(\tau_4)$	}	1	C_1	I
		Z	$C_c^{222}(\tau_1, \tau_4), C_c^{222_1}(\tau_2, \tau_3)$				
		T	$I_c^{222}(\tau_1, \tau_4), I_c^{2_1 2_1 2_1}(\tau_2, \tau_3)$				
		S	$(P_a^2, C_a^{222})(\tau_1, \tau_2)$	}	2	C_{4v}	I, II
		R	$(C_a^2, F_s^{222})(\tau_1, \tau_2)$				
22-46	F2221'	Γ	$F_{222}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		XT	$C_a^{222}(\tau_1, \tau_2), C_a^{222_1}(\tau_3, \tau_4)$	}	1	C_1	I
		Y	$C_a^{222}(\tau_1, \tau_3), C_a^{222_1}(\tau_2, \tau_4)$				
		Z	$C_a^{222}(\tau_1, \tau_4), C_a^{222_1}(\tau_2, \tau_3)$				
		R	$(P_s^1, C_a^2, C_a^2, C_a^2, F_s^{222}, F_s^{222})(\tau_1)$	4	56.1	I, II, III, IV, V, VI	2, 4, 4, 4, 8, 8
23-50	I2221'	Γ	$I_{222}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		X	$P_I^{222}(\tau_1), P_I^{2_1 2_1 2}(\tau_2, \tau_3, \tau_4)$	1	C_1	I	2
		U	$(C_a^2, C_a^{222})(\tau_1, \tau_2)$	}	2	C_{4v}	I, II
		TS	$(C_c^2, C_a^{222})(\tau_1, \tau_2)$				
		R	$F_s^{222}(\tau_1 + \tau_4)$	2	C_4	I	4

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
-54	I2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ 1'	Γ	I2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ (τ ₁)	1	C ₁	I	1
		X	P _I 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ (τ ₁), P _I 222 ₁ (τ ₂ , τ ₃ , τ ₄)	1	C ₁	I	2
		U	(C _a 2, C _a 222 ₁)(τ ₁ , τ ₂)	} 2	C _{4v}	I, II	2, 2
		TS	(C _c 2, C _a 222 ₁)(τ ₁ , τ ₂)				
-58	Pmm21'	Γ	Pmm2(τ ₁)	1	C ₁	I	1
		X	P _a mm2(τ ₁ , τ ₄), P _a ma2(τ ₂ , τ ₃)	} 1	C ₁	I	2
		Y	P _a mm2(τ ₁ , τ ₂), P _a ma2(τ ₃ , τ ₄)				
		Z	P _c mm2(τ ₁), P _c mc2 ₁ (τ ₂ , τ ₄), P _c cc2(τ ₃)				
		R	F _s mm2(τ ₁ +τ ₄)				
		U	A _c mm2(τ ₁ , τ ₄), A _c bm2(τ ₂ , τ ₃)				
		T	A _c mm2(τ ₁ , τ ₂), A _c bm2(τ ₃ , τ ₄)				
		S	C _a mm2(τ ₁ +τ ₄)				
-67	Pmc2 ₁ 1'	Γ	Pmc2 ₁ (τ ₁)	1	C ₁	I	1
		X	P _a mc2 ₁ (τ ₁ , τ ₄), P _a mn2 ₁ (τ ₂ , τ ₃)	} 1	C ₁	I	2
		Y	P _b mc2 ₁ (τ ₁ , τ ₂), P _a ca2 ₁ (τ ₃ , τ ₄)				
		S	C _a mc2 ₁ (τ ₁ +τ ₄)				
-79	Pcc21'	Γ	Pcc2(τ ₁)	1	C ₁	I	1
		X	P _a cc2(τ ₁ , τ ₄), P _b nc2(τ ₂ , τ ₃)	} 1	C ₁	I	2
		Y	P _a cc2(τ ₁ , τ ₂), P _b nc2(τ ₃ , τ ₄)				
		S	C _a cc2(τ ₁ +τ ₄)				
-88	Pma21'	Γ	Pma2(τ ₁)	1	C ₁	I	1
		Y	P _b ma2(τ ₁ , τ ₂), P _a ba2(τ ₃ , τ ₄)	} 1	C ₁	I	2
		Z	P _c ma2(τ ₁), P _c mn2 ₁ (τ ₂), P _c nc2(τ ₃), P _c ca2 ₁ (τ ₄)				
		T	A _c ma2(τ ₁ , τ ₂), A _c ba2(τ ₃ , τ ₄)				
-100	Pca2 ₁ 1'	Γ	Pca2 ₁ (τ ₁)	1	C ₁	I	1
		Y	P _b ca2 ₁ (τ ₁ , τ ₂), P _b na2 ₁ (τ ₃ , τ ₄)	1	C ₁	I	2
-112	Pnc21'	Γ	Pnc2(τ ₁)	1	C ₁	I	1
		X	P _a nc2(τ ₁ , τ ₄), P _a nn2(τ ₂ , τ ₃)	1	C ₁	I	2
-124	Pmn2 ₁ 1'	Γ	Pmn2 ₁ (τ ₁)	1	C ₁	I	1
		Y	P _b mn2 ₁ (τ ₁ , τ ₂), P _a na2 ₁ (τ ₃ , τ ₄)	1	C ₁	I	2
		R	(C _a m, C _a c)(τ ₁)	} 2	C _{4v}	I, II	2, 2
		U	(C _a m, P _a c)(τ ₁)				
-136	Pba21'	Γ	Pba2(τ ₁)	1	C ₁	I	1
		Z	P _c ba2(τ ₁), P _c na2 ₁ (τ ₂ , τ ₄), P _c nn2(τ ₃)	1	C ₁	I	2
-145	Pna2 ₁ 1'	Γ	Pna2 ₁ (τ ₁)	1	C ₁	I	1
		T	(C _a c, P _a c)(τ ₁)	2	C _{4v}	I, II	2, 2

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
157	Pnn21'	Γ	$P_{nn2}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		R	$F_{sdd2}(\tau_1, \tau_4)$	1	C_1	I	2
166	Cmm21'	Γ	$C_{mm2}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		Y	$P_{Cmm2}(\tau_1), P_{Cma2}(\tau_2, \tau_4), P_{Cba2}(\tau_3)$	1	C_1	I	2
		Z	$C_{Cmm2}(\tau_1), C_{Cmc2_1}(\tau_2, \tau_4), C_{Ccc2}(\tau_3)$				
		T	$I_{Cmm2}(\tau_1), I_{Cma2}(\tau_2, \tau_4), I_{Cba2}(\tau_3)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4
		R	$(C_a^2, F_{smm2})(\tau_1, \tau_2)$				
		S	$(P_a^2, C_{amm2})(\tau_1, \tau_2)$				
173	Cmc2 ₁ '	Γ	$C_{mc2_1}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		Y	$P_{Cmc2_1}(\tau_1), P_{Cmn2_1}(\tau_2), P_{Cna2_1}(\tau_3), P_{Cca2_1}(\tau_4)$	1	C_1	I	2
		S	$(P_a^2, C_{amc2_1})(\tau_1, \tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4
181	Ccc21'	Γ	$C_{cc2}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		Y	$P_{Ccc2}(\tau_1), P_{Cnc2}(\tau_2, \tau_4), P_{Cnn2}(\tau_3)$	1	C_1	I	2
		R	$(C_a^2, F_{sdd2})(\tau_1, \tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4
		S	$(P_a^2, C_{acc2})(\tau_1, \tau_2)$				
188	Amm21'	Γ	$A_{mm2}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		Y	$P_{Amm2}(\tau_1), P_{Amc2_1}(\tau_2), P_{Anc2_1}(\tau_3), P_{Bmn2_1}(\tau_4)$	1	C_1	I	2
		Z	$A_{amm2}(\tau_1, \tau_4), A_{ama2}(\tau_2, \tau_3)$				
		T	$I_{amm2}(\tau_1, \tau_4), I_{ama2}(\tau_2, \tau_3)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4
		R	$(C_a^m, F_{smm2})(\tau_1, \tau_2)$				
		S	$(P_a^m, A_{amm2})(\tau_1), (P_a^c, A_{abm2})(\tau_2)$				
196	Abm21'	Γ	$A_{bm2}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		Y	$P_{Bma2}(\tau_1), P_{Bca2_1}(\tau_2), P_{Acc2}(\tau_3), P_{Bmc2_1}(\tau_4)$	1	C_1	I	2
		Z	$A_{abm2}(\tau_1, \tau_4), A_{aba2}(\tau_2, \tau_3)$				
		T	$I_{bma2}(\tau_1, \tau_4), I_{aba2}(\tau_2, \tau_3)$				
204	Ama21'	Γ	$A_{ma2}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		Y	$P_{Ama2}(\tau_1), P_{Ama2_1}(\tau_2), P_{Ann2}(\tau_3), P_{Ana2_1}(\tau_4)$	1	C_1	I	2
		R	$(C_a^m, F_{sdd2})(\tau_1, \tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4
		S	$(P_a^m, A_{ama2})(\tau_1), (P_a^c, A_{aba2})(\tau_2)$				
212	Aba21'	Γ	$A_{ba2}(\tau_1)$	1	C_1	I	1
		Y	$P_{Aba2}(\tau_1), P_{Bna2_1}(\tau_2), P_{Bnc2}(\tau_3), P_{Aca2_1}(\tau_4)$	1	C_1	I	2
		Z	$(C_c^2, P_{bc})(\tau_1)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
		T	$(C_c^2, C_{cc})(\tau_1)$				



	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
220	Fmm21'	Γ	Fmm2(τ ₁)	1	C ₁	I	1	
		XI	A _C mm2(τ ₁), A _C ma2(τ ₂), A _C ba2(τ ₃), A _C bm2(τ ₄)	}	1	C ₁	I	2
		Z	C _A mm2(τ ₁), C _A mc2(τ ₂ , τ ₄), C _A cc2(τ ₃)					
		Y	A _C mm2(τ ₁), A _C bm2(τ ₂), A _C ba2(τ ₃), A _C ma2(τ ₄)					
		R	(P _s 1, C _a 2, C _a m, C _a m, F _s mm2, F _s dd2)(τ ₁)	4	56.1	I, II, III, IV, V, VI	2, 4, 4, 4, 6, 6	
225	Fdd21'	Γ	Fdd2(τ ₁)	1	C ₁	I	1	
		R	(P _s 1, C _a 2, C _a c, C _a c, C _a 2)(τ ₁)	4	56.01	I, II, III, IV, V	2, 4, 4, 4, 6	
230	Imm21'	Γ	Imm2(τ ₁)	1	C ₁	I	1	
		X	P _I mm2(τ ₁), P _I mn2(τ ₂ , τ ₄), P _I nn2(τ ₃)	1	C ₁	I	2	
		U	(C _a m, A _C mm2)(τ ₁), (C _a c, A _C bm2)(τ ₂)	}	2	C _{4v}	I, II	2, 4
		S	(C _c 2, C _a mm2)(τ ₁ , τ ₂)					
		T	(C _c m, A _C mm2)(τ ₁), (C _c c, A _C bm2)(τ ₂)					
		R	(F _s mm2, F _s dd2)(τ ₁ , τ ₂)					
236	Iba21'	Γ	Iba2(τ ₁)	1	C ₁	I	1	
		X	P _I cc2(τ ₁), P _I ca2(τ ₂ , τ ₄), P _I ba2(τ ₃)	1	C ₁	I	2	
		S	(C _c 2, C _a cc2)(τ ₁ , τ ₂)	2	C _{4v}	I, II	2, 4	
242	Ima21'	Γ	Ima2(τ ₁)	1	C ₁	I	1	
		X	P _I ma2(τ ₁), P _I mc2(τ ₂), P _I nc2(τ ₃), P _I na2(τ ₄)	1	C ₁	I	2	
		T	(C _c m, A _C ma2)(τ ₁), (C _c c, A _C ba2)(τ ₂)	}	2	C _{4v}	I, II	2, 4
		S	(C _c 2, C _a mc2)(τ ₁ , τ ₂)					
250	Pmmm1'	Γ	Pmmm(τ ₁), Pm'm'm'(τ ₅), Pm'mm(τ ₆ , τ ₇ , τ ₈)	1	C ₁	I	1	
		X	P _a mmm(τ ₁ , τ ₆), P _c ccm(τ ₂ , τ ₅), P _a mme(τ ₃ , τ ₄ , τ ₇ , τ ₈)	}	1	C ₁	I	2
		Y	P _a mmm(τ ₁ , τ ₇), P _a mme(τ ₂ , τ ₄ , τ ₆ , τ ₈), P _c ccm(τ ₃ , τ ₅)					
		Z	P _a mmm(τ ₁ , τ ₈), P _a mme(τ ₂ , τ ₃ , τ ₆ , τ ₇), P _c ccm(τ ₄ , τ ₅)					
		S	C _a mmm(τ ₁ , τ ₄ , τ ₆ , τ ₇), C _a mme(τ ₂ , τ ₃ , τ ₅ , τ ₈)					
		T	C _a mmm(τ ₁ , τ ₂ , τ ₇ , τ ₈), C _a mme(τ ₃ , τ ₄ , τ ₅ , τ ₆)					
		U	C _a mmm(τ ₁ , τ ₃ , τ ₆ , τ ₈), C _a mme(τ ₂ , τ ₄ , τ ₅ , τ ₇)					
		R	F _s mmm(τ ₁ →τ ₈)					
258	Pnnn1'	Γ	Pnnn(τ ₁), Pn'n'n'(τ ₅), Pn'nn(τ ₆ , τ ₇ , τ ₈)	1	C ₁	I	1	
		R	F _s ddd(τ ₁ →τ ₈)	1	C ₁	I	2	
266	Pccm1'	Γ	Pccm(τ ₁), Pc'c'm'(τ ₅), Pc'cm(τ ₆ , τ ₇), Pccm'(τ ₈)	1	C ₁	I	1	
		X	P _a ccm(τ ₁ , τ ₆), P _a ban(τ ₂ , τ ₅), P _a cca(τ ₃ , τ ₈), P _c mna(τ ₄ , τ ₇)	}	1	C ₁	I	2
		Y	P _a ccm(τ ₁ , τ ₇), P _a cca(τ ₂ , τ ₈), P _a ban(τ ₃ , τ ₅), P _c mna(τ ₄ , τ ₆)					
		S	C _a ccm(τ ₁ , τ ₄ , τ ₆ , τ ₇), C _a cca(τ ₂ , τ ₃ , τ ₅ , τ ₈)					
276	Pban1'	Γ	Pban(τ ₁), Pb'a'n'(τ ₅), Pb'en(τ ₆ , τ ₇), Pban'(τ ₈)	1	C ₁	I	1	
		Z	P _c ban(τ ₁ , τ ₈), P _b nna(τ ₂ , τ ₃ , τ ₆ , τ ₇), P _a nnn(τ ₄ , τ ₅)	1	C ₁	I	2	



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
0	Pmma1'	Γ	$Pmma(\tau_1), Pm'm'a'(\tau_5), Pm'ma(\tau_6), Pmm'a(\tau_7), Pmma'(\tau_8)$	1	C_1	I	1
		γ	$P_bmma(\tau_1, \tau_7), P_a'mmn(\tau_2, \tau_8), P_c'mna(\tau_3, \tau_5),$ $P_c'bcm(\tau_4, \tau_6)$	}	1	C_1	I
		Z	$P_c'mma(\tau_1, \tau_8), P_b'bcm(\tau_2, \tau_7), P_a'bam(\tau_3, \tau_6),$ $P_c'cca(\tau_4, \tau_5)$				
		T	$C_a'mcm(\tau_1, \tau_2, \tau_7, \tau_8), C_a'mca(\tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6)$				
6	Pnna1'	Γ	$Pnna(\tau_1), Pn'n'a'(\tau_5), Pn'na(\tau_6), Pnn'a(\tau_7), Pnna'(\tau_8)$				
		T	$(P_a'2/c, C_a'2/c)(\tau_1, \tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
2	Fmna1'	Γ	$Fmna(\tau_1), Fm'n'a'(\tau_5), Fm'na(\tau_6), Fmn'a(\tau_7), Fmna'(\tau_8)$	1	C_1	I	1
		γ	$F_b'mna(\tau_1, \tau_7), F_a'nnm(\tau_2, \tau_8), F_a'naa(\tau_3, \tau_5),$ $F_c'bcn(\tau_4, \tau_6)$	}	1	C_1	I
		U	$(C_a'2/m, P_c'2/c)(\tau_1, \tau_2)$				
		R	$(C_a'2/m, C_a'2/c)(\tau_1, \tau_2)$				
				2	C_{4v}	I, II	2, 2
8	Pcca1'	Γ	$Pcca(\tau_1), Pc'c'a'(\tau_5), Pc'ca(\tau_6), Pcc'a(\tau_7), Pcca'(\tau_8)$	1	C_1	I	1
		γ	$P_b'cca(\tau_1, \tau_7), P_a'ccn(\tau_2, \tau_8), P_c'nna(\tau_3, \tau_5),$ $P_a'bcn(\tau_4, \tau_6)$	}	1	C_1	I
4	Pbam1'	Γ	$Pbam(\tau_1), Pb'a'm'(\tau_5), Pb'am(\tau_6, \tau_7), Pbam'(\tau_8)$	1	C_1	I	1
		Z	$P_c'bam(\tau_1, \tau_8), P_b'nma(\tau_2, \tau_3, \tau_6, \tau_7), P_c'nmn(\tau_4, \tau_5)$	1	C_1	I	2
		S	$P_a'2/m(\tau_1 + \tau_5, \tau_4 + \tau_8), P_a'2/c(\tau_2 + \tau_6, \tau_3 + \tau_7)$	}	2	C_4	I
		R	$C_a'2/m(\tau_1 + \tau_5, \tau_2 + \tau_6, \tau_3 + \tau_7, \tau_4 + \tau_8)$				
				2	C_4	I	2
6	Pccn1'	Γ	$Pccn(\tau_1), Pc'c'n'(\tau_5), Pc'cn(\tau_6, \tau_7), Pccn'(\tau_8)$	1	C_1	I	1
		R	$C_a'2/c(\tau_1 + \tau_5, \tau_2 + \tau_6, \tau_3 + \tau_7, \tau_4 + \tau_8)$	2	C_4	I	2
		S	$(P_a'2/c, C_a'cc2)(\tau_1, \tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
8	Pbcm1'	Γ	$Pbcm(\tau_1), Pb'c'm'(\tau_5), Pb'cm(\tau_6), Pbc'm(\tau_7), Pbcm'(\tau_8)$	1	C_1	I	1
		X	$P_b'bcm(\tau_1, \tau_6), P_b'bcn(\tau_2, \tau_5), P_a'bca(\tau_3, \tau_8),$ $P_b'nma(\tau_4, \tau_7)$	}	1	C_1	I
				1	C_1	I	2
4	Pnnm1'	Γ	$Pnnm(\tau_1), Pn'n'm'(\tau_5), Pn'nm(\tau_6, \tau_7), Pnnm'(\tau_8)$	1	C_1	I	1
		TU	$(P_a'2_1/c, C_a'2/m)(\tau_1, \tau_2)$	}	2	C_{4v}	I, II
		R	$(F_a'dd2, C_a'2/m)(\tau_1, \tau_2)$				
		S	$P_a'2/m(\tau_1 + \tau_5, \tau_4 + \tau_8), P_a'2/c(\tau_2 + \tau_6, \tau_3 + \tau_7)$				
				2	C_4	I	2
6	Pmmn1'	Γ	$Pmmn(\tau_1), Pm'm'n'(\tau_5), Pm'mn(\tau_6, \tau_7), Pmmn'(\tau_8)$	1	C_1	I	1
		Z	$P_c'mmn(\tau_1, \tau_8), P_a'nma(\tau_2, \tau_3, \tau_6, \tau_7), P_c'ccn(\tau_4, \tau_5)$	1	C_1	I	2
		S	$(P_a'2/c, C_a'mm2)(\tau_1, \tau_2)$	}	2	C_{4v}	I, II
		R	$(C_a'2/c, F_b'mm2)(\tau_1, \tau_2)$				
				2	C_{4v}	I, II	2, 2
8	Pbcn1'	Γ	$Pbcn(\tau_1), Pb'c'n'(\tau_5), Pb'cn(\tau_6), Pbc'n(\tau_7), Pbcn'(\tau_8)$	1	C_1	I	1
		S	$(C_a'2/c, P_a'2_1/c)(\tau_1, \tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
-434	Pbca1'	Γ	Pbca(τ ₁), Pb'c'a'(τ ₅), Pb'ca(τ ₆ , τ ₇ , τ ₈)	1	C ₁	I	1
		R	P _s ¹ (τ ₁ , τ ₁ , τ ₂ , τ ₂)	4	13.1	I	2
-442	Pnma1'	Γ	Pnma(τ ₁), Pn'm'a'(τ ₅), Pn'ma(τ ₆), Pnm'a(τ ₇), Pnma'(τ ₈)	1	C ₁	I	1
		U	P _a ² ₁ /m(τ ₁ , τ ₅ , τ ₄ , τ ₈), P _a ² ₁ /c(τ ₂ , τ ₆ , τ ₃ , τ ₇)	2	C ₄	I	2
		T	(C _a mc ₂ ₁ , P _a ² ₁ /c)(τ ₁ , τ ₂)	2	C _{4v}	I, II	2, 2
-458	Cmcm1'	Γ	Cmcm(τ ₁), Cm'c'm'(τ ₅), Cm'cm(τ ₆), Cmc'm(τ ₇), Cmcm'(τ ₈)	1	C ₁	I	1
		Y	P _A mma(τ ₁), P _A nnm(τ ₂), P _C bcm(τ ₃), P _B nma(τ ₄), P _B nna(τ ₅), P _C bcm(τ ₆), P _A mmn(τ ₇), P _A nma(τ ₈)	1	C ₁	I	2
		S	(P _a ² ₁ /m, C _a mcm)(τ ₁ , τ ₄), (P _a ² ₁ /c, C _a mca)(τ ₂ , τ ₃)	2	C _{4v}	I, II	2, 2
-470	Cmca1'	Γ	Cmca(τ ₁), Cm'c'a'(τ ₅), Cm'ca(τ ₆), Cmc'a(τ ₇), Cmca'(τ ₈)	1	C ₁	I	1
		Y	P _A bam(τ ₁), P _C mna(τ ₂), P _C bca(τ ₃), P _A ccn(τ ₄), P _A bcn(τ ₅), P _A cca(τ ₆), P _C nma(τ ₇), P _B bcm(τ ₈)	1	C ₁	I	2
		R	(P _s ¹ , C _a ² /m)(τ ₁ , τ ₂ , τ ₃ , τ ₄)	4	26.4	I, II	2, 2
-482	Cmmm1'	Γ	Cmmm(τ ₁), Cm'm'm'(τ ₅), Cm'mm(τ ₆ , τ ₇), Cmmm'(τ ₈)	1	C ₁	I	1
		Y	P _C mmm(τ ₁), P _B mna(τ ₂ , τ ₃), P _C bam(τ ₄), P _C ban(τ ₅), P _B mma(τ ₆ , τ ₇), P _C mmn(τ ₈)	1	C ₁	I	2
		Z	C _c mmm(τ ₁ , τ ₈), C _c mcm(τ ₂ , τ ₃ , τ ₆ , τ ₇), C _c ccm(τ ₄ , τ ₅)	2	C _{4v}	I, II	2, 4
		T	I _c mmm(τ ₁ , τ ₈), I _a mma(τ ₂ , τ ₃ , τ ₆ , τ ₇), I _c bam(τ ₄ , τ ₅)				
		R	(C _a ² /m, F _B mmm)(τ ₁ , τ ₃), (C _a ² /c, F _B mmm)(τ ₂ , τ ₄)	2	C _{4v}	I, II	2, 4
		S	(P _a ² /m, C _a mmm)(τ ₁ , τ ₄), (P _a ² /c, C _a mma)(τ ₂ , τ ₃)				
-492	Cccm1'	Γ	Cccm(τ ₁), Cc'c'm'(τ ₅), Cc'cm(τ ₆ , τ ₇), Cccm'(τ ₈)	1	C ₁	I	1
		Y	P _C ccm(τ ₁), P _A nna(τ ₂ , τ ₃), P _C nnm(τ ₄), P _C nnn(τ ₅), P _A mna(τ ₆ , τ ₇), P _C ccn(τ ₈)	1	C ₁	I	2
		R	(C _a ² /m, F _S ddd)(τ ₁ , τ ₃), (C _a ² /c, F _S ddd)(τ ₂ , τ ₄)	2	C _{4v}	I, II	2, 4
		S	(P _a ² /m, C _a ccm)(τ ₁ , τ ₄), (P _a ² /c, C _a cca)(τ ₂ , τ ₃)				
-502	Cmma1'	Γ	Cmma(τ ₁), Cm'm'a'(τ ₅), Cm'ma(τ ₆ , τ ₇), Cmma'(τ ₈)	1	C ₁	I	1
		Y	P _A ccm(τ ₁ , τ ₅), P _C mma(τ ₂ , τ ₇), P _B cca(τ ₃ , τ ₆), P _A bcm(τ ₄ , τ ₈)	1	C ₁	I	2
		Z	C _c mma(τ ₁ , τ ₈), C _c mca(τ ₂ , τ ₃ , τ ₆ , τ ₇), C _c cca(τ ₄ , τ ₅)	2	C _{4v}	I, II	2, 4
		T	I _a bam(τ ₁ , τ ₄ , τ ₅ , τ ₈), I _c bca(τ ₃ , τ ₆), I _c mma(τ ₂ , τ ₇)				
-512	Ccca1'	Γ	Ccca(τ ₁), Cc'c'a'(τ ₅), Cc'ca(τ ₆ , τ ₇), Ccca'(τ ₈)	1	C ₁	I	1
		Y	P _A ban(τ ₁ , τ ₅), P _C nna(τ ₂ , τ ₇), P _C cca(τ ₃ , τ ₆), P _B bcm(τ ₄ , τ ₈)	1	C ₁	I	2



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
22	Fmmm1'	Γ	Fmmm(τ_1), Fm'm'm'(τ_5), Fm'mm(τ_6, τ_7, τ_8)	1	C ₁	I	1
		XT	C _A mmm(τ_1), C _A ccm(τ_2), C _A mca(τ_3, τ_4), C _A cca(τ_5), C _A mma(τ_6), C _A mcm(τ_7, τ_8)				
		Y	C _A mmm(τ_1), C _A ccm(τ_3), C _A mca(τ_2, τ_4), C _A cca(τ_5), C _A mcm(τ_6, τ_8), C _A mma(τ_7)	1	C ₁	I	2
		Z	C _A mmm(τ_1), C _A mca(τ_2, τ_3), C _A ccm(τ_4), C _A cca(τ_5), C _A mcm(τ_6, τ_7), C _A mma(τ_8)				
		R	(P _S ¹ , C _a 2/m, C _a 2/m, C _a 2/m, F _S mmm, F _S ddd)(τ_1), (P _S ¹ , C _a 2/c, C _a 2/c, C _a 2/c, F _S mmm, F _S ddd)(τ_2)	4	56.1	I, II, III IV, V, VI	2, 4, 4 4, 8, 8
28	Fddd1'	Γ	Fddd(τ_1), Fd'd'd'(τ_5), Fd'dd(τ_6, τ_7, τ_8)	1	C ₁	I	1
		R	(P _S ¹ , C _a 2/c, C _a 2/c, C _a 2/c, F _S 222)(τ_1, τ_2)	4	82.01	I, II, III IV, V	2, 4, 4 4, 8
34	Immm1'	Γ	Immm(τ_1), Im'm'm'(τ_5), Im'mm(τ_6, τ_7, τ_8)	1	C ₁	I	1
		X	P _I mmm(τ_1), P _I nnm(τ_2, τ_3, τ_4), P _I nnn(τ_5), P _I mmn(τ_6, τ_7, τ_8)				
		U	(C _a 2/m, C _a mmm)(τ_1, τ_4), (C _a 2/c, C _a mma)(τ_2, τ_3)	2	C _{4v}	I, II	2, 4 2, 4
		TS	(C _c 2/m, C _a mmm)(τ_1, τ_4), (C _c 2/c, C _a mma)(τ_2, τ_3)				
		R	(F _S mmm, F _S ddd)($\tau_1 + \tau_4$)				4, 4
40	Ibam1'	Γ	Ibam(τ_1), Ib'a'm'(τ_5), Ib'am(τ_6, τ_7), Ibam'(τ_8)	1	C ₁	I	1
		X	P _I ccm(τ_1), P _I bcm(τ_2, τ_3), P _I bam(τ_4), P _I ban(τ_5), P _I bcm(τ_6, τ_7), P _I ccn(τ_8)				
		S	(C _c 2/m, C _a ccm)(τ_1, τ_4), (C _c 2/c, C _a cca)(τ_2, τ_3)	2	C _{4v}	I, II	2, 4
49	Ibca1'	Γ	Ibca(τ_1), Ib'c'a'(τ_5), Ib'ca(τ_6, τ_7, τ_8)	1	C ₁	I	1
		X	P _I bca(τ_1, τ_5), P _I cca($\tau_2, \tau_3, \tau_4, \tau_6, \tau_7, \tau_8$)	1	C ₁	I	2
55	Imma1'	Γ	Imma(τ_1), Im'm'a'(τ_5), Im'ma(τ_6, τ_7), Imma'(τ_8)	1	C ₁	I	1
		X	P _I mma(τ_1, τ_8), P _I mna(τ_2, τ_6), P _I nma(τ_3, τ_7), P _I nna(τ_4, τ_5)				
		U	(C _a 2/m, C _a mcm)(τ_1, τ_4), (C _a 2/c, C _a mca)(τ_2, τ_3)	2	C _{4v}	I, II	2, 4
		T	(C _c 2/m, C _a mcm)(τ_1, τ_4), (C _c 2/c, C _a mca)(τ_2, τ_3)				



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
TRAGONAL								
75-2	P4 ₁ ²	Γ	P4 ₁ ² (τ ₂)	1	C ₁	I	1	
		Z	P _c 4 ₁ ² (τ ₁), P _c 4 ₂ ² (τ ₂)	}	1	C ₁	I	2
		M	P _c 4 ₁ ² (τ ₁ , τ ₂)					
		A	I _c 4 ₁ ² (τ ₁ , τ ₂)	}	2	C _{4v}	I, II	2, 4
		R	(C _a 2, I _c 4 ₁ ²)(τ ₁ , τ ₂)					
X	(P _a 2, P _c 4 ₁ ²)(τ ₁ , τ ₂)							
76-8	P4 ₁ 1 ²	Γ	P4 ₁ ² (τ ₂)	1	C ₁	I	1	
		M	P _c 4 ₁ ² (τ ₁ , τ ₂)	1	C ₁	I	2	
		X	(P _a 2 ₁ , P _c 4 ₁ ²)(τ ₁ , τ ₂)	2	C _{4v}	I, II	2, 4	
77-14	P4 ₂ 1 ²	Γ	P4 ₂ ² (τ ₂)	1	C ₁	I	1	
		Z	P _c 4 ₁ ² (τ ₃), P _c 4 ₃ ² (τ ₄)	}	1	C ₁	I	2
		M	P _c 4 ₂ ² (τ ₁ , τ ₂)					
		A	I _c 4 ₁ ² (τ ₃ , τ ₄)	}	2	C _{4v}	I, II	2, 4
		R	(C _a 2, I _c 4 ₁ ²)(τ ₁ , τ ₂)					
X	(P _a 2, P _c 4 ₂ ²)(τ ₁ , τ ₂)							
78-20	P4 ₃ 1 ²	Γ	P4 ₃ ² (τ ₂)	1	C ₁	I	1	
		M	P _c 4 ₃ ² (τ ₁ , τ ₂)	1	C ₁	I	2	
		X	(P _a 2 ₁ , P _c 4 ₃ ²)(τ ₁ , τ ₂)	2	C _{4v}	I, II	2, 4	
79-26	I4 ₁ ²	Γ	I4 ₁ ² (τ ₂)	1	C ₁	I	1	
		MZ	P _I 4 ₁ ² (τ ₁), P _I 4 ₂ ² (τ ₂)	1	C ₁	I	2	
		A	(I _c 4 ₁ ² , I _c 4 ₁ ²)(τ ₁)	2	C _{4v}	I, II	4, 4	
		X	(C _c 2, P _c 4 ₁ ²)(τ ₁), (C _c 2, P _c 4 ₂ ²)(τ ₂)	2	C _{4v}	I, II	2, 4	
		N	(P _s 1, C _a 2, P _s 1, P _s 1, I _c 4 ₁ ²)(τ ₁)	4	58.01	I, II, III IV, V	2, 4, 4 4, 8	
80-30	I4 ₁ 1 ²	Γ	I4 ₁ ² (τ ₂)	1	C ₁	I	1	
		MZ	P _I 4 ₁ ² (τ ₁), P _I 4 ₃ ² (τ ₂)	1	C ₁	I	2	
		X	(C _c 2, P _c 4 ₁ ²)(τ ₁), (C _c 2, P _c 4 ₃ ²)(τ ₂)	2	C _{4v}	I, II	2, 4	
		N	(P _s 1, P _s 1, C _a 2, C _a 2)(τ ₁)	4	59.1	I, II, III, IV	2, 4, 4, 8	
81-34	P4̄ ₁ 1 ²	Γ	P4̄ ₁ ² (τ ₂)	1	C ₁	I	1	
		Z	P _c 4̄ ₁ ² (τ ₁ , τ ₂)	1	C ₁	I	2	
			P _b 2 ₁ ² (τ ₃ , τ ₄)	2	C ₄	I	2	
		M	P _c 4̄ ₁ ² (τ ₁ , τ ₂)	1	C ₁	I	2	
			P _a 2 ₁ ² (τ ₃ , τ ₄)	2	C ₄	I	2	
		A	I _c 4̄ ₁ ² (τ ₁ , τ ₂)	1	C ₁	I	2	
			C _a 2 ₁ ² (τ ₃ , τ ₄)	2	C ₄	I	2	
		R	(C _a 2, I _c 4̄ ₁ ²)(τ ₁ , τ ₂)	2	C _{4v}	I, II	2, 4	
		X	(P _a 2, P _c 4̄ ₁ ²)(τ ₁ , τ ₂)	2	C _{4v}	I, II	2, 4	



(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
I41'	Γ	$I4'(τ_2)$	1	C_1	I	1	
		MZ	$P_1^4(τ_1, τ_2)$	1	C_1	I	2
			$P_C^2(τ_3, τ_4)$	2	C_4	I	2
		A	$I_C^4(τ_1, τ_2, τ_3, τ_4)$	2	C_4	I	4
		X	$(C_C^2, P_C^4)(τ_1, τ_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4
		N	$(P_B^1, P_B^1, C_A^2, P_B^1, I_C^4)(τ_1)$	4	58.01	I, II, III IV, V	2, 4, 4 4, 8
P4/m1'	Γ	$P4'/m(τ_2), P4'/m'(τ_5), P4'/m'(τ_6),$	1	C_1	I	1	
		$P2'/m(τ_7, τ_8)$	2	C_4	I	1	
	Z	$P_C^4/m(τ_1, τ_5), P_C^4/m(τ_2, τ_6),$	1	C_1	I	2	
		$P_B^2/m(τ_3, τ_4, τ_7, τ_8)$	2	C_4	I	2	
	M	$P_C^4/m(τ_1, τ_2), P_C^4/n(τ_5, τ_6),$	1	C_1	I	2	
		$P_A^2/c(τ_3, τ_4), P_A^2/m(τ_7, τ_8)$	2	C_4	I	2	
	A	$I_C^4/m(τ_1, τ_2, τ_5, τ_6)$	1	C_1	I	2	
		$C_A^2/m(τ_3, τ_4, τ_7, τ_8)$	2	C_4	I	2	
	R	$(C_C^2/m, I_C^4/m)(τ_1, τ_2, τ_3, τ_4)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4	
	X	$(P_A^2/m, P_C^4/m)(τ_1, τ_4), (P_A^2/c, P_C^4/n)(τ_2, τ_3)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4	
P4 ₂ /m1'	Γ	$P4_2'/m(τ_2), P4_2'/m'(τ_5), P4_2'/m'(τ_6),$	1	C_1	I	1	
		$P2'/m(τ_7, τ_8)$	2	C_4	I	1	
	Z	$(P_C^4, P_B^2/m)(τ_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
	M	$P_C^4/m(τ_1, τ_2), P_C^4/n(τ_5, τ_6),$	1	C_1	I	2	
		$P_A^2/c(τ_3, τ_4), P_A^2/m(τ_7, τ_8)$	2	C_4	I	2	
	A	$(I_C^4, C_A^2/m)(τ_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
	R	$(C_C^2/m, I_C^4/a)(τ_1, τ_4)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4	
	X	$(P_A^2/m, P_C^4/m)(τ_1, τ_4), (P_A^2/c, P_C^4/n)(τ_2, τ_3)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4	
P4/n1'	Γ	$P4'/n(τ_2), P4'/n'(τ_5), P4'/n'(τ_6),$	1	C_1	I	1	
		$P2'/c(τ_7, τ_8)$	2	C_4	I	1	
	Z	$P_C^4/n(τ_1, τ_5), P_C^4/n(τ_2, τ_6),$	1	C_1	I	2	
		$P_B^2/c(τ_3, τ_4, τ_7, τ_8)$	2	C_4	I	2	
	M	$(P_C^4, P_A^2/c)(τ_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
	A	$(I_C^4, C_A^2/c)(τ_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
P4 ₂ /n1'	Γ	$P4_2'/n(τ_2), P4_2'/n'(τ_5), P4_2'/n'(τ_6),$	1	C_1	I	1	
		$P2'/c(τ_7, τ_8)$	2	C_4	I	1	
	Z	$(P_C^4, P_B^2/c)(τ_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
	M	$(P_C^4, P_A^2/c)(τ_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
	A	$I_C^4/a(τ_1, τ_2, τ_5, τ_6)$	1	C_1	I	2	
$C_A^2/c(τ_3, τ_4, τ_7, τ_8)$		2	C_4	I	2		



(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
I4/m1'	Γ	I4'/m(τ ₂), I4'/m'(τ ₅), I4'/m'(τ ₆),	1	C ₁	I	1	
		C2'/m(τ ₇ +τ ₈)	2	C ₄	I	1	
	MZ	P _I ⁴ /m(τ ₁), P _I ⁴ ₂ /m(τ ₂), P _I ⁴ /n(τ ₅), P _I ⁴ ₂ /n(τ ₆),	1	C ₁	I	2	
		P _C ² ₁ /c(τ ₃ +τ ₄), P _C ² ₁ /m(τ ₇ +τ ₈)	2	C ₄	I	2	
	A	(I _c ⁴ /m, I _c ⁴ ₁ /a)(τ ₁ , τ ₂)	2	C _{4v}	I, II	4, 4	
	X	(C _c ² /m, P _C ⁴ /m)(τ ₁), (C _c ² /c, P _C ⁴ ₂ /n)(τ ₂),	}	2	C _{4v}	I, II	2, 4
(C _c ² /c, P _C ⁴ /n)(τ ₃), (C _c ² /m, P _C ⁴ ₂ /m)(τ ₄)							
N	(P _s ¹ , P _s ¹ , C _a ² /m, P _s ¹ , I _c ⁴ /m)(τ ₁ , τ ₂)	4	58.01		I, II, III IV, V	2, 4, 4 4, 8	
I4 ₁ /a1'	Γ	I4 ₁ '/a(τ ₂), I4 ₁ '/a'(τ ₅), I4 ₁ '/a'(τ ₆),	1	C ₁	I	1	
		C2'/c(τ ₇ +τ ₈)	2	C ₄	I	1	
	MZ	(P _I ⁴ _{1,3} , P _C ² ₁ /c)(τ ₂)	2	C _{4v}	I, II	2, 2	
	N	(P _s ¹ , P _s ¹ , C _a ² /c, I _c ⁴)(τ ₁ , τ ₂)	4	80.01		I, II, III, IV	2, 4, 4,
P4221'	Γ	P422(τ ₁), P4'22'(τ ₃), P4'2'2(τ ₄)	1	C ₁	I	1	
	Z	P _c ⁴ 22(τ ₁ , τ ₂), P _c ⁴ ₂ 22(τ ₃ , τ ₄)	}	1	C ₁	I	
	M	P _c ⁴ 22(τ ₁ , τ ₃), P _c ⁴ ₂ 2(τ ₂ , τ ₄)					
	A	I _c ⁴ 22(τ ₁ +τ ₄)					
	R	(C _a ² 222, I _c ⁴ 22)(τ ₁ +τ ₄)	}	2	C _{4v}	I, II	2, 4
	X	(P _a ² 222, P _c ⁴ 22)(τ ₁ , τ ₃), (P _c ² 222 ₁ , P _c ⁴ ₂ 2)(τ ₂ , τ ₄)					
P4 ₂ 2 ₁ '	Γ	P4 ₂ 2(τ ₁), P4'2 ₁ 2'(τ ₃), P4'2' ₁ 2(τ ₄)	1	C ₁	I	1	
	Z	P _c ⁴ ₂ 2(τ ₁ , τ ₂), P _c ⁴ ₂ 2 ₁ 2(τ ₃ , τ ₄)	1	C ₁	I	2	
	M	(P _C ⁴ , P _C ² ₁ 2 ₁ 2)(τ ₁)	2	C _{4v}	I, II	2, 2	
		P _A ² 22 ₁ (τ ₂ +τ ₃ +τ ₄ +τ ₅)	2	C ₄	I	2	
	A	(I _c ⁴ , I _c ² 222)(τ ₁)	2	C _{4v}	I, II	2, 2	
		I _c ² ₁ 2 ₁ 2 ₁ (τ ₂ +τ ₃ +τ ₄ +τ ₅)	2	C ₄	I	2	
	P4 ₁ 221'	Γ	P4 ₁ 22(τ ₁), P4 ₁ 22'(τ ₃), P4 ₁ 2'2(τ ₄)	1	C ₁	I	1
M		P _C ⁴ ₁ 22(τ ₁ , τ ₃), P _C ⁴ ₁ 2' ₁ 2(τ ₂ , τ ₄)	1	C ₁	I	2	
X		(P _a ² 22 ₁ , P _C ⁴ ₁ 22)(τ ₁ , τ ₃), (P _a ² ₁ 2' ₁ 2, P _C ⁴ ₁ 2' ₁ 2)(τ ₂ , τ ₄)	2	C _{4v}	I, II	2, 4	
P4 ₁ 2' ₁ 21'	Γ	P4 ₁ 2' ₁ 2(τ ₁), P4 ₁ 2' ₁ 2'(τ ₃), P4 ₁ 2' ₁ 2(τ ₄)	1	C ₁	I	1	
	M	(P _C ⁴ ₁ , P _C ² ₁ 2' ₁ 2 ₁)(τ ₁),	2	C _{4v}	I, II	2, 2	
		P _A ² ₁ 2' ₁ 2(τ ₂ +τ ₃ +τ ₄ +τ ₅)	2	C ₄	I	2	
	R	(P _a ² ₁ , P _a ² ₁ , C _a ² , C _a ²)(τ ₁ +τ ₂ +τ ₃ +τ ₄)	4	59.1		I, II, III, IV	2, 2, 4,



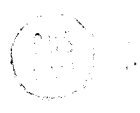
(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)		
120	P ₄ ² 221'	Γ P ₄ ² 22(τ ₁), P ₄ ² 22'(τ ₃), P ₄ ² 2'2(τ ₄)	1	C ₁	I	1		
		Z P _c ⁴ ₁ 22(τ ₂ , τ ₅), P _c ⁴ ₃ 22(τ ₃ , τ ₄)	}	1	C ₁	I	2	
		M P _c ⁴ ₂ 22(τ ₁ , τ ₃), P _c ⁴ ₂ 2'2(τ ₂ , τ ₄)						
		A I _c ⁴ ₁ 22(τ ₂ +τ ₅)						
		R (C _a ² 22, I _c ⁴ ₁ 22)(τ ₁ +τ ₄)	}	2	C _{4v}	I, II	2, 4	
X (P _a ² 22, P _c ⁴ ₂ 22)(τ ₁ , τ ₃), (P _c ² 22 ₁ , P _c ⁴ ₂ 2'2)(τ ₂ , τ ₄)								
128	P ₄ ² 2 ₁ 21'	Γ P ₄ ² 2 ₁ 2(τ ₁), P ₄ ² 2 ₁ 2'(τ ₃), P ₄ ² 2' ₁ 2(τ ₄)	1	C ₁	I	1		
		Z P _c ⁴ ₁ 2 ₁ 2(τ ₂ , τ ₅), P _c ⁴ ₃ 2 ₁ 2(τ ₃ , τ ₄)	1	C ₁	I	2		
		M {	P _A ² 22 ₁ (τ ₂ +τ ₃ , τ ₄ +τ ₅)	2	C ₄	I	2	
			(P _c ⁴ ₂ , P _c ² ₁ 2 ₁ 2)(τ ₁)	2	C _{4v}	I, II	2, 2	
		A {	I _c ² 22(τ ₂ +τ ₃ , τ ₄ +τ ₅)	2	C ₄	I	2	
			(I _c ⁴ ₁ , I _c ² ₁ 2 ₁ 2 ₁)(τ ₁)	2	C _{4v}	I, II	2, 2	
136	P ₄ ³ 221'	Γ P ₄ ³ 22(τ ₁), P ₄ ³ 22'(τ ₃), P ₄ ³ 2'2(τ ₄)	1	C ₁	I	1		
		M P _c ⁴ ₃ 22(τ ₁ , τ ₃), P _c ⁴ ₃ 2'2(τ ₂ , τ ₄)	1	C ₁	I	2		
		X (P _a ² 22 ₁ , P _c ⁴ ₃ 22)(τ ₁ , τ ₃), (P _a ² ₁ 2'2, P _c ⁴ ₃ 2'2)(τ ₂ , τ ₄)	2	C _{4v}	I, II	2, 4		
144	P ₄ ³ 2 ₁ 21'	Γ P ₄ ³ 2 ₁ 2(τ ₁), P ₄ ³ 2 ₁ 2'(τ ₃), P ₄ ³ 2' ₁ 2(τ ₄)	1	C ₁	I	1		
		M {	P _c ² 22 ₁ (τ ₂ +τ ₃), P _c ² ₁ 2'2 ₁ (τ ₄ +τ ₅)	2	C ₄	I	2	
			(P _c ⁴ ₃ , P _c ² ₁ 2'2 ₁)(τ ₁)	2	C _{4v}	I, II	2, 2	
		R (P _a ² ₁ , P _a ² ₁ , C _a ² , C _a ²)(τ ₁ +τ ₂ , τ ₃ +τ ₄)	4	59.1	I, II, III, IV	2, 2, 4, 4		
152	I ₄ ² 221'	Γ I ₄ ² 22(τ ₁), I ₄ ² 22'(τ ₃), I ₄ ² 2'2(τ ₄)	1	C ₁	I	1		
		MZ P _I ⁴ 22(τ ₁), P _I ⁴ 2 ₁ 2(τ ₂), P _I ⁴ 22(τ ₃), P _I ⁴ 2'2(τ ₄)	1	C ₁	I	2		
		A (I _c ⁴ 22, I _c ⁴ ₁ 22)(τ ₁ , τ ₄)	}	2	C _{4v}	I, II	4, 4	
		X {					(C _A ² 22, P _c ⁴ 22)(τ ₁), (C _A ² 22 ₁ , P _c ⁴ ₂ 2'2)(τ ₂),	2, 4
							(C _A ² 22 ₁ , P _c ⁴ ₂ 22)(τ ₃), (C _A ² 22, P _c ⁴ ₂ 2'2)(τ ₄)	2, 4
N (C _c ² , C _a ² , C _a ² 22, I _c ⁴ ₁ 22, I _c ⁴ 22)(τ ₁ , τ ₂)	4	82.01	I, II, III, IV, V	2, 4, 4, 8, 8				
158	I ₄ ¹ 221'	Γ I ₄ ¹ 22(τ ₁), I ₄ ¹ 22'(τ ₃), I ₄ ¹ 2'2(τ ₄)	1	C ₁	I	1		
		MZ P _I ⁴ ₁ 22(τ ₂), P _I ⁴ ₃ 2'2(τ ₃), P _I ⁴ ₃ 22(τ ₄), P _I ⁴ ₁ 2'2(τ ₅)	1	C ₁	I	2		
		X {	(C _A ² 22, P _c ⁴ ₁ 22)(τ ₁), (C _A ² 22 ₁ , P _c ⁴ ₃ 22)(τ ₂),	}	2	C _{4v}	I, II	2, 4
			(C _A ² 22 ₁ , P _c ⁴ ₃ 2'2)(τ ₃), (C _A ² 22, P _c ⁴ ₁ 2'2)(τ ₄)					
N (C _c ² , C _a ² , C _a ² 22 ₁ , I _c ² 22)(τ ₁ , τ ₂)	4	80.01	I, II, III, IV	2, 4, 4, 8				



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
164	P4nm1'	Γ	$P4nm(\tau_1), P4'mm'(\tau_3), P4'm'm(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		Z	$P_c^4mm(\tau_1), P_c^4cc(\tau_2), P_c^4_2mc(\tau_3), P_c^4_2cm(\tau_4)$	1	C_1	I	2
			$(P_c^4mc_2, C_c^4mc_2)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2,2
		A	$I_c^4mm(\tau_1, \tau_3), I_c^4cm(\tau_2, \tau_4),$	1	C_1	I	2
			$(F_s^4mm_2, I_c^4ma_2)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2,2
		M	$P_c^4mm(\tau_1, \tau_3), P_c^4bm(\tau_2, \tau_4),$	1	C_1	I	2
			$(C_a^4mm_2, P_c^4ma_2)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2,2
		R	$(A_c^4mm_2, I_c^4_4mm)(\tau_1, \tau_2), (A_c^4bm_2, I_c^4_4cm)(\tau_3, \tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2,4
		X	$(P_a^4mm_2, P_c^4_4mm)(\tau_1, \tau_2), (P_a^4ma_2, P_c^4_4bm)(\tau_3, \tau_4)$				
172	P4bm1'	Γ	$P4bm(\tau_1), P4'bm'(\tau_3), P4'b'm(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		Z	$P_c^4bm(\tau_1), P_c^4nc(\tau_2), P_c^4_2bc(\tau_3), P_c^4_2nm(\tau_4)$	1	C_1	I	2
			$(P_c^4na_2, C_c^4mc_2)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2,2
		A	$(I_c^4, I_c^4ma_2)(\tau_1)$	2	C_{4v}	I, II	2,2
		M	$(P_c^4, P_c^4ma_2)(\tau_1)$				
180	P4 ₂ cm1'	Γ	$P4_2cm(\tau_1), P4'_2cm'(\tau_3), P4'_2c'm(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		Z	$(P_c^4_{1,3}, C_c^4mc_2)(\tau_1)$	2	C_{4v}	I, II	2,2
		A	$(I_c^4_1, I_c^4ma_2)(\tau_1)$				
		M	$P_c^4_2mc(\tau_1, \tau_3), P_c^4_2bc(\tau_2, \tau_4)$	1	C_1	I	2
			$(C_a^4cc_2, P_c^4ma_2)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2,2
		X	$(P_a^4cc_2, P_c^4_2cm)(\tau_1, \tau_2), (P_b^4nc_2, P_c^4_2nm)(\tau_3, \tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2,4
188	P4 ₂ nm1'	Γ	$P4_2nm(\tau_1), P4'_2nm'(\tau_3), P4'_2n'm(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		A	$I_c^4_1md(\tau_1, \tau_3), I_c^4_1cd(\tau_2, \tau_4)$	1	C_1	I	2
			$(F_s^4dd_2, I_c^4mm_2)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2,2
		M	$(P_c^4_2, P_c^4ba_2)(\tau_1)$	2	C_{4v}	I, II	2,2
		Z	$(P_c^4_{1,3}, C_c^4mc_2)(\tau_1)$				
196	P4cc1'	Γ	$P4cc(\tau_1), P4'cc'(\tau_3), P4'c'c(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		M	$P_c^4cc(\tau_1, \tau_3), P_c^4nc(\tau_2, \tau_4)$	1	C_1	I	2
			$(C_a^4cc_2, P_c^4nc_2)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2,2
		X	$(P_a^4cc_2, P_c^4_4cc)(\tau_1, \tau_2), (P_b^4nc_2, P_c^4_4nc)(\tau_3, \tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2,4
204	P4nc1'	Γ	$P4nc(\tau_1), P4'nc'(\tau_3), P4'n'c(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		A	$(I_c^4, F_s^4dd_2)(\tau_1)$	2	C_{4v}	I, II	2,2
		M	$(P_c^4, P_c^4nc_2)(\tau_1)$				



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
212	P4 ₂ mc1'	Γ	P4 ₂ mc(τ ₁), P4 ₂ 'mc'(τ ₃), P4 ₂ 'm'c(τ ₄)	1	C ₁	I	1	
			M	P _C ⁴ ₂ cm(τ ₁ , τ ₃), P _C ⁴ ₂ nm(τ ₂ , τ ₄)	1	C ₁	I	2
				[C _a mm2, P _C nc2](τ ₅)	2	C _{4v}	I, II	2, 2
			A	(I _C ⁴ ₁ , F _S mm2)(τ ₁)	2	C _{4v}	I, II	2, 2
			Z	(P _C ⁴ _{1,3} , P _C mc2 ₁)(τ ₁)				
			X	(A _C mm2, I _C ⁴ ₁ md)(τ ₁ , τ ₂), (A _C bm2, I _C ⁴ ₁ cd)(τ ₃ , τ ₄)	2	C _{4v}	I, II	2, 4
R	(P _a mm2, P _C ⁴ ₂ mc)(τ ₁ , τ ₂), (P _b ma2, P _C ⁴ ₂ bc)(τ ₃ , τ ₄)							
220	P4 ₂ bc1'	Γ	P4 ₂ bc(τ ₁), P4 ₂ 'bc'(τ ₃), P4 ₂ 'b'c(τ ₄)	1	C ₁	I	1	
			Z	(P _C ⁴ _{1,3} , P _C na2 ₁)(τ ₁)	2	C _{4v}	I, II	2, 2
			M	(P _C ⁴ ₂ , P _C nc2)(τ ₁)				
228	I4mm1'	Γ	I4mm(τ ₁), I4'mm'(τ ₃), I4'm'm(τ ₄)	1	C ₁	I	1	
			MZ	P _I ⁴ mm(τ ₁), P _I ⁴ nc(τ ₂), P _I ⁴ ₂ mc(τ ₃), P _I ⁴ ₂ nm(τ ₄)	1	C ₁	I	2
				(P _I mn2 ₁ , C _A mc2 ₁)(τ ₅)	2	C _{4v}	I, II	2, 2
			X	(A _C mm2, P _C ⁴ mm)(τ ₁), (A _C ma2, P _C ⁴ ₂ cm)(τ ₂)	2	C _{4v}	I, II	2, 4
				(A _C ba2, P _C ⁴ bm)(τ ₃), (A _C bm2, P _C ⁴ ₂ nm)(τ ₄)				
			A	(I _C ⁴ mm, I _C ⁴ ₁ md)(τ ₁), (I _C ⁴ cm, I _C ⁴ ₁ cd)(τ ₃)	2	C _{4v}	I, II	4, 4
				(I _C ma2, F _S dd2)(τ ₂ , τ ₂ , τ ₄ , τ ₄)	4	26.1	I, II	4, 4
N	(C _C m, C _a m, A _C mm2, I _C ⁴ ₁ md, I _C ⁴ mm)(τ ₁), (C _C c, C _a c, A _C bm2, I _C ⁴ ₁ cd, I _C ⁴ cm)(τ ₂)	4	82.01	{ I, II, III IV, V	{ 2, 4, 4 8, 8			
234	I4cm1'	Γ	I4cm(τ ₁), I4'cm'(τ ₃), I4'c'm(τ ₄)	1	C ₁	I	1	
			MZ	P _I ⁴ bm(τ ₁), P _I ⁴ cc(τ ₂), P _I ⁴ ₂ bc(τ ₃), P _I ⁴ ₂ cm(τ ₄)	1	C ₁	I	2
				(P _I ca2 ₁ , C _A mc2 ₁)(τ ₅)	2	C _{4v}	I, II	2, 2
			X	(A _C ma2, P _C ⁴ nc)(τ ₁), (A _C mm2, P _C ⁴ ₂ mc)(τ ₂), (A _C bm2, P _C ⁴ cc)(τ ₃), (A _C ba2, P _C ⁴ ₂ bc)(τ ₄)	2	C _{4v}	I, II	2, 4
240	I4 ₁ md1'	Γ	I4 ₁ md(τ ₁), I4 ₁ 'md'(τ ₃), I4 ₁ 'm'd(τ ₄)	1	C ₁	I	1	
			MZ	(P _I ⁴ _{1,3} , P _I mn2 ₁)(τ ₁)	2	C _{4v}	I, II	2, 2
			N	(C _C m, C _a c, A _C mm2, I _C mm2)(τ ₁), (C _C c, C _a c, A _C bm2, I _C ba2)(τ ₂)	4	80.01	I, II, III, IV	2, 4, 4, 8
246	I4 ₁ cd1'	Γ	I4 ₁ cd(τ ₁), I4 ₁ 'cd'(τ ₃), I4 ₁ 'c'd(τ ₄)	1	C ₁	I	1	
			MZ	(P _I ⁴ _{1,3} , P _I ca2 ₁)(τ ₁)	2	C _{4v}	I, II	2, 2



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
252	$P\bar{4}2m1'$	Γ	$P\bar{4}2m(\tau_1), P\bar{4}'2m'(\tau_3), P\bar{4}'2'm(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		Z	$P_c\bar{4}2m(\tau_1, \tau_4), P_c\bar{4}2c(\tau_2, \tau_3)$	1	C_1	I	2
		M	$(C_c mc2_1, P_c 222_1)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
		M	$P_c\bar{4}m2(\tau_1, \tau_3), P_c\bar{4}b2(\tau_2, \tau_4)$	1	C_1	I	2
		M	$(P_c ma2, C_c 222)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
		A	$I_c\bar{4}m2(\tau_1, \tau_4), I_c\bar{4}c2(\tau_2, \tau_3)$	1	C_1	I	2
		A	$(I_c ma2, F_s 222)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
		R	$(C_c 222, I_c\bar{4}2m)(\tau_1 + \tau_4)$				
		X	$(P_c 222, P_c\bar{4}2m)(\tau_1, \tau_3), (P_c 222_1, P_c\bar{4}2_1m)(\tau_2, \tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4
260	$P\bar{4}2c1'$	Γ	$P\bar{4}2c(\tau_1), P\bar{4}'2c'(\tau_3), P\bar{4}'2'c(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		Z	$P_c 222_1(\tau_2 + \tau_4, \tau_3 + \tau_5)$	2	C_4	I	2
		M	$P_c\bar{4}c2(\tau_1, \tau_3), P_c\bar{4}n2(\tau_2, \tau_4)$	1	C_1	I	2
		M	$(P_c nc2, P_c 222)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
		A	$F_s 222(\tau_2 + \tau_4, \tau_3 + \tau_5)$	2	C_4	I	2
		R	$(C_c 222, I_c\bar{4}2d)(\tau_1 + \tau_4)$				
		X	$(P_c 222, P_c\bar{4}2c)(\tau_1, \tau_3), (P_c 222_1, P_c\bar{4}2_1c)(\tau_2, \tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4
268	$P\bar{4}2_1m1'$	Γ	$P\bar{4}2_1m(\tau_1), P\bar{4}'2_1m'(\tau_3), P\bar{4}'2'_1m(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		Z	$P_c\bar{4}2_1m(\tau_1, \tau_4), P_c\bar{4}2_1c(\tau_2, \tau_3)$	1	C_1	I	2
		M	$(C_c mc2_1, P_c 2_1 2_1 2_1)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
		M	$(P_c\bar{4}, P_c ma2)(\tau_1)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
		M	$P_c ba2(\tau_2 + \tau_5), P_c mm2(\tau_3 + \tau_4)$	2	C_4	I	2
		A	$(I_c\bar{4}, I_c ma2)(\tau_1)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
		A	$I_c ba2(\tau_2 + \tau_5), I_c mm2(\tau_3 + \tau_4)$	2	C_4	I	2
276	$P\bar{4}2_1c1'$	Γ	$P\bar{4}2_1c(\tau_1), P\bar{4}'2_1c'(\tau_3), P\bar{4}'2'_1c(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		Z	$P_c 2_1 2_1 2_1(\tau_2 + \tau_4, \tau_3 + \tau_5)$	2	C_4	I	2
		A	$C_c 2(\tau_1)$	4	13.1	I	2
		A	$I_c\bar{4}(\tau_2 + \tau_3, \tau_4 + \tau_5)$	2	C_4	I	2
		M	$P_c cc2(\tau_2 + \tau_5), P_c nn2(\tau_3 + \tau_4)$	2	C_4	I	2
		M	$(P_c\bar{4}, P_c nc2)(\tau_1)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
284	$P\bar{4}m21'$	Γ	$P\bar{4}m2(\tau_1), P\bar{4}'m'2(\tau_3), P\bar{4}'m2'(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		Z	$P_c\bar{4}m2(\tau_1, \tau_4), P_c\bar{4}c2(\tau_2, \tau_3)$	1	C_1	I	2
		M	$(P_c mc2_1, C_c 222_1)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
		M	$P_c\bar{4}2m(\tau_1, \tau_4), P_c\bar{4}2_1m(\tau_2, \tau_3)$	1	C_1	I	2
		M	$(C_c mm2, P_c 222_1)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
		A	$I_c\bar{4}2m(\tau_1 + \tau_4)$	1	C_1	I	2
		A	$(F_s nm2, I_c 222)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
		R	$(A_c mm2, I_c\bar{4}m2)(\tau_1, \tau_2), (A_c bm2, I_c\bar{4}c2)(\tau_3, \tau_4)$				
		X	$(P_c mm2, P_c\bar{4}m2)(\tau_1, \tau_2), (P_c ma2, P_c\bar{4}b2)(\tau_3, \tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
292	P4c21'	Γ	$P\bar{4}c2(\tau_1), P\bar{4}'c'2(\tau_3), P\bar{4}'c2'(\tau_4)$	1	C_1	I	1	
			Z	$C_c222_1(\tau_2, \tau_5, \tau_3, \tau_4)$	2	C_4	I	2
			M	$P_c\bar{4}2c(\tau_1, \tau_4), P_c\bar{4}2_1c(\tau_2, \tau_3)$	1	C_1	I	2
				$(C_{ac}c2, P_A222_1)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
			A	$I_c222(\tau_2, \tau_5, \tau_3, \tau_4)$	2	C_4	I	2
X	$(P_{oc}c2, P_c\bar{4}c2)(\tau_1, \tau_2), (P_{nc}c2, P_c\bar{4}n2)(\tau_3, \tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4			
300	P4b21'	Γ	$P\bar{4}b2(\tau_1), P\bar{4}'b'2(\tau_3), P\bar{4}'b2'(\tau_4)$	1	C_1	I	1	
			Z	$P_c\bar{4}b2(\tau_1, \tau_4), P_c\bar{4}n2(\tau_2, \tau_3)$	1	C_1	I	2
				$(P_{cn}n2, C_c222_1)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
			M	$P_c222(\tau_2, \tau_5), P_c2_12_12(\tau_3, \tau_4)$	2	C_4	I	2
A	$I_c2_12_12_1(\tau_2, \tau_5, \tau_3, \tau_4)$							
308	P4n21'	Γ	$P\bar{4}n2(\tau_1), P\bar{4}'n'2(\tau_4), P\bar{4}'n'2(\tau_3)$	1	C_1	I	1	
			Z	$C_c222_1(\tau_2, \tau_5, \tau_3, \tau_4)$	2	C_4	I	2
			M	$P_c2_12_12(\tau_3, \tau_4), P_c222(\tau_2, \tau_5)$	2	C_4	I	2
			A	$I_c\bar{4}2d(\tau_1, \tau_4)$	1	C_1	I	2
$(F_{sd}d2, I_c2_12_12_1)(\tau_5)$	2	C_{4v}		I, II	2, 2			
316	I4m21'	Γ	$I\bar{4}m2(\tau_1), I\bar{4}'m'2(\tau_3), I\bar{4}'m2'(\tau_4)$	1	C_1	I	1	
			M2	$P_I\bar{4}m2(\tau_1, \tau_4), P_I\bar{4}m2(\tau_2, \tau_3)$	1	C_1	I	2
				$(P_{Imn}n2, C_A222_1)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
			A	$(I_c\bar{4}2m, I_c\bar{4}2d)(\tau_1, \tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	4, 4
			X	$(C_A222, P_c\bar{4}2m)(\tau_1, \tau_2), (C_A222_1, P_c\bar{4}2_1m)(\tau_3, \tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4
			N	$(C_{cm}, C_{a2}, A_{cmm}2, I_c\bar{4}m2, I_c\bar{4}m2)(\tau_1)$	4	82.01	{	I, II, III IV, V
$(C_{cc}, C_{a2}, A_{cbm}2, I_c\bar{4}c2, I_c\bar{4}c2)(\tau_2)$								
322	I4c21'	Γ	$I\bar{4}c2(\tau_1), I\bar{4}'c'2(\tau_3), I\bar{4}'c2'(\tau_4)$	1	C_1	I	1	
			M2	$P_I\bar{4}c2(\tau_1, \tau_4), P_I\bar{4}b2(\tau_2, \tau_3)$	1	C_1	I	2
				$(P_{Ica}c2, C_A222_1)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
			X	$(C_A222, P_c\bar{4}2c)(\tau_1, \tau_2), (C_A222_1, P_c\bar{4}2_1c)(\tau_3, \tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4
326	I42m1'	Γ	$I\bar{4}2m(\tau_1), I\bar{4}'2m'(\tau_3), I\bar{4}'2'm(\tau_4)$	1	C_1	I	1	
			M2	$P_I\bar{4}2m(\tau_1), P_I\bar{4}2_1c(\tau_2), P_I\bar{4}2c(\tau_3), P_I\bar{4}2_1m(\tau_4)$	1	C_1	I	2
				$(C_{Am}c2, P_I2_12_12)(\tau_5)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
			X	$(A_{cmm}2, P_c\bar{4}m2)(\tau_1), (A_{cma}2, P_c\bar{4}m2)(\tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4
				$(A_{cba}2, P_c\bar{4}b2)(\tau_3), (A_{cbm}2, P_c\bar{4}c2)(\tau_4)$				
			N	$(C_c2, C_{am}, C_A222, I_c\bar{4}2d, I_c\bar{4}2m)(\tau_1, \tau_2)$	4	82.01	{	I, II, III IV, V
A	$I_c\bar{4}m2(\tau_1, \tau_4), I_c\bar{4}c2(\tau_2, \tau_3)$	2	C_4	I	4			
334	I42d1'	Γ	$I\bar{4}2d(\tau_1), I\bar{4}'2d'(\tau_3), I\bar{4}'2'd(\tau_4)$	1	C_1	I	1	
			M2	$P_I222_1(\tau_2, \tau_4), P_I2_12_12_1(\tau_3, \tau_5)$	2	C_4	I	2
			N	$(C_c2, C_A222_1, C_{ac}, I_c\bar{4})(\tau_1, \tau_2)$	4	80.01	I, II, III	4, 4, 8

81V2
LILLE

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)		
-340	P4/nmm1'	Γ	$P4/nmm(\tau_1), P4'/nmm'(\tau_3), P4'/nm'm(\tau_4), P4/m'mm(\tau_7)$	1	C_1	I	1		
			$P4/m'm'm'(\tau_6), P4'/m'm'm(\tau_8), P4'/m'mm'(\tau_9)$	2	C_{4v}	I, II	1, 1		
			$(Pm'mm, Cm'mm)(\tau_{10})$						
		M	$P_C4/mmm(\tau_1, \tau_4), P_C4/mbm(\tau_2, \tau_3), P_C4/nbm(\tau_6, \tau_9)$	1	C_1	I	2		
			$P_C4/nmm(\tau_7, \tau_8)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2		
		A	$(C_a mma, P_B mna)(\tau_5), (C_a mmm, P_B mma)(\tau_{10})$	1	C_1	I	2		
			$I_C4/mmm(\tau_1, \tau_4, \tau_7, \tau_8), I_C4/mcm(\tau_2, \tau_3, \tau_6, \tau_9)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2		
		Z	$(F_s mmm, I_a mma)(\tau_5, \tau_{10})$	1	C_1	I	2		
			$P_C4/mmm(\tau_1, \tau_7), P_C4/mcc(\tau_2, \tau_6), P_C4_2/mmc(\tau_3, \tau_9)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2		
		R	$P_C4_2/mcm(\tau_4, \tau_8)$	1	C_1	I	2		
			$(P_a mma, C_c mcm)(\tau_5, \tau_{10})$	2	C_{4v}	I, II	2, 2		
		X	$(C_a mmm, I_C4/mmm)(\tau_1, \tau_2, \tau_7, \tau_8),$	2	C_{4v}	I, II	2, 4		
$(C_a mma, I_C4/mcm)(\tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6)$	2		C_{4v}	I, II	2, 4				
X	$(P_a mmm, P_C4/mmm)(\tau_1, \tau_7), (P_a mma, P_C4/nmm)(\tau_8, \tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4				
	$(P_C ccm, P_C4/nbm)(\tau_3, \tau_5), (P_a mma, P_C4/mbm)(\tau_4, \tau_6)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4				
-352	P4/mcc1'	Γ	$P4/mcc(\tau_1), P4'/mcc'(\tau_3), P4'/mc'c(\tau_4), P4/m'cc(\tau_7)$	1	C_1	I	1		
			$P4/m'c'c'(\tau_6), P4'/m'c'c(\tau_8), P4'/m'cc'(\tau_9)$	2	C_{4v}	I, II	1, 1		
			$(Pc'cm, Cc'cm)(\tau_{10})$						
		M	$P_C4/mcc(\tau_1, \tau_4), P_C4/mnc(\tau_2, \tau_3), P_C4/nnc(\tau_6, \tau_9)$	1	C_1	I	2		
			$P_C4/ncc(\tau_7, \tau_8)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2		
		A	$(I_C422, I_C4/m)(\tau_1, \tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2		
		Z	$(P_C422, P_C4/m)(\tau_1), (P_C4_222, P_C4_2/m)(\tau_2)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2		
		X	$(P_a ccm, P_C4/mcc)(\tau_1, \tau_7), (P_a cca, P_C4/ncc)(\tau_2, \tau_8)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4		
			$(P_a ban, P_C4/nnc)(\tau_3, \tau_5), (P_C mna, P_C4/mnc)(\tau_4, \tau_6)$	2	C_{4v}	I, II	2, 4		
		-364	P4/nbm1'	Γ	$P4/nbm(\tau_1), P4'/nbm'(\tau_3), P4'/nb'm(\tau_4), P4/n'bm(\tau_7)$	1	C_1	I	1
					$P4/n'b'm'(\tau_6), P4'/n'b'm(\tau_8), P4'/n'bm'(\tau_9)$	2	C_{4v}	I, II	1, 1
					$(Pb'an, Cm'ma)(\tau_{10})$				
M	$(P_C422, P_A ccm)(\tau_1), (P_C4_212, P_A bcm)(\tau_2)$			2	C_{4v}	I, II	2, 2		
A	$(I_C422, I_a bam)(\tau_1, \tau_2)$			2	C_{4v}	I, II	2, 2		
Z	$P_C4/nbm(\tau_1, \tau_7), P_C4/nnc(\tau_2, \tau_6), P_C4_2/nbc(\tau_3, \tau_9)$			1	C_1	I	2		
	$P_C4_2/nnm(\tau_4, \tau_8)$			2	C_{4v}	I, II	2, 2		
	$(P_b nna, C_c mca)(\tau_5, \tau_{10})$								
-376	P4/nnc1'			Γ	$P4/nnc(\tau_1), P4'/nnc'(\tau_3), P4'/nn'c(\tau_4), P4/n'nc(\tau_7)$	1	C_1	I	1
					$P4/n'n'c'(\tau_6), P4'/n'n'c(\tau_8), P4'/n'nc'(\tau_9)$	2	C_{4v}	I, II	1, 1
					$(Pn'nn, Cc'ca)(\tau_{10})$				
				A	$(I_C422, F_s ddd)(\tau_3, \tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	1, 1
		M	$(P_C422, P_A ban)(\tau_3), (P_C4_212, P_B bcn)(\tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2		



	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
#88	P4/m3m1'	$\left\{ \begin{array}{l} P4/mbm(\tau_1), P4'/mbm'(\tau_3), P4'/mb'm(\tau_4), P4/m'bm(\tau_7) \\ P4/m'b'm'(\tau_6), P4'/m'b'm(\tau_8), P4'/m'bm'(\tau_9) \\ (Pb'am, Cm'mm)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$ $\left\{ \begin{array}{l} (P_C^4/m, P_B mma)(\tau_1), (P_C^4/n, P_B mna)(\tau_6) \\ P_C^4 ban(\tau_2+\tau_5), P_C^4 mnm(\tau_3+\tau_4), P_C^4 bam(\tau_7+\tau_{10}), \\ P_C^4 mmm(\tau_8+\tau_9) \end{array} \right\}$ $\left\{ \begin{array}{l} P_C^4/mbm(\tau_1, \tau_7), P_C^4/mnc(\tau_2, \tau_6), P_C^4_2/mbc(\tau_3, \tau_9) \\ P_C^4_2/mnm(\tau_4, \tau_8) \\ (P_B nma, C_C mcm)(\tau_5, \tau_{10}) \end{array} \right\}$ $\left\{ \begin{array}{l} (I_C^4/m, I_A mma)(\tau_1, \tau_6) \\ I_C^4 bam(\tau_2+\tau_5, \tau_7+\tau_{10}), I_C^4 mmm(\tau_3+\tau_4, \tau_8+\tau_9) \end{array} \right\}$	1	C ₁	I	1	
			2	C _{4v}	I, II	1, 1	
			2	C _{4v}	I, II	2, 2	
			2	C ₄	I	2	
			1	C ₁	I	2	
			2	C _{4v}	I, II	2, 2	
			2	C _{4v}	I, II	2, 2	
			2	C ₄	I	2	
#00	P4/mnc1'		$\left\{ \begin{array}{l} P4/mnc(\tau_1), P4'/mnc'(\tau_3), P4'/mn'c(\tau_4), P4/m'nc(\tau_7) \\ P4/m'n'c'(\tau_6), P4'/m'n'c(\tau_8), P4'/m'nc'(\tau_9) \\ (Pn'nm, Cc'cm)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$ $\left\{ \begin{array}{l} (P_C^4/m, P_A mna)(\tau_1), (P_C^4/n, P_A nna)(\tau_6) \\ P_C^4 nnn(\tau_2+\tau_5), P_C^4 ccn(\tau_3+\tau_4), P_C^4 nnm(\tau_7+\tau_{10}), \\ P_C^4 ccm(\tau_8+\tau_9) \end{array} \right\}$ $\left\{ \begin{array}{l} (I_C^4/m, I_C^4 \bar{2}d)(\tau_1, \tau_2) \\ (P_A^2_1/c, C_A^2/m, C_A^2/c, F_S ddd, I_C^4/m)(\tau_1, \tau_2) \end{array} \right\}$	1	C ₁	I	1
				2	C _{4v}	I, II	1, 1
		2		C _{4v}	I, II	2, 2	
		2		C ₄	I	2	
		2		C _{4v}	I, II	2, 2	
		4		S ₈ .01	{ I, II, III IV, V }	2, 2, 4 4, 4	
#12	P4/nmm1'	$\left\{ \begin{array}{l} P4/nmm(\tau_1), P4'/nmm'(\tau_3), P4'/nm'm(\tau_4), P4/n'mm(\tau_7) \\ P4/n'm'm'(\tau_6), P4'/n'm'm(\tau_8), P4'/n'mm'(\tau_9) \\ (Pm'mn, Cm'ma)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$ $\left\{ \begin{array}{l} (P_C^4 nm, P_C^4 mma)(\tau_1), (P_C^4 bm, P_B cca)(\tau_2) \\ (P_A^4 ccm, P_C^4 \bar{2}m)(\tau_3), (P_A^4 bcm, P_C^4 \bar{2}1m)(\tau_4) \\ (I_C^4 nm, I_C^4 mma)(\tau_1), (I_C^4 cm, I_C^4 bca)(\tau_2) \\ (I_A^4 bam, I_C^4 \bar{2}m)(\tau_3, \tau_4) \end{array} \right\}$ $\left\{ \begin{array}{l} P_C^4/nmm(\tau_1, \tau_7), P_C^4/ncc(\tau_2, \tau_6), P_C^4_2/nmc(\tau_3, \tau_9) \\ P_C^4_2/ncm(\tau_4, \tau_8) \\ (P_A^4 nma, C_C mca)(\tau_5, \tau_{10}) \end{array} \right\}$	1	C ₁	I	1	
			2	C _{4v}	I, II	1, 1	
			2	C _{4v}	I, II	2, 2	
			2	C _{4v}	I, II	2, 2	
			1	C ₁	I	2	
			2	C _{4v}	I, II	2, 2	
#24	P4/ncc1'		$\left\{ \begin{array}{l} P4/ncc(\tau_1), P4'/ncc'(\tau_3), P4'/nc'c(\tau_4), P4/n'cc(\tau_7) \\ P4/n'c'c'(\tau_6), P4'/n'c'c(\tau_8), P4'/n'cc'(\tau_9) \\ (Pc'cn, Cc'ca)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$ $\left\{ \begin{array}{l} (P_B^4 bcn, P_C^4 \bar{2}1c)(\tau_1), (P_A^4 ban, P_C^4 \bar{2}2c)(\tau_2) \\ (P_C^4^4 cc, P_C^4 cca)(\tau_3), (P_C^4^4 nc, P_C^4 nnc)(\tau_4) \end{array} \right\}$	1	C ₁	I	1
				2	C _{4v}	I, II	1, 1
		2		C _{4v}	I, II	2, 2	



(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
36	$P4_2/nmc1'$	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} P4_2/nmc(\tau_1), P4_2'/mmc'(\tau_3), P4_2'/mm'c(\tau_4), P4_2/m'mc(\tau_7) \\ P4_2/m'm'c'(\tau_6), P4_2'/m'm'c(\tau_8), P4_2'/m'mc'(\tau_9) \\ (Pm'mm, Cc'cm)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	1	C_1	I	1	
			2	C_{4v}	I, II	1.1	
		M	$\left\{ \begin{array}{l} P_{C_2}^4/mcm(\tau_1, \tau_4), P_{C_2}^4/mnm(\tau_2, \tau_3), P_{C_2}^4/nnm(\tau_6, \tau_9) \\ P_{C_2}^4/nmc(\tau_7, \tau_8) \\ (C_a mma, P_A nna)(\tau_5), (C_a mmm, P_A mna)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	1	C_1	I	2
				2	C_{4v}	I, II	2.2
		Z	$(P_{C_2}^4, I_3, 22, P_a mma)(\tau_3, \tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2.2
		A	$(I_{C_2}^4, 22, F_s mmm)(\tau_3, \tau_4)$				
		R	$\left\{ \begin{array}{l} (C_a mmm, I_{C_2}^4/amd)(\tau_1, \tau_2, \tau_7, \tau_8) \\ (C_a mma, I_{C_2}^4/acd)(\tau_3, \tau_4, \tau_5, \tau_6) \end{array} \right\}$	2	C_{4v}	I, II	2.4
		48	$P4_2/mcm1'$	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} P4_2/mcm(\tau_1), P4_2'/mcm'(\tau_3), P4_2'/mc'm(\tau_4), P4_2/m'cm(\tau_7) \\ P4_2/m'c'm'(\tau_6), P4_2'/m'c'm(\tau_8), P4_2'/m'cm'(\tau_9) \\ (Pc'cm, Cm'mm)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	1	C_1	I
2	C_{4v}				I, II	1.1	
M	$\left\{ \begin{array}{l} P_{C_2}^4/mmc(\tau_1, \tau_4), P_{C_2}^4/mbc(\tau_2, \tau_3), P_{C_2}^4/nbc(\tau_6, \tau_9) \\ P_{C_2}^4/nmc(\tau_7, \tau_8) \\ (C_a cca, P_B mna)(\tau_5), (C_a ccm, P_B mma)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$			1	C_1	I	2
				2	C_{4v}	I, II	2.2
Z	$(P_{C_2}^4, I_3, 22, C_c mcm)(\tau_3, \tau_4)$			2	C_{4v}	I, II	2.4
X	$\left\{ \begin{array}{l} (P_a ccm, P_{C_2}^4/mcm)(\tau_1, \tau_7), (P_a cca, P_{C_2}^4/nmc)(\tau_2, \tau_8) \\ (P_a ban, P_{C_2}^4/nnm)(\tau_3, \tau_5), (P_c mna, P_{C_2}^4/mnm)(\tau_4, \tau_6) \end{array} \right\}$						
60	$P4_2/nbc1'$	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} P4_2/nbc(\tau_1), P4_2'/nbc'(\tau_3), P4_2'/nb'c(\tau_4), P4_2/n'bc(\tau_7) \\ P4_2/n'b'c'(\tau_6), P4_2'/n'b'c(\tau_8), P4_2'/n'bc'(\tau_9) \\ (Pb'en, Cc'ca)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	1	C_1	I	1	
			2	C_{4v}	I, II	1.1	
		Z	$(P_{C_2}^4, I_3, 22, P_a ban)(\tau_3), (P_{C_2}^4, I_3, 22, P_B bcn)(\tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2.2
72	$P4_2/nnm1'$	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} P4_2/nnm(\tau_1), P4_2'/nnm'(\tau_3), P4_2'/nn'm(\tau_4), P4_2/n'nm(\tau_7) \\ P4_2/n'n'm'(\tau_6), P4_2'/n'n'm(\tau_8), P4_2'/n'nm'(\tau_9) \\ (Pn'nn, Cm'ma)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	1	C_1	I	1	
			2	C_{4v}	I, II	1.1	
		M	$(P_{C_2}^4, I_3, 22, P_B cca)(\tau_3), (P_{C_2}^4, I_3, 22, P_C nna)(\tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2.2
		Z	$(P_{C_2}^4, I_3, 22, C_c mca)(\tau_3, \tau_4)$				
		A	$\left\{ \begin{array}{l} I_{C_2}^4/amd(\tau_1, \tau_4, \tau_7, \tau_8), I_{C_2}^4/acd(\tau_2, \tau_3, \tau_6, \tau_9) \\ (F_s ddd, I_c bam)(\tau_5, \tau_{10}) \end{array} \right\}$	1	C_1	I	2
2	C_{4v}			I, II	2.2		

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
484	$P4_2/mbc1'$	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} P4_2/mbc(\tau_1), P4_2'/mbc'(\tau_3), P4_2'/mb'c(\tau_4), P4_2'/m'bc(\tau_7) \\ P4_2/m'b'c'(\tau_6), P4_2'/m'b'c(\tau_8), P4_2'/m'bc'(\tau_9) \\ (Pb'am, Cc'cm)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	1	C_1	I	1	
			2	C_{4v}	I, II	1, 1	
		$M \left\{ \begin{array}{l} (P_{C_2}^4/m, P_{A' mna})(\tau_1), (P_{C_2}^4/n, P_{A' nna})(\tau_6) \\ P_{C' ccn}(\tau_3 + \tau_4), P_{C' nnn}(\tau_2 + \tau_5), P_{C' nnm}(\tau_7 + \tau_{10}) \\ P_{C' ccm}(\tau_8 + \tau_9) \end{array} \right\}$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
			2	C_4	I	2	
		$Z (P_{C_1, 3}^4, 2_1^2, P_{b' nma})(\tau_3, \tau_4)$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
496	$P4_2/mnm1'$	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} P4_2/mnm(\tau_1), P4_2'/mnm'(\tau_3), P4_2'/mn'm(\tau_4), P4_2'/m'nm(\tau_7) \\ P4_2/m'n'm'(\tau_6), P4_2'/m'n'm(\tau_8), P4_2'/m'nm'(\tau_9) \\ (Pn'nm, Cm'ma)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	1	C_1	I	1	
			2	C_{4v}	I, II	1, 1	
		$M \left\{ \begin{array}{l} (P_{C_2}^4/m, P_{B' mma})(\tau_1), (P_{C_2}^4/n, P_{B' mna})(\tau_6) \\ P_{C' ban}(\tau_2 + \tau_5), P_{C' mnn}(\tau_3 + \tau_4), P_{C' bam}(\tau_7 + \tau_{10}) \\ P_{C' mmm}(\tau_8 + \tau_9) \end{array} \right\}$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
			2	C_4	I	2	
		$A \left\{ \begin{array}{l} (I_{C_2}^4 2d, I_{C' mma})(\tau_1, \tau_2), (I_{C_1}^4 md, I_{C' mmm})(\tau_3) \\ (I_{C_1}^4 cd, I_{C' bam})(\tau_4) \end{array} \right\}$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
		$Z (P_{C_1, 3}^4, 2_1^2, C_{C' mcm})(\tau_3, \tau_4)$					
		$R (P_a^2, 1/c, C_a^2/m, F_a^2 mmm, C_a^2/m, I_{C_1}^4/a)(\tau_1, \tau_2)$	4	58.01	{ I, II, III IV, V	{ 2, 2, 4 4, 4	
508	$P4_2/nmc1'$	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} P4_2/nmc(\tau_1), P4_2'/nmc'(\tau_3), P4_2'/nm'c(\tau_4), P4_2'/n'mc(\tau_7) \\ P4_2/n'm'c'(\tau_6), P4_2'/n'm'c(\tau_8), P4_2'/n'mc'(\tau_9) \\ (Pm'mn, Cc'ca)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	1	C_1	I	1	
			2	C_{4v}	I, II	1, 1	
		$M \left\{ \begin{array}{l} (P_{C_2}^4 2cm, P_{C' cca})(\tau_1), (P_{C_2}^4 nm, P_{C' nna})(\tau_2) \\ (P_{B' bcn}, P_{C_1}^4 2_1 m)(\tau_3), (P_{A' ban}, P_{C_1}^4 2m)(\tau_4) \end{array} \right\}$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
		$A (I_{C_1}^4/a, I_{C_1}^4 2m)(\tau_1, \tau_2)$					
		$Z (P_{C_1, 3}^4, 2_1^2, P_{a' nma})(\tau_3, \tau_4)$					
520	$P4_2/ncm1'$	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} P4_2/ncm(\tau_1), P4_2'/ncm'(\tau_3), P4_2'/nc'm(\tau_4), P4_2'/n'cm(\tau_7) \\ P4_2/n'c'm'(\tau_6), P4_2'/n'c'm(\tau_8), P4_2'/n'cm'(\tau_9) \\ (Pc'cn, Cm'ma)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	1	C_1	I	1	
			2	C_{4v}	I, II	1, 1	
		$A \left\{ \begin{array}{l} (I_{C_1}^4/a, I_{A' bam})(\tau_1, \tau_6) \\ I_{C' mma}(\tau_2 + \tau_4, \tau_7 + \tau_9), I_{C' bca}(\tau_3 + \tau_5, \tau_8 + \tau_{10}) \end{array} \right\}$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
			2	C_4	I	2	
		$M \left\{ \begin{array}{l} (P_{C_2}^4 mc, P_{C' mma})(\tau_1), (P_{C_2}^4 bc, P_{B' cca})(\tau_2) \\ (P_{A' bcm}, P_{C_1}^4 2_1 c)(\tau_3), (P_{A' ccm}, P_{C_1}^4 2c)(\tau_4) \end{array} \right\}$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
		$Z (P_{C_1, 3}^4, 2_1^2, C_{C' mca})(\tau_3, \tau_4)$					



	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
532	14/mmm1'	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} 14/mmm(\tau_1), 14'/mmm'(\tau_3), 14'/mm'm(\tau_4), 14/m'mm(\tau_7) \\ 14/m'm'm'(\tau_6), 14'/m'm'm(\tau_8), 14'/m'mm'(\tau_9) \\ (Im'mm, Fm'mm)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 1 \\ 2 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} C_1 \\ C_{4v} \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} I \\ I, II \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 1 \\ 1, 1 \end{array} \right\}$	
		$MZ \left\{ \begin{array}{l} P_{I^4}/mmm(\tau_1), P_{I^4}/nnc(\tau_2), P_{I^4_2}/mmc(\tau_3), P_{I^4_2}/mnm(\tau_4) \\ P_{I^4}/nnc(\tau_6), P_{I^4}/nmm(\tau_7), P_{I^4_2}/nmm(\tau_8), P_{I^4_2}/nmc(\tau_9) \\ (P_{I^4}nmm, C_{Amca})(\tau_5), (P_{I^4}nmm, C_{Amcm})(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 1 \\ 2 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} C_1 \\ C_{4v} \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} I \\ I, II \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 2 \\ 2, 2 \end{array} \right\}$	
		$X \left\{ \begin{array}{l} (C_{Ammm}, P_{C^4}/mmm)(\tau_1), (C_{Accm}, P_{C^4_2}/nmm)(\tau_2) \\ (C_{Amca}, P_{C^4_2}/nmc)(\tau_3), (C_{Amca}, P_{C^4}/mbm)(\tau_4) \\ (C_{Acca}, P_{C^4}/nbm)(\tau_5), (C_{Amma}, P_{C^4_2}/mcm)(\tau_6) \\ (C_{Amcm}, P_{C^4_2}/mnm)(\tau_7), (C_{Amcm}, P_{C^4}/nmm)(\tau_8) \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 2 \end{array} \right\}$	C_{4v}	I, II	$2, 4$	
		$A \left\{ I_{C^4}/mmm, I_{C^4_1}/amd(\tau_1, \tau_4), (I_{C^4}/mcm, I_{C^4_1}/acd)(\tau_2, \tau_3) \right\}$	2	C_{4v}	I, II	$4, 4$	
		$N \left\{ \begin{array}{l} (C_{C^2}/m, C_{C^2}/m, C_{C^2}mmm, I_{C^4_1}/amd, I_{C^4}/mmm)(\tau_1, \tau_4) \\ (C_{C^2}/c, C_{C^2}/c, C_{C^2}mca, I_{C^4_1}/acd, I_{C^4}/mcm)(\tau_2, \tau_3) \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 4 \end{array} \right\}$	82.01	$\left\{ \begin{array}{l} I, II, III \\ IV, V \end{array} \right\}$	$\left\{ \begin{array}{l} 2, 4, 4 \\ 8, 8 \end{array} \right\}$	
542	14/mcm1'	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} 14/mcm(\tau_1), 14'/mcm'(\tau_3), 14'/mc'm(\tau_4), 14/m'cm(\tau_7) \\ 14/m'c'm'(\tau_6), 14'/m'c'm(\tau_8), 14'/m'cm'(\tau_9) \\ (Ib'am, Fm'mm)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 1 \\ 2 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} C_1 \\ C_{4v} \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} I \\ I, II \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 1 \\ 1, 1 \end{array} \right\}$	
		$MZ \left\{ \begin{array}{l} P_{I^4}/mcc(\tau_1), P_{I^4}/mbm(\tau_2), P_{I^4_2}/mcm(\tau_3), P_{I^4_2}/mbc(\tau_4) \\ P_{I^4}/nbm(\tau_6), P_{I^4}/ncc(\tau_7), P_{I^4_2}/nbc(\tau_8), P_{I^4_2}/nmc(\tau_9) \\ (P_{I^4}bcn, C_{Amca})(\tau_5), (P_{I^4}bcm, C_{Amcm})(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 1 \\ 2 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} C_1 \\ C_{4v} \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} I \\ I, II \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 2 \\ 2, 2 \end{array} \right\}$	
		$X \left\{ \begin{array}{l} (C_{Amma}, P_{C^4}/mcc)(\tau_1), (C_{Acca}, P_{C^4_2}/nbc)(\tau_2) \\ (C_{Amcm}, P_{C^4_2}/nmc)(\tau_3), (C_{Amcm}, P_{C^4}/mnc)(\tau_4) \\ (C_{Accm}, P_{C^4}/nnc)(\tau_5), (C_{Ammm}, P_{C^4_2}/mmc)(\tau_6) \\ (C_{Amca}, P_{C^4_2}/mbc)(\tau_7), (C_{Amca}, P_{C^4}/ncc)(\tau_8) \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 2 \end{array} \right\}$	C_{4v}	I, II	$2, 4$	
552	14 ₁ /amd1'	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} 14_1/amd(\tau_1), 14'_1/amd'(\tau_3), 14'_1/am'd(\tau_4), 14_1/a'md(\tau_7) \\ 14_1/a'm'd'(\tau_6), 14'_1/a'm'd(\tau_8), 14'_1/a'md'(\tau_9) \\ (Im'ma, Fd'dd)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 1 \\ 2 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} C_1 \\ C_{4v} \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} I \\ I, II \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 1 \\ 1, 1 \end{array} \right\}$	
		$MZ \left\{ (P_{I^4_1,3}{}^{22}, P_{I^4}nma)(\tau_3), (P_{I^4_1,3}{}^{22}, P_{I^4}nma)(\tau_4) \right\}$	2	C_{4v}	I, II	$2, 2$	
		$N \left\{ \begin{array}{l} (C_{C^2}/m, C_{C^2}/m, C_{C^2}mmm, I_{C^4_1}{}^2)(\tau_1, \tau_4) \\ (C_{C^2}/c, C_{C^2}/c, C_{C^2}mca, I_{C^4_1}{}^2)(\tau_2, \tau_3) \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 4 \end{array} \right\}$	101.01	I, II, III, IV	$2, 4, 4, 8$	
62	14 ₁ /acd1'	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} 14_1/acd(\tau_1), 14'_1/acd'(\tau_3), 14'_1/ac'd(\tau_4), 14_1/a'cd(\tau_7) \\ 14_1/a'c'd'(\tau_6), 14'_1/a'c'd(\tau_8), 14'_1/a'cd'(\tau_9) \\ (Ib'ca, Fd'dd)(\tau_{10}) \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 1 \\ 2 \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} C_1 \\ C_{4v} \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} I \\ I, II \end{array} \right\}$	$\left. \begin{array}{l} 1 \\ 1, 1 \end{array} \right\}$	
		$MZ \left\{ (P_{I^4_1,3}{}^2, P_{I^4}bca)(\tau_3), (P_{I^4_1,3}{}^2, P_{I^4}cca)(\tau_4) \right\}$	2	C_{4v}	I, II	$2, 2$	



(a) (b) (c) (d) (e) (f) (g)

RHOMBOHEDRAL

143-2	P31'	A	$P_C 3(\tau_1)$	1	C_1	I	2
		L	$(P_S 1, P_C 3)(\tau_1)$	3	T_h	I, II	2, 8
		M	$(P_S 1, P_C 3^*)(\tau_1)^*$	3	T_h	I, II	2, 4
144-5	P3 ₁ '	A	$P_C 3_2(\tau_1)$	1	C_1	I	2
		L	$(P_S 1, P_C 3_2)(\tau_1)$	3	T_h	I, II	2, 8
		M	$(P_S 1, P_C 3_2^*)(\tau_1)^*$	3	T_h	I, II	2, 4
145-8	P3 ₂ '	A	$P_C 3_1(\tau_1)$	1	C_1	I	2
		L	$(P_S 1, P_C 3_1)(\tau_1)$	3	T_h	I, II	2, 8
		M	$(P_S 1, P_C 3_1^*)(\tau_1)^*$	3	T_h	I, II	2, 4
146-11	R31'	Z	$R_I 3(\tau_1)$	1	C_1	I	2
		A	$(P_S 1, R_I 3)(\tau_1)$	3	T_h	I, II	2, 8
		X	$(P_S 1, R_I 3^*)(\tau_1)^*$	3	T_h	I, II	2, 4
147-14	P3̄1'	Γ	$P\bar{3}'(\tau_4)$	1	C_1	I	1
			$P\bar{1}'(\tau_5 + \tau_6)$	2	C_6	I	1
		A	$P_C \bar{3}(\tau_1, \tau_4)$	1	C_1	I	2
			$P_S \bar{1}(\tau_2 + \tau_3, \tau_5 + \tau_6)$	2	C_6	I	2
		M	$(P_S \bar{1}, P\bar{3})(\tau_1), (P_S \bar{1}, P\bar{3}')(\tau_2)$	3	T_h	I, II	2, 4
		L	$(P_S \bar{1}, P_C \bar{3})(\tau_1, \tau_2)$	3	T_h	I, II	2, 8
148-18	R3̄1'	Γ	$R\bar{3}'(\tau_4)$	1	C_1	I	1
			$P\bar{1}'(\tau_5 + \tau_6)$	2	C_6	I	1
		Z	$R_I \bar{3}(\tau_1, \tau_4)$	1	C_1	I	2
			$P_S \bar{1}(\tau_2 + \tau_3, \tau_5 + \tau_6)$	2	C_6	I	2
		A	$(P_S \bar{1}, R_I \bar{3})(\tau_1, \tau_2)$	3	T_h	I, II	2, 8
		X	$(P_S \bar{1}, R\bar{3})(\tau_1), (P_S \bar{1}, R\bar{3}')(\tau_2)$	3	T_h	I, II	2, 4
149-22	P31'2	Γ	$P312(\tau_1)^*$	1	C_1	I	1
		A	$P_C 312(\tau_1, \tau_2)$	1	C_1	I	2
		L	$(C_2, P_C 312)(\tau_1, \tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 8
		M	$(P_2, P312)(\tau_1), (P_2, P312^*)(\tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 4
150-26	P321'	Γ	$P321(\tau_1)^*$	1	C_1	I	1
		A	$P_C 321(\tau_1, \tau_2)$	1	C_1	I	2
		M	$(P_2, P321)(\tau_1), (P_2, P321^*)(\tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 4
		L	$(C_2, P_C 321)(\tau_1, \tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 6
		H	$P_C 312(\tau_1, \tau_2)$	2	C_6	I	6
		K	$P312(\tau_1), P312^*(\tau_2)$	2	C_6	I	3

BUS
LILLE

a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
-30	P3 ₁ '2	Γ	P3 ₁ 12(τ ₁) [*]	1	C ₁	I	1
		A	P _c 3 ₂ 12(τ ₂ , τ ₃)	1	C ₁	I	2
		M	(P _a 2, P3 ₁ 12)(τ ₁) [*] , (P _a 2 ₁ , P3 ₁ 12')(τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 4
		L	(C _a 2, P _c 3 ₂ 12)(τ ₁ , τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 8
-34	P3 ₁ 21'	Γ	P3 ₁ 21(τ ₁) [*]	1	C ₁	I	1
		A	P _c 3 ₂ 21(τ ₂ , τ ₃)	1	C ₁	I	2
		M	(P _a 2, P3 ₁ 21)(τ ₁) [*] , (P _a 2 ₁ , P3 ₁ 21')(τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 4
		L	(C _a 2, P _c 3 ₂ 21)(τ ₁ , τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 8
		H	P _c 3 ₂ 12(τ ₂ , τ ₃)	2	C ₆	I	6
		K	P3 ₁ 12(τ ₁) [*] , P3 ₁ 12'(τ ₂)	2	C ₆	I	3
-38	P3 ₂ '2	Γ	P3 ₂ 12(τ ₁) [*]	1	C ₁	I	1
		A	P _c 3 ₁ 12(τ ₂ , τ ₃)	1	C ₁	I	2
		M	(P _a 2, P3 ₂ 12)(τ ₁) [*] , (P _a 2 ₁ , P3 ₂ 12')(τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 4
		L	(C _a 2, P _c 3 ₁ 12)(τ ₁ , τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 8
-42	P3 ₂ 21'	Γ	P3 ₂ 21(τ ₁) [*]	1	C ₁	I	1
		A	P _c 3 ₁ 21(τ ₂ , τ ₃)	1	C ₁	I	2
		M	(P _a 2, P3 ₂ 21)(τ ₁) [*] , (P _a 2 ₁ , P3 ₂ 21')(τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 4
		L	(C _a 2, P _c 3 ₁ 21)(τ ₁ , τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 8
		H	P _c 3 ₁ 12(τ ₂ , τ ₃)	2	C ₆	I	6
		K	P3 ₂ 12(τ ₁) [*] , P3 ₂ 12'(τ ₂)	2	C ₆	I	3
-46	R321'	Γ	R32(τ ₁) [*]	1	C ₁	I	1
		Z	R _I 32(τ ₁ , τ ₂)	1	C ₁	I	2
		X	(P _c 2, R32)(τ ₁) [*] , (P _c 2 ₁ , R32')(τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 4
		A	(C _c 2, R _I 32)(τ ₁ , τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 8
-50	P3m1'	Γ	P3m1(τ ₁) [*]	1	C ₁	I	1
		A	P _c 3m1(τ ₁), P _c 3c1(τ ₂)	1	C ₁	I	2
			(C _c m, C _c c)(τ ₃)	2	C _{6v}	I, II	2, 2
			(P _a m, P3m1)(τ ₁) [*] , (P _a c, P3m1')(τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 4
		L	(C _a m, P _c 3m1)(τ ₁), (C _a c, P _c 3c1)(τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 8
		H	(P _c 31m, P _c 31c)(τ ₁ , τ ₂ , τ ₃)	2	C _{6v}	I, II	6, 6
		K	(P31m, P31m')(τ ₁ , τ ₂ , τ ₃)	2	C _{6v}	I, II	3, 3
-54	P31'm	Γ	P31m(τ ₁) [*]	1	C ₁	I	1
		A	P _c 31m(τ ₁), P _c 31c(τ ₂)	1	C ₁	I	2
			(C _c m, C _c c)(τ ₃)	2	C _{6v}	I, II	2, 2
			(P _a m, P31m)(τ ₁) [*] , (P _a c, P31m')(τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 4
		L	(C _a m, P _c 31m)(τ ₁), (C _a c, P _c 31c)(τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 8
		H	P _c 3m1(τ ₁), P _c 3c1(τ ₂)	2	C ₆	I	6



(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
58	P3c1'	Γ	$P3c1(\tau_1)^\circ$	1	C_1	I	1
		M	$(P_{\alpha c}, P3c1)(\tau_1)^\circ, (P_{\alpha c}, P3c'1)(\tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 4
		K	$(P31c, P31c')(\tau_1)^\circ$	2	C_{6v}	I, II	3, 3
62	P31'c	Γ	$P31c(\tau_1)^\circ$	1	C_1	I	1
		M	$(P_{\alpha c}, P31c)(\tau_1)^\circ, (P_{\alpha c}, P31c')(\tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 4
66	R3m1'	Γ	$R3m(\tau_1)^\circ$	1	C_1	I	1
		Z	$R_{I3m}(\tau_1), R_{I3c}(\tau_2)$	1	C_1	I	2
			$(C_{cm}, C_{cc})(\tau_3)$	2	C_{6v}	I, II	2, 2
		X	$(P_{cm}, R3m)(\tau_1)^\circ, (P_{\alpha c}, R3m')(\tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 4
		A	$(C_{cm}, R_{I3m})(\tau_1), (C_{cc}, R_{I3c})(\tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 8
70	R3c1'	Γ	$R3c(\tau_1)^\circ$	1	C_1	I	1
		X	$(P_{\alpha c}, R3c)(\tau_1)^\circ, (P_{\alpha c}, R3c')(\tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 4
74	P31'm	Γ	$P31m(\tau_1)^\circ, P3'1m(\tau_4), P3'1m'(\tau_5)$	1	C_1	I	1
			$(C2/m', C2'/m)(\tau_6)$	2	C_{6v}	I, II	1, 1
		A	$P_c31m(\tau_1, \tau_4), P_c31c(\tau_2, \tau_5)$	1	C_1	I	2
			$(C_c2/m, C_c2/c)(\tau_3), (C_c2/c, C_c2/m)(\tau_6)$	2	C_{6v}	I, II	2, 2
		M	$(P_{\alpha 2}/m, P31m)(\tau_1)^\circ, (P_{\alpha 2_1}/c, P31m')(\tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 4
			$(P_{\alpha 2}/c, P3'1m')(\tau_3), (P_{\alpha 2_1}/m, P3'1m)(\tau_4)$				
L	$(C_{\alpha 2}/m, P_c31m)(\tau_1, \tau_4), (C_{\alpha 2}/m, P_c31c)(\tau_2, \tau_3)$	3	O_h	I, II	2, 8		
80	P31'c	Γ	$P31c(\tau_1)^\circ, P3'1c(\tau_4), P3'1c'(\tau_5)$	1	C_1	I	1
			$(C2/c', C2'/c)(\tau_6)$	2	C_{6v}	I, II	1, 1
		M	$(P_{\alpha 2}/c, P31c)(\tau_1)^\circ, (P_{\alpha 2_1}/c, P31c')(\tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 4
			$(P_{\alpha 2}/c, P3'1c')(\tau_3), (P_{\alpha 2_1}/c, P3'1c)(\tau_4)$				
86	P3m1'	Γ	$P3m1(\tau_1)^\circ, P3'm1(\tau_4), P3'm'1(\tau_5)$	1	C_1	I	1
			$(C2/m', C2'/m)(\tau_6)$	2	C_{6v}	I, II	1, 1
		A	$P_c3m1(\tau_1, \tau_4), P_c3c1(\tau_2, \tau_5)$	1	C_1	I	2
			$(C_c2/m, C_c2/c)(\tau_3), (C_c2/c, C_c2/m)(\tau_6)$	2	C_{6v}	I, II	2, 2
		M	$(P_{\alpha 2}/m, P3m1)(\tau_1)^\circ, (P_{\alpha 2_1}/c, P3m'1)(\tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 4
			$(P_{\alpha 2}/c, P3'm'1)(\tau_3), (P_{\alpha 2_1}/m, P3'm1)(\tau_4)$				
		L	$(C_{\alpha 2}/m, P_c3m1)(\tau_1, \tau_4), (C_{\alpha 2}/m, P_c3c1)(\tau_2, \tau_3)$	3	O_h	I, II	2, 8
M	$(P_c31m, P_c31c)(\tau_1), (P_c31c, P_c31m)(\tau_2)$	2	C_{6v}	I, II	6, 6		
92	P3c1'	Γ	$P3c1(\tau_1)^\circ, P3'c1(\tau_4), P3'c'1(\tau_5)$	1	C_1	I	1
			$(C2/c', C2'/c)(\tau_6)$	2	C_{6v}	I, II	1, 1
		M	$(P_{\alpha 2}/c, P3c1)(\tau_1)^\circ, (P_{\alpha 2_1}/c, P3c'1)(\tau_2)$ $(P_{\alpha 2}/c, P3'c'1)(\tau_3), (P_{\alpha 2_1}/c, P3'c1)(\tau_4)$	3	O_h	I, II	2, 4



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
98	$R\bar{3}m1'$	Γ	$R\bar{3}m(\tau_1), R\bar{3}'m(\tau_4), R\bar{3}'m'(\tau_5)$	1	C_1	I	1
			$(C_2/m', C_2'/m)(\tau_6)$	2	C_{6v}	I, II	1, 1
		Z	$R_I\bar{3}m(\tau_1, \tau_4), R_I\bar{3}c(\tau_2, \tau_5)$	1	C_1	I	2
			$(C_c^2/m, C_c^2/c)(\tau_3), (C_c^2/c, C_c^2/m)(\tau_6)$	2	C_{6v}	I, II	2, 2
		X	$(P_c^2/m, R\bar{3}m)(\tau_1), (P_A^2/c, R\bar{3}'m)(\tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 4
			$(P_A^2/c, R\bar{3}'m)(\tau_3), (P_c^2/m, R\bar{3}'m)(\tau_4)$				
		A	$(C_c^2/m, R_I\bar{3}m)(\tau_1, \tau_4), (C_c^2/c, R_I\bar{3}c)(\tau_2, \tau_5)$	3	O_h	I, II	2, 8
104	$R\bar{3}c1'$	Γ	$R\bar{3}c(\tau_1), R\bar{3}'c(\tau_4), R\bar{3}'c'(\tau_5)$	1	C_1	I	1
			$(C_2/c', C_2'/c)(\tau_6)$	2	C_{6v}	I, II	1, 1
		X	$(P_A^2/c, R\bar{3}c)(\tau_1), (P_A^2/c, R\bar{3}'c)(\tau_2)$	3	O_h	I, II	2, 4
			$(P_A^2/c, R\bar{3}'c)(\tau_3), (P_A^2/c, R\bar{3}'c)(\tau_4)$				

EXAGONAL

110	$P61'$	Γ	$P6'(\tau_2)$	1	C_1	I	1
		A	$P_c^6(\tau_1), P_c^6(\tau_2)$	1	C_1	I	2
		M	$(P_a^2, P6)(\tau_1), (P_a^2, P6')(\tau_2)$	3	T_h	I, II	2, 4
		L	$(C_a^2, P_c^6)(\tau_1), (C_a^2, P_c^6)(\tau_2)$	3	T_h	I, II	2, 8
		H	$(P_c^6, P_c^6)(\tau_1)$	2	C_{6v}	I, II	6, 6
		K	$(P6^*, P6')(\tau_1)$	2	C_{6v}	I, II	3, 3
114	$P6_11'$	Γ	$P6_1'(\tau_2)$	1	C_1	I	1
		M	$(P_a^2, P6_1)(\tau_1), (P_a^2, P6_1')(\tau_2)$	3	T_h	I, II	2, 4
		K	$(P6_1^*, P6_1')(\tau_1)$	2	C_{6v}	I, II	3, 3
118	$P6_51'$	Γ	$P6_5'(\tau_2)$	1	C_1	I	1
		M	$(P_a^2, P6_5)(\tau_1), (P_a^2, P6_5')(\tau_2)$	3	T_h	I, II	2, 4
		K	$(P6_5^*, P6_5')(\tau_1)$	2	C_{6v}	I, II	3, 3
122	$P6_21'$	Γ	$P6_2'(\tau_2)$	1	C_1	I	1
		A	$P_c^6(\tau_1), P_c^6(\tau_2)$	1	C_1	I	2
		M	$(P_a^2, P6_2)(\tau_1), (P_a^2, P6_2')(\tau_2)$	3	T_h	I, II	2, 4
		L	$(C_a^2, P_c^6)(\tau_1), (C_a^2, P_c^6)(\tau_2)$	3	T_h	I, II	2, 8
		H	$(P_c^6, P_c^6)(\tau_1)$	2	C_{6v}	I, II	6, 6
		K	$(P6_2^*, P6_2')(\tau_1)$	2	C_{6v}	I, II	3, 3
126	$P6_41'$	Γ	$P6_4'(\tau_2)$	1	C_1	I	1
		A	$P_c^6(\tau_1), P_c^6(\tau_2)$	1	C_1	I	2
		M	$(P_a^2, P6_4)(\tau_1), (P_a^2, P6_4')(\tau_2)$	3	T_h	I, II	2, 4
		L	$(C_a^2, P_c^6)(\tau_1), (C_a^2, P_c^6)(\tau_2)$	3	T_h	I, II	2, 8
		H	$(P_c^6, P_c^6)(\tau_1)$	2	C_{6v}	I, II	6, 6
		K	$(P6_4^*, P6_4')(\tau_1)$	2	C_{6v}	I, II	3, 3



	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
130	P6 ₃ 1'	Γ	P6 ₃ '(τ ₂)	1	C ₁	I	1	
			M	(P _a 2 ₁ , P6 ₃ ')(τ ₁), (P _a 2 ₁ , P6 ₃ ')(τ ₂)	3	T _h	I, II	2, 4
			K	(P6 ₃ ', P6 ₃ ')(τ ₁) [*]	2	C _{6v}	I, II	3, 3
134	P6̄ ₁ '	Γ	P6̄'(τ ₄)	1	C ₁	I	1	
			A	{ P _c 6̄(τ ₁ , τ ₄)	1	C ₁	I	2
				{ P _b m(τ ₂ +τ ₃ , τ ₅ +τ ₆)	2	C ₆	I	2
			M	{ (P _a m, P6̄')(τ ₁), (P _a c, P6̄')(τ ₂)	3	T _h	I, II	2, 4
			L	{ (C _a m, P _c 6̄)(τ ₁ , τ ₂)	3	T _h	I, II	2, 8
			H	{ P _c 6̄(τ ₁ , τ ₄)	2	C ₆	I	6
			K	{ P6̄'(τ ₁) [*] , P6̄'(τ ₄)	2	C ₆	I	3
138	P6/m1'	Γ	{ P6'/m(τ ₂), P6'/m(τ ₇), P6'/m(τ ₈)	1	C ₁	I	1	
				{ P2'/m(τ ₅ +τ ₆), P2'/m(τ ₉ +τ ₁₀) [*]	2	C ₆	I	1
			A	{ P _c 6/m(τ ₁ , τ ₇), P _c 6 ₃ /m(τ ₂ , τ ₈)	1	C ₁	I	2
				{ P _b 2/m(τ ₃ +τ ₄ , τ ₉ +τ ₁₀), P _b 2 ₁ /m(τ ₅ +τ ₆ , τ ₁₁ +τ ₁₂)	2	C ₆	I	2
			M	{ (P _a 2/m, P6'/m)(τ ₁) [*] , (P _a 2/c, P6'/m)(τ ₂)	3	T _h	I, II	2, 4
				{ (P _a 2/c, P6'/m)(τ ₃), (P _a 2/m, P6'/m)(τ ₄)				
				L	{ (C _a 2/m, P _c 6/m)(τ ₁ , τ ₃), (C _a 2/m, P _c 6 ₃ /m)(τ ₂ , τ ₄)	3	T _h	I, II
	H	{ (P _c 6/m, P _c 6 ₃ /m)(τ ₁ , τ ₄)	2	C _{6v}	I, II	6, 6		
	K	{ (P6'/m, P6'/m)(τ ₁) [*] , (P6'/m', P6'/m')(τ ₄)	2	C _{6v}	I, II	3, 3		
144	P6 ₃ /m1'	Γ	{ P6 ₃ '/m(τ ₂), P6 ₃ '/m(τ ₇), P6 ₃ '/m(τ ₈)	1	C ₁	I	1	
				{ P2 ₁ '/m(τ ₅ +τ ₆), P2 ₁ '/m(τ ₉ +τ ₁₀)	2	C ₆	I	1
			M	{ (P _a 2 ₁ /m, P6 ₃ '/m)(τ ₁) [*] , (P _a 2 ₁ /c, P6 ₃ '/m')(τ ₂)	3	T _h	I, II	2, 4
				{ (P _a 2 ₁ /c, P6 ₃ '/m')(τ ₃), (P _a 2 ₁ /m, P6 ₃ '/m)(τ ₄)				
			K	{ (P6 ₃ '/m, P6 ₃ '/m)(τ ₁) [*] , (P6 ₃ '/m', P6 ₃ '/m')(τ ₄)	2	C _{6v}	I, II	3, 3
150	P6221'	Γ	P622(τ ₁) [*] , P6'22'(τ ₃), P6'2'2(τ ₄)	1	C ₁	I	1	
			A	P _c 622(τ ₁ , τ ₂), P _c 6 ₃ 22(τ ₃ , τ ₄)	1	C ₁	I	2
			M	{ (P _c 222, P622)(τ ₁) [*] , (P _A 222 ₁ , P6'2'2)(τ ₂)	3	O _h	I, II	2, 4
				{ (P _A 222 ₁ , P6'22')(τ ₃), (P _c 2 ₁ 2 ₁ 2, P62'2')(τ ₄)				
			L	{ (I _c 222, P _c 622)(τ ₁ , τ ₄), (I _c 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ , P _c 6 ₃ 22)(τ ₂ , τ ₃)	3	O _h	I, II	2, 8
			H	{ (P _c 622, P _c 6 ₃ 22)(τ ₁ , τ ₂)	2	C _{6v}	I, II	6, 6
			K	{ (P622, P6'2'2)(τ ₁) [*] , (P62'2', P6'22')(τ ₂)	2	C _{6v}	I, II	3, 3
156	P6 ₁ 221'	Γ	P6 ₁ 22(τ ₁) [*] , P6 ₁ 22'(τ ₃), P6 ₁ 2'2(τ ₄)	1	C ₁	I	1	
			M	{ (P _A 2 ₁ 2 ₁ 2, P6 ₁ 2'2)(τ ₂), (P _c 222 ₁ , P6 ₁ 22)(τ ₁) [*]	3	O _h	I, II	2, 4
				{ (P _A 2 ₁ 2 ₁ 2, P6 ₁ 22')(τ ₃), (P _c 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ , P6 ₁ 2'2')(τ ₄)				
K	{ (P6 ₁ 22, P6 ₁ 2'2)(τ ₁) [*] , (P6 ₁ 2'2', P6 ₁ 22')(τ ₂)	2	C _{6v}	I, II	3, 3			



	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
162	$P6_5 221'$	Γ	$P6_5 22(\tau_1), P6_5' 22'(\tau_3), P6_5' 2' 2(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		M	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{C 222}, P6_5 22)(\tau_1), (P_{A 2_1 2_1 2}, P6_5' 2' 2)(\tau_2) \\ (P_{A 2_1 2_1 2}, P6_5' 22')(\tau_3), (P_{C 2_1 2_1 2_1}, P6_5^* 2' 2')(\tau_4) \end{array} \right\}$	3	O_h	I, II	2, 4
		K	$(P6_5 22, P6_5' 2' 2)(\tau_1), (P6_5^* 2' 2', P6_5' 22')(\tau_2)$	2	C_{6v}	I, II	3, 3
168	$P6_2 221'$	Γ	$P6_2 22(\tau_1), P6_2' 22'(\tau_3), P6_2' 2' 2(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		A	$P_{C 6_4 22}(\tau_2, \tau_3), P_{C 6_1 22}(\tau_5, \tau_6)$	1	C_1	I	2
		M	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{C 222}, P6_2 22)(\tau_1), (P_{A 222}, P6_2' 2' 2)(\tau_2) \\ (P_{A 222}, P6_2' 22')(\tau_3), (P_{C 2_1 2_1 2}, P6_2^* 2' 2')(\tau_4) \end{array} \right\}$	3	O_h	I, II	2, 4
		L	$(I_{C 222}, P_{C 6_4 22})(\tau_1, \tau_4), (I_{C 2_1 2_1 2_1}, P_{C 6_1 22})(\tau_2, \tau_3)$	3	O_h	I, II	2, 8
		H	$(P_{C 6_4 22}, P_{C 6_1 22})(\tau_1, \tau_2)$	2	C_{6v}	I, II	6, 6
		K	$(P6_2 22, P6_2' 2' 2)(\tau_1), (P6_2^* 2' 2', P6_2' 22')(\tau_2)$	2	C_{6v}	I, II	3, 3
174	$P6_4 221'$	Γ	$P6_4 22(\tau_1), P6_4' 22'(\tau_3), P6_4' 2' 2(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		A	$P_{C 6_2 22}(\tau_2, \tau_3), P_{C 6_5 22}(\tau_5, \tau_6)$	1	C_1	I	2
		M	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{C 222}, P6_4 22)(\tau_1), (P_{A 222}, P6_4' 2' 2)(\tau_2) \\ (P_{A 222}, P6_4' 22')(\tau_3), (P_{C 2_1 2_1 2}, P6_4^* 2' 2')(\tau_4) \end{array} \right\}$	3	O_h	I, II	2, 4
		L	$(I_{C 222}, P_{C 6_2 22})(\tau_1, \tau_4), (I_{C 2_1 2_1 2_1}, P_{C 6_5 22})(\tau_2, \tau_3)$	3	O_h	I, II	2, 8
		H	$(P_{C 6_2 22}, P_{C 6_5 22})(\tau_1, \tau_2)$	2	C_{6v}	I, II	6, 6
		K	$(P6_4 22, P6_4' 2' 2)(\tau_1), (P6_4^* 2' 2', P6_4' 22')(\tau_2)$	2	C_{6v}	I, II	3, 3
180	$P6_3 221'$	Γ	$P6_3 22(\tau_1), P6_3' 22'(\tau_3), P6_3' 2' 2(\tau_4)$	1	C_1	I	1
		M	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{C 222}, P6_3 22)(\tau_1), (P_{A 2_1 2_1 2}, P6_3' 2' 2)(\tau_2) \\ (P_{A 2_1 2_1 2}, P6_3' 22')(\tau_3), (P_{C 2_1 2_1 2_1}, P6_3^* 2' 2')(\tau_4) \end{array} \right\}$	3	O_h	I, II	2, 4
		K	$(P6_3 22, P6_3' 2' 2)(\tau_1), (P6_3^* 2' 2', P6_3' 22')(\tau_2)$	2	C_{6v}	I, II	3, 3
186	$P6mm1'$	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} P6mm(\tau_1), P6'mm'(\tau_3), P6'm'm(\tau_4) \\ Cmm2(\tau_6) \end{array} \right\}$	1 2	C_1 C_{6v}	I I	1 1
		A	$\left\{ \begin{array}{l} P_{C 6mm}(\tau_1), P_{C 6cc}(\tau_2), P_{C 6_3 mc}(\tau_3), P_{C 6_3 cm}(\tau_4) \\ (C_{C mc 2_1}, C_{C mc 2_1})(\tau_5), (C_{C mm 2}, C_{C cc 2})(\tau_6) \end{array} \right\}$	1 2	C_1 C_{6v}	I I, II	2 2, 2
		M	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{C mm 2}, P6mm)(\tau_1), (P_{C ma 2}, P6'm'm)(\tau_2) \\ (P_{C ba 2}, P6m^*m')(\tau_3), (P_{C ma 2}, P6'mm')(\tau_4) \end{array} \right\}$	3	O_h	I, II	2, 4
		L	$\left\{ \begin{array}{l} (I_{C mm 2}, P_{C 6mm})(\tau_1), (I_{C ma 2}, P_{C 6_3 cm})(\tau_2) \\ (I_{C ba 2}, P_{C 6cc})(\tau_3), (I_{C ma 2}, P_{C 6_3 mc})(\tau_4) \end{array} \right\}$	3	O_h	I, II	2, 8
		H	$(P_{C 6mm}, P_{C 6_3 mc})(\tau_1), (P_{C 6cc}, P_{C 6_3 cm})(\tau_2)$	2	C_{6v}	I, II	6, 6
		K	$(P6mm, P6'mm')(\tau_1), (P6m^*m', P6'm'm)(\tau_2)$	2	C_{6v}	I, II	3, 3
192	$P6cc1'$	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} P6cc(\tau_1), P6'cc'(\tau_3), P6'c'c(\tau_4) \\ Ccc2(\tau_6) \end{array} \right\}$	1 2	C_1 C_{6v}	I I	1 1
		M	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{C cc 2}, P6cc)(\tau_1), (P_{C nc 2}, P6'c'c)(\tau_2) \\ (P_{C nn 2}, P6c^*c')(\tau_3), (P_{C nc 2}, P6'cc')(\tau_4) \end{array} \right\}$	3	O_h	I, II	2, 4
		K	$(P6cc, P6'cc')(\tau_1), (P6c^*c', P6'c'c)(\tau_2)$	2	C_{6v}	I, II	3, 3

BUS LILLE

	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)		
-198	P6 ₃ cm1'	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} P6_3cm(\tau_1), P6_3'cm'(\tau_3), P6_3'c'm(\tau_4) \\ Cmc2_1(\tau_6) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1		
				2	C _{6v}	I	1		
				3	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{Cmc}2_1, P6_3^*cm)(\tau_1), (P_{Cmn}2_1, P6_3'c'm)(\tau_2) \\ (P_{Cna}2_1, P6_3'c'm')(\tau_3), (P_{Cca}2_1, P6_3'cm')(\tau_4) \end{array} \right.$	0 _h	I, II	2, 4	
						2	C _{6v}	I, II	3, 3
				K	$(P6_3mc, P6_3'mc')(\tau_1), (P6_3^*m'c', P6_3'm'c)(\tau_2)$	2	C _{6v}	I, II	3, 3
-204	P6 ₃ mc1'	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} P6_3mc(\tau_1), P6_3'mc'(\tau_3), P6_3'm'c(\tau_4) \\ Cmc2_1(\tau_6) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1		
				2	C _{6v}	I	1		
				3	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{Cmc}2_1, P6_3mc)(\tau_1), (P_{Cca}2_1, P6_3'm'c)(\tau_2) \\ (P_{Cna}2_1, P6_3^*m'c')(\tau_3), (P_{Cmn}2_1, P6_3'mc')(\tau_4) \end{array} \right.$	0 _h	I, II	2, 4	
						8	M ₅	I, II, III	6, 6, 6
				K	$(P6_3cm, P6_3'cm')(\tau_1), (P6_3^*c'm', P6_3'c'm)(\tau_2)$	2	C _{6v}	I, II	3, 3
-210	P6̄ ₂ m21'	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} P6̄_2m2(\tau_1), P6̄_2'm'2(\tau_4), P6̄_2'm2'(\tau_5) \\ Amm2(\tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1		
				2	C _{6v}	I	1		
				1	$\left\{ \begin{array}{l} P_{C6̄}2m2(\tau_1, \tau_5), P_{C6̄}2c2(\tau_2, \tau_4) \\ (A_{Amm}2, A_{Ama}2)(\tau_3), (A_{Ama}2, A_{Amm}2)(\tau_6) \end{array} \right.$	C ₁	I	2	
						2	C _{6v}	I, II	2, 2
				3	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{Amm}2, P6̄_2m2)(\tau_1), (P_{Bmn}2_1, P6̄_2'm2')(\tau_2) \\ (P_{Anc}2, P6̄_2'm'2)(\tau_3), (P_{Amc}2_1, P6̄_2^*m'2')(\tau_4) \end{array} \right.$	0 _h	I, II	2, 4	
						3	0 _h	I, II	2, 8
				H	$(P_{C6̄}2m, P_{C6̄}2c)(\tau_1, \tau_4)$	2	C _{6v}	I, II	6, 6
				K	$(P6̄_2m, P6̄_2^*m')(\tau_1), (P6̄_2'2'm, P6̄_2'2m')(\tau_4)$	2	C _{6v}	I, II	3, 3
-216	P6̄ ₂ c21'	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} P6̄_2c2(\tau_1), P6̄_2'c'2(\tau_4), P6̄_2'c2'(\tau_5) \\ Ama2(\tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1		
				2	C _{6v}	I	1		
				3	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{Ama}2, P6̄_2c2)(\tau_1), (P_{Amn}2_1, P6̄_2^*c'2')(\tau_2) \\ (P_{Ann}2, P6̄_2'c'2)(\tau_3), (P_{Ana}2_1, P6̄_2'c2')(\tau_4) \end{array} \right.$	0 _h	I, II	2, 4	
						2	C _{6v}	I, II	3, 3
				K	$(P6̄_2c, P6̄_2^*c')(\tau_1), (P6̄_2'2'c, P6̄_2'2c')(\tau_4)$	2	C _{6v}	I, II	3, 3
-222	P6̄ ₂ m1'	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} P6̄_2m(\tau_1), P6̄_2'2m'(\tau_4), P6̄_2'2m(\tau_5) \\ Amm2(\tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1		
				2	C _{6v}	I	1		
				1	$\left\{ \begin{array}{l} P_{C6̄}2m(\tau_1, \tau_5), P_{C6̄}2c(\tau_2, \tau_4) \\ (A_{Amm}2, A_{Ama}2)(\tau_3), (A_{Ama}2, A_{Amm}2)(\tau_6) \end{array} \right.$	C ₁	I	2	
						2	C _{6v}	I, II	2, 2
				3	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{Amm}2, P6̄_2m)(\tau_1), (P_{Bmn}2_1, P6̄_2'2'm)(\tau_2) \\ (P_{Anc}2, P6̄_2'2m')(\tau_3), (P_{Amc}2_1, P6̄_2^*m')(\tau_4) \end{array} \right.$	0 _h	I, II	2, 4	
						3	0 _h	I, II	2, 8
				H	$(P_{C6̄}2m(\tau_1, \tau_5), P_{C6̄}2c(\tau_2, \tau_4))$	2	C ₆	I	6
				K	$(P6̄_2m(\tau_1), P6̄_2^*m'2'(\tau_2), P6̄_2'm'2(\tau_4), P6̄_2'm2'(\tau_5))$	2	C ₆	I	3



	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
228	$P\bar{6}2c1'$		$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} P\bar{6}2c(\tau_1), P\bar{6}'2c'(\tau_4), P\bar{6}'2'c(\tau_5) \\ A_{ma}2(\tau_3) \end{array} \right\}$	1	C_1	I	1
				2	C_{6v}	I	1
			$M \left\{ \begin{array}{l} (P_{Ama}2, P\bar{6}2c)(\tau_1), (P_{Ann}2, P\bar{6}'2'c)(\tau_2) \\ (P_{Ann}2, P\bar{6}'2c)(\tau_3), (P_{Ama}2, P\bar{6}'2'c)(\tau_4) \end{array} \right\}$	3	O_h	I, II	2, 4
			$H \left\{ \begin{array}{l} (C_c^m, C_c^2)(\tau_2, \tau_3) \end{array} \right\}$	4	S_6	I, II	6, 6
			$K \left\{ \begin{array}{l} P\bar{6}c2(\tau_1), P\bar{6}'c'2(\tau_2), P\bar{6}'c'2(\tau_4), P\bar{6}'c2'(\tau_5) \end{array} \right\}$	2	C_6	I	3
234	$P6/mmm1'$		$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} P6/mmm(\tau_1), P6'/m'mm'(\tau_3), P6'/m'm'm(\tau_4), P6/m'mm(\tau_8) \\ P6/m'm'm'(\tau_7), P6'/m'mm'(\tau_9), P6'/mmm'(\tau_{10}) \\ (C_m^m, C_m^m)(\tau_{11}), (C_m^m, C_m^m)(\tau_{12}) \\ C_m^m(\tau_6) \end{array} \right\}$	1	C_1	I	1
				2	C_{6v}	I, II	1, 1
				2	C_{6v}	I	1
			$A \left\{ \begin{array}{l} P_c^6/mmm(\tau_1, \tau_8), P_c^6/mcc(\tau_2, \tau_7), P_c^6/mcc(\tau_3, \tau_{10}) \\ P_c^6/mcm(\tau_4, \tau_9) \\ (C_c^m, C_c^m)(\tau_5, \tau_{11}), (C_c^m, C_c^m)(\tau_6) \\ (C_c^c, C_c^m)(\tau_{12}) \end{array} \right\}$	1	C_1	I	2
				2	C_{6v}	I, II	2, 2
			$M \left\{ \begin{array}{l} (P_c^m, P6/mmm)(\tau_1), (P_{Bma}, P6'/m'm'm)(\tau_2) \\ (P_{Bma}, P6'/m'mm'(\tau_3), (P_{cbm}, P6'/m'm'm)(\tau_4) \\ (P_{cbm}, P6'/m'm'm)(\tau_5), (P_{Bma}, P6'/mmm)(\tau_6) \\ (P_{Bma}, P6'/m'm'm)(\tau_7), (P_{cmm}, P6'/m'mm)(\tau_8) \end{array} \right\}$	3	O_h	I, II	2, 4
			$L \left\{ \begin{array}{l} (I_c^m, P_c^6/mmm)(\tau_1, \tau_8), (I_a^m, P_c^6/mcm)(\tau_2, \tau_6) \\ (I_a^m, P_c^6/mcc)(\tau_3, \tau_7), (I_c^m, P_c^6/mcc)(\tau_4, \tau_5) \end{array} \right\}$	3	O_h	I, II	2, 8
			$H \left\{ \begin{array}{l} (P_c^6/mmm, P_c^6/mcm)(\tau_1, \tau_5), (P_c^6/mcc, P_c^6/mcc)(\tau_2, \tau_4) \end{array} \right\}$	2	C_{6v}	I, II	6, 6
			$K \left\{ \begin{array}{l} (P6/mmm, P6'/mmm)(\tau_1), (P6'/m'm', P6'/m'm'm)(\tau_2) \\ (P6'/m'm'm', P6'/m'm'm)(\tau_4), (P6'/m'mm, P6'/m'mm)(\tau_5) \end{array} \right\}$	2	C_{6v}	I, II	3, 3
244	$P6/mcc1'$		$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} P6/mcc(\tau_1), P6'/m'cc'(\tau_3), P6'/m'c'c(\tau_4), P6'/m'cc(\tau_8) \\ P6'/m'c'c'(\tau_7), P6'/m'c'c(\tau_9), P6'/mcc'(\tau_{10}) \\ (C_c^c, C_c^c)(\tau_{11}), (C_c^c, C_c^c)(\tau_{12}) \\ C_c^c(\tau_6) \end{array} \right\}$	1	C_1	I	1
				2	C_{6v}	I, II	1, 1
				2	C_{6v}	I	1
			$M \left\{ \begin{array}{l} (P_c^c, P6/mcc)(\tau_1), (P_{Anna}, P6'/m'c'c)(\tau_2) \\ (P_{Anna}, P6'/m'cc'(\tau_3), (P_{cnn}, P6'/m'c'c)(\tau_4) \\ (P_{cnn}, P6'/m'c'c)(\tau_5), (P_{Anna}, P6'/mcc'(\tau_6) \\ (P_{Anna}, P6'/m'c'c)(\tau_7), (P_{ccn}, P6'/m'cc)(\tau_8) \end{array} \right\}$	3	O_h	I, II	2, 4
			$K \left\{ \begin{array}{l} (P6/mcc, P6'/mcc'(\tau_1), (P6'/m'c'c', P6'/m'c'c)(\tau_2) \\ (P6'/m'c'c', P6'/m'c'c)(\tau_4), (P6'/m'cc, P6'/m'cc'(\tau_5) \end{array} \right\}$	2	C_{6v}	I, II	3, 3



(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
254	$P6_3/mcm1'$	Γ $\left\{ \begin{array}{l} P6_3/mcm(\tau_1), P6_3/m'cm'(\tau_3), P6_3/m'c'm(\tau_4) \\ P6_3/m'c'm'(\tau_7), P6_3/m'cm(\tau_8), P6_3/mc'm(\tau_9) \\ P6_3/mcm'(\tau_{10}) \\ (Cmc'm, Cmc'm)(\tau_{11}), (Cm'c'm', Cmc'm')(\tau_{12}) \\ Cmc'm(\tau_6) \end{array} \right.$	$\left. \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ 2 \end{array} \right\}$	C_1 C_{6v} C_{6v}	I I, II I	1 1,1 1
		M $\left\{ \begin{array}{l} (P_A nma, P6_3/mcm)(\tau_1), (P_A nnm, P6_3/m'c'm)(\tau_2) \\ (P_C bcn, P6_3/m'c'm')(\tau_3), (P_B nma, P6_3/mc'm^*)(\tau_4) \\ (P_B nna, P6_3/m'c'm')(\tau_5), (P_C bcm, P6_3/mcm')(\tau_6) \\ (P_A mnn, P6_3/mc'm)(\tau_7), (P_A nma, P6_3/m'cm)(\tau_8) \end{array} \right.$	$\left. \begin{array}{l} 3 \end{array} \right\}$	O_h	I, II	2, 4
		K $\left\{ \begin{array}{l} (P6_3/mmc, P6_3/mmc')(\tau_1), (P6_3/mm'c', P6_3/mm'c)(\tau_2) \\ (P6_3/m'm'c', P6_3/m'm'c)(\tau_4), (P6_3/m'mc, P6_3/m'mc')(\tau_5) \end{array} \right.$	$\left. \begin{array}{l} 2 \end{array} \right\}$	C_{6v}	I, II	3, 3
-264	$P6_3/mmc1'$	Γ $\left\{ \begin{array}{l} P6_3/mmc(\tau_1), P6_3/m'cc'(\tau_3), P6_3/m'm'c(\tau_4) \\ P6_3/m'm'c'(\tau_7), P6_3/m'mc(\tau_8), P6_3/mm'c(\tau_9) \\ P6_3/mmc'(\tau_{10}) \\ (Cm'cm, Cmc'm)(\tau_{11}), (Cm'c'm', Cmc'm')(\tau_{12}) \\ Cmc'm(\tau_6) \end{array} \right.$	$\left. \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ 2 \end{array} \right\}$	C_1 C_{6v} C_{6v}	I I, II I	1 1,1 1
		K $\left\{ \begin{array}{l} (P6_3/mcm, P6_3/mcm')(\tau_1), (P6_3/mc'm', P6_3/mc'm)(\tau_2) \\ (P6_3/m'c'm', P6_3/m'c'm)(\tau_4), (P6_3/m'cm, P6_3/m'cm')(\tau_5) \end{array} \right.$	$\left. \begin{array}{l} 2 \end{array} \right\}$	C_{6v}	I, II	3, 3
		M $\left\{ \begin{array}{l} (P_A nma, P6_3/mmc)(\tau_1), (P_C bcn, P6_3/m'm'c)(\tau_2) \\ (P_A nnm, P6_3/m'mc')(\tau_3), (P_B nma, P6_3/mm'c^*)(\tau_4) \\ (P_B nna, P6_3/m'm'c')(\tau_5), (P_A mnn, P6_3/mmc')(\tau_6) \\ (P_C bcm, P6_3/mm'c)(\tau_7), (P_A nma, P6_3/m'mc)(\tau_8) \end{array} \right.$	$\left. \begin{array}{l} 3 \end{array} \right\}$	O_h	I, II	2, 4



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
-2	P23'	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} P_{23}(\tau_1) \\ P_{222}(\tau_2 + \tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1	
				2	C ₆	I	1	
			M	$(C_{a222}, I_{23})(\tau_1, \tau_4), (C_{a222}, I_{2,3})(\tau_2, \tau_3)$	3	T _h	I, II	2, 4
			R	$\left\{ \begin{array}{l} F_{a23}(\tau_1) \\ F_{a222}(\tau_2 + \tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	2
					2	C ₆	I	2
X	$(P_{a222}, P_{I23})(\tau_1, \tau_2), (P_{c222}, P_{I2,3})(\tau_3, \tau_4)$	3	T _h	I, II	2, 8			
-5	F23'	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} F_{23}(\tau_1) \\ F_{222}(\tau_2 + \tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1	
				2	C ₆	I	1	
		X	$(C_{A222}, P_{23})(\tau_1, \tau_3), (C_{A222}, P_{2,3})(\tau_2, \tau_4)$	3	T _h	I, II	2, 4	
		L	$(R_{I3}, F_{a23}, F_{a23})(\tau_1)$	4	95.1	I, II, III	2, 8, 8	
-8	I23'	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} I_{23}(\tau_1) \\ I_{222}(\tau_2 + \tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1	
				2	C ₆	I	1	
		N	$\left\{ \begin{array}{l} (C_{c2}, C_{a222}, R_3, R_{I3}, I_{23}, I_{c222})(\tau_1) \\ (C_{c2}, C_{a222}, R_3, R_{I3}, I_{2,3}, I_{c222})(\tau_2) \end{array} \right.$	6	L ₈	I, II, III, IV, V, VI	2, 4, 8, 8, 8, 8	
				P	$\left\{ \begin{array}{l} F_{a23}(\tau_1) \\ F_{a222}(\tau_2 + \tau_3) \end{array} \right.$	2	C ₄	I
		H	$\left\{ \begin{array}{l} P_{I23}(\tau_1) \\ P_{I222}(\tau_2 + \tau_3) \end{array} \right.$	2	C ₁₂	I	4	
				1	C ₁	I	2	
				2	C ₆	I	2	
-10	P2 ₁ 3'	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} P_{2,3}(\tau_1) \\ P_{2,1,2,1}(\tau_2 + \tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1	
				2	C ₆	I	1	
		M	$(P_{c2,1}, R_3, R_3, R_3, R_3)(\tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4)$	6	L ₁₂	I, II, III, IV, V	2, 4, 4, 4, 4	
-13	I2 ₁ 3'	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} I_{2,3}(\tau_1) \\ I_{2,1,2,1}(\tau_2 + \tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1	
				2	C ₆	I	1	
		N	$(C_{c2}, C_{a222}, R_3, R_{I3}, R_3)(\tau_1, \tau_2)$	6	L ₅	I, II, III, IV, V	2, 4, 8, 8, 8	
		H	$\left\{ \begin{array}{l} P_{I2,3}(\tau_1) \\ P_{I2,1,2,1}(\tau_2 + \tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	2	
2	C ₆	I	2					



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
0-15	Pm3'	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} Pm3(\tau_1), Pm'3(\tau_5) \\ Pmmm(\tau_2+\tau_3), Pm'm'm'(\tau_6+\tau_7) \\ (Pm'mm, R\bar{3}')(\tau_8) \end{array} \right.$ $R \left\{ \begin{array}{l} F_m m3(\tau_1, \tau_5) \\ F_s mmm(\tau_2+\tau_3, \tau_6+\tau_7) \\ (F_s mmm, R_I \bar{3}')(\tau_4, \tau_8) \end{array} \right.$ $X \left\{ \begin{array}{l} (P_a mmm, P_I m3)(\tau_1, \tau_6), (P_a mma, P_I a3)(\tau_3, \tau_4, \tau_7, \tau_8), \\ (P_c ccm, P_I n3)(\tau_2, \tau_5) \end{array} \right.$ $M \left\{ \begin{array}{l} (C_a mmm, Im3)(\tau_1, \tau_4), (C_a mma, Ia3)(\tau_2, \tau_3), \\ (C_a mma, Im'3)(\tau_5, \tau_8), (C_a mmm, Ia'3)(\tau_6, \tau_7) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1	
			2	C ₆	I	1	
			3	T _h	I, II	1, 1	
			1	C ₁	I	2	
			2	C ₆	I	2	
			3	T _h	I, II	2, 2	
			3	T _h	I, II	2, 8	
			3	T _h	I, II	2, 4	
-19	Pn3'		$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} Pn3(\tau_1), Pn'3(\tau_5) \\ Pnnn(\tau_2+\tau_3), Pn'n'n'(\tau_6+\tau_7) \\ (Pn'nn, R\bar{3}')(\tau_8) \end{array} \right.$ $R \left\{ \begin{array}{l} F_s d3(\tau_1, \tau_5) \\ F_s ddd(\tau_2+\tau_3, \tau_6+\tau_7) \\ (F_s ddd, R_I \bar{3}')(\tau_4, \tau_8) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1
				2	C ₆	I	1
				3	T _h	I, II	1, 1
				1	C ₁	I	2
		2		C ₆	I	2	
		3		T _h	I, II	2, 2	
23	Fm3'	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} Fm3(\tau_1), Fm'3(\tau_5) \\ Fmmm(\tau_2+\tau_3), Fm'm'm'(\tau_6+\tau_7) \\ (Fm'mm, R\bar{3}')(\tau_8) \end{array} \right.$ $X \left\{ \begin{array}{l} (C_A mmm, Pm3)(\tau_1), (C_A mca, Pa3)(\tau_2, \tau_4), \\ (C_A ccm, Pn3)(\tau_3), (C_A cca, Pm'3)(\tau_5), \\ (C_A mcm, Pa'3)(\tau_6, \tau_8), (C_A mma, Pn'3)(\tau_7) \end{array} \right.$ $L \left\{ \begin{array}{l} (R_I \bar{3}, F_s m3, F_s m3)(\tau_1, \tau_4) \\ (P_a \bar{1}, C_a 2/m, F_s mmm)(\tau_2+\tau_3, \tau_5+\tau_6) \end{array} \right.$		1	C ₁	I	1
				2	C ₆	I	1
				3	T _h	I, II	1, 1
				3	T _h	I, II	2, 4
				4	95.1	I, II, III	2, 8, 8
				8	L ₄	I, II, III	2, 4, 8
27	Fd3'		$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} Fd3(\tau_1), Fd'3(\tau_5) \\ Fddd(\tau_2+\tau_3), Fd'd'd'(\tau_6+\tau_7) \\ (Fd'dd, R\bar{3}')(\tau_8) \end{array} \right.$ $L \left\{ \begin{array}{l} (R_I \bar{3}, F_s 23)(\tau_1, \tau_4) \\ (P_a \bar{1}, C_a 2/c, F_s 222)(\tau_2+\tau_3, \tau_5+\tau_6) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1
				2	C ₆	I	1
				3	T _h	I, II	1, 1
				4	108.01	I, II	2, 8
				8	M ₃	I, II, III	2, 4, 8



(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
4-31	Im3'	Γ	Im3(τ_1), Im'3(τ_5)	1	C ₁	I	1	
			Immm($\tau_2 + \tau_3$), Im'm'm'($\tau_6 + \tau_7$)	2	C ₆	I	1	
			(Im'mm, R $\bar{3}$ ')(τ_8)	3	T _h	I, II	1, 1	
		H	P _I m3(τ_1), P _I n3(τ_5)	1	C ₁	I	2	
			P _I mmm($\tau_2 + \tau_3$), P _I nnn($\tau_6 + \tau_7$)	2	C ₆	I	2	
			(P _I nnm, R $\bar{3}$)(τ_4), (P _I mmn, R $\bar{3}$)(τ_8)	3	T _h	I, II	2, 2	
		N	(C _c 2/m, C _a mmm, R $\bar{3}$, R $\bar{3}$, Im3, I _c mmm)(τ_1)	6	L ₈	}	I, II, III,	2, 4, 8,
			(C _c 2/c, C _a mma, R $\bar{3}$, R $\bar{3}$, Ia3, I _c bca)(τ_2)					
			(C _c 2/c, C _a mma, R $\bar{3}$, R $\bar{3}$ ', Im'3, I _a bam)(τ_3)					
			(C _c 2/m, C _a mmm, R $\bar{3}$, R $\bar{3}$ ', Ia'3, I _a mma)(τ_4)					
		P	(F _s m3, F _s d3)(τ_1)	2	C _{4v}	I, II	4, 4	
			(F _s 222, F _s mmm, F _s ddd)($\tau_2 + \bar{\tau}_2, \tau_3 + \bar{\tau}_3$)	4	42.1	I, II, III	4, 4, 4	
5-34	Pa3'	Γ	Pa3(τ_1), Pa'3(τ_5)	1	C ₁	I	1	
			Pbca($\tau_2 + \tau_3$), Pb'c'a'($\tau_6 + \tau_7$)	2	C ₆	I	1	
			(Pb'ca, R $\bar{3}$ ')(τ_8)	3	T _h	I, II	1, 1	
		R	P _s $\bar{1}$ ($\tau_1 + \bar{\tau}_1, \tau_4 + \bar{\tau}_4$)	4	49.1	I	2	
			R _I $\bar{3}$ ($\tau_2 + \bar{\tau}_2, \tau_3 + \bar{\tau}_3, \tau_5 + \bar{\tau}_5, \tau_6 + \bar{\tau}_6$)	4	49.2	I	2	
5-38	Ia3'	Γ	Ia3(τ_1), Ia'3(τ_5)	1	C ₁	I	1	
			Ibca($\tau_2 + \tau_3$), Ib'c'a'($\tau_6 + \tau_7$)	2	C ₆	I	1	
			(Ib'ca, R $\bar{3}$ ')(τ_8)	3	T _h	I, II	1, 1	
		H	P _I a3(τ_1, τ_5)	1	C ₁	I	2	
			P _I bca($\tau_2 + \tau_3, \tau_6 + \tau_7$)	2	C ₆	I	2	
			(P _I cca, R $\bar{3}$)(τ_4, τ_8)	3	T _h	I, II	2, 2	
7-41	P43'2	Γ	P432(τ_1), P4'32'(τ_2)	1	C ₁	I	1	
			(P422, P4'22')(τ_3)	2	C _{6v}	I, II	1, 1	
		M	(P _c 422, I432)(τ_1, τ_4), (P _c 4 ₂ 2, I4'32')(τ_2, τ_3)	3	O _h	I, II	2, 4	
		R	F _s 432(τ_1, τ_2)	1	C ₁	I	2	
			(I _c 422, I _c 4 ₁ 22)(τ_3)	2	C _{6v}	I, II	2, 2	
X	(P _c 422, P _I 432)(τ_1, τ_2), (P _c 4 ₂ 22, P _I 4 ₂ 32)(τ_3, τ_4)	3	O _h	I, II	2, 8			
8-45	P4 ₂ 3'2	Γ	P4 ₂ 32(τ_1), P4' ₂ 32'(τ_2)	1	C ₁	I	1	
			(P4 ₂ 22, P4' ₂ 22')(τ_3)	2	C _{6v}	I, II	1, 1	
		R	F _s 4 ₁ 32(τ_1, τ_2)	1	C ₁	I	2	
			(I _c 4 ₁ 22, I _c 4 ₁ 22)(τ_3)	2	C _{6v}	I, II	2, 2	
		X	(P _c 4 ₁ 22, P _I 4 ₁ 32)(τ_2, τ_3), (P _c 4 ₃ 22, P _I 4 ₃ 32)(τ_4, τ_5)	3	O _h	I, II	2, 8	
M	(P _c 4 ₂ 2 ₁ , I4 ₁ 32)(τ_2, τ_5), (P _c 4 ₂ 22, I4 ₁ 32')(τ_3, τ_4)	3	O _h	I, II	2, 4			

	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
9	F43'2	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} F432(\tau_1), F4'32'(\tau_2) \\ (I422, I4'22')(\tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1
		X	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{I422}, P432)(\tau_1), (P_{I421}, P4'32')(\tau_2), \\ (P_{I422}, P4'32')(\tau_3), (P_{I422}, P4_232)(\tau_4) \end{array} \right.$	2	C _{6v}	I, II	1.1
		L	$(R_{I32}, F_{S432}, F_{S432})(\tau_1), (R_{I32}, F_{S4132}, F_{S4132})(\tau_2)$	3	O _h	I, II	2.4
		W	$(I_{C422}, I_{C4122}, P_{I432}, P_{I4232}, P_{I4332}, P_{I4132})(\tau_1, \tau_2)$	4	109.01	I, II, III	2.8.8
				6	L ₂	I, II, III, IV, V, VI	4.4.32, 32.32.32
3	F4 ₁ 3'2	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} F4_132(\tau_1), F4_1'32'(\tau_2) \\ (I4_122, I4_1'22')(\tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1
		L	$(R_{I32}, F_{S23})(\tau_1, \tau_2)$	2	C _{6v}	I, II	1.1
		X	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{I4122}, P4_132)(\tau_2), (P_{I4121}, P4_3'32')(\tau_3), \\ (P_{I4321}, P4_1'32')(\tau_4), (P_{I4322}, P4_332)(\tau_5) \end{array} \right.$	4	110.1	I, II	2.8
				3	O _h	I, II	2.4
7	I43'2	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} I432(\tau_1), I4'32'(\tau_2) \\ (I422, I4'22')(\tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1
		P	$\left\{ \begin{array}{l} (F_{S432}, F_{S4132})(\tau_1) \\ (I_{C422}, I_{C4122})(\tau_2 + \bar{\tau}_2, \tau_3 + \bar{\tau}_3) \end{array} \right.$	2	C _{4v}	I, II	4.4
		H	$\left\{ \begin{array}{l} P_{I432}(\tau_1), P_{I4232}(\tau_2) \\ (P_{I422}, P_{I422})(\tau_3) \end{array} \right.$	2	C _{12v}	I, II	4.4
		N	$\left\{ \begin{array}{l} (C_{A222}, P_{C422}, R_{I32}, R32, I432, I_{C422})(\tau_1) \\ (C_{A222}, P_{C422}, R_{I32}, R32, I4_132, I_{C4122})(\tau_2) \\ (C_{A222}, P_{C422}, R_{I32}, R32', I4_1'32', I_{C422})(\tau_3) \\ (C_{A222}, P_{C422}, R_{I32}, R32', I4_1'32', I_{C4122})(\tau_4) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	2
				2	C _{6v}	I, II	2.2
				6	L ₄	I, II, III, IV, V, VI	2.4.8, 8.8.8
0	P4 ₃ 3'2	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} P4_332(\tau_1), P4_3'32'(\tau_2) \\ (P4_321, P4_3'21)(\tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1
		M	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{C222}, P_{C222}, R32, R32, R32)(\tau_2 + \bar{\tau}_2, \tau_4 + \bar{\tau}_4) \\ (P_{C222}, P_{C222}, R32', R32', R32')(\tau_3 + \bar{\tau}_3, \tau_5 + \bar{\tau}_5) \end{array} \right.$	2	C _{6v}	I, II	1.1
				6	L ₁₃	I, II, III, IV, V	2.2.4, 4.4
54	P4 ₁ 3'2	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} P4_132(\tau_1), P4_1'32'(\tau_2) \\ (P4_121, P4_1'21)(\tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1
		M	$(P_{C41}, P_{C41}, R3, R3, R3)(\tau_4 + \tau_5, \tau_2 + \tau_3)$	2	C _{6v}	I, II	1.1
				6	L ₁₃	I, II, III, IV, V	2.2.4, 4.4
8	I4 ₁ 3'2	Γ	$\left\{ \begin{array}{l} I4_132(\tau_1), I4_1'32'(\tau_2) \\ (I4_122, I4_1'22)(\tau_3) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1
		H	$\left\{ \begin{array}{l} P_{I4332}(\tau_1), P_{I4132}(\tau_2) \\ (P_{I4322}, P_{I4122})(\tau_3) \end{array} \right.$	2	C _{6v}	I, II	1.1
		N	$\left\{ \begin{array}{l} (C_{A222}, P_{C4122}, R_{I32}, R32, R32)(\tau_1) \\ (C_{A222}, P_{C4322}, R_{I32}, R32', R32')(\tau_2) \\ (C_{A222}, P_{C4122}, R_{I32}, R32', R32')(\tau_3, \tau_4) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	2
				2	C _{6v}	I, II	2.2
				6	L ₁₁	I, II, III, IV, V	2.4.8, 8.8



(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
71	P43'm	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} P\bar{4}3m(\tau_1), P\bar{4}'3m'(\tau_2) \\ (P\bar{4}2m, P\bar{4}'2m')(\tau_3) \\ (P\bar{4}'2'm, R3m)(\tau_4) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1
			2	C _{6v}	I, II	1, 1
			3	O _h	I, II	1, 1
		$R \left\{ \begin{array}{l} F_s\bar{4}3m(\tau_1), F_s\bar{4}3c(\tau_2) \\ (I_c\bar{4}m2, I_c\bar{4}c2)(\tau_3) \\ (I_c\bar{4}m2, R_I3m)(\tau_4), (I_c\bar{4}c2, R_I3c)(\tau_5) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	2
			2	C _{6v}	I, II	2, 2
			3	O _h	I, II	2, 2
		$X \left\{ \begin{array}{l} (P_c\bar{4}2m, P_I\bar{4}3m)(\tau_1, \tau_4), (P_c\bar{4}2c, P_I\bar{4}3n)(\tau_2, \tau_3) \\ (P_c222_1, C_{mc}2_1, R_I3m, R_I3c, P_I2_13, P_c\bar{4}2_1m, P_c\bar{4}2_1n)(\tau_5) \end{array} \right.$	3	O _h	I, II	2, 8
			6	L ₇	{ I, II, III, IV, V, VI, VII	2, 2, 8, 8, 8, 4, 4
		$M \left\{ \begin{array}{l} (P_c\bar{4}m2, I\bar{4}3m)(\tau_1, \tau_4), (P_c\bar{4}b2, I\bar{4}'3m')(\tau_2, \tau_3) \\ (C_a222, P_cma2, I2_13, I2_13, R3m)(\tau_5) \end{array} \right.$	3	O _h	I, II	2, 4
			6	L ₇	{ I, II, III, IV, V	2, 2, 4, 4, 4
75	F43'm	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} F\bar{4}3m(\tau_1), F\bar{4}'3m'(\tau_2) \\ (I\bar{4}m2, I\bar{4}'m'2)(\tau_3) \\ (I\bar{4}'m'2', R3m)(\tau_4) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1
			2	C _{6v}	I, II	1, 1
			3	O _h	I, II	1, 1
		$X \left\{ \begin{array}{l} (P_I\bar{4}m2, P\bar{4}3m)(\tau_1, \tau_4), (P_I\bar{4}n2, P\bar{4}'3m')(\tau_2, \tau_3) \\ (P_I mn2_1, C_A222_1, R3m, R3m', P2_13)(\tau_5) \end{array} \right.$	3	O _h	I, II	2, 4
			6	L ₇	{ I, II, III, IV, V	2, 2, 4, 4, 4
79	I43'm	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} I\bar{4}3m(\tau_1), I\bar{4}'3m'(\tau_2) \\ (I\bar{4}2m, I\bar{4}'2m')(\tau_3) \\ (I\bar{4}'2'm, R3m)(\tau_4) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1
			2	C _{6v}	I, II	1, 1
			3	O _h	I, II	1, 1
		$H \left\{ \begin{array}{l} P_I\bar{4}3m(\tau_1), P_I\bar{4}3n(\tau_2) \\ (P_I\bar{4}2m, P_I\bar{4}2c)(\tau_3) \\ (P_I\bar{4}2_1m, R_I3m)(\tau_4), (P_I\bar{4}2_1c, R_I3c)(\tau_5) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	2
			2	C _{6v}	I, II	2, 2
			3	O _h	I, II	2, 2
		$N \left\{ \begin{array}{l} (A_cmm2, P_c\bar{4}m2, R_I3m, R3m, I\bar{4}3m, I_c\bar{4}2m)(\tau_1, \tau_2) \\ (A_cma2, P_c\bar{4}c2, R_I3m, R3m', I\bar{4}'3d', I_c\bar{4}2d)(\tau_3) \\ (A_cma2, P_c\bar{4}b2, R_I3c, R3m', I\bar{4}'3m', I_c\bar{4}2m)(\tau_4) \end{array} \right.$	6	L ₄	{ I, II, III, IV, V, VI	2, 4, 8, 8, 8, 8
		$P \left\{ \begin{array}{l} F_s\bar{4}3m(\tau_1), F_s\bar{4}3c(\tau_2) \\ (F_s222, I_c\bar{4}m2, I_c\bar{4}c2)(\tau_3, \tau_3) \end{array} \right.$	2	C ₄	I	4
			4	44.1	I, II, III	4, 4, 4
82	P43'n	$\Gamma \left\{ \begin{array}{l} P\bar{4}3n(\tau_1), P\bar{4}'3n'(\tau_2) \\ (P\bar{4}2c, P\bar{4}'2c')(\tau_3) \\ (P\bar{4}'2'c, R3c)(\tau_4) \end{array} \right.$	1	C ₁	I	1
			2	C _{6v}	I, II	1, 1
			3	O _h	I, II	1, 1
		$M \left\{ \begin{array}{l} (P_cnc2, C_a222, R3c', R3c, I23)(\tau_1) \\ (P_c\bar{4}c2, I\bar{4}3d)(\tau_2, \tau_5), (P_c\bar{4}n2, I\bar{4}'3d')(\tau_3, \tau_4) \end{array} \right.$	6	L ₇	{ I, II, III, IV, V	2, 2, 4, 4, 4
			3	O _h	I, II	2, 4
		$R \left\{ \begin{array}{l} F_s222(\tau_3, \tau_3) \\ F_s23(\tau_4, \tau_5) \end{array} \right.$	4	21.1	I	2
			2	C ₄	I	2
		$X \left\{ \begin{array}{l} (P_c222_1, P_c\bar{4}2_1c, P_I2_13)(\tau_2, \tau_4, \tau_3, \tau_5) \end{array} \right.$	6	L ₁₀	I, II, III	2, 4, 8



a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	
9-86	F43'c	Γ	F43c(τ ₁), F4'3c'(τ ₂)	1	C ₁	I	1	
			(I4c2, I4'c'2)(τ ₃)	2	C _{6v}	I, II	1, 1	
			(I4'c'2', R3c)(τ ₄)	3	O _h	I, II	1, 1	
		X	(P _I c2 ₁ , C _A 222 ₁ , R3c, R3c', P2 ₁ 3, Cc')(τ ₁)	6	L ₇	I, II, III, IV, V, VI	2, 2, 4, 4, 4, 4	
(P _I 4c2, P43n)(τ ₂ , τ ₅), (P _I 4b2, P4'3n')(τ ₃ , τ ₄)	3		O _h	I, II	2, 4			
0-90	I43'd	Γ	I43d(τ ₁), I4'3d'(τ ₂)	1	C ₁	I	1	
			(I42d, I4'2d')(τ ₃)	2	C _{6v}	I, II	1, 1	
			(I4'2'd, R3c)(τ ₄)	3	O _h	I, II	1, 1	
		H	P _I 2 ₁ 3(τ ₄ , τ ₅)	2	C ₄	I	2	
			P _I 2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ (τ ₃ , τ ₃)	4	21.1	I	2	
P	(I _C 4, C _a 2)(τ ₂ , τ ₂ , τ ₃ , τ ₃)	4	98.1	I, II	4, 4			
1-93	Pm3'm	Γ	Pm3m(τ ₁), Pm3m'(τ ₂), Pm'3m'(τ ₆), Pm'3m(τ ₇)	1	C ₁	I	1	
			(P4/mmm, P4'/mmm')(τ ₃), (P4/m'm'm', P4'/m'm'm)(τ ₈)	2	C _{6v}	I, II	1, 1	
			(P4'/mm'm, R3m)(τ ₄), (P4'/m'mm', R3'm')(τ ₉),	3	O _h	I, II	1, 1	
			(P4/m'mm, R3'm)(τ ₁₀)					
		R	F ₈ m3m(τ ₁ , τ ₇), F ₈ m3c(τ ₂ , τ ₆)	1	C ₁	I	2	
			(I _C 4/mmm, I _C 4/mcm)(τ ₃ , τ ₈)	2	C _{6v}	I, II	2, 2	
			(I _C 4/mmm, R _I 3m)(τ ₄ , τ ₉), (I _C 4/mcm, R _I 3c)(τ ₅ , τ ₁₀)	3	O _h	I, II	2, 2	
		X	(P _C 4/mmm, P _I m3m)(τ ₁), (P _C 4/mcc, P _I m3n)(τ ₂),	3	O _h	I, II	2, 8	
			(P _C 4/mmc, P _I m3m)(τ ₃), (P _C 4/mcm, P _I m3n)(τ ₄),					
			(P _C 4/mcc, P _I n3n)(τ ₆), (P _C 4/mmm, P _I n3m)(τ ₇),					
			(P _C 4/mcm, P _I n3n)(τ ₈), (P _C 4/mmc, P _I n3m)(τ ₉)					
		M	(C _C mcm, P _a mna, R _I 3c, R _I 3m, P _I a3, P _C 4/nmm, P _C 4/mbm)(τ ₅),	6	L ₇	I, II, III, IV, V, VI, VII	2, 2, 8, 8	
(C _C mcm, P _a mna, R _I 3m, R _I 3c, P _I a3, P _C 4/mbm, P _C 4/nmm)(τ ₁₀)	8, 4, 4							
(P _C 4/mmm, Im3m)(τ ₁ , τ ₄), (P _C 4/mbm, Im3m')(τ ₂ , τ ₃),	3		O _h				I, II	2, 4
(P _C 4/nbm, Im'3m')(τ ₆ , τ ₉), (P _C 4/nmm, Im'3m)(τ ₇ , τ ₈)								
M	(C _a mna, P _B mna, Ia3, Ia3, R3m', I ₄ /mmm, I ₄ /mmm)(τ ₅)	6	L ₇	I, II, III, IV, V, VI, VII	2, 2, 4, 4, 4, 4			
	(C _a mmm, P _B mna, Ia'3, Ia'3, R3'm, I ₄ /mmm)(τ ₁₀)	6	L ₄	I, II, III, IV, V, VI	2, 2, 4, 4, 4, 4			
2-99	Pn3'n	Γ	Pn3n(τ ₁), Pn3n'(τ ₂), Pn'3n'(τ ₆), Pn'3n(τ ₇)	1	C ₁	I	1	
			(P4/nnc, P4'/nnc')(τ ₃), (P4/n'n'c', P4'/n'n'c)(τ ₈),	2	C _{6v}	I, II	1, 1	
			(P4'/nn'c, R3c)(τ ₄), (P4'/n'nc', R3'c')(τ ₉),	3	O _h	I, II	1, 1	
		(P4/n'nc, R3'c)(τ ₁₀)						
		R	(F _a d3, F _a 432)(τ ₂)	2	C _{4v}	I, II	2, 2	
			(F _a ddd, I _C 422)(τ ₃ , τ ₃ , τ ₄ , τ ₄)	4	48.1	I, II	2, 2	
M	(P _C 422, P _A ban, I432, I432, R3'c', I ₄ 2d)(τ ₁)	6	L ₄	I, II, III, IV, V, VI	2, 2, 4, 4, 4, 4			
	(P _C 42 ₁ 2, P _B bcn, I4'32', I4'32', R3'c, I ₄ 2d)(τ ₂)							



(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)		
05	Pm3'n	Γ $\left\{ \begin{array}{l} Pm3n(\tau_1), Pm3n'(\tau_2), Pm'3n'(\tau_6), Pm'3n(\tau_7) \\ (P4_2/mmc, P4_2'/mmc)(\tau_3), (P4_2/m'm'm', P4_2'/m'm'm')(\tau_8) \\ (P4_2'/mm'm, R\bar{3}c)(\tau_4), (P4_2'/m'mc', R\bar{3}'c')(\tau_9), \\ (P4_2'/m'mc, R\bar{3}'c)(\tau_{10}) \end{array} \right.$	1	C_1	I	1		
			2	C_{6v}	I, II	1, 1		
			3	O_h	I, II	1, 1		
			4	C_{4v}	I, II	2, 2		
		R	$\left\{ \begin{array}{l} (F_8m3, F_84_132)(\tau_2) \\ (F_8mmm, I_44_122)(\tau_3 + \bar{\tau}_3, \tau_4 + \bar{\tau}_4) \end{array} \right.$	2	C_{4v}	I, II	2, 2	
				4	48.1	I, II	2, 2	
		X	$(P_8mme, P_84_1322, P_84_21c, P_8a3, P_84_132, P_84_332)(\tau_3, \tau_4)$	6	L_9	$\left\{ \begin{array}{l} I, II, III, \\ IV, V, VI \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 2, 2, 4, \\ 8, 8, 8 \end{array} \right.$	
		M	$\left\{ \begin{array}{l} (P_84_2'/nmc, Ia3d)(\tau_2, \tau_5), (P_84_2'/nmc, Ia3d')(\tau_3, \tau_4), \\ (P_84_2'/mnm, Ia'3d)(\tau_7, \tau_{10}), (P_84_2'/mcm, Ia'3d')(\tau_8, \tau_9) \\ (C_8mmm, P_8mna, Im3, Im3, R\bar{3}c, I_41/amd, I_41/amd)(\tau_1) \\ (C_8mma, P_8nna, Im'3, Im'3, R\bar{3}'c', I_41/acd, I_41/acd)(\tau_6) \end{array} \right.$	3	O_h	I, II	2, 4	
				6	L_7	$\left\{ \begin{array}{l} I, II, III, IV, \\ V, VI, VII \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 2, 2, 4, 4, \\ 4, 4, 4 \end{array} \right.$	
11	Pn3'm	Γ $\left\{ \begin{array}{l} Pn3m(\tau_1), Pn3m'(\tau_2), Pn'3m'(\tau_6), Pn'3m(\tau_7) \\ (P4_2'/nmm, P4_2'/nmm')(\tau_3), (P4_2'/n'n'm', P4_2'/n'n'm)(\tau_8) \\ (P4_2'/n'n'm, R\bar{3}m)(\tau_4), (P4_2'/n'n'm', R\bar{3}'m')(\tau_9), \\ (P4_2'/n'n'm, R\bar{3}'m)(\tau_{10}) \end{array} \right.$	1	C_1	I	1		
			2	C_{6v}	I, II	1, 1		
			3	O_h	I, II	1, 1		
			1	C_1	I	2		
		R	$\left\{ \begin{array}{l} F_8d3m(\tau_1, \tau_6), F_8d3c(\tau_2, \tau_7) \\ (I_44_1/amd, I_44_1/acd)(\tau_3, \tau_8) \end{array} \right.$	2	C_{6v}	I, II	2, 2	
		X	$(C_8mca, P_84_1322, P_84_21m, R_8\bar{3}c, P_84_132, P_84_332)(\tau_3, \tau_4)$	6	L_4	$\left\{ \begin{array}{l} I, II, III, \\ IV, V, VI \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 2, 2, 4, \\ 8, 8, 8 \end{array} \right.$	
		M	$\left\{ \begin{array}{l} (P_84_22_12, P_8bcm, I_4132, I_4132, R\bar{3}'m, I_4m2)(\tau_3) \\ (P_84_222, P_8ccm, I_4132', I_4132', R\bar{3}'m', I_4m2)(\tau_4) \end{array} \right.$	6	L_4	$\left\{ \begin{array}{l} I, II, III, \\ IV, V, VI \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 2, 2, 4, \\ 4, 4, 4 \end{array} \right.$	
		17	Fm3'm	Γ $\left\{ \begin{array}{l} Fm3m(\tau_1), Fm3m'(\tau_2), Fm'3m'(\tau_6), Fm'3m(\tau_7) \\ (I_4'/mmm, I_4'/mmm')(\tau_3), (I_4'/m'm'm', I_4'/m'm'm)(\tau_8) \\ (I_4'/mm'm, R\bar{3}m)(\tau_4), (I_4'/m'mm', R\bar{3}'m')(\tau_9), \\ (I_4'/m'mm, R\bar{3}'m)(\tau_{10}) \end{array} \right.$	1	C_1	I	1
					2	C_{6v}	I, II	1, 1
3	O_h				I, II	1, 1		
3	O_h				I, II	2, 4		
X	$\left\{ \begin{array}{l} (P_84_2'/mmc, Pn3m)(\tau_2), (P_84_2'/mmm, Pn3m)(\tau_1), \\ (P_84_2'/mnm, Pn3m')(\tau_3), (P_84_2'/mmm, Pn3m)(\tau_4), \\ (P_84_2'/nnc, Pm'3m')(\tau_6), (P_84_2'/nmm, Pn'3m')(\tau_7), \\ (P_84_2'/nmc, Pm'3m)(\tau_8), (P_84_2'/nmm, Pn'3m')(\tau_9) \\ (C_8mca, P_8nmm, Pa3, Pa3, R\bar{3}'m', P_84_2'/mnm, P_84_2'/nmm)(\tau_5) \\ (C_8mcm, P_8mmm, Pa3, Pa3, R\bar{3}'m', P_84_2'/nmm, P_84_2'/mnm)(\tau_{10}) \end{array} \right.$			6	L_7	$\left\{ \begin{array}{l} I, II, III, IV, \\ V, VI, VII \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 2, 2, 4, 4, \\ 4, 4, 4 \end{array} \right.$	
L	$\left\{ \begin{array}{l} (F_8m3m, R_8\bar{3}m)(\tau_1), (F_8m3c, R_8\bar{3}c)(\tau_2), \\ (F_8d3m, R_8\bar{3}m)(\tau_4), (F_8d3c, R_8\bar{3}c)(\tau_5) \\ (C_82/c, C_82/m, I_44_1/mcm, I_44_1/mmm, C_8mma)(\tau_3) \\ (C_82/m, C_82/c, I_44_1/mmm, I_44_1/mcm, C_8mmm)(\tau_6) \end{array} \right.$			4	109.01	I, II	8, 2	
				8	M_2	$\left\{ \begin{array}{l} I, II, III, \\ IV, V \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 4, 4, 8, \\ 8, 4 \end{array} \right.$	
W	$\left\{ \begin{array}{l} (P_8I_43m, P_8I_43m, I_44_1/mmm, I_44_1/amd, P_84_332)(\tau_1) \\ (P_8I_43m, P_8I_43m, I_44_1/mcm, I_44_1/acd, P_84_332)(\tau_2) \\ (P_8I_43m, P_8I_43m, I_44_1/mcm, I_44_1/acd, P_84_332)(\tau_3) \\ (P_8I_43m, P_8I_43m, I_44_1/mmm, I_44_1/amd, P_84_332)(\tau_4) \end{array} \right.$			6	L_1	$\left\{ \begin{array}{l} I, II, III, \\ IV, V \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 32, 32, 4, \\ 4, 32 \end{array} \right.$	

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
123	Fm3'c	Γ { Fm3c(τ_1), Fm3c'(τ_2), Fm'3c'(τ_6), Fm'3c(τ_7) (I4/mcm, I4'/mcm')(τ_3), (I4/m'c'm', I4'/m'c'm)(τ_8) (I4'/mc'm, R3c)(τ_4), (I4'/m'cm', R3'c')(τ_9), (I4'/m'cm, R3'c)(τ_{10}) X { (P _I 4/mbm, Pm3c')(τ_1), (P _I 4/mcc, Pn3n)(τ_2), (P _I 4 ₂ /mcm, Pm3n)(τ_3), (P _I 4 ₂ /mbc, Pn3n')(τ_4), (P _I 4/ncc, Pm'3n)(τ_6), (P _I 4/nbm, Pn'3n')(τ_7), (P _I 4 ₂ /nbc, Pm'3n')(τ_8), (P _I 4 ₂ /ncm, Pn'3)(τ_9) (C _A mca, P _I bcn, Pa3, Pa3, R3c, P _I 4/mnc, P _I 4 ₂ /nmc)(τ_5) (C _A cca, P _I ben, Pm'3, Pa'3, R3'c, P _I 4 ₂ /nmc, P _I 4/mnc)(τ_{10})	1	C ₁	I	1	
			2	C _{6v}	I, II	1, 1	
			3	O _h	I, II	1 1	
			3	O _h	I, II	2, 4	
			6	L ₇	{ I, II, III, IV V, VI, VII	{ 2, 2, 4, 4 4, 4, 4	
129	Fd3'm		Γ { Fd3m(τ_1), Fd3m'(τ_2), Fd'3m'(τ_6), Fd'3m(τ_7) (I4 ₁ /amd, I4 ₁ '/amd')(τ_3), (I4 ₁ /a'm'd', I4 ₁ '/a'm'd)(τ_8) (I4 ₁ '/am'd, R3m)(τ_4), (I4 ₁ '/a'md', R3'm')(τ_9) (I4 ₁ /a'md, R3'm)(τ_{10}) X { (P _I 4 ₃ 22, P _I nmaP ₃ 32, P4 ₁ 32, R3c', P4 ₂ 1m)(τ_3) (P _I 4 ₃ 2 ₁ 2, P _I mna, P4 ₁ 32', P4 ₃ 32', R3c, P4 ₂ 1m)(τ_4) L { (R _I 3m, F ₅ 43m)(τ_1, τ_4), (R _I 3c, F ₅ 43c)(τ_2, τ_5) (C _a 2/c, C _a 2/m, C _a mca, I _c 4c2, I _c 4m2)(τ_3) (C _a 2/m, C _a 2/c, C _a mcm, I _c 4m2, I _c 4c2)(τ_6)	1	C ₁	I	1
				2	C _{6v}	I, II	1, 1
				3	O _h	I, II	1, 1
				6	L ₄	{ I, II, III, IV, V, VI	{ 2, 2, 4, 4, 4, 4
				4	115.01	I, II	2, 8
		8		M ₁	I, II, III, IV, V	{ 4, 4, 4, 8, 8	
135	Fd3'c	Γ { Fd3c(τ_1), Fd3c'(τ_2), Fd'3c'(τ_6), Fd'3c(τ_7) (I4 ₁ /acd, I4 ₁ '/acd')(τ_3), (I4 ₁ /a'c'd', I4 ₁ '/a'c'd)(τ_8) (I4 ₁ '/ac'd, R3c)(τ_4), (I4 ₁ '/a'cd', R3'c')(τ_9), (I4 ₁ /a'cd, R3'c)(τ_{10}) X { (P _I 4 ₃ 22, P _I bcm, P4 ₃ 32, P4 ₁ 32, R3c', P4 ₂ 1c)(τ_3) (P _I 4 ₃ 2 ₁ 2, P _I bcm, P4 ₁ 32', P4 ₃ 32', R3c, P4 ₂ 1c)(τ_4)		1	C ₁	I	1
				2	C _{6v}	I, II	1, 1
			3	O _h	I, II	1, 1	
			6	L ₄	{ I, II, III, IV, V, VI	{ 2, 2, 4, 4, 4, 4	



	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)
141	Im3'm						
		Γ	$\left\{ \begin{array}{l} \text{Im}3m(\tau_1), \text{Im}3m'(\tau_2), \text{Im}'3m'(\tau_6), \text{Im}'3m(\tau_7) \\ (\text{I}4/\text{mmm}, \text{I}4'/\text{mmm}')(\tau_3), (\text{I}4/\text{m}'\text{m}'\text{m}', \text{I}4'/\text{m}'\text{m}'\text{m}')(\tau_8) \\ (\text{I}4'/\text{mm}'\text{m}, \text{R}\bar{3}m)(\tau_4), (\text{I}4'/\text{m}'\text{mm}', \text{R}\bar{3}'\text{m}')(\tau_9), \\ (\text{I}4/\text{m}'\text{mm}, \text{R}\bar{3}'\text{m}')(\tau_{10}) \end{array} \right.$	1	C_1	I	1
				2	C_{6v}	I, II	1, 1
				3	O_h	I, II	1, 1
		H	$\left\{ \begin{array}{l} P_{\text{I}m}3m(\tau_1), P_{\text{I}m}3n(\tau_2), P_{\text{I}n}3n(\tau_6), P_{\text{I}n}3m(\tau_7) \\ (P_{\text{I}4}/\text{mmm}, P_{\text{I}4_2}/\text{mmc})(\tau_3), (P_{\text{I}4}/\text{nnc}, P_{\text{I}4_2}/\text{nnm})(\tau_8) \\ (F_s m3m, F_s d3m)(\tau_1), (F_s m3c, F_s d3c)(\tau_2) \end{array} \right.$	1	C_1	I	2
				2	C_{6v}	I, II	2, 2
		P	$\left\{ \begin{array}{l} (\text{I}_c 422, \text{I}_c 4_1 22, \text{I}_c 4/\text{mmm}, \text{I}_c 4/\text{mmm}, \text{I}_c 4_1/\text{amd}, \text{I}_c 4_1/\text{amd})(\tau_3 + \bar{\tau}_3) \end{array} \right.$	2	C_{4v}	I, II	4, 4
				4	74.1	I, II, III, IV, V, VI	4, 4, 4, 4, 4, 4
		N	$\left\{ \begin{array}{l} (C_A \text{mmm}, P_{C4}/\text{mmm}, R_{\text{I}\bar{3}}m, R\bar{3}m, \text{Im}3m, \text{I}_c 4/\text{mmm})(\tau_1) \\ (C_A \text{ccm}, P_{C4}/\text{nbm}, R_{\text{I}\bar{3}}c, R\bar{3}m', \text{Im}3m', \text{I}_c 4/\text{mcm})(\tau_2) \\ (C_A \text{mca}, P_{C4_2}/\text{ncc}, R_{\text{I}\bar{3}}m, R\bar{3}m', \text{I}a3d', \text{I}_c 4_1/\text{amd})(\tau_3) \\ (C_A \text{mca}, P_{C4}/\text{mbc}, R_{\text{I}\bar{3}}c, R\bar{3}m', \text{Im}3m', \text{I}_c 4/\text{mcm})(\tau_4) \\ (C_A \text{cca}, P_{C4}/\text{nbm}, R_{\text{I}\bar{3}}c, R\bar{3}'\text{m}', \text{Im}'3m', \text{I}_c 4/\text{mmm})(\tau_5) \\ (C_A \text{mma}, P_{C4}/\text{mmm}, R_{\text{I}\bar{3}}m, R\bar{3}'\text{m}', \text{Im}'3m, \text{I}_c 4/\text{mcm})(\tau_6) \\ (C_A \text{mcm}, P_{C4}/\text{mmm}, R_{\text{I}\bar{3}}c, R\bar{3}'\text{m}', \text{Im}'3m', \text{I}_c 4/\text{mcm})(\tau_7) \\ (C_A \text{mcm}, P_{C4}/\text{nmm}, R_{\text{I}\bar{3}}m, R\bar{3}'\text{m}', \text{Im}'3m, \text{I}_c 4/\text{mmm})(\tau_8) \end{array} \right.$	6	L_4	I, II, III, IV, V, VI	2, 4, 8, 8, 8, 8
146	Ia3'd						
		Γ	$\left\{ \begin{array}{l} \text{I}a3d(\tau_1), \text{I}a3d'(\tau_2), \text{I}a'3d'(\tau_6), \text{I}a'3d(\tau_7) \\ (\text{I}4_1/\text{acd}, \text{I}4_1'/\text{acd}')(\tau_3), (\text{I}4_1/\text{a}'\text{c}'\text{d}', \text{I}4_1'/\text{a}'\text{c}'\text{d}')(\tau_8) \\ (\text{I}4_1'/\text{ac}'\text{d}, \text{R}\bar{3}c)(\tau_4), (\text{I}4_1'/\text{a}'\text{cd}', \text{R}\bar{3}'\text{c}')(\tau_9), \\ (\text{I}4_1/\text{a}'\text{cd}, \text{R}\bar{3}'\text{c}')(\tau_{10}) \end{array} \right.$	1	C_1	I	1
				2	C_{6v}	I, II	1, 1
				3	O_h	I, II	1, 1
		H	$\left\{ \begin{array}{l} (P_{\text{I}a}3, P_{\text{I}4}32)(\tau_2) \\ (P_{\text{I}bca}, P_{\text{I}4_1,3}22)(\tau_3 + \bar{\tau}_3, \tau_4 + \bar{\tau}_4) \end{array} \right.$	2	C_{4v}	I, II	2, 2
				4	48.1	I, II	2, 2



REFERENCES

1. N.V. Belov, N.N. Neronova et T.S. Smirnova, *Sov. Phys. Crystallo.* 2, 311 (1957)
2. J. Zak, A. Casher, H. Glück et Y. Gur, *The Irreducible Representations of Space Groups*, Benjamin, New-York, 1969
3. V. Dvorak, *Phys. Stat. Sol.* 45 (b), 147 (1971)
4. P. Tolédano et J.C. Tolédano, *Phys. Rev.* B14, 7, 3097 (1976)
5. P. Tolédano et J.C. Tolédano, *Phys. Rev.* B16, 1, 386 (1977)
6. J.C. Tolédano et P. Tolédano, *Phys. Rev.* B21, 3, 1139 (1980)
7. P. Tolédano et J.C. Tolédano, *Phys. Rev.* B25, 3, 1946 (1982)
8. O.V. Kovalev, *Sov. Phys. Solid State*, 5, n°11, 2315 (1964)
9. J.O. Dimmock et R.G. Wheeler, *Phys. Rev.* 127, n°2, 391 (1962)
10. Yu. I. Sirotin, *Sov. Phys. Crystallo.* 8, n°2, 195 (1965)
11. O.V. Kovalev, *Sov. Phys. Crystallo.* 9, 6, 665 (1965)
12. M. Hédoux, *Mémoire de D.E.A., Université de Lille* 1 (1981)

C H A P I T R E 6

COMPARAISON AVEC LES DONNEES EXPERIMENTALES

I. Remarques préliminaires.

Dans ce chapitre nous comparons nos résultats théoriques avec les données expérimentales disponibles sur les transitions ferromagnétiques et antiferromagnétiques. Ces données proviennent pour l'essentiel de la table d'Oles et al [1] où sont compilés (jusqu'en 1976) l'ensemble des résultats obtenus sur des substances magnétiques, par diffraction de neutrons. Nous avons complété cette compilation par des données obtenues plus récemment. Soulignons toutefois que nous n'avons pas vérifié d'une façon approfondie les données contenues dans la référence [1], et qu'une analyse plus détaillée des données expérimentales reste à faire.

Lorsque les données expérimentales étaient suffisantes pour permettre une comparaison directe avec nos résultats théoriques, nous les avons reportées dans les tables 6.1 à 6.3. Dans un nombre non négligeable de cas, ces données étaient incomplètes (point de la zone de Brillouin non indiqué ou donnée du groupe magnétique d'un seul sous réseau) ou contradictoires (indication d'une multiplication de la maille élémentaire pour une CI associée au centre de la zone de Brillouin, indication d'un réseau antiferromagnétique pour une transition recensée comme ferromagnétique, arrangement non colinéaire de spins pour des transitions antiferromagnétiques, etc...). Dans la mesure où nos résultats théoriques nous permettaient de préciser certaines insuffisances, nous avons reproduit les données expérimentales correspondantes dans les tables 6.4. Notons enfin que dans l'ensemble des tables 6.1 à 6.4, nous nous sommes bornés à examiner les données concernant la symétrie des phases magnétiques, sans rechercher les données concernant l'ordre des transitions, ou des propriétés magnétiques particulières.

II. Commentaires sur les tables

Les tables 6.1 contiennent les matériaux qui subissent une transition para-ferromagnétique ou para-ferrimagnétique, induite par une CI du centre de la zone de Brillouin. Ces matériaux sont donc, en général, des matériaux ferromagnétiques ou ferrimagnétiques propres.

Dans les colonnes (b), (c) et (d) sont indiqués respectivement le groupe paramagnétique, la température de Curie, et le groupe ferromagnétique. Les phases recensées comme ferrimagnétiques sont désignées par un point.

Les CI qui induisent les transitions précédentes sont indiquées dans la colonne (e), suivies de la dimension correspondante du paramètre d'ordre, colonne (f), et de l'image associée (colonne (g)) qui permet, à l'aide des tables du chapitre 4, de connaître l'énergie libre associée à la transition. Ces données découlent de nos résultats théoriques et l'on peut remarquer que l'ensemble des transitions qui figurent dans la table 6.1, subissent un changement de symétrie prédit par la théorie de Landau.

Les tables 6.2 et 6.3 recensent les matériaux qui possèdent une transition antiferromagnétique confirmée. La table 6.2 concerne les antiferromagnétiques associés à une CI du centre de la zone de Brillouin. La table 6.3 donne les antiferromagnétiques impropres associés à une CI correspondant à un point de la surface de la zone de Brillouin. Les colonnes de la table 6.2 ont la même signification que celles de la table 6.1. Les tables 6.3 précisent en outre la multiplication de la maille élémentaire (colonne (h)) et le point de la zone de Brillouin (colonne (i)).

Ici aussi nos résultats théoriques prédisent bien les modifications de symétrie observées expérimentalement. Comme nous l'avons indiqué ci-dessus les tables 6.4 contiennent des matériaux pour lesquels manquaient certaines données (table 6.4.a), ou pour lesquels les données nous sont apparues contradictoires (table 6.4.b). Pour ces deux tables, un examen plus approfondi des données expérimentales est nécessaire.

III. La boracite nickel-iode.

Aucun exemple connu de ferromagnétique impropre n'est indiqué comme tel dans la littérature scientifique. Or nos résultats indiquent qu'une fraction des transitions ferromagnétiques sont associées à un point de la surface de la zone de Brillouin. Pour ces transitions qui s'accompagnent d'une multiplication de la maille magnétique élémentaire, le paramètre d'ordre n'est pas l'intensité d'aimantation, mais une grandeur physique distincte qui se couple non linéairement avec l'intensité d'aimantation. D'autre part, nos résultats indiquent que des transitions ferromagnétiques prédites théoriquement correspondent à une modification de symétrie simultanément magnétique et structurale. Ceci nous a conduit à considérer plus en détail le cas de la Boracite nickel-iode qui est un exemple connu de transition où l'ordre magnétique apparaît à la même température que le changement structural [2]. La transition à 64°K dans ce matériau est induite par une coreprésentation six-dimensionnelle au point X de la zone de Brillouin cubique F. Le changement de symétrie para-ferromagnétique est $F\bar{4}3c1' \rightarrow Cc'$ [2] ($V \times 4$). La phase basse température est indiquée comme ferromagnétique faible [3], ce qui indique bien que l'intensité d'aimantation est une grandeur spontanée secondaire qui n'est pas déterminante pour expliquer le mécanisme de la transition. De plus la représentation à six dimensions τ_1 ne satisfait pas le critère de Landau, alors que la coreprésentation associée satisfait cette condition, ceci est en accord avec le caractère discontinu du déplacement atomique observé à la transition, et le caractère au contraire continu observé pour l'alignement des spins [2,4].

TABLE 6.1

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f) (g)
CoFe ₂ Se ₄	C2/m1'	125	C2'/m'	τ ₂	1 C ₁
● Fe ₃ Se ₄	C2/m1'	320	C2'/m'	τ ₂	1 C ₁
● Fe ₂ VSe ₄	C2/m1'	155	C2'/m'	τ ₂	1 C ₁
● HoAl	Pbcm1'	26	Pb'cm'	τ ₃	1 C ₁
● HoNi	Pnma1'	31	Pnm'a'	τ ₂	1 C ₁
DyNi	Pnma1'	62	Pnm'a'	τ ₂	1 C ₁
ErNi	Pnma1'	10	Pn'm'a'	τ ₄	1 C ₁
TmNi	Pnma1'	7	Pn'm'a'	τ ₄	1 C ₁
MnP	Pnma1'	291,5	Pn'ma'	τ ₃	1 C ₁
TbGa	Cmcm1'	158	Cm'c'm	τ ₄	1 C ₁
Co ₃ V ₂ O ₈	Cmca1'	10	Cmc'a'	τ ₂	1 C ₁
● CuCr ₂ O ₄	I4̄2d1'	133	Fd'd2'	τ ₅	2 C _{4v}
● Mn ₂ Sb	P4/nmm1'	550	P4/nm'm'	τ ₂	1 C ₁
MnAl	P4/nmm1'	518	P4/nm'm'	τ ₂	1 C ₁
UAsS	P4/nmm1'	125	P4/nm'm'	τ ₂	1 C ₁
UAsTe	P4/nmm1'	66	P4/nm'm'	τ ₂	1 C ₁
UPSe	P4/nmm1'	110	P4/nm'm'	τ ₂	1 C ₁
UPTe	P4/nmm1'	85	P4/nm'm'	τ ₂	1 C ₁
NiMnO ₃	R3̄1'	435	P1̄	τ ₂ +τ ₃	2 C ₆
Cr ₂ Te ₃	P3̄1c1'	302	P3̄1c'	τ ₂	1 C ₁
● Cr ₅ S ₆	P3̄1c1'	305	C2/c1'	τ ₃	2 C _{6v}
NdCo ₃	R3̄m1'	395	R3̄m'	τ ₂	1 C ₁
PrCo ₃	R3̄m1'	349	R3̄m'	τ ₂	1 C ₁
PrNi ₃	R3̄m1'	20	R3̄m'	τ ₂	1 C ₁
TmNi ₃	R3̄m1'	43	R3̄m'	τ ₂	1 C ₁
Tb ₂ C	R3̄m1'	266	Cm'	τ ₃	2 C _{6v}
● ErCo ₃	R3̄m1'	401	R3̄m'	τ ₂	1 C ₁
● HoCo ₃	R3̄m1'	418	R3̄m'	τ ₂	1 C ₁
CrBr ₃	R3̄c1'	35	R3̄c'	τ ₂	1 C ₁
CeCo ₅	P6/mmm1'	673	P6/mm'm'	τ ₂	1 C ₁
NdCo ₅	P6/mmm1'	913	P6/mm'm'	τ ₂	1 C ₁
Ni ₅ Er	P6/mmm1'	13	P6/mm'm'	τ ₂	1 C ₁
YCo ₅	P6/mmm1'	978	P6/mm'm'	τ ₂	1 C ₁
TbNi ₅	P6/mmm1'	27	Cmm'm'	τ ₅	2 C _{6v}
● HoCo ₅	P6/mmm1'	1000	P6/mm'm'	τ ₂	1 C ₁
● TbCo ₅	P6/mmm1'	980	P6/mm'm'	τ ₂	1 C ₁



TABLE 6.1 (suite)

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)(g)
Mn_5GaO_3	$P6_3/mcm1'$	304	$P6_3/mc'm'$	T_2	1 C_1
Fe_5Si_3	$P6_3/mcm1'$	376	$P6_3/mc'm'$	T_2	1 C_1
BIMn	$P6_3/mmc1'$	623	$P6_3/mm'c'$	T_2	1 C_1
$\alpha-Co$	$P6_3/mmc1'$	1383	$P6_3/mm'c'$	T_2	1 C_1
$CsNiF_3$	$P6_3/mmc1'$	80	$P6_3/mm'c'$	T_2	1 C_1
$ErMn_2$	$P6_3/mmc1'$	25	$P6_3/mm'c'$	T_2	1 C_1
Gd	$P6_3/mmc1'$	290	$P6_3/mm'c'$	T_2	1 C_1
U_3P_4	$I\bar{4}3d1'$	144	$R3c'$	T_5	3 O_h
• Ni_3Mn	$Pm3'm$	610	$P4/mm'm'$	T_5	3 O_h
Fe_4N	$Pm3'm$	761	$P4/mm'm'$	T_5	3 O_h
Ba_2NiUO_6	$Fm3'm$	20	$I4/mm'm'$	T_5	3 O_h
Ni	$Fm3'm$	633	$I4/mm'm'$	T_5	3 O_h
Us	$Fm3'm$	180	$R\bar{3}m'$	T_5	3 O_h
$ErAl_2$	$Fd3'm$	24	$I4_1/am'd'$	T_5	3 O_h
• $HoFe_2$	$Fd3'm$	610	$I4_1/am'd'$	T_5	3 O_h
• MnV_2O_4	$Fd3'm$	52	$I4_1/am'd'$	T_5	3 O_h
$NdAl_2$	$Fd3'm$	76	$I4_1/am'd'$	T_5	3 O_h
$TbNi_2$	$Fd3'm$	45	$R\bar{3}m'$	T_5	3 O_h
• $Dy_3Fe_5O_{12}$	$Ia3'd$	551	$R\bar{3}c'$	T_5	3 O_h
• $Tm_3Fe_5O_{12}$	$Ia3'd$	549	$R\bar{3}c'$	T_5	3 O_h
• $Yb_3Fe_5O_{12}$	$Ia3'd$	548	$R\bar{3}c'$	T_5	3 O_h
• $Y_3Fe_5O_{12}$	$Ia3'd$	553	$R\bar{3}c'$	T_5	3 O_h



TABLE 6.2

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f) (g)
DyOOH	P2 ₁ /m1'	7,2	P2 ₁ /m'	τ ₃	1 C ₁
ErOOH	P2 ₁ /m1'	?	P2 ₁ '/m'	τ ₄	1 C ₁
LiCuCl ₃ ·2H ₂ O	P2 ₁ /c1'	6,7	P2 ₁ '/c	τ ₄	1 C ₁
CrTiNdO ₅	Pbam1'	13	Pbam'	τ ₈	1 C ₁
CrUO ₄	Pbcn1'	?	Pbc'n	τ ₇	1 C ₁
GeMnO ₃	Pbca1'	16	Pb'ca	τ ₆ , τ ₇ , τ ₈	1 C ₁
HoCoO ₃	Pnma1'	2,4	Pn'm'a'	τ ₅	1 C ₁
LaErO ₃	Pnma1'	2,4	Pnma	τ ₁	1 C ₁
NaCoF ₃	Pnma1'	78	Pnma	τ ₁	1 C ₁
TbAlO ₃	Pnma1'	3,8	Pn'm'a'	τ ₅	1 C ₁
TbCoO ₃	Pnma1'	3,3	Pnma	τ ₁	1 C ₁
Co ₂ SiO ₄	Pnma1'	49	Pnma	τ ₁	1 C ₁
α-FeOOH	Pnma1'	403	Pnma'	τ ₈	1 C ₁
Fe ₂ SiO ₄	Pnma1'	65	Pnma	τ ₁	1 C ₁
KFeCl ₃	Pnma1'	15	Pnma	τ ₁	1 C ₁
LiCoPO ₄	Pnma1'	23	Pnma'	τ ₈	1 C ₁
LiMnPO ₄	Pnma1'	34,6	Pn'm'a'	τ ₅	1 C ₁
LiNiPO ₄	Pnma1'	23	Pnm'a	τ ₇	1 C ₁
Mn ₂ GeS ₄	Pnma1'	?	Pnma	τ ₁	1 C ₁
β-CoSO ₄	Pnma1'	12	Pnma	τ ₁	1 C ₁
CoSeO ₄	Pnma1'	30	Pnma	τ ₁	1 C ₁
CuSO ₄	Pnma1'	36,6	Pnma	τ ₁	1 C ₁
DyAlO ₃	Pnma1'	3,5	Pn'm'a'	τ ₅	1 C ₁
DyCoO ₃	Pnma1'	3,6	Pn'm'a'	τ ₅	1 C ₁
ErVO ₃	Pnma1'	20	Pnma	τ ₁	1 C ₁
GdCoO ₃	Pnma1'	2,9	Pn'm'a'	τ ₅	1 C ₁
GdFeO ₃	Pnma1'	657	Pnma	τ ₁	1 C ₁
NiCrO ₄	Cmcm1'	23	Cmcm	τ ₁	1 C ₁
C ₂ (Zn) ₂	Imma1'	7,5	Im'ma	τ ₆ , τ ₇	1 C ₁
CuFeS ₂	I42d1'	815	I42d	τ ₁	1 C ₁
UBi ₂	P4/nmm1'	183	P4/n'm'm'	τ ₆	1 C ₁
UOTe	P4/nmm1'	157	P4/n'm'm'	τ ₆	1 C ₁
CoF ₂	P4 ₂ /mnm1'	37	P4 ₂ '/mnm'	τ ₃	1 C ₁
FeF ₂	P4 ₂ /mnm1'	78	P4 ₂ '/mnm'	τ ₃	1 C ₁
FeOF	P4 ₂ /mnm1'	315	P4 ₂ '/mnm'	τ ₃	1 C ₁



TABLE 6.2 (suite)

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f) (g)
Fe_2TeO_6	$P4_2/mnm1'$	218	$P4_2/m'n'm'$	τ_6	1 C_1
MnF_2	$P4_2/mnm1'$	67,3	$P4_2'/mnm'$	τ_3	1 C_1
CoCs_3Cl_5	$I4/mcm1'$	0,523	$I4'/m'cm'$	τ_9	1 C_1
DyPO_4	$I4_1/amd1'$	3,4	$I4_1'/a'm'd$	τ_8	1 C_1
GdVO_4 (a)	$I4_1/amd1'$	2,4	$I4_1'/a'm'd$	τ_8	1 C_1
HoPO_4 (a)	$I4_1/amd1'$	1,4	$I4_1'/a'm'd$	τ_8	1 C_1
TbPO_4 (a)	$I4_1/amd1'$	2,2	$I4_1'/a'm'd$	τ_8	1 C_1
$\text{Nb}_2\text{Co}_4\text{O}_9$	$R\bar{3}c1'$	30	$P\bar{3}'c'1$	τ_5	1 C_1
$\text{Nb}_2\text{Mn}_4\text{O}_2$	$R\bar{3}c1'$	125	$P\bar{3}'c'1$	τ_5	1 C_1
CoF_3	$R\bar{3}c1'$	460	$R\bar{3}c$	τ_1	1 C_1
Cr_2O_3	$R\bar{3}c1'$	306	$R\bar{3}'c'$	τ_5	1 C_1
FeCO_3	$R\bar{3}c1'$	20	$R\bar{3}c$	τ_1	1 C_1
$\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$	$R\bar{3}c1'$	956	$R\bar{3}c$	τ_1	1 C_1
$\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{Al}$	$R\bar{3}c1'$	956	$R\bar{3}c$	τ_1	1 C_1
$\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{Ga}$	$R\bar{3}c1'$	956	$R\bar{3}c$	τ_1	1 C_1
$\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{Tl}$	$R\bar{3}c1'$	956	$R\bar{3}c$	τ_1	1 C_1
HoMn_3	$P6_3cm1'$	76	$P6_3cm$	τ_1	1 C_1
FeS	$P\bar{6}2c1'$	599	$P\bar{6}'2'c$	τ_5	1 C_1
CrNb_4S_8	$P6_3/mmc1'$?	$P6_3'/m'm'c$	τ_4	1 C_1
CrSb	$P6_3/mmc1'$	720	$P6_3'/m'm'c$	τ_4	1 C_1
NiS	$P6_3/mmc1'$	265	$P6_3'/m'm'c$	τ_4	1 C_1
Er_2O_3	$Ia3'$	4	$Ia3$	τ_1	1 C_1
Mn_3GaN	$Pm3'm$	298	$R\bar{3}m$	τ_4	3 O_h
Co_3O_4	$Fd3'm$	33	$I4_1'/a'm'd$	τ_8	2 C_{6v}



TABLE 6.3

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)(g)	(h)	(i)
$\text{CoCl}_2 \cdot 6(\text{H}_2\text{O})$	$C2/m1'$	2.25	$C_c 2/c$	τ_2, τ_3	1 C_1	2	$Y(00\frac{1}{2})$
$\text{NiCl}_2 \cdot 6(\text{H}_2\text{O})$	$C2/m1'$	5.34	$C_c 2/c$	τ_2, τ_3	1 C_1	2	$Y(00\frac{1}{2})$
CoWO_4	$P2/c1'$	55	$P_a 2/c$	$\tau_1 + \tau_4$	1 C_1	2	$A(\frac{1}{2}00)$
FeNbO_4	$P2/c1'$?	$P_a 2/c$	$\tau_1 + \tau_4$	1 C_1	2	$A(\frac{1}{2}00)$
FeWO_4	$P2/c1'$	75.9	$P_a 2/c$	$\tau_1 + \tau_4$	1 C_1	2	$A(\frac{1}{2}00)$
NiWO_4	$P2/c1'$	67	$P_a 2/c$	$\tau_1 + \tau_4$	1 C_1	2	$A(\frac{1}{2}00)$
RbFeF_4	$Pca2_1'$?	$P_b na2_1$	τ_3, τ_4	1 C_1	2	$Y(0\frac{1}{2}0)$
$\text{CuCl}_2 \cdot 2(\text{D}_2\text{O})$	$Pmna1'$?	$P_c bcn$	τ_4, τ_6	1 C_1	2	$Y(0\frac{1}{2}0)$
$\text{CuCl}_2 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$	$Pmna1'$	4.35	$P_c bcn$	τ_4, τ_6	1 C_1	2	$Y(0\frac{1}{2}0)$
CrSb_2	$Pnmm1'$	273	$P_a 2_1/c$	τ_1, τ_2	2 C_{4v}	2	$T(0\frac{11}{22}), U(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$
CaMn_2O_4	$Pbcm1'$	225	$P_a bcm$	τ_1, τ_6	1 C_1	2	$X(\frac{1}{2}00)$
NdAl	$Pbcm1'$	29	$P_a bca$	τ_3, τ_8	1 C_1	2	$X(\frac{1}{2}00)$
TbAl	$Pbcm1'$	72	$P_a bca$	τ_3, τ_8	1 C_1	2	$X(\frac{1}{2}00)$
TmAl	$Pbcm1'$	11	$P_b bcn$	τ_2, τ_5	1 C_1	2	$X(\frac{1}{2}00)$
CoUO_4	$Imma1'$	12	$C_c 2/m$	τ_1, τ_4	2 C_{4v}	2	$T(\frac{1}{2}0-\frac{1}{2})$
MnPt	$P4/mmm1'$	970	$P_B mna$	τ_5	2 C_{4v}	2	$M(\frac{11}{22}0)$
UAs_2	$P4/mmm1'$	283	$P_c 4/ncc$	τ_2, τ_6	1 C_1	2	$Z(00\frac{1}{2})$
UOS	$P4/mmm1'$	55	$P_c 4/ncc$	τ_2, τ_6	1 C_1	2	$Z(00\frac{1}{2})$
UOSe	$P4/mmm1'$	72	$P_c 4/ncc$	τ_2, τ_6	1 C_1	2	$Z(00\frac{1}{2})$
UP_2	$P4/mmm1'$	203	$P_c 4/ncc$	τ_2, τ_6	1 C_1	2	$Z(00\frac{1}{2})$
USb_2	$P4/mmm1'$	206	$P_c 4/ncc$	τ_2, τ_6	1 C_1	2	$Z(00\frac{1}{2})$
Cs_2MnCl_4	$I4/mmm1'$	52	$C_A mca$	} τ_3, τ_4 τ_5	2 C_{4v}	2	$X(\frac{11}{22}0)$
K_2CoF_4	$I4/mmm1'$	107	$C_A mca$		2 C_{4v}	2	$M(\frac{111}{222}), Z(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}-\frac{1}{2})$
K_2MnF_4	$I4/mmm1'$	45	$C_A mca$				
K_2NiF_4	$I4/mmm1'$	97.23	$C_A mca$				
Rb_2MnCl_4	$I4/mmm1'$	55	$C_A mca$				
Rb_2MnF_4	$I4/mmm1'$	38.4	$C_A mca$				
Rb_2FeF_4	$I4/mmm1'$	56.3	$C_A ccm$	τ_2	2 C_{4v}	2	$X(\frac{11}{22}0)$
CoTiO_3	$R\bar{3}1'$	37	$P_s \bar{1}$	$\tau_2 + \tau_3, \tau_5 + \tau_6$	2 C_6	2	$Z(\frac{111}{222})$
FeTiO_3	$R\bar{3}1'$	68	$P_s \bar{1}$	$\tau_2 + \tau_3, \tau_5 + \tau_6$	2 C_6	2	$Z(\frac{111}{222})$
$\text{Dy}_2\text{O}_2\text{Se}$	$P\bar{3}m1'$	8.5	$P_c \bar{3}c1$	τ_2, τ_5	1 C_1	2	$A(00\frac{1}{2})$
FeBr_2	$P\bar{3}m1'$	11	$P_c \bar{3}c1$	τ_2, τ_5	1 C_1	2	$A(00\frac{1}{2})$
Ni(OH)_2	$P\bar{3}m1'$	28	$P_c \bar{3}c1$	τ_2, τ_5	1 C_1	2	$A(00\frac{1}{2})$
$\text{Yb}_2\text{O}_2\text{S}$	$P\bar{3}m1'$	3	$C_c 2/m$	τ_3, τ_6	2 C_{6v}	2	$A(00\frac{1}{2})$
FeCl_2	$R\bar{3}m1'$	23.5	$R_1 \bar{3}c$	τ_2, τ_3	3 O_h	8	$A(\frac{1}{2}00)$



TABLE 6.3 (suite)

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)(g)	(h)	(i)
DyGe ₂	P6/mmm1'	15	C _c mcm	τ ₅ ·τ ₁₁	2 C _{6v}	2	A(00 $\frac{1}{2}$)
FeSn	P6/mmm1'	365	C _c mcm	τ ₅ ·τ ₁₁	2 C _{6v}	2	A(00 $\frac{1}{2}$)
FeGe	P6/mmm1'	412	P _c 6/mcc	τ ₂ ·τ ₇	1 C ₁	2	A(00 $\frac{1}{2}$)
CuMnSb	F43'm	55	R _I 3c	τ ₂	4 109.01	2	L($\frac{111}{222}$)
CaMnO ₃	Pm3'm	123	I _c 4/mcm	} τ ₃ ·τ ₈	2 C _{6v}	2	R($\frac{111}{222}$)
KCoF ₃	Pm3'm	144	I _c 4/mcm		} τ ₅ ·τ ₁₀	3 O _h	2
ErIn ₃	Pm3'm	6	P _c 4/mbm	τ ₂ ·τ ₃	3 O _h	2	M($\frac{11}{22}$ 0)
KFeF ₃	Pm3'm	112	R _I 3c	τ ₅ ·τ ₁₀	3 O _h	2	R($\frac{11}{22}$ 0)
KNiF ₃	Pm3'm	253	I _c 4/mcm	τ ₃ ·τ ₈	2 C _{6v}	2	R($\frac{11}{22}$ 0)
				τ ₅ ·τ ₁₀	3 O _h		
β-MnAu	Pm3'm	513	P _a mma	τ ₅ ·τ ₁₀	6 L ₇	2	X(0 $\frac{1}{2}$ 0)
NdIn ₃	Pm3'm	7	P _c 4/mbm	τ ₂ ·τ ₃	3 O _h	2	M($\frac{11}{22}$ 0)
NdSn ₃	Pm3'm	4.7	P _a mma	τ ₅ ·τ ₁₀	6 L ₇	2	X(0 $\frac{1}{2}$ 0)
PbCrO ₃	Pm3'm	240	I _c 4/mcm	} τ ₃ ·τ ₈	2 C _{6v}	2	R($\frac{111}{222}$)
					} τ ₅ ·τ ₁₀		
RbFeF ₃	Pm3'm	102	I _c 4/mcm			2	R($\frac{111}{222}$)
TbAg	Pm3'm	106	P _c 4/mbm	τ ₂ ·τ ₃	3 O _h	2	M($\frac{11}{22}$ 0)
TbCu	Pm3'm	117	P _c 4/mbm	τ ₂ ·τ ₃	3 O _h	2	M($\frac{11}{22}$ 0)
UPb ₃	Pm3'm	32	P _c 4/mcc	τ ₂ ·τ ₆	3 O _h	2	X(0 $\frac{1}{2}$ 0)
NdSe	Fm3'm	14	R _I 3c	τ ₂ ·τ ₅	4 109.01	} 2	L($\frac{111}{222}$)
NdTe	Fm3'm	13	R _I 3c	τ ₂ ·τ ₅	4 109.01		
TbAs	Fm3'm	10,5	R _I 3c	τ ₂ ·τ ₅	4 109.01		
TbBi	Fm3'm	18	R _I 3c	τ ₂ ·τ ₅	4 109.01		
TbP	Fm3'm	8	R _I 3c	τ ₂ ·τ ₅	4 109.01		
TbSb	Fm3'm	15	R _I 3c	τ ₂ ·τ ₅	4 109.01		
TbSe	Fm3'm	52	R _I 3c	τ ₂ ·τ ₅	4 109.01		



TABLE 6.4.a

(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	(i)
$\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$	$\text{C2/m1}'$	8.8	$\text{C}_c 2/c$	τ_2, τ_3	1	C_1	2	$\text{E}(\frac{1}{2} \frac{11}{22}), \text{Y}(00\frac{1}{2}), \text{C}(\frac{111}{222})$
Au_5Mn_2	$\text{C2/m1}'$	353	$\text{P}_s \bar{1}$	τ_1, τ_2	2	C_{4v}	2	$\text{F}(\frac{1}{2}00), \text{F}^*(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$
CuF_2	$\text{P2}_1/\text{c1}'$	69	$\text{P}_a 2_1/\text{c}$	$\tau_1 + \tau_4$	1	C_1	2	$\text{A}(\frac{1}{2}00)$
$\text{Mn}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	$\text{P2}_1/\text{c1}'$	318	$\text{P}_a 2_1/\text{c}$	$\tau_1 + \tau_4$	1	C_1	2	$\text{A}(\frac{1}{2}00)$
$\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	$\text{P2}_1/\text{c1}'$	1.62	$\text{P2}_1/\text{c}$	τ_4	1	C_1	1	$\Gamma(000)$
BaCoF_4	$\text{Cmc2}_1'$	69.6	$\text{P}_a 2_1$	τ_1, τ_2	2	C_{4v}	2	$\text{S}(\frac{1}{2}00)$
$\text{CsCoCl}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	$\text{Pcca1}'$	340	$\text{P}_a \text{ccn}$	τ_2, τ_8	1	C_1	2	$\text{Y}(0\frac{1}{2}0)$
CoNb_2O_6	$\text{Pbcn1}'$?	$\text{P}_a 2_1/\text{c}$	τ_1, τ_2	2	C_{4v}	2	$\text{S}(\frac{11}{22}0)$
Fe_2GeS_4	$\text{Pnma1}'$	108	Pnma	τ_1	1	C_1	1	$\Gamma(000)$
FeTa_2O_6	$\text{P4}_2/\text{mnm1}'$	14	$\text{I}_c 4_1/\text{a}$	τ_1, τ_2	4	58.01	4	$\text{R}(0\frac{11}{22})$
ThMn_2Si_2	$\text{I4/mmm1}'$	483	$\text{P}_1 4/\text{ncc}$	τ_6	1	C_1	2	$\text{M}(\frac{111}{222}), \text{Z}(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$
TbAu_2	$\text{I4/mmm1}'$	55	$\text{C}_A \text{mca}$	τ_3	2	C_{4v}	2	$\text{X}(\frac{11}{22}0)$
MnSn_2	$\text{I4/mcm1}'$	325	$\text{C}_A \text{ccm}$	τ_5	2	C_{4v}	2	$\text{X}(\frac{11}{22}0)$
$\text{U}_2\text{N}_2\text{As}$	$\text{P}\bar{3}\text{m1}'$	406	$\text{P}_c \bar{3}\text{c1}$	τ_2, τ_5	1	C_1	2	$\text{A}(00\frac{1}{2})$
$\text{U}_2\text{N}_2\text{P}$	$\text{P}\bar{3}\text{m1}'$?	$\text{P}\bar{3}'\text{m}'1$	τ_5	1	C_1	1	$\Gamma(000)$
$\text{U}_2\text{N}_2\text{S}$	$\text{P}\bar{3}\text{m1}'$	233	$\text{P}\bar{3}'\text{m}'1$	τ_5	1	C_1	1	$\Gamma(000)$
$\text{U}_2\text{N}_2\text{Se}$	$\text{P}\bar{3}\text{m1}'$	245	$\text{P}_c \bar{3}\text{c1}$	τ_2, τ_5	1	C_1	2	$\text{A}(00\frac{1}{2})$
$\text{Ca}_3\text{Fe}_2(\text{GeO}_4)_3$	$\text{Ia}\bar{3}'\text{d}$?	$\text{P}_I 4_1 22$	$\tau_3 + \bar{\tau}_3, \tau_4 + \bar{\tau}_4$	4	48.1	2	$\text{H}(\frac{111}{222})$

TABLE 6.4.b

$\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{D}_2\text{O}$	$\text{C2/m1}'$	17.5	$\text{P}_c 2/\text{m}$	τ_1	1	C_1	2	$\text{A}(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0), \text{Z}(\frac{11}{22}0)$
$\alpha\text{-O}_2$	$\text{C2/m1}'$	23.9	$\text{P}_c 2/\text{m}$	τ_1	1	C_1	2	$\text{A}(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0), \text{Z}(\frac{11}{22}0)$
$\text{CuF}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	$\text{C2/m1}'$	10-26	$\text{P}_A 2_1/\text{c}$	τ_2	1	C_1	2	$\text{A}(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0), \text{Z}(\frac{11}{22}0)$
BaFe_2O_4	$\text{Cmm21}'$	680	$\text{P}_c \text{ma}2$	τ_3	1	C_1	2	$\text{Y}(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$
	ou $\text{Amm21}'$		$\text{P}_A \text{nc}2$	τ_3	1	C_1	2	$\text{Y}(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$
$\alpha\text{-CoSO}_4$	$\text{Cmcm1}'$	12	$\text{P}_c \text{bcn}$	τ_3	1	C_1	2	$\text{Y}(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$
FeSO_4	$\text{Cmcm1}'$	23	$\text{P}_c \text{bcn}$	τ_3	1	C_1	2	$\text{Y}(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$
NiSO_4	$\text{Cmcm1}'$	37	$\text{P}_c \text{bcn}$	τ_3	1	C_1	2	$\text{Y}(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$
NiSeO_4	$\text{Cmcm1}'$	27	$\text{P}_c 2_1/\text{c}$	τ_2, τ_3	2	C_{4v}	2	$\text{S}(\frac{1}{2}00)$
MnUO_4	$\text{Imma1}'$	12	$\text{P}_I \text{nma}$	τ_3, τ_7	1	C_1	2	$\text{X}(\frac{111}{222})$
$\beta\text{-FeOOH}$	$\text{I4/m1}'$	237	$\text{P}_I 4/\text{m}$	τ_1	1	C_1	2	$\text{M}(\frac{111}{222}), \text{Z}(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$
Yb_2O_4	$\text{Ia}\bar{3}'$	2.25	$\text{P}_I \text{bca}$	$\tau_2 + \tau_3, \tau_6 + \tau_7$	2	C_6	2	$\text{H}(\frac{111}{222})$



REFERENCES:

1. A.Oles et al, Magnetic structures determined by neutron diffraction, Warszawa, Krakow (1976)
2. H.Schmid, communication personnelle
3. H.Schmid, On a magnetoelectric classification of materials, dans Magnetoelectric Interaction Phenomena in Crystals, Ed. A.J. Freeman et H.Schmid, Gordon and Breach(1973)
4. J.P.Rivera et H.Schmid, Ferroelectrics, 36, 447(1981)

C O N C L U S I O N

Dans cette thèse, la théorie de Landau des transitions de phases du deuxième ordre a été appliquée de façon systématique aux coreprésentations irréductibles actives des 230 groupes paramagnétiques. Pour chacune de ces coreprésentations, la forme de l'énergie libre de Landau et les changements de symétrie conduisant à des phases ferromagnétiques et antiferromagnétiques stables ont été établis. Bien qu'un certain nombre de coreprésentations examinées dans ce travail soient déduites de représentations irréductibles inactives (ne vérifiant pas le critère de Landau), la structure générale des résultats obtenus (dimensions des paramètres d'ordre, nombre d'images et énergies libres distinctes, ordre des sous-groupes, ...) diffère peu de celle correspondant à un travail similaire consacré aux transitions purement structurales [1]. En particulier, il apparaît que les transitions magnétiques ont toujours un paramètre d'ordre de dimension $n \leq 8$, les cas les plus fréquents étant $n = 1$ et 2 .

Bien que la Physionomie générale des changements de symétrie magnétiques prédits par la théorie de Landau, corresponde dans l'ensemble à la situation suggérée par les données expérimentales - avec une large prédominance des transitions antiferromagnétiques (en majorité impropres) sur les transitions ferromagnétiques - plusieurs résultats mettent en lumière des situations théoriques qui n'ont pas été encore reconnues expérimentalement.

1) L'existence d'un ferromagnétisme impropre. Une fraction des transitions ferromagnétiques sont induites par des coreprésentations associées à des points de la surface de la zone de Brillouin. Dans ces transitions qui s'accompagnent d'une multiplication de la maille magnétique élémentaire, l'aimantation spontanée est un effet secondaire provenant d'un couplage non linéaire avec le paramètre d'ordre de la transition. A notre connaissance, le seul exemple expérimental confirmé de ferromagnétique impropre est la Boracite Nickel-Iode [2]. Il est significatif que la transition magnétique dans ce matériau soit classifiée comme ferromagnétique faible. Parmi les exemples recensés de corps ferromagnétiques faibles ou

ferrimagnétiques, on devrait en effet pouvoir trouver plusieurs cas de ferromagnétiques impropres (qui se distingueraient des ferromagnétiques faibles et des ferrimagnétiques par l'absence de sous réseaux équivalents et opposés ainsi que par la forme des anomalies au voisinage du point de transition).

2) La Boracite Nickel-Iode semble réaliser deux autres situations théoriques révélées par notre travail : d'une part, l'apparition simultanée (prédite par symétrie) d'un ordre magnétique et structural à une même température [3], d'autre part le fait que cette transition peut être à la fois du 1^{er} ordre structuralement et du 2^{ème} ordre magnétiquement. Une comparaison détaillée du modèle théorique décrivant la transition ferromagnétique-ferroélastique-ferroélectrique de la Boracite Nickel-Iode, et des données expérimentales nombreuses obtenues pour ce matériau, reste cependant à faire.

La compilation des données expérimentales connues sur les symétries des matériaux ferro et antiferromagnétiques, présentée au chapitre 6, montre qu'une majorité de ces transitions peut être reliée à une coreprésentation irréductible unique et active. Il existe toutefois un nombre non négligeable de transitions magnétiques dont le changement de symétrie peut être relié à une coreprésentation réductible. D'autre part, bien que de nombreuses structures magnétiques hélicoïdales puissent être rattachées à des coreprésentations ne vérifiant pas le critère de Lifshitz, il semble que la grande variété de structures de ce type nécessite, du point de vue de la description de leurs propriétés de symétrie, de recourir à des concepts qui n'ont pas d'équivalent dans l'étude des transitions structurales (tels les groupes de P-symétrie [4] et leurs coreprésentations). Plusieurs problèmes doivent également être étudiés si l'on veut apprécier complètement l'applicabilité de la théorie de Landau aux transitions magnétiques, tels les transitions magnétiques du 1^{er} ordre (qui paraissent bien moins fréquentes que les transitions structurales du 1^{er} ordre), les transitions magnétiques sans relation de groupe à sous-groupe entre les phases (qui sont également rares), les transitions dont la phase la plus symétrique est ferromagnétique ou antiferromagnétique, l'étude des couplages magnétostructuraux, etc... La présente étude, par les clarifications qu'elle apporte, constitue une étape indispensable vers l'examen de ces divers problèmes.

REFERENCES:

1. P.Tolédano,Thèse d'état,Université de Picardie(1979)
2. H.Schmid,On a magnetolectric classification of materials,dans
Magnetolectric Interaction Phenomena in Crystals,Ed. A.J.
Freeman et H.Schmid,Gordon and Breach(1973)
3. H.Schmid,communication personnelle
4. A.M.Zamorzaev,Soviet Physics Crystallo.,12,n°5,(1968)

ANNEXE 1

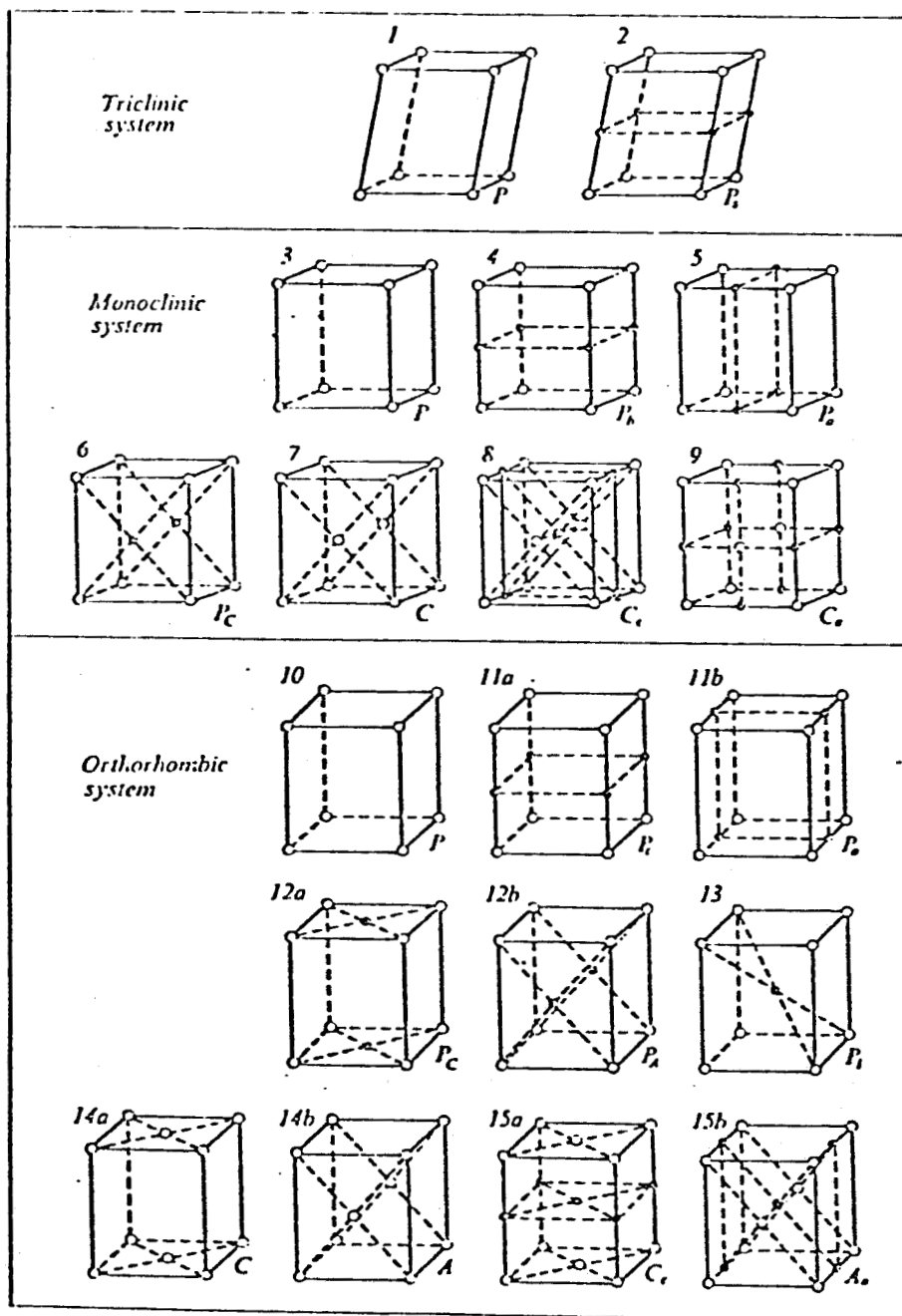
LES 36 RESEAUX DE BRAVAIS MAGNETIQUES

ET

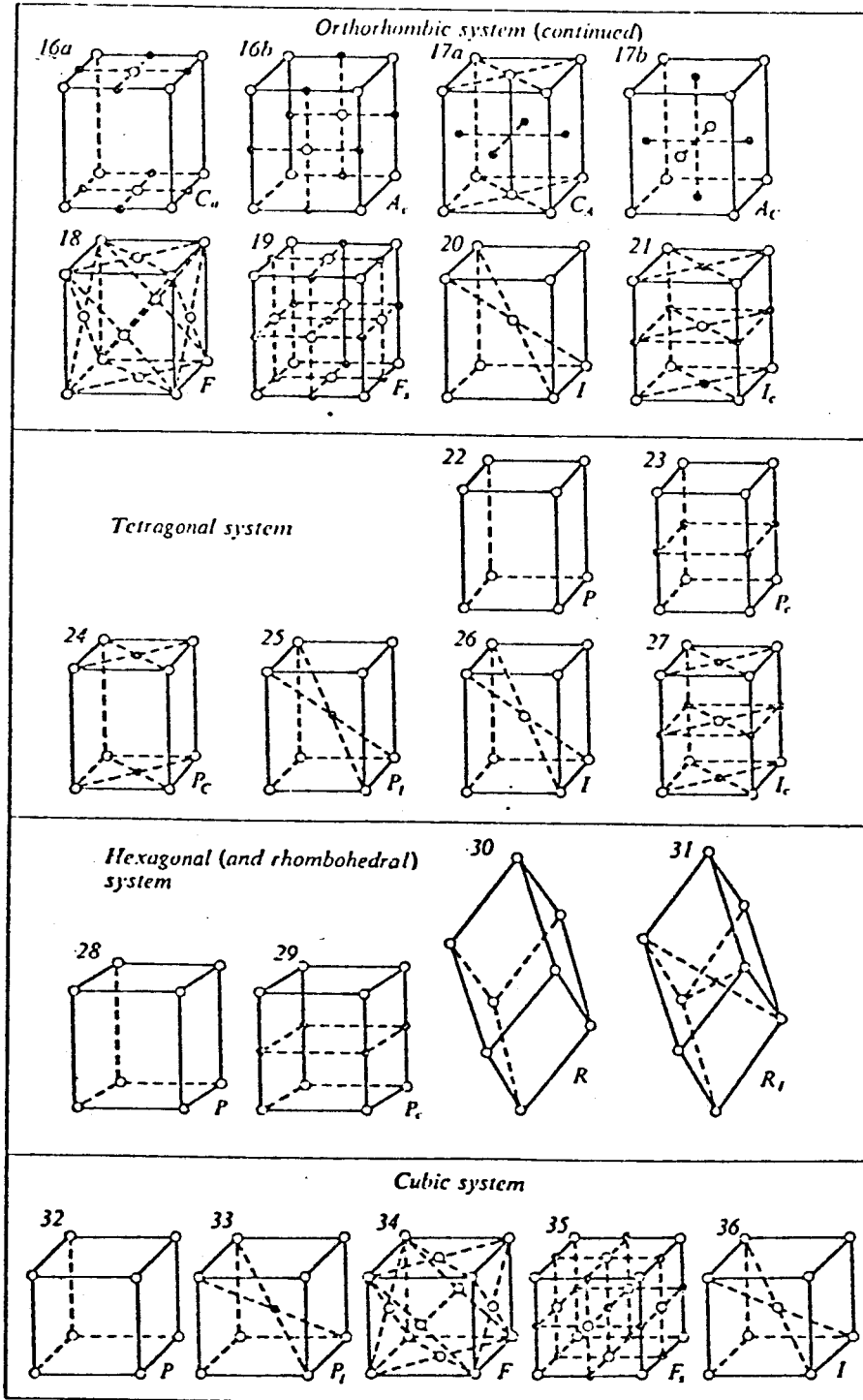
LES 1651 GROUPES DE SHUBNIKOV

LES RESEAUX DE BRAVAIS

MAGNETIQUES



BUS
LILLE



LISTE DES GROUPES DE SHUBNIKOV

Triclinic system	10. P_22_1	35. C_2m	60. $C2'/m$
	11. P_12_1	36. C_2m	61. $C2/mi'$
	12. P_c2_1	(9) 37. Cc	62. $C2'/mi'$
C_1	(5) 13. $C2$	38. $Cc1'$	63. C_22/m
(1) 1. $P1$	14. $C21'$	39. Cc'	64. C_22/m
2. $P1'$	15. $C2'$	40. $C_c c$	(13) 65. $P2/c$
3. P_11	16. C_22	41. $C_c c$	66. $P2/c1'$
C_2	17. C_22	C_{2h}	67. $P2'/c$
(2) 4. $P\bar{1}$	C_{2h}	(10) 42. $P2/m$	68. $P2/c'$
5. $P\bar{1}1'$	(6) 18. Pm	43. $P2/m1'$	69. $P2'/c'$
6. $P\bar{1}'$	19. $Pm1'$	44. $P2'/m$	70. P_22/c
7. $P_1\bar{1}$	20. Pm'	45. $P2'/m'$	71. P_22/c
Monoclinic system‡	21. P_2m	46. $P2'/m'$	72. P_22/c
	22. P_2m	47. P_22/m	73. P_22/c
	23. $P_c m$	48. P_22/m	74. P_c2/c
C_2	(7) 24. Pc	49. P_c2/m	(14) 75. $P2_1/c$
(3) 1. $P2$	25. $Pc1'$	(11) 50. $P2_1/m$	76. $P2_1/c1'$
2. $P21'$	26. Pc'	51. $P2_1/m1'$	77. $P2_1/c$
3. $P2'$	27. $P_c c$	52. $P2_1/m$	78. $P2_1/c'$
4. P_22	28. $P_c c$	53. $P2_1/m'$	79. $P2_1'/c'$
5. P_22	29. $P_2 c$	54. $P2_1/m'$	80. P_22_1/c
6. P_c2	30. $P_c c$	55. P_22_1/m	81. P_22_1/c
(4) 7. $P2_1$	31. $P_c c'$	56. P_22_1/m	82. $P2_1/c$
8. $P2_11'$	(8) 32. Cm	57. P_c2_1/m	83. P_22_1/c
9. $P2_1'$	33. $Cm1'$	(12) 58. $C2/m$	84. P_c2_1/c
	34. Cm'	59. $C2/m1'$	(15) 85. $C2/c$
			86. $C2/c1'$



- | | | | |
|-----------------------|-----------------------|--------------------|--------------------|
| 87. $C2/c$ | (21) 38. $C222$ | 83. P_2cc2 | 132. P_8mnn2_1 |
| 88. $C2/c'$ | 39. $C2221'$ | 84. $P'_c cc2$ | 133. $P_c mnn2_1$ |
| 89. $C2'/c'$ | 40. $C2'2'2$ | 85. P_4cc2 | 134. $P_1 mnn2_1$ |
| 90. C_2/c | 41. $C22'2'$ | 86. P_1cc2 | (32) 135. $Pba2$ |
| 91. C_2/c | 42. C_222 | (28) 87. $Pma2$ | 136. $Pba21'$ |
| | 43. C_222 | 88. $Pma21'$ | 137. $Pb'a2'$ |
| | 44. C_4222 | 89. $Pm'a2'$ | 138. $Pb'a'2$ |
| Orthorhombic | (22) 45. $F222$ | 90. $P'ma'2'$ | 139. P_ba2 |
| system | 46. $F2221'$ | 91. $Pm'a'2$ | 140. P_ba2 |
| | 47. $F2'2'2$ | 92. P_2ma2 | 141. P_cba2 |
| | 48. F_222 | 93. P_4ma2 | 142. P_4ba2 |
| | (23) 49. $I222$ | 94. P_cma2 | 143. P_1ba2 |
| | 50. $I2221'$ | 95. P_4ma2 | (33) 144. $Pna2_1$ |
| | 51. $I2'2'2$ | 96. P_4ma2 | 145. $Pna2_11'$ |
| | 52. I_222 | 97. P_cma2 | 146. $Pn'a2'_1$ |
| (16) 1. $P222$ | (24) 53. $I2_12_12_1$ | (29) 99. $Pca2_1$ | 147. $Pn'a'2'_1$ |
| 2. $P2221'$ | 54. $I2_12_12_11'$ | 100. $Pca2_11'$ | 148. $Pn'a'2'_1$ |
| 3. $P2'2'2$ | 55. $I2'_12'_12'_1$ | 101. $Pc'a2'_1$ | 149. P_2na2_1 |
| 4. P_2222 | 56. $I_22_12_12_1$ | 102. $Pc'a'2'_1$ | 150. P_2na2_1 |
| 5. P_c222 | | 103. $Pc'a'2'_1$ | 151. P_2na2_1 |
| 6. P_1222 | C_2 | 104. P_2ca2_1 | 152. P_4na2_1 |
| (17) 7. $P222_1$ | (25) 57. $Pmm2$ | 105. P_4ca2_1 | 153. P_8na2_1 |
| 8. $P222_11'$ | 58. $Pmm21'$ | 106. P_2ca2_1 | 154. P_cna2_1 |
| 9. $P2'2'2_1$ | 59. $Pm'm2'$ | 107. P_4ca2_1 | 155. P_cna2_1 |
| 10. $P22'2'_1$ | 60. $Pm'm'2$ | 108. P_2ca2_1 | (34) 156. $Pnn2$ |
| 11. P_222_1 | 61. P_2nm2 | 109. P_cca2_1 | 157. $Pnn21'$ |
| 12. P_c222_1 | 62. P_2nm2 | 110. P_1ca2_1 | 158. $Pn'n2'$ |
| 13. P_4222_1 | 63. P_cmm2 | (30) 111. $Pnc2$ | 159. $Pn'n'2$ |
| 14. P_c222_1 | 64. P_4mm2 | 112. $Pnc21'$ | 160. P_2nn2 |
| 15. P_1222_1 | 65. P_1mm2 | 113. $Pn'c2'$ | 161. P_2nn2 |
| (18) 16. $P2_12_12$ | (26) 66. $Pnc2_1$ | 114. $Pnc'2'$ | 162. P_4nn2 |
| 17. $P2_12_121'$ | 67. $Pnc2_11'$ | 115. $Pn'c'2$ | 163. P_cnn2 |
| 18. $P2'_12'_12$ | 68. $Pm'c2'_1$ | 116. P_2nc2 | 164. P_1nn2 |
| 19. $P2_12'_12'$ | 69. $Pm'c'2'_1$ | 117. P_2nc2 | (35) 165. $Cmm2$ |
| 20. $P_22_12_12$ | 70. $Pm'c'2_1$ | 118. P_2nc2 | 166. $Cmm21'$ |
| 21. $P_22_12_12$ | 71. P_2nc2_1 | 119. P_4nc2 | 167. $Cn'i'm2'$ |
| 22. $P_42_12_12$ | 72. P_4nc2_1 | 120. P_8nc2 | 168. $Cn'i'm'2$ |
| 23. $P_c2_12_12$ | 73. P_2nc2_1 | 121. P_cnc2 | 169. C_2nm2 |
| 24. $P_12_12_12$ | 74. P_4nc2_1 | 122. P_1nc2 | 170. C_2nm2 |
| (19) 25. $P2_12_12_1$ | 75. P_8nc2_1 | (31) 123. $Pmn2_1$ | 171. C_4nm2 |
| 26. $P2_12_12_11'$ | 76. P_cnc2_1 | 124. $Pmn2_11'$ | (36) 172. $Cmc2_1$ |
| 27. $P2'_12'_12_1$ | 77. P_1nc2_1 | 125. $Pm'n2'_1$ | 173. $Cmc2_11'$ |
| 28. $P_22_12_12_1$ | (27) 78. $Pcc2$ | 126. $Pm'n'2'_1$ | 174. $Cn'i'c2'_1$ |
| 29. $P_c2_12_12_1$ | 79. $Pcc21'$ | 127. $Pm'n'2_1$ | 175. $Cm'c'2'_1$ |
| 30. $P_12_12_12_1$ | 80. $Pc'c2'$ | 128. P_2mn2_1 | 176. $Cm'c'2_1$ |
| (20) 31. $C222_1$ | 81. $Pc'c'2$ | 129. P_4mn2_1 | 177. C_2mc2_1 |
| 32. $C222_11'$ | 82. P_ccc2 | 130. P_2mn2_1 | 178. C_2mc2_1 |
| 33. $C2'2'2_1$ | | 131. P_4mn2_1 | 179. C_4mc2_1 |
| 34. $C22'2'_1$ | | | |
| 35. C_222_1 | | | |
| 36. C_4222_1 | | | |
| 37. C_4222_1 | | | |



- | | | | |
|-------------------------|-------------------------|-----------------------------|-------------------------|
| (37) 180. Ccc2 | 227. Fd'd'2 | 272. P _a ccm | (53) 321. P'mna |
| 181. Ccc21' | 228. F _a dd2 | 273. P _a ccm | 322. P'mna1' |
| 182. Cc'c2' | (44) 229. Imm2 | 274. P _a ccm | 323. P'm'na |
| 183. Cc'c'2 | 230. Imm21' | 275. P _c ccm | 324. P'mn'a |
| 184. C _a cc2 | 231. Im'm2' | 276. P _i ccm | 325. P'mna' |
| 185. C _a cc2 | 232. Im'm'2 | (50) 277. Pban | 326. P'mi'na |
| 186. C _a cc2 | 233. I _a mm2 | 278. Pban1' | 327. P'mna' |
| (38) 187. Amm2 | 234. I _a mm2 | 279. Pb'an | 328. P'm'na' |
| 188. Amm21' | (45) 235. Iba2 | 280. P'ban' | 329. P'mi'na' |
| 189. Am'm2' | 236. Iba21' | 281. Pb'a'n | 330. P _a mna |
| 190. Amm'2' | 237. Ib'a2' | 282. Pb'an' | 331. P _a mna |
| 191. Am'm'2 | 238. Ib'a'2 | 283. Pb'a'n' | 332. P _a mna |
| 192. A _a mm2 | 239. I _a ba2 | 284. P _a han | 333. P _a mna |
| 193. A _a mm2 | 240. I _a ba2 | 285. P _a han | 334. P _a mna |
| 194. A _c mm2 | (46) 241. Ima2 | 286. P _a han | 335. P _c mna |
| (39) 195. Abm2 | 242. Ima21' | 287. P _c ban | 336. P _i mna |
| 196. Abm21' | 243. Im'a2' | 288. P _i ban | (54) 337. Pcca |
| 197. Ab'm2' | 244. Ima'2' | (51) 289. Pmna | 338. Pcca1' |
| 198. Abm'2' | 245. Im'a'2 | 290. Pmna1' | 339. Pc'ca |
| 199. Ab'm'2 | 246. I _a na2 | 291. Pm'na | 340. Pcc'a |
| 200. A _a hm2 | 247. I _a na2 | 292. Pm'm'a | 341. Pcca' |
| 201. A _a hm2 | 248. I _a na2 | 293. Pmma' | 342. Pc'c'a |
| 202. A _c hm2 | | 294. Pni'm'a | 343. Pcc'a' |
| (40) 203. Ama2 | D ₂₄ | 295. Pmim'a' | 344. P'c'c'a' |
| 204. Ama21' | (47) 249. Pmmm | 296. Pm'm'a' | 345. P'c'c'a' |
| 205. Am'a2' | 250. Pmmml' | 297. Pm'mi'a' | 346. P _a cca |
| 206. Ama'2' | 251. Pm'nim | 298. P _a mna | 347. P _a cca |
| 207. Am'a'2 | 252. Pm'ni'm | 299. P _a mna | 348. P _a cca |
| 208. A _a ma2 | 253. Pni'ni'm' | 300. P _a mna | 349. P _a cca |
| 209. A _a ma2 | 254. P _a nim | 301. P _a mna | 350. P _a cca |
| 210. A _c ma2 | 255. P _c mim | 302. P _a mna | 351. P _c cca |
| (41) 211. Abe2 | 256. P _i mim | 303. P _c mna | 352. P _i cca |
| 212. Aba21' | (48) 257. Pnnn | 304. P _i mna | (55) 353. Pbam |
| 213. Ab'a2' | 258. Pnnn1' | (52) 305. P _a na | 354. Pbam1' |
| 214. Ab'a'2' | 259. Pn'nn | 306. P'anna1' | 355. Pb'am |
| 215. Ab'a'2 | 260. Pn'n'n | 307. Pn'na | 356. Pbam' |
| 216. A _a ba2 | 261. Pn'n'n' | 308. Pni'a | 357. Pb'a'm |
| 217. A _a ba2 | 262. P _a inn | 309. Pnna' | 358. Pb'am' |
| 218. A _c ba2 | 263. P _c nnn | 310. Pn'n'a | 359. Pb'a'm' |
| (42) 219. Fmm2 | 264. P _i nnn | 311. Pnn'a' | 360. P'ham |
| 220. Fmm21' | (49) 265. Pccm | 312. Pn'na' | 361. P'ham |
| 221. Fm'm2' | 266. Pccm1' | 313. Pn'ni'a' | 362. P _a ham |
| 222. Fm'm'2 | 267. Pc'cm | 314. P _a nna | 363. P _c ham |
| 223. F _a mm2 | 268. Pccm' | 315. P _a nna | 364. P _i ham |
| (43) 224. Fdd2 | 269. Pc'c'm | 316. P _a nna | (56) 365. Pccn |
| 225. Fdd21' | 270. Pc'cm' | 317. P _a nna | 366. Pccn1' |
| 226. Fd'd'2' | 271. Pc'c'm' | 318. P _a nna | 367. Pc'cn |
| | | 319. P _c nna | 368. Pccn' |
| | | 320. P _i nna | 369. Pc'c'n |
| | | | 370. Pc'cn' |



- | | | | |
|------------------------------|------------------------------|------------------------------|------------------------------|
| 371. <i>Pc'c'n'</i> | 420. <i>Pbc'n</i> | (64) 469. <i>Cmca</i> | 518. <i>C₂cca</i> |
| 372. <i>P₂ccn</i> | 421. <i>Pbcn'</i> | 470. <i>Cnical'</i> | 519. <i>C₂cca</i> |
| 373. <i>P₂ccn</i> | 422. <i>Pb'c'n</i> | 471. <i>Cm'ca</i> | 520. <i>C₂cca</i> |
| 374. <i>P₂ccn</i> | 423. <i>Pbc'n'</i> | 472. <i>Cmca'</i> | (69) 521. <i>Frcmm</i> |
| 375. <i>P₂ccn</i> | 424. <i>Pb'cn'</i> | 473. <i>Cmca'</i> | 522. <i>Fmmml'</i> |
| 376. <i>P₂ccn</i> | 425. <i>Pb'c'n'</i> | 474. <i>Cm'c'a</i> | 523. <i>Fm'inm</i> |
| (57) 377. <i>Pbcm</i> | 426. <i>P₂bcn</i> | 475. <i>Cmca'</i> | 524. <i>Fm'm'm</i> |
| 378. <i>Pbcm1'</i> | 427. <i>P₂bcn</i> | 476. <i>Cm'ca'</i> | 525. <i>Fm'm'm'</i> |
| 379. <i>Pb'cm</i> | 428. <i>P₂bcn</i> | 477. <i>Cm'c'a'</i> | 526. <i>F₂mm</i> |
| 380. <i>Pbc'm</i> | 429. <i>P₂bcn</i> | 478. <i>C₂mca</i> | (70) 527. <i>Fddd</i> |
| 381. <i>Pbcm'</i> | 430. <i>P₂bcn</i> | 479. <i>C₂mca</i> | 528. <i>Fddd1'</i> |
| 382. <i>Pb'c'm</i> | 431. <i>P₂bcn</i> | 480. <i>C₂mca</i> | 529. <i>Fd'dd</i> |
| 383. <i>Pbc'm'</i> | 432. <i>P₂bcn</i> | (65) 481. <i>Cmm</i> | 530. <i>Fd'd'd</i> |
| 384. <i>Pb'cm'</i> | (61) 433. <i>Pbca</i> | 482. <i>Cmmml'</i> | 531. <i>Fd'd'd'</i> |
| 385. <i>Pb'c'm'</i> | 434. <i>Pbcal'</i> | 483. <i>Cm'mm</i> | 532. <i>F₂ddd</i> |
| 386. <i>P₂bcm</i> | 435. <i>Pb'ca</i> | 484. <i>Cmm'm'</i> | (71) 533. <i>Imm</i> |
| 387. <i>P₂bcm</i> | 436. <i>Pb'c'a</i> | 485. <i>Cm'm'm</i> | 534. <i>Immml'</i> |
| 388. <i>P₂bcm</i> | 437. <i>Pb'c'a'</i> | 486. <i>Cm'm'm'</i> | 535. <i>Im'mm</i> |
| 389. <i>P₂bcm</i> | 438. <i>P₂bca</i> | 487. <i>Cm'm'm'</i> | 536. <i>Im'm'm</i> |
| 390. <i>P₂bcm</i> | 439. <i>P₂bca</i> | 488. <i>C₂mm</i> | 537. <i>Im'm'm'</i> |
| 391. <i>P₂bcm</i> | 440. <i>P₂bca</i> | 489. <i>C₂mm</i> | 538. <i>I₂mm</i> |
| 392. <i>P₂bcm</i> | (62) 441. <i>Pnma</i> | 490. <i>C₂mm</i> | (72) 539. <i>Ibam</i> |
| (58) 393. <i>Pnmm</i> | 442. <i>Pnmal'</i> | (66) 491. <i>Cccm</i> | 540. <i>Ibam1'</i> |
| 394. <i>Pnmm1'</i> | 443. <i>Pn'ma</i> | 492. <i>Cccml'</i> | 541. <i>Ib'am</i> |
| 395. <i>Pn'nm</i> | 444. <i>Pn'm'a</i> | 493. <i>Cc'cm</i> | 542. <i>Ibani'</i> |
| 396. <i>Pnmm'</i> | 445. <i>Pnma'</i> | 494. <i>Cccm'</i> | 543. <i>Ib'a'ni</i> |
| 397. <i>Pn'n'm</i> | 446. <i>Pn'ni'a</i> | 495. <i>Cc'c'm</i> | 544. <i>Ib'a'ni'</i> |
| 398. <i>Pn'm'm'</i> | 447. <i>Pn'm'a'</i> | 496. <i>Ccc'm'</i> | 545. <i>Ib'a'm'</i> |
| 399. <i>Pn'n'ni'</i> | 448. <i>Pn'ma'</i> | 497. <i>Cc'c'm'</i> | 546. <i>I₂bam</i> |
| 400. <i>P₂nm</i> | 449. <i>Pn'm'a'</i> | 498. <i>C₂ccm</i> | (73) 548. <i>Ibca</i> |
| 401. <i>P₂nm</i> | 450. <i>P₂ma</i> | 499. <i>C₂ccm</i> | 549. <i>Ibcal'</i> |
| 402. <i>P₂nm</i> | 451. <i>P₂ma</i> | 500. <i>C₂ccm</i> | 550. <i>Ib'ca</i> |
| 403. <i>P₂nm</i> | 452. <i>P₂ma</i> | (67) 501. <i>Cnma</i> | 551. <i>Ib'c'a</i> |
| 404. <i>P₂nm</i> | 453. <i>P₂ma</i> | 502. <i>Cnmal'</i> | 552. <i>Ib'c'a'</i> |
| (59) 405. <i>Pmma</i> | 454. <i>P₂ma</i> | 503. <i>Cm'ma</i> | 553. <i>I₂bca</i> |
| 406. <i>Pmma1'</i> | 455. <i>P₂ma</i> | 504. <i>Cmma'</i> | (74) 554. <i>Inma</i> |
| 407. <i>Pm'mn</i> | 456. <i>P₂ma</i> | 505. <i>Cm'm'a</i> | 555. <i>Inmal'</i> |
| 408. <i>Pmma'</i> | (63) 457. <i>Cmcm</i> | 506. <i>Cm'm'a'</i> | 556. <i>In'ma</i> |
| 409. <i>Pm'm'n</i> | 458. <i>Cmcm1'</i> | 507. <i>Cm'm'a'</i> | 557. <i>Inma'</i> |
| 410. <i>Pm'm'n'</i> | 459. <i>Cm'cm</i> | 508. <i>C₂ma</i> | 558. <i>In'ni'u</i> |
| 411. <i>Pm'm'n'</i> | 460. <i>Cm'cm</i> | 509. <i>C₂ma</i> | 559. <i>Inn'a'</i> |
| 412. <i>P₂mmn</i> | 461. <i>Cmcm'</i> | 510. <i>C₂ma</i> | 560. <i>Im'ni'a'</i> |
| 413. <i>P₂mmn</i> | 462. <i>Cm'c'm</i> | (68) 511. <i>Ccca</i> | 561. <i>I₂ma</i> |
| 414. <i>P₂mmn</i> | 463. <i>Cm'c'ni'</i> | 512. <i>Cccal'</i> | 562. <i>I₂ma</i> |
| 415. <i>P₂mmn</i> | 464. <i>Cm'c'm'</i> | 513. <i>Cc'ca</i> | |
| 416. <i>P₂mmn</i> | 465. <i>Cm'c'm'</i> | 514. <i>Ccca'</i> | |
| (60) 417. <i>Pbcn</i> | 466. <i>C₂mcm</i> | 515. <i>Cc'c'a</i> | |
| 418. <i>Pbcn1'</i> | 467. <i>C₂mcm</i> | 516. <i>Ccc'a'</i> | |
| 419. <i>Pb'cn</i> | 468. <i>C₂mcm</i> | 517. <i>Cc'c'a'</i> | |



Tetragonal system				
	C_4	(82) 39. $I\bar{4}$	84. I_4/a'	129. $P_4'2_12'$
		40. $I\bar{4}1'$	85. I_4'/a'	130. $P_4'2_1'2'$
		41. $I\bar{4}'$	86. I_4/a	131. $P_4'2_12$
		42. $I_4\bar{4}$		132. $P_4'2_12$
			D_4	133. $P_4'2_12$
(75)	1. P_4		(89) 87. P_422	134. $P_4'2_12$
	2. P_41'		88. P_4221'	
	3. P_4'	(83) 43. $P_4'm$	89. $P_4'22'$	(95) 135. P_4322
	4. P_4A	44. P_4/ml'	90. $P_4'22'$	136. P_43221'
	5. P_4A	45. P_4'/m	91. $P_4'2'2'$	137. $P_43'22'$
	6. P_4A	46. P_4/m'	92. $P_4'22$	138. $P_43'2'2'$
(76)	7. P_41	47. P_4'/m'	93. $P_4'22$	139. $P_43'2'2'$
	8. P_41'	48. P_4'/m	94. $P_4'22$	140. $P_43'22$
	9. P_41	49. P_4A/m		141. $P_4'3'22$
	10. P_41	50. P_4A/m	(90) 95. P_42_12'	142. $P_4'3'22$
	11. $P_4'1$	(84) 51. P_42/m	96. P_42_121'	(96) 143. $P_43'2_12$
	12. $P_4'1$	52. P_42/ml'	97. $P_4'2_12'$	144. $P_43'2_121'$
(77)	13. P_42	53. P_42'/m	98. $P_42'2'$	145. $P_43'2_12'$
	14. P_421'	54. P_42'/m'	99. $P_4'2_12$	146. $P_43'2_12'$
	15. P_42'	55. P_42'/m'	100. $P_4'2_12$	147. $P_43'2_12$
	16. P_42	56. $P_4'2_1/m$	101. $P_4'2_12$	148. $P_4'3'2_12$
	17. $P_4'2$	57. $P_4'2_1/m$	102. $P_4'2_12$	149. $P_4'3'2_12$
	18. $P_4'2$	58. $P_4'2_1/m$	(91) 103. $P_4'22$	150. $P_4'3'2_12$
(78)	19. P_43	(85) 59. P_4/n	104. $P_4'221'$	(97) 151. I_422
	20. P_431'	60. $P_4/n1'$	105. $P_4'22'$	152. I_4221'
	21. P_43'	61. P_4'/n	106. $P_4'2'2'$	153. $I_4'22'$
	22. P_43	62. P_4'/n'	107. $P_4'2'2'$	154. $I_4'2'2'$
	23. $P_4'3$	63. P_4'/n'	108. $P_4'2_12$	155. $I_4'2'2$
	24. $P_4'3$	64. P_4A/n	109. $P_4'2_12$	156. $I_4'22$
		65. P_4A/n	110. $P_4'2_12$	
		66. P_4A/n	(92) 111. $P_4'2_12$	(98) 157. $I_4'22$
(79)	25. I_4	(86) 67. P_42/n	112. $P_4'2_121'$	158. $I_4'221'$
	26. I_41'	68. $P_42/n1'$	113. $P_4'2_12'$	159. $I_4'22'$
	27. I_4'	69. P_42'/n	114. $P_4'2_12'$	160. $I_4'2'2'$
	28. I_4	70. P_42'/n'	115. $P_4'2_12'$	161. $I_4'2'2'$
		71. P_42'/n'	116. $P_4'2_12$	162. $I_4'2_12$
(80)	29. I_41	72. $P_4'2_1/n$	117. $P_4'2_12$	
	30. I_41'	73. $P_4'2_1/n$	118. $P_4'2_12$	C_4
	31. I_41	74. $P_4'2_1/n$		(99) 163. P_4nm
	32. I_41			164. P_4nm1'
		(87) 75. $I_4'm$	(93) 119. P_422	165. $P_4'm'm$
		76. I_4/ml'	120. $P_4'221'$	166. $P_4'nm'$
		77. I_4'/m	121. $P_4'22'$	167. $P_4'm'm'$
(81)	33. $P\bar{4}$	78. I_4'/m'	122. $P_4'2'2'$	168. $P_4'nun$
	34. $P\bar{4}1'$	79. I_4'/m'	123. $P_4'2'2'$	169. $P_4'nm$
	35. $P\bar{4}'$	80. I_4'/m	124. $P_4'2_12$	170. $P_4'nm$
	36. $P_4\bar{4}$	(88) 81. $I_4'ia$	125. $P_4'2_12$	
	37. $P_4\bar{4}$	82. $I_4'/a1'$	126. $P_4'2_12$	(100) 171. P_4bm
	38. $P_4\bar{4}$	83. I_4'/a	(94) 127. $P_4'2_12$	172. P_4bm1'
			128. $P_4'2_121'$	173. $P_4'b'm$



- | | | | |
|----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|
| 174. $P_4'bm'$ | 221. $P_4'b'c$ | (113) 267. $P_3'2_1m'$ | (119) 315. I_3m2 |
| 175. $P_4b'm'$ | 222. $P_4'bc'$ | 268. $P_4'2_1m1'$ | 316. I_3m21' |
| 176. $P_4b'm$ | 223. $P_4b'c'$ | 269. $P_4'2_1m$ | 317. $I_3'm'2$ |
| 177. P_4Abm | 224. P_4A_2bc | 270. $P_4'2_1m'$ | 318. $I_3'm'2'$ |
| 178. P_4Abm | 225. P_4A_2bc | 271. $P_4'2_1m'$ | 319. $I_3m'2'$ |
| (101) 179. P_4_2cm | 226. P_4A_2bc | 272. $P_4'2_1m$ | 320. $I_4'3m2$ |
| 180. P_4_2cm1' | (107) 227. I_4mm | 273. $P_4'2_1m$ | (120) 321. I_3c2 |
| 181. $P_4_2c'm$ | 228. I_4mm1' | 274. $P_4'2_1m$ | 322. I_3c21' |
| 182. $P_4_2c'm'$ | 229. $I_4'm'm$ | (114) 275. $P_4'2_1c$ | 323. $I_4'c'2$ |
| 183. $P_4_2c'm'$ | 230. $I_4'nun'$ | 276. $P_4'2_1c$ | 324. $I_4'c'2'$ |
| 184. P_4A_2cm | 231. $I_4m'm'$ | 277. $P_4'2_1c$ | 325. $I_4c'2'$ |
| 185. P_4A_2cm | 232. I_4mm | 278. $P_4'2_1c$ | 326. $I_4'c'2$ |
| 186. P_4A_2cm | (108) 233. I_4cm | 279. $P_4'2_1c'$ | (121) 327. $I_3'2m$ |
| (102) 187. P_4_2nm | 234. I_4cm1' | 280. $P_4'2_1c$ | 328. $I_4'2m1'$ |
| 188. P_4_2nm1' | 235. $I_4'c'm$ | 281. $P_4'2_1c$ | 329. $I_4'2'm$ |
| 189. $P_4_2'n'm$ | 236. $I_4'c'm'$ | 282. $P_4'2_1c$ | 330. $I_4'2m'$ |
| 190. $P_4_2'n'm'$ | 237. $I_4c'm'$ | (115) 283. $P_4'3m2$ | 331. $I_4'2m'$ |
| 191. $P_4_2'n'm'$ | 238. $I_4'c'm$ | 284. $P_4'3m21'$ | 332. $I_4'2m'$ |
| 192. P_4A_2nm | (109) 239. I_4_1md | 285. $P_4'3'm'2$ | (122) 333. $I_4'2d$ |
| 193. P_4A_2nm | 240. I_4_1md1' | 286. $P_4'3'm'2'$ | 334. $I_4'2d1'$ |
| 194. P_4A_2nm | 241. $I_4_1'm'd$ | 287. $P_4'3'm'2'$ | 335. $I_4'2'd$ |
| (103) 195. P_4cc | 242. $I_4_1'm'd'$ | 288. $P_4'3'm'2$ | 336. $I_4'2'd'$ |
| 196. P_4cc1' | 243. $I_4_1'm'd'$ | 289. $P_4'3'm2$ | 337. $I_4'2'd'$ |
| 197. $P_4'c'c$ | 244. $I_4_1'md$ | 290. $P_4'3'm2$ | 338. $I_4'3'2d$ |
| 198. $P_4'cc'$ | (110) 245. I_4_1cd | (116) 291. $P_4'3c2$ | D_{24} |
| 199. $P_4c'c'$ | 246. I_4_1cd1' | 292. $P_4'3c21'$ | (123) 339. $P_4'mmm$ |
| 200. $P_4'cc$ | 247. $I_4_1'c'd$ | 293. $P_4'3'c'2$ | 340. $P_4'mmm1'$ |
| 201. $P_4'cc$ | 248. $I_4_1'c'd'$ | 294. $P_4'3'c'2'$ | 341. $P_4'ni'nun$ |
| 202. $P_4'cc$ | 249. $I_4_1'c'd'$ | 295. $P_4'3'c'2'$ | 342. $P_4'mm'm$ |
| (104) 203. P_4nc | 250. $I_4_1'cd$ | 296. $P_4'3c2$ | 343. $P_4'j'nunm'$ |
| 204. P_4ncl' | D_{24} | 297. $P_4'3c2$ | 344. $P_4'm'm'm'$ |
| 205. $P_4'n'c$ | (111) 251. $P_4'32m$ | 298. $P_4'3c2$ | 345. $P_4'm'm'm'$ |
| 206. $P_4'nc'$ | 252. $P_4'32m1'$ | (117) 299. $P_4'3b2$ | 346. $P_4'm'm'm'$ |
| 207. $P_4'n'c'$ | 253. $P_4'3'2'm$ | 300. $P_4'3b21'$ | 347. $P_4'ni'ni'm'$ |
| 208. $P_4'nc$ | 254. $P_4'3'2m'$ | 301. $P_4'3'b'2$ | 348. $P_4'ni'nunm$ |
| 209. $P_4'nc$ | 255. $P_4'3'2m'$ | 302. $P_4'3'b'2'$ | 349. $P_4'ni'nunm$ |
| 210. $P_4'nc$ | 256. $P_4'3'2m$ | 303. $P_4'3'b'2'$ | 350. $P_4'ni'nunm$ |
| (105) 211. P_4_2mc | 257. $P_4'3'2m$ | 304. $P_4'3b2$ | (124) 351. $P_4'mcc$ |
| 212. P_4_2mcl' | 258. $P_4'3'2m$ | 305. $P_4'3b2$ | 352. $P_4'mcc1'$ |
| 213. $P_4_2'm'c$ | (112) 259. $P_4'32c$ | (118) 307. $P_4'3n2$ | 353. $P_4'm'cc$ |
| 214. $P_4_2'm'c'$ | 260. $P_4'32c1'$ | 308. $P_4'3n21'$ | 354. $P_4'm'c'c$ |
| 215. $P_4_2ni'c'$ | 261. $P_4'3'2'c$ | 309. $P_4'3'n'2$ | 355. $P_4'm'c'c'$ |
| 216. $P_4_2ni'c'$ | 262. $P_4'3'2'c'$ | 310. $P_4'3'n'2'$ | 356. $P_4'ni'c'c'$ |
| 217. P_4A_2mc | 263. $P_4'3'2'c'$ | 311. $P_4'3'n'2'$ | 357. $P_4'm'c'c'$ |
| 218. P_4A_2mc | 264. $P_4'3'2c$ | 312. $P_4'3'n2$ | 358. $P_4'm'c'c'$ |
| (106) 219. P_4_2bc | 265. $P_4'3'2c$ | 313. $P_4'3'n2$ | 359. $P_4'm'c'c'$ |
| 220. P_4_2bc1' | 266. $P_4'3'2c$ | 314. $P_4'3'n2$ | 360. $P_4'm'c'c'$ |



- | | | | |
|----------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
| 361. $P_4A'mcc$ | (129) 411. $P_4'nmm$ | (133) 459. P_4A_2/nbc | (137) 507. P_4A_2/nmc |
| 362. P_4A/ncc | 412. $P_4/nmm1'$ | 460. $P_4A_2/nbc1'$ | 508. $P_4A_2/nmc1'$ |
| (125) 363. $P_4'nbm$ | 413. $P_4/n'mm$ | 461. $P_4A_2/n'bc$ | 509. $P_4A_2/n'mc$ |
| 364. $P_4'nbm1'$ | 414. $P_4'/n'm$ | 462. $P_4A_2/nb'c$ | 510. $P_4A_2/nm'c$ |
| 365. $P_4'n'bm$ | 415. P_4'/nmm' | 463. P_4A_2/nbc' | 511. P_4A_2/nmc' |
| 366. $P_4'/nb'm$ | 416. $P_4'/n'm'm$ | 464. $P_4A_2/n'b'c$ | 512. $P_4A_2/n'm'c$ |
| 367. P_4'/nbm' | 417. $P_4/nm'n'$ | 465. $P_4A_2/nb'c'$ | 513. $P_4A_2/nm'c'$ |
| 368. $P_4'/n'b'm$ | 418. $P_4'/n'mm'$ | 466. $P_4A_2/n'bc'$ | 514. $P_4A_2/n'inc'$ |
| 369. $P_4.r'b'm'$ | 419. $P_4'/n'm'm'$ | 467. $P_4A_2/n'b'c'$ | 515. $P_4A_2/n'm'c'$ |
| 370. $P_4'n'bm'$ | 420. P_4A/nmm | 468. P_4A_2/nbc | 516. P_4A_2/nmc |
| 371. $P_4.n'b'm'$ | 421. P_4A/nmm | 469. P_4A_2/nbc | 517. P_4A_2/nmc |
| 372. P_4A,nbm | 422. P_4A/nmm | 470. P_4A_2/nbc | 518. P_4A_2/nmc |
| 373. P_4A,nbm | (130) 423. P_4jncc | (134) 471. P_4A_2/nmm | (138) 519. P_4A_2/ncm |
| 374. P_4A,nbm | 424. P_4jncc1' | 472. $P_4A_2/nmm1'$ | 520. $P_4A_2/ncm1'$ |
| (126) 375. P_4ncc | 425. $P_4/n'cc$ | 473. $P_4A_2/n'n'm$ | 521. $P_4A_2/n'cm$ |
| 376. $P_4'ncc1'$ | 426. $P_4'/nc'c$ | 474. $P_4A_2/jn'n'm$ | 522. $P_4A_2/nc'm$ |
| 377. $P_4/n'nc$ | 427. P_4'/ncc' | 475. P_4A_2/nmm' | 523. P_4A_2/nem' |
| 378. $P_4/jn'c'$ | 428. $P_4'/n'c'c$ | 476. $P_4A_2/n'n'm$ | 524. $P_4A_2/n'c'm$ |
| 379. $P_4/jnnc'$ | 429. $P_4/n'c'c'$ | 477. $P_4A_2/nn'm'$ | 525. $P_4A_2/nc'm'$ |
| 380. $P_4'/n'n'c$ | 430. $P_4'/n'cc'$ | 478. $P_4A_2/n'nm'$ | 526. $P_4A_2/n'cm'$ |
| 381. $P_4/nn'c'$ | 431. $P_4/n'c'c'$ | 479. $P_4A_2/n'n'm'$ | 527. $P_4A_2/n'c'm'$ |
| 382. $P_4'/n'nc'$ | 432. P_4A/ncc | 480. P_4A_2/nmm | 528. P_4A_2/nem |
| 383. $P_4A/n'nc'$ | 433. P_4A/ncc | 481. P_4A_2/nmm | 529. P_4A_2/nem |
| 384. $P_4A'nnc$ | 434. P_4A/ncc | 482. P_4A_2/nmm | 530. P_4A_2/nem |
| 385. P_4A,nnc | (131) 435. $P_4A_2'mmc$ | (135) 483. P_4A_2/mbc | (139) 531. $J_4'mmm$ |
| 386. $P_4A'nnc$ | 436. $P_4A_2/mmc1'$ | 484. $P_4A_2/mbc1'$ | 532. $J_4/mmm1'$ |
| (127) 387. $P_4'mbm$ | 437. $P_4A_2/m'mc$ | 485. $P_4A_2/m'bc$ | 533. $J_4/n'mm$ |
| 388. $P_4A'mbm1'$ | 438. $P_4A_2/m'm'c$ | 486. $P_4A_2/m'b'c$ | 534. $J_4'/n'm'm$ |
| 389. $P_4'm'bm$ | 439. P_4A_2/mmc' | 487. P_4A_2/mbc' | 535. J_4'/mnm' |
| 390. $P_4'/mb'm$ | 440. $P_4A_2/m'm'c'$ | 488. $P_4A_2/m'b'c'$ | 536. $J_4'/m'm'm$ |
| 391. P_4'/mbm' | 441. $P_4A_2/mm'c'$ | 489. $P_4A_2/mb'c'$ | 537. $J_4'/m'm'm'$ |
| 392. $P_4'/m'b'm$ | 442. $P_4A_2/m'mc'$ | 490. $P_4A_2/m'bc'$ | 538. $J_4'/m'mm'$ |
| 393. $P_4'/mb'b'm'$ | 443. $P_4A_2/m'm'c'$ | 491. $P_4A_2/m'b'c'$ | 539. $J_4'/m'm'm'$ |
| 394. $P_4'/m'b'm'$ | 444. P_4A_2/mmc | 492. P_4A_2/mbc | 540. J_4/nmm |
| 395. $P_4A'm'b'm'$ | 445. P_4A_2/mmc | 493. P_4A_2/mbc | (140) 541. J_4/mcm |
| 396. $P_4A'mbm$ | 446. P_4A_2/mmc | 494. P_4A_2/mbc | 542. $J_4/mcm1'$ |
| 397. $P_4A,jmbm$ | (132) 447. P_4A_2/mcm | (136) 495. P_4A_2/mnm | 543. $J_4/m'cm$ |
| 398. $P_4A,jmbm$ | 448. $P_4A_2/mcm1'$ | 496. $P_4A_2/mnm1'$ | 544. $J_4'/m'c'm$ |
| (128) 399. $P_4'mnc$ | 449. $P_4A_2/m'cm$ | 497. $P_4A_2/n'n'm$ | 545. J_4'/mcm' |
| 400. $P_4/mnc1'$ | 450. $P_4A_2/mc'm$ | 498. $P_4A_2/nm'n'm$ | 546. $J_4'/m'c'm$ |
| 401. $P_4A/m'nc$ | 451. P_4A_2/mcm' | 499. P_4A_2/mnm' | 547. $J_4/mc'm'$ |
| 402. $P_4'/m'nc'$ | 452. $P_4A_2/m'c'm$ | 500. $P_4A_2/n'n'm$ | 548. $J_4'/m'cm'$ |
| 403. P_4'/mnc' | 453. $P_4A_2/mc'm'$ | 501. $P_4A_2/nm'm'$ | 549. $J_4/m'c'm'$ |
| 404. $P_4A/m'n'c'$ | 454. $P_4A_2/m'cm'$ | 502. $P_4A_2/m'nm'$ | 550. J_4A/mcm |
| 405. $P_4A/mn'c'$ | 455. $P_4A_2/m'c'm'$ | 503. $P_4A_2/m'n'm'$ | (141) 551. J_4A/md |
| 406. $P_4'/m'nc'$ | 456. P_4A_2/mcm | 504. P_4A_2/mnm | 552. $J_4A/md1'$ |
| 407. $P_4A/m'n'c'$ | 457. P_4A_2/mcm | 505. P_4A_2/mnm | 553. J_4A/md |
| 408. P_4A,mnc | 458. P_4A_2/mcm | 506. P_4A_2/mnm | 554. J_4A/md |
| 409. P_4A,mnc | | | 555. J_4A/md |
| 410. P_4A,mnc | | | |



556. $I_4^1/a'm'd$	D_3	(159) 61. P_31c	104. R_3c1'
557. $I_4^1/am'd'$		62. $P_31'c$	105. $R_3'c$
558. $I_4^1/a'md'$	(149) 21. P_312	63. P_31c'	106. $R_3'c'$
559. $I_4^1/a'm'd'$	22. $P_31'2$	64. P_31c	107. R_3c'
560. I_4^1/amd	23. P_312'	(160) 65. R_3m	108. R_3c
(142) 561. I_4^1/acd	24. P_312	66. R_3m1'	
562. $I_4^1/acd1'$	(150) 25. P_321	67. R_3m'	B. Hexagonal sub-system
563. $I_4^1/a'cd$	26. P_321'	68. R_3m	
564. $I_4^1/ac'd$	27. P_321'	(161) 69. R_3c	C_6
565. I_4^1/acd'	28. P_321	70. R_3c1'	(168) 109. P_6
566. $I_4^1/a'c'd$	(151) 29. $P_3,12$	71. R_3c'	110. P_61'
567. $I_4^1/ac'd'$	30. $P_3,1'2$	72. R_3c	111. P_6'
568. $I_4^1/a'cd'$	31. $P_3,12'$	D_{3d}	112. P_6
569. $I_4^1/a'c'd'$	32. $P_3,1'2$	(162) 73. P_31m	(169) 113. $P_6,1$
570. I_4^1/acd	(152) 33. $P_3,21$	74. $P_31'm$	114. $P_6,1'$
	34. $P_3,21'$	75. P_31m	115. $P_6,1'$
Hexagonal system	35. $P_3,2'1$	76. P_31m'	116. $P_6,6,1$
A. Rhombohedral sub-system	36. $P_3,2,21$	77. P_31m'	(170) 117. $P_6,2$
C_3	(153) 37. $P_3,2,12$	78. P_31m	118. $P_6,2,1'$
(143) 1. P_3	38. $P_3,2,1'2$	(163) 79. P_31c	119. $P_6,2$
2. P_31'	39. $P_3,2,12'$	80. $P_31'c$	120. $P_6,2$
3. P_3	40. $P_3,2,12'$	81. $P_3'1c$	(171) 121. $P_6,2$
(144) 4. $P_3,1$	(154) 41. $P_3,2,21$	82. $P_3'1c'$	122. $P_6,2,1'$
5. $P_3,1'$	42. $P_3,2,21'$	83. P_31c'	123. $P_6,2'$
6. $P_3,1$	43. $P_3,2'21$	84. P_31c	124. $P_6,2$
(145) 7. $P_3,2$	44. $P_3,2,21$	(164) 85. P_3m1	(172) 125. $P_6,4$
8. $P_3,2,1'$	(155) 45. R_32	86. P_3m1'	126. $P_6,4,1'$
9. $P_3,2$	46. R_321'	87. $P_3'm1$	127. $P_6,4$
(146) 10. R_3	47. R_32'	88. $P_3'm'1$	128. $P_6,4$
11. R_31'	48. R_32	89. $P_3m'1$	(173) 129. $P_6,3$
12. R_3	C_{3v}	90. P_3m1	130. $P_6,3,1'$
(147) 13. P_3	(156) 49. P_3m1	(165) 91. P_3c1	131. $P_6,3$
14. P_31'	50. P_3m1'	92. P_3c1'	132. $P_6,3$
15. P_3'	51. $P_3m'1$	93. $P_3'c1$	C_{3h}
16. P_3	52. P_3m1	94. $P_3'c'1$	(174) 133. P_6
(148) 17. R_3	(157) 53. P_31m	95. $P_3c'1$	134. $P_6,1'$
18. R_31'	54. $P_31'm$	96. P_3c1	135. P_6'
19. R_3'	55. P_31m'	(166) 97. R_3m	136. P_6
20. R_3	56. P_31m	98. R_3m1'	
	(158) 57. P_3c1	99. $R_3'm$	C_{6h}
	58. P_3c1'	100. $R_3'm'$	(175) 137. P_6/m
	59. $P_3c'1$	101. R_3m'	138. $P_6/m1'$
	60. P_3c1	102. R_3m	
		(167) 103. R_3c	



139. $P6/m$	183. $P6_32'$	225. $P\bar{6}2'm'$	271. $P6_3/m'm'e'$
140. $P6/m'$	184. P_66_322	226. $P_6\bar{6}2m$	272. P_66_3/mmc
141. $P6'/m'$			
142. P_66/m	C_{6h}	(190) 227. $P\bar{6}2c$	Cubic system
(176) 143. $P6_3/m$	(183) 185. $P6mm$	228. $P\bar{6}2c1'$	
144. $P'6_3/m1'$	186. $P'6mm1'$	229. $P\bar{6}'2'c$	T
145. $P'6_3/m$	187. $P'6'm'm$	230. $P\bar{6}'2c'$	
146. $P'6_3/m'$	188. $P'6'mm'$	231. $P\bar{6}'2'c'$	(195) 1. $P23$
147. $P'6_3/m'$	189. $P'6m'm'$	232. $P_6\bar{6}2c$	2. $P23'$
148. P_66_3/m	190. P_66mm		3. P_123
		D_{6h}	
D_6	(184) 191. $P6cc$	(191) 233. $P'6'/mnm$	(196) 4. $F23$
(177) 149. $P622$	192. $P6ccl'$	234. $P'6'/mnm1'$	5. $F23'$
150. $P6221'$	193. $P6'c'c'$	235. $P'6'/m'nm$	6. $F23$
151. $P6'2'2'$	194. $P6'cc'$	236. $P'6'/mnm'm$	
152. $P6'22'$	195. $P6c'c'$	237. $P'6'/nmnm'$	(197) 7. $I23$
153. $P62'2'$	196. P_66cc	238. $P'6'/m'm'm$	8. $I23'$
154. P_6222		239. $P'6'/m'mm'$	
	(185) 197. $P6_3cm$	240. $P'6'/m'm'm'$	(198) 9. $P2_13$
(178) 155. $P6_122$	198. $P6_3cm1'$	241. $P'6'/m'm'm'$	10. $P2_13'$
156. $P6_1221'$	199. $P6_3'cm$	242. P_66'/mnm	11. P_12_13
157. $P6_1'2'2'$	200. $P6_3'cm'$		
158. $P6_1'22'$	201. $P6_3'c'm'$	(192) 243. $P6'mcc$	(199) 12. $I2_13$
159. $P6_1'2'2'$	202. P_66_3cm	244. $P6'mccl'$	13. $I2_13'$
160. P_66_122		245. $P6'm'cc$	
	(186) 203. $P6_3mc$	246. $P6'jm'c'c$	T_h
(179) 161. $P6_222$	204. $P6_3mcl'$	247. $P6'jmcc'$	
162. $P6_2221'$	205. $P6_3'm'c$	248. $P6'/m'i'c'c'$	(200) 14. $Pm3$
163. $P6_2'2'2'$	206. $P6_3'mc'$	249. $P6'/m'cc'$	15. $Pm3'$
164. $P6_2'22'$	207. $P6_3'm'c'$	250. $P6'jm'c'c'$	16. $Pm'3$
165. $P6_2'2'2'$	208. P_66_3mc	251. $P6'/m'c'c'$	17. P_1m3
166. P_66_222		252. $P_66'jmcc$	
	D_{3h}		(201) 18. $Pn3$
(180) 167. $P6_322$	(187) 209. $P\bar{6}m2$	(193) 253. $P6_3/mcm$	19. $Pn3'$
168. $P6_2221'$	210. $P\bar{6}m21'$	254. $P6_3'/mcm1'$	20. $Pn'3$
169. $P6_2'2'2'$	211. $P\bar{6}'m'2$	255. $P6_3'/m'cm$	21. P_1n3
170. $P6_2'22'$	212. $P\bar{6}'m'2'$	256. $P6_3'/m'c'm$	
171. $P6_2'2'2'$	213. $P\bar{6}'m'2'$	257. $P6_3'/mcm'$	(202) 22. $Fm3$
172. P_66_222	214. $P_6\bar{6}m2$	258. $P6_3'/m'c'm$	23. $Fm3'$
		259. $P6_3'/m'cm'$	24. $Fm'3$
(181) 173. $P6_422$	(188) 215. $P\bar{6}c2$	260. $P6_3'/m'c'm'$	25. F_1m3
174. $P6_4221'$	216. $P\bar{6}c21'$	261. $P6_3'/m'c'm'$	
175. $P6_4'2'2'$	217. $P\bar{6}'c'2$	262. P_66_3/mcm	(203) 26. $Fd3$
176. $P6_4'22'$	218. $P\bar{6}'c'2'$		27. $Fd3'$
177. $P6_4'2'2'$	219. $P\bar{6}'c'2'$	(194) 263. $P6_3'/mme$	28. $Fd'3$
178. P_66_422	220. $P_6\bar{6}c2$	264. $P6_3'/mme1'$	29. F_1d3
		265. $P6_3'/m'mc$	
(182) 179. $P6_322$	(189) 221. $P\bar{6}2m$	266. $P6_3'/m'm'c$	(204) 30. $Im3$
180. $P6_2221'$	222. $P\bar{6}2m1'$	267. $P6_3'/m'mc'$	31. $Im3'$
181. $P6_2'2'2'$	223. $P\bar{6}'2'm$	268. $P6_3'/m'm'c'$	32. $Im'3$
182. $P6_2'2'2'$	224. $P\bar{6}'2'm'$	269. $P6_3'/m'm'c'$	
		270. $P6_3'/m'm'c'$	(205) 33. $Pa3$



34. $Pa3'$	62. P_1A_132	(220) 89. $I\bar{4}3d$	118. $Fm'3m$
35. $Pa'3$	(213) 63. $P4_132$	90. $I\bar{4}3'd$	119. $Fm3m'$
36. P_1a3	64. $P4_13'2$	91. $I\bar{4}'3d'$	120. $Fm'3m'$
(206) 37. $Ia3$	65. $P4_1'32'$		121. F_2m3m
38. $Ia3'$	66. P_1A_132	O_h	(226) 122. $Fm3c$
39. $Ia'3$	(214) 67. $I4_132$	(221) 92. $Pm3m$	123. $Fm3'c$
O	68. $I4_13'2$	93. $Pm3'm$	124. $Fm'3c$
(207) 40. $P432$	69. $I4_1'32'$	94. $Pm'3m$	125. $Fm3c'$
41. $P43'2$		95. $Pm3m'$	126. $Fm'3c'$
42. $P4'32'$	T_d	96. $Pm'3m'$	127. F_2m3c
43. P_1432	(215) 70. $P\bar{4}3m$	97. P_1m3m	(227) 128. $Fd3m$
(208) 44. $P4_232$	71. $P\bar{4}'3m'$	(222) 98. $Pn3n$	129. $Fd3'm$
45. $P4_23'2$	72. $P\bar{4}'3m'$	99. $Pn3'n$	130. $Fd'3m$
46. $P4_2'32'$	73. $P_1\bar{4}3m$	100. $Pn'3n$	131. $Fd3ni'$
47. P_1A_232	(216) 74. $F\bar{4}3m$	101. $Pn3n'$	132. $Fd'3m'$
(209) 48. $F432$	75. $F\bar{4}'3m'$	102. $Pn'3n'$	133. F_d3m
49. $F43'2$	76. $F\bar{4}'3m'$	103. P_1n3n	(228) 134. $Fd3c$
50. $F4'32'$	77. $F_2\bar{4}3m$	(223) 104. $Pm3n$	135. $Fd3'c$
51. F_2432	(217) 78. $I\bar{4}3m$	105. $Pm3'n$	136. $Fd'3c$
(210) 52. $F4_132$	79. $I\bar{4}'3m'$	106. $Pm'3n$	137. $Fd3c'$
53. $F4_13'2$	80. $I\bar{4}'3m'$	107. $Pm3n'$	138. $Fd'3c'$
54. $F4_1'32'$	(218) 81. $P\bar{4}3n$	108. $Pm'3n'$	139. F_d3c
55. F_24_132	82. $P\bar{4}'3n$	109. P_1m3n	(229) 140. $Im3m$
(211) 56. $I432$	83. $P\bar{4}'3n'$	(224) 110. $Pn3m$	141. $Im3'm$
57. $I43'2$	84. $P_1\bar{4}3n$	111. $Pn3'm$	142. $Im'3m$
58. $I4'32'$	(219) 85. $F\bar{4}3c$	112. $Pn'3m$	143. $Im3m'$
(212) 59. $P4_132$	86. $F\bar{4}'3c'$	113. $Pn3m'$	144. $Im'3m'$
60. $P4_13'2$	87. $F\bar{4}'3c'$	114. $Pn'3m'$	(230) 145. $Ia3d$
61. $P4_1'32'$	88. $F_2\bar{4}3c$	115. P_1n3m	146. $Ia3'd$
		(225) 116. $Fm3m$	147. $Ia'3d$
		117. $Fm3'm$	148. $Ia3d'$
			149. $Ia'3d'$

REFERENCE :

1. N.V. Belov, N.N. Neronova and T.S. Smirnova, Sov.

Phys. Crystallography 2, 311 (1957).



ANNEXE 2

COMMUNICATIONS

Applicability of the Landau theory of phase transitions to magnetically ordered systems:P.Tolédano,M.Clin et M.Hédoux.Communication présentée au 5^{eme} congrès international de Ferroélectricité (Université de Pensylvanie,Août 1981)

A new type of magnetostructural phase transition:M.Clin,M.Hédoux et P.Tolédano. Communication à présenter au 5^{eme} congrès Européen de Ferroélectricité (Torremolinos Espagne,Septembre 1983)

APPLICABILITY OF THE LANDAU THEORY OF PHASE TRANSITIONS TO MAGNETICALLY ORDERED SYSTEMS*

PIERRE TOLÉDANO, MARTIAL CLIN and MICHEL HÉDOUX
Groupe de Physique Théorique, Faculté des Sciences, 80000-Amiens (France)

The procedure one has to use to apply the Landau theory of phase transitions to magnetic systems is presented. Two cases are considered: (1) transitions from a paramagnetic phase to a ferromagnetic, antiferromagnetic, ferrimagnetic or helicoidal antiferromagnetic phase; (2) transition from a ferromagnetic or antiferromagnetic phase towards the various types of spin arrangements. It is shown that in most cases the knowledge of the space-group irreducible representation of the high-temperature phase is sufficient to infer the order-parameter symmetries, the free-energy expansion and the Shubnikov groups stable or low-temperature.

The thermodynamic part of the theory of second-order phase transitions has been successfully applied by Landau and Lifshitz to the qualitative investigation of ferromagnetic and antiferromagnetic substances. Along the same line Dzialoshinskii² has explained the phenomenological features of weak ferromagnetism, latent antiferromagnetism and helicoidal antiferromagnetism. A Landau thermodynamic theory has also been used to describe the various magnetic phases which have been found more recently.³ On the contrary, very few studies have resorted fully to the symmetry aspects of the Landau theory. With the exception of the early works of Kovalev,⁴ the theoretical analysis of the symmetry changes occurring at magnetic phase transitions have been restricted either to the recalling of the basic principles for their partial description⁵⁻⁷ (such as the point-group modification) or to apply these principles to specific structures requiring an incomplete use of the symmetry criteria contained in the theory.^{8,9} Such a situation relies partly on the fact that the specific procedure one has to use to apply the Landau theory to magnetic structures has not been completely explicit in the same practical manner than for structural transitions.¹⁰ In this way, one has to use Shubnikov groups¹¹ and their corepresentations¹² (and likewise, further generalizations of these concepts)¹³ which have been shown to be the suitable tools for the description of magnetic phase transitions.¹⁴

In this paper we describe a procedure which allows one to determine the order-parameter symmetries of magnetic transitions taking place from a paramagnetic, ferromagnetic or antiferromagnetic phase. The detailed group-theoretical arguments underlying the various statements and theoretical examples will be given elsewhere.¹⁵

I. MAGNETIC TRANSITIONS FROM A PARAMAGNETIC PHASE

Let us first consider the case of transitions which take place from a paramagnetic high-temperature phase. The full invariance group of this phase can be written¹⁹:

$G = H + H.R$ where H is the space-group of the non-magnetic crystal (Fedorov group), and R the time-reversal operator. The standard procedure^{6,10,18,19} to determine the stable magnetic phases which can arise at low-temperature below a phase transition of the second kind is: 1) to select the irreducible corepresentations of G complying to the Landau and Lifshitz conditions¹⁸ 2) For each of the preceding "active" corepresentations, to construct the corresponding free-energy expansion F made up of invariants of the order-parameter components η_i . 3) To find the set of component values η_i^0 for which F is an absolute minimum. 4) For each set of η_i^0 to identify the subgroups of G

leaving invariant the magnetic density axial vector $M(\vec{r})$ expanded as a function of the basic functions of the corepresentation space.

Though each of the preceding operations has been well clarified^{14,20} this procedure remains cumbersome because most of the required material related to corepresentations is still unavailable. However it can largely be avoided following a method suggested by Kovalev⁴, which involves exclusively the use of the irreducible representations (IR) of the non-magnetic space group H. The advantage of such a simplification being that the large amount of theoretical results which have been obtained by the application of the Landau theory to structural transitions²¹ can almost directly be transposed for magnetic ones. More precisely one can find in ref. 21 for the active IR's of each of the 230 space-groups, the corresponding free-energy expansion and the set of values of the order-parameter components associated to the stable low-temperature states. Thus, using these data, one has only to identify the magnetic group corresponding to a given IR by the method which is detailed hereunder.

Let τ_1 be an active IR of H. The magnetic groups induced by τ_1 can be shared in two families. 1) Antiferromagnetic groups G_i of type IV¹⁹ which possess a magnetic lattice and only space-group operations forming a subgroup of H. As the subgroups of H induced by τ_1 can be found in ref. 21, we only have to determine the magnetic lattice of G_i . This lattice corresponds to the combinations of the time-reversal operator R with the elementary translations of the crystal lattice of H, leaving invariant the magnetic density M. In Table I are listed paramagnetic-antiferromagnetic transitions of this type taking place in the mmm class.

2) Ferro or antiferromagnetic groups G_i^1 of type III which can be written¹⁹:

$$G_i^1 = H_i^1 + (H - H_i^1).R$$
 where H_i^1 is a halving subgroup of H. The lattice of the G_i^1 groups is non-magnetic and can thus be obtained from ref. 21. The operations of G_i^1 which are not pure translations coincide with the combinations of the time-reversal operator R and the elements of H of the form (g/t_g) (with g belonging to the point group of H) leaving invariant the magnetic density M. Table II gives examples of such transitions. It must be pointed out that one has also to take into account as "magnetically active" the IR's of H discarded by the Landau condition¹⁸ as the odd invariants existing in the free-energy of the structural transition vanish for the magnetic one⁶.

In Table III are listed magnetic transitions taking place from the paramagnetic group $P6_3/mmc1'$. This group has been also considered by Kovalev⁴. Our results differ from those given in his work, because we do not take into account a selection criterion which eliminates IR's involving a non-zero magnetic density at the points of space where atoms are located⁴. Actually this condition is connected to the specific materialization of the $P6_3/mmc$ space group considered by this author (the hexagonal closest packing) and can be avoided in the general case. In the same way we do not eliminate, as Kovalev does, the stable states corresponding to a magnetic structure in which the magnetic moment of different atoms are not of equal length, as it should correspond to ferrimagnetism or to the various types of canted ferromagnetism¹. These later structures cannot be described by a single magnetic group but make necessary to recourse to two -or more- Shubnikov groups, each one describing a sublattice arrangement with magnetic moments of equal length.

For transitions towards an helicoidal phase the IR's violating the Lifshitz condition must be considered¹. If the magnetic moment turns discontinuously the helical structure can be described by generalized Shubnikov groups¹³. If on the contrary, the incommensuration is continuous one has to use magnetic groups in spaces of dimension higher than three²².

II. TRANSITIONS FROM A MAGNETIC PHASE

When the high temperature phase is described by an antiferromagnetic group of type IV, the procedure which has to be followed to apply the Landau theory, is similar

TABLE I Transitions from a paramagnetic phase towards magnetic groups of type IV. The images (Im) and free-energies (F.E.) labeling are taken from Ref. 21. The IR and Brillouin zone points notation is the same as in Ref. 23.

Paramagnetic group	B.Z point	Antiferromagnetic groups	Crystal and magnetic translations	O.P dim	Stable solutions	Im F.E
Pnmm1'	Z	$P_{2mm}(T_1, T_6), P_{2ccm}(T_4, T_5)$ $P_{2mna}(T_2, T_3, T_4, T_7)$	$\begin{bmatrix} \vec{e}_1, \vec{e}_2, 2\vec{e}_1 \\ R\vec{e}_1 \end{bmatrix}$	1	1	a F ₁
	S	$C_{2mm}(T_1, T_4, T_5, T_7)$ $C_{2ma}(T_2, T_3, T_5, T_6)$	$\begin{bmatrix} \vec{e}_1 + \vec{e}_2, \vec{e}_1 - \vec{e}_2, \vec{e}_1 \\ R\vec{e}_1, R\vec{e}_2 \end{bmatrix}$	1	1	a F ₁
Pnnn1'	R	$F_{2dd}(T_1, T_6)$	$\begin{bmatrix} \vec{e}_1 + \vec{e}_2, \vec{e}_1 + \vec{e}_3, \vec{e}_2 + \vec{e}_3 \\ R\vec{e}_1, R\vec{e}_2, R\vec{e}_3 \end{bmatrix}$	1	1	a F ₁
Pccm1'	X	$P_{2ccm}(T_1, T_6), P_{2ban}(T_2, T_5)$ $P_{2cca}(T_3, T_4), P_{2cna}(T_4, T_7)$	$\begin{bmatrix} 2\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_1 \\ R\vec{e}_1 \end{bmatrix}$	1	1	a F ₁
	Y	$P_{2ccm}(T_1, T_6), P_{2cca}(T_2, T_5)$ $P_{2ban}(T_3, T_4), P_{2cna}(T_4, T_7)$	$\begin{bmatrix} \vec{e}_1, 2\vec{e}_2, \vec{e}_1 \\ R\vec{e}_2 \end{bmatrix}$	1	1	a F ₁
Pmm1'	T	$C_{2mc}(T_1, T_2, T_3, T_6)$ $C_{2ca}(T_1, T_4, T_5, T_6)$	$\begin{bmatrix} \vec{e}_2 + \vec{e}_3, \vec{e}_2 - \vec{e}_1, \vec{e}_1 \\ R\vec{e}_1, R\vec{e}_2 \end{bmatrix}$	1	1	a F ₁
Pmm1'	R	$(C_2/m, C_2/c)(T_1, T_2)$	$\begin{bmatrix} \vec{e}_1 + \vec{e}_2, \vec{e}_1 - \vec{e}_3, \vec{e}_2 + \vec{e}_3 \\ R\vec{e}_1, R\vec{e}_2, R\vec{e}_3 \end{bmatrix}$	2	(10)(11)	b F ₄
	U	$(C_2/m, C_2/c)(T_1, T_2)$	$\begin{bmatrix} \vec{e}_1 + \vec{e}_2, \vec{e}_1 - \vec{e}_3, \vec{e}_2 \\ R\vec{e}_1, R\vec{e}_2 \end{bmatrix}$	2	(10)(11)	b F ₄
Pccn1'	R	$C_2/m(T_1 + T_2, T_3 + T_4, T_5 + T_7, T_6 + T_8)$	$\begin{bmatrix} \vec{e}_1 + \vec{e}_2, \vec{e}_1 - \vec{e}_3, \vec{e}_2 + \vec{e}_3 \\ R\vec{e}_1, R\vec{e}_2, R\vec{e}_3 \end{bmatrix}$	2	(11)	c F ₃
	S	$(C_2/c2, P_2/c)(T_1, T_2)$	$\begin{bmatrix} \vec{e}_1 + \vec{e}_2, \vec{e}_1 - \vec{e}_3, \vec{e}_1 \\ R\vec{e}_1, R\vec{e}_2 \end{bmatrix}$	2	(10)(11)	b F ₄
Pbca1'	R	$P_2\bar{1}(T_1 + T_2, T_3 + T_4)$	$\begin{bmatrix} \vec{e}_1 + \vec{e}_2, \vec{e}_1 + \vec{e}_3, \vec{e}_2 + \vec{e}_3 \\ R\vec{e}_1, R\vec{e}_2, R\vec{e}_3 \end{bmatrix}$	4	(nξn'ξ')	13J F ₁₃
Pmm1'	U	$P_2/m(T_1 + T_2, T_3 + T_4)$ $P_2/c(T_1 + T_2, T_3 + T_4)$	$\begin{bmatrix} \vec{e}_1 + \vec{e}_2, \vec{e}_1 - \vec{e}_3, \vec{e}_2 \\ R\vec{e}_1, R\vec{e}_2 \end{bmatrix}$	2	(11)	c F ₃
	T	$(C_2/mc2_1, P_2/c)(T_1, T_2)$	$\begin{bmatrix} \vec{e}_1, \vec{e}_2 + \vec{e}_3, \vec{e}_2 - \vec{e}_3 \\ R\vec{e}_1, R\vec{e}_2 \end{bmatrix}$	2	(10)(11)	b F ₄

TABLE II Transitions from a paramagnetic phase towards magnetic groups of type III. All the IR are at the Brillouin zone center.

Paramagnetic group	Ferro or Antiferromagnetic groups
Pnmm1'	$Pnmm(T_1), Pm'mm(T_6, T_7, T_8), Pm'm'm(T_2, T_3, T_4), Pm'm'm'(T_5)$
Pnnn1'	$Pnnn(T_1), Pn'nn(T_6, T_7, T_8), Pn'n'n(T_2, T_3, T_4), Pn'n'n'(T_5)$
Pccm1'	$Pccm(T_1), Pc'cm(T_6, T_7), Pccm'(T_8), Pc'c'm(T_4), Pc'c'm'(T_2, T_3), Pc'c'm'(T_5)$
Pban1'	$Pban(T_1), Pb'an(T_6, T_7), Pban'(T_8), Pb'a'n(T_2, T_3), Pb'a'n'(T_5)$
Pmma1'	$Pmma(T_1), Pm'ma(T_6), Pm'm'a(T_7), Pmma'(T_8), Pm'm'a'(T_4), Pm'm'a'(T_2), Pm'm'a'(T_3), Pm'm'a'(T_5)$
Pnna1'	$Pnna(T_1), Pn'na(T_6), Pn'n'a(T_7), Pnna'(T_8), Pn'n'a'(T_4), Pn'n'a'(T_2), Pn'n'a'(T_3), Pn'n'a'(T_5)$
Pana1'	$Pana(T_1), Pm'na(T_6), Pm'n'a(T_7), Pnaa'(T_8), Pm'n'a'(T_4), Pm'n'a'(T_2), Pm'n'a'(T_3), Pm'n'a'(T_5)$
Pcca1'	$Pcca(T_1), Pc'ca(T_6), Pcc'a(T_7), Pcca'(T_8), Pc'c'a(T_4), Pcc'a'(T_2), Pc'c'a'(T_3), Pc'c'a'(T_5)$
Pbam1'	$Pbam(T_1), Pb'am(T_6, T_7), Pbam'(T_8), Pb'a'm(T_4), Pb'a'm'(T_2, T_3), Pb'a'm'(T_5)$
Pccn1'	$Pccn(T_1), Pc'cn(T_6, T_7), Pccn'(T_8), Pc'c'n(T_4), Pc'c'n'(T_2, T_3), Pc'c'n'(T_5)$
Pnrm1'	$Pnrm(T_1), Pn'rm(T_6, T_7), Pnrm'(T_8), Pn'n'm(T_4), Pn'n'm'(T_2, T_3), Pn'n'm'(T_5)$
Pmnm1'	$Pmnm(T_1), Pm'mn(T_6, T_7), Pmnm'(T_8), Pm'm'n(T_4), Pm'm'n'(T_2, T_3), Pm'm'n'(T_5)$
Pbca1'	$Pbca(T_1), Pb'c'a(T_2, T_3, T_4), Pb'c'a'(T_5), Pb'ca(T_6, T_7, T_8)$
Pnma1'	$Pnma(T_1), Pn'm'a'(T_2), Pn'm'a'(T_3), Pn'm'a'(T_4, T_5), Pn'm'a(T_6), Pn'm'a(T_7), Pnma'(T_8)$

APPLICABILITY OF THE LANDAU THEORY OF PHASE TRANSITIONS



TABLE III Transitions from the $P6_3/mnc1'$ group. Same conventions as for Table I. The F.E. forms are given explicitly.

B Z point	Low-symmetry magnetic groups	Lattice translations	Stable solutions	O.P. dim	Im.	F.E.	
M $\vec{k} = \frac{4\pi}{3a'}\frac{2\pi}{3a}, 0$	$P_{Cnm}(T_1), P_{Cbcn}(T_2), P_{Cnnc}(T_3), P_{Cnma}(T_4)$ $P_{Cnma}(T_5), P_{Cnnc}(T_6), P_{Cbcn}(T_7), P_{Cnma}(T_8)$	$2\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$ $R\vec{t}_1$	(100)	3	(O_H)	F_1	
	$P6_3/mnc(T_1), P6_3/m'm'c(T_2), P6_3/m'mc'(T_3)$ $P6_3/m'mc'(T_4), P6_3/m'm'c'(T_5), P6_3/m'mc'(T_6)$ $P6_3'/m'm'c(T_7), P6_3'/m'mc(T_8)$	$2\vec{t}_1, 2\vec{t}_2, \vec{t}_3$	(111)				
$F_1 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \eta_i^2 + \frac{3}{4} \sum_{i=1}^3 \eta_i^4 + \frac{\xi_2}{2} \sum_{i < j=1,3}^4 \eta_i^2 \eta_j^2$							
K $\vec{k} = \frac{4\pi}{3a}, 0, 0$	$(P6_3/mnc, P6_3'/m'm'c)(T_1)$ $(P6_3/m'm'c, P6_3'/m'mc')(T_2)$ $(P6_3'/m'm'c, P6_3'/m'mc')(T_4)$ $(P6_3'/m'mc, P6_3'/m'm'c)(T_5)$	$\vec{t}_1 - \vec{t}_2$ $\vec{t}_1 + 2\vec{t}_2$ \vec{t}_3	(10)(01)	2	(C_{6v})	F_2	
	$F_2 = \frac{\alpha}{2} \rho^2 + \frac{\beta}{4} \rho^4 + \frac{\gamma}{6} \rho^6 + \frac{\delta}{8} \rho^8 + \frac{\epsilon}{10} \rho^{10} + \frac{\xi_1}{12} \rho^{12} + \frac{\xi_2}{12} \rho^{12} \cos 12\phi$ $\eta_1 = \rho \cos \phi$ $\eta_2 = \rho \sin \phi$						
Γ $\vec{k} = 0, 0, 0$	$P6_3/mnc(T_1), P6_3'/m'm'c(T_2), P6_3'/m'mc'(T_3)$ $P6_3'/m'm'c(T_4), P6_3'/m'm'c'(T_7), P6_3'/m'mc(T_8)$ $P6_3'/m'm'c(T_9), P6_3'/m'mc'(T_{10})$	$\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$		1	1	(C_4)	F_3
	$(Cmc'm', Cn'cn')(T_5), (Cmccn, Cn'c'm)(T_6)$ $(Cn'c'n, Cn'c'm)(T_{11}), (Cn'c'm', Cn'c'm')(T_{12})$	$\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$	(10)(01)	2	(C_{6v})	F_2	
$F_3 = \frac{\alpha}{2} \eta^2 + \frac{\beta}{4} \eta^4$							
A $\vec{k} = 0, 0, \frac{\pi}{c}$	$(P_{C31m}, P_{C62m})(T_1)$ $(P_{C31c}, P_{C62c})(T_2)$	$\vec{t}_1, \vec{t}_2, 2\vec{t}_3$ $R\vec{t}_3$	(10)(11)	2	(C_{4v})	F_4	
	$F_4 = \frac{\alpha}{2} (\eta_1^2 + \eta_2^2) + \frac{\beta}{4} (\eta_1^4 + \eta_2^4) + \frac{\beta_2}{2} \eta_1^2 \eta_2^2$						

to the one used for a paramagnetic phase. The low-temperature magnetic group is necessarily of type IV, with a change in the crystal and magnetic lattices. The determination of the new low-temperature magnetic lattice involves simultaneously an identification of the new crystal cell, given in Ref. 21, and of the new magnetic lattice vectors which can be obtained by combining the time-reversal operator R with the elementary translations of the high-temperature crystal lattice. If, on the contrary, the high temperature phase is described by a magnetic group of type III, then one cannot avoid the explicit recourse to the use of corepresentations and to the standard general procedure which has been described in Section I.

In Table IV are listed transitions which illustrate the two preceding cases.

TABLE IV Transitions from a magnetic group of type III or IV.

High symmetry magnetic group	B Z point	Low-symmetry magnetic groups	Crystal and magnetic translations
P2'/m	Γ	P2'/m(τ ₁ , τ ₆), P1'(τ ₂ , τ ₇), P2'(τ ₃ , τ ₆), Pm(τ ₄ , τ ₅).	$\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$
	Γ	Pm'mm(τ ₁), P2'/m(τ ₂ , τ ₃ , τ ₄), P2'2'2(τ ₅), Pm'm2'(τ ₆ , τ ₇), Pmm2(τ ₈).	$\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$
	Z	Pm'mm(τ ₁ , τ ₆), Pmm'a(τ ₂ , τ ₇), Pmma'(τ ₃ , τ ₆), Pc'cm(τ ₄ , τ ₅).	$\left[\begin{array}{l} \vec{t}_1, \vec{t}_2, 2\vec{t}_3 \\ R\vec{t}_3 \end{array} \right.$
	S	Cm'mm(τ ₁ , τ ₄ , τ ₆ , τ ₇), Cm'ma(τ ₂ , τ ₃ , τ ₅ , τ ₈).	$\left[\begin{array}{l} \vec{t}_1 + \vec{t}_2, \vec{t}_1 - \vec{t}_2, \vec{t}_3 \\ R\vec{t}_1, R\vec{t}_2 \end{array} \right.$
Pm'mm	R	Fm'mm(τ ₁ , τ ₆).	$\left[\begin{array}{l} \vec{t}_1 + \vec{t}_2, \vec{t}_1 + \vec{t}_3, \vec{t}_2 + \vec{t}_3 \\ R\vec{t}_1, R\vec{t}_2, R\vec{t}_3 \end{array} \right.$
	Γ	P2/m(τ ₂), Pm'm'm(τ ₁), P2'/m'(τ ₃ , τ ₄), Pm'm'2(τ ₆), P2'2'2(τ ₅), Pm'm2'(τ ₇ , τ ₈).	$\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$
	Z	Pm'm'm(τ ₁ , τ ₆), Pmm'a'(τ ₂ , τ ₃ , τ ₆ , τ ₇), Pc'c'm(τ ₄ , τ ₅).	$\left[\begin{array}{l} \vec{t}_1, \vec{t}_2, 2\vec{t}_3 \\ R\vec{t}_3 \end{array} \right.$
	S	Cm'm'm(τ ₁ , τ ₄ , τ ₆ , τ ₇), Cm'm'a(τ ₂ , τ ₃ , τ ₅ , τ ₈).	$\left[\begin{array}{l} \vec{t}_1 + \vec{t}_2, \vec{t}_1 - \vec{t}_2, \vec{t}_3 \\ R\vec{t}_1, R\vec{t}_2 \end{array} \right.$
Pm'm'm	R	Fm'm'm(τ ₁ , τ ₆).	$\left[\begin{array}{l} \vec{t}_1 + \vec{t}_2, \vec{t}_1 + \vec{t}_3, \vec{t}_2 + \vec{t}_3 \\ R\vec{t}_1, R\vec{t}_2, R\vec{t}_3 \end{array} \right.$
	Γ	Pm'm'm'(τ ₁), P2/m'(τ ₂ , τ ₃ , τ ₄), P222(τ ₅), Pm'm'2(τ ₆ , τ ₇ , τ ₈).	$\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$
	Z	Pm'm'm'(τ ₁ , τ ₆), Pm'm'a'(τ ₂ , τ ₃ , τ ₆ , τ ₇), Pc'c'm'(τ ₄ , τ ₅).	$\left[\begin{array}{l} \vec{t}_1, \vec{t}_2, 2\vec{t}_3 \\ R\vec{t}_3 \end{array} \right.$
	S	Cm'm'm'(τ ₁ , τ ₄ , τ ₆ , τ ₇), Cm'm'a'(τ ₂ , τ ₃ , τ ₅ , τ ₈).	$\left[\begin{array}{l} \vec{t}_1 + \vec{t}_2, \vec{t}_1 - \vec{t}_2, \vec{t}_3 \\ R\vec{t}_1, R\vec{t}_2 \end{array} \right.$
Pm'm'm'	R	Fm'm'm'(τ ₁ , τ ₆).	$\left[\begin{array}{l} \vec{t}_1 + \vec{t}_2, \vec{t}_1 + \vec{t}_3, \vec{t}_2 + \vec{t}_3 \\ R\vec{t}_1, R\vec{t}_2, R\vec{t}_3 \end{array} \right.$
	Γ	P _a mmm(τ ₁), P _a 2/m(τ ₂ , τ ₃ , τ ₄), P _a 222(τ ₅), P _a mm2(τ ₆ , τ ₇ , τ ₈).	$\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$
	Z	P _b 2(τ ₁ +τ ₂), P _c 4 ₁ (τ ₃), P _c 4 ₃ (τ ₄).	$\left[\begin{array}{l} \vec{t}_1, \vec{t}_2, 2\vec{t}_3 \\ R\vec{t}_3 \end{array} \right.$
	Γ	P4m'm'(τ ₁), P4(τ ₂), Pm'm'2(τ ₃ , τ ₄), Pm'(τ ₅ , τ ₁).	$\vec{t}_1, \vec{t}_2, \vec{t}_3$

CONCLUSION

The method which has been given in this paper allows one to analyze, in the framework of the Landau theory, the transitions from a paramagnetic, ferromagnetic and antiferromagnetic phase. For transitions towards an helicoidal or canted magnetic structure a specific complementary procedure should be used.¹⁵

Theoretically and experimentally, magnetic transitions present a variety of situations which are not entirely encountered at structural transitions. Their symmetry and thermodynamic investigation should bring a deeper understanding of

the applicability of the Landau theory together with a more systematic knowledge of magnetic structures.

REFERENCES

1. L.D. Landau and E.M. Lifshitz, Electrodynamics of Continuous Media (Pergamon Press, Oxford, 1960).
2. I.E. Dzialoshinskii, Sov. Phys. JETP 5, 1259(1957); 6, 1120(1958); 19, 960(1964).
3. D. Deutges and G. Heber, Phys. Stat. Sol.(b) 101, 683(1980).
4. O.V. Kovalev, Sov. Phys. Sol. State 5, 2309(1964); 5, 2315(1969), 7, 77(1965).
5. J.O. Dimmock, Phys. Rev. 130, 1337(1963).
6. A.P. Cracknell, J. Lorenc and J.A. Przystava, J. Phys. C9, 1731(1976).
7. V.E. Naish, Izv. Akad. Nauk, SSSR, Ser. Fiz. 42, 1684(1978).
8. Yu.A. Izyumov, V.E. Naish and S.B. Petrov, J. Magn. Magnet. Mat. 13, 267(1979).
9. J. Solyom, J. de Physique, Supp. C1 32, 471(1971).
10. G.Ya. Lyubarskii, The Appl. of Group Theory in Physics(Pergamon Press, N.Y. 1960).
11. N.V. Belov, N.N. Neronova and T.S. Smirnova, Sov. Phys. Crystallography 2, 311(1957).
12. E.P. Wigner, Group Theory (Academic Press, New York, 1959).
13. A.M. Zamorzaev, Sov. Phys. Crystallography 12, 717(1968).
14. J.O. Dimmock and R.G. Wheeler, J. Phys. Chem. Solids 23, 729(1962).
15. P. Tolédano, M. Clin and M. Hedoux (to be published).
16. J.O. Dimmock, J. Math. Phys. 4, 1307(1963).
17. O.V. Kovalev, Irred. Rep. of the Space Groups (Gordon and Breach N.Y. 1965).
18. L.D. Landau and E.M. Lifshitz, Statistical Physics(Pergamon Press, Oxford 1958).
19. C.J. Bradley and A.P. Cracknell, The Mathematical Theory of Symmetry in Solids (Clarendon Press, Oxford 1972).
20. A.P. Cracknell and A.K. Sedaghat, J. Phys. C5, 977(1972)
21. P. Toledano and J.C. Toledano, Phys. Rev. B14, 3097(1976), B16, 386(1977), B21, 1139(1980) and to be published.
22. P.M. De Wolff, Acta Crystallographica A30, 777(1974).
23. J. Zak, A. Casher, H. Glück and Y. Gur, The Irreducible Representations of Space Groups (Benjamin, New York, 1969).

*As requested by two referees, the tables of this paper were enlarged and consequently the length increased to six pages in order to ensure better legibility.

A NEW TYPE OF MAGNETOSTRUCTURAL PHASE TRANSITION

M. Clin, M. Hédoux and P. Toledano

Groupe de Physique théorique, Faculté des Sciences d'Amiens

33, rue Saint-Leu, 80000 Amiens - France

We identify theoretically a new type of phase transition, which corresponds to the simultaneous onset of magnetical and structural orders. In this family of magnetostructural transitions, the magnetic cell is generally different from the crystallographic cell, and a breaking of translational symmetry should be observed for both the magnetic and structural lattices. Accordingly the transition is improper either with respect to the magnetization or regarding the non-magnetic spontaneous components (polarization, strain or higher order polar tensors) resulting from the structural modification. In the framework of the Landau theory of phase transitions, it is shown that only multidimensional representations associated to a little number of Brillouin zone boundary points, may induce such transitions. Thus, their essential phenomenological properties are established, namely the order-parameter symmetries, the free-energy forms, the non-linear couplings of the order-parameter with magnetic and non-magnetic macroscopic components, and the temperature variation of the magnetic and dielectric susceptibilities. The theoretical situation of transitions which could be structurally first-order and magnetically second-order is pointed out. As a possible illustrative example, the 64 K transition in nickel-iodine Boracite is discussed.

RESUME

Le travail présenté dans cette thèse consiste en l'application de la théorie de Landau des transitions de phases du second ordre aux transitions ferromagnétiques et antiferromagnétiques, se produisant à partir d'une phase paramagnétique. Ce travail conduit à établir des tables qui fournissent les changements de symétrie magnétiques et les énergies libres associées à chacune des coreprésentations irréductibles "actives" des 230 groupes "gris" paramagnétiques. Les résultats obtenus permettent, par comparaison avec les données expérimentales, de vérifier ainsi l'applicabilité de la théorie de Landau aux transitions magnétiques.

MOTS-CLES

THEORIE LANDAU
SYMETRIE
TRANSITION MAGNETIQUE
TRANSITION PHASE
FERROMAGNETISME
ANTIFERROMAGNETISME