N° d'ordre : 1045

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE 3ème CYCLE

par

Marc GUILLUY

PROPRIETES DE SYMETRIE DES PHASES INCOMMENSURABLES

Soutenue le 8 Juin 1983 devant la Commission d'examen

Président	R.	FOURET	Professeur, Université de Lille 1
Examinateurs	S.	AUBRY	Maître de recherche C.N.R.S.
	R.	CURRAT	Maître de recherche C.N.R.S.
	G.	LEBEGUE	Professeur, Université de Picardie
Rapporteur	P.	TOLEDANO	Maître-Assistant, Université de Picardie

REMERCIEMENTS

Monsieur R. FOURET, a bien voulu présider le Jury de cette Thése et montrer un intérêt particulier à mon travail. Je lui en suis profondément reconnaissant.

Je remercie Madame LEBEGUE, qui après m'avoir accueilli comme membre de son groupe, a permis, par la confiance qu'elle m'a accordée, que ce travail soit mené à bien.

- Monsieur S. AUBRY et Monsieur R. CURRAT qui ont bien voulu examiner ce travail et accepter de participer au Jury.

- et particulièrement Monsieur P. TOLEDANO, qui après m'avoir proposé le sujet de cette Thèse, a permis, par une aide constante et des conseils attentifs, de mener à bien ce travail.

J'exprime enfin ma sincère reconnaissance à Madame COIRET, qui s'est chargée avec talent et diligence de la frappe du Manuscrit.

***

S O M M A I R E

INTRODUCTION

Les études expérimentales effectuées sur des matériaux qui possédent des phases incommensurables se sont développées de façon intensive au cours des dix dernières années. Bien qu'elles portent encore sur un nombre réduit de familles structurales, ces études ont apporté des indications nombreuses qui fournissent un support matériel substantiel aux théories physiques. Ainsi plusieurs modèles microscopiques ont été proposés [1-4] qui montrent qu'un ordre incommensurable peut s'établir, résultant de la compétition entre deux types d'interactions antagonistes. Dans un premier type de modèle, du type Ising anisotrope, des interactions ferromagnétiques entre plus proches voisins et antiferromagnétiques entre deuxièmes voisins sont prises en compte [1-2]. Des modèles de "dynamique de réseau" considèrent pour leur part des oscillateurs anharmoniques avec interactions harmoniques de signes opposés entre plus proches voisins et voisins éloignés [3]. Enfin le modèle d'Aubry consiste en un réseau soumis à un potentiel périodique incommensurable avec le pas du réseau [4].

Les théories précédentes fournissent en général une interprétation qualitative des propriétés "standards" des phases incommensurables, telles l'apparition de l'incommensurabilité au dessous d'une transition continue, le domaine de stabilité limité en température de la phase incommensurable qui disparait lors d'une transition d'ancrage discontinue, ou la variation avec la température du vecteur d'onde $\vec{k}$. Certaines d'entre elles permettent également d'interpréter des propriétés observées moins fréquemment comme l'absence de transition d'ancrage, des ancrages partiels ou successifs, une succession de phases incommensurables avec des modulations distinctes ou simultanées, l'apparition de l'incommensurabilité au dessous d'une transition possédant certaines caractéristiques habituellement attribuées aux transitions du premier ordre (hystérésis thermique, effet de mémoire ...), la non variation du vecteur d'onde avec la température.

La plupart des propriétés expérimentales des phases incommensurables trouvent également une interprétation satisfaisante dans le cadre d'une théorie de Landau généralisée [5-6]. Ce type de théorie, dans laquelle les arguments de symétrie sont essentiels, décrit le système à l'aide d'une énergie libre-qui se présente ici comme la somme sur tout le volume du cristal d'une densité d'énergie dépendant du point- dont la minimisation fournit les états stables successifs (commensurables et incommensurables). Bien qu'elle possède des limitations inhérentes aux modèles phénoménologiques -les mécanismes microscopiques ne sont pas pris en compte, les résultats fournissent l'ensemble des situations possibles et non celles réalisées effectivement par le système- la théorie de Landau des phases incommensurables a été utilisée de façon trés fréquente, révélant une puissance d'interprétation surprenante. Cette capacité d'interpréter, parfois de façon trés détaillée, le comportement des systèmes subissant des transitions de phases, réside dans le fait que les concepts thermodynamiques et de symétrie qui constituent la théorie de Landau, concentrent une quantité d'informations et de précisions plus importantes que ne le suggère son apparente simplicité.

L'objet de cette thèse est d'illustrer les considérations précédentes en vérifiant d'une part, l'aptitude de la théorie de Landau à prédire des propriétés des phases incommensurables qui découlent de la symétrie des systèmes, d'autre part en prolongeant certains aspects de cette théorie. Au chapitre 1 nous rappelons les divers développements qui ont été suggérés au cours des dernières années, pour étendre la théorie de Landau à l'étude des phases incommensurables. Dans les chapitres 2 et 3 nous vérifions d'une manière systématique deux propriétés fondamentales de la théorie, à savoir le rôle essentiel joué par deux types d'invariants dans la densité d'énergie libre: les invariants anisotropes et les invariants contenant des dérivées des composantes du paramètre d'ordre par rapport aux coordonnées d'espace. Au chapitre 2 les cartes des points lignes et surfaces d'ancrage associés à des invariants anisotropes de degrés 3, 4 et 6 sont données pour les 14 zones de Brillouin. Au chapitre 3 un bilan est effectué des formes possibles de modulation dans les phases incommensurables (y compris les cas pathologiques). Enfin au chapitre 4 nous précisons les propriétés théoriques des diagrammes de phases et des points multicritiques dans les systèmes incommensurables, un domaine qui est encore peu connu expérimentalement.

CHAPITRE 1

THEORIE PHENOMENOLOGIQUE DES PHASES INCOMMENSURABLES

Dans ce chapitre, nous passons en revue les modèles phénomènologiques qui ont été proposés pour décrire les caractéristiques des phases incommensurables. Ces modèles consistent pour la plupart en une généralisation de certains aspects de la théorie de Landau des transitions de phases strictement cristallines.

Certains points particuliers, tels, l'étude des diagrammes de phases, la détermination des points multicritiques (Points de Lifshitz) où la description d'une succession de phases incommensurables, sont développés au chapitre 4.

a) Transition phase haute température-phase incommensurable et transition d'ancrage

Dans la théorie de Landau des transitions de phases cristallines, le coefficient α de l'invariant quadratique des composantes du paramètre d'ordre ne dépend que des variables extérieures (par exemple la température T) et non du vecteur d'onde $\vec{k}$. En effet celui-ci conserve une valeur fixe $\vec{k}_o$ qui correspond à un point de haute symétrie (de la surface ou du centre) de la zone de Brillouin du système considéré. La généralisation de la théorie de Landau aux phases incommensurables requiert de considérer également la variation de α en fonction du vecteur d'onde $\vec{k}$, puisque $\vec{k}$ varie dans la majorité des cas en fonction de la température : $\alpha[\vec{k}(T)]$.

De la variation de $\vec{k}(T)$ il découle que, dans la phase incommensurable, les composantes du paramètre d'ordre η_i varient en fonction des coordonnées d'espace x_k (k = 1, 2, 3) et de la température. L'énergie libre du cristal doit alors s'écrire comme la somme sur le volume du cristal d'une densité locale d'énergie ϕ[5]:

$$F = \int_V \phi \, dv \qquad (1)$$

Dans l'expression de ϕ doivent également figurer les dérivées successives des $\eta_i(x_k)$. On peut écrire :

$$\phi = \phi_1(\eta_i) + \phi_2(\eta_i, \frac{\partial^n \eta_j}{\partial x_k^n}) \qquad (2)$$

où $\phi_1(\eta_i)$ a la forme d'un développement classique de Landau du paramètre d'ordre. ϕ_2 contient des combinaisons des η_i avec leurs dérivées successives par rapport aux x_k . Les états stables du cristal sont donnés par les minima de F qui fournissent les valeurs d'équilibre $(\eta_i)_{eq}$ des composantes du paramètre d'ordre dans la phase incommensurable. La détermination des $(\eta_i)_{eq}$ qui minimisent (1) nécessite de résoudre un système d'équations non linéaires (Equations d'Euler-Lagrange) :

$$\sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \dot{\eta}_{i}, x_j}\right) = \frac{\partial \phi}{\partial \eta_i} \qquad (3)$$

où ($\dot{\eta}_i$,x_j) est la dérivée de η_i par rapport à x_j. La solution de (3) nécessite d'introduire des approximations adaptées à chaque cas particulier. Considérons à titre d'exemple le cas d'un paramètre d'ordre à deux composantes étudié par Levanyuk et Sannikov [6] où

$$\phi_1 = \frac{\alpha}{2}(\eta_1^2 + \eta_2^2) + \frac{\beta_1}{4}(\eta_1^2 + \eta_2^2)^2 + \frac{\beta_2}{4}[(\eta_1^2 - \eta_2^2)^2 - (2\eta_1\eta_2)^2]$$

$$\phi_2 = \delta\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial x} - \eta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial x}\right) + \frac{\sigma}{2}\left[\left(\frac{\partial \eta_1}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \eta_2}{\partial x}\right)^2\right]$$

Un passage en coordonnées polaires ($\eta_1 = \rho \cos\theta$, $\eta_2 = \rho \sin\theta$) donne la forme plus synthétique

$$\phi = \frac{\alpha}{2}\rho^2 + \frac{\beta_1}{4}\rho^4 + \frac{\beta_2}{4}\rho^4 \cos 4\theta - \delta\rho^2 \frac{\partial\theta}{\partial x} + \frac{\sigma}{2}\left[\left(\frac{\partial\rho}{\partial x}\right)^2 + \rho\left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)^2\right]$$

Les équations (3) s'écrivent alors :

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \phi}{\partial \dot{\rho}}\right) = \frac{\partial \phi}{\partial \rho}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \phi}{\partial \dot{\theta}}\right) = \frac{\partial \phi}{\partial \theta}$$

formules qui s'explicitent par

$$\frac{\partial}{\partial x}(\sigma\dot{\rho}) = \alpha\rho + \beta_1\rho^3 + \beta_2\rho^3 \cos 4\theta \ - 2\ \delta\rho\dot{\theta} + \sigma\rho\dot{\theta}^2$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(-\ \delta\rho^2 + \sigma\rho^2\dot{\theta}) = -\ \beta_2\rho^4 \sin 4\theta \qquad (4)$$

L'approximation faite par Levanyuk et Sannikov consiste à prendre une amplitude constante (ρ = cte). Les équations (4) deviennent pour $\beta_2 = 0$

$$\rho^2\ (-\ \delta + \sigma\dot{\theta}) = 0$$

$$\beta_1\rho^3 - 2\ \delta\rho\dot{\theta} + \sigma\rho\dot{\theta} = 0$$

le système se résout exactement et les solutions sont

$$\eta_1 = \rho_o \cos k_o x \qquad \eta_2 = \rho_o \sin k_o x \qquad (5)$$

$$k_o = \frac{|\delta|}{\sigma} \qquad \rho_o = \frac{\alpha_o - \alpha}{\beta_1} \quad \text{avec} \quad \alpha_o = \frac{\delta^2}{\sigma} \qquad (6)$$

Au voisinage de la transition phase haute température—phase incommensurable l'énergie libre a la valeur :

$$F \doteq \frac{-(\alpha_o - \alpha)^2}{4\ \beta_1}$$

Les solutions (5) expriment une variation sinusoïdale des η_i le long de la direction x (Fig. 1). Le vecteur d'onde k_o étant en général irrationnel, la phase est incommensurable. D'autre part la transition se produit à une température Ti telle que $\alpha = \alpha_o$, l'équation (6) montre que la transition vers la phase incommensurable est du 2° ordre.

Ainsi l'approximation d'un potentiel isotrope dans leqel figure un terme antisymétrique du type

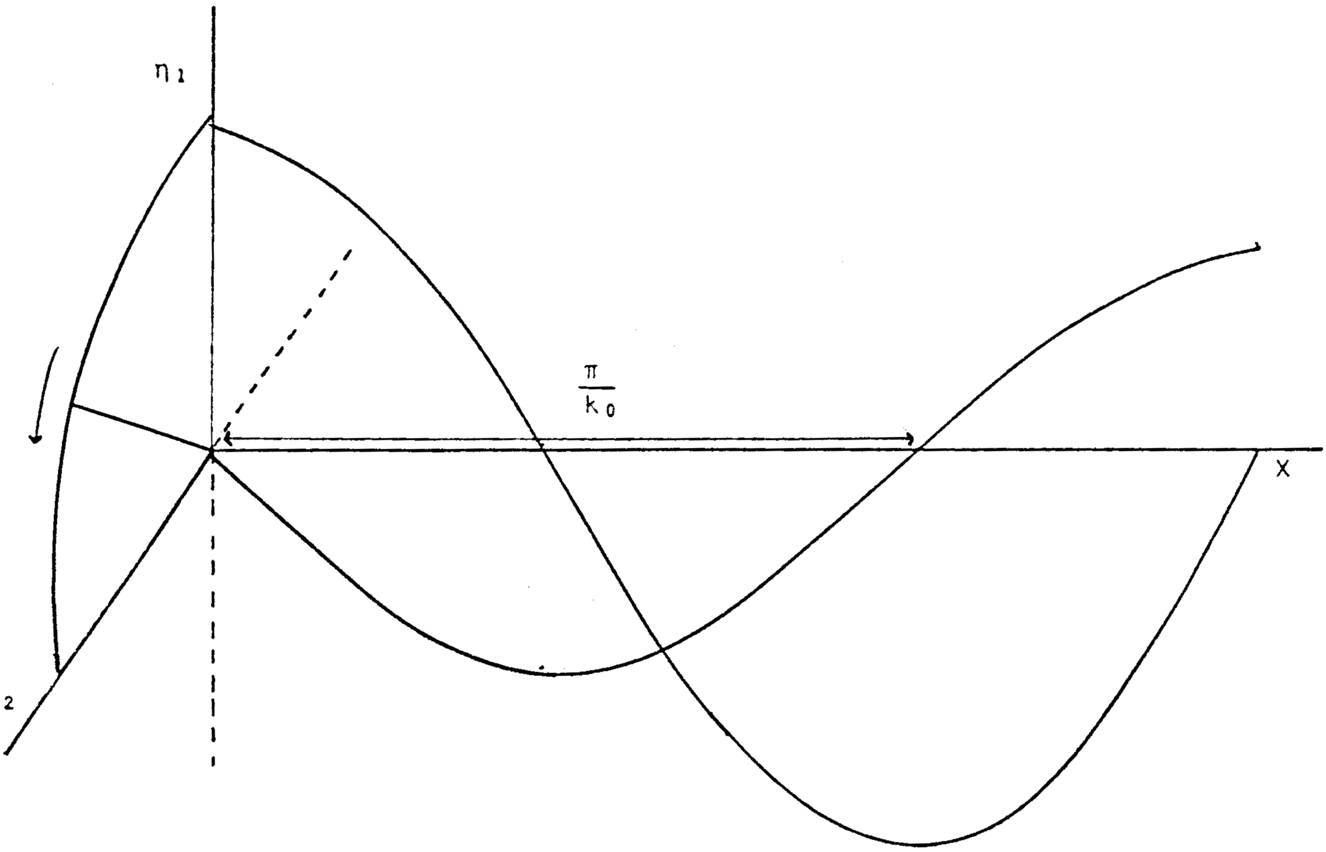


Figure 1: Variation des composantes du paramètre d'ordre dans l'approximation d'une densité ϕ_1 isotrope.

$$\eta_i \frac{\partial \eta_j}{\partial x_k} - \eta_j \frac{\partial \eta_i}{\partial x_k} \qquad (7)$$

(invariant de Lifshitz [7]) permet de prédire au-dessous d'une phase haute température l'apparition continue d'une phase incommensurable. Ces équations ne permettent toutefois pas de prédire l'existence d'une transition à plus basse température, Tc, généralement observée dans les matériaux qui sont le siège d'une phase incommensurable. Cette transition qui possède généralement un charactère discontinu est appelée transition d'ancrage ("de lock-in")[8] Levanyuk et Sannikov interprêtent cette caractéristique complémentaire en prenant en compte la contribution (supposée négligeable en première approximation) du terme anisotrope de coefficient β_2 dans l'énergie libre. Pour des valeurs élevées des composantes du paramètre d'ordre, ce terme n'est plus négligeable. Son expression $\beta_2 \rho^4 \cos 4\theta$ révèle qu'il contribue d'autant plus à abaisser l'énergie de ϕ_1 que θ prend des valeurs proches de $(2n + 1) \frac{\pi}{4}$ $(\beta_2 > 0)$ ou $2n \frac{\pi}{4}$ $(\beta_2 < 0)$ (Fig. 2).

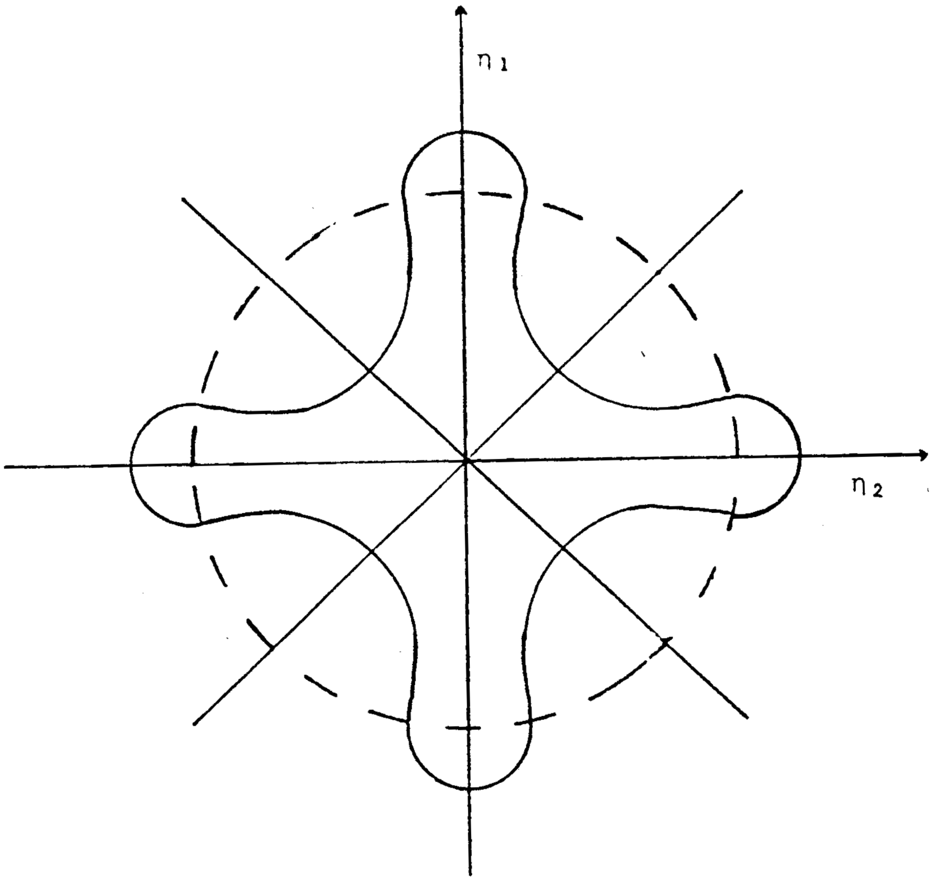


Figure 2: Variations des composantes du paramètre d'ordre à l'approche de la transition d'ancrage lorsqu'un terme anisotrope de degré 4 est pris en compte.

Lorsque ces valeurs sont atteintes, les composantes η_1, η_2 deviennent indépendantes des coordonnées d'espace et cette situation correspond à l'apparition de la phase commensurable stable à basse température. Les équations (4) s'écrivent alors

$$\rho\left(\alpha + \left(\beta_1 - |\beta_2|\right)\rho^2\right) = 0$$

$$\dot{\theta} = 0$$

L'énergie libre de la phase homogène basse température à la transition d'ancrage prend la valeur

$$F = \frac{-\alpha^2}{4(\beta_1 - |\beta_2|)} \quad \text{avec} \quad \rho_c^2 = \frac{-\alpha}{\beta_1 - |\beta_2|}$$

Dans le modèle précédent, on voit donc que la succession de deux phases, incommensurable puis commensurable , s'explique par la compétition du terme anisotrope quartique et de l'invariant de Lifshitz. Ce dernier, qui est du second degré, est prédominant pour les faibles valeurs du paramètre d'ordre et peut être négligé devant le terme anisotrope qui l'emporte pour les valeurs élevées des η_i à plus basse température. Nous montrons au chapitre 2 que la forme et le degré du terme anisotrope permettent de déterminer les coordonnées du vecteur d'onde à la transition d'ancrage. Remarquons qu'à l'approche de cette dernière transition le vecteur (η_1, η_2) a tendance à ne pas "tourner" uniformément mais à séjourner plus longuement le long des bissectrices du plan (η_1, η_2) (Fig. 2). La modulation spatiale dans ce cas consiste en de larges régions homogènes séparées par des régions plus étroites (discommensurations) où θ varie de $(2n + 1) \frac{\pi}{4}$ à $(2n + 3) \frac{\pi}{4}$ pour $\beta_2 > 0$ (Fig. 3)

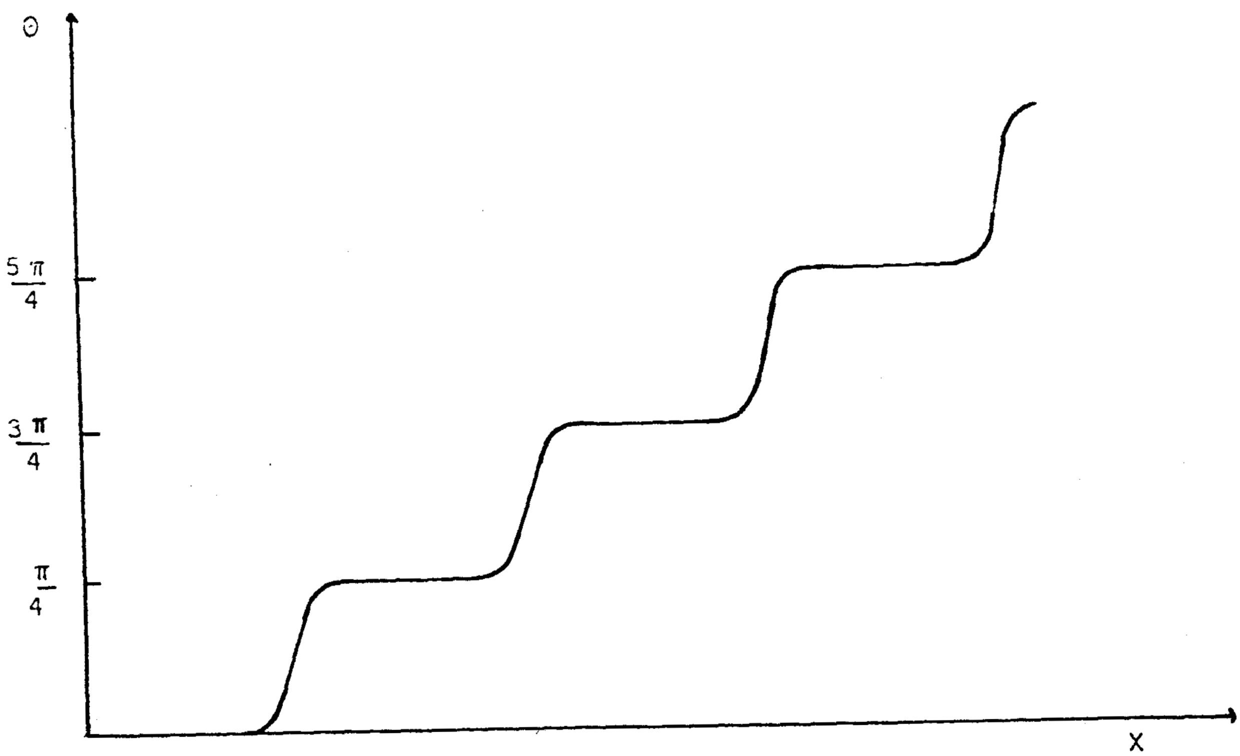


Figure 3: Variation de $\theta(x)$ dans la région où les discommensurations apparaissent.

Dans cette région les équations (4) se réduisent à

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} = - \frac{\beta_2}{\sigma} \rho_c^2 \sin 4 \theta \quad \text{avec} \quad \rho_c^2 = \frac{- \alpha}{\beta_1 - |\beta_2|}$$

qui est une équation de Sine-Gordon indépendante du temps.

on peut écrire $\frac{d^2\theta}{dx^2} = - b \sin 4\theta$ où $b = \frac{\beta_2}{\sigma} \rho_c^2$

équation qui s'intègre en deux étapes

$$\left(\frac{d\theta}{dx}\right)^2 = \frac{b}{2} \cos 4\theta + c \quad \text{puis} \quad \theta(x) = \frac{1}{2} \sin^{-1} \left(Sn \frac{2b}{d} x\right)$$

avec $d^2 = \frac{2b}{2c+b}$, $Sn(x)$ étant la fonction sinus elliptique .

On obtient donc une expression quantitative de l'évolution de la modulation au voisinage de Tc dans la phase incommensurable. Golovko [9] a ainsi pu calculer l'énergie libre de la phase incommensurable et en déduire que la transition d'ancrage est discontinue. D'autre part, une résolution numérique [10] de l'équation d'Euler dans le cas général montre une faible variation de l'amplitude $\rho(\vec{r})$ en fonction des coordonnées d'espace, ce qui justifie l'approximation d'une amplitude constante.

Toutefois le modèle précédent utilise des approximations importantes qui n'excluent nullement l'éventualité de transitions faiblement discontinues vers la phase incommensurable, ni une trasition d'ancrage continue.

REMARQUE :

Comme nous l'avons indiqué, l'existence d'un invariant de Lifshitz dans ϕ_2 n'implique pas nécessairement l'apparition d'une phase incommensurable. En effet, si l'énergie associée aux termes anisotropes est plus importante, que l'énergie libre associée à l'invariant de Lifshitz au point de transition Ti, une transition vers une phase basse température commensurable se produit directement. Cette transition sera alors du premier ordre puisque les composantes du paramètre d'ordre prennent des valeurs importantes dés Ti. La théorie phénoménologique exposée ci-dessus permet donc également de prédire l'existence d'une transition d'ancrage du premier ordre entre phases strictement périodiques (Table 1.1). On connait un certain nombre d'exemples qui illustrent cette situation tels $NaH_3(SeO_3)_2$, $LiNH_4SO_4$, $CsCuCl_3$, FeS ou $Cd(NO_3)_2$. Dans la table 1.1 on peut toutefois noter que les transitions dans NbO_2, $RbAg_4I_5$ ou $KFeF_4$ ont été rapportées comme étant du second ordre. Les données obtenues pour ces matériaux sont cependant insuffisantes ou incertaines pour constituer des contre-exemples convaincants. En particulier, les données expérimentales pour la transition observée à haute température dans NbO_2 suggérent l'existence de deux transitions succèssives dans ce matériaux[11].

b) Equation de dispersion

Dans le paragraphe précédent, le terme couplant les composants du paramètre d'ordre à ses dérivées s'est avéré essentiel pour expliquer l'apparition d'une phase incommensurable. Un terme antisymétrique du type (7) n'est cependant pas toujours permis par la symétrie du système. Nous indiquons ci-dessous que même en l'absence d'invariant de Lifshitz, un régime incommensurable peut apparaître sous certaines conditions.

Dans la théorie de Landau, parmi les représentations irréductibles qui figurent dans le développement de l'énergie libre d'un cristal, la représentation irréductible (unique) associée à la transition correspond au coefficient α_{io} qui s'annulle le premier, les autres coefficients α_i associés aux autres représentations irréductibles restant positifs. (Fig. 4). La valeur k_{io} du vecteur d'onde à l'établissement de la phase incommensurable est donc celle qui minimise $\alpha(\vec{k})$ lorsque ce coefficient s'annule (T = Ti).

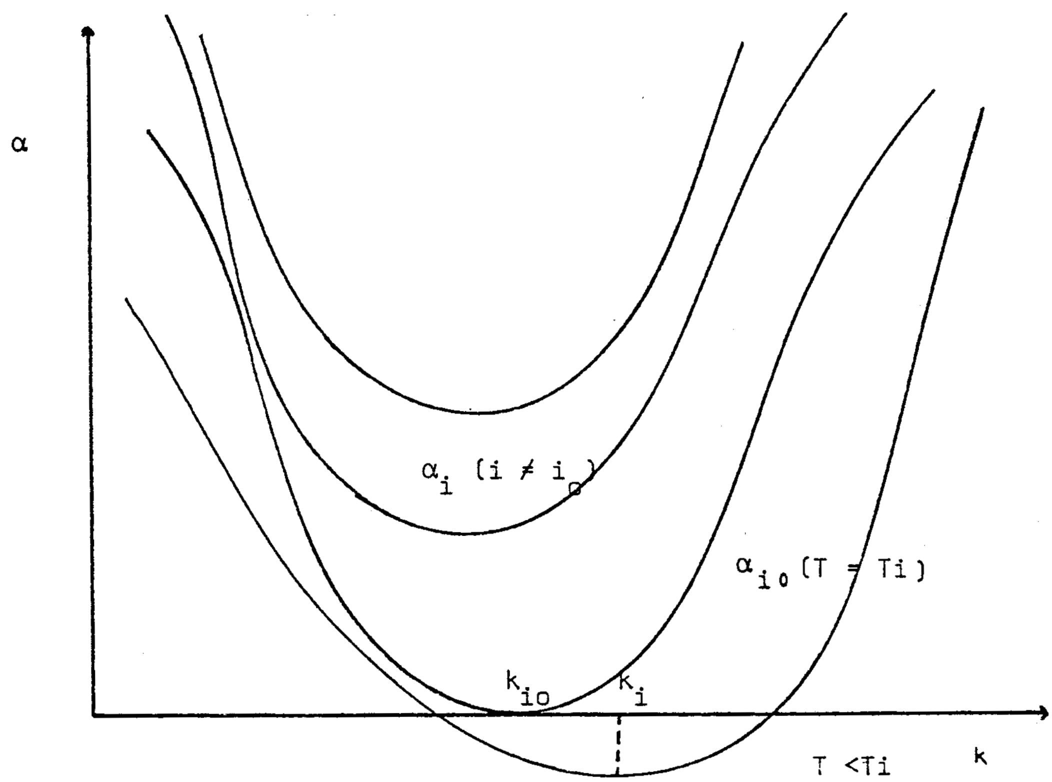


Figure 4: Forme des courbes $\alpha_i(\vec{k})$ à la température T = Ti et T < Ti

Lorsque la température est abaissée, d'autres valeurs $\vec{k}_i$ (dont la valeur varie continûment) sont associées aux minima successifs de F et déterminent les valeurs d'équilibre successives du paramètre d'ordre dans la phase incommensurable. A ces valeurs, sont associées des formes différentes de l'énergie libre F . Toutefois la description phénoménologique adoptée par Dzialoshinskii [5] puis Levanyuk et Sannikov [6] consiste à prendre parmi ces valeurs celle correspondant à l'énergie libre la plus symétrique coïncidant généralement avec la valeur $\vec{k}_c$ au point d'ancrage.

Comme les $\vec{k}_i$ varient peu autour de $\vec{k}_c$, on peut effectuer un développement limité de $\alpha(\vec{k})$ au voisinage de $\vec{k}_c$

$$\alpha(\vec{k}) = a_o + a_1 (\vec{k} - \vec{k}_c) + \frac{a_2}{2} (\vec{k} - \vec{k}_c)^2 + \ldots\ldots$$

Plusieurs situations peuvent alors se produire selon la forme de ce développement, qui est déterminé par la symétrie du systéme:

1e cas

$$\alpha(\vec{k}) = a_o + a_1 (\vec{k} - \vec{k}_c) + \frac{a_2}{2} (\vec{k} - \vec{k}_c)^2 \qquad (8)$$

Ce développement possède un terme linéaire non nul qui traduit l'existence d'une tangente oblique (en $\vec{k} = \vec{k}_c$) à la courbe $\alpha(\vec{k})$ (Fig. 5 a) ou b)) lors de l'apparition de la phase incommensurable (T = Ti)

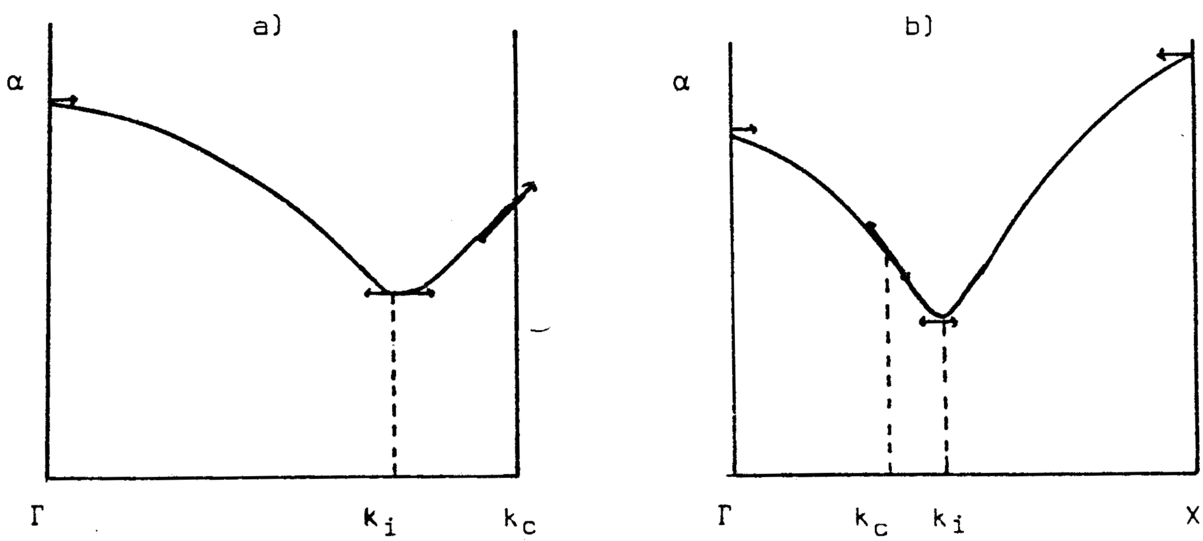


Figure 5: $\alpha(\vec{k})$ dans les cas où $k = k_c$ correspond à un point de la surface de la zone de Brillouin (cas a)) ou à un point intérieur (cas b)).

Le minimum de (8) par rapport à k correspond ici à

$$k_i = k_c - \frac{a_1}{a_2} \qquad \text{avec } a_2 > 0$$

On voit donc que la stabilité de la phase incommensurable est assurée par le signe positif de a_2.

2e cas

$$\alpha(\vec{k}) = a_o + \frac{a_2}{2}(\vec{k} - \vec{k}_c)^2 + \ldots\ldots \qquad (9)$$

Le terme linéaire est nul par symétrie. Nous nous trouvons dans le cas où la condition de Lifshitz est satisfaite. Hornreich et al[12] montrent que sous certaines conditions une phase incommensurable peut également apparaitre. La minimisation de (9) par rapport a $\vec{k}$ donne en effet

$$a_2(\vec{k} - \vec{k}_c) = 0$$

$$a_2 > 0$$

Si $a_2 < 0$ nous voyons que la solution $\vec{k} = \vec{k}_c$ est instable. Pour trouver la valeur de $\vec{k}$ correspondant au minimum de $\alpha(\vec{k})$ (c'est-à-dire à la phase stable) nous devons prendre en compte des termes de degré supérieur en $(\vec{k} - \vec{k}_c)$. On peut alors considérer le développement limité (Fig. 6):

$$\alpha(\vec{k}) = a_o + \frac{a_2}{2}(\vec{k} - \vec{k}_c)^2 + \frac{a_4}{4}(\vec{k} - \vec{k}_c)^4 \qquad (10)$$

dont les minima fournissent les valeurs d'équilibre

$$k_i = k_c \pm\sqrt{\frac{-a_2}{a_4}} \qquad (11)$$

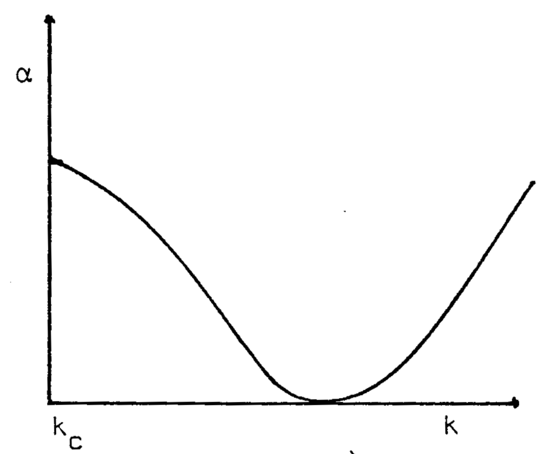


Figure 6: Forme de $\alpha(\vec{k})$ lorsque $a_2 < 0$ $a_4 > 0$

L'équation précédente montre que l'on peut avoir une phase incommensurable pour les domaines correspondant aux valeurs des coefficients

$$a_2 < 0 \qquad a_4 > 0$$

Nous voyons en particulier que la double égalité

$a_2 = 0$ et $\alpha = 0$ détermine dans le diagramme de phases (Fig. 7) un point (point de Lifshitz) qui sépare une ligne de transitions continues vers une phase homogène, d'une ligne de transitions continues vers une phase incommensurable.

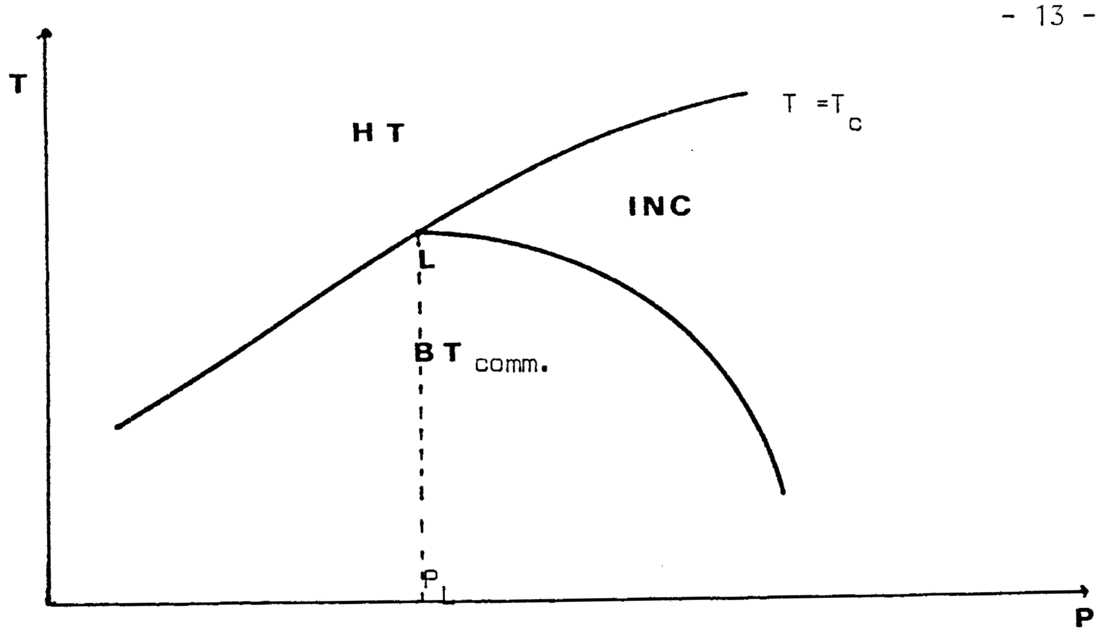


Figure 7 Point de Lifshitz (L) séparant une ligne de transitions continues d'une phase haute température (HT) vers une phase basse température (BT) et une ligne de transitions continues vers une phase incommensurable (INC).

Aslanyan et Levanyuk [13] suggérent que la condition $a_4 > 0$ est physiquement peu réaliste. En effet dans l'approximation statistique des plus proches voisins, l'équation de dispersion s'écrit [14]

$$\omega^2(q) \simeq 1 - \cos qa$$

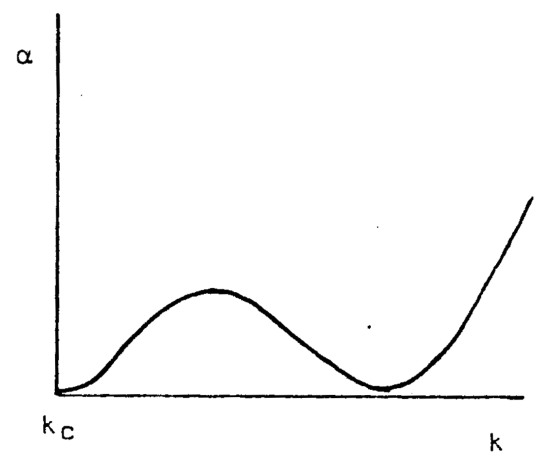


Figure 8: $a_2>0$ $a_4<0$ $a_6>0$

qui montre qu'une valeur de a_4 négative est énergétiquement la plus probable. On doit alors considérer le développement (Fig. 8)

$$\alpha(\vec{k}) = a_o + \frac{a_2}{2}(\vec{k}-\vec{k}_c)^2 + \frac{a_4}{4}(\vec{k}-\vec{k}_c)^4 + \frac{a_6}{6}(\vec{k}-\vec{k}_c)^6 \qquad (12)$$

dans lequel le coefficient du terme de degré six est positif.

Le minimum de (12) correspond alors aux valeurs d'équilibre:

$$k_i = k_c \pm \sqrt{\frac{-a_4 \pm \sqrt{a_4^2 - 4\, a_6 a_2}}{2\, a_6}} \quad \text{avec } a_4^2 - 4\, a_2 a_6 > 0$$

Une phase incommensurable est donc possible pour les domaines correspondant aux valeurs des coefficients

$$a_6 > 0 \ , \quad a_2 > 0, \quad a_4 < 0 \ , \quad a_4^2 - 4\ a_2 a_6 > 0$$

Le point de Lifshitz est alors défini par la double condition

$$\alpha = 0 \qquad \text{et} \qquad a_4^2 - 4\ a_2 a_6 = 0$$

Les trois cas précédents correspondent à des expressions particulières du développement limité de $\alpha(\vec{k})$. Au chapitre 4 nous effectuons une discussion générale des situations qui peuvent être rencontrées à cet égard.

REMARQUE :

Dans ce paragraphe, l'apparition d'une phase incommensurable est interprétée en considérant la variation de $\alpha(\vec{k})$. Ceci revient à ne retenir dans l'espace du paramètre d'ordre que les termes quadratiques de la forme $(\frac{\partial \eta_i}{\partial x})^2$ ou $\eta_i \frac{\partial \eta_j}{\partial x}$. Boccara [15] a suggéré que l'instabilité de la phase homogéne pouvait être induite par des termes de degrés supérieurs. Ainsi, Aslanyan et Levanyuk[16,17], Loginov[18] et Korzhenevskii[19] examinent des exemples théoriques pour lesquels les invariants contenus dans ϕ_2 permettant d'expliquer l'apparition d'une phase incommensurable sont de la forme

$$\eta_i \eta_j \frac{\partial^n \eta_k}{\partial x_l^n} \qquad \text{avec n impair}$$

Korshenevskii considère en particulier une densité d'énergie libre dans laquelle

$$\phi_1 = \frac{\alpha}{2} (\eta_1^2 + \eta_2^2) + \frac{\beta}{4} (\eta_1^2 + \eta_2^2)^2 + \frac{\gamma}{6} (\eta_1^2 + \eta_2^2)^3$$

$$\phi_2 = b(\eta_1^2 \frac{\partial \eta_2}{\partial x} + \eta_2^2 \frac{\partial \eta_1}{\partial x}) + \frac{g}{2} [(\nabla \eta_1)^2 + (\nabla \eta_2)^2]$$

avec des coefficients g et γ strictement positifs. ($\nabla \eta_i = \sum_j \frac{\partial \eta_i}{\partial x_j}$)

Si l'on effectue le changement de variable $\eta_1 = \rho \cos kx$, $\eta_2 = \rho \sin 2kx$ l'énergie libre moyenne $(\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \phi d\theta)$ s'écrit

$$\phi_o + \frac{\alpha}{2}\rho^2 + \frac{5g}{4}k^2\rho^2 + \frac{b}{2}k\rho^3 + \frac{5\beta}{16}\rho^4 + \frac{7\gamma}{24}\rho^6$$

où $\alpha = a\,(T - T_o)$

La minimisation de cette énergie permet d'écrire au voisinage de T_o

$$k_o^2 = \frac{\alpha}{5(1 - x)g} \qquad \text{avec} \qquad x = \frac{25\beta g}{4\,b^2}$$

Si $x > 1$ la phase incommensurable prend place pour $T < T_o$ ($\alpha < 0$). L'énergie libre de la phase incommensurable vaut :

$$\phi_{ic} = \frac{\rho_o^2\alpha}{4} \quad \text{où} \quad \rho_o = \frac{-5g}{b}\,k_o$$

Si l'on compare ϕ_{ic} avec l'énergie libre de la phase homogène (k = 0) $\phi_c\ (k = 0) = -\frac{\alpha^2}{4\beta}$, il apparaît que l'établissement de la phase incommensurable est énergétiquement plus favorable pour $x < 5$.

Si $x < 1$ la température de transition T_i est supérieure à T_o, la ligne de transition du premier ordre de la phase initiale vers la phase incommensurable est déterminée par la condition

$$\phi_{ic} = \phi_o \quad \text{d'où} \quad \alpha = \frac{3(1 - x)^2\, b^4}{400\,\tilde{\gamma}\,g^2} \qquad \left(\tilde{\gamma} = \frac{56}{32}\gamma\right)$$

Pour $x < 0$ ($\beta < 0$) une transition du premier ordre vers une phase homogéne peut se produire directement.

Ces résultats permettent de tracer le diagramme de phases représenté sur la Fig. 9. Un diagramme du même type est obtenu par Aslanyan et Levanyuk[16] dans le cas d'un paramètre d'ordre à trois composantes. Ces auteurs prédisent ainsi l'existence de phases incommensurables dans des matériaux très étudiés tels le quartz ou certaines Pérovskites ferroélectriques du type $BaTiO_3$.

Nous pouvons donc conclure ce paragraphe en remarquant qu'une grande variété de situations théoriques permettent de prédire l'apparition de phases incommensurables. Ceci est vrai non seulement lorsqu'un invariant de Lifshitz est autorisé par la symétrie du système, mais également lorsque des invaraints de degrés supérieurs (mettant en jeu des dérvées de degrés impairs des composantes du paramètre d'ordre) figurent dans la densité d'énergie libre de Landau.

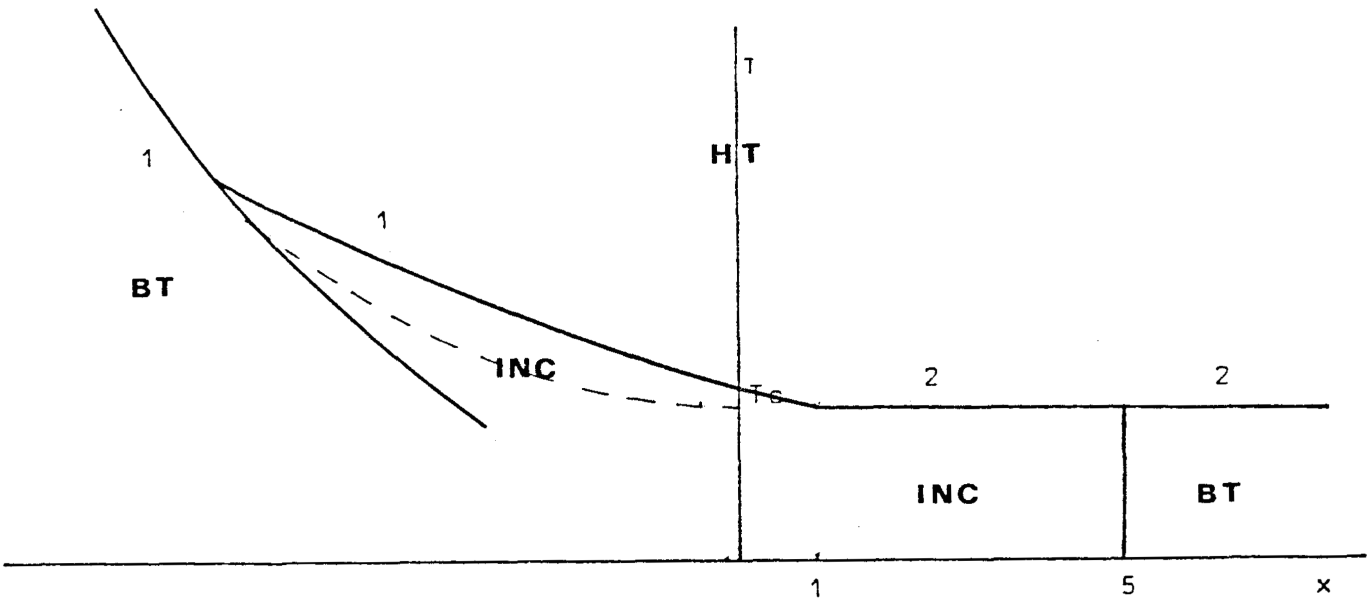


Figure 9 : Diagramme de phases correspondant au cas où ϕ_2 contient un terme de la forme

$$\eta_i \eta_j \quad \frac{\partial^n \eta_k}{\partial x^n}$$

c) Diagrammes de phases

Un nombre très réduit de diagrammes de phases pression-température ont été établis sur le plan expérimental, (Thiourée [20] , K_2SeO_4 [21]) pour des systèmes incommensurables.
Indenbom et Loginov[22] , déduisent du modèle théorique présenté dans le paragraphe précédent la forme de ces diagrammes dans le cas simple où il existe une phase incommensurable unique.

Nous avons montré que le vecteur d'onde correspondant à l'apparition d'une phase incommensurable s'écrit avec les notations de (8) :

$$k_i = k_c - \frac{a_1}{a_2}$$

Au point de transition (T_c, P_c) lorsque $k_i = k_c$; $a_o = 0$, $a_1 = 0$ et $a_2 > 0$. Au voisinage de ce point a_o et a_1 peuvent être considérés, en première approximation, comme des fonctions linéaires de la température T et de la pression P. Il est alors possible si l'on considère a_2 indépendant de la température, de déduire la forme des diagrammes de phases pression-température.

Si l'on tient compte de la valeur de k_i, le coefficient $\alpha(\vec{k})$ s'écrit:

$$\alpha = a_o - \frac{a_1^2}{2\, a_2}$$

La ligne de transition entre la phase initiale haute température et la phase incommensurable correspond donc à la loi parabolique

$$a_o = A\, a_1^2 \qquad (13)$$

D'autre part, l'énergie libre dans la phase incommensurable s'écrit :

$$\phi_i = \phi_o + \frac{(a_o - \frac{a_1^2}{2a_2})}{2} \rho^2 + \frac{\beta}{4} \rho^4 \qquad \text{où } \rho^2 = \eta_1^2 + \eta_2^2$$

La minimisation de ϕ_i donne

$$\rho^2 = - \frac{(a_o - \frac{a_1^2}{2a_2})}{\beta} \qquad (14)$$

En remplaçant (14) dans ϕ_i on obtient

$$\phi_i = \phi_o - \frac{(a_o - \frac{a_1^2}{2a_2})^2}{4\, \beta} \qquad \text{avec} \quad a_o - \frac{a_1^2}{2a_2} < 0 \qquad (15)$$

Dans la phase commensurable basse température lorsque $\vec{k} = \vec{k}_c$ le coefficient a_1 s'annule mais les termes anisotropes de l'énergie libre doivent être pris en compte. Ces termes sont proportionnels à ρ^N où N est strictement supérieur à 2. (Dans le cas traité au premier paragraphe N était égal à 4).

L'énergie libre s'écrit donc :

$$\phi_c = \phi_o + \frac{\alpha}{2} \rho^2 + \frac{\beta}{4} \rho^4 - A\rho^N \qquad \text{avec } A > 0 \qquad (16)$$

Suivant la valeur de N deux types de situations qualitativement distinctes peuvent être rencontrées. Une première situation se produit lorsque $N > 3$. Comme $\rho^2 = -a_o/\beta$,(16) se met sous la forme:

$$\phi_c = \phi_o - \frac{a_o^2}{4\beta} - A\left(-\frac{a_o}{\beta}\right)^{N/2}$$

Dans l'hypothèse d'une transition d'ancrage du premier ordre on peut écrire sur la ligne de coexistence des phases incommensurable et basse température $\phi_c = \phi_i$. Cette égalité permet de trouver la condition d'apparition de la phase basse température :

$$A\left(-\frac{a_o}{\beta}\right)^{N/2} \simeq -\frac{a_o a_1^2}{4\, a_2\, \beta}$$

où l'on a négligé dans (15) les termes de degré quatre en a_n devant ceux de degré deux.

La transition d'ancrage prend place le long de la ligne

$$a_o = -C\,|a_1|^{4/N-2} \qquad \text{où} \qquad C = \frac{B}{(4\,a_2 A)^{2/N-2}}$$

Indenbom et Loginov tracent les différentes courbes $a_o = f(a_1)$ suivant le degré N du terme anisotrope (Fig. 10). Les figures ci-dessous donnent la forme des diagrammes dans le cas où N = 4, 5, 6 et N ≥ 7. On remarque que ces figures correspondent toujours au cas d'une transition du second ordre vers une phase incommensurable.

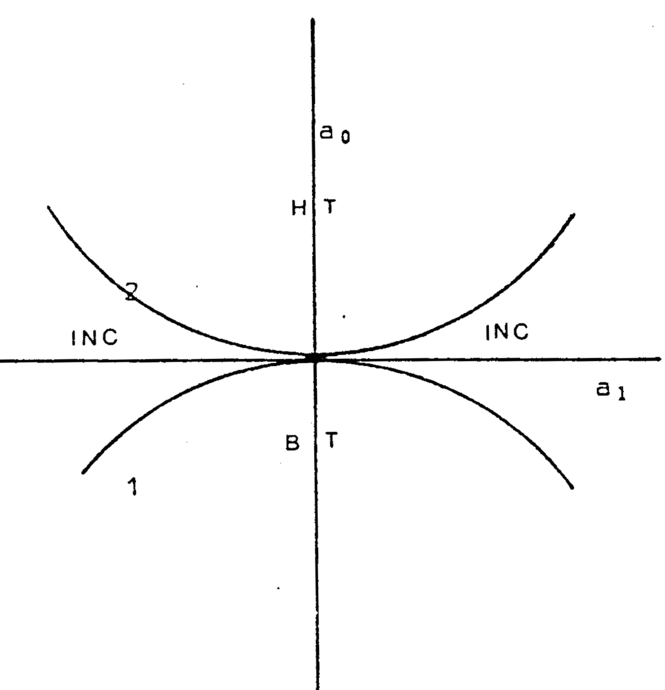


Figure 10 a)

cas où N=4

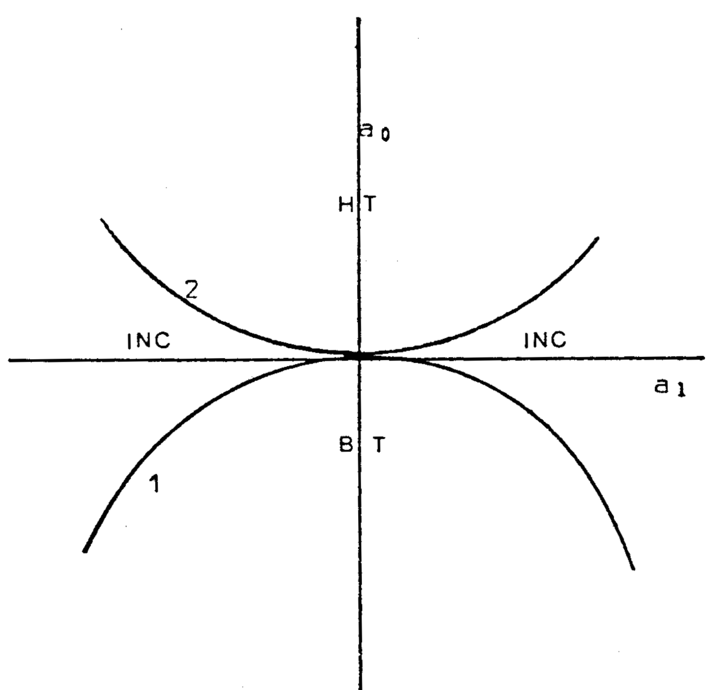


Figure 10 b)

cas où N=5

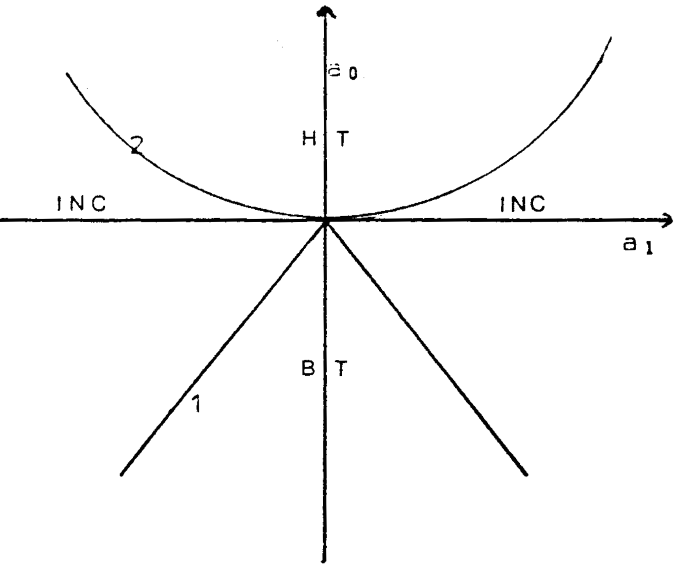


Figure 10 c)

cas où N=6

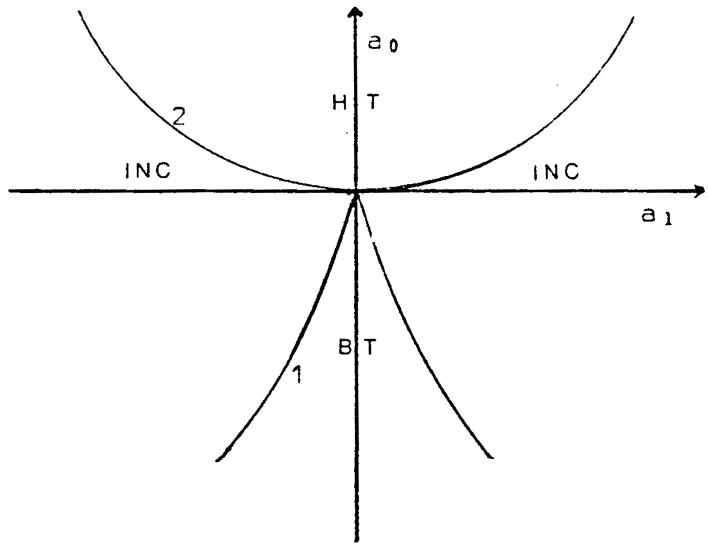


Figure 10 d)

cas où N⩾7

Dans le cas où N = 3 une situation qualitativement différente est rencontrée, l'énergie libre s'écrit en effet

$$\phi = \frac{\alpha}{2} (\eta_1^2 + \eta_2^2) + \mu(\eta_1^3 - 3\eta_1\eta_2^2) + \frac{\beta}{4} (\eta_1^2 + \eta_2^2)^2$$

Dans ce cas (qui se produit lorsque le critère de Landau n'est pas satisfait) une transition du premier ordre vers une phase strictement cristalline se produit pour:

$$\frac{\alpha}{2} \rho^2 - \mu\rho^3 + \frac{\beta}{4} \rho^4 = 0$$

$$\rho(\alpha - 3 \mu\rho + \beta\rho^2) = 0$$

Ces deux équations fournissent la valeur de α à la transition:

$$\alpha = \frac{2\,\mu^2}{\beta} \qquad \text{avec} \qquad \rho = \frac{2\mu}{\beta} \qquad (17)$$

Si le coefficient μ est suffisamment faible pour pouvoir être négligé en premiére approximation devant l'invariant de Lifshitz, les lignes de transition (13) et (17) convergent en

$$a_o = \frac{2\mu^2}{\beta} = \frac{a_1^2}{2a_2}$$

Nous pouvons alors tracer la Fig. 11 dans lequelle apparaît une ligne de transition du premier ordre vers la phase basse température.

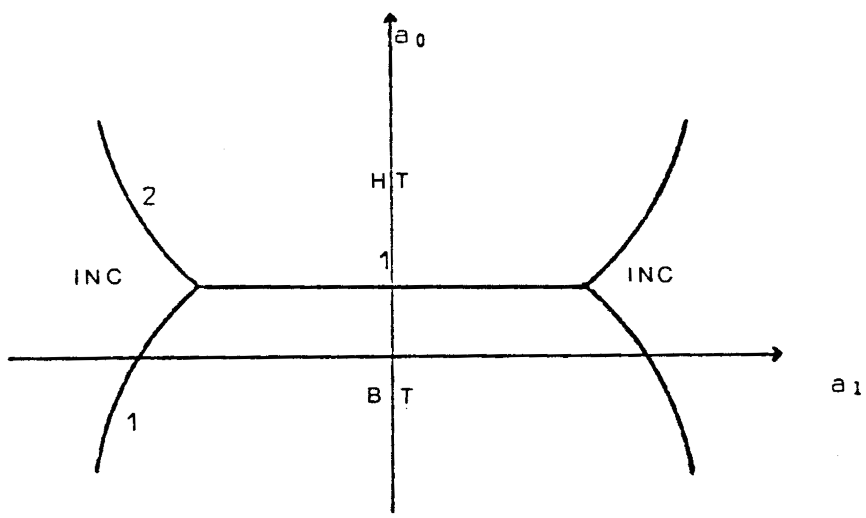


Figure 11 Diagramme de phases N=3

Les différents diagrammes nous montrent donc le comportement des lignes de transition au voisinage du point (T_c,P_c). Ces résultats sont obtenus, en considérant des énergies libres simplifiées par des approximations substantielles Au chapitre 4, nous revenons sur la forme des diagrammes de phases des systèmes incommensurables.

d) Données expérimentales

Dans la table 1.2 nous avons réuni la majorité des substances pour lesquelles une phase incommensurable structurale a été mise en évidence.

Une grande variété de composés apparaissent dans cette table. Ainsi des phases incommensurables ont été décelées dans des isolants ioniques (K_2SeO_4), moléculaires ($SC(NH_2)_2$), des conducteurs inorganiques à une dimension (KCP), à deux dimensions ($NbSe_2$, $TaSe_2$), des sels organiques (TTF-TCNQ), etc ...

La majorité de ces substances possèdent en commun les caractéristiques standards mentionnées dans l'introduction, à savoir: un domaine de stabilité limité en température, l'apparition de l'incommensurabilité au-dessous d'une transition du second ordre, une variation du vecteur d'onde en fonction de la température dans la phase incommensurable, et une transition d'ancrage discontinue à plus basse température. Comme nous l'avons également indiqué dans l'introduction, un certain nombre de matériaux révèlent toutefois des particularités qui s'écartent du comportement standard précédent. Ainsi une transition d'ancrage quasi-continue est observée dans Na_2CO_3, de même une transition faiblement du premier ordre vers une phase incommensurable est observée dans $K_2PbC_u(NO_2)_6$. Plusieurs phases incommensurales distinctes ont été trouvées pour $(N(CH_3)_4)_2CoCl_4$. Dans TTF.TCNQ le vecteur d'onde ne varie pas avec la température. Enfin aucune transition d'ancrage (ou un ancrage partiel) n'est observée dans des matériaux tels $NbSe_2$, $C_{12}D_{10}$, $ThBr_4$ ou $BaNa_2Nb_5O_{15}$.

Les résultats contenus dans le tableau 1.2 appellent d'autre part les remarques générales suivantes.

i) La phase haute température appartient en grande majorité à des systèmes cristallins de basse symétrie (Monoclinique et Orthorhombique). On peut en particulier souligner l'occurence étonnante du groupe Pnma (D_{2h}^{16}) qui constitue actuellement le groupe spatial "prototype" de prés de 60% des matériaux possédant une phase incommensurable. Il faut toutefois garder à l'esprit que l'étude expérimentale active des phases incommensurables n'a débuté réellement que depuis moins d'une dizaine d'années. Si on établit un lien entre l'apparition de phases incommensurables et les représentations irréductibles qui ne vérifient pas le critére de Lifshitz, il n'existe aucune raison théorique justifiant l'apparition plus fréquente de ces phases dans les systèmes de basse symétrie (voir réf. 24).

ii) Le paramètre d'ordre associé à la transition vers une phase incommensurable posséde dans la majorité des cas deux composantes, ce nombre se réduisant de moitié lorsque la transition d'ancrage se produit au centre de la zone de Brillouin (pour la Thiourée par exemple). Un petit nombre de phases incommensurables sont décrites par des paramétres d'ordre de dimension supérieure à deux.

C'est le cas pour $BaMnF_4$, $Ba_2Na\ Nb_5O_{15}$ (n = 4), $TaSe_2$ (n = 6) ou $Cs_2PbCu(NO_2)_6$ (n = 8); Notons que pour les transitions où l'ancrage se produit directement (Table 1.1) une majorité de transitions sont associées à des paramètres de dimension élévée.

Légende des tables 1.1 et 1.2

a) Matériaux

b) Groupe spatial de la phase haute température

c) Température Ti (en Kelvin) vers la phase incommensurable

d) Ordre de la transition

e) Direction de modulation

f) Température d'ancrage Tc (en Kelvin)

h) Dénomination du point (ou de la ligne de haute symétrie) d'aprés la notation des tables de Zak et al

i) Groupe spatial de la phase basse température

j) Multiplcation du nombre d'atomes dans la maille élémentaire dans la phase commensurable basse température (par rapport à la phase haute température)

k) Dimension du paramètre d'ordre associé à la transition

Table 1.1

Matériaux qui subissent une transition d'ancrage directement vers une phase commensurable. L'énergie libre de la transition contient un ou plusieurs invariants de Lifshitz.

a	b	f	d	i	g	h	j	k	Réf.
$NaH_3(SeO_3)_2$	$P2_1/b$	194	1	P1	$0, 0, \frac{c^*}{2}$	Z	2	2	25
$NaNH_4C_4H_4O_6 . 4H_2O$	$P2_12_12$	109	1	$P2_1$	$\frac{a^*}{2}, 0, 0$	X	2	2	8
$LiNH_4SO_4$	$Pna2_1$	283	1	$P2_1$	$\frac{a^*}{2}, \frac{b^*}{2}, 0$	S	2	2	25
$KFeF_4$	Amma	390	2	Pmmm	$\frac{a^*}{4}, \frac{b^*}{4}, 0$	Ξ		4	26
NbO_2	$P4_2/mnm$	1073	2	$I4_1/a$	$\frac{a^*}{4}, \frac{b^*}{4}, \frac{c^*}{2}$	S	6	4	91.92.93
FeS	$P6_3/mmc$	410	1	$P\bar{6}2c$	$\frac{2a^*}{3}, -\frac{b^*}{3}, \frac{c^*}{2}$	H	6	4	25
$CsCuCl_3$	$P6_3/mmc$	423	1	$P6_122$	$0, 0, \frac{c^*}{3}$	Δ	3	4	95
$RbAg_4I_5$	$P4_132$	208	2	$I4_1/a$	$0, 0, 0$	Γ	1	3	95
$Cd(NO_3)_2$	Pa3	433	1	$Pca2_1$	$0, \frac{b^*}{2}, 0$	X	2	6	25

Table 1.2

Matériaux possédant une ou plusieurs phases incommensurables

a	b	c	d	e	f	d	g	h	i	j	k	Ref.
$NbSe_3$	$P2_1/m$	145		$(1-\delta)\frac{b^*}{4}$	58		$\frac{a^*}{2},(1-\delta)\frac{b^*}{4},\frac{c^*}{2}$	S			2	66 67
Na_2CO_3	$C2/m$	619	2	$\delta_1 a^*+\delta_2 c^*$	130	2	$\frac{a^*}{6},0,\frac{c^*}{3}$	Ξ	P2/b	12	2	28 29
$C_{12}H_{10}$	$P2_1/a$	40	2	$\delta_1 a^*+(1-\delta_2)\frac{b^*}{2}$	16	1	$0,(1-\delta)\frac{b^*}{2},0$	Ξ			2	83 84
$C_{12}D_{10}$	$P2_1/a$	38	2	$\delta_1 a^*+(1-\delta_2)\frac{b^*}{2}$	21	1	$0,(1-\delta)\frac{b^*}{2},0$	Ξ			2	83 84
TTF-TCNQ	$P2_1/a$	54	2	$\frac{a^*}{2}+0{,}295b^*$								97
		47	2	$\delta a^*+0{,}295b^*$	38	1	$\frac{a^*}{4},0{,}295b^*,0$	Ξ			2	
TSeF-TCNQ	$P2_1/a$	29	2	$\frac{a^*}{2}+0{,}317b^*$							2	97
PTS	$P2_1/c$	206	2	$\frac{a^*}{2}+\delta b^*$	163	1	$\frac{a^*}{2},0,0$	Ξ	$P2_1/c$	2	2	71 72 73
$RbH_3(SeO_3)_2$	$P2_12_12_1$	155	2	$(1-\delta)\frac{c^*}{2}$	153	1	$0,0,\frac{c^*}{2}$	Z	$P2_1$	2	2	89
$RbD_3(SeO_3)_2$	$P2_12_12_1$	148	2	$(1-\delta)\frac{c^*}{2}$	145	1	$0,0,\frac{c^*}{2}$	Z	$P2_1$	2	2	90
$BaMnF_4$	$A2_1am$	247	2	$0{,}391a^*+\frac{b^*}{2}+\frac{c^*}{2}$							4	52 54 53
$Cu(C_8H_8NO)_2$	Iba2	305	2	δa^*	241	1	$0,0,0$	Σ	B2	1	2	80
$(NH_4)_2BeF_4$	Pnam	173	2	$(1-\delta)\frac{a^*}{2}$	163	1	$\frac{a^*}{2},0,0$	X	$Pn2_1a$	2	2	50
$(ND_4)_2BeF_4$	Pnam	183	2	$(1-\delta)\frac{a^*}{2}$	177	1	$\frac{a^*}{2},0,0$	X	$Pn2_1a$	2	2	51
K_2SeO_4	Pnam	129	2	$(1-\delta)\frac{a^*}{3}$	93	1	$\frac{a^*}{3},0,0$	Σ	$Pna2_1$	3	2	86 87 88
$SC(NH_2)_2$	Pnma	202	2	δb^*	176	1	$0,\frac{b^*}{9},0$	Δ		9	2	58 59
					169	1	$0,0,0$	Γ	$P2_1ma$	1	1	
$SC(ND_2)_2$	Pnma	216	2	δb^*	193	1	$0,\frac{b^*}{9},0$	Δ		9	2	58 59
					191	1	$0,0,0$	Γ	$P2_1ma$	1	1	
Cs_2HgBr_4	Pnma	243	2	δa^*	230	1	$0,0,0$	Σ	$P2_1/n$	1	2	33
Cs_2CdBr_4	Pnma	252	2	δa^*	237	1	$0,0,0$	Σ	$P2_1/n$	1	2	32
Rb_2ZnCl_4	Pmcn	302	2	$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$	192	1	$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$Pnc2_1$	3	2	37 38
Rb_2ZnBr_4	Pmcn	347	2	$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$	193	(1)	$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$Pnc2_1$	3	2	34 96
K_2ZnCl_4	Pmcn	553	2	$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$	403	1	$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$Pnc2_1$	3	2	35 36

Table 1.2 (suite)

a	b	c	d	e	f	d	g	h	i	j	k	Ref.
$(NH_4)_2ZnCl_4$		271	1	$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$	266	1	$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$P2_1cn$	3	2	98
$N(CH_3)_4)_2ZnCl_4$	Pmcn	296	2	$(2+\delta)\frac{c^*}{5}$	280	1	$0,0,\frac{2c^*}{5}$	Λ	$P2_1cn$	5	2	39 40 41
					275	1	$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$P2_1/n$	3	2	
					168	1	$0,0,0$	Γ	$P2_1/c$	1	1	
					155	1	$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$P2_12_12_1$	3	2	
$N(CD_3)_4)_2ZnCl_4$	Pman	297	2	δa^*	279	1	$\frac{3a^*}{7},0,0$	Σ	$P2_1an$	7	2	44 45
					277	1	$\frac{a^*}{2},0,0$	X	$P2_1/n$	2	2	
					274		$\frac{a^*}{3},0,0$	Σ	$P2_12_12_1$	3	2	
$N(CH_3)_4)_2CoCl_4$	Pmcn	293	2	$(2-\delta)\frac{c^*}{5}$	281	1	$0,0,\frac{2c^*}{5}$	Λ	$P2_1cn$	5	2	46
		279		δc^*	277		$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$P2_1/n$	3	2	
					192		$0,0,0$	Γ	$P2_1/c$	1	1	
					122		$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$P2_12_12_1$	3	2	
$N(CD_3)_4)_2CoCl_4$	Pmcn	297	2	$(2-\delta)\frac{c^*}{5}$	282	1	$0,0,\frac{2c^*}{5}$	Λ	$P2_1cn$	2	2	46
					277		$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$P2_1/n$	3	2	
					162		$0,0,0$	Γ	$P2_1/c$	1	1	
					120		$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$P2_12_12_1$	3	2	
$N(CH_3)_4)_2MnCl_4$	Pmcn	292	2	δc^*	291	1	$0,0,\frac{c^*}{2}$	Z	$P2_1/c$	2	2	47
					266		$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$P2_1/n$	3	2	
$N(CH_3)_4)_2CuCl_4$	Pmcn	297	2	$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$	291	1	$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$P2_1/c$	3	2	46
					263		$0,0,0$	Γ	$P2_1/n$	1	1	
$N(CD_3)_4)_2CuCl_4$	Pmcn	299	2	$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$	293	1	$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$P2_1/c$	3	2	46
					263		$0,0,0$	Γ	$P2_1/n$	1	1	
$N(CH_3)_4)_2CuBr_4$	Pmcn	271	2	$(1-\delta)\frac{b^*}{2}$	242	1	$0,\frac{b^*}{2},0$	Y	$Pbc2_1$	2	2	49
					237		$0,0,0$	Γ	$P2_1/c$	1	1	
$N(CH_3)_4)_2FeCl_4$	Pmcn	281	2	δ_1c^*	270	1	$0,0,\frac{3c^*}{7}$	Λ	$P2_1cn$	7	2	48
		267		δ_2c^*	266	1	$0,0,\frac{c^*}{3}$	Λ	$P2_1/n$	3	2	
					240		$0,0,0$	Γ	$P2_1/c$	1	1	

Table 1.2 (suite)

a	b	c	d	e	f	d	g	h	i	j	k	Ref.
δ-$(CH_3NH_3)_2MnCl_4$	Abma	168		$(1-\delta)\frac{b^*}{3}$	112		$0, \frac{b^*}{3}, 0$	Δ	Pbca	3	2	68 69 70
$NaNO_2$	Immm	438	2	δa^*	435	1	$0, 0, 0$	Σ	Imm2	1	2	58 55
K.C.P	P4mm	140	2	$\frac{a^*}{2}+\frac{b^*}{2}+0,3c^*$								97
$Ba_2NaNb_5O_{15}$	P4bm	573	2	$(1+\delta_1)\frac{a^*+b^*}{4}+\frac{c^*}{2}$	548	1	$(1+\delta_2)\frac{a^*+b^*}{4}, \frac{c^*}{2}$	S	Amm2		4	30 31
$ThBr_4$	$I4_1/amd$	95		$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$								81 82
$ThCl_4$	$I4_1/amd$	70		$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$								
1T-TaS_2	$P\overline{3}m1$	500	2	$0,283a^*$								61
		350	2	$0,245a^*+0,068b^*$	200	1	$\frac{3a^*}{13}, \frac{b^*}{13}, \frac{c^*}{3}$	C	$P\overline{3}$			
1T-$TaSe_2$	$P\overline{3}m1$	500	2	$\delta_1 a^*+\delta_2 b^*$	473	1	$\frac{3a^*}{13}, \frac{b^*}{13}, \frac{c^*}{3}$	C	$P\overline{3}$			62
1T-VSe_2	$P\overline{3}m1$	112		$\delta a^*+(1-\delta)\frac{c^*}{3}$	80		$\frac{a^*}{4}, 0, (1-\delta)\frac{c^*}{3}$					63
2H-$TaSe_2$	$P6_3/mmc$	122	2	$(1-\delta)\frac{a^*}{3}$	90	1	$\frac{a^*}{3}, 0, 0$	Σ	Cmcm	3	6	55
2H-$NbSe_2$	$P6_3/mmc$	33	2	$(1-\delta)\frac{a^*}{3}$								64
$Cs_2PbCu(NO_2)_6$	Fm3	297		$\frac{a^*}{2}+\frac{b^*}{2}+\delta c^*$	282		$\frac{a^*}{2}, \frac{b^*}{2}, \frac{c^*}{4}$	θ				87
					266		$\frac{a^*}{2}, \frac{b^*}{2}, \frac{c^*}{2}$	L	B2/b	8	8	
$K_2PbCu(NO_2)_6$	Fm3	280	1	$\delta a^*+\delta b^*$	273		$\frac{a^*}{2}, \frac{b^*}{2}, \frac{c^*}{2}$	L	B2/b	8	8	88
$Tl_2PbCu(NO_2)_6$	Fm3	290	1	$\delta a^*+\delta b^*$	249		$\frac{a^*}{2}, \frac{b^*}{2}, \frac{c^*}{2}$	L	B2/b	8	8	85 86
$Rb_2PbCu(NO_2)_6$	Fm3	310		$\delta a^*+\delta b^*$	276		$\frac{a^*}{2}, \frac{b^*}{2}, \frac{c^*}{2}$	L	B2/b	8	8	85 86
CH_4	Fm3c	20		δa^*	10		$\frac{a^*}{8}, 0, 0$	Δ	$P\overline{4}3m$	8	6	74 75
CD_4	Fm3c	27		δa^*	22		$\frac{a^*}{8}, 0, 0$	Δ	$P\overline{4}3m$	8	6	74

CHAPITRE 2

POINTS D'ANCRAGE DES PHASES INCOMMENSURABLES

a) Position du problème

Dans la théorie de Landau généralisée présentée au chapitre précédent, nous avons souligné que les termes anisotropes figurant dans l'énergie libre déterminent l'apparition de la transition d'ancrage. Généralement seuls les termes anisotropes de degré n le plus bas doivent être pris en compte à cet effet. n est en général égal à trois, quatre ou six dans la majorité des transitions d'ancrage expérimentalement observées. Bien que la nécessité de prendre en compte des termes anisotropes de degrés plus élevés soit parfois nécessaire, elle correspond toutefois à une situation relativement marginale (voir table 2.14). De plus les données expérimentales révèlent que les transitions d'ancrage où n est grand ($n > 10$) sont difficilement observables (comme dans Na_2CO_3 où $n = 12$).

Pour n donné nous montrons ci-dessous que des considérations de symétrie nous permettent de déduire de façon systématique les coordonnées des points d'ancrage susceptibles d'être associés aux divers types d'invariants anisotropes. Ainsi pour un degré donné des termes anisotropes, on peut dresser la carte des points d'ancrage dans chacune des zones de Brillouin. Dans ce chapitre, nous donnons (paragraphe c) les cartes des points d'ancrage associées à des invariants anisotropes de degré $n = 3$, 4 et 6 pour les quatorze zones de Brillouin. Ce travail systématique nous permet ensuite de vérifier par comparaison avec les données expérimentales, la validité, sur ce point, de la théorie phénoménologique exposée au chapitre 1.

b) Méthode de la détermination des points d'ancrage

Si l'on suppose que le degré n du terme anisotrope qui induit la transition d'ancrage est connu, la méthode que nous présentons, repose sur l'invariance de ce terme par le groupe spatial de la phase haute-température et, en particulier, par les translations primitives de cette phase. On peut écrire les monômes constituant le terme d'ancrage sous la forme générale :

$$\eta_1^{n_1} \cdot \eta_2^{n_2} \cdot \ldots\ldots\ldots \; \eta_p^{n_p} \qquad (1) \quad (n_1 + n_2 + \ldots + n_p = n)$$

où les composantes η_i ($i = 1 \ldots\ldots p$) du paramètre d'ordre se répartissent sur les p branches de l'étoile du vecteur $\vec{k}_1$: Pour le point le plus général de la zone de Brillouin considérée, le groupe du vecteur $\vec{k}_1$, $G(\vec{k}_1)$ se réduit à l'identité. Le nombre de branches inéquivalentes est alors égal à l'ordre de la syngonie du cristal, c'est-à-dire au groupe de symétrie du réseau. Un élément g_i de ce groupe transforme $\vec{k}_1$ en une branche inéquivalente $\vec{k}_i$. L'invariance de (1) par les translations du cristal s'exprime alors par les équations

$$e^{i(n_1\vec{k}_1 + n_2\vec{k}_2 + \ldots + n_p\vec{k}_p)\vec{t}_j} = e^{i2p_j\pi} \qquad (j = 1,2,3) \qquad (2)$$

où les $\vec{t}_j^{**}$ sont les translations primitives du réseau direct et les p_j des entiers. On a donc

$$n_1\vec{k}_1 + n_2\vec{k}_2 + \ldots\ldots + n_p\vec{k}_p = p_j\vec{t}_j^{**} \qquad (i = 1, 2, 3) \qquad (3)$$

les $\vec{t}_j^{**}$ étant les translations primitives du réseau réciproque.

Les conditions relatives aux coordonnées des $\vec{k}_1$ et par conséquent aux coordonnées des vecteurs d'ancrage, seront alors données par la projection sur les trois translations primitives de l'équation (3). Remarquons que pour un cristal donné les termes (1) doivent être invariant par les opérations de symétrie du groupe spatial de haute symétrie autres que les translations, ce qui réduit encore le nombre des points d'ancrage possibles.

A titre d'exemple, nous calculons les vecteurs d'ancrage induit par les termes d'ancrage du type η_i^3 et $\eta_i^2\eta_j^2$ dans le réseau orthorhombique P. La classe de Laue de ce réseau est le groupe D_{2h} constitué de huit opérations de symétrie : E, U_z, U_x, U_y, I, σ_z, σ_x, σ_y. Dans le cas d'un point quelconque (symétrie 1 (C_1)) de la zone de Brillouin, les η_i ont les propriétés de transformations suivantes:

$\eta_1 \to (x, y, z)$ E	$\eta_5 \to (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ I
$\eta_2 \to (\bar{x}, \bar{y}, z)$ U_z	$\eta_6 \to (x, y, \bar{z})$ σ_z
$\eta_3 \to (x, \bar{y}, \bar{z})$ U_x	$\eta_7 \to (\bar{x}, y, z)$ σ_x
$\eta_4 \to (\bar{x}, y, \bar{z})$ U_y	$\eta_8 \to (x, \bar{y}, z)$ σ_y

L'invariance par translation du terme d'ancrage η_i^3 s'écrit

$$3\,\vec{k}_i\cdot\vec{t}_j = 2\,p_j\,\pi \qquad j = (1, 2, 3)$$

Nous obtenons ainsi un ensemble de huit systèmes de trois équations à trois inconnues de la forme :

$$3\ xa = 2\ n\ \pi$$
$$3\ yb = 2\ m\ \pi$$
$$3\ zc = 2\ p\ \pi$$

qui détermine des points d'ancrage (Fig. 1) de coordonnées $\frac{2\pi}{3}\ (\frac{n}{a}, \frac{m}{b}, \frac{p}{c})$ avec n,m,p entiers.

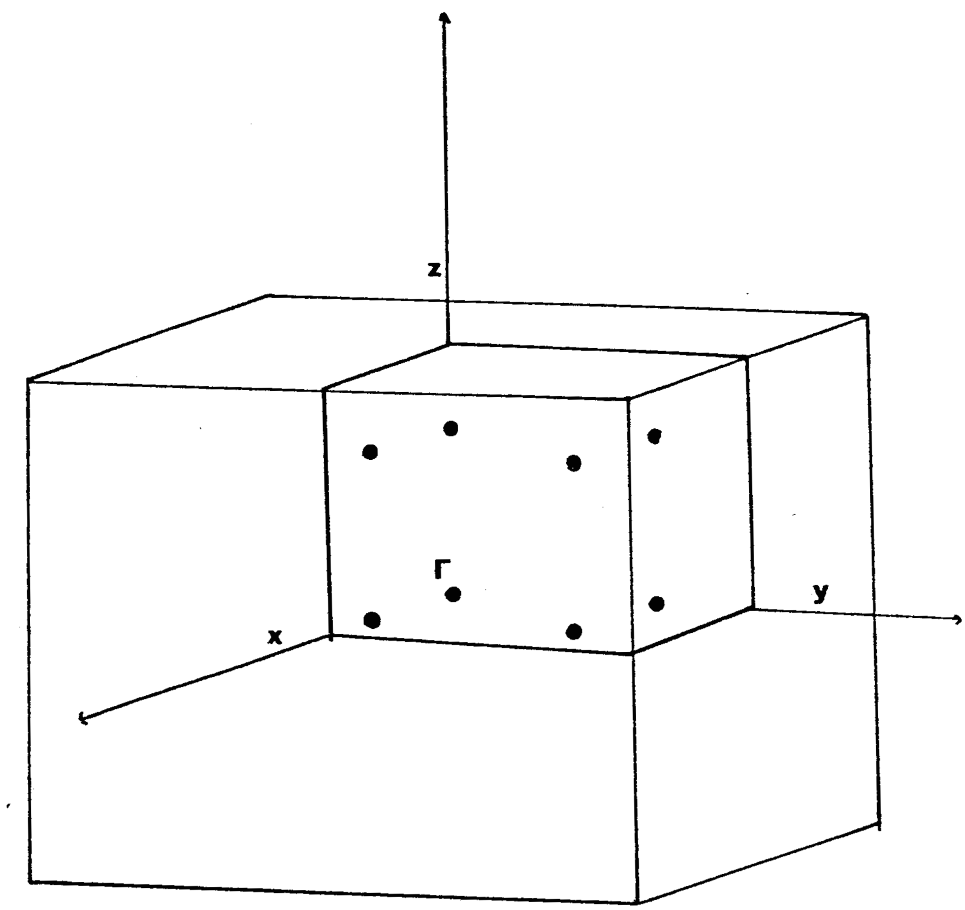


Figure 1

Points d'ancrage dans le réseau Orthorhombique P, induits par des termes de la forme η_i^3

Les points d'ancrage associés au terme $\eta_i^2\eta_j^2$ obéissent pour leur part aux équations.

$$(2\ \vec{k}_i + 2\ \vec{k}_j)\ \vec{t}_1 = 2\ p_1\pi \tag{4}$$

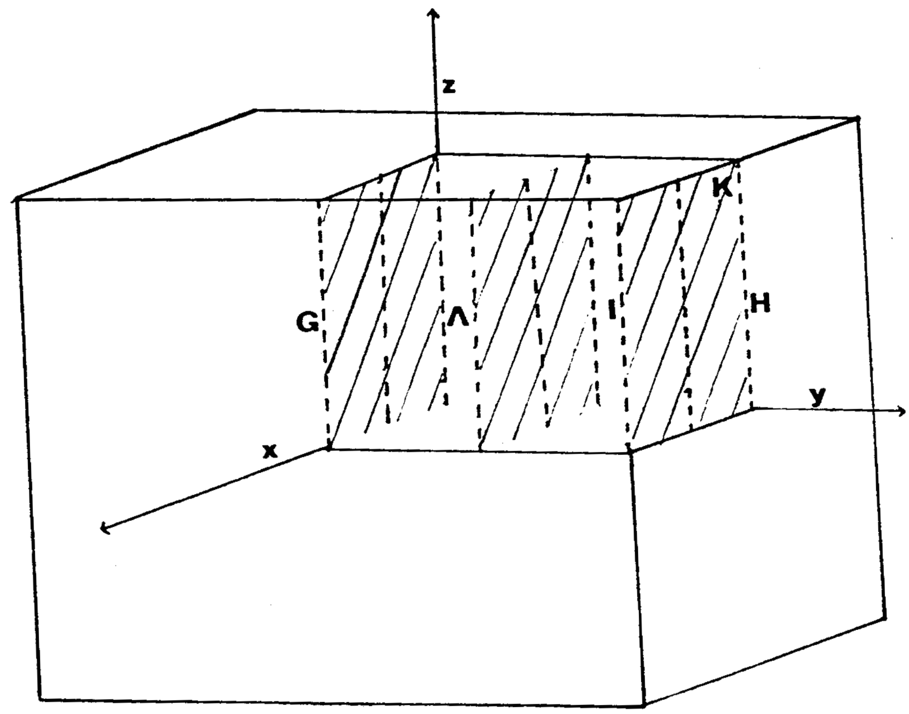
Dans le cas où i = 1 et j = 6, l'équation (4) s'exprime par

$$4 x a = 2 n \pi$$
$$4 y b = 2 m \pi$$

nous obtenons, non plus des points, mais des <u>lignes d'ancrage.</u> La composante z du vecteur pouvant prendre toutes les valeurs comprises entre 0 et $\frac{\pi}{c}$ (Fig. 2).
D'autre part pour i = 1 et j = 4 on a :

$$4 y b = 2 m \pi$$

qui est l'équation d'un <u>plan d'ancrage</u> perpendiculaire à l'axe oy



<u>Figure 2</u>
Lignes et surfaces d'ancrage dans le réseau Orthorhombique P, induites par des termes de la forme $\eta_i^2\eta_j^2$

Toutefois ces lignes et surfaces d'ancrage contiennent des points d'ancrage associés à l'apparition de monômes anisotropes additionnels. On peut donc prévoir -ce que la situation expérimentale suggère- que l'ancrage se produira sur ces points.

c) Résultats

Nous avons appliqué la méthode précédente aux termes d'ancrage formés à partir des composantes du paramètre d'ordre, pour les quatorze zones de Brillouin. Nous avons considéré l'ensemble des termes anisotropes de degré trois, quatre et certains invariants de degré six. Nos résultats sont indiqués dans les tableaux 2.1 à 2.13. Pour une zone de Brillouin donnée, les tables correspondantes contiennent des coordonnées des points d'ancrage suivis des monômes associés. Le groupe d'invariance du vecteur $\vec{k}$ (lorsqu'il est distinct de l'identité) est indiqué entre parenthèses. Les coordonnées des points, lignes et plans sont exprimés en fonction des vecteurs de base du réseau réciproque primitif que nous rappelons en annexe 1. Pour chaque réseau de Bravais nous avons illustré par une figure les points, lignes et plans compatibles avec un certain type d'invariant.

Pour ne pas alourdir la présentation, seuls sont indiqués dans ce chapitre les résultats concernant les réseaux Monoclinique et Orthorhombique. Ceux concernant les autres réseaux figurent dans l'annexe 2. La notation des points, lignes et plans des zones de Brillouin est celle des tables de Zak et al[23]. Les coordonnées indiquées entre parenthèses se déduisent par une permutation circulaire. Le centre de zone (Γ) qui n'apparait sur aucune table est compatible avec tous les types d'invariants.

Nos résultats appellent les remarques suivantes :

Les lignes et les plans d'ancrage sont associés à certains monômes de degré trois ($\eta_i\eta_j\eta_k$), quatre ($\eta_i^2\eta_j^2$, $\eta_i^2\eta_j\eta_k$, $\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l$) et six ($\eta_i^3\eta_j^3$, $\eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$), ces termes coexistent généralement dans l'énergie libre avec des monômes tels que η_i^3, η_i^4, η_i^6 qui sont associés à des points de la zone de Brillouin. On peut donc prévoir que le vecteur d'onde s'ancre en ces points. Ceci découle de ce que le terme anisotrope lorsqu'il est constitué d'une somme de plusieurs monômes, induit u n point d'ancrage résultant de l'intersection des domaines d'ancrage associés à chaque monôme. Ainsi si nous considérons l'énergie libre de la forme :

$$\Phi_1 = \frac{\alpha}{2} (\eta_1^2 + \eta_2^2) + \frac{\beta}{4} (\eta_1^2 + \eta_2^2)^2 + \frac{\beta'}{4} ((\eta_1^2 - \eta_2^2)^2 - (2\eta_1\eta_2)^2) + \ldots$$

où η_1 et η_2 se répartissent sur deux branches distinctes.
Le terme anisotrope s'écrit

$$\eta_1^4 + \eta_2^4 - 6\ \eta_1^2\eta_2^2$$

Aux monômes η_i^4 et $\eta_i^2\eta_j^2$ sont associés respectivement des points, des lignes et des surfaces d'ancrage (table 2.2) pour un réseau orthorhombique P. L'intersection

a) Points d'ancrage, réseau P

$(0\ \tfrac13\ \tfrac13\ .\ \tfrac13\ 0\ \tfrac13\ .\ \tfrac13\ \tfrac13\ \tfrac13)\ \eta_i^3, \eta_i^6 \qquad (0\ 0\ \tfrac13)(C_2)(0\ \tfrac13\ 0\ .\ \tfrac13\ 0\ 0\ .\ \tfrac13\ \tfrac13\ 0)(Cs)\ \eta_i^3, \eta_i^2\eta_j, \eta_i^6$

$(0\ \tfrac14\ \tfrac14\ .\ \tfrac14\ 0\ \tfrac14\ .\ \tfrac14\ \tfrac14\ \tfrac14\ .\ \tfrac14\ \tfrac12\ \tfrac14\ .\ \tfrac12\ \tfrac14\ \tfrac14)\ \eta_i^4 \qquad (0\ 0\ \tfrac14\ .\ 0\ \tfrac12\ \tfrac14\ .\ \tfrac12\ 0\ \tfrac14\ .\ \tfrac12\ \tfrac12\ \tfrac14)(C_2)\ \eta_i^4, \eta_i^3\eta_j$

$(0\ \tfrac14\ 0\ .\ 0\ \tfrac14\ \tfrac12\ .\ \tfrac14\ 0\ 0\ .\ \tfrac14\ 0\ \tfrac12\ .\ \tfrac14\ \tfrac14\ 0\ .\ \tfrac14\ \tfrac14\ \tfrac12\ .\ \tfrac14\ \tfrac12\ 0\ .\ \tfrac14\ \tfrac12\ \tfrac12\ .\ \tfrac12\ \tfrac14\ 0\ .\ \tfrac12\ \tfrac14\ \tfrac12)(Cs)\ \eta_i^4, \eta_i^3\eta_j$

$$\left.\begin{array}{l}(0\ 0\ \tfrac12\{Z\}.0\ \tfrac12\ 0\{Y\}.0\ \tfrac12\ \tfrac12\{C\}.\tfrac12\ 0\ 0\{A\})(C_2h)\\ (\tfrac12\ 0\ \tfrac12\{E\}.\tfrac12\ \tfrac12\ 0\{B\}.\tfrac12\ \tfrac12\ \tfrac12\{D\})(C_2h)\end{array}\right\}\ \eta_i^4, \eta_i^3\eta_j, \eta_i^2\eta_j\eta_k, \eta_i^6, \eta_i^3\eta_j^3$$

$$\left.\begin{array}{l}(0\ \tfrac16\ \tfrac16\ .\ 0\ \tfrac16\ \tfrac13\ .\ 0\ \tfrac13\ \tfrac16\ .\ \tfrac16\ 0\ \tfrac16\ .\ \tfrac16\ 0\ \tfrac13\ .\ \tfrac16\ \tfrac16\ \tfrac16\ .\ \tfrac16\ \tfrac16\ \tfrac13\ .\ \tfrac16\ \tfrac13\ \tfrac16\ .\ \tfrac16\ \tfrac13\ \tfrac13\ .\ \tfrac16\ \tfrac12\ \tfrac16\ .\ \tfrac16\ \tfrac12\ \tfrac13)\\ (\tfrac13\ 0\ \tfrac16\ .\ \tfrac13\ \tfrac16\ \tfrac16\ .\ \tfrac13\ \tfrac16\ \tfrac13\ .\ \tfrac13\ \tfrac13\ \tfrac16\ .\ \tfrac13\ \tfrac12\ \tfrac16\ .\ \tfrac13\ \tfrac12\ \tfrac13\ .\ \tfrac13\ \tfrac12\ \tfrac12\ .\ \tfrac12\ \tfrac16\ \tfrac16\ .\ \tfrac12\ \tfrac16\ \tfrac13\ .\ \tfrac12\ \tfrac13\ \tfrac16\ .\ \tfrac12\ \tfrac13\ \tfrac13)\\ (0\ 0\ \tfrac16\ .\ 0\ \tfrac12\ \tfrac16\ .\ 0\ \tfrac12\ \tfrac13\ .\ \tfrac12\ 0\ \tfrac16\ .\ \tfrac12\ 0\ \tfrac13\ .\ \tfrac12\ \tfrac12\ \tfrac16\ .\ \tfrac12\ \tfrac12\ \tfrac13)(C_2)\\ (0\ \tfrac16\ 0\ .\ 0\ \tfrac16\ \tfrac12\ .\ 0\ \tfrac13\ \tfrac12\ .\ \tfrac16\ 0\ 0\ .\ \tfrac16\ 0\ \tfrac12\ .\ \tfrac16\ \tfrac16\ 0\ .\ \tfrac16\ \tfrac16\ \tfrac12\ .\ \tfrac16\ \tfrac13\ 0\ .\ \tfrac16\ \tfrac13\ \tfrac12\ .\ \tfrac16\ \tfrac12\ 0)(Cs)\\ (\tfrac16\ \tfrac12\ \tfrac12\ .\ \tfrac13\ 0\ \tfrac12\ .\ \tfrac13\ \tfrac16\ 0\ .\ \tfrac13\ \tfrac16\ \tfrac12\ .\ \tfrac13\ \tfrac13\ \tfrac12\ .\ \tfrac13\ \tfrac12\ 0\ .\ \tfrac12\ \tfrac16\ 0\ .\ \tfrac12\ \tfrac16\ \tfrac12\ .\ \tfrac12\ \tfrac13\ 0\ .\ \tfrac12\ \tfrac13\ \tfrac12)(Cs)\end{array}\right\}\ \eta_i^6$$

b) Points d'ancrage, réseau B

$\left(\tfrac13\ 0\ \tfrac13\ .\ \tfrac13\ \tfrac13\ \tfrac13\right)\ \eta_i^3, \eta_i^6 \qquad \left(0\ \tfrac13\ 0\ .\ \tfrac23\ 0\ 0\ .\ \tfrac23\ \tfrac13\ 0\right)(Cs)\ \eta_i^3, \eta_i^2\eta_j, \eta_i^6$

$\left(0\ \tfrac14\ \tfrac12\ .\ \tfrac14\ 0\ \tfrac14\ .\ \tfrac14\ \tfrac14\ \tfrac14\ .\ \tfrac14\ \tfrac12\ \tfrac14\ .\ \tfrac12\ \tfrac14\ 0\ .\ \tfrac12\ \tfrac14\ \tfrac12\ .\ \tfrac34\ 0\ \tfrac14\ .\ \tfrac34\ \tfrac14\ \tfrac14\ .\ \tfrac34\ \tfrac12\ \tfrac14\right)\ \eta_i^4$

$\left(\tfrac12\ 0\ \tfrac14\ .\ \tfrac12\ \tfrac12\ \tfrac14\ .\ \tfrac14\ 0\ \tfrac12\ .\ \tfrac14\ \tfrac14\ \tfrac12\ .\ \tfrac14\ \tfrac12\ \tfrac12\right)\ \eta_i^3\eta_j$

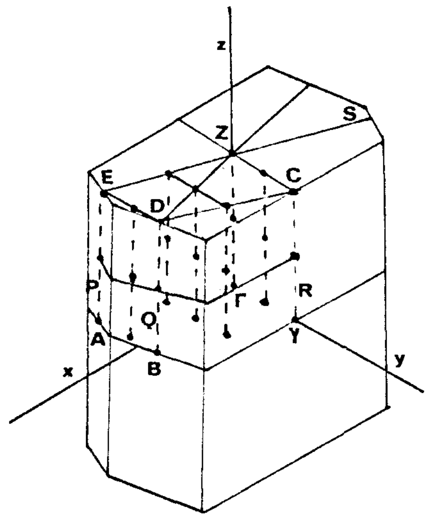
$\left(0\ \tfrac14\ 0\ .\ \tfrac12\ 0\ 0\ .\ \tfrac12\ \tfrac12\ 0\ .\ 0\ \tfrac14\ 1\right)(Cs)\left(0\ 0\ \tfrac12\ .\ 0\ \tfrac12\ \tfrac12\right)(C_2)\ \eta_i^4, \eta_i^3\eta_j$

$\left(\tfrac12\ 0\ \tfrac12\{F\}.\tfrac12\ \tfrac12\ \tfrac12\{F''\}\right)(Ci)\ \eta_i^4, \eta_i^3\eta_j, \eta_i^2\eta_j\eta_k, \eta_i^6, \eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$

$\left(0\ \tfrac12\ 0\{Y\}.1\ 0\ 0\{A\}.0\ 0\ 1\{Z\}.1\ \tfrac12\ 0\{B\}.0\ \tfrac12\ 1\{C\}\right)(C_2h)\ \eta_i^4, \eta_i^3\eta_j, \eta_i^2\eta_j\eta_k, \eta_i^6, \eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$

$$\left.\begin{array}{l}\left(0\ \tfrac16\ \tfrac13\ .\ 0\ \tfrac13\ \tfrac13\ .\ 0\ 0\ \tfrac23\ .\ 0\ \tfrac16\ \tfrac23\ .\ 0\ \tfrac13\ \tfrac23\ .\ 0\ \tfrac16\ 1\ .\ 0\ \tfrac13\ 1\ .\ \tfrac16\ 0\ \tfrac16\ .\ \tfrac16\ \tfrac16\ \tfrac16\ .\ \tfrac16\ \tfrac13\ \tfrac16\ .\ \tfrac16\ \tfrac12\ \tfrac16\right)\\ \left(\tfrac16\ 0\ \tfrac12\ .\ \tfrac16\ \tfrac16\ \tfrac12\ .\ \tfrac16\ \tfrac13\ \tfrac12\ .\ \tfrac16\ \tfrac12\ \tfrac12\ .\ \tfrac16\ 0\ \tfrac56\ .\ \tfrac16\ \tfrac16\ \tfrac56\ .\ \tfrac16\ \tfrac13\ \tfrac56\ .\ \tfrac16\ \tfrac12\ \tfrac56\ .\ \tfrac13\ \tfrac16\ \tfrac13\ .\ \tfrac13\ \tfrac12\ \tfrac13\ .\ \tfrac13\ 0\ \tfrac23\right)\\ \left(\tfrac13\ \tfrac16\ \tfrac23\ .\ \tfrac13\ \tfrac13\ \tfrac23\ .\ \tfrac13\ \tfrac12\ \tfrac23\ .\ \tfrac12\ 0\ \tfrac16\ .\ \tfrac12\ \tfrac16\ \tfrac16\ .\ \tfrac12\ \tfrac13\ \tfrac16\ .\ \tfrac12\ \tfrac12\ \tfrac16\ .\ \tfrac12\ \tfrac13\ \tfrac12\ .\ \tfrac12\ \tfrac16\ \tfrac12\ .\ \tfrac23\ 0\ \tfrac13\ .\ \tfrac23\ \tfrac16\ \tfrac13\right)\\ \left(\tfrac23\ \tfrac13\ \tfrac13\ .\ \tfrac23\ \tfrac12\ \tfrac13\ .\ \tfrac56\ 0\ \tfrac16\ .\ \tfrac56\ \tfrac16\ \tfrac16\ .\ \tfrac56\ \tfrac13\ \tfrac16\ .\ \tfrac56\ \tfrac12\ \tfrac16\right)\left(0\ 0\ \tfrac13\ .\ 0\ \tfrac12\ \tfrac13\ .\ 0\ \tfrac12\ \tfrac23\right)(C_2)\\ \left(\tfrac13\ 0\ 0\ .\ \tfrac13\ \tfrac16\ 0\ .\ \tfrac13\ \tfrac13\ 0\ .\ \tfrac13\ \tfrac12\ 0\ .\ \tfrac23\ \tfrac16\ 0\ .\ \tfrac23\ \tfrac12\ 0\right)(Cs)\end{array}\right\}\ \eta_i^6$$

Zone de Brillouin P



Zone de Brillouin B

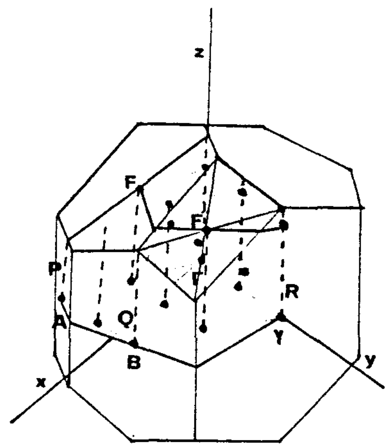


Figure 1: Points, lignes et surfaces d'ancrage dans le systéme monoclinique, associés à des invariants anisotropes de degré 4.

c) Lignes et surfaces d'ancrage Réseau P

$\left(0\ \tfrac14\ k\ .\ \tfrac14\ 0\ k\ .\ \tfrac14\ \tfrac14\ k\ .\ \tfrac14\ \tfrac12\ k\ .\ \tfrac12\ \tfrac14\ k\right)\ \eta_i^2\eta_j^2$

$\left(0\ 0\ k\{\Delta\}.0\ \tfrac12\ k\{R\}.\tfrac12\ 0\ k\{P\}.\tfrac12\ \tfrac12\ k\{Q\}\right)(C_2)\eta_i^2\eta_i^2, \eta_i^2\eta_j\eta_k, \eta_i^3\eta_j^3$

$$\left.\begin{array}{l}\left(0\ \tfrac16\ k\ .\ 0\ \tfrac13\ k\ .\ \tfrac12\ \tfrac16\ k\ .\ \tfrac12\ \tfrac13\ k\ .\ \tfrac16\ 0\ k\ .\ \tfrac16\ \tfrac16\ k\right)\\ \left(\tfrac16\ \tfrac13\ k\ .\ \tfrac16\ \tfrac12\ k\ .\ \tfrac13\ 0\ k\ .\ \tfrac13\ \tfrac16\ k\ .\ \tfrac13\ \tfrac13\ k\ .\ \tfrac13\ \tfrac12\ k\right)\end{array}\right\}\ \eta_i^3\eta_i^3$$

$\left(k'k\ \tfrac14\right)\ \eta_i^2\eta_j^2 \qquad \left(k'k\ \tfrac16\ .\ k'k\ \tfrac13\right)\ \eta_i^3\eta_j^3$

$\left(k'k\ 0\{\Xi\}.k'k\ \tfrac12\{S\}\right)(Cs)\ \eta_i^2\eta_j^2, \eta_i^2\eta_i\eta_k, \eta_i^3\eta_j^3$

d) Lignes et surfaces d'ancrage Réseau B

$\left(0\ \tfrac14\ k\ .\ \tfrac12\ \tfrac14\ k\ .\ 1\ \tfrac14\ k\right)\ \eta_i^2\eta_j^2 \qquad \left(\tfrac12\ 0\ k\ .\ \tfrac12\ \tfrac12\ k\right)\ \eta_i^2\eta_j^2, \eta_i^2\eta_j\eta_k$

$\left(0\ 0\ k\{\Delta\}.0\ \tfrac12\ k\{R\}.1\ 0\ k\{P\}.1\ \tfrac12\ k\{Q\}\right)(C_2)\ \eta_i^2\eta_j^2, \eta_i^2\eta_j\eta_k, \eta_i^3\eta_j^3$

$$\left.\begin{array}{l}\left(\tfrac13\ 0\ k\ .\ \tfrac23\ 0\ k\ .\ 0\ \tfrac16\ k\ .\ \tfrac13\ \tfrac16\ k\ .\ \tfrac23\ \tfrac16\ k\ .\ 1\ \tfrac16\ k\right)\\ \left(0\ \tfrac13\ k\ .\ \tfrac13\ \tfrac13\ k\ .\ \tfrac23\ \tfrac13\ k\ .\ 1\ \tfrac13\ k\ .\ \tfrac13\ \tfrac12\ k\ .\ \tfrac23\ \tfrac12\ k\right)\end{array}\right\}\ \eta_i^3\eta_j^3$$

$\left(k'k\ \tfrac12\right)\ \eta_i^2\eta_j^2 \qquad \left(k'k\ \tfrac13\ .\ k'k\ \tfrac23\right)\eta_i^3\eta_j^3$

$\left(k'k\ 0\{\Xi\}.k'k\ 1\{S\}\right)(Cs)\ \eta_i^2\eta_j^2, \eta_i^2\eta_j\eta_k, \eta_i^3\eta_j^3$

Table 2.1: Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans les réseaux monoclinique P et B

a) Points d'ancrage, réseau P

$\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\Big)\ n_i^3 , n_i^6 \qquad \Big(0\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ 0\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ 0\Big)\ (Cs)\ n_i^3 , n_i^2 n_j , n_i^6$

$0\ 0\ \frac{1}{3}\ .0\ \frac{1}{3}\ 0\ .\frac{1}{3}\ 0\ 0\Big)\ (C_2v)\ n_i^3 , n_i^2 n_j , n_i n_j n_k , n_i^6 , n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\Big)\ n_i^4 \qquad \Big(0\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{4}\ 0\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ 0\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\Big)\ (Cs)\ n_i^4 , n_i^3 n_j$

$\left.\begin{array}{l} \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ .0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{4}\ 0\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ 0\ .\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ 0\Big)\ (Cs) \\ 0\ \frac{1}{4}\ .0\ \frac{1}{4}\ 0\ .\frac{1}{4}\ 0\ 0\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\Big)\ (C_2v) \end{array}\right\}\ n_i^4 , n_i^3 n_j , n_i^2 n_j n_k$

$\left.\begin{array}{l} 0\ \frac{1}{2}\{Z\}\ .0\ \frac{1}{2}\ 0\{Y\}\ .0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\{T\}\Big)\ (D_2h) \\ \frac{1}{2}\ 0\ 0\{X\}\ .\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}\{U\}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0\{S\}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\{R\}\Big)\ (D_2h) \end{array}\right\}\ n_i^4 , n_i^3 n_j , n_i^2 n_j n_k , n_i n_j n_k n_l , n_i^6 , n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left.\begin{array}{l} \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\Big) \\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ .0\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ .0\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{6}\ 0\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ 0\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ 0\Big)\ (Cs) \\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ 0\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ 0\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ 0\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\Big)\ (Cs) \\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\Big)\ (Cs) \end{array}\right\}\ n_i^6$

$\left.\begin{array}{l} \frac{1}{3}\ 0\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ 0\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{6}\ 0\ 0\ .\frac{1}{6}\ 0\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ 0\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\Big)\ (C_2v) \\ 0\ \frac{1}{6}\ .0\ \frac{1}{6}\ 0\ .0\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ .0\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ .0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ .0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{6}\Big)\ (C_2v) \\ \frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ 0\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ 0\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\Big)\ (C_2v) \end{array}\right\}\ n_i^6 , n_i^2 n_j^2 n_k^2$

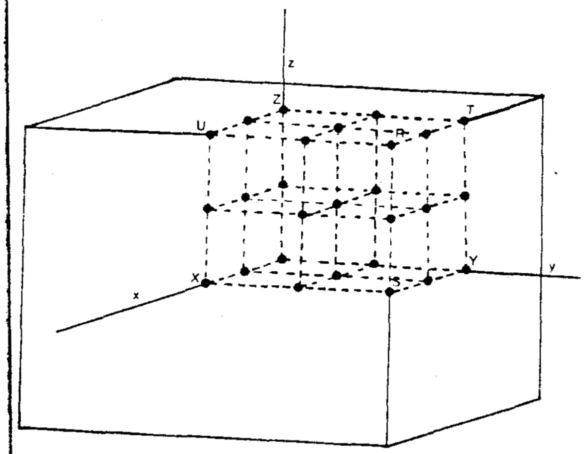


Figure 1: Points et lignes d'ancrage dans le systéme orthorhombique P associés aux invariants de degré 4

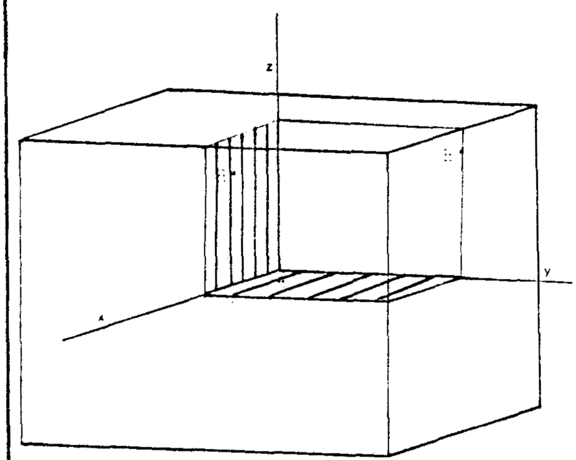


Figure 2: Surfaces d'ancrage intérieures à la zone de Brillouin dans le systéme orthorhombique P associées aux invariants de degré 4 et 6

b) Lignes et surfaces d'ancrage, réseau P

$\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ k)\Big)\ n_i^2 n_j^2 \qquad \Big((0\ \frac{1}{4}\ k).(\frac{1}{4}\ 0\ k).(\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ k).(\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ k)\Big)\ n_i^2 n_j^2 , n_i^2 n_j n_k$

$\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ k).(\frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ k).(\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ k)\Big)\ n_i^3 n_j^3$

$0\ \frac{1}{6}\ k).(0\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ k).(\frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{1}{6}\ 0\ k).(\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ k).(\frac{1}{3}\ 0\ k).(\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ k)\Big)\ (Cs)\ n_i^3 n_j^3$

$0\ 0\ k).(0\ \frac{1}{2}\ k).(\frac{1}{2}\ 0\ k).(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ k)\Big)\ (C_2v)\ n_i^2 n_j^2 , n_i^2 n_j n_k , n_i n_j n_k n_l , n_i^3 n_j^3$

$k'k\ \frac{1}{4})\Big)\ n_i^2 n_j^2 , n_i n_j n_k n_l \qquad \Big((k'k\ \frac{1}{6}).(k'k\ \frac{1}{3})\Big)\ n_i^3 n_j^3$

$k'k\ 0).(k'k\ \frac{1}{2})\Big)\ (Cs)\ n_i^2 n_j^2 , n_i^2 n_j n_k , n_i n_j n_k n_l , n_i^3 n_j^3$

Table 2.2: Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le réseau orthorhombique P

a) Points d'ancrage, réseau I

$\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ 0\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ 0\Big]$ (Cs) $\eta_i^3, \eta_i^2\eta_j, \eta_i^6$ $\qquad \Big(1\ \frac{1}{3}\ 0\ .1\ 0\ \frac{1}{3}\Big]$ (C2v) $\eta_i^3, \eta_i^2\eta_j, \eta_i^6$

$0\ 0\ .0\ \frac{2}{3}\ 0\ .0\ 0\ \frac{2}{3}\Big]$ (C2v) $\eta_i^3, \eta_i^2\eta_j, \eta_i\eta_j\eta_k, \eta_i^6, \eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$

$\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\Big]$ η_i^4 $\qquad \Big(0\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{4}\ 0\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ 0\ .\frac{3}{4}\ 0\ \frac{1}{4}\ .\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ 0\Big]$ (Cs) $\eta_i^4\ \eta_i^3\eta_j$

$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\Big]$ (C2) $\Big(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\Big]$ (C2v) $\eta_i^3\eta_j$

$\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ .0\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{4}\ 0\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ 0\ .\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ 0\Big]$ (Cs) $\eta_i^3\eta_j, \eta_i^2\eta_j\eta_k$

$0\ \frac{1}{2}\ .0\ \frac{1}{2}\ 0\ .\frac{1}{2}\ 0\ 0\Big]$ (C2v) $\Big(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}(R)\Big]$ (D2) $\eta_i^4, \eta_i^3\eta_j, \eta_i^2\eta_j\eta_k$

$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}(T).\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}(U).\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0(S)\Big]$ (C2h) $\Big(1\ 0\ 0(X)\Big]$ (D2h) $\eta_i^4, \eta_i^3\eta_j, \eta_i^2\eta_j\eta_k, \eta_i\eta_j\eta_k\eta_l, \eta_i^6, \eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$

$\left.\begin{array}{l} \frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\Big] \\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ .\frac{2}{3}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ .\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\Big] \\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}.\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ 0\ .\frac{1}{6}\ 0\ \frac{1}{6}\ .\frac{2}{3}\ 0\ \frac{1}{3}\Big]\ (Cs) \\ \frac{1}{3}\ 0\ .\frac{5}{6}\ \frac{1}{6}\ 0\ .\frac{5}{6}\ 0\ \frac{1}{6}\ \ 1\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\Big]\ (Cs) \end{array}\right\}\eta_i^6$

$\left.\begin{array}{l} \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ .0\ \frac{1}{3}\ 0\ .0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ 0\ .\frac{1}{6}\ 0\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ 0\ .\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{6}\Big]\ (Cs) \\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\Big]\ (C2)\ \Big(0\ 0\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ 0\ 0\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ .\frac{2}{3}\ 0\ 0\Big]\ (C2v) \end{array}\right\}\eta_i^6, \eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$

b) Lignes et surfaces d'ancrage, réseau I

$\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ k).(\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ k)(\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ k)\Big]\eta_i^2\eta_j^2$ $\quad \Big((\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ k).(\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ k)\Big]$ $\eta_i^2\eta_j\eta_k$

$\frac{1}{2}\ 0\ k).(0\ \frac{1}{2}\ k)\Big]$ (Cs) $\eta_i^2\eta_j^2, \eta_i^2\eta_j\eta_k$ $\qquad \Big[(1\ 0\ k).(0\ 1\ k)\Big]$ (C2v) $\eta_i^2\eta_j\eta_k, \eta_i\eta_j\eta_k\eta_l, \eta_i^3\eta_j^3$

$0\ 0\ k)\Big]$ (C2v) $\eta_i^2\eta_j^2, \eta_i^2\eta_j\eta_k, \eta_i\eta_j\eta_k\eta_l, \eta_i^3\eta_j^3$

$\left.\begin{array}{l} \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ k).(\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ k).(\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ k).(\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{5}{6}\ \frac{1}{6}\ k).(1\ \frac{1}{3}\ k)\Big] \\ 0\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{1}{3}\ 0\ k).(\frac{2}{3}\ 0\ k)\Big]\ (Cs)\ \Big((\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ k)\Big]\ (C2v) \end{array}\right\}\eta_i^3\eta_j^3$

$k'k\ \frac{1}{3}).(k'k\ \frac{2}{3})\Big]$ $\eta_i^3\eta_j^3$ $\qquad \Big((k'k\ 0).(k'k\ 1)\Big]$ (Cs) $\eta_i^2\eta_j^2, \eta_i^2\eta_j\eta_k, \eta_i\eta_j\eta_k\eta_l, \eta_i^3\eta_j^3$

$k'k\ \frac{1}{2})\Big]$ $\eta_i^2\eta_j^2, \eta_i\eta_j\eta_k\eta_l$

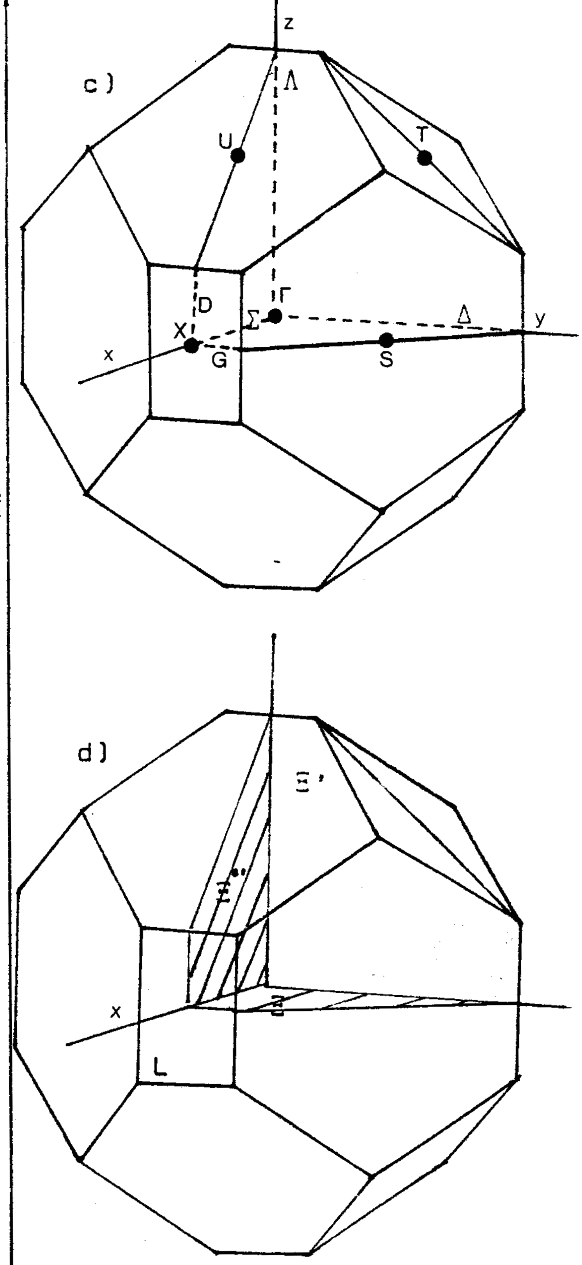


Figure 1: c) Points et lignes d'ancrage
d) Surfaces d'ancrage dans le systéme orthorhombique I associés aux invariants de degré 4 et 6.

Table 2.3

Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le réseau orthorhombique I

a) Points d'ancrage, réseau C

$\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\Big)\ \eta_i^3,\eta_i^6$ $\qquad \Big(0\ \frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ 0\ .\frac{1}{3}\ 1\ \frac{1}{3}\Big)(Cs)\ \eta_i^3,\eta_i^2\eta_j,\eta_i^6$

$1\ 0\ .0\ \frac{2}{3}\ 0\Big)(C_2v)\ \eta_i^3,\eta_i^2\eta_j,\eta_i\eta_j\eta_k,\eta_i^6,\eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$

$\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\Big)\ \eta_i^4$

$\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ 0\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ 0\ .\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{2}\Big)(Cs)\ \eta_i^4,\eta_i^3\eta_j$

$\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\Big)(C_2)\Big(0\ \frac{1}{2}\ 0\ .0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ .0\ 1\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{2}\ 0\ 0\ .\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}\Big)(C_2v)\ \eta_i^4,\eta_i^3\eta_j$

$\left.\begin{array}{l}\frac{1}{2}\ 0\{S\}.\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\{R\}\Big)(C_2h)\\ 0\ \frac{1}{2}\{Z\}.0\ 1\ 0\{Y\}.0\ 1\ \frac{1}{2}\{T\}\Big)(D_2h)\end{array}\right\}\eta_i^4,\eta_i^3\eta_j,\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l,\eta_i^6,\eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$

$\left.\begin{array}{l}\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{6}\ \frac{5}{6}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ \frac{5}{6}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\Big)\\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ .0\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ .0\ \frac{2}{3}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ 0\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ 0\ .\frac{1}{6}\ \frac{5}{6}\ 0\ .\frac{1}{6}\ \frac{5}{6}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{3}\ 0\ \frac{1}{6}\Big)(Cs)\\ 0\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ 0\ .\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{3}\ 1\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ 0\ .\frac{2}{3}\ 0\ \frac{1}{6}\ .\frac{2}{3}\ 0\ \frac{1}{3}\Big)(Cs)\\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ .0\ \frac{2}{3}\ 0\ .0\ \frac{2}{3}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{3}\ 0\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{3}\ 1\ \frac{1}{2}\ .\frac{2}{3}\ 0\ \frac{1}{2}\Big)(C_2v)\end{array}\right\}\eta_i^6$

$\left.\begin{array}{l}\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\Big)(Cs)\Big(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\Big)(C_2)\\ 0\ \frac{1}{6}\ .0\ 0\ \frac{1}{3}\ .0\ \frac{1}{3}\ 0\ .0\ 1\ \frac{1}{6}\ .0\ 1\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ 0\ 0\Big)(C_2v)\end{array}\right\}\eta_i^6,\eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$

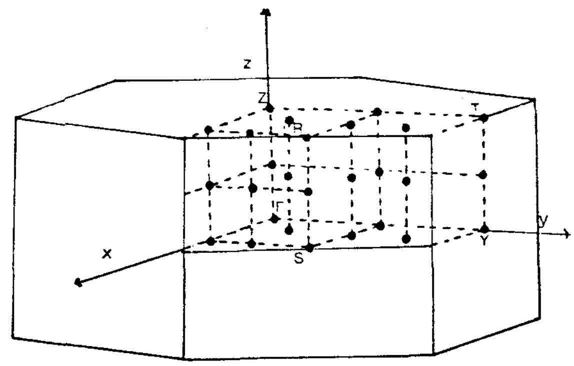


Figure 1: Points et lignes d'ancrage dans le systéme orthorhombique C associés aux invariants de degrés 4.

b) Lignes et surfaces d'ancrage, réseau C

$\frac{1}{4}\ k\ .\frac{1}{2}\ k\ \frac{1}{4}\ .k\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}.\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ k\Big)\ \eta_i^2\eta_j^2$ $\quad\Big(\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ k\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ k\Big)\ \eta_i^2\eta_j\eta_k$

$0)k\ .(k\ 0)\frac{1}{4}\ .k\ 1\ \frac{1}{4}\Big)(Cs)\ \eta_i^2\eta_j^2,\eta_i^2\eta_j\eta_k$ $\qquad\Big(0\ 1\ k\{H\}\Big)(C_2v)\ \eta_i^2\eta_j^2,\eta_i^2\eta_j\eta_k,\eta_i^3\eta_j^3$

$k)0\ .k\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\Big)(Cs)\ \eta_i^2\eta_j^2,\eta_i^2\eta_j\eta_k,\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l$

$\frac{1}{2}\ k\{I\}\Big)(C_2)\Big((0\ 0\ k).(k\ 0)\frac{1}{2}\ .k\ 1\ 0\{C\}.k\ 1\ \frac{1}{2}\{E\}\Big)(C_2v)\ \eta_i^2\eta_j^2,\eta_i^2\eta_j\eta_k,\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l,\eta_i^3\eta_j^3$

$\left.\begin{array}{l}\frac{1}{6}\ k\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ k\ .\frac{1}{6}\ \frac{5}{6}\ k\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ k\ .\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ k\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ k\Big)\\ \frac{1}{3}\ k\ .0\ \frac{2}{3}\ k\ .\frac{1}{3}\ 0\ k\ .\frac{1}{3}\ 1\ k\ .\frac{2}{3}\ 0\ k\Big)(Cs)\\ \frac{1}{3})\frac{1}{6}\ .(k\ \frac{1}{3})\frac{1}{3}\ .(k\ \frac{1}{3})\frac{1}{2}\ .(k\ \frac{2}{3})\frac{1}{6}\ .(k\ \frac{2}{3})\frac{1}{3}\ .(k\ \frac{2}{3})\frac{1}{2}\Big)\\ 0)\frac{1}{6}\ .(k\ 0)\frac{1}{3}\ .(k\ \frac{1}{3})0\ .(k\ \frac{2}{3})0\ .(k\ 1)\frac{1}{6}\ .(k\ 1)\frac{1}{3}\Big)(Cs)\\ 1)0\ .(k\ 1)\frac{1}{2}\Big)(C_2v)\end{array}\right\}\eta_i^3\eta_j^3$

$k)k'.k'k\ \frac{1}{4}\Big)\ \eta_i^2\eta_j^2,\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l$

$'k\ 0).k'1\ k\{K\}.k'k\ \frac{1}{2}\Big)(Cs)\ \eta_i^2\eta_j^2,\eta_i^2\eta_j\eta_k,\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l,\eta_i^3\eta_j^3$

$k)k'.(\frac{2}{3}\ k)k'.k'k\ \frac{1}{6}\ .k'k\ \frac{1}{3}\Big)\ \eta_i^3\eta_j^3$

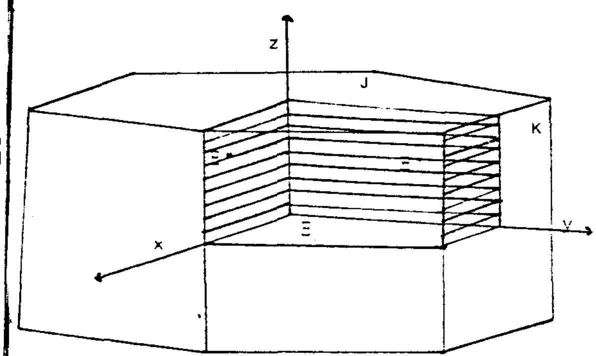


Figure 2: Surfaces d'ancrage dans le systéme orthorhombique C associées aux invariants de degrés 4 et 6.

Table 2.4 Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le réseau orthorhombique C

a) Points d'ancrage, réseau F

$\left(\frac{1}{3}\,\frac{1}{3}\,\frac{1}{3}\right)\ \eta_i^3,\eta_i^6 \qquad \left(0\,\frac{2}{3}\,\frac{2}{3}\,.\frac{2}{3}\,0\,\frac{2}{3}\,.\frac{2}{3}\,\frac{2}{3}\,0\,.\frac{1}{3}\,\frac{1}{3}\,1\,.\frac{1}{3}\,1\,\frac{1}{3}\,.1\,\frac{1}{3}\,\frac{1}{3}\right)(Cs)\ \eta_i^3\cdot\eta_i^2\eta_j$

$\left(0\,0\,\frac{2}{3}\,.0\,\frac{2}{3}\,0\,.\frac{2}{3}\,0\,0\right)(C_2v)\ \eta_i^3,\eta_i^2\eta_j,\eta_i\eta_j\eta_k,\eta_i^6,\eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$

$\left(\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,.\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\,.\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\,\frac{1}{4}\,.\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\,\frac{3}{4}\,.\frac{3}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\right)\ \eta_i^4$

$\left(\frac{1}{2}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,.\frac{1}{4}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{4}\,.\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{2}\,.\frac{1}{2}\,\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\,.\frac{1}{4}\,\frac{1}{2}\,\frac{3}{4}\,.\frac{1}{2}\,\frac{3}{4}\,\frac{1}{4}\,.\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\,\frac{1}{2}\,.\frac{3}{4}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{4}\,.\frac{3}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{2}\right)\ \eta_i^3\eta_j$

$\left(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{4}\,.\frac{1}{4}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,.\frac{1}{2}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{2}\right)\ \eta_i^3\eta_j,\eta_i^2\eta_j\eta_k$

$\left(0\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,.\frac{1}{2}\,0\,\frac{1}{2}\,.\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,0\right)(Cs)\left(0\,\frac{1}{2}\,1\,.0\,1\,\frac{1}{2}\,.\frac{1}{2}\,0\,1\,.\frac{1}{2}\,1\,0\right)(C_2v)\ \eta_i^4,\eta_i^3\eta_j$

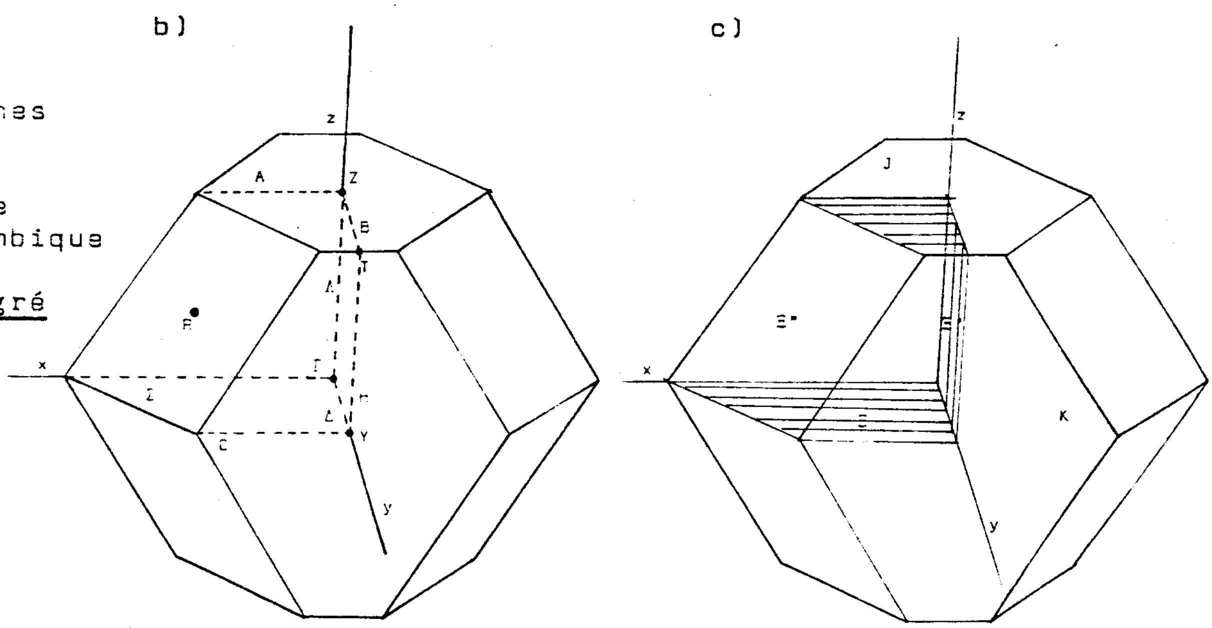
$\left(0\,0\,\frac{1}{2}\,.0\,\frac{1}{2}\,0\,.\frac{1}{2}\,0\,0\right)(Cs)\ \eta_i^4,\eta_i^3\eta_j,\eta_i^2\eta_j\eta_k$

$\left(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\{R\}\right)(C1)\left(0\,0\,1\{Z\}.0\,1\,0\{Y\}.1\,0\,0\{X\}.0\,1\,1\{T\}\right)(D_2h)\begin{cases}\eta_i^4\cdot\eta_i^3\eta_j\cdot\eta_i^2\eta_j\eta_k\cdot\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l\\ \eta_i^6,\eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2\end{cases}$

$\left.\begin{array}{l}\left(\frac{1}{6}\,\frac{1}{6}\,\frac{1}{6}\,.\frac{1}{6}\,\frac{1}{6}\,\frac{1}{2}\,.\frac{1}{6}\,\frac{1}{6}\,\frac{5}{6}\,.\frac{1}{6}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{6}\,.\frac{1}{6}\,\frac{1}{2}\,\frac{5}{6}\,.\frac{1}{6}\,\frac{5}{6}\,\frac{1}{6}\,.\frac{1}{3}\,\frac{1}{3}\,\frac{2}{3}\,.\frac{1}{3}\,\frac{2}{3}\,\frac{1}{3}\,.\frac{1}{2}\,\frac{1}{6}\,\frac{1}{6}\,.\frac{2}{3}\,\frac{1}{3}\,\frac{1}{3}\,.\frac{5}{6}\,\frac{1}{6}\,\frac{1}{6}\right)\\ \left(0\,\frac{1}{3}\,\frac{1}{3}\,.0\,\frac{1}{3}\,\frac{2}{3}\,.0\,\frac{2}{3}\,\frac{1}{3}\,.0\,\frac{2}{3}\,\frac{2}{3}\,.\frac{1}{3}\,0\,\frac{1}{3}\,.\frac{1}{3}\,0\,\frac{2}{3}\,.\frac{1}{3}\,\frac{1}{3}\,0\,.\frac{1}{3}\,\frac{2}{3}\,0\,.\frac{2}{3}\,0\,\frac{1}{3}\,.\frac{2}{3}\,\frac{1}{3}\,0\right)(Cs)\end{array}\right\}\ \eta_i^6$

$\left.\begin{array}{l}\left(\frac{1}{6}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,.\frac{1}{2}\,\frac{1}{6}\,\frac{1}{2}\,.\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{6}\right)\\ \left(0\,0\,\frac{1}{3}\,.0\,\frac{1}{3}\,0\,.0\,\frac{1}{3}\,1\,.0\,\frac{2}{3}\,1\,.0\,1\,\frac{1}{3}\,.0\,1\,\frac{2}{3}\,.\frac{1}{3}\,0\,0\right)(C_2v)\end{array}\right\}\eta_i^6,\eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$

igure 1:
Points et lignes
ancrage
Surfaces
ancrage dans le
stéme orthorhombique
associés aux
variants de degré
et 6.



d) Ligness et surfaces d'ancrage, réseau F

$\left((\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,k)\right)\ \eta_i^2\eta_j^2 \qquad \left((0\,\frac{1}{2}\,k).(1\,\frac{1}{2}\,k)(\frac{1}{2}\,0\,k)(\frac{1}{2}\,1\,k)\right)\ \eta_i^2\eta_j^2,\eta_i^2\eta_j\eta_k$

$\left((0\,0\,k).(0\,1\,k).(1\,1\,k)(1\,0\,k)\right)(C_2v)\ \eta_i^2\eta_j^2\cdot\eta_i^2\eta_j\eta_k\cdot\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l\cdot\eta_i^3\eta_j^3$

$\left.\begin{array}{l}\left((\frac{1}{3}\,\frac{1}{3}\,k).(\frac{1}{3}\,\frac{2}{3}\,k).(\frac{2}{3}\,\frac{1}{3}\,k).(\frac{2}{3}\,\frac{2}{3}\,k)\right)\left((1\,0\,k)\right)(C_2v)\\ \left((0\,\frac{1}{3}\,k).(0\,\frac{2}{3}\,k).(\frac{1}{3}\,0\,k).(\frac{1}{3}\,1\,k).(\frac{2}{3}\,0\,k).(\frac{2}{3}\,1\,k).(1\,\frac{1}{3}\,k).(1\,\frac{2}{3}\,k)\right)(Cs)\end{array}\right\}\eta_i^3\eta_j^3$

$\left((k'k\,\frac{1}{2})\right)\ \eta_i^2\eta_j^2\cdot\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l \quad \left((k'k\,0).(k'k\,1)\right)(Cs)\ \eta_i^2\eta_j^2\cdot\eta_i^2\eta_j\eta_k\cdot\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l\cdot\eta_i^3\eta_j^3$

$\left((k'k\,\frac{1}{3}).(k'k\,\frac{2}{3})\right)\ \eta_i^3\eta_j^3$

Table 2.5 Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le réseau orthorhombique F de ces solutions nous donne bien une série de points d'ancrage. Toutefois on peut supposer que si la symétrie du système détermine exclusivement des lignes ou des plans d'ancrage, le vecteur d'onde peut avoir tendance à glisser et tourner respectivement sur ces lignes et plans avant de s'accrocher en des points particuliers. Remarquons que la détermination des points d'ancrage doit tenir compte de la répartition des composantes du paramètre d'ordre η_i sur les diverses branches de l'étoile du vecteur $\vec{k}_1$. Ainsi si l'on considère à titre d'exemple le trihydrosélénure de Rubidium $(RbH_3(SeO_3)_2)$ [8].La transition dans ce corps est associée à une représentation bidimensionnelle correspondant à une étoile $\vec{k}_1$ à une branche. Cette représentation permet la construction d'un terme anisotrope $\eta_1^4 + \eta_2^4 - 6\eta_1^2\eta_2^2$. Toutefois η_1 et η_2 correspondent au même vecteur $\vec{k}_1 = (0, 0, \frac{1}{2})$. Par conséquent le monome $\eta_1^2\eta_2^2$ possède les mêmes propriétes de symétrie que η_1^4 qui est donc le seul type de terme associé au point d'ancrage dans ce composé.

d) Données expérimentales

Nous avons reporté dans la table 2.14 et 2.15 les points d'ancrage d'un certain nombre de matériaux pour lesquels les données expérimentales sont suffisantes. Les résultats contenus dans ces tables appellent les remarques suivantes.

La majorité des transitions d'ancrage observées expérimentalement au dessous d'une phase incommensurable (table 2.15) sont induites par des termes anisotropes de degré 3 ($TaSe_2$, phase δ de $(CH_3NH_7)_2MnCl_4)$, 4 ($(NH_4)_2BeF_4$, $(N(CH_3)_4)_2CuBr_4$) et 6 (K_2SeO_4; Rb_2ZnCl_4). Toutefois on trouve également des termes d'ancrage de degré 5, 7, 9 et 12. Lorsqu'aucune phase incommensurable intermédiaire n'est observée (table 2.14) les termes d'ancrage sont toujours de degré 3, 4, et 6. Certaines substances possèdent plusieurs transitions d'ancrage successives tels $SC(ND_2)_2$ ou les membres de la famille $(N(CH_3)_4)_2MCl_4$ (M = Zn, Co, Fe). un examen détaillé des données précédentes suggère deux types de considérations.

i) Des considérartions de symétrie permettant d'expliquer le degré préférentiel de certains ancrages. Ainsi dans la Thiourée deutériée $SC(ND_2)_2$, Dénoyer et al [20] ont établi un diagramme de phases qui révèle des ancrages en

$(0, \frac{1}{9}, 0)$, $(0, \frac{1}{7}, 0)$ et sous pression en $(0, \frac{1}{3}, 0)$. Ces ancrages correspondent à des termes en η_i^9, η_i^7 et η_i^3 successivement permis par symétrie sur la ligne Δ qui joint le centre au point Y de la surface de la zone de Brillouin Orthorhombique P. L'absence d'ancrage en $(0, \frac{1}{8}, 0)$ s'explique d'autre part en considérant la représentation irréductible Δ_4 du groupe spatial Pnma [23] qui induit la succession de transitions dans la thiourée. Le paramètre d'ordre associé à cette représentation est bidimensionnel (sauf en $(0, \frac{1}{2}, 0)$ $\vec{k}_1 \neq -\vec{k}_1$ sur la ligne Δ). Les propriétés de transformation de ses deux composantes η_1 et η_2 autorisent un terme anisotrope de la forme $\eta_1^n + \eta_2^n$ dont le degré n dépend du point particulier $(0, \delta, 0)$ considéré sur Δ. Ce terme est invariant si la condition

$$(-1)^n e^{i\pi n} = 1$$

est satisfaite. Or ceci se produit si $n_{pair} = \frac{2}{\delta}$ et $n_{impair} = \frac{1}{\delta}$. L'ancrage en $(0, \frac{1}{8}, 0)$ serait donc associé à un invariant anisotrope de degré 16, qui correspond à une énergie difficilement observable.

Dans le cas de Na_2CO_3 le terme d'ancrage de degré n = 12 indiqué par De Pater [29] s'explique par les considérations de symétrie suivantes. Les deux composantes du paramètre d'ordre η_1 et η_2 se transforment comme une représentation bidimensionnelle associée à un point de l'espace réciproque situé sur la ligne Ξ (joignant le centre à la surface dans la zone de Brillouin monoclinique B). On peut aisément vérifier que ces composantes se transforment de la façon suivante:

$$\eta_1 \rightarrow (x, y, z) \qquad \eta_2 \rightarrow (x, \bar{y}, z)$$

L'invariance par translation des monomes η_i^{12} conduit aux équations:

$$\begin{cases} \dfrac{12xa}{2} + \dfrac{12yc}{2} = 2n\pi \\ -\dfrac{12xa}{2} + \dfrac{12yc}{2} = 2m\pi \\ 12xb + 12cd = 2p\pi \end{cases}$$

les points d'ancrage correspondants s'écrivent donc

$$\left(\frac{n-m}{12}, \frac{n+m}{12}, \frac{p}{12}\right)$$

De même on peut aisément vérifier que les autres mônomes du 12$^{\text{éme}}$ degré permis par symétrie ($\eta_i^{10}\eta_j^2$, $\eta_i^8\eta_j^4$, $\eta_i^6\eta_j^6$) correspondent respectivement aux points d'ancrage possibles:

$(\frac{n-m}{12} , \frac{n+m}{8} , \frac{p}{12})$, $(\frac{n-m}{12} , \frac{n+m}{4} , \frac{p}{12})$ et $(\frac{n}{12}, k , \frac{p}{12})$

Si n+m = 0, l'intersection des quatre familles de points d'ancrage conduit aux trois types de points possibles

$(\frac{1}{6}, 0 , \frac{p}{12})$, $(\frac{1}{3}, 0 , \frac{p}{12})$ et $(\frac{1}{2}, 0 , \frac{p}{12})$

Pour p = 4, on retrouve bien le point d'ancrage en $(\frac{1}{6}, 0 , \frac{1}{3})$ déterminé par De Pater.

ii) L'apparition d'ancrages successifs associés à des invariants anisotropes de degrés élevés peut être interprétée par des considérations qui ne découlent pas uniquement de la symétrie des systèmes considérés. La mise en jeu de termes d'ancrage anisotropes de degrés élevés autorise en effet la prise en compte dans la densité d'énergie libre ϕ_2 d'invariants des dérivées partielles d'ordre supérieur à 1. Comme nous le montrons dans le chapitre 4, des termes de la forme

$$\eta_i^p \frac{\partial^q \eta_j}{\partial x^q}$$

peuvent rentrer en compétition avec les invariants anisotropes de degrés élevés conduisant à une succession d'ancrages avec des phases incommensurables et commensurables stables dans un domaine étroit de température ou de pression. Cette situation serait celle réalisée dans la thiourée ou dans $(N(CH_3)_4)_2MCl_4$ avec M = Zn, Co, Fe.

Légende des tables 2.14 et 2.15

a) Matériaux
b) Groupe spatial de la phase haute température
c) Température d'ancrage Tc (en Kelvin)
d) Coordonnées du point d'ancrage
e) Notation du point correspondant dans la zone de Brillouin
f) Dimension du paramètre d'ordre associé à la transition
g) Nombre de branches inéquivalentes de l'étoile du vecteur $\vec{k}$
h) Degré du terme anisotrope responsable de la transition d'ancrage
i) Forme des monomes distincts constituant le terme anisotrope

Table 2.14 Forme des invariants anisotropes associés à la transition d'ancrage pour les matériaux possédant une transition directe vers la phase commensurable.

a	b	c	d	e	f	g	h	i	Ref.
$NaH_3(SeO_3)_2$	$P2_1/b$	194	$(0,0,\frac{1}{2})$	Z	2	1	4	$\eta_i^4, \eta_i^2\eta_j^2$	25
$NaNH_4C_4H_4O_6.4H_2O$	$P2_12_12$	109	$(\frac{1}{2},0,0)$	X	2	1	4	$\eta_i^4, \eta_i^2\eta_j^2$	8
$LiNH_4SO_4$	$Pna2_1$	283	$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$	S	2	1	4	$\eta_i^4, \eta_i^2\eta_j^2$	25
$KFeF_4$	Amma	390	$(\frac{1}{4},\frac{1}{4},0)$	Ξ	4	4	4	$\eta_i^4, \eta_i^2\eta_j^2$	26
NbO_2	$P4_2/mnm$	1073	$(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{2})$	S	4	4	4	$\eta_i^4, \eta_i^2\eta_j^2$	91,92,93
FeS	$P6_3/mmc$	410	$(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$	H	4	2	6	$\eta_i^6, \eta_i^4\eta_j^2$	25
$CsCuCl_3$	$P6_3/mmc$	423	$(0,0,\frac{1}{3})$	Δ	4	2	3	$\eta_i^3, \eta_i^2\eta_j$	95
$RbAg_4I_5$	$P4_132$	208	(0,0,0)	Γ	3	1	3	$\eta_i\eta_j\eta_k$	94
$Cd(NO_3)_2$	Pa3	433	$(0,\frac{1}{2},0)$	X	6	3	6	$\eta_i^6, \eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$	25

Table 2.15

Forme des invariants anisotropes associés à la transition d'ancrage pour les matériaux possédant une ou plusieurs phases incommensurables.

a	b	c	d	e	f	g	h	i	Ref.
Na_2CO_3	C2/m	130	$(\frac{1}{6},0,\frac{1}{3})$	Ξ	2	2	12	$\eta_i^{12},\eta_i^{10}\eta_j^2,\eta_i^6\eta_j^4,\eta_i^6\eta_j^6$	29
$RbH_3(SeO_3)_2$	$P2_12_12_1$	153	$(0,0,\frac{1}{2})$	Z	2	1	4	$\eta_i^4,\eta_i^2\eta_j^2$	4
$RbD_3(SeO_3)_2$	$P2_12_12_1$	145	$(0,0,\frac{1}{2})$	Z	2	1	4	$\eta_i^4,\eta_i^2\eta_j^2$	4
$(NH_4)_2BeF_4$	Pnam	163	$(\frac{1}{2},0,0)$	X	2	1	4	$\eta_i^4,\eta_i^2\eta_j^2$	50
$(ND_4)_2BeF_4$	Pnam	177	$(\frac{1}{2},0,0)$	X	2	1	4	$\eta_i^4,\eta_i^2\eta_j^2$	51
K_2SeO_4	Pnam	93	$(\frac{1}{3},0,0)$	Σ	2	2	6	$\eta_i^6,\eta_i^4\eta_j^2$	76
$SC(NH_2)_2$	Pnma	176	$(0,\frac{1}{9},0)$	Δ	2	2	9	$\eta_i^9,\eta_i^7\eta_j^2,\eta_i^5\eta_j^4,\eta_i^3\eta_j^6,\eta_i\eta_j^8$	58 59
$SC(ND_2)_2$	Pnam	193	$(0,\frac{1}{9},0)$	Δ	2	2	9	$\eta_i^9,\eta_i^7\eta_j^2,\eta_i^5\eta_j^4,\eta_i^3\eta_j^6,\eta_i\eta_j^8$	58 59
		-P-	$(0,\frac{1}{7},0)$	Δ	2	2	7	$\eta_i^7,\eta_i^5\eta_j^2,\eta_i^3\eta_j^4,\eta_i\eta_j^6$	20
Rb_2ZnCl_4	Pmcn	192	$(0,0,\frac{1}{3})$	Λ	2	2	6	$\eta_i^6,\eta_i^4\eta_j^2$	37 38
Rb_2ZnBr_4	Pmcn	193	$(0,0,\frac{1}{3})$	Λ	2	2	6	$\eta_i^6,\eta_i^4\eta_j^2$	34 96
K_2ZnCl_4	Pmcn	403	$(0,0,\frac{1}{3})$	Λ	2	2	6	$\eta_i^6,\eta_i^4\eta_j^2$	35 36
$(NH_4)_2ZnCl_4$	Pncm	266	$(0,0,\frac{1}{3})$	Λ	2	2	6	$\eta_i^6,\eta_i^4\eta_j^2$	
$(N(CH_3)_4)_2ZnCl_4$	Pmcn	280	$(0,0,\frac{2}{5})$	Λ	2	2	5	$\eta_i^5,\eta_i^3\eta_j^2,\eta_i\eta_j^4$	42 43
		275	$(0,0,\frac{1}{3})$	Λ	2	2	3	$\eta_i^3,\eta_i^2\eta_j$	
$(N(CH_3)_4)_2CoCl_4$	Pmcn	281	$(0,0,\frac{2}{5})$	Λ	2	2	5	$\eta_i^5,\eta_i^3\eta_j^2,\eta_i\eta_j^4$	46
		277	$(0,0,\frac{1}{3})$	Λ	2	2	3	$\eta_i^3,\eta_i^2\eta_j$	
$(N(CD_3)_4)_2CoCl_4$	Pmcn	282	$(0,0,\frac{2}{5})$	Λ	2	2	5	$\eta_i^5,\eta_i^3\eta_j^2,\eta_i\eta_j^4$	46
		277	$(0,0,\frac{1}{3})$	Λ	2	2	3	$\eta_i^3,\eta_i^2\eta_j$	
$(N(CD_3)_4)_2ZnCl_4$	Pman	279	$(\frac{3}{7},0,0)$	Σ	2	2	7	$\eta_i^7,\eta_i^5\eta_j^2,\eta_i^3\eta_j^4,\eta_i\eta_j^6$	45
		277	$(\frac{1}{2},0,0)$	X	2	1	4	$\eta_i^4,\eta_i^2\eta_j^2$	
$(N(CH_3)_4)_2MnCl_4$	Pmcn	291	$(0,0,\frac{1}{2})$	Z	2	1	4	$\eta_i^4,\eta_i^2\eta_j^2$	47
$(N(CH_3)_4)_2CuCl_4$	Pmcn	291	$(0,0,\frac{1}{3})$	Λ	2	2	6	$\eta_i^6,\eta_i^4\eta_j^2$	46
$(N(CD_3)_4)_2CuCl_4$	Pmcn	293	$(0,0,\frac{1}{3})$	Λ	2	2	6	$\eta_i^6,\eta_i^4\eta_j^2$	46
$(N(CH_3)_4)_2CuBr_4$	Pmcn	242	$(0,\frac{1}{2},0)$	Y	2	1	4	$\eta_i^4,\eta_i^2\eta_j^2$	49
$(N(CH_3)_4)_2FeCl_4$	Pmcn	270	$(0,0,\frac{3}{7})$	Λ	2	2	7	$\eta_i^7,\eta_i^5\eta_j^2,\eta_i^3\eta_j^4,\eta_i\eta_j^6$	48
		266	$(0,0,\frac{1}{3})$	Λ	2	2	3	$\eta_i^3,\eta_i^2\eta_j$	
δ-$(CH_3NH_3)_2MnCl_4$	Abma	112	$(0,\frac{1}{3},0)$	Σ	2	2	3	$\eta_i^3,\eta_i^2\eta_j$	68
2H-$TaSe_2$	$P6_3/mmc$	90	$(\frac{1}{3},\frac{1}{6},0)$	Δ	6	6	3	$\eta_i^3,\eta_i^2\eta_j$	64

CHAPITRE 3

FORME DE LA MODULATION DANS LES PHASES INCOMMENSURABLES

Dans ce chapitre nous vérifions un deuxième aspect de la théorie phénoménologique développée au chapitre 1, à savoir: la relation existant entre la forme de l'invariant de Lifshitz permis par la symétrie du système et la forme de la modulation dans la phase incommensurable.

a) Introduction

Dans les exemples traités ci-dessous nous montrons comment la forme de la modulation au voisinage de la transition phase haute température-phase incommensurable, peut être déduite de la forme de (ou des) invariant(s) de Lifshitz contenus dans la densité d'énergie libre. De tels invariants ne sont pas toujours permis par la symétrie du système et en particulier sont interdits pour les représentations actives (i.e pour les représentations induisant des transitions continues entre phases strictement périodiques). Lifshitz a montré [7] qu'à l'exception d'un certain nombre de points de haute symétrie de la surface et du centre de la zone de Brillouin, de tels invariants étaient toujours possibles.

Ceci est en particulier vrai pour tous les points intérieurs des diverses zones de Brillouin. Le recensement systématique des représentations associées à des points de la surface et du centre de la zone de Brillouin permettant l'existence d'invariants de Lifshitz a été effectué dans les Refs [24, 60]. Pour chacune de ces représentations nous avons calculé les invariants de Lifshitz correspondants. Bien que ce travail ne soit pas exhaustif (puisqu'il exclut en particulier les représentations associées à des points intérieurs aux zones de Brillouin), il fournit une image assez complète des situations qui peuvent être rencontrées à ce sujet.

b) Détermination de la direction de modulation

Si l'invariant de Lifshitz est de la forme

$$\left(\eta_i \frac{\partial \eta_j}{\partial x_l} - \eta_j \frac{\partial \eta_i}{\partial x_l}\right)$$

la transformée de Fourier des termes quadratiques de $\phi(\vec{r})$ s'écrit

$$\Phi(\vec{k}) = \sum_i |\xi_i(\vec{k})|^2 \left[\alpha_0 + \sum_{l,m} \sigma_{ilm} k_l k_m\right] - i \sum_{i<j} \delta_{ijl} (\xi_i \bar{\xi}_j - \xi_j \bar{\xi}_i) k_l \qquad (1)$$

où $\xi_i(\vec{k})$ est la transformée de la composante du paramètre d'ordre η_i. Les σ_{ilm} et δ_{ijl} sont respectivement les coefficients des transformées de Fourier du carré des gradiants des η_i et de l'invariant de Lifshitz. L'invariant de Lifshitz apparait donc comme un terme de couplage bilinéaire entre les $\xi_i(\vec{k})$. Les différentes directions de modulation sont alors obtenues en minimisant les valeurs propres de (1) considéré comme un polynome quadratique homogéne[27, 28].

A titre d'exemple considérons le cas d'un paramètre d'ordre à deux composantes correspondant à l'énergie libre déjà examinée au premier chapitre.

$$\begin{aligned}
\phi_1 &= \frac{\alpha}{2}(\eta_1^2 + \eta_2^2) + \frac{\beta_1}{4}(\eta_1^2 + \eta_2^2)^2 + \frac{\beta_2}{4}\left[(\eta_1^2 - \eta_2^2)^2 - (2\eta_1\eta_2)^2\right] \\
\phi_2 &= \delta\left(\eta_1\frac{\partial \eta_2}{\partial x} - \eta_2\frac{\partial \eta_1}{\partial x}\right) + \sigma\left[\left(\frac{\partial \eta_1}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \eta_2}{\partial x}\right)^2\right]
\end{aligned} \qquad (2)$$

avec $F = \int_x (\phi_1 + \phi_2)\, dx$

Le terme $\int_V \eta_i^2(\vec{r})\, d\vec{r}$ possède pour transformée de Fourier

$$\int_V d\vec{r} \int_{\vec{k}} \xi_i(\vec{k}) e^{i\vec{k}.\vec{r}}\, d\vec{k} \int_{\vec{k}'} \xi_i(\vec{k}') e^{i\vec{k}'.\vec{r}}\, d\vec{k}' =$$

$$\int_{\vec{k}} \int_{\vec{k}'} \xi_i(\vec{k}) \xi_i(\vec{k}') \delta(\vec{k}+\vec{k}')\, d\vec{k}\, d\vec{k}' = \int_{\vec{k}} \xi_i(\vec{k}) \bar{\xi}_i(\vec{k})\, d\vec{k}$$

la densité d'énergie libre (2) se note si l'on se limite aux termes quadratiques.

$$\left[|\xi_1(\vec{k})|^2 + |\xi_2(\vec{k})|^2\right](\frac{\alpha}{2} + \sigma k_x^2) - i\delta k_x\left[\xi_1(\vec{k})\overline{\xi}_2(\vec{k}) - \xi_2(\vec{k})\overline{\xi}_1(\vec{k})\right] \quad (3)$$

en découplant (3) nous obtenons

$$|\xi_1'(\vec{k})|^2(\frac{\alpha}{2} - \delta k_x + \sigma k_x^2) + |\xi_2'(\vec{k})|^2(\frac{\alpha}{2} + \delta k_x + \sigma k_x^2)$$

nous obtenons alors les courbes de dispersion de la Figure 1.

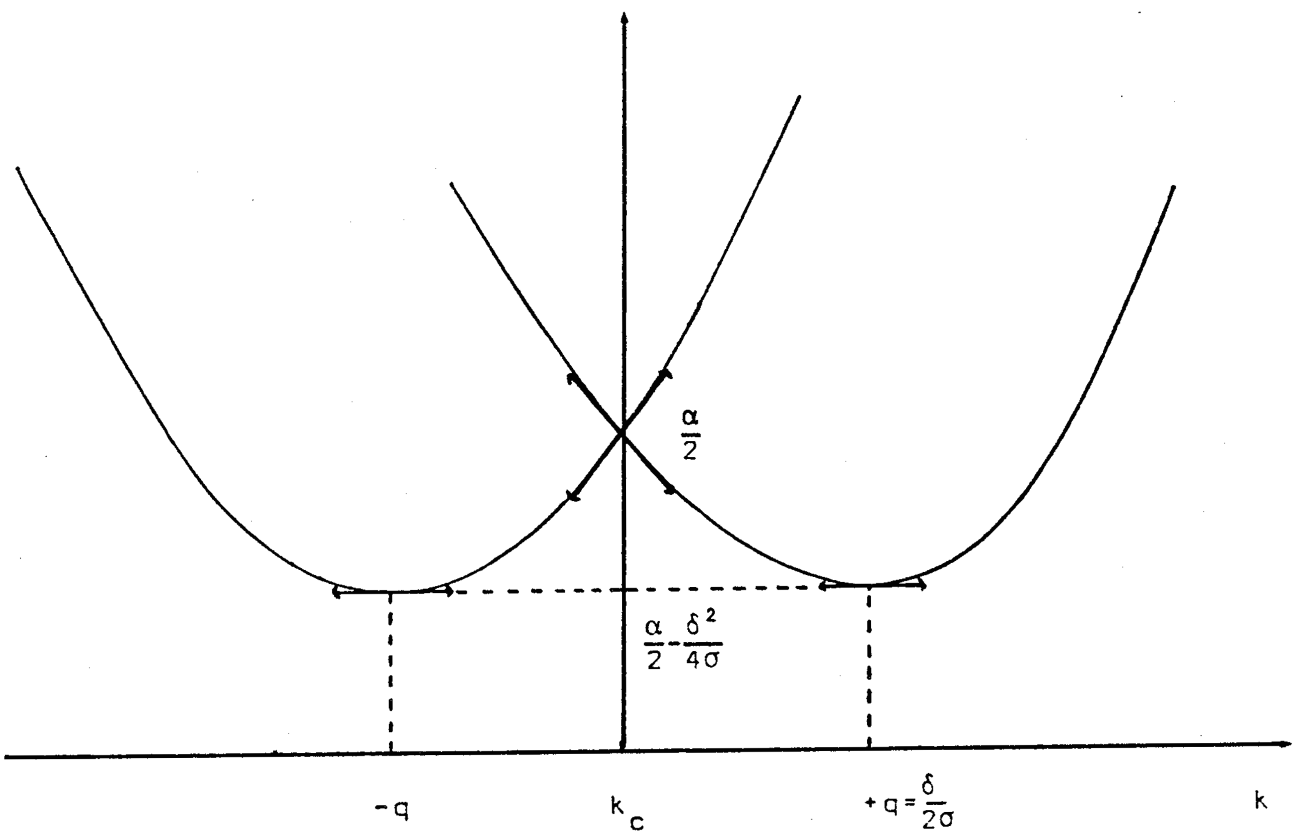


Figure 1

la minimisation des coefficients de $|\xi_1'(k)|^2$ et de $|\xi_2'(k)|^2$ fournit alors la direction de modulation, en accord avec les considérations developpées au chapitre 1.

On a ici $k_x = \frac{\delta}{2\sigma}$ modulation le long de l'axe Ox. Le vecteur d'onde $\vec{k}_i = \vec{k}_c + \vec{q}$ $(\vec{q} = \frac{\delta}{2\sigma})$ est incommensurable.

Toutefois il arrive que la connaissance de l'invariant de Lifshitz ne suffise pas pour déterminer sans ambiguïté la direction de modulation dans la phase incommensurable, il est alors nécessaire de prendre en compte des dérivées du paramètre d'ordre de degré supérieur (voir paragraphe suivant).

c) Résultats

Dans la table 3.1 nous avons regroupé les résultats théoriques correspondant aux diverses formes de modulation et d'invariants de Lifshitz. Plusieurs situations doivent être distiguées.

i) La situation la plus fréquemment rencontrée est le cas d'un invariant de Lifshitz de la forme $(\eta_i \frac{\partial \eta_j}{\partial v} - \eta_j \frac{\partial \eta_i}{\partial v})$ $(v = x,y,z)$ qui correspond à une modulation unique se propageant le long d'un des axes. Ces invariants se rencontrent dans tous les systèmes à l'exception du système Cubique. Pour certains points du système Monoclinique, la direction de modulation est aussi unique mais peut se produire dans une direction quelconque du plan σ_z. Cette direction est alors dépendante de la température (Fig. 2), le vecteur d'onde "tournant" dans le plan σ_z.

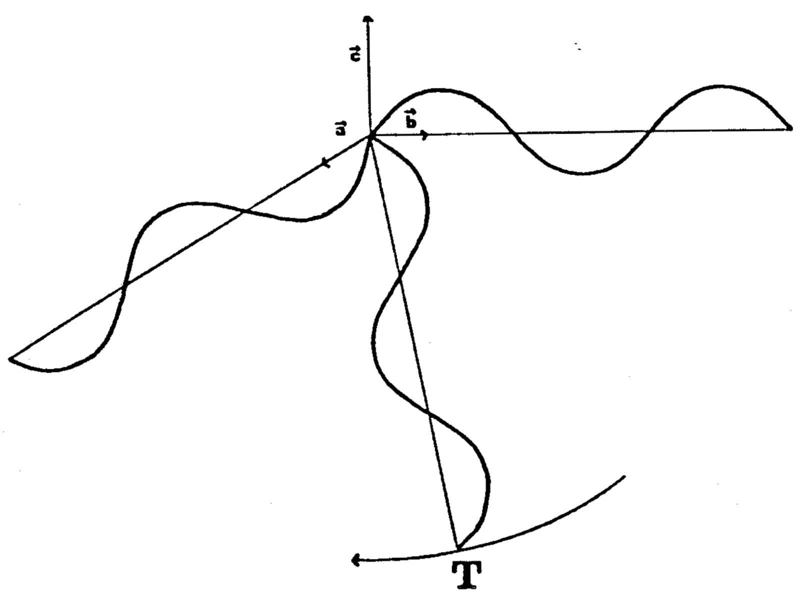


Figure 2 Modulation dépendante de la température dans le système Monoclinique. Le vecteur d'onde tourne dans le plan σ_z.

ii) Les invariants rapportés dans la table 3.1 (3,4,5) qui correspondent à un paramètre d'ordre à quatre composantes sont associés à une modulation simultanée sur chacun des deux axes mais de longueur d'onde différente. Examinons le cas des invariants qui se transforment comme la représentation τ_1 au point X du groupe C_{4h}^3. La transformée de Fourier $\Phi(\vec{k})$ s'écrit ici:

$$\Phi(\vec{k}) = \left[\alpha + \sigma_1(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\right] \sum_i \xi_i^2 + i(\delta_1 k_y + \delta_2 k_x)(\xi_1\overline{\xi}_2 - \xi_2\overline{\xi}_1)$$
$$+ i(\delta_2 k_y - \delta_1 k_x)(\xi_3\overline{\xi}_4 - \xi_4\overline{\xi}_3)$$

Les valeurs propres λ_i sont solution de l'équation

$$\det\begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 \\ \overline{b} & a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & c \\ 0 & 0 & \overline{c} & a \end{bmatrix} = 0 \text{ avec } \begin{aligned} a &= \alpha + \sigma_1(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - \lambda \\ b &= i(\delta_1 k_y + \delta_2 k_x) \\ c &= i(\delta_2 k_y - \delta_1 k_x) \end{aligned}$$

on a donc

$$\left[(\alpha + \sigma_1 k^2 - \lambda)^2 - (\delta_1 k_y + \delta_2 k_x)^2\right]\left[(\alpha + \sigma_1 k^2 - \lambda)^2 - (\delta_2 k_y - \delta_1 k_x)^2\right] = 0$$

La minimisation des valeurs propres conduit à

$$1)\quad k_x = \pm\frac{\delta_1}{2\sigma_1} \qquad k_y = \pm\frac{\delta_2}{2\sigma_1}$$
$$2)\quad k_x = \pm\frac{\delta_2}{2\sigma_1} \qquad k_y = \pm\frac{\delta_1}{2\sigma_1}$$

qui correspond à <u>deux modulations le long des axes Ox et Oy de longueurs d'onde différentes</u> (Fig. 3).

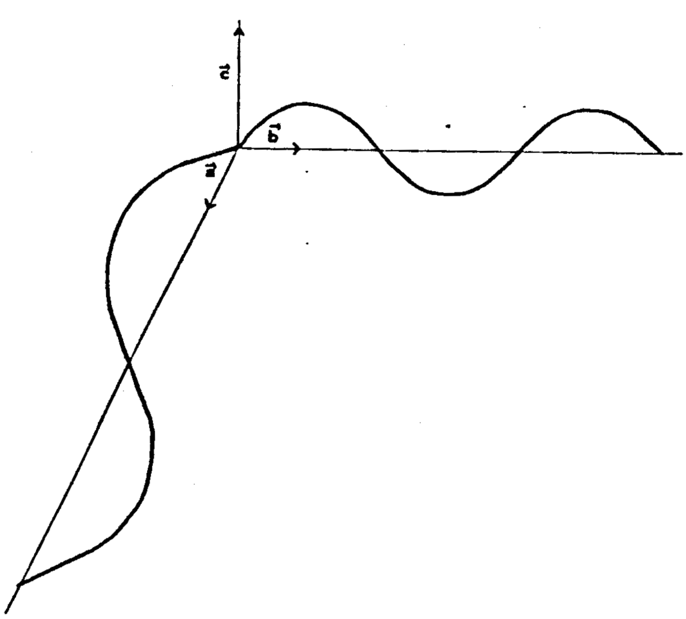


Figure 3 Modulation le long des deux axes Ox et Oy.

Une autre situation caractéristique est trouvée lorsque des invariants de la forme

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial x} - \eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial x}\right) + \left(\eta_3\frac{\partial\eta_4}{\partial y} - \eta_4\frac{\partial\eta_3}{\partial y}\right) \quad (L1)$$

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial y} - \eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial y}\right) - \left(\eta_3\frac{\partial\eta_4}{\partial x} - \eta_4\frac{\partial\eta_3}{\partial x}\right) \quad (L2)$$

sont permis par symétrie. Selon que L1 et L2 figurent isolément ou conjointement dans ϕ, les directions de modulation diffèrent. Pour C_{4v}^{11} $X(\tau_1)$ ou C_{4v}^{12} $X(\tau_1)$ par exemple, la seule possibilité est une modulation identique le long des axes Ox et Oy.

iii) Une troisième classe de situations intervient lorsque la connaissance des seuls invariants de Lifshitz est insuffisante pour déterminer complètement la direction de modulation. Ishibashi et Dvorak [27] ont étudié l'une de ces situations dans laquelle un invariant du type

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial y} - \eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial y}\right) - \left(\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial y} - \eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial y}\right) + \left(\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial x} - \eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial x}\right) + \left(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial x} - \eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial x}\right)$$

est associé à la représentation τ_3 du groupe spatial C_{6v}^1 au point K. Ces auteurs montrent que la valeur propre dépend alors explicitement de $\sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, ce qui ne permet pas de déterminer une direction de modulation mais un domaine de l'espace (un cercle dans le plan σ_z). Toutefois des considérations de symétrie permettent de trouver pour ces "points coniques plans" une direction de modulation préférentielle. En effet si le groupe du vecteur $\vec{k}_1$ ($G(\vec{k}_1)$) contient des axes de symétrie ou des miroirs dans le plan σ_z la modulation s'établira le long de ces directions de symétrie. Par contre si $G(\vec{k}_1)$ ne possède pas de tels éléments de symétrie (comme $G(\vec{k}_1) = S_4$ pour C_{4h}^6 $A(\tau_1,\tau_2)$), la direction dans le plan σ_z est quelconque et peut varier avec la température. L'existence d'axes ou de plans de symétrie qui favorisent une direction de modulation, se traduit en effet dans l'expression de l'énergie libre par l'existence d'invariants du paramètre d'ordre et de leurs dérivées de degrés supérieurs. L'introduction de ces invariants dans l'équation (1) conduit à des calculs complexes que nous ne présentons pas ici.

D'autres types de points coniques peuvent être mis en évidence. Ainsi dans le cas de la représentation τ_2 au point H du groupe spatial

C^1_{3i}, on obtient une valeur propre qui est une combinaison linéaire de k_z et $\sqrt{k_x^2+k_y^2}$. La direction de modulation est alors contenue dans un cône de révolution (table 3.1,9). Comme $G(\vec{k}_1) = C_3$ la symétrie du systéme ne permet pas de prévoir une direction de modulation. Celle ci peut donc varier avec la température dans le cône.

On peut détailler le calcul effectué pour une espéce particuliére de point cônique mise en évidence dans le système Orthorhombique. Dans ce système on peut associer à certaines représentations irréductibles quatre invariants de Lifshitz indépendants:

$$(\eta_1 \frac{\partial\eta_2}{\partial u} - \eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial u}) - (\eta_3\frac{\partial\eta_4}{\partial u} - \eta_4\frac{\partial\eta_3}{\partial u}) \ , \ (\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial v} - \eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial v}) + (\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial v} - \eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial v})$$

$$(\eta_1 \frac{\partial\eta_3}{\partial w} - \eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial w}) - (\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial w} - \eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial w}) \ , \ (\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial w} - \eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial w}) + (\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial w} - \eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial w})$$

La minimisation des valeurs propres conduit aux équations

$$\sqrt{k_u^2 + k_v^2} = \frac{\delta_1}{2\sigma_1} \ , \ \sqrt{k_u^2 + k_v^2} = \frac{\delta_2}{2\sigma_1} \ , \ k_w = \frac{\sqrt{\delta_3^2 + \delta_4^2}}{2\sigma_1}$$

L'égalité de δ_1 et δ_2 permet d'éliminer la solution $k_u = k_v = 0$, la direction de modulation est alors identique à celle d'un point cônique. Nous pouvons toutefois remarquer que $k_c = (k_u^2+k_v^2)^{1/2}$ ne se trouve plus seulement dans le plan σ_z mais aussi dans le plan σ_x (D^{10}_{2h} U) ou σ_y (D^{10}_{2h} T).

iiii) Dans le système Cubique des "points sphériques" peuvent être trouvés. Ce cas se produit lorsque l'invariant de Lifshitz s'écrit:

$$(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial z} - \eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial z}) + (\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial x} - \eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial x}) - (\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial y} - \eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial y})$$

pour la représentation τ_4 du groupe T_1 au centre de la zone de Brillouin Cubique P. La direction de modulation est telle que l'extrémité du vecteur $\vec{k}$ décrit une sphére d'équation $(k_x^2+k_y^2+k_z^2)^{1/2} = \frac{\delta}{2\sigma}$. Remarquons toutefois que cette situation est rencontrée pour les groupes O et T qui possédent toujours des axes de symétrie dans leur groupe du vecteur $\vec{k}_1$. Par conséquent on peut penser que la direction de modulation se produira le long de ces axes.

Un point sphérique particulier intervient dans les systémes quadratique (D^4_4 A(τ_1,τ_2), Rhombohédrique (D^2_3 (K,H)(τ_3)) ou Hexagonal

$\left(C_6^1\ (H,K)(\tau_2)\right)$. Dans ce cas la transformée de $\phi(\vec{r})$ s'écrit

$$\Phi(\vec{k}) = \left[\alpha + \sigma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\right] \sum_i \xi_i^2 + \delta_1 k_z (\xi_1\bar{\xi}_2 - \xi_2\bar{\xi}_1 - \xi_3\bar{\xi}_4 + \xi_4\bar{\xi}_3)$$
$$+ \delta_2 k_x (\xi_1\bar{\xi}_3 - \xi_3\bar{\xi}_1 + \xi_2\bar{\xi}_4 - \xi_4\bar{\xi}_2) + \delta_2 k_y (\xi_1\bar{\xi}_4 - \xi_4\bar{\xi}_1 - \xi_2\bar{\xi}_3 + \xi_3\bar{\xi}_2)$$

Les valeurs propres ne dépendent plus linéairement de k_z et $(k_x^2+k_y^2)^{1/2}$, en effet dans ce cas l'équation de dispersion s'écrit

$$(\alpha + \sigma_1 k^2 - \lambda) = \pm \sqrt{\delta_1^2 k_z^2 + \delta_2^2 (k_x^2 + k_y^2)}$$

La minimisation de fournit alors les équations

$$2\sigma_1 k_z \pm \frac{\delta_1^2 k_z}{\sqrt{\delta_1^2 k_z^2 + \delta_2^2 (k_x^2 + k_y^2)}} = 0$$

$$2\sigma_1 k_i \pm \frac{\delta_1^2 k_i}{\sqrt{\delta_1^2 k_z^2 \quad \delta_2^2 (k_x^2 + k_y^2)}} = 0 \qquad (\ i = x,y\ )$$

Ces équations donnent alors trois solutions recencées dans la table 3.1,12 qui correspondent respectivement à <u>un point spérique</u>, <u>un point cônique plan</u> et <u>une modulation le long de l'axe Oz.</u>

Dans les tables qui suivent nous faisons un bilan détaillé des invariants de Lifshitz associés aux représentations irréductibles inactives de la surface et du centre de la zone de Brillouin dans les sept systèmes cristallins. Pour chaque situation nous donnons succssivement la forme de l'invariant de Lifshitz, l'expression du vecteur de modulation et les représentations irréductibles des groupes spatiaux qui illustrent cette situation.

Table 3.1

1) Direction de modulation unique indépendante de la température

a) Le long de l'axe Ox:

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial x}-\eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial x}\right) \qquad k_x=\frac{\delta_1}{2\sigma_1}$$

$D_2^3(X,U)(\tau_1)$, $D_2^4\ X(\tau_1)$, $C_{2v}^4(X,S,U,R)(\tau_1)$, $C_{2v}^5(X,S,U,R)(\tau_1)$, $C_{2v}^6(T,R)(\tau_1)$

$C_{2v}^7(X,S)(\tau_1)$, $C_{2v}^8(X,U)(\tau_1)$, $C_{2v}^9\ X(\tau_1)$, $C_{2v}^{10}(X,T)(\tau_1)$, $C_{2v}^{19}(X,T)(\tau_1)$

$D_{2h}^2(X,T)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^4(X,U)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^6\ X(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^7(X,S)(\tau_1,\tau_2)$

$D_{2h}^9\ X(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{10}\ X(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{11}(Z,U)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{12}\ X(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{13}(X,U)(\tau_1,\tau_2)$

$D_{2h}^{14}\ X(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{15}\ X(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{16}\ X(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{24}(X,T)(\tau_1,\tau_2)$

b) Le long de l'axe Oy:

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial y}-\eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial y}\right) \qquad k_y=\frac{\delta_1}{2\sigma_1}$$

$D_2^2(Z,R,U,T)(\tau_1)$, $D_2^3(Y,T)(\tau_1)$, $D_2^4\ Y(\tau_1)$, $C_{2v}^6(Y,S)(\tau_1)$, $C_{2v}^8(Y,T)(\tau_1)$

$C_{2v}^9\ Y(\tau_1)$, $C_{2v}^{10}(Y,U)(\tau_1)$, $C_{2v}^{19}\ Y(\tau_1)$, $D_{2h}^2(Y,U)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^4(Y,T)(\tau_1,\tau_2)$

$D_{2h}^6\ Z(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^8(Y,S)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^9(Y,T,U)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{10}\ Y(\tau_1,\tau_2)$

$D_{2h}^{11}(Y,T)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{12}\ Y(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{13}(Y,T)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{14}\ Y(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{15}\ Y(\tau_1,\tau_2)$

$D_{2h}^{16}\ Y(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{24}\ Y(\tau_1,\tau_2)$

c) Le long de l'axe Oz:

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial z}-\eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial z}\right) \qquad k_z=\frac{\delta_1}{2\sigma_1}$$

$C_2^2(Z,E,D,C)(\tau_1+\tau_2)$, $C_{2h}^2(Z,E,D,C)(\tau_1)$, $C_{2h}^5(B,Y)(\tau_1)$

$D_2^4\ Z(\tau_1)$, $D_2^5(Z,T)(\tau_1)$, $C_{2v}^2(Z,T,U,R)(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$, $C_{2v}^3(Z,T,U,R)(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$

$C_{2v}^5(Z,T)(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$, $C_{2v}^6(Z,U)(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$, $C_{2v}^7(Z,T)(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$

$C_{2v}^8(R,S)(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$, $C_{2v}^9(Z,R,S)(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$, $C_{2v}^{10}(Z,S)(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$

$C_{2v}^{12}(Z,T)(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$, $C_{2v}^{13}(Z,T)(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$, $C_{2v}^{16}(Z,T)(\tau_1)$, $C_{2v}^{19}\ Z(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$

$D_{2h}^2(Z,S)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^3(Z,T,U)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^4(S,R)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^5(X,U,S,R)(\tau_1,\tau_2)$

$D_{2h}^6(Y,R,S)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^7(Z,T)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^8(Z,U)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{10}\ Z(\tau_1,\tau_2)$

$D_{2h}^{12}\ Z(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{14}\ Z(\tau_1,\tau_2)$, $D_{1h}^{15}\ Z(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{16}\ Z(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{17}(Z,T)(\tau_1,\tau_2)$

$D_{2h}^{18}(Z,T)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{20}(Z,T)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{22}(Z,T)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{24}\ Z(\tau_1,\tau_2)$

c) <u>Le long de l'axe Oz (suite)</u>

$C_4^1(\Gamma,M,A,Z)(\tau_3+\tau_4)$,$C_4^2(\Gamma,M)(\tau_3+\tau_4)$,$C_4^2(A,Z)(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$,$C_4^3(\Gamma,M)(\tau_3+\tau_4)$

$C_4^3(A,Z)(\tau_1+\tau_2)$,$C_4^4(\Gamma,M)(\tau_3+\tau_4)$,$C_4^4(A,Z)(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$,$C_4^5(\Gamma,M,Z)(\tau_3+\tau_4)$

$C_4^6(\Gamma,M,Z)(\tau_3+\tau_4)$,$C_{4h}^2(Z,A)(\tau_1)$,$C_{4h}^3(M,A)(\tau_1)$,$C_{4h}^4(Z,M)(\tau_1)$,$C_{4h}^4(Z,M)(\tau_1)$

$D_4^1(\Gamma,Z,A,M)(\tau_5)$,$D_4^2(\Gamma,M)(\tau_5)$,$D_4^3(\Gamma,M)(\tau_5)$,$D_4^3(Z,A)(\tau_1,\tau_2)$,$D_4^4\ \Gamma(\tau_5)$

$D_4^4\ M(\tau_1,\tau_2)$,$D_4^5(\Gamma,M)(\tau_5)$,$D_4^5(Z,A)(\tau_1)$,$D_4^6\ \Gamma(\tau_5)$,$D_4^6\ Z(\tau_1)$,$D_4^7(\Gamma,M)(\tau_5)$

$D_4^7(Z,A)(\tau_1,\tau_2)$,$D_4^8\ \Gamma(\tau_5)$,$D_4^8\ Z(\tau_1,\tau_2)$,$D_4^9(\Gamma,Z)(\tau_5)$,$D_4^{10}\ \Gamma(\tau_5)$,$D_4^{10}\ Z(\tau_1)$

$C_{4v}^2(A,M)(\tau_2+\tau_5,\tau_3+\tau_4)$,$C_{4v}^3(Z,A)(\tau_2+\tau_3,\tau_4+\tau_5)$,$C_{4v}^4(M,Z)(\tau_2+\tau_3,\tau_4+\tau_5)$

$C_{4v}^5(Z,A)(\tau_2+\tau_3,\tau_4+\tau_5)$,$C_{4v}^6\ Z(\tau_2+\tau_3,\tau_4+\tau_5)$,$C_{4v}^6\ A(\tau_2+\tau_4,\tau_3+\tau_5)$

$C_{4v}^6\ M\ (\tau_2+\tau_5,\tau_3+\tau_4)$,$C_{4v}^7(Z,A)(\tau_2+\tau_3,\tau_4+\tau_5)$,$C_{4v}^8\ Z(\tau_2+\tau_4,\tau_3+\tau_5)$

$C_{4v}^8\ M(\tau_2+\tau_5,\tau_3+\tau_4)$,$C_{4v}^8\ A(\tau_2+\tau_3,\tau_4+\tau_5)$,$C_{4v}^{12}\ Z(\tau_2+\tau_4,\tau_3+\tau_5)$,$D_{2d}^2(Z,A)(\tau_1)$

$D_{2d}^4\ Z(\tau_1)$,$D_{2d}^6(Z,A)(\tau_1)$,$D_{2d}^7(M,A)(\tau_1)$,$D_{2d}^8(M,Z)(\tau_1)$,$D_{2d}^{12}\ Z(\tau_1)$

$D_{4h}^3(M,A)(\tau_3,\tau_4)$,$D_{4h}^4(M,Z,A)(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^6\ Z(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^8\ Z(\tau_1,\tau_2)$

$D_{4h}^9(Z,A)(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{10}(Z,A)(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{11}(M,Z,A)(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{12}(M,Z)(\tau_1,\tau_2)$

$D_{4h}^{13}\ Z(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{14}\ Z(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{15}\ Z(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{16}\ Z(\tau_1,\tau_2)$

$C_3^1\ \Gamma(\tau_2+\tau_3)$,$C_3^1(K,H)(\tau_1,\tau_2,\tau_3)$,$C_3^1\ A(\tau_2,\tau_3)$,$C_3^2\ \Gamma(\tau_2+\tau_3)$,$C_3^2(K,H)(\tau_1,\tau_2,\tau_3)$

$C_3^2\ A(\tau_2,\tau_3)$,$C_3^3\ \Gamma(\tau_2+\tau_3)$,$C_3^3(K,H)(\tau_1,\tau_2,\tau_3)$,$C_3^3\ A(\tau_2,\tau_3)$,$C_3^4\ \Gamma(\tau_2+\tau_3)$

$C_3^4\ Z(\tau_2,\tau_3)$,$C_{3i}^1(H,K)(\tau_1)$,$D_3^1(\Gamma,A)(\tau_3)$,$D_3^1(K,H)(\tau_1,\tau_2,\tau_3)$,$D_3^2(\Gamma,A)(\tau_3)$

$D_3^3\ \Gamma(\tau_3)$,$D_3^3\ A(\tau_1)$,$D_3^3(K,H)(\tau_1,\tau_2,\tau_3)$,$D_3^4\ \Gamma(\tau_3)$,$D_3^4\ A(\tau_1)$,$D_3^5\ \Gamma(\tau_3)$

$D_3^5\ A(\tau_1)$,$D_3^5(K,H)(\tau_1,\tau_2,\tau_3)$,$D_3^6\ \Gamma(\tau_3)$,$D_3^6\ A(\tau_1)$,$D_3^7\ \Gamma(\tau_1)$,$D^7\ Z(\tau_3)$

$C_{3v}^2\ K(\tau_1,\tau_2)$,$C_{3v}^3\ A(\tau_2+\tau_3)$,$C_{3v}^3\ K(\tau_2,\tau_3)$,$C_{3v}^4\ A(\tau_2+\tau_3)$,$C_{3v}^4\ K(\tau_1,\tau_2)$

$C_{3v}^4\ H(\tau_2,\tau_3)$,$C_{3v}^6\ Z(\tau_2+\tau_3)$,$D_{3d}^1(H,K)(\tau_1,\tau_2)$,$D_{3d}^2(H,K)(\tau_1,\tau_2)$,$D_{3d}^2\ A(\tau_1)$

$D_{3d}^4\ H(\tau_1,\tau_2)$,$D_{3d}^4\ A(\tau_1)$,$D_{3d}^6\ Z(\tau_1)$

$C_6^1(\Gamma,A)(\tau_3+\tau_4,\tau_5+\tau_6)$,$C_6^2\ \Gamma(\tau_3+\tau_4,\tau_5+\tau_6)$,$C_6^2\ H(\tau_2)$,$C_6^2\ A(\tau_1,\tau_2,\tau_3,\tau_4,\tau_5,\tau_6)$

$C_6^3\ \Gamma(\tau_3+\tau_4,\tau_5+\tau_6)$,$C_6^3\ H(\tau_3)$,$C_6^3\ A(\tau_1,\tau_2,\tau_3,\tau_4,\tau_5,\tau_6)$,$C_6^4(\Gamma,A)(\tau_3+\tau_4,\tau_5+\tau_6)$

$C_6^5(\Gamma,A)(\tau_3+\tau_4,\tau_5+\tau_6)$,$C_6^6\ \Gamma(\tau_3+\tau_4,\tau_5+\tau_6)$,$C_6^6\ H(\tau_1)$,$C_6^6\ A(\tau_1,\tau_2,\tau_3,\tau_4,\tau_5,\tau_6)$

$C_{6h}^2\ A(\tau_1)$,$D_6^1(\Gamma,A)(\tau_5,\tau_6)$,$D_6^2\ \Gamma(\tau_5,\tau_6)$,$D_6^2\ H(\tau_1,\tau_2)$,$D_6^2\ A(\tau_1,\tau_2,\tau_3)$

$D_6^3\ \Gamma(\tau_5,\tau_6)$,$D_6^3\ H(\tau_1,\tau_2)$,$D_6^3\ A(\tau_1,\tau_2,\tau_3)$,$D_6^4\ \Gamma(\tau_5,\tau_6)$,$D_6^4\ A(\tau_1,\tau_4)$

$D_6^5\ \Gamma(\tau_5,\tau_6)$,$D_6^5\ A(\tau_1,\tau_2,\tau_3)$,$D_6^6\ \Gamma(\tau_5,\tau_6)$,$D_6^6\ H(\tau_1,\tau_2)$,$D_6^6\ A(\tau_1,\tau_2,\tau_3)$

$C_{6v}^2\ A(\tau_2,\tau_3,\tau_5,\tau_6)$,$C_{6v}^3\ A(\tau_2,\tau_3,\tau_5,\tau_6)$,$C_{6v}^4\ A(\tau_2,\tau_3,\tau_5,\tau_6)$,$D_{3h}^2\ H(\tau_5,\tau_6)$

$D_{3h}^4\ A(\tau_1)$,$D_{6h}^2\ A(\tau_1,\tau_2)$,$D_{6h}^3\ H(\tau_1,\tau_2,\tau_3,\tau_4)$,$D_{6h}^3\ A(\tau_1,\tau_2)$,$D_{6h}^4\ A(\tau_1,\tau_2)$

d) <u>Le long de l'axe Oz:</u> (paramétre d'ordre à 4 composantes)

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial z}-\eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial z}\right)\pm\left(\eta_3\frac{\partial\eta_4}{\partial z}-\eta_4\frac{\partial\eta_3}{\partial z}\right) \qquad k_z=\frac{\delta_1}{2\sigma_1}$$

(+) $C_{2v}^{12}\ R(\tau_1,\tau_2)$

(-) $D_{2}^{5}\ R(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{17}\ R(\tau_1,\tau_2)$

(+) $C_{4}^{2}\ R(\tau_1+\tau_2)$, $C_{4}^{4}\ R(\tau_1+\tau_2)$, $D_{4}^{3}\ R(\tau_1)$, $D_{4}^{7}\ R(\tau_1)$, $C_{4v}^{3}\ R(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$
$C_{4v}^{5}\ R(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$, $C_{4v}^{10}\ A(\tau_1+\tau_2)$, $D_{4h}^{2}\ R(\tau_1,\tau_2)$, $D_{4h}^{10}\ R(\tau_1,\tau_2)$

(-) $D_{4}^{2}(R,X)(\tau_1)$, $D_{4}^{4}\ X(\tau_1)$, $D_{4}^{6}(R,X)(\tau_1)$, $D_{4}^{8}\ X(\tau_1)$, $D_{2d}^{6}\ R(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$
$D_{2d}^{12}\ X(\tau_1+\tau_2,\tau_3+\tau_4)$, $D_{4h}^{8}\ A(\tau_3,\tau_4)$, $D_{4h}^{13}\ A(\tau_3,\tau_4)$

(+) $C_{6}^{2}\ H(\tau_1,\tau_3)$, $C_{6}^{3}\ H(\tau_1,\tau_2)$, $C_{6}^{6}\ H(\tau_2,\tau_3)$, $C_{6v}^{2}\ H(\tau_1+\tau_2)$, $C_{6v}^{4}\ H(\tau_1+\tau_2)$
$D_{6h}^{4}\ A(\tau_3)$

(-) $C_{6h}^{2}\ A(\tau_2,\tau_3)$, $D_{3h}^{4}\ H(\tau_1)$, $D_{6h}^{3}\ A(\tau_3)$

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial z}-\eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial z}\right)\pm\left(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial z}-\eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial z}\right)$$

(+) $D_{4h}^{17}\ A(\tau_5)$ $D_{4h}^{15}\ A(\tau_3,\tau_4)$

(-) $D_{2d}^{11}\ A(\tau_5)$, $D_{4h}^{6}\ A(\tau_3,\tau_4)$, $D_{4h}^{18}\ A(\tau_5)$

(+) $D_{6h}^{2}\ H(\tau_1)$

(-) $D_{3h}^{4}\ H(\tau_1)$, $D_{6h}^{4}\ H(\tau_1)$

d) <u>Le long de l'axe Oz:</u> (suite)
la longueur de modulation dépend de deux coefficients

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial z}-\eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial z}\right)-\left(\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial z}-\eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial z}\right) \qquad k_z=\frac{\delta_1}{2\sigma_1}+\frac{\delta_2}{2\sigma_1}$$

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial z}-\eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial z}\right)+\left(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial z}-\eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial z}\right)$$

$D_{2h}^{26}\ R(\tau_1,\tau_2)$

$C_{4h}^{5}\ A(\tau_3,\tau_4)$, $D_{2d}^{10}\ A(\tau_3+\tau_4)$, $D_{4h}^{2}(Z,A)(\tau_3,\tau_4)$, $D_{4h}^{4}\ Z(\tau_3,\tau_4)$, $D_{4h}^{6}\ Z(\tau_3,\tau_4)$
$D_{4h}^{8}\ Z(\tau_3,\tau_4)$, $D_{4h}^{8}\ A(\tau_1,\tau_2)$, $D_{4h}^{11}\ A(\tau_3,\tau_4)$, $D_{4h}^{13}\ A(\tau_1,\tau_2)$$D_{4h}^{18}\ A(\tau_1,\tau_2,\tau_3,\tau_4)$

$D_{3h}^{2}\ H(\tau_1,\tau_2,\tau_3,\tau_4)$, $D_{3h}^{4}(H,A)(\tau_2,\tau_3)$, $D_{6h}^{2}\ A(\tau_3,\tau_4,\tau_5,\tau_6)$

d) <u>Le long de l'axe Oz (suite)</u>

la modulation dépend de trois coefficients

$$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial z} - \eta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial z}\right) + \left(\eta_3 \frac{\partial \eta_4}{\partial z} - \eta_4 \frac{\partial \eta_3}{\partial z}\right) \qquad k_z = \frac{\delta_3}{2\sigma_1} + \frac{\sqrt{\delta_2^2 + \delta_1^2}}{2\sigma_1}$$

$$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_3}{\partial z} - \eta_3 \frac{\partial \eta_1}{\partial z}\right) - \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_4}{\partial z} - \eta_4 \frac{\partial \eta_2}{\partial z}\right)$$

$$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_4}{\partial z} - \eta_4 \frac{\partial \eta_1}{\partial z}\right) + \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_3}{\partial z} - \eta_3 \frac{\partial \eta_2}{\partial z}\right)$$

$C_{2v}^{21}\ R(\tau_1,\tau_2)$

$C_{4v}^{5}(Z,A)(\tau_1)$, $C_{4v}^{6}\ Z(\tau_1)$, $C_{4v}^{8}\ A(\tau_1)$, $C_{4v}^{10}\ A(\tau_3+\tau_4)$

$C_{3v}^{3}\ H(\tau_1,\tau_2,\tau_3)$ $\qquad$ $C_{6v}^{2}\ A(\tau_1,\tau_4)$

2) Direction de modulation unique dépendant de la température

$$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial u} - \eta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial u}\right) \qquad u \in \sigma_z \qquad k_u = \frac{\delta_1}{2\sigma_1}$$

$C_s^{2}(A,D,E,B)(\tau_1+\tau_2)$, $C_s^{4}(C,B,Y)(\tau_1+\tau_2)$, $C_{2h}^{4}(B,Y,D,C)(\tau_1)$, $C_{2h}^{5}(Z,E)(\tau_1)$
$C_{2h}^{6}(B,Y,D)(\tau_1)$

3) Direction de modulation simultanée le long des axes Ou et Ov

$$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial u} - \eta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial u}\right) - \left(\eta_3 \frac{\partial \eta_4}{\partial u} - \eta_4 \frac{\partial \eta_3}{\partial u}\right) \qquad k_u = \frac{\delta_1}{\sigma_1} \qquad k_v = \frac{\delta_2}{\sigma_1}$$

$$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial v} - \eta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial v}\right) + \left(\eta_3 \frac{\partial \eta_4}{\partial v} - \eta_4 \frac{\partial \eta_3}{\partial v}\right)$$

$u = x \quad v = y$

$C_{2v}^{15}(R,S)(\tau_1,\tau_2)$, $C_{2v}^{17}(R,S)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{18}\ S(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{21}(R,S)(\tau_1,\tau_2)$
$D_{2h}^{22}(R,S)(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{27}\ S(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{28}\ S(\tau_1,\tau_2)$
$D_{2h}^{16}\ R(\tau_1,\tau_2)$

$u = x \quad v = z$

$C_{2v}^{21}\ U(\tau_1,\tau_2)$, $C_{2v}^{22}\ U(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{26}\ U(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{27}\ U(\tau_1,\tau_2)$

$u = y \quad v = z$

$C_{2v}^{21}\ T(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{26}\ T(\tau_1,\tau_2)$, $D_{2h}^{27}\ T(\tau_1,\tau_2)$

4) Direction de modulation simultanée le long des axes Ox et Oy

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial y}-\eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial y}\right)-\left(\eta_3\frac{\partial\eta_4}{\partial x}-\eta_4\frac{\partial\eta_3}{\partial x}\right) \qquad k_x=\frac{\delta_1}{2\sigma_1} \qquad k_y=\frac{\delta_2}{2\sigma_1}$$

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial x}-\eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial x}\right)+\left(\eta_3\frac{\partial\eta_4}{\partial y}-\eta_4\frac{\partial\eta_3}{\partial y}\right)$$

$C_{4h}^{3}(R,X)(\tau_1)$,$C_{4h}^{4}(R,X)(\tau_1)$,$C_{4h}^{6}\ X(\tau_1)$

5) Direction de modulation simultanée le long des axes Ou et Ov

Trois invariants indépendants

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial u}-\eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial u}\right)+\left(\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial u}-\eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial u}\right) \qquad k_u=\frac{\delta_1}{2\sigma_1} \qquad k_v=\frac{\sqrt{\delta_2^2+\delta_3^2}}{2\sigma_1}$$

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial v}-\eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial v}\right)-\left(\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial v}-\eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial v}\right)$$

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial v}-\eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial v}\right)+\left(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial v}-\eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial v}\right)$$

$u=x \qquad v=y$

$D_{2h}^{15}\ S(\tau_1,\tau_2)$,$D_{2h}^{16}\ S(\tau_1,\tau_2)$ $\qquad$ $D_{2h}^{11}(R,S)(\tau_1,\tau_2)^{\bullet}$

$u=z \qquad v=x$

$D_{2h}^{15}\ U(\tau_1,\tau_2)$ $\qquad$ $C_{2v}^{22}\ R([\tau_1,\tau_2)^{\bullet}$

$u=y \qquad v=z$

$D_{2h}^{15}\ T(\tau_1,\tau_2)$

6) Direction de modulation le long de l'axe Ox ou Oy / Direction de modulation simultanée le long des axes Ox et Oy

a) $\left(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial y}-\eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial y}\right)-\left(\eta_3\frac{\partial\eta_4}{\partial x}-\eta_4\frac{\partial\eta_3}{\partial x}\right) \qquad k_x=k_y=\frac{\delta_1}{2\sigma_1}$

$D_4^{2}(R,X)(\tau_1)$,$D_4^{4}\ X(\tau_1)$,$D_4^{6}(R,X)(\tau_1)$,$D_4^{8}(R,X)(\tau_1)$,$C_{4v}^{2}(R,X)(\tau_1)$
$C_{4v}^{4}\ X(\tau_1)$,$C_{4v}^{6}\ X(\tau_1)$,$C_{4v}^{8}(R,X)(\tau_1)$,$D_{2d}^{3}(R,X)(\tau_1)$,$D_{2d}^{4}(R,X)(\tau_1)$
$D_{2d}^{7}(R,X)(\tau_1)$,$D_{2d}^{8}\ X(\tau_1)$,$D_{4h}^{3}(R,X)(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{4}\ X(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{5}(R,X)(\tau_1,\tau_2)$
$D_{4h}^{6}\ X(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{7}(R,X)(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{8}\ X(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{11}(R,X)(\tau_1,\tau_2)$
$D_{4h}^{12}\ X(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{13}(R,X)(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{14}\ X(\tau_1,\tau_2)$,$D_{4h}^{15}(R,X)(\tau_1,\tau_2)$
$D_{4h}^{16}\ X(\tau_1,\tau_2)$

b) $\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial x} - \eta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial x}\right) + \left(\eta_3 \frac{\partial \eta_4}{\partial y} - \eta_4 \frac{\partial \eta_3}{\partial y}\right)$ $\qquad k_x = k_y = \frac{\delta_1}{2\sigma_1}$

$C_{4v}^{4}\ R(\tau_1)$, $C_{4v}^{6}\ R(\tau_1)$, $D_{2d}^{8}\ R(\tau_1)$, $D_{4h}^{4}\ R(\tau_1,\tau_2)$, , $D_{4h}^{12}\ R(\tau_1,\tau_2)$

7) Direction de modulation simultanée le long des axes Ox et Oy

$$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial y} - \eta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial y}\right) - \left(\eta_3 \frac{\partial \eta_4}{\partial x} - \eta_4 \frac{\partial \eta_3}{\partial x}\right) + \left(\eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial x} - \eta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial x}\right) + \left(\eta_3 \frac{\partial \eta_4}{\partial y} - \eta_4 \frac{\partial \eta_3}{\partial y}\right)$$

$$k_x = k_y = \frac{\delta_1}{2\sigma_1}$$

$C_{4v}^{11}\ X(\tau_1)$, $C_{4v}^{12}\ X(\tau_1)$, $D_{4h}^{19}\ X(\tau_1,\tau_2)$, $D_{4h}^{20}\ X(\tau_1,\tau_2)$

8) Points coniques plans

$$\text{a)}\ \left(\eta_1 \frac{\partial \eta_3}{\partial u} - \eta_3 \frac{\partial \eta_1}{\partial u}\right) - \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_4}{\partial u} - \eta_4 \frac{\partial \eta_2}{\partial u}\right) + \left(\eta_1 \frac{\partial \eta_4}{\partial v} - \eta_4 \frac{\partial \eta_1}{\partial v}\right) + \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_3}{\partial v} - \eta_3 \frac{\partial \eta_2}{\partial v}\right)$$

$$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_3}{\partial v} - \eta_3 \frac{\partial \eta_1}{\partial v}\right) - \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_4}{\partial v} - \eta_4 \frac{\partial \eta_2}{\partial v}\right) - \left(\eta_1 \frac{\partial \eta_4}{\partial u} - \eta_4 \frac{\partial \eta_1}{\partial u}\right) - \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_3}{\partial u} - \eta_3 \frac{\partial \eta_2}{\partial u}\right)$$

$u = x \qquad v = y$ $\qquad \sqrt{k_u^2 + k_v^2} = \sqrt{\frac{\delta_1^2 + \delta_2^2}{2\sigma_1}}$

$C_{4h}^{6}\ A(\tau_1,\tau_2)$

$u = y \qquad v = x$

$C_{4h}^{6}\ A(\tau_3,\tau_4)$

$C_{6h}^{1}(K,H)(\tau_3,\tau_4)$, $C_{6h}^{2}\ K(\tau_3,\tau_4)$

$$\text{b)}\ \left(\eta_1 \frac{\partial \eta_3}{\partial y} - \eta_3 \frac{\partial \eta_1}{\partial y}\right) - \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_4}{\partial y} - \eta_4 \frac{\partial \eta_2}{\partial y}\right) + \left(\eta_1 \frac{\partial \eta_4}{\partial x} - \eta_4 \frac{\partial \eta_1}{\partial x}\right) + \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_3}{\partial x} - \eta_3 \frac{\partial \eta_2}{\partial x}\right)$$

$$\sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \frac{\delta_1}{2\sigma_1}$$

$C_{6v}^{1}(H,K)(\tau_3)$, $C_{6v}^{2}\ K(\tau_3)$, $C_{6v}^{3}\ K(\tau_3)$, $C_{6v}^{4}\ K(\tau_3)$

$D_{3h}^{3}(H,K(\tau_3,\tau_6)$, $D_{3h}^{4}\ K(\tau_3,\tau_6)$

$D_{6h}^{1}(H,K)(\tau_3,\tau_6)$, $D_{6h}^{2}\ K(\tau_3,\tau_6)$, $D_{6h}^{3}\ K(\tau_3,\tau_6)$, $D_{6h}^{4}\ K(\tau_3,\tau_6)$

$D_{3d}^{3}(H,K)(\tau_3)$ • $\qquad D_{3d}^{4}\ K(\tau_3)$ •

c) $$\begin{cases} (\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial x}-\eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial x})+(\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial x}-\eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial x})+(\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial y}-\eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial y})-(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial y}-\eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial y})- \\ (\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial y}-\eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial y})-(\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial y}-\eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial y})+(\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial x}-\eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial x})-(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial x}-\eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial x}) \end{cases}$$

$$\sqrt{k_x^2+k_y^2} = \frac{\delta_1}{2\sigma_1}$$

$D_2^{12}d\ A(\tau_1,\tau_2)$

9) Points coniques (I)

a) $(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial z}-\eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial z})-(\eta_3\frac{\partial\eta_4}{\partial z}-\eta_4\frac{\partial\eta_3}{\partial z})$

$$(\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial u}-\eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial u})-(\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial u}-\eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial u})-(\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial v}-\eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial v})-(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial v}-\eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial v})$$

$$(\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial v}-\eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial v})-(\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial v}-\eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial v})+(\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial u}-\eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial u})+(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial u}-\eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial u})$$

$$k_z=\frac{\delta_1}{2\sigma_1} \qquad \sqrt{k_u^2+k_v^2}=\frac{\sqrt{\delta_2^2+\delta_3^2}}{2\sigma_1}$$

$C_3^1 i(H,K)(\tau_2)$ $u=x$ $v=y$ $\qquad$ $C_3^1 i(H,K)(\tau_3)$ $u=y$ $v=x$

b) $(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial z}-\eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial z})\pm(\eta_3\frac{\partial\eta_4}{\partial z}-\eta_4\frac{\partial\eta_3}{\partial z})$

$$(\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial u}-\eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial u})-(\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial u}-\eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial u})\pm(\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial v}-\eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial v})\pm(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial v}-\eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial v})$$

$$k_z=\frac{\delta_1}{2\sigma_1} \qquad \sqrt{k_u^2+k_v^2}=\frac{\delta_2}{2\sigma_1}$$

(+) $u=y$ $v=x$

$D_6^1(H,K)(\tau_3)$, $D_6^2\ K(\tau_3)$, $D_6^3\ K(\tau_3)$, $D_6^4(H,K)(\tau_3)$, $D_6^5(H,K)(\tau_3)$, $D_6^6\ K(\tau_3)$

(−) $u=x$ $v=y$

$D_3^1 d(H,K)(\tau_3)$, $D_3^2 d(H,K)(\tau_3)$

c) $(\eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial z} - \eta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial z}) + (\eta_3 \frac{\partial \eta_4}{\partial z} - \eta_4 \frac{\partial \eta_3}{\partial z})$

$$(\eta_1 \frac{\partial \eta_3}{\partial x} - \eta_3 \frac{\partial \eta_1}{\partial x}) + (\eta_2 \frac{\partial \eta_4}{\partial x} - \eta_4 \frac{\partial \eta_2}{\partial x}) + (\eta_1 \frac{\partial \eta_4}{\partial y} - \eta_4 \frac{\partial \eta_1}{\partial y}) - (\eta_2 \frac{\partial \eta_3}{\partial y} - \eta_3 \frac{\partial \eta_2}{\partial y})$$

$$k_z = \frac{\delta_1}{2\sigma_1} \qquad \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \frac{\delta_2}{2\sigma_1}$$

$C_{3v}^{2}(H,K)(\tau_3)$, $C_{3v}^{4}\ K(\tau_3)$, $C_{3v}^{4}\ H(\tau_1)$

d) $(\eta_1 \frac{\partial \eta_3}{\partial z} - \eta_3 \frac{\partial \eta_1}{\partial z}) - (\eta_2 \frac{\partial \eta_4}{\partial z} - \eta_4 \frac{\partial \eta_2}{\partial z})$

$$(\eta_1 \frac{\partial \eta_4}{\partial z} - \eta_4 \frac{\partial \eta_1}{\partial z}) + (\eta_2 \frac{\partial \eta_3}{\partial z} - \eta_3 \frac{\partial \eta_2}{\partial z})$$

$$(\eta_1 \frac{\partial \eta_3}{\partial u} - \eta_3 \frac{\partial \eta_1}{\partial u}) + (\eta_2 \frac{\partial \eta_4}{\partial u} - \eta_4 \frac{\partial \eta_2}{\partial u}) + (\eta_1 \frac{\partial \eta_4}{\partial v} - \eta_4 \frac{\partial \eta_1}{\partial v}) - (\eta_2 \frac{\partial \eta_3}{\partial v} - \eta_3 \frac{\partial \eta_2}{\partial v})$$

$u = x \qquad v = y$

$$k_z = \frac{\sqrt{\delta_1^2 + \delta_2^2}}{2\sigma_1}, \sqrt{k_u^2 + k_v^2} = \frac{\delta_3}{2\sigma_1}$$

$D_{3d}^{4}\ A(\tau_2, \tau_3)$

$u = y \qquad v = x$

$D_{3d}^{2}\ A(\tau_2, \tau_3)$, $D_{3d}^{6}\ Z(\tau_2, \tau_3)$

e) $(\eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial z} - \eta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial z}) + (\eta_3 \frac{\partial \eta_4}{\partial z} - \eta_4 \frac{\partial \eta_3}{\partial z})$

$$(\eta_1 \frac{\partial \eta_3}{\partial z} - \eta_3 \frac{\partial \eta_1}{\partial z}) - (\eta_2 \frac{\partial \eta_4}{\partial z} - \eta_4 \frac{\partial \eta_2}{\partial z})$$

$$(\eta_1 \frac{\partial \eta_4}{\partial z} - \eta_4 \frac{\partial \eta_1}{\partial z}) + (\eta_2 \frac{\partial \eta_3}{\partial z} - \eta_3 \frac{\partial \eta_2}{\partial z})$$

$$(\eta_1 \frac{\partial \eta_3}{\partial y} - \eta_3 \frac{\partial \eta_1}{\partial y}) + (\eta_2 \frac{\partial \eta_4}{\partial y} - \eta_4 \frac{\partial \eta_2}{\partial y}) + (\eta_1 \frac{\partial \eta_4}{\partial x} - \eta_4 \frac{\partial \eta_1}{\partial x}) - (\eta_2 \frac{\partial \eta_3}{\partial x} - \eta_3 \frac{\partial \eta_2}{\partial x})$$

$$k_z = \frac{\sqrt{\delta_1^2 + \delta_2^2 + \delta_3^2}}{2\sigma_1} \qquad \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \frac{\delta_4}{2\sigma_1}$$

$C_{3v}^{3}\ A(\tau_1)$, $C_{3v}^{4}\ A(\tau_1)$, $C_{3v}^{6}\ Z(\tau_1)$

10) Points coniques (II)

a) $\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial u} - \eta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial u}\right) - \left(\eta_3 \frac{\partial \eta_4}{\partial u} - \eta_4 \frac{\partial \eta_3}{\partial u}\right)$

$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_3}{\partial v} - \eta_3 \frac{\partial \eta_1}{\partial v}\right) + \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_4}{\partial v} - \eta_4 \frac{\partial \eta_2}{\partial v}\right)$

$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_3}{\partial w} - \eta_3 \frac{\partial \eta_1}{\partial w}\right) - \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_4}{\partial w} - \eta_4 \frac{\partial \eta_2}{\partial w}\right)$

$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_4}{\partial w} - \eta_4 \frac{\partial \eta_1}{\partial w}\right) + \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_3}{\partial w} - \eta_3 \frac{\partial \eta_2}{\partial w}\right)$

point conique si $\delta_1 = \delta_2$

$$\sqrt{k_u^2 + k_v^2} = \frac{\delta_1}{2\sigma_1} = \frac{\delta_2}{2\sigma_1}$$

$$k_w = \frac{\sqrt{\delta_3^2 + \delta_4^2}}{2\sigma_1}$$

modulation Ow si $\delta_1 \neq \delta_2$

$$k_w = \frac{\sqrt{\delta_3^2 + \delta_4^2}}{2\sigma_1}$$

u = x	v = y	w = z	$D_{2h}^{8}(R,T)(\tau_1,\tau_2)$
u = y	v = z	w = x	$D_{2h}^{10}\ U(\tau_1,\tau_2)$
u = x	v = z	w = y	$D_{2h}^{10}\ T(\tau_1,\tau_2)$

b) $\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_3}{\partial x} - \eta_3 \frac{\partial \eta_1}{\partial x}\right) + \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_4}{\partial x} - \eta_4 \frac{\partial \eta_2}{\partial x}\right)$

$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_4}{\partial y} - \eta_4 \frac{\partial \eta_1}{\partial y}\right) - \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_3}{\partial y} - \eta_3 \frac{\partial \eta_2}{\partial y}\right)$

$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_2}{\partial z} - \eta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial z}\right) + \left(\eta_3 \frac{\partial \eta_4}{\partial z} - \eta_4 \frac{\partial \eta_3}{\partial z}\right)$

$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_3}{\partial z} - \eta_3 \frac{\partial \eta_1}{\partial z}\right) - \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_4}{\partial z} - \eta_4 \frac{\partial \eta_2}{\partial z}\right)$

$\left(\eta_1 \frac{\partial \eta_4}{\partial z} - \eta_4 \frac{\partial \eta_1}{\partial z}\right) + \left(\eta_2 \frac{\partial \eta_3}{\partial z} - \eta_3 \frac{\partial \eta_2}{\partial z}\right)$

point conique si $\delta_1 = \delta_2$

$$\sqrt{k_x^2 + k_y^2} = \frac{\delta_1}{2\sigma_1} = \frac{\delta_2}{2\sigma_1}$$

$$k_z = \frac{\sqrt{\delta_3^2 + \delta_4^2 + \delta_5^2}}{2\sigma_1}$$

modulation Oz si $\delta_1 \neq \delta_2$

$$k_z = \frac{\sqrt{\delta_3^2 + \delta_4^2 + \delta_5^2}}{2\sigma_1}$$

$C_{2v}^{9}\ U(\tau_1)$

11) Points sphériques (I)

paramétre d'ordre à trois composantes

$$(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial z}-\eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial z})+(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial x}-\eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial x})-(\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial y}-\eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial y})$$

$$\sqrt{k_x^2+k_y^2+k_z^2} = \frac{\delta_1}{2\sigma_1}$$

$T_1(\Gamma,R)(\tau_4)$,T_2 $\Gamma(\tau_4)$,T_3 $(\Gamma,H)(\tau_4)$,T_4 $\Gamma(\tau_4)$,T_5 $\Gamma(\tau_4)$,$O_1(\Gamma,R)(\tau_4,\tau_5)$

$O_2(\Gamma,R)(\tau_4,\tau_5)$,O_3 $\Gamma(\tau_4,\tau_5)$,O_4 $\Gamma(\tau_4,\tau_5)$,$O_5(\Gamma,H)(\tau_4,\tau_5)$,O_6 $\Gamma(\tau_4,\tau_5)$

O_7 $\Gamma(\tau_4,\tau_5)$,$O_8(\Gamma,H)(\tau_4,\tau_5)$

12) Points sphériques (II)

a) $(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial z}-\eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial z})-(\eta_3\frac{\partial\eta_4}{\partial z}-\eta_4\frac{\partial\eta_3}{\partial z})$

$$(\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial x}-\eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial x})+(\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial x}-\eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial x})+(\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial y}-\eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial y})-(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial y}-\eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial y})$$

point sphérique si $\delta_1 = \delta_2$

$$\sqrt{k_x^2+k_y^2+k_z^2} = \frac{\delta_1}{2\sigma_1} = \frac{\delta_2}{2\sigma_1}$$

$\overset{4}{D}_4$ $A(\tau_1,\tau_2)$,$\overset{8}{D}_4$ $A(\tau_1,\tau_2)$

point conique plan si $\delta_1 \neq \delta_2$

$$\sqrt{k_x^2+k_y^2} = \frac{\delta_2}{2\sigma_1}$$

$\overset{2}{D}_3(K',H)(\tau_3)$,$\overset{4}{D}_3$ $K(\tau_3)$,$\overset{4}{D}_3$ $H(\tau_1)$,$\overset{6}{D}_3$ $K(\tau_3)$,$\overset{6}{D}_3$ $H(\tau_1)$

ou modulation Oz si $\delta_1 \neq \delta_2$

$$k_z = \frac{\delta_1}{2\sigma_1}$$

b) $(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial z}-\eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial z})+(\eta_3\frac{\partial\eta_4}{\partial z}-\eta_4\frac{\partial\eta_3}{\partial z})$

$$(\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial x}-\eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial x})-(\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial x}-\eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial x})-(\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial y}-\eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial y})-(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial y}-\eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial y})$$

$$(\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial y}-\eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial y})-(\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial y}-\eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial y})+(\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial x}-\eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial x})+(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial x}-\eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial x})$$

même discution que a) mais δ_2 est remplacé par $\sqrt{\delta_2^2+\delta_3^2}$

$\overset{1}{C}_6(H,K)(\tau_2)$,$\overset{2}{C}_6$ $K(\tau_2)$,$\overset{3}{C}_6$ $K(\tau_2)$,$\overset{4}{C}_6(H,K)(\tau_2)$,$\overset{5}{C}_6(H,K)(\tau_2)$,$\overset{6}{C}_6$ $K(\tau_2)$

$\overset{1}{C}_6(H,K)(\tau_3)$,$\overset{2}{C}_6$ $K(\tau_3)$,$\overset{3}{C}_6$ $K(\tau_3)$,$\overset{4}{C}_6(H,K)(\tau_3)$,$\overset{5}{C}_6(H,K)(\tau_3)$,$\overset{6}{C}_6$ $K(\tau_3)$
$\overset{1}{C}_{6h}(H,K)(\tau_5,\tau_6)$,$\overset{2}{C}_{6h}$ $K(\tau_5,\tau_6)$

13) Point sphérique (III)

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_2}{\partial x}-\eta_2\frac{\partial\eta_1}{\partial x}\right)-\left(\eta_3\frac{\partial\eta_4}{\partial x}-\eta_4\frac{\partial\eta_3}{\partial x}\right)$$

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_3}{\partial y}-\eta_3\frac{\partial\eta_1}{\partial y}\right)+\left(\eta_2\frac{\partial\eta_4}{\partial y}-\eta_4\frac{\partial\eta_2}{\partial y}\right)$$

$$\left(\eta_1\frac{\partial\eta_4}{\partial z}-\eta_4\frac{\partial\eta_1}{\partial z}\right)-\left(\eta_2\frac{\partial\eta_3}{\partial z}-\eta_3\frac{\partial\eta_2}{\partial z}\right)$$

point sphérique si $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3$

$$\sqrt{k_x^2+k_y^2+k_z^2} = \frac{\delta_1}{2\sigma_1} = \frac{\delta_2}{2\sigma_1} = \frac{\delta_3}{2\sigma_1}$$

point conique plan si $\delta_i = \delta_j \neq \delta_k$

$$\sqrt{k_{xi}^2+k_{xj}^2} = \frac{\delta_i}{2\sigma_1} = \frac{\delta_j}{2\sigma_1}$$

modulation Ox_i $\quad \delta_i \neq \delta_j \neq \delta_k$

$$k_{xi} = \frac{\delta_i}{2\sigma_1} \qquad k_{xj} = k_{xk} = 0$$

$D_9^2\ R(\tau_1,\tau_2)$

d) Données expérimentales

La plupart des matériaux recensés dans la table 3.3 possèdent une direction de modulation unique. Ainsi par exemple dans K_2SeO_4, Iizumi et al [79] mentionnent des réflections satellites incommensurables caractérisées par le vecteur d'onde $\vec{q} = \frac{1}{3}(1 - \delta)\vec{a}^*$. La déviation δ varie avec la température de 0,07 à 122,5°K à 0,042 à 110°K puis disparait discontinuement à Tc = 93°K. Pour Rb_2ZnCl_4, Gesi et Iizumi [38] ont déterminé à l'aide de la diffusion des neutrons des réflections satellites de la forme $\vec{q} = \frac{1}{3}(1 - \delta)\vec{c}^*$ où δ varie aussi avec la température. Dans ces deux exemples la modulation se trouve le long d'un axe de symétrie, le paramètre d'ordre ayant deux composantes. Par contre dans le Biphényle [84] $(C_{12}H_{10})$ la modulation est de la forme $\delta_a\vec{a}^* + \frac{1}{2}(1 - \delta_b)\vec{b}^*$ où δ_a et δ_b varie avec la température respectivement de 0,05 à 0,04 et de 0,085 à 0,07. On a donc une variation de la modulation dans le plan σ_z non déterminée par la symètrie du système et qui tourne dans ce plan.

Un petit nombre de transitions sont associées à un paramètre d'ordre à quatre composantes. Dans $BaMnF_4$ nos résultats théoriques prédisent une modulation simultanée suivant Ox et Oy ou selon l'un de ces deux axes. Expérimentalement la modulation est observée le long de l'axe Ox, la surstructure suivant Oy étant commensurable. Pour $BaNaNb_5O_{15}$ l'invariant de Lifshitz au point $\frac{\vec{a}^* + \vec{b}^*}{4}$ suggére une modulation le long de la diagonale xy en accord avec les observations [31].

Les données contenues dans la table 3.3 révélent une faible variété de situations expérimentales. Celles-ci confirment toutefois le lien étroit existant entre la forme de la modulation et celle de l'invariant de Lifshitz contenu dans la densité d'énergie libre. Les formes de modulations observées dans les matériaux magnétiques incommensurables sont plus variées et illustrent de maniére beaucoup plus complète nos résultats théoriques. En particulier un exemple de "point cônique" magnétique a été expérimentalement établi.

Légende des tables 3.2 et 3.3

a) Matériaux
b) Groupe spatial de la phase haute température
c) Tc (°K)
d) Ti (°K)
e) Coordonnées du point d'ancrage
f) Notation du point de la zone de Brillouin
g) Direction de modulation observée expérimentalement
h) Dimension du paramètre d'ordre
i) Forme de l'invariant de Lifshitz correspondant

Table 3.2 — Forme de l'invariant de Lifshitz dans les matériaux pour lesquels aucune incommensurabilité n'a été détectée.

a	b	c	e	f	h	i
$NaH_3(SeO_3)_2$	$P2_1/b$	194	$(0,0,\frac{1}{2})$	Z	2	(1,2)u
$NaNH_4C_4H_4O_6.4H_2O$	$P2_12_12$	109	$(\frac{1}{2},0,0)$	X	2	(1,2)x
$LiNH_4SO_4$	$Pna2_1$	283	$(\frac{1}{2},\frac{1}{2},0)$	S	2	(1,2)z
$KFeF_4$	Amma	390	$(\frac{1}{4},\frac{1}{4},0)$	Ξ	4	(1,2)x+(3,4)x,(1,2)y-(3,4)y
NbO_2	$P4_2/mnm$	1073	$(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{2})$	S	4	(1,2)x+(1,2)y+(3,4)x-(3,4)y
FeS	$P6_3/mmc$	410	$(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$	H	4	(1,3)z-(2,4)z
$CsCuCl_3$	$P6_3/mmc$	423	$(0,0,\frac{1}{3})$	Δ	4	(1,3)z+(2,4)z
$RbAg_4I_5$	$P4_132$	208	(0,0,0)	Γ	3	(2,3)x-(1,3)y+(1,2)z
$Cd(NO_3)_2$	Pa3	433	$(0,\frac{1}{2},0)$	X	6	(1,2)y+(3,4)z+(5,6)x

Table 3.3 Invariants de Lifshitz et direction de modulation dans des matériaux possédant une phase incommensurable

a	b	d	g	f	h	i
$NbSe_3$	$P2_1/m$	145	$(1-\delta)\frac{b^*}{4}$	S	2	$(1,2)_u$
Na_2CO_3	$C2/m$	619	$\delta_1 a^*+\delta_2 c^*$	Ξ	2	$(1,2)_u$
$C_{12}H_{10}$	$P2_1/a$	40	$\delta_1 a^*+(1-\delta_2)\frac{b^*}{2}$	Ξ	2	$(1,2)_u$
$C_{12}D_{10}$	$P2_1/a$	38	$\delta_1 a^*+(1-\delta_2)\frac{b^*}{2}$	Ξ	2	$(1,2)_u$
TTF-TCNQ	$P2_1/a$	47	$\delta a^*+0,295b^*$	Ξ	2	$(1,2)_u$
TSeF-TCNQ	$P2_1/a$	29	$\frac{a^*}{2}+0,317b^*$	Ξ	2	$(1,2)_u$
$RbH_3(SeO_3)_2$	$P2_12_12_1$	155	$(1-\delta)\frac{c^*}{2}$	Z	2	$(1,2)_z$
$RbD_3(SeO_3)_2$	$P2_12_12_1$	148	$(1-\delta)\frac{c^*}{2}$	Z	2	$(1,2)_z$
$BaMnF_4$	$A2_1am$	247	$0,391a^*+\frac{b^*}{2}+\frac{c^*}{2}$	I	4	$(1,2)_x+(3,4)_x,(1,2)_y-(3,4)_y$
$(NH_4)_2BeF_4$	Pnam	173	$(1-\delta)\frac{a^*}{2}$	X	2	$(1,2)_x$
$(ND_4)_2BeF_4$	Pnam	183	$(1-\delta)\frac{a^*}{2}$	X	2	$(1,2)_x$
K_2SeO_4	Pnma	129	$(1-\delta)\frac{a^*}{3}$	Σ	2	$(1,2)_x$
$SC(NH_2)_2$	Pnma	202	δb^*	Δ	2	$(1,2)_y$
$SC(ND_2)_2$	Pnma	218	δb^*	Δ	2	$(1,2)_y$
Rb_2ZnCl_4	Pmcn	302	$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$	Λ	2	$(1,2)_z$
Rb_2ZnBr_4	Pmcn	347	$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$	Λ	2	$(1,2)_z$
K_2ZnCl_4	Pmcn	553	$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$	Λ	2	$(1,2)_z$
$(NH_4)_2ZnCl_4$	Pncm	271	$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$	Λ	2	$(1,2)_z$
$(N(CH_3)_4)_2ZnCl_4$	Pmcn	296	δc^*	Λ	2	$(1,2)_z$
$(N(CD_3)_4)_2ZnCl_4$	Pman	297	δa^*	X	2	$(1,2)_x$
$(N(CH_3)_4)_2CoCl_4$	Pmcn	293	δc^*	Λ	2	$(1,2)_z$
		279	δc^*	Λ	2	$(1,2)_z$
$(N(CD_3)_4)_2CoCl_4$	Pmcn	297	δc^*	Λ	2	$(1,2)_z$
$(N(CH_3)_4)_2MnCl_4$	Pmcn	292	δc^*	Z	2	$(1,2)_z$
$(N(CH_3)_4)_2CuCl_4$	Pmcn	297	δc^*	Λ	2	$(1,2)_z$
$(N(CD_3)_4)_2CuCl_4$	Pmcn	299	δc^*	Λ	2	$(1,2)_z$
$(N(CH_3)_4)_2FeCl_4$	Pmcn	281	δc^*	Λ	2	$(1,2)_z$
		266	δc^*	Λ	2	$(1,2)_z$

Table 3.3 (suite)

a	b	d	g	f	h	i
$(N(CH_3)_4)_2CuBr_4$	Pmcn	271	$(1-\delta)\frac{b^*}{2}$	Y	2	$(1,2)_y$
δ-$(CH_3NH_7)_2MnCl_4$	Abma	168	$(1-\delta)\frac{b^*}{3}$	Δ	2	$(1,2)_y$
K.C.P	P4mm	140	$\frac{a^*}{2}+\frac{b^*}{2}+0,3c^*$	V	4	$(1,3)_z+(2,4)_z$
$Ba_2NaNb_5O_{15}$	P4bm	573	$(1-\delta)\frac{a^*+b^*}{4}+\frac{c^*}{2}$	S	4	$(1,2)_x+(3,4)_x+(1,2)_y-(3,4)_y$
$ThBr_4$	$I4_1$/amd	95	$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$	Λ	2	$(1,2)_z$
$ThCl_4$	$I4_1$/amd	70	$(1-\delta)\frac{c^*}{3}$	Λ	2	$(1,2)_z$
2H-$TaSe_2$	$P6_3$/mmc	122	$(1-\delta)\frac{a^*}{3}$	Σ	6	$2(1,2)_x+\sqrt{3}(4,5)_y+\sqrt{3}(3,6)_z$
2H-$NbSe_2$	$P6_3$/mmc	33	$(1-\delta)\frac{a^*}{3}$	Σ	6	$2(1,2)_x+\sqrt{3}(4,5)_y+\sqrt{3}(3,6)_z$

CHAPITRE 4

DIAGRAMMES DE PHASES DANS LES SYSTEMES INCOMMENSURABLES

a) Introduction

Au cours des chapitres précédents nous avons vérifié d'une façon systématique deux caractéristiques des phases incommensurables qui se déduisent directement des propriétés de symétrie des systèmes correspondants -et de la forme de l'énergie libre de Landau qui en découle-. La prédiction des vecteurs d'ancrage possibles et la forme de la modulation apparaissant dans la phase incommensurable, découlent en effet directement de la symétrie du paramètre d'ordre décrivant la succession de transitions. Dans ce chapitre nous examinons des propriétés des phases incommensurables qui sont reliées d'une manière moins immédiate à la symétrie du système considéré. Nous étudions successivement les points multicritiques qui peuvent apparaitre dans un système possédant une ou plusieurs phases incommensurables, ainsi que la forme des diagrammes de phases lorsque deux variables (par exemple la température et la pression) sont impliquées dans la transition. Les considérations précédentes nous conduisent alors à envisager la description de systèmes qui subissent une succession de plusieurs phases incommensurables ou ancrages successifs.

b) Points multicritiques dans les systèmes incommensurables

Au chapitre 1 nous avons déjà mentionné la définition des points de Lifshitz par Hornreich et al [12] et Aslanyan et Levanyuk [13]. Sur les figures 1 et 2 nous avons représenté la variation du coefficient $\alpha(\vec{k})$ (courbe de dispersion), le diagramme de phases pression-température (au voisinage du point de transition) et la variation du vecteur d'onde en fonction de la pression, pour les deux types de points de Lifshitz définis par ces auteurs.

La définition des points de Lifshitz précédents repose sur le développement limité, au voisinage du vecteur d'ancrage $\vec{k}_c$, du coefficient $\alpha(\vec{k})$ de l'invariant quadratique dans la densité d'énergie libre. D'une manière générale, on peut écrire:

$$\alpha(\vec{k}) = a_o(T,P) + \sum_n a_n(T,P) \ (\vec{k} - \vec{k}_c)^n \qquad (1)$$

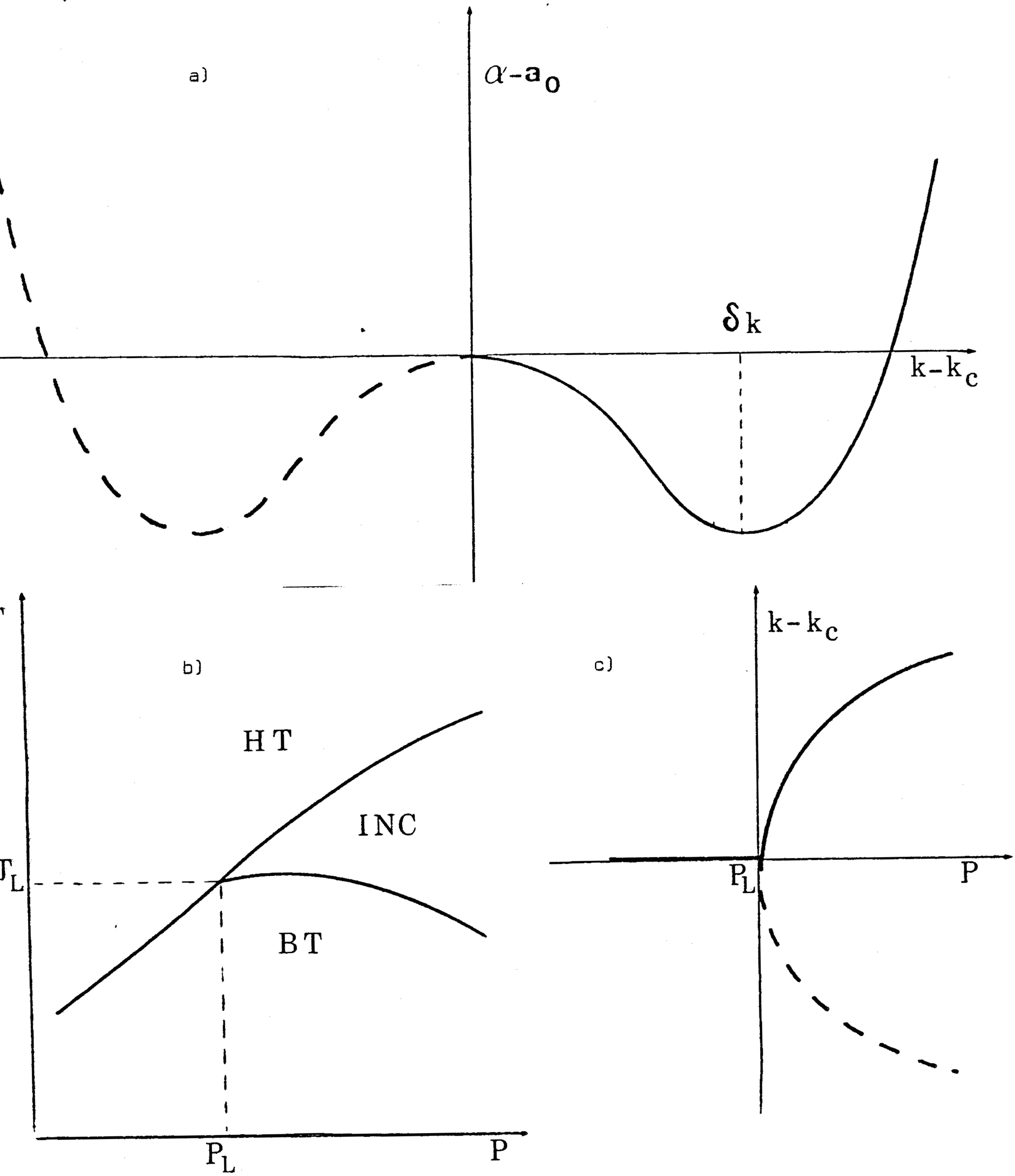


Figure 1 Cas où n_{max} = 4 a) Courbe de dispersion b) Diagramme de phases pression-température c) Variation du vecteur d'onde à partir du point de Lifshitz défini par $\alpha = a_2 = 0$

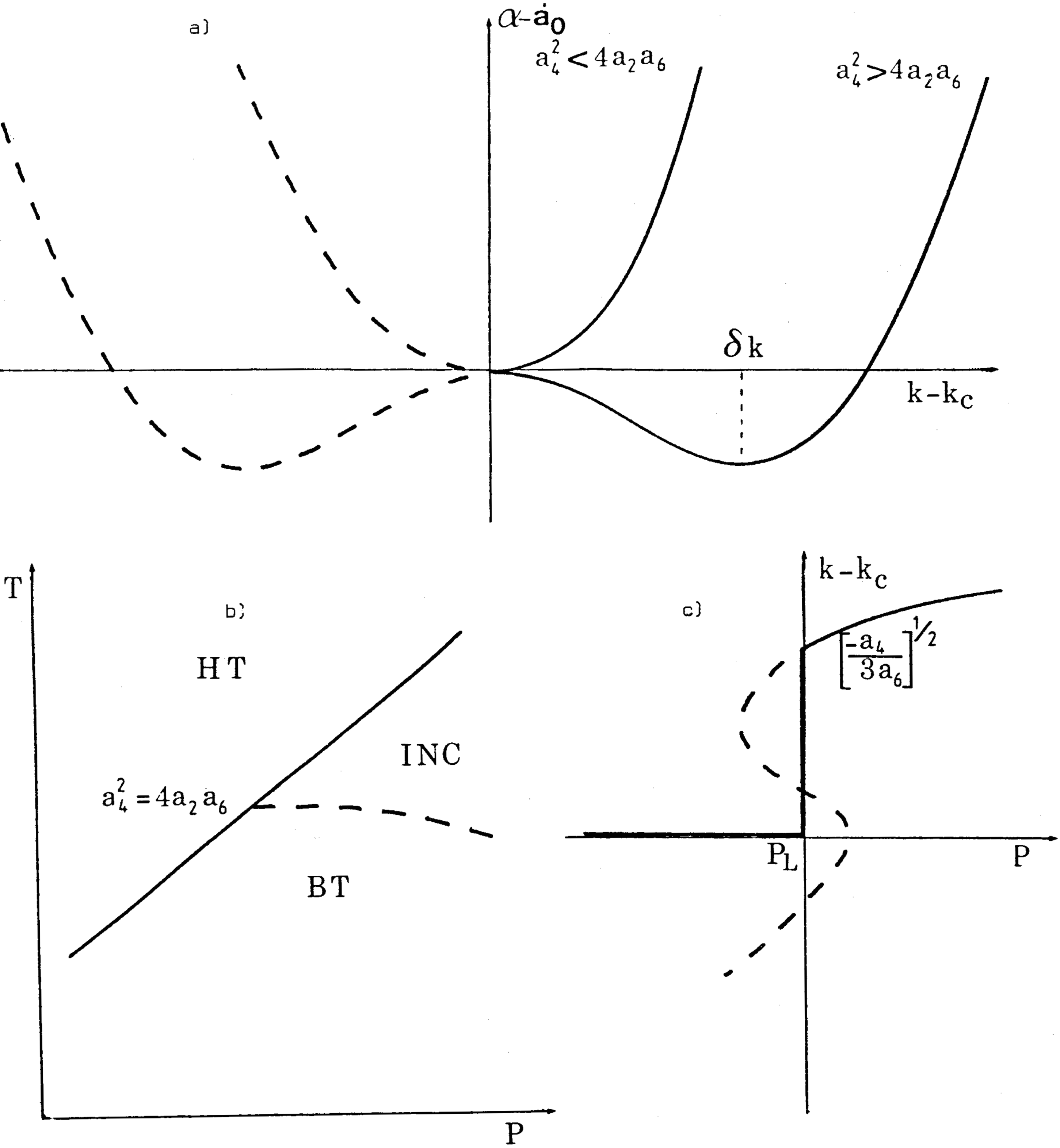


Figure 2 Cas où $n_{max} = 6$ a) Courbe de dispersion b) Diagramme de phases pression-température c) Variation du vecteur d'onde , on remarque que $\vec{k}$ varie discontinument au point de Lifshitz défini par $\alpha = 0$ et $a_4^2 - 4a_2a_6 = 0$

où P est une variable extérieure qui peut être la pression mais également la composition chimique ,etc . . .
Selon la parité de la fonction $\alpha(\vec{k})$ deux familles de points multicritiques peuvent être définies.

cas 1: n est toujours pair

Les deux exemples de points de Lifshitz déjà mentionnés entrent dans cette catégorie de points multicritiques et correspondent respectivement au cas où $n_{max} = 4$ et $n_{max} = 6$.
Si $n_{max} = 8$, on doit dans ce cas supposer que $a_4 <0$, $a_6 <0$ et $a_8 >0$, le seul coefficient a_2 pouvant varier avec la pression. La minimisation de (1) (qui peut encore se résoudre algébriquement) montre que trois phases stables peuvent apparaitre lorsque $a_2(P)$ varie, deux de ces phases étant incommensurables (Fig. 3a). Sur l'isotherme T = Tc (α = 0) deux points de Lifshitz peuvent être ainsi définis pour différentes valeurs de a_2 en P_{L1} et P_{L2}. La variation de $(\vec{k} - \vec{k}_c)(P)$ est représentée sur la figure 4 a) sur laquelle on voit que le vecteur d'onde croit continument de zéro en P_{L1} puis subit une discontinuité en P_{L2}.

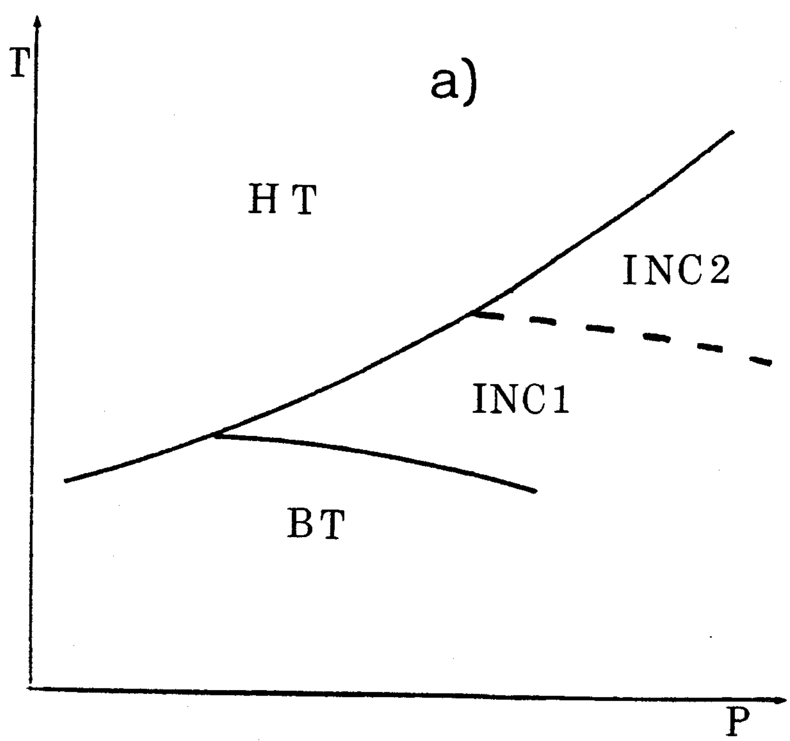


Figure 3 a) Diagramme de phases pression-température dans le cas où n= 8

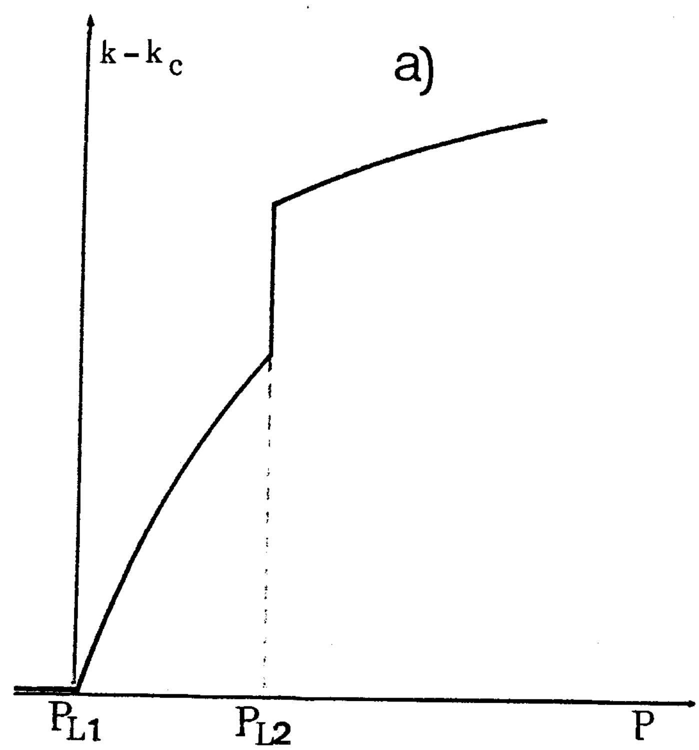
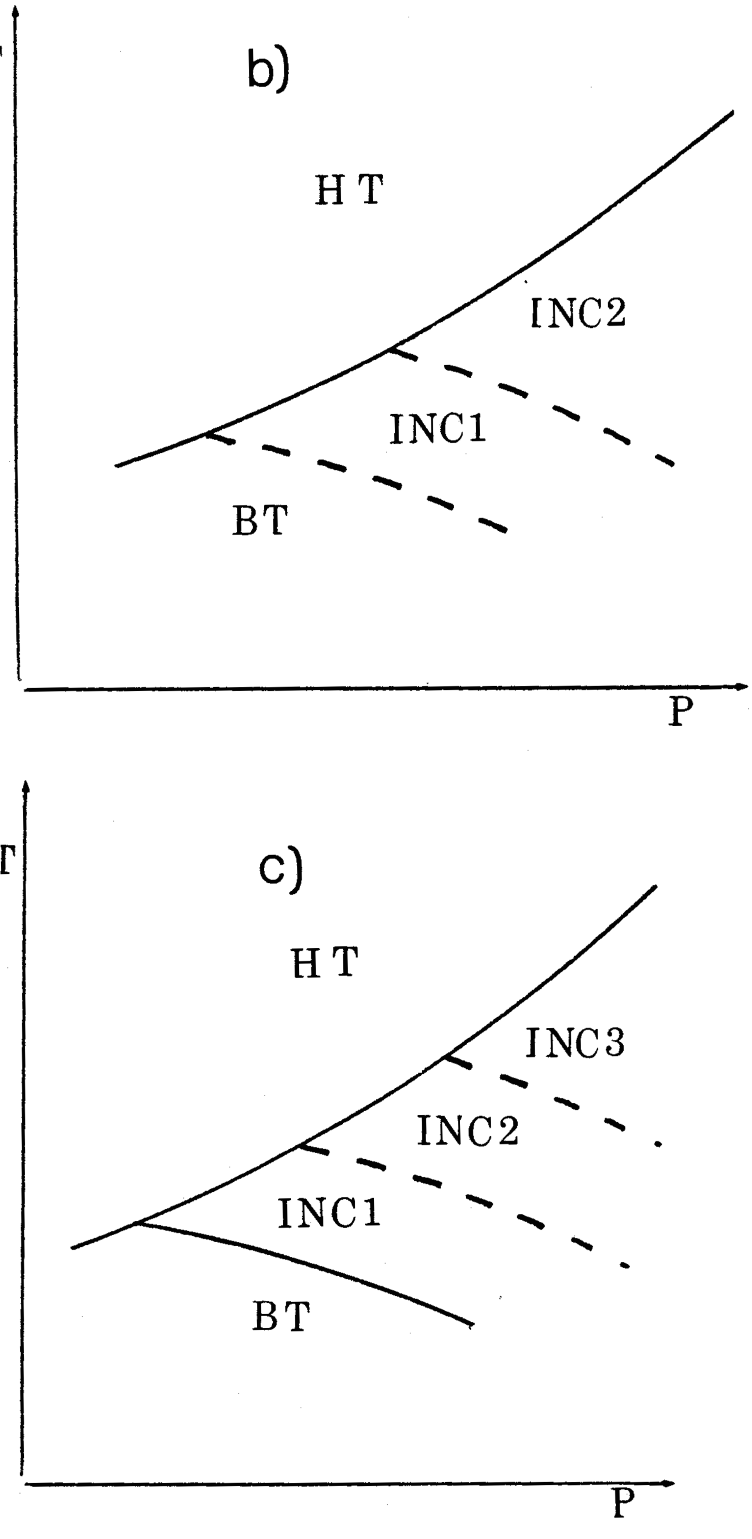


Figure 4 a) Variation du vecteur d'onde pour n= 8

Sur les figures 3 b,c) et 4 b,c) nous avons représenté respectivement les diagrammes de phases (T,P) et les courbes $(\vec{k} - \vec{k}_c)(P)$ pour $n_{max} = 10$ et $n_{max} = 12$. Dans ce dernier cas nous voyons que sur la ligne $\alpha(T) = 0$, peuvent être définis trois points correspondant à des valeurs de $a_2(P)$ qui séparent quatre phases dont trois sont incommensurables.



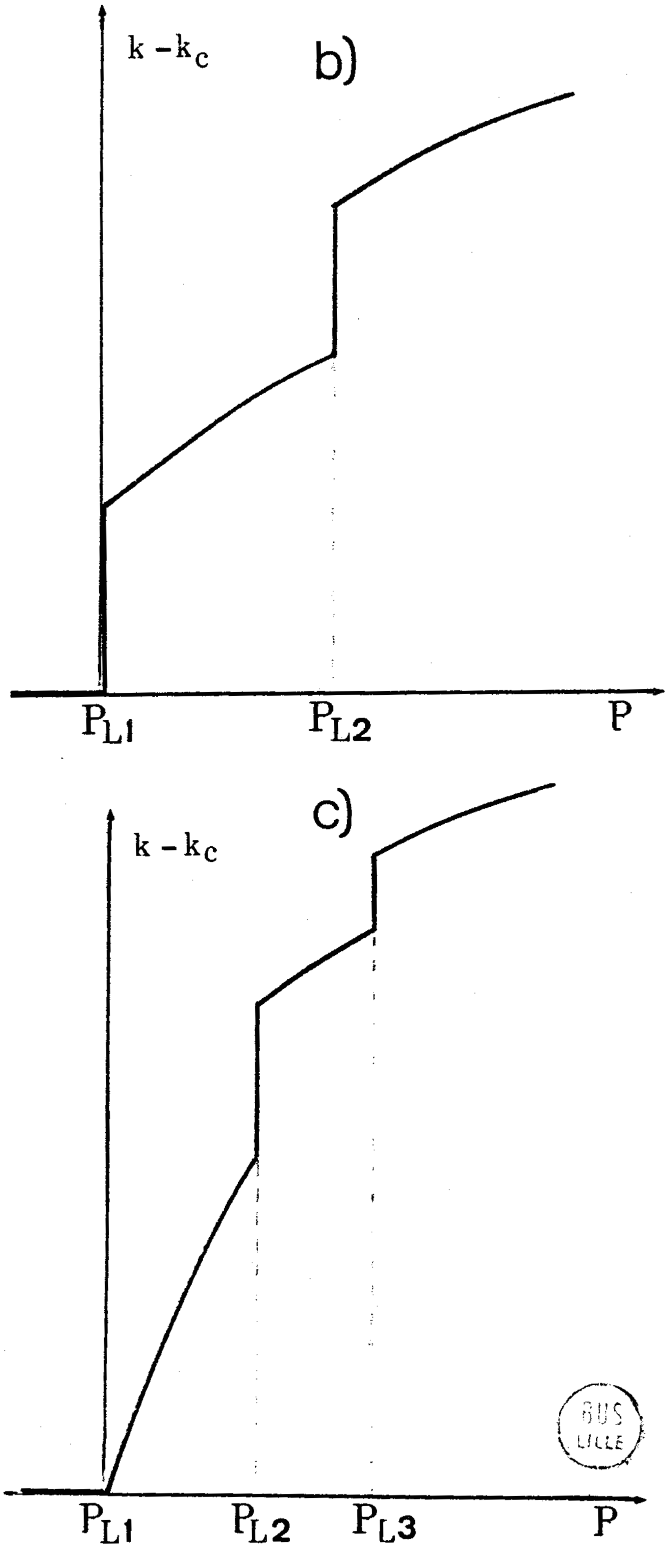


Figure 3 Diagramme de phases pression-température b) n=10, c) n=12

Figure 4 Variation du vecteur d'onde pour n= 10 (b) et n= 12 (c)

Les résultats précédents se généralisent pour n_{max} quelconque (mais toujours pair). On voit que si $n_{max}/2$ est pair le vecteur d'onde croît toujours continument de zéro, alors que pour $n_{max}/2$ impair, le vecteur d'onde subit une discontinuité dés l'apparition de la première phase incommensurable. Considérer des termes de degré n dans (1) signifie que dans la densité d'énergie libre, des dérivées d'ordre n par rapport aux variables d'espace (qui sont toujours du deuxième degré en η_i) doivent être prises en compte. Ainsi pour le point de Lifshitz avec $n_{max}= 4$, Hornreich et al[12] introduisent des invariants de la forme : $\left(\dfrac{\partial^2\eta_i}{\partial x_j^2}\right)^2$

De même $n_{max}= 8$ implique que l'on retienne des invariants de la forme:

$$\frac{\partial^4\eta_i}{\partial x_k^4}\cdot\frac{\partial^4\eta_j}{\partial x_k^4} \quad , \quad \eta_i\cdot\frac{\partial^8\eta_j}{\partial x_k^8} \quad \text{ou} \quad \left(\frac{\partial^4\eta_i}{\partial x_k^4}\right)^2$$

Prendre exclusivement en compte des termes de degrés pairs dans l'expression de $\alpha(\vec{k})$ signifie que le groupe d'invariance du vecteur $\vec{k}$ contient l'inversion ou trois axes concourants. En particulier, le fait qu'aucun invariant linéaire ne figure dans (1) exprime que la condition de Lifshitz est satisfaite par la représentation irréductible qui induit la transition. Nous considérons maintenant le cas où cette condition est violée.

<u>cas 2: des termes impairs figurent dans (1)</u>

Si l'on suppose qu'un invariant linéaire (n=1) existe dans (1) on peut définir plusieurs types de points multicritiques suivant la valeur de n_{max}. Pour $n_{max}= 2$ nous avons représenté sur les figures 5 a, b, c et d) respectivement la variation de $(\alpha - a_0)(\vec{k} - \vec{k}_c)$, $(\vec{k} - \vec{k}_c)(a_1)$, $a_0(a_1)$ et le diagramme de phase pression-température correspondant. Nous voyons que la variation du coefficient a_1 en fonction de la pression est essentielle. Elle prédit dans ce cas -qui correspond à la situation la plus simple décrite au chapitre 1- une variation linéaire du vecteur d'onde et un point multicritique défini par $\alpha = a_1 = 0$ qui sépare trois phases dont l'une est incommensurable.

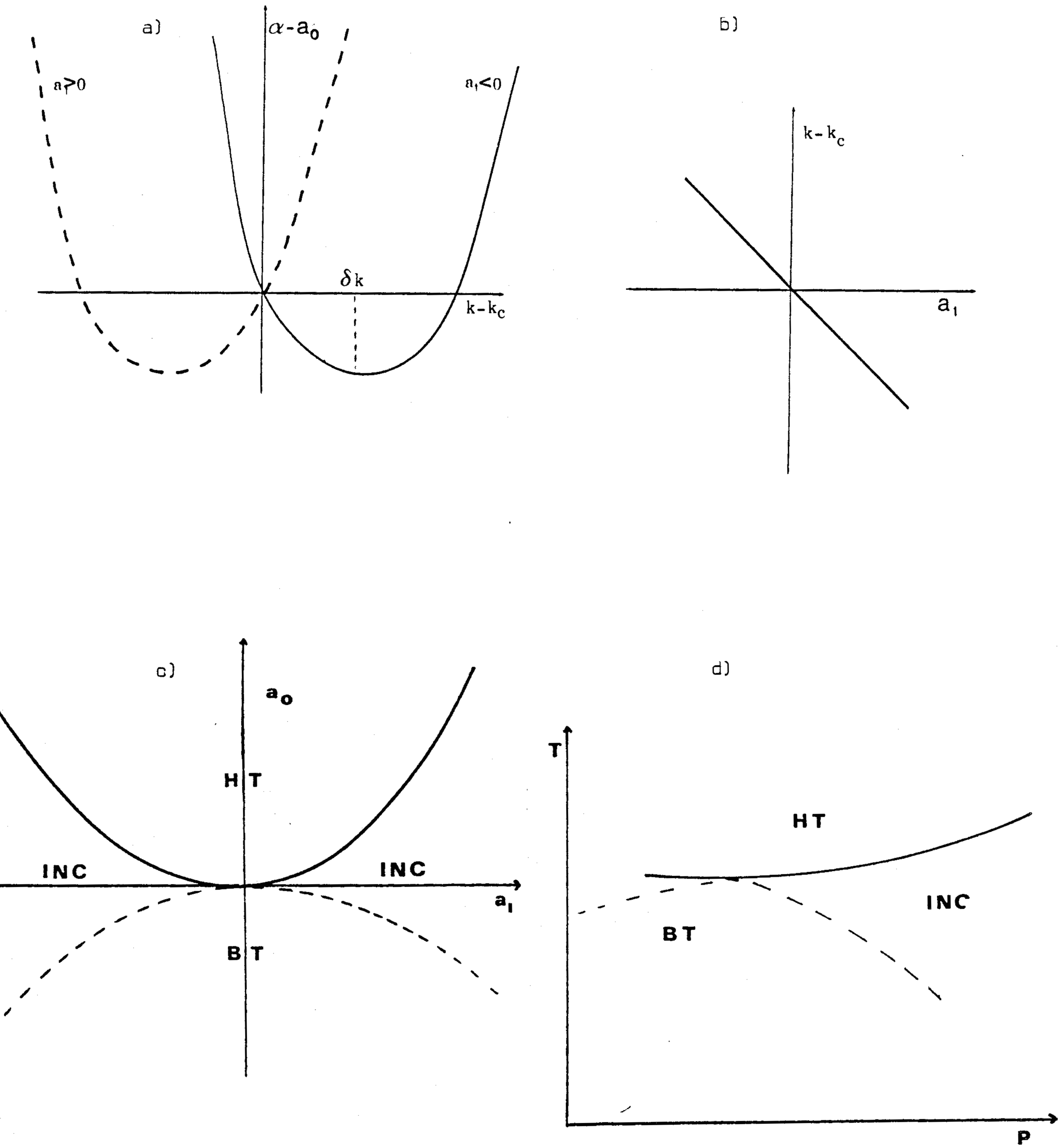


Figure 5 Cas d'une énergie libre pos-édant un invariant de Lifshitz avec n_{max} = 2 a) Courbe de dispersion b) Variation du vecteur d'onde c) Diagramme $a_o = f(a_1)$ d) Diagramme de phases pression-température.

La situation correspondant à $n_{max} = 3$ est représentée sur les figures 6 a, b, c). La différence essentielle avec le cas $n_{max} = 2$ est que le vecteur d'onde ne varie plus linéairement avec a_1 dans la phase incommensurable mais subit une discontinuité pour $a_1 = a_2^2 / 3a_3$ où il tombe à la valeur commensurable $k_c = 0$. La condition $a_2^2 = 3a_1a_3$ définit un point multicritique sur la ligne T=Tc qui sépare une ligne de transitions continues d'une ligne de transitions discontinues.

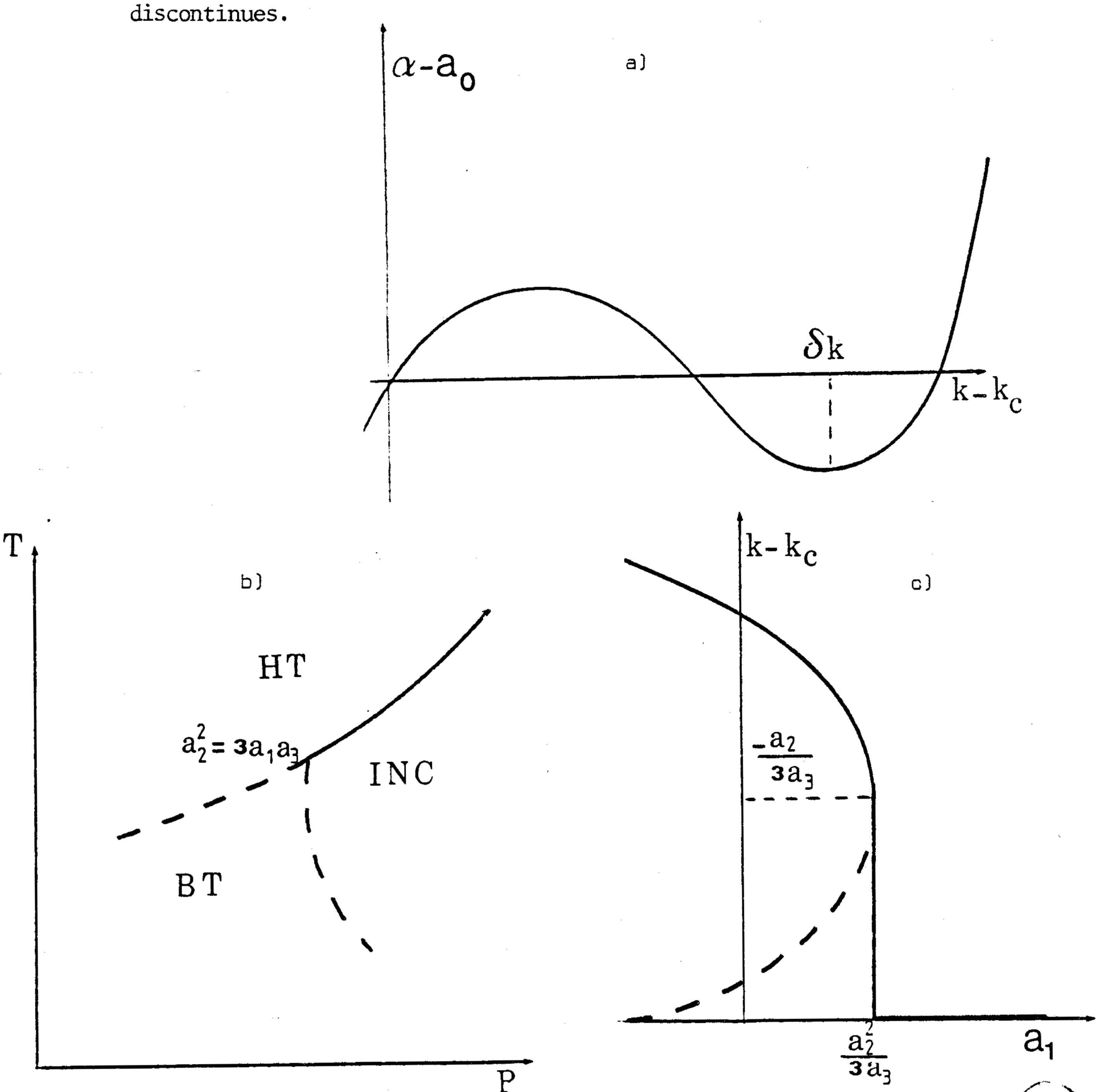


Figure 6 Cas où $n_{max} = 3$ a) Courbe de dispersion b) Diagramme de phases pression-température c) Variation du vecteur d'onde

Les figures 7 a, b, c) montrent que pour n_{max}= 4 deux phases incommensurables sont stables pour des domaines de valeurs différents de P. Le passage d'une phase à l'autre s'effectuant par un saut discontinu du vecteur d'onde. Ici le point multicritique sépare trois phases dont deux sont incommensurables.

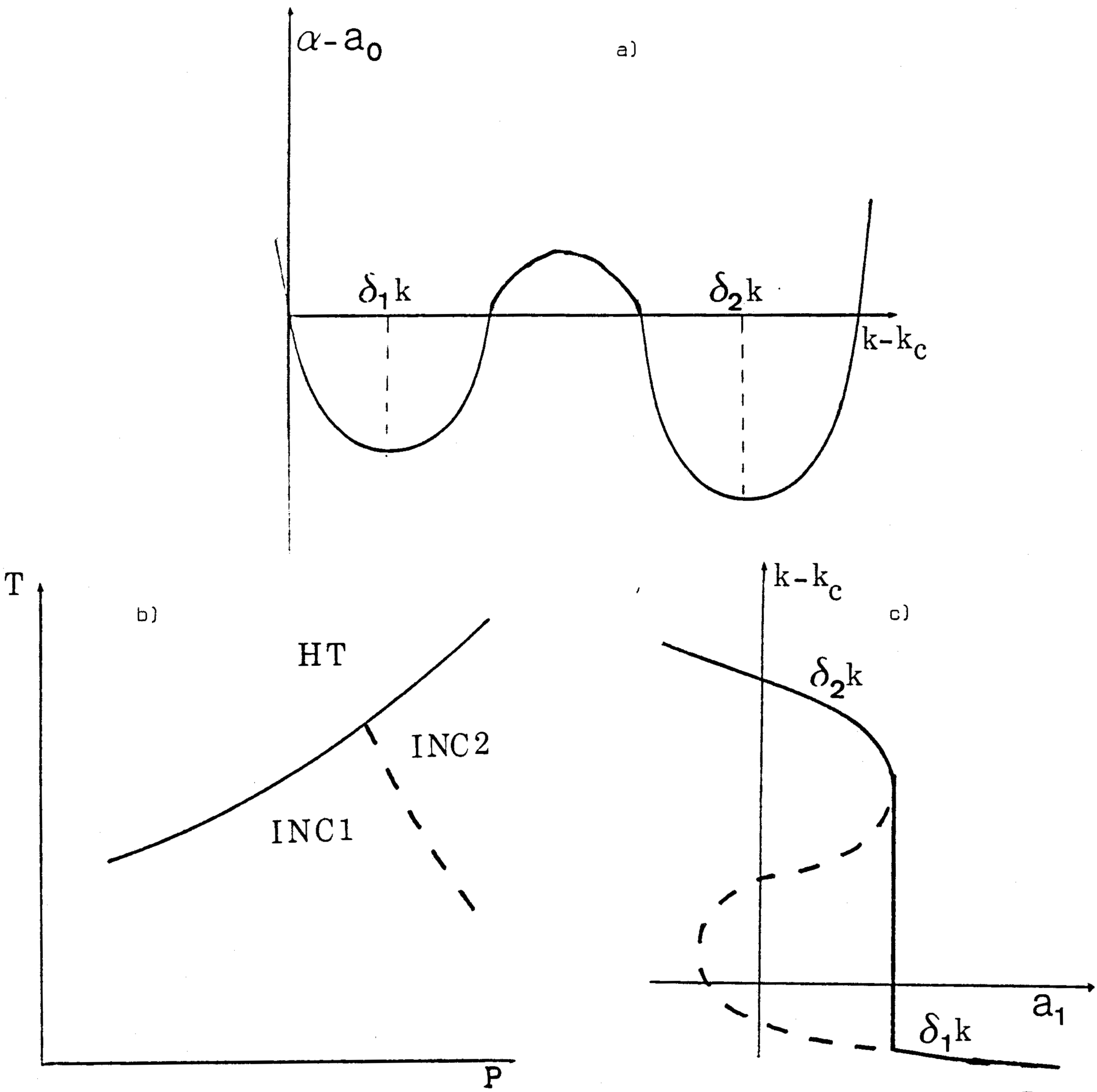


Figure 7 Cas où n_{max} = 4 (avec des valeurs impaires de n)
a) courbe de dispersion b) Diagramme de phases pression-température
c) Variation du vecteur d'onde

Pour la définition des points multicritiques introduits dans ce paragraphe nous avons considéré exclusivement des termes qui sont du deuxième degré par rapport aux composantes du paramètre d'ordre. Au chapitre 1 nous avons montré que des termes de la forme $\eta_i \eta_j \frac{\partial \eta_k}{\partial x}$ dans la densité d'énergie libre assurent également la stabilité des phases incommensurables dans un domaine donné de température. On peut montrer [16] que de tels termes définissent de nouveau minima pour $\alpha(\vec{k})$ et conduisent donc à définir des points multicritiques distincts de ceux déjà considérés. Un ensemble plus complexe de points multicritiques peut aussi être défini si $\alpha(\vec{k})$ est fonction des diverses composantes k_i de $\vec{k}$, les coefficients a_i dans (1) devenant alors des grandeurs tensorielles. Nous ne développons pas ici l'analyse de telles situations.

c) Diagrammes de phases

Au paragraphe précédent un certain nombre de diagrammes pression-température sont indiqués. Il faut toutefois souligner le caractère schématique de ces diagrammes qui veulent symboliser l'existence de points multicritiques mais ne reflètent pas les comportements réels des courbes de séparations des phases. Michelson [99] a ainsi montré que l'angle entre les courbes au voisinage des points multicritiques dépend de la symétrie du réseau cristallin. Dans le cas du modèle considéré au chapitre 1, la forme des diagrammes de phases au voisinage du point de rencontre des courbes de séparation des phases, peut être obtenue par une transformation linéaire des coefficient a_o et a_1. Ainsi , les figures 8 représentent les divers diagrammes pression-température qui peuvent être obtenus pour une énergie libre possédant un terme anisotrope de degré N et un invariant de lifshitz.

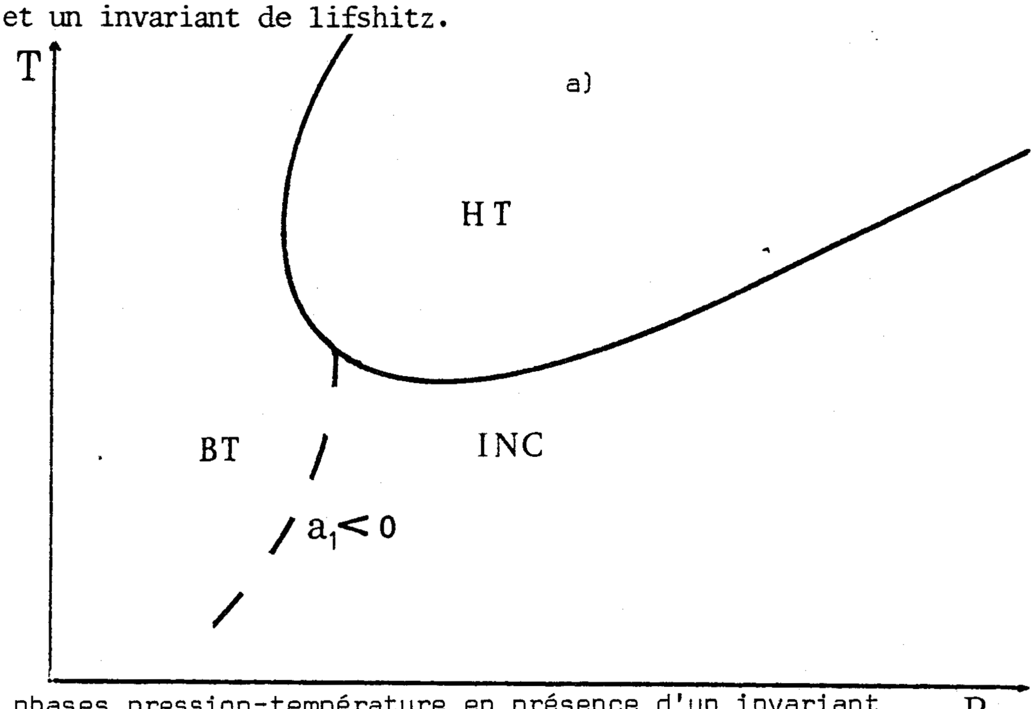
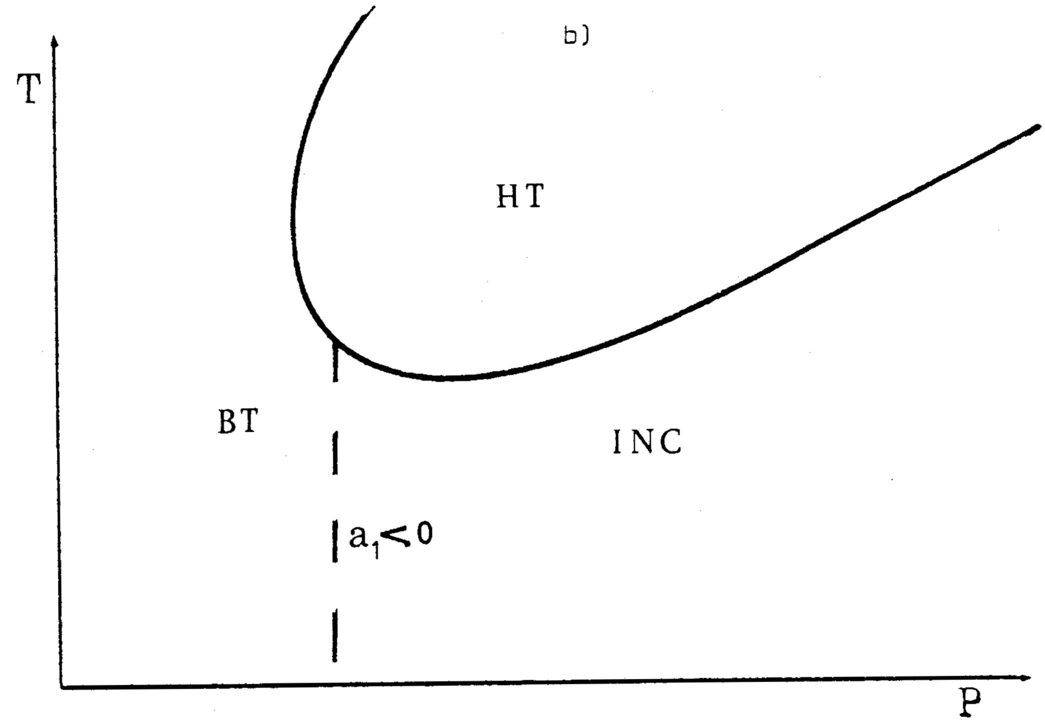


Figure 8 diagramme de phases pression-température en présence d'un invariant de Lifshitz et d'un terme anisotrope de degré N = 4



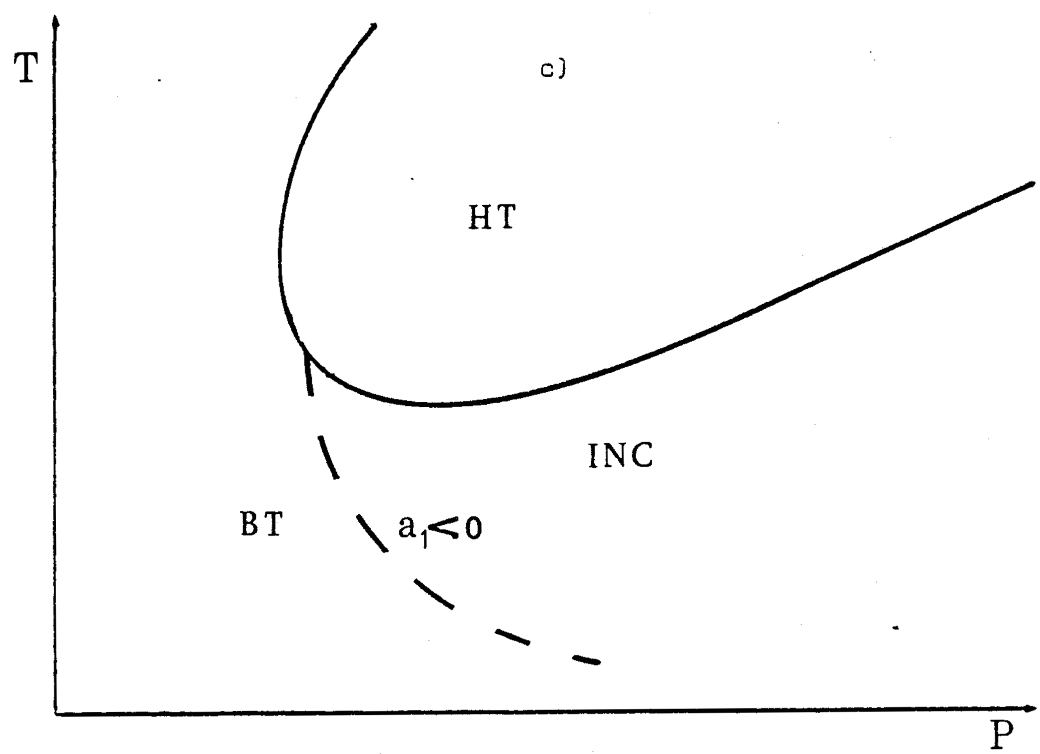


Figure 8 Diagramme de phases pression-température en présence d'un invariant de Lifshitz et de termes anisotropes de degré N = 6 (b) et N = 8 (c)

Des diagrammes de phases correspondant à des situations plus complexes (successions de transitions d'ancrage ou de phases incommensurables) peuvent être décrits phénoménologiquement si l'on introduit dans la densité d'énergie libre deux types de termes:

1) Des invariants qui couplent les composantes du paramètre d'ordre aux dérivées partielles successives de celles-ci. Nous avons montré au paragraphe précédent, que des termes de ce type pouvaient conduire à l'apparition de plusieurs phases incommensurables avec des ancrages successifs.

2) Des invariants des composantes du paramètre d'ordre de degrés plus élevés. La variation des composantes η_i du paramètre d'ordre en fonction de la température dépend en effet du degré des invariants pris en compte dans la partie homogène de la densité d'énergie libre. Si l'on considère le cas le plus simple d'un paramètre d'ordre à une seule composante, la figure 9 montre la variation de η en fonction de la température pour des énergies libres possédant des invariants de degrés n pair avec $n_{max} = 4, 6, 8, 10$ et 12 , **si** on écrit l'énergie libre sous la forme:

$$\phi = a_o + \sum_n a_n \eta^n$$

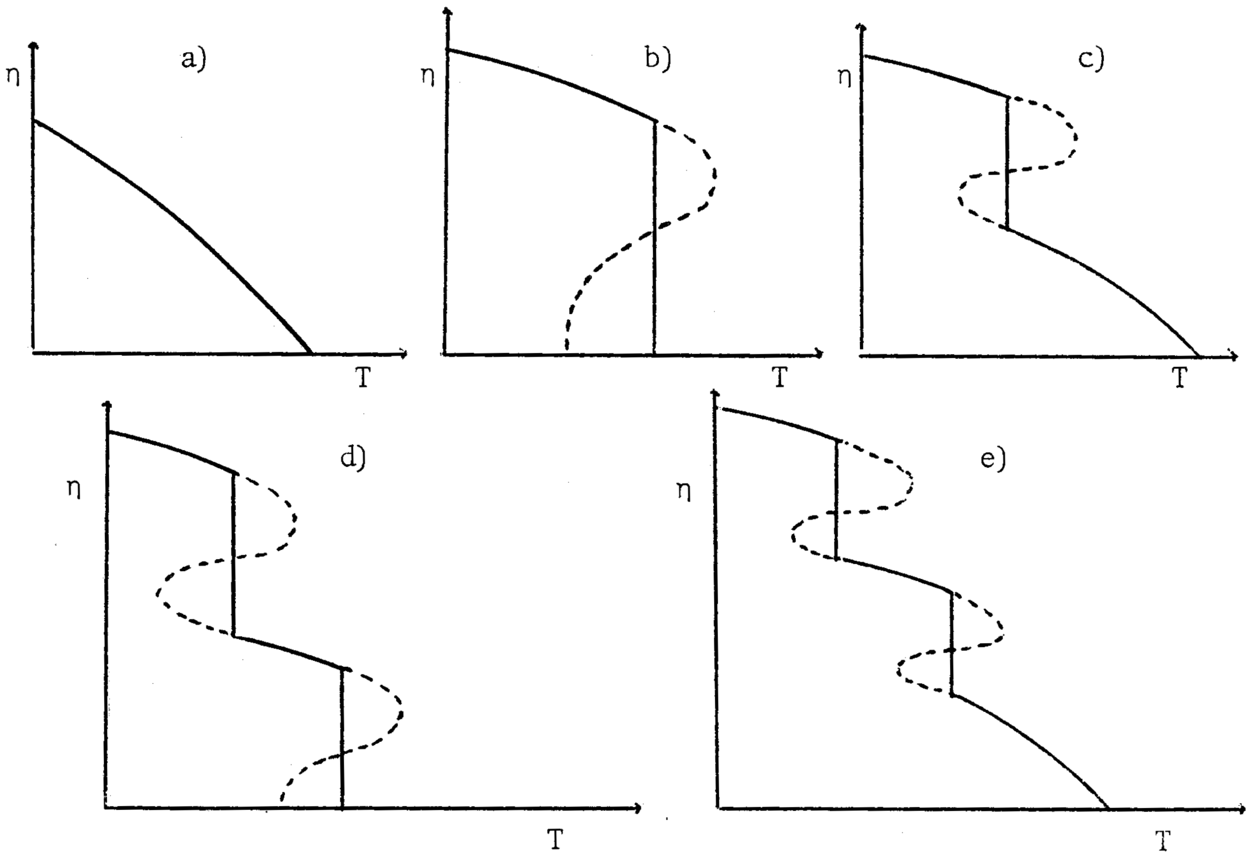
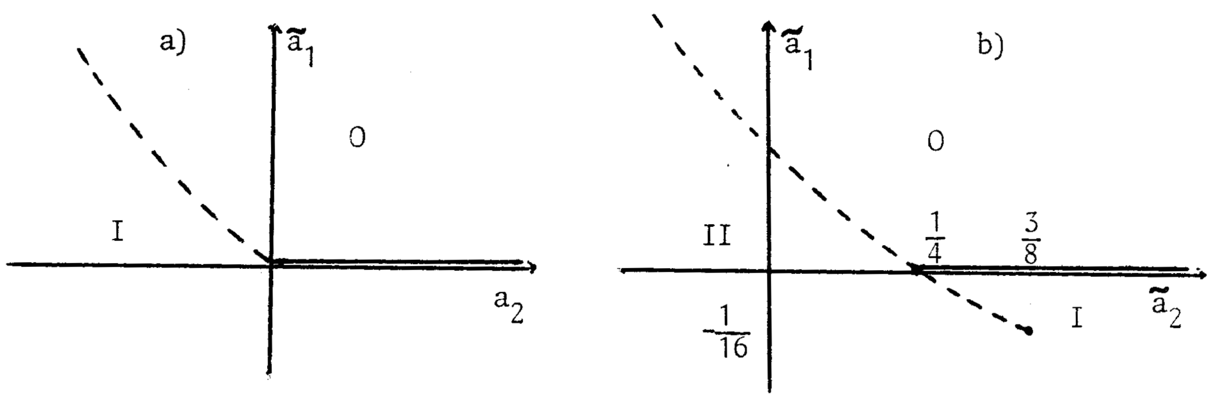


Figure 9 Variation du paramètre d'ordre η en fonction de la température dans le cas où le terme de degré le plus élevé η^n contenu dans l'énergie libre correspond à n=4 (a), 6 (b), 8 (c), 10 (d), 12 (e)

On voit par exemple que pour des invariants de degré 12, le paramètre d'ordre décrit une succession de quatre phases distinctes (commensurables) séparées par trois transitions dont la première est continue et les deux autres discontinues. Les diagrammes de phases peuvent posséder un ensemble complexe de points critiques et multicritiques. Ainsi sur la figure 10 nous avons représenté les diagrammes dans le plan des coefficients $\tilde{a}_1$, $\tilde{a}_2$ dans le cas n_{max}= 6 et 8. Dans le cas où n_{max}= 6 (Fig.10 a)) nous avons un diagramme de phases possédant un point tricritique défini par $a_2 = a_4 = 0$ où une ligne de transition du premier ordre (pour laquelle $a_2 \simeq a_4^2$) rencontre une ligne de transition du second ordre ($a_2 = 0$). Dans le cas où n_{max}= 8 (Fig.10 b)) le diagramme possède un point critique ($\tilde{a}_1 = -\frac{1}{16}$ et $\tilde{a}_2 = \frac{3}{8}$) et un point triple où convergent une ligne de transition du second ordre et une ligne de transition du premier ordre de coordonnées $\tilde{a}_1 = 0$ et $\tilde{a}_2 = \frac{1}{4}$



$\tilde{a}_1 = a_2 \qquad \tilde{a}_2 = a_4 \qquad\qquad \tilde{a}_1 = |a_6^3|\, a_8^2/a_2 \qquad \tilde{a}_2 = a_6^2 a_8$

Figure 10 Diagramme de phases dans l'espace des paramètre réduits $\tilde{a}_1$ et $\tilde{a}_2$. a) cas où n_{max}= 6, b) cas où n_{max}= 8

On peut à titre d'exemple considérer le potentiel de degré 8, dans lequel figurent simultanément les deux types de termes précedents:

$$\phi = \phi_o + \frac{\alpha}{2}(\eta_1^2+\eta_2^2) + \frac{\beta}{4}(\eta_1^2+\eta_2^2)^2 + \frac{\gamma}{6}(\eta_1^2+\eta_2^2)^3 + \frac{\delta_1}{8}(\eta_1^2+\eta_2^2)^4 + \delta_2\eta_1\eta_2(\eta_1^6+\eta_2^6)$$
$$+ a_2\left[\left[\frac{\partial\eta_1}{\partial x}\right]^2 + \left[\frac{\partial\eta_2}{\partial x}\right]^2\right] + a_4\left[\left[\frac{\partial^2\eta_1}{\partial x^2}\right]^2 + \left[\frac{\partial^2\eta_2}{\partial x^2}\right]^2\right] + a_6\left[\left[\frac{\partial^3\eta_1}{\partial x^3}\right]^2 + \left[\frac{\partial^3\eta_2}{\partial x^3}\right]^2\right] \qquad (2)$$

où l'on a supposé $\alpha = a(T-Tc)$, $\beta < 0$, $\gamma < 0$, $\delta_1 > \delta_2 > 0$, $a_2 > 0$, $a_4 < 0$, et $a_6 > 0$.

Le diagramme de phases correspondant à la minimisation de l'énergie libre $F = \int_V \phi dx$ est représenté schématiquement sur la figure 11 . Il contient au dessous de la température de transition Ti une succession de deux phases incommensurables séparées par un ancrage partiel, et se terminant par une transition d'ancrage vers une phase commensurable ($k = k_c$).

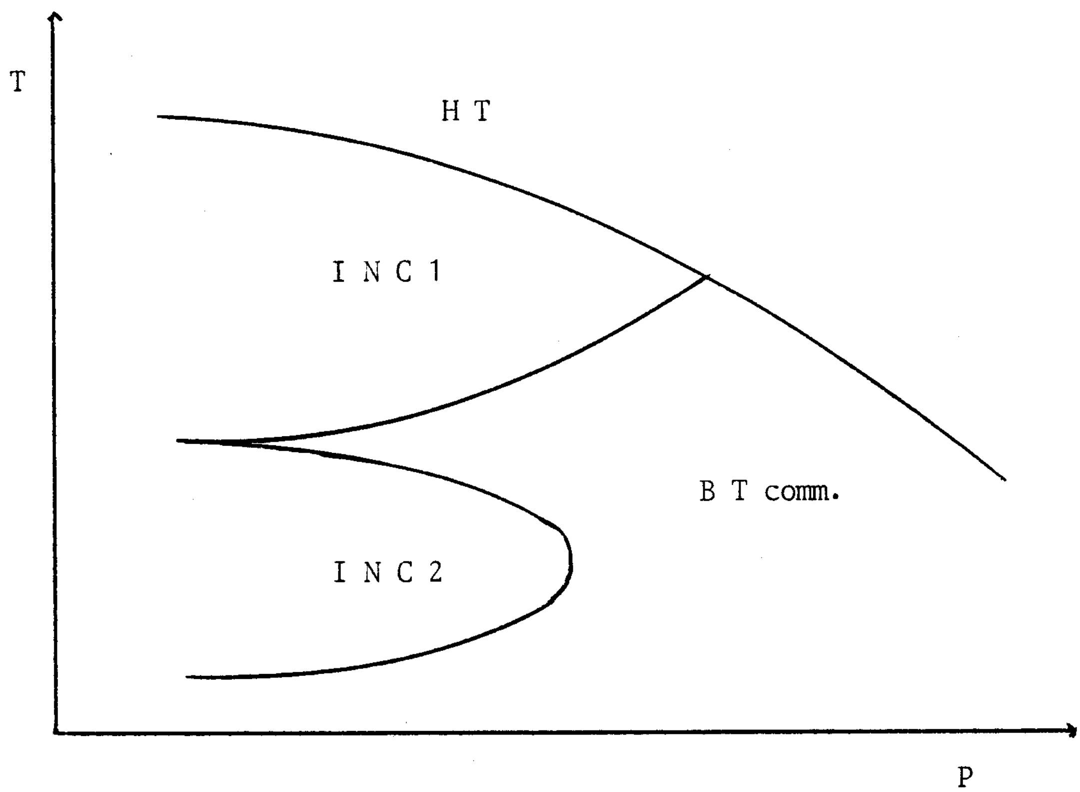


Figure 11 Diagramme de phases pression-température correspondant à la densité d'énergie libre (2)

CONCLUSION

Dans cette thèse, plusieurs aspects de la théorie de Landau des phases incommensurables ont été soulignés. En premier lieu, le rôle essentiel joué par deux types de termes figurant dans la densité d'énergie libre ϕ décrivant ces phases, a été vérifié. Nous avons ainsi montré d'une part que les invariants anisotropes des composantes η_i du paramètre d'ordre de la transition, déterminent strictement les coordonnées des vecteurs d'ancrage. D'autre part, que les invariants de Lifshitz expriment la structure de la modulation dans la phase incommensurable. La forme de ces deux invariants se déduit entièrement de la représentation irréductible qui induit la succession de phases, ce qui illustre le lien étroit existant entre la symétrie des systèmes incommensurables (dont cette représentation irréductible est l'expression) et leurs propriétés les plus remarquables. Toutefois le peu de variété des situations expérimentales obtenues à ce jour sur ces deux points, ne nous a pas permis de vérifier complètement les conclusions théoriques résultant d'une étude systématique (détermination des cartes d'ancrage associées à des invariants anisotropes de degré $n \leq 6$; modulations correspondant à des paramètres d'ordre de dimension inférieure à 4).

Nous avons également (chapitre 4) développé un aspect encore peu étudié sur le plan expérimental, de la théorie de Landau des phases incommensurables, dans lequel les propriétés de symètrie jouent un rôle important mais non exclusif. En considérant la forme du développement limité dans l'espace réciproque du coefficient $\alpha(\vec{k})$ (du terme quadratique dans ϕ) au voisinage du vecteur d'ancrage k_c, nous avons montré que les points multicritiques dans les systèmes incommensurables appartenaient à deux familles distinctes. Une première famille se rattache au cas où des puissances paires de $(k - k_c)$ figurent dans le développement de $\alpha(\vec{k})$. Le diagramme de phases possède alors un ou plusieurs points multicritiques séparant une succession de phases (dont au moins une est commensurable), le vecteur d'onde pouvant varier continument à partir de $\vec{k}_c$ dans les phases incommensurables, selon le degré n du développement. Une deuxième classe de points multicritiques est définie lorsqu'un terme linéaire en $(k - k_c)$ figure dans le développement de $\alpha(\vec{k})$ (ou plus généralement un terme de degré impair). Le système peut alors (selon la variation du coefficient du terme linéaire) posséder plusieurs points multicritiques séparant une succession de phases qui peuvent toutes être incommensurables. Les considérations précédentes nous ont alors permis d'envisager l'étude des systèmes incommensurables qui sont le siége d'une série de transitions d'ancrage ou incommensurables. Nous avons suggéré que de tels systèmes pouvaient être décrits en prenant simultanément en compte des invariants anisotropes de degrés élevés et des invariants contenant des dérivées d'ordre supérieur des composantes du paramètre d'ordre. Une étude de modèles particuliers correspondant à des transitions réellement observées (telles la Thiourée) serait toutefois nécessaire pour illustrer ce modèle.

R E F E R E N C E S

REFERENCES

1. M.E. Fisher et W. Selke, Phys. Rev. Lett. 44 1502 (1980);J. von Boehm et P. Back, Phys. Rev. Lett. 42 122 (1979)
2. J. Villain et M. Gordon, J. Phys. C: Solid Stat. Phys 13 3117 (1980)
3. T. Janssen et J.A. Tjon, Ferroelectrics 36 285 (1981)
4. S. Aubry,dans Solitons and Condensed Matter Physics, Springer-Vertag Heidelberg New York 1981, p. 264
5. I.E. Dzialoshinskii, Sov. Phys. J.E.T.P. 20 960 (1964)
6. A.P. Levanyuk et D.G. Sannikov, Sov. Phys. Solid State 18 245 (1976)
7. E.M. Lifshitz, Z. Eksp. Teor. Fisiki 11 255 (1941)
8. D.G. Sannikov et A.P. Levanyuk, Sov. Phys. Solid State 19 67 (1977)
9. V.A. Golovco, Sov. Phys. Solid State 22 1729 (1980)
10. Y. Ishibashi et V. Dvorak, J. Phys. Soc. Japan 44 32 (1978)
11. P. Tolédano et J.C. Tolédano Phys. Rev. B.14 3097 (1976)
12. R.M. Hornreich, M. Luban et S. Shtrikman, Phys. Rev. Lett; 35 1678 (1975)
13. T.A. Aslanyan et A.P. Levanyuk, Sov. Phys. Solid State 20 466 (1978)
14. C. Kittel Introduction à la Physique du Solide, Paris Dunod (1958)
15. N. Boccara, Ann. Phys. 76 72 (1973)

16. T.A. Aslanyan et A.P. Levanyuk, Sov. Phys. Solid State 20 1925 (1978)

17. T.A. Aslanyan et A.P. Levanyuk, Sov. Phys. Solid State 31 547 (1979)

18. E.B. Loginov, Sov. Phys. Crys. 24 637 (1979)

19. A.L. Korzhenevskii, Sov. Phys. J.E.T.P. 54 568 (1979)

20. F. Denoyer et al, C.R. Acad. Scie. Paris 292 13 (1981)

21. G.A. Samara, N.E. Massu et F.G. Ulman, Ferroelectrics 36 335 (1981)

22. V.L. Indenbom et E.B. Loginov, Sov. Phys. Crys. 26 526 (1981)

23. J. Zak et al, The Irreducible Representations of Space Groups Benjamin N.Y. (1969)

24. P. Tolédano, Thése de Doctorat Université de Picardie (1979)

25. P. Tolédano et G. Pascoli dans N. Boccara, Symmetries and broken Symmetries in Condensed Matter Physics (IDSET,Paris) 291 (1981)

26. A. Maciel et J.F. Ryan, Journal de Phys. C.6 716 (1981)

27. Y. Ishibashi et V. Dvorak, J; Phys. Jap. 45 1119 (1978)

28. J.C. Tolédano et P. Tolédano, Ferroelectrics 26 715 (1980)

29. C.J. de Pater, Physica 96 89 (1979). C.J. de Pater et R.B. Helmholdt, Phys. Rev. 19 5735 (1979)

30. J. Schneck et F. Denoyer, Phys. Rev. 23 383 (1981)

31. J. Schneck et al, Phys. Rev. 25 1766 (1982)

32. S. Plesko, R. Kind et H. Arend, Ferroelectrics 26 703 (1980)

33. S. Plesko et al, Ferroelectrics 36 331 (1981)

34. S. Sawada et al, J. Phys. Soc. Jap. 50 3677 (1981)

35. K. Itoh et al, J. Phys. Soc. Jap. 48 1039 (1980)

36. S. Sawada, Y. Shiroishi et al, J. Phys. Soc. Jap. 43 2101 (1977)

37. S. Sawada, Y. Shiroishi et al, J. Phys. Soc. Jap. 43 2099 (1977)

38. K. Gesi, M. Iizumi, J. Phys. Soc. Jap. 46 697 (1979)

39. S. Tanisaki et H.Mashiyama, J. Phys. Soc. Jap. 48 339 (1980)

40. K.Gesi et M. Iisumi, J. Phys Soc. Jap. 48 337 (1980)

41. H. Mashiyama et S. Tanssaki, Phys. Lett. 76 347 (1980)

42. H. Mashiyama, J. Phys. Soc. Jap. 49 2270 (1980)

43. R. Almairac, M. Ribet et al, J. Physique 41 315 (1980)

44. H. Mashiyama, S. Tanssaki et K. Gesi, J. Phys. Soc. Jap. 50 1415 (1981)

45. G. Marion, R. Almairac et al, J. Phys. Solid State Phys. 14 3177(1981)

46. K. Gesi, J. Phys. Soc. Jap. 51 2532 (1982)

47. H. Mashiyama et S. Tanisaki, J. Phys. Soc. Jap. 50 1413 (1981)

48. H. Mashiyama et S. Tanisaki, J. Phys. Soc. Jap; 15 455 (1982)

49. K. Gesi et K. Ozawa, J. Phys. Soc. Jap. 51 2205 (1982)

50. H. Takena , R. Ohhishi et H. Terauchi, J. Phys. Soc. Jap. 42 929 (1977)

51. M. Iizumi et K. Gesi, Solid State Comm. 22 37 (1977)

52. M. Eibschütz et H.J. Guggenheim, Phys. Rev. 19 5754 (1979)

53. B.B. Lavrencic et J.F. Scott, Phys. Rev. 24 2711 (1981)

54. V. Dvorak et J. Fousek, Phys. State Solid 61 99 (1980)

55. A.P. Levanyuk et D.G. Sannikov, Sov. Phys. Solid State 18 1122 (1976)

56. D. Kucharczyk, A. Pietraszko et K. Lukaszewicz, Phys. State Solid
37 287 (1976)

57. K. Aizu, J. Phys. Soc.Jap. 44 230 (1977)

58. A.H. Moudden, F. Denoyer et M. Lambert, J. Physique 39 1323 (1978)

59. F. Denoyer, A.H. Moudden, R.Currat, Phys. Rev.
25 1697 (1982)

60. G. Pascoli, Thése de 3° Cycle Université de LILLE I (1981)

61. R.Brouwer et F. Jellinek, Mat. Res. Bull. 9 827 (1974)

62. D.R. Karecki et B.P. Clayman, Phys. Rev. 19 6367 (1979)

63. K. Tsutsumi, T.Saubongi et A. Torujumi, J. Phys. Soc. Jap.
49 837 (1980)

64. D.E. Moncton, J.D. Axe et F.J. Disalvo, Phys. Rev. 16 801 (1977)

65. K.K. Fung, S.M. Kernan et al, J. Phys. Solid State Phys.
14 5417 (1981)

66. J.L. Hodeau, M. Marezio et al, J. Phys. Solid State Phys.
11 4117 (1978)

67. R. Bruinsma et S. Trullinge, Phys. Rev. 22 4543 (1980)

68. W. Depmeieret S.A. Mason, Solid State Comm. 44 722 (1982)

69. W. Depmeieret al, Acta Cryst. B.33 3713 (1977)

70. W. Depmeieret al, Acta Cryst. B.34 920 (1977)

71. P. Robin, J.P. Pouget et al, Chem. Phys. Lett. 71 217 (1979)

72. J.N. Patillon, P. Robin et al, Mol.Cryst.,Liq. Cryst.
76 297 (1981)

73. M. Bertault, M. Krauzmut et al, J. Physique 43 755 (1982)

74. A.I. Prokhvatilov,A.P. Isakina et I.N. Krupskii, Solid State Comm.
42 59 (1982)

75. D. van der Putten, K.O. Prins et N.J. Trappeniers, Physica
114 281 (1982)

76. D.G. Sannikov et A.P. Levanyuk, Sov.Phys. Solid State
20 580 (1978)

77. Y. Ishibashi, J. Phys. Soc. Jap. 51 1220 (1982)

78. K. Aizu, J. Phys. Soc. Jap. 43 1301 (1977)

79. M. Iizumi, J.D. Axe et al, Phys. Rev. 15 4392 (1977)

80. W. Adlhart, H. Blank et H. Jagodzinski, Acta Cryst. 38 505 (1982)

81. P. Delamoye et R. Currat, J. Phys. 43 655 (1982)

82. P. de Kouchkovsky, M.F. le Cloarec et P. Delamoye, Mat. Res. Bull. 16 1421 (1981)

83. J. Trotter, Acta Cryst. 14 1135 (1961)

84. H. Cailleau, F. Moussa et J. Mons, Solid State Comm. 31 521 (1979)

85. M. Mori et Y. Yamada, J. Phys. Soc. Jap. 46 1673 (1979)

86. M. Mori, Y. Noda et Y. Yamada, J. Phys.soc.jap. 48 1288 (1980)

87. Y. Noda, M. Mori et Y. Yamada, Solid State Comm. 23 954 (1978)

88. S. Kashida, J. Phys. Soc. Jap. 47 1134 (1979)

89. V. Dvorak,et S.K. Esayan, Solid State Comm. 44 901 (1982)

90. R. Blinc, M.I. Burgar et al, Phys. Rev. 26 6159 (1982)

91. S.M. Shapiro, J.D. Axe et al, Solid State Comm. 15 377 (1974)

92. R. Pynn, J.D. Axe et P.M. Raccah, Phys. Rev. 17 2196 (1978)

93. D. Mukamel, Phys. Rev. Lett. 34 481 (1975)

94. W.V. Johnston, H. Wiedersich et G.W. Lindberg, J. Chem. 51 3739 (1969)

95. S. Horotsu, Solid State Phys. 10 967 (1977)

96. C.J. de Pater, J.D. Axe et R. Currat, Phys. Rev. 19 4684 (1979)

97. J.T. Devreese et al, Higly Conducting One-Dimensional Solids N.Y. (1979)

98. I.P. Aleksandrova, Ferroelctrics 24 135 (1980)

99. A. Michelson, Phys. Rev. B16 577, 585 et 5121 (1977)

A N N E X E 1

BASES DES COORDONNEES D'ANCRAGE

S Y S T E M E   T R I C L I N I Q U E

(base triclinique)

base des coordonnées d'ancrage

$$\left(\frac{2\pi}{a} \; , \; 0 \; , \; 0 \right)$$

$$\left(0 \; , \; \frac{2\pi}{b} \; , \; 0 \right)$$

$$\left(0 \; , \; 0 \; , \; \frac{2\pi}{c} \right)$$

S Y S T E M E   M O N O C L I N I Q U E

base des coordonnées d'ancrage:

$$\left(\frac{2\pi}{a} \; , -\frac{2\pi b}{da} , \; 0 \right)$$

$$\left(0 \; , \; \frac{2\pi}{d} \; , \; 0 \right)$$

$$\left(0 \; , \; 0 \; , \; \frac{2\pi}{c} \right)$$

réseau direct	réseau réciproque	
$(a \; , \; 0 \; , \; 0)$	$\left(\frac{2\pi}{a} \; , \; \frac{2\pi b}{da} , \; 0 \right)$	
$(b \; , \; d \; , \; 0)$	$\left(0 \; , \; \frac{2\pi}{d} \; , \; 0 \right)$	(P)
$(0 \; , \; 0 \; , \; c)$	$\left(0 \; , \; 0 \; , \; \frac{2\pi}{c} \right)$	
$\left(\frac{a}{2} \; , \; 0 \; , \; \frac{c}{2} \right)$	$\left(\frac{2\pi}{a} \; , -\frac{2\pi b}{ad} , \; \frac{2\pi}{c} \right)$	
$\left(-\frac{a}{2} \; , \; 0 \; , \; \frac{c}{2} \right)$	$\left(-\frac{2\pi}{a} \; , \; \frac{2\pi b}{ad} , \; \frac{2\pi}{c} \right)$	(B)
$(b \; , \; d \; , \; 0)$	$\left(0 \; , \; \frac{2\pi}{d} \; , \; 0 \right)$	

SYSTEME ORTHORHOMBIQUE

base des coordonnées d'ancrage:

$\left(\frac{2\pi}{a} , 0 , 0 \right)$

$\left(0 , \frac{2\pi}{b} , 0 \right)$

$\left(0 , 0 , \frac{2\pi}{c} \right)$

réseau direct	réseau réciproque	
$(a , 0 , 0)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , 0 , 0 \right)$	
$(0 , b , 0)$	$\left(0 , \frac{2\pi}{b} , 0 \right)$	(P)
$(0 , 0 , c)$	$\left(0 , 0 , \frac{2\pi}{c} \right)$	
$\left(\frac{a}{2} , \frac{b}{2} , 0 \right)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , \frac{2\pi}{b} , -\frac{2\pi}{c} \right)$	
$\left(\frac{a}{2} , 0 , \frac{c}{2} \right)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , -\frac{2\pi}{b} , \frac{2\pi}{c} \right)$	(F)
$\left(0 , \frac{b}{2} , \frac{c}{2} \right)$	$\left(-\frac{2\pi}{a} , \frac{2\pi}{b} , \frac{2\pi}{c} \right)$	
$\left(\frac{a}{2} , \frac{b}{2} , 0 \right)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , \frac{2\pi}{b} , 0 \right)$	
$\left(\frac{a}{2} , -\frac{b}{2} , 0 \right)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , -\frac{2\pi}{b} , 0 \right)$	(C)
$(0 , 0 , c)$	$\left(0 , 0 , \frac{2\pi}{c} \right)$	
$\left(\frac{a}{2} , \frac{b}{2} , \frac{c}{2} \right)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , 0 , \frac{2\pi}{c} \right)$	
$\left(\frac{a}{2} , \frac{b}{2} , -\frac{c}{2} \right)$	$\left(0 , \frac{2\pi}{b} , -\frac{2\pi}{c} \right)$	(I)
$\left(\frac{a}{2} , -\frac{b}{2} , -\frac{c}{2} \right)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , -\frac{2\pi}{b} , 0 \right)$	

S Y S T E M E   Q U A D R A T I Q U E

base des coordonnées d'ancrage:

$$\left(\frac{2\pi}{a} , 0 , 0 \right)$$

$$\left(0 , \frac{2\pi}{a} , 0 \right)$$

$$\left(0 , 0 , \frac{2\pi}{c} \right)$$

réseau direct	réseau réciproque	
$(a , 0 , 0)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , 0 , 0 \right)$	
$(0 , a , 0)$	$\left(0 , \frac{2\pi}{a} , 0 \right)$	(P)
$(0 , 0 , c)$	$\left(0 , 0 , \frac{2\pi}{c} \right)$	
$\left(\frac{a}{2} , \frac{a}{2} , \frac{c}{2} \right)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , 0 , \frac{2\pi}{c} \right)$	
$\left(\frac{a}{2} , \frac{a}{2} , -\frac{c}{2} \right)$	$\left(0 , \frac{2\pi}{a} , -\frac{2\pi}{c} \right)$	(I)
$\left(\frac{a}{2} , -\frac{a}{2} , -\frac{c}{2} \right)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , -\frac{2\pi}{a} , 0 \right)$	

S Y S T E M E   R H O M B O H E D R I Q U E

base des coordonnées d'ancrage:
(hexagonale)

$$\left(\frac{4\pi}{3a}, 0, 0\right)$$

$$\left(0, \frac{4\pi}{3a}, 0\right)$$

$$\left(0, 0, \frac{2\pi}{c}\right)$$

réseau direct	réseau réciproque	
$\left(\frac{a}{3}, -\frac{a}{3}, \frac{c}{3}\right)$	$\left(\frac{4\pi}{3a}, -\frac{4\pi}{3a}, \frac{\pi}{c}\right)$	
$\left(\frac{a}{3}, \frac{2a}{3}, \frac{c}{3}\right)$	$\left(\frac{4\pi}{3a}, \frac{8\pi}{3a}, \frac{\pi}{c}\right)$	(R)
$\left(-\frac{2a}{3}, -\frac{a}{3}, \frac{c}{3}\right)$	$\left(-\frac{8\pi}{3a}, -\frac{4\pi}{3a}, \frac{\pi}{c}\right)$	

S Y S T E M E   H E X A G O N A L

base des coordonnées d'ancrage:
(hexagonale)

$$\left(\frac{8\pi}{3a}, 0, 0\right)$$

$$\left(0, \frac{8\pi}{3a}, 0\right)$$

$$\left(0, 0, \frac{2\pi}{c}\right)$$

réseau direct	réseau réciproque	
$(a, 0, 0)$	$\left(\frac{8\pi}{3a}, \frac{4\pi}{3a}, 0\right)$	
$(0, a, 0)$	$\left(\frac{4\pi}{3a}, \frac{8\pi}{3a}, 0\right)$	(P)
$(0, 0, c)$	$\left(0, 0, \frac{2\pi}{c}\right)$	

S Y S T E M E   C U B I Q U E

base des coordonnées d'ancrage:

$$\left(\frac{2\pi}{a} , 0 , 0 \right)$$

$$\left(0 , \frac{2\pi}{a} , 0 \right)$$

$$\left(0 , 0 , \frac{2\pi}{a} \right)$$

réseau direct	réseau réciproque	
$(a , 0 , 0)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , 0 , 0 \right)$	
$(0 , a , 0)$	$\left(0 , \frac{2\pi}{a} , 0 \right)$	(P)
$(0 , 0 , a)$	$\left(0 , 0 , \frac{2\pi}{a} \right)$	
$\left(\frac{a}{2} , \frac{a}{2} , -\frac{a}{2} \right)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , \frac{2\pi}{a} , 0 \right)$	
$\left(-\frac{a}{2} , \frac{a}{2} , \frac{a}{2} \right)$	$\left(0 , \frac{2\pi}{a} , \frac{2\pi}{a} \right)$	(I)
$\left(\frac{a}{2} , -\frac{a}{2} , \frac{a}{2} \right)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , 0 , \frac{2\pi}{a} \right)$	
$\left(\frac{a}{2} , \frac{a}{2} , 0 \right)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , \frac{2\pi}{a} , -\frac{2\pi}{a} \right)$	
$\left(\frac{a}{2} , 0 , \frac{a}{2} \right)$	$\left(\frac{2\pi}{a} , -\frac{2\pi}{a} , \frac{2\pi}{a} \right)$	(F)
$\left(0 , \frac{a}{2} , \frac{a}{2} \right)$	$\left(-\frac{2\pi}{a} , \frac{2\pi}{a} , \frac{2\pi}{a} \right)$	

ANNEXE 2

COORDONEES DES POINTS D'ANCRAGE DANS LES ZONES DE BRILLOUIN

Triclinique

Quadratique

Rhombohèdrique

Hexagonal

Cubique

Points d'ancrage:

$$\left(0\ 0\ \tfrac{1}{3}\ .0\ \tfrac{1}{3}\ 0\ .0\ \tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{3}\ .\tfrac{1}{3}\ 0\ 0\ .\tfrac{1}{3}\ 0\ \tfrac{1}{3}\ .\tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{3}\ 0\ .\tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{3}\right)\ n_i^3 . n_i^6$$

$$\left.\begin{array}{l}\left(0\ 0\ \tfrac{1}{4}\ .0\ \tfrac{1}{4}\ 0\ .0\ \tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{4}\ .\tfrac{1}{4}\ 0\ 0\ .\tfrac{1}{4}\ 0\ \tfrac{1}{4}\ .\tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{4}\ 0\ .\tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{4}\ .\tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{2}\ 0\ .\tfrac{1}{4}\ 0\ \tfrac{1}{2}\right) \\ \left(\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{4}\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{4}\ .\tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{4}\ .\tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{2}\ 0\ \tfrac{1}{4}\ .0\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{4}\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{4}\ 0\ .0\ \tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{2}\right)\end{array}\right\} n_i^4$$

$$\left(0\ 0\ \tfrac{1}{2}\ .0\ \tfrac{1}{2}\ 0\ .0\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{2}\ 0\ 0\ .\tfrac{1}{2}\ 0\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ 0\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\right)\ n_i^4 . n_i^3 n_j . n_i^6$$

$$\left.\begin{array}{l}\left(0\ 0\ \tfrac{1}{6}\ .0\ \tfrac{1}{6}\ 0\ .0\ \tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{6}\ .0\ \tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{3}\ .0\ \tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{2}\ .0\ \tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{6}\ .0\ \tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{2}\ .0\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{6}\ .0\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{3}\ .\tfrac{1}{6}\ 0\ 0\right) \\ \left(\tfrac{1}{6}\ 0\ \tfrac{1}{6}\ .\tfrac{1}{6}\ 0\ \tfrac{1}{3}\ .\tfrac{1}{6}\ 0\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{6}\ 0\ .\tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{6}\ .\tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{3}\ .\tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{3}\ 0\ .\tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{6}\ .\tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{3}\right) \\ \left(\tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{2}\ 0\ \ \tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{6}\ .\tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{3}\ .\tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{3}\ 0\ \tfrac{1}{6}\ .\tfrac{1}{3}\ 0\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{6}\ 0\ .\tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{6}\ .\tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{3}\right) \\ \left(\tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{6}\ .\tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{2}\ 0\ .\tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{6}\ .\tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{3}\ .\tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{2}\ 0\ \tfrac{1}{6}\ .\tfrac{1}{2}\ 0\ \tfrac{1}{3}\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{6}\ 0\right) \\ \left(\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{6}\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{3}\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{3}\ 0\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{6}\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{3}\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{2}\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{6}\ .\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{3}\right)\end{array}\right\} n_i^6$$

• Points d'ancrage associés à des invariants de degré 4.

▪ Points d'ancrage associés à des invariants de degré 4 et 6.

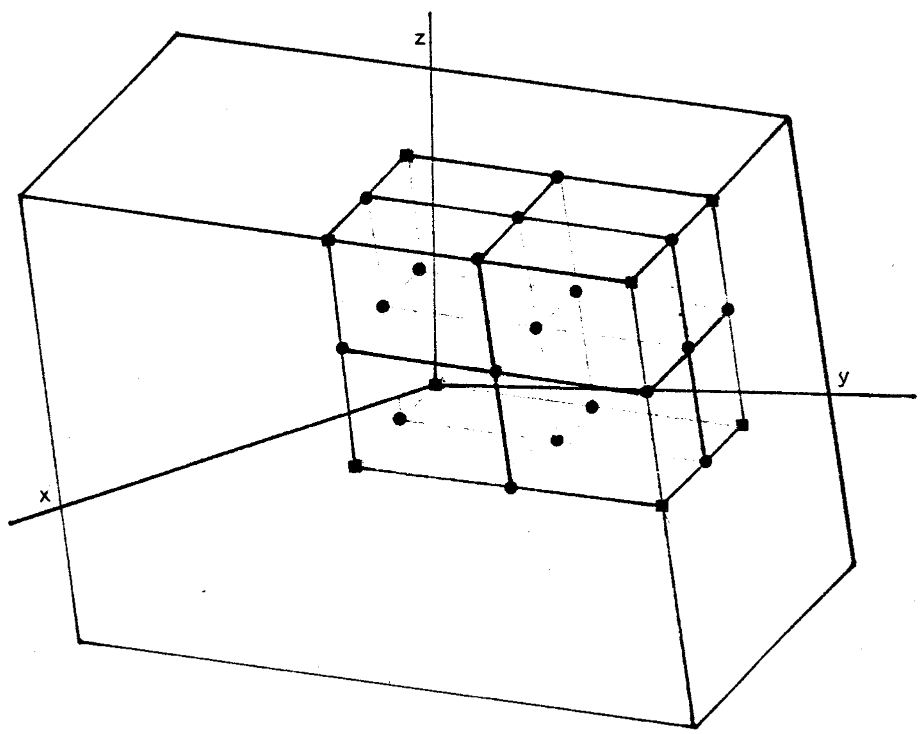


Figure 1 : Points d'ancrage dans le Systéme Triclinique.

Table 2.6 : Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le réseau Triclinique.

a) Points d'ancrage, réseau P

$\frac{2}{5}\ \frac{1}{3}\big)\ n_i^2 n_j \qquad \big(\frac{1}{5}\ \frac{2}{5}\ 0\big)\ (Cs)\ n_i^2 n_j . n_i n_j n_k . n_i^3 n_j . n_i^2 n_j n_k . n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ .0\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\big)\ (Cs)\ n_i^3 . n_i^2 n_j . n_i^6 . n_i^3 n_j^3 \qquad \big(\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ 0\big)\ (C_2v)\ n_i^3 . n_i^2 n_j . n_i n_j n_k$

$\frac{1}{3}\ 0\big)\ (C_2v)\big(0\ 0\ \frac{1}{3}\big)\ (C_4v)\ n_i^3 . n_i^2 n_j . n_i n_j n_k . n_i^6 . n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\frac{2}{5}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{8}\ \frac{3}{8}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{10}\frac{3}{10}\frac{1}{4}\big)\ n_i^3 n_j \qquad \big(0\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\big)\ (Cs)\ n_i^4 . n_i^3 n_j$

$\frac{3}{8}\ 0\ .\frac{1}{10}\frac{3}{10}0\ .\frac{1}{8}\ \frac{3}{8}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{10}\frac{3}{10}\frac{1}{2}\ .\frac{1}{5}\ \frac{2}{5}\ \frac{1}{2}\big)\ (Cs)\ n_i^3 n_j . n_i^2 n_j n_k$

$\frac{1}{4}\ 0\ .0\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ .0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ 0\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\big)\ (C_2v)\ n_i^4 . n_i^3 n_j . n_i^2 n_j n_k$

$\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\big)\ (Cs)\big(0\ 0\ \frac{1}{4}\big)\ (C_2v)\big(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\big)\ (C_4v)\ n_i^4 . n_i^3 n_j . n_i^2 n_j n_k . n_i^2 n_j^2$

$\frac{1}{4}\ 0\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\big)\ (C_2v)\ n_i^4 . n_i^3 n_j . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l\ \ n_i^2 n_j^2$

$\frac{1}{2}\ 0(X).0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}(R)\big)\ (D_2h)\ n_i^4 . n_i^3 n_j . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^2 n_j^2 . n_i^6 . n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$0\ \frac{1}{2}(Z).\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0(M).\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}(A)\big)\ (D_4h)\ n_i^4 . n_i^3 n_j . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^2 n_j^2\ \ n_i^6\ \ n_i^2 n_j^2 n_k^2\ \ n_i^3 n_j^3$

$\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\big)\ n_i^6 \qquad \big(\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\big)\ n_i^6 . n_i^3 n_j^3$

$\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ .0\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ 0\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\big)\ (Cs)\ n_i^6 \qquad \big(0\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\big)\ (Cs)\ n_i^6 . n_i^3 n_j^3$

$\frac{1}{5}\ 0\ .\frac{1}{10}\frac{1}{5}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{5}\ \frac{2}{5}\ \frac{1}{2}\big)\ (Cs)\ n_i^2 n_j^2 n_k^2 \qquad \big(\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ 0\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\big)\ (Cs)\ n_i^6 . n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ .0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ .0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\big)\ (C_2v)\ n_i^6 . n_i^2 n_j^2 n_k^2 \qquad \big(0\ 0\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\big)\ (C_4v)\ n_i^6 . n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3$

$\left.\begin{array}{l}\frac{1}{6}\ 0\ .0\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ 0\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\big)\ (C_2v)\\ \frac{1}{2}\ 0\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ 0\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\big)\ (C_2v)\end{array}\right\}\ n_i^6 . n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3$

b) Lignes et surfaces d'ancrage, réseau P

$\frac{1}{4}\ k\big)\ n_i n_j n_k n_l . n_i^2 n_j n_k \qquad \big(\frac{1}{10}\frac{3}{10}k\ .\frac{1}{5}\ \frac{2}{5}\ k\ .\frac{1}{8}\ \frac{3}{8}\ k\big)\ \ n_i^2 n_j n_k$

$\frac{1}{4}\ k)\big)\ (Cs)\ n_i^2 n_j^2 \qquad \big((\frac{1}{4}\ 0\ k).(0\ \frac{1}{4}\ k).(\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ k).(\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ k)\big)\ (Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k$

$0\ k).(0\ \frac{1}{2}\ k)\big)\ (C_2v,Cs)\big((\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ k).(0\ 0\ k)\big)\ (C_4v,C_2v)\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^3 n_j^3$

$\frac{1}{2}\text{-}k\ \frac{1}{4}\big)\big(k\ \frac{1}{2}\text{-}k\ 0\ .k\ \frac{1}{2}\text{-}k\ \frac{1}{2}\big)\ (Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i n_j n_k n_l$

$k\ \frac{1}{4}\big)\ (Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l \qquad \big(k\ k\ 0\ .k\ k\ \frac{1}{2}\big)\ (C_2v)\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^3 n_j^3$

$\left.\begin{array}{l}\frac{1}{3}\ k).(\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ k).(\frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ k)\big)\big((0\ \frac{1}{6}\ k).(0\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{1}{6}\ 0\ k)\big)\ (Cs)\\ \frac{1}{6}\ k).(\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ k).(\frac{1}{3}\ 0\ k).(\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ k).(\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ k).\big)\ (Cs)\\ \frac{1}{3}\text{-}k\ \frac{1}{6}\ .k\ \frac{1}{3}\text{-}k\ \frac{1}{3}\big)\big(k\ \frac{1}{3}\text{-}k\ 0\ .k\ \frac{1}{3}\text{-}k\ \frac{1}{2}\big)\ (Cs)\big(k\ k\ \frac{1}{6}\ .k\ k\ \frac{1}{3}\big)\end{array}\right\}\ n_i^3 n_j^3$

$'k\ \frac{1}{4})\big)\ n_i^2 n_j^2 . n_i n_j n_k n_l \qquad \big((k'k\ 0).(k'k\ \frac{1}{2})\big)\ (Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^3 n_j^3$

$'k\ \frac{1}{3}).(k'k\ \frac{1}{6})\big)\ n_i^3 n_j^3$

$\frac{1}{2}\text{-}k'k\big)\ n_i^2 n_j^2 . n_i n_j n_k n_l \qquad \big(k'\frac{1}{3}\text{-}k'k\big)\ n_i^3 n_j^3$

$k'k\big)\ (Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i n_j n_k n_l . n_i^3 n_j^3$

Table 2.7: Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le réseau quadratique P

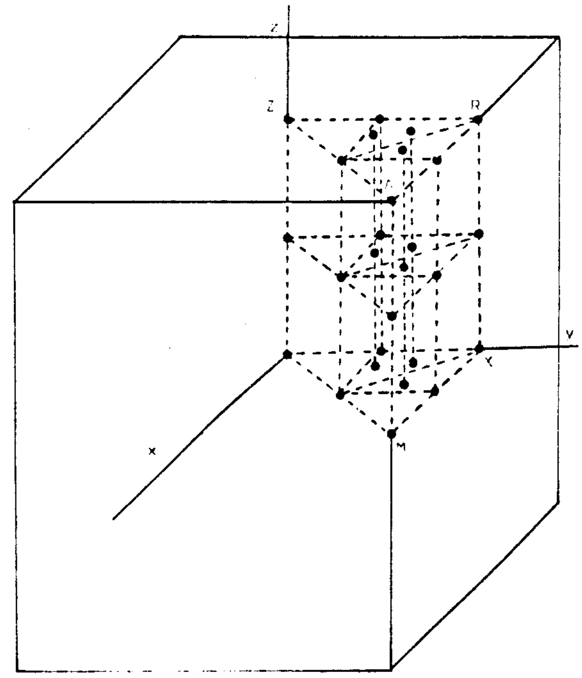


Figure 1 : Points et lignes d'ancrage dans le systéme quadratique associés aux invariants de degré 4

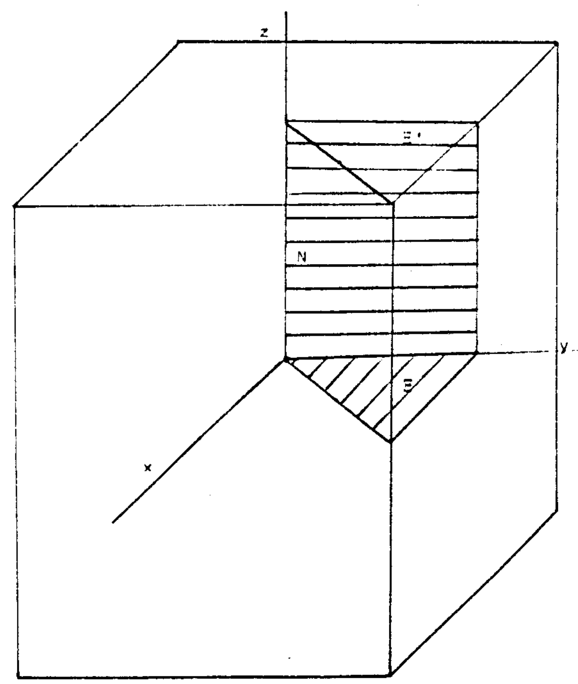


Figure 2: Surfaces d'ancrage dans le systéme quadratique associées aux invariants de degré 4 et 6

a) Points d'ancrage, réseau I

$\frac{1}{5}\ \frac{1}{3}\Big)\ \eta_i^2\eta_j \qquad \Big(\frac{3}{5}\ \frac{1}{5}\ 0\Big)(Cs)\ \eta_i^2\eta_j.\eta_i\eta_j\eta_k.\eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$

$0\ \frac{1}{3}\Big)(Cs)\ \eta_i^3.\eta_i^2\eta_j.\eta_i^6 \qquad \Big(\frac{7}{3}\ 0\ 0\ .\frac{1}{3}\ 0\ 1\Big)(C_2v)\ \eta_i^3.\eta_i^2\eta_j.\eta_i\eta_j\eta_k.\eta_i^6.\eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$

$\frac{1}{3}\ 0\Big)(C_2v)\ \eta_i^3.\eta_i^2\eta_j.\eta_i\eta_j\eta_k.\eta_i^6.\eta_i^3\eta_j^3$

$0\ \frac{2}{3}.1\ 0\ \frac{1}{3}\Big)(C_4v)\ \eta_i^3.\eta_i^2\eta_j.\eta_i\eta_j\eta_k.\eta_i^6.\eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2.\eta_i^3\eta_j^3$

$\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ .\frac{5}{8}\ \frac{1}{8}\ \frac{1}{4}\ .\frac{3}{10}\frac{1}{10}\frac{1}{4}\ .\frac{3}{10}\frac{1}{10}\frac{3}{4}\ .\frac{3}{5}\ \frac{1}{5}\ \frac{1}{2}\Big)\ \eta_i^3\eta_j$

$\frac{1}{5}\ 0\ .\frac{1}{4}\ 0\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ .\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{4}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ 0\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\Big)(Cs)\ \eta_i^3\eta_j.\eta_i^2\eta_j\eta_k$

$0\ \frac{1}{4}\Big)(Cs)\Big(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ 0\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ 1\ .\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ 0\Big)(C_2v)\ \eta_i^4.\eta_i^3\eta_j$

$\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\Big)(Cs)\ \eta_i^4.\eta_i^3\eta_j.\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l \qquad \Big(\frac{1}{2}\ 0\ 0\Big)(C_2v)\ \eta_i^4.\eta_i^3\eta_j.\eta_i^2\eta_j\eta_k$

$0\ \frac{1}{2}\Big)(C_4v)\ \eta_i^4.\eta_i^3\eta_j.\eta_i^2\eta_j\eta_k.\eta_i^2\eta_j^2 \qquad \Big(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\{A\}\Big)(D_2d)\ \eta_i^4.\eta_i^3\eta_j.\eta_i^2\eta_j\eta_k.\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l.\eta_i^2\eta_j^2$

$0\ \frac{1}{2}\{N\}\Big)(C_2h)\ \eta_i^4.\eta_i^3\eta_j.\eta_i^2\eta_j\eta_k.\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l.\eta_i^2\eta_j^2.\eta_i^6.\eta_i^3\eta_j^3$

$\frac{1}{2}\ 0\{X\}\Big)(D_2h)\Big(0\ 0\ 1\{Z\}.1\ 0\ 0\{M\}\Big)(D_4h)\eta_i^4.\eta_i^3\eta_j.\eta_i^2\eta_j\eta_k.\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l.\eta_i^2\eta_j^2.\eta_i^6.\eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2\eta_i^3\eta_j.$

$\left.\begin{array}{l}\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ \frac{5}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ \frac{5}{6}\ .\frac{2}{3}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\Big) \\ 0\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{6}\ 0\ \frac{5}{6}\ .\frac{1}{3}\ 0\ \frac{2}{3}\ .\frac{2}{3}\ 0\ \frac{1}{3}\ .\frac{5}{6}\ 0\ \frac{1}{6}\Big)(Cs)\Big(\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ 0\ .\frac{5}{6}\ \frac{1}{6}\ 0\Big)(C_2v)\end{array}\right\}\eta_i^6$

$0\frac{1}{10}0\Big)(Cs)\ \eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2 \qquad \Big(\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{2}{3}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\Big)\ \eta_i^6.\eta_i^3\eta_j^3$

$0\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{6}\Big)(Cs)\Big(\frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\Big)(C_2)\Big(\frac{1}{3}\ 0\ 0\Big)(C_2v)\ \eta_i^6.\eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2$

$\frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ 0\Big)(C_2v)\Big(0\ 0\ \frac{1}{3}\Big)(C_4v)\ \eta_i^6.\eta_i^2\eta_j^2\eta_k^2.\eta_i^3\eta_j^3$

b) Lignes et surfaces d'ancrage, réseau I

$\frac{1}{5}\ k\ .\frac{5}{8}\ \frac{1}{8}\ k\ .\frac{3}{10}\frac{1}{10}k\Big)\ \eta_i^2\eta_j\eta_k \qquad \Big((\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ k).(\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ k).(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ k)\Big)\ \eta_i^2\eta_j^2$

$k\ \frac{1}{4}\ .k\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\Big)\ \eta_i\eta_j\eta_k\eta_l$

$\frac{1}{2}\ k).(\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ k).(\frac{1}{2}\ 0\ k).(0\ \frac{1}{2}\ k)\Big)(Cs)\ \eta_i^2\eta_j^2.\eta_i^2\eta_j\eta_k \qquad \Big(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ k\Big)\ \eta_i^2\eta_j^2.\eta_i^2\eta_j\eta_k.\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l$

$0\ k).(1\ 0\ k).(0\ 1\ k)\Big)(C_4v,C_2v)\Big((\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ k)\Big)(C_2v,C_2)\ \eta_i^2\eta_j^2.\eta_i^2\eta_j\eta_k.\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l.\eta_i^3\eta_j^3$

$k\ \frac{1}{2}\Big)(Cs)\Big(k\ 1-k\ 0\Big)(C_2v)\ \eta_i^2\eta_j^2.\eta_i^2\eta_j\eta_k.\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l \qquad \Big(k\ k\ \frac{1}{4}\ .k\ k\ \frac{3}{4}\Big)(Cs)\ \eta_i^2\eta_j\eta_k.\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l$

$k\ 0\ .k\ k\ 1\Big)(C_2v)\ \eta_i^2\eta_j^2.\eta_i^2\eta_j\eta_k.\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l.\eta_i^3\eta_j^3$

$\frac{1}{2}-k\ \frac{1}{4}\ .k\ \frac{1}{2}-k\ \frac{3}{4}\Big)(Cs)\ \eta_i^2\eta_j^2.\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l \qquad \Big(k\ \frac{1}{2}-k\ \frac{1}{2}\Big)\ \eta_i\eta_j\eta_k\eta_l$

$\left.\begin{array}{l}\frac{1}{6}\ k).(\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ k).(\frac{1}{6}\ \frac{5}{6}\ k).(\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ k).(\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ k).(\frac{2}{3}\ 0\ k).(\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{5}{6}\ \frac{1}{6}\ k)\Big) \\ \frac{1}{3}\ k).(0\ \frac{2}{3}\ k).(\frac{1}{3}\ 0\ k).(\frac{2}{3}\ 0\ k)\Big)(Cs) \\ \frac{1}{3}-k\ \frac{1}{6}\ .k\ \frac{1}{3}-k\ \frac{1}{2}\ .k\ \frac{1}{3}-k\ \frac{5}{6}\ .k\ \frac{2}{3}-k\ \frac{1}{3}\ .k\ 1-k\ \frac{1}{6}\Big) \\ k\ \frac{1}{3}\ .k\ k\ \frac{2}{3}\Big)(Cs)\Big(k\ \frac{2}{3}-k\ 0\Big)(Cs)\end{array}\right\}\eta_i^3\eta_j^3$

$\frac{1}{2}-k'k\Big)\ \eta_i^2\eta_j^2.\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l \qquad \Big((k'k\ \frac{1}{2}).k'1-k'k\Big)(Cs)\ \eta_i^2\eta_j^2.\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l.\eta_i^3\eta_j^3$

$'k\ 0).(k'k\ 1).k'k'k\Big)(Cs)\ \eta_i^2\eta_j^2.\eta_i^2\eta_j\eta_k.\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l.\eta_i^3\eta_j^3$

$'k\ \frac{1}{6}).(k'k\ \frac{1}{3}).(k'k\ \frac{2}{3}).(k'k\ \frac{5}{6})\ \ k'\frac{1}{3}-k'k\ .k'\frac{2}{3}-k'k\Big)\ \eta_i^3\eta_j^3$

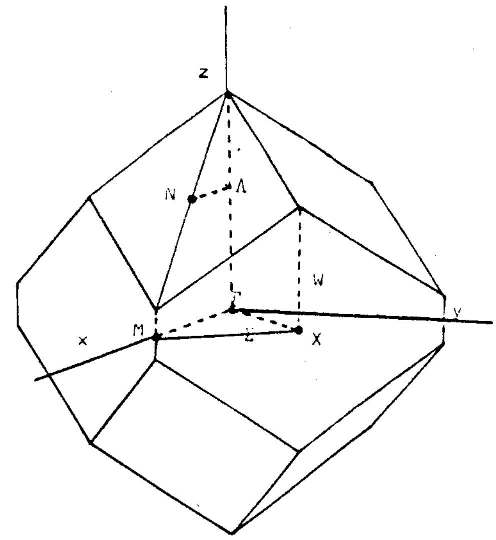


Figure 1: Points et lignes d'ancrage dans le systéme quadratique associés aux invariants de degré 4 et 6

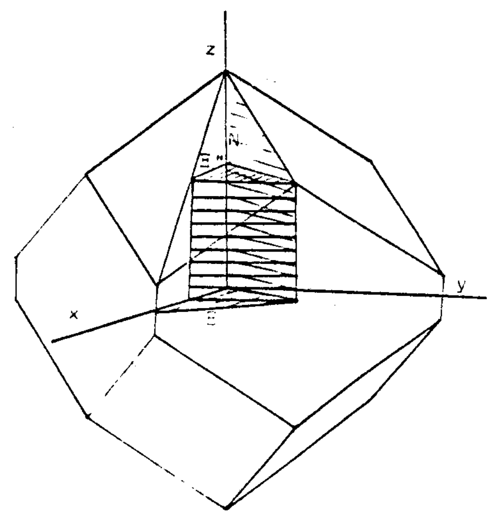


Figure 2: Surfaces d'ancrage dans le systéme quadratique associées aux invariants de degré 4 et 6

Table 2.8: Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le réseau quadratique I

a) <u>Points d'ancrage</u>

$\left(\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\right)\ n_i^3 \cdot n_i^2 n_j \cdot n_i^6 \qquad \left(1\ 0\ 0\right)(C_2)\ n_i^3 \cdot n_i^6 \cdot n_i^3 n_j^3$

$\left(\frac{3}{2}\ 0\ 0(X)\right)(C_2h)\ n_i n_j n_k \cdot n_i^4 \cdot n_i^3 n_j \cdot n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^6 \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left(1\ 1\ 0\right)\left(2\ 1\ 0\right)(C_3v)\ n_i^3 \cdot n_i^2 n_j \cdot n_i n_j n_k \cdot n_i^6 \cdot n_i^3 n_j^3 \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left(\frac{6}{7}\ \frac{3}{7}\ 0\ .\frac{2}{7}\ \frac{1}{7}\ \frac{1}{4}\ .\frac{8}{7}\ \frac{4}{7}\ \frac{1}{4}\ .\frac{4}{7}\ \frac{2}{7}\ \frac{1}{2}\ .\frac{4}{13}\frac{4}{13}\frac{1}{2}\ .\frac{12}{13}\ \frac{8}{13}0\right) n_i^3 n_j \qquad \left(1\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\right)\ n_i^4$

$\left(\frac{3}{2}\ \frac{3}{4}\ 0\right)\left(\frac{3}{4}\ 0\ 0\right)(C_2)\ n_i^4 \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2 \qquad \left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\right)\ n_i^2 n_j^2$

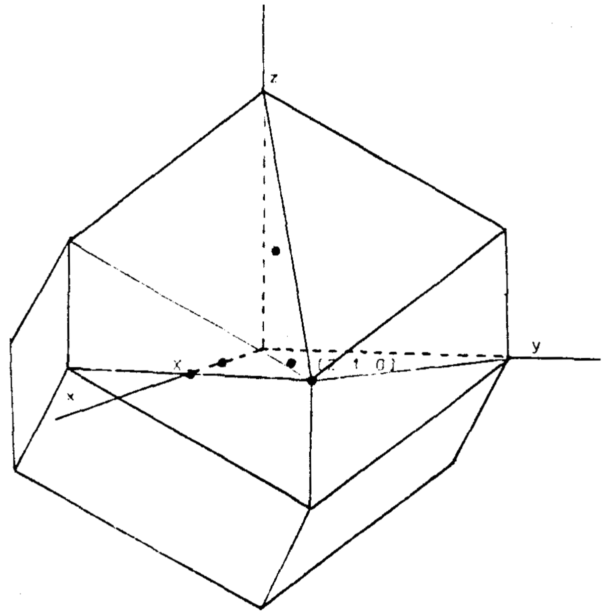
$\left(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ .1\ 1\ \frac{1}{4}\right)\ n_i^4 \cdot n_i^3 n_j \qquad \left(\frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\ 0\ .\frac{3}{2}\ \frac{3}{2}\ 0\right)\ n_i^4 \cdot n_i^3 n_j \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right)\ n_i^4 \cdot n_i^3 n_j \cdot n_i^6 \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2 \qquad \left(1\ 1\ \frac{1}{2}\right)\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^6 \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$$\left.\begin{array}{l} \left(0\ 1\ 0\ .\frac{1}{2}\ 1\ 0\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ .\frac{2}{3}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ .\frac{2}{3}\ \frac{2}{3}\ \frac{1}{6}\ .0\ 1\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}\right) \\ \left(\frac{1}{2}\ 1\ \frac{1}{2}\ .1\ 0\ \frac{1}{2}\ .1\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ .2\ 1\ \frac{1}{2}\right)\left(\frac{1}{2}\ 0\ 0\right)(C_2)\left(0\ 0\ \frac{1}{2}\right)(C_3v) \end{array}\right\} n_i^6$$

$\left(\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ .\frac{2}{3}\ \frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\right)\ n_i^3 n_j^3 \qquad \left(\frac{1}{4}\ 0\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ .1\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ .\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\right)\ n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0\ .1\ \frac{1}{2}\ 0\right) n_i^6 \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2$



<u>Figure 1:</u> Points d'ancrage dans le systéme rhomboédrique associés aux <u>invariants 3 et 6</u>

b) <u>Lignes et surfaces d'ancrage</u>

$\left((k\ 1)\frac{1}{3}\ .(k\ 1+k)\frac{1}{3}\right)\ n_i n_j n_k \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2 \qquad \left((k\ 0)0\right)(C_2)\ n_i n_j n_k \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left(k\ k\ 0\right)\ n_i n_j n_k \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left((k\ \frac{k}{2})0\ .(k\ \frac{3}{2}+\frac{k}{2})0\ .(k\ \frac{1}{2}+\frac{k}{2})\frac{1}{4}\ .(k\ 1+\frac{k}{2})\frac{1}{2}\ .(1\ \frac{1}{2})k\ .(\frac{3}{2}\ 0)k\ .(k\ \frac{1}{2}-k)\frac{1}{4}\ .(k\ \frac{3}{2}-k)0\right)\ n_i^2 n_j^2$

$\left(2\ 1\ k\right)(C_3v)\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^2 n_j n_k \cdot n_i n_j n_k n_l$

$\left(0\ 0\ k(\Lambda)\right)(C_3v)\left((k\ -k)0\ .(k\ -k)\frac{1}{2}\right)\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^2 n_j n_k \cdot n_i n_j n_k n_l \cdot n_i^3 n_j^3$

$$\left.\begin{array}{l} \left((k\ 1-k)0\ .(k\ \frac{1}{3}-k)\frac{1}{6}\ .(k\ \frac{2}{3}-k)\frac{1}{3}\ .(k\ 1-k)\frac{1}{2}\right) \\ \left((k\ \frac{k}{2})0\ .(k\ \frac{1}{3}+\frac{k}{2})\frac{1}{6}\ .(k\ \frac{2}{3}+k)\frac{1}{3}\ .(k\ \frac{k}{2})\frac{1}{2}\right) \\ \left((\frac{2}{3}\ \frac{1}{3})k\ .(1\ 0)k\right) \end{array}\right\} n_i^3 n_j^3$$

$\left((k\ \frac{3}{2})0\ .(k\ \frac{1}{2})\frac{1}{6}\ .(k\ \frac{1}{2}+k)\frac{1}{6}\right)\ n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left(k'k\ \frac{1}{3}\ .k'k\ 0\right)\ n_i n_j n_k \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left((k\ \frac{3}{2})k'\right)\ n_i^2 n_j^2 \qquad \left((k\ 0)k'.k'k'k\right)\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^2 n_j n_k \cdot n_i n_j n_k n_l \cdot n_i^3 n_j^3$

$\left((k\ 1)k'.k'k\ \frac{1}{6}\ .k'k\ \frac{1}{2}\right)\ n_i^2 n_j^2 n_k^2$

<u>Table 2.9</u> Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le systéme rhomboédrique

a) Points d'ancrage

$\left(\frac{5}{14}\frac{1}{14}\frac{1}{3}\right)$ $n_i^2 n_j$ $\qquad$ $\left(\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\right)$ $n_i^3, n_i^6, n_i^3 n_j^3$

$\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{3}\right)(C_{2v})$ $n_i n_j n_k, n_i^6, n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ 0(M)\right)(D_{2h})$ $n_i n_j n_k, n_i^4, n_i^2 n_j^2, n_i^3 n_j, n_i^2 n_j n_k, n_i^6, n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left(\frac{5}{14}\frac{1}{14}0\right)(C_s)$ $n_i^2 n_j; n_i n_j n_k, n_i^2 n_j^2 n_k^2$ $\qquad$ $\left(\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ 0\right)(C_{2v})$ $n_i^3, n_i^2 n_j, n_i^6, n_i^3 n_j^3$

$\left(\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{3}\right)(C_{3v})$ $n_i^3, n_i^2 n_j, n_i^6, n_i^3 n_j^3$ $\qquad$ $\left(0\ 0\ \frac{1}{3}\right)(C_{6v})$ $n_i^3, n_i^2 n_j, n_i n_j n_k, n_i^6, n_i^2 n_j^2 n_k^2, n_i^3 n_j^3$

$\left(\frac{1}{2}\ 0\ 0(K)\right)(D_{3h})$ $n_i^3, n_i^2 n_j, n_i n_j n_k, n_i^2 n_j^2, n_i^2 n_j n_k, n_i n_j n_k n_l, n_i^6, n_i^2 n_j^2 n_k^2, n_i^3 n_j^3$

$\left(\frac{5}{16}\frac{1}{16}\frac{1}{4} \cdot \frac{3}{14}\frac{1}{14}\frac{1}{4} \cdot \frac{5}{14}\frac{2}{14}\frac{1}{4} \cdot \frac{3}{7}\ \frac{1}{7}\ \frac{1}{4} \cdot \frac{7}{16}\frac{2}{16}\frac{1}{4} \cdot \frac{7}{26}\frac{2}{26}\frac{1}{4} \cdot \frac{12}{26}\ \frac{3}{26}\frac{1}{4}\right)$ $n_i^3 n_j$

$\left.\begin{array}{l} \left(\frac{5}{16}\frac{1}{16}0 \cdot \frac{3}{14}\frac{1}{14}0 \cdot \frac{5}{14}\frac{2}{14}0 \cdot \frac{3}{7}\ \frac{1}{7}\ 0 \cdot \frac{7}{16}\frac{2}{16}0 \cdot \frac{7}{26}\frac{2}{26}0 \cdot \frac{12}{26}\ \frac{3}{26}0\right)(C_s) \\ \left(\frac{5}{16}\frac{1}{16}\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{14}\frac{1}{14}\frac{1}{2} \cdot \frac{5}{14}\frac{2}{14}\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{7}\ \frac{1}{7}\ \frac{1}{2} \cdot \frac{7}{16}\frac{2}{16}\frac{1}{2} \cdot \frac{7}{26}\frac{2}{26}\frac{1}{2} \cdot \frac{12}{26}\ \frac{3}{26}\frac{1}{2}\right)(C_s) \end{array}\right\} n_i^3 n_j, n_i^2 n_j n_k$

$\left(\frac{1}{4}\ \frac{1}{8}\ \frac{1}{4}\right)$ n_i^4 $\qquad$ $\left(\frac{1}{4}\ 0\ \frac{1}{4}\right)(C_s)$ $n_i^2 n_j^2$ $\qquad$ $\left(0\ 0\ \frac{1}{4}\right)(C_{6v})$ $n_i^4, n_i^3 n_j$

$\left(\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{4}\right)(C_{3v})$ $n_i^2 n_j^2, n_i^2 n_j n_k$ $\qquad$ $\left(\frac{3}{8}\ 0\ \frac{1}{4}\right)(C_s)$ $n_i^4, n_i^3 n_j$

$\left(\frac{1}{4}\ \frac{1}{8}\ 0 \cdot \frac{1}{4}\ \frac{1}{8}\ \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{8}\ 0\ 0 \cdot \frac{3}{8}\ 0\ \frac{1}{2}\right)(C_{2v})$ $n_i^4, n_i^3 n_j, n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\right)(C_s)$ $n_i^4\ n_i^2 n_j^2\ n_i^3 n_j$ $\qquad$ $\left(\frac{1}{4}\ 0\ 0 \cdot \frac{1}{4}\ 0\ \frac{1}{2}\right)(C_{2v})$ $n_i^2 n_j^2, n_i^2 n_j n_k, n_i^3 n_j, n_i^6, n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left(\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}(H)\right)(D_{3h})$ $n_i^2 n_j^2, n_i^2 n_j n_k, n_i n_j n_k n_l, n_i^6, n_i^2 n_j^2 n_k^2, n_i^3 n_j^3$

$\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{2}(L)\right)(D_{2h})$ $n_i^4, n_i^2 n_j^2, n_i^3 n_j, n_i^2 n_j n_k, n_i^6, n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left(0\ 0\ \frac{1}{2}(A)\right)(D_{6h})$ $n_i^4, n_i^2 n_j^2, n_i^3 n_j, n_i^2 n_j n_k, n_i n_j n_k n_l, n_i^6, n_i^2 n_j^2 n_k^2, n_i^3 n_j^3$

$\left.\begin{array}{l} \left(\frac{1}{6}\ \frac{1}{12}\frac{1}{6} \cdot \frac{1}{6}\ \frac{1}{12}\frac{1}{3} \cdot \frac{5}{12}\frac{1}{12}\frac{1}{6} \cdot \frac{5}{12}\frac{1}{12}\frac{1}{3} \cdot \frac{5}{12}\frac{1}{6}\ \frac{1}{6} \cdot \frac{5}{12}\frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\right) \\ \left(\frac{1}{4}\ 0\ \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{4}\ 0\ \frac{1}{3} \cdot \frac{5}{12}\frac{1}{12}0 \cdot \frac{5}{12}\frac{1}{12}\frac{1}{2} \cdot \frac{5}{12}\frac{1}{6}\ 0 \cdot \frac{5}{12}\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\right)(C_s)\left(\frac{1}{6}\ \frac{1}{12}\frac{1}{2}\right)(C_{2v}) \end{array}\right\} n_i^6$

$\left(\frac{1}{4}\ \frac{1}{8}\ \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{4}\ \frac{1}{8}\ \frac{1}{3} \cdot \frac{5}{14}\frac{1}{14}\frac{1}{2} \cdot \frac{5}{28}\frac{1}{28}0 \cdot \frac{5}{28}\frac{1}{28}\frac{1}{2} \cdot \frac{3}{8}\ 0\ \frac{1}{6} \cdot \frac{3}{8}\ 0\ \frac{1}{3}\right)(C_s)$ $n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left(\frac{1}{6}\ 0\ \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{6}\ 0\ \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{3}\ 0\ \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{3}\ 0\ \frac{1}{3}\right)(C_s)\left(\frac{1}{6}\ 0\ 0 \cdot \frac{1}{6}\ 0\ \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3}\ 0\ 0 \cdot \frac{1}{3}\ 0\ \frac{1}{2}\right)(C_{2v})$ $n_i^3 n_j^3$

$\left(\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\right)\left(\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\right)(C_{2v})\left(\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{6}\right)(C_{3v})$ $n_i^6, n_i^3 n_j^3$

$\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{6}\right)(C_{2v})$ $n_i^6, n_i^2 n_j^2 n_k^2$ $\qquad$ $\left(0\ 0\ \frac{1}{6}\right)(C_{6v})$ $n_i^6, n_i^2 n_j^2 n_k^2, n_i^3 n_j^3$

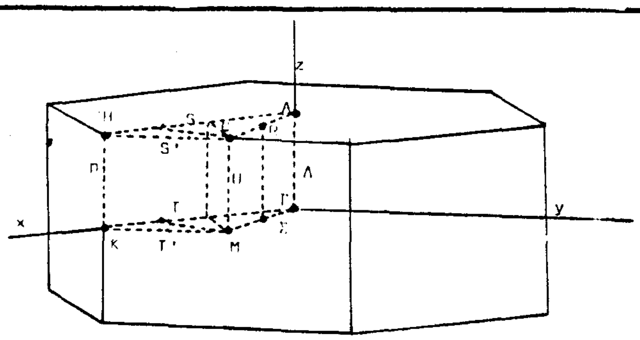


Figure 1: Points et lignes d'ancrage associés aux invariants de degré 4 et 6

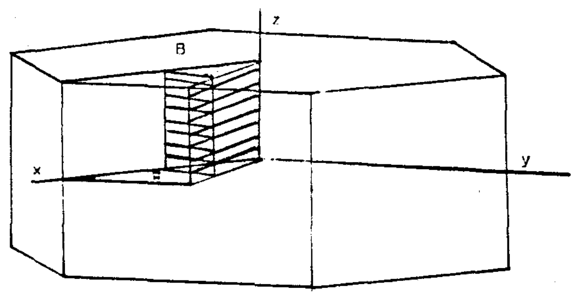


Figure 2: Surfaces d'ancrage associées aux invariants de degré 4 et 6

Table 2.10[a]: Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le systéme hexagonal

a) Lignes d'ancrage

$$\left(k\ k\ \tfrac{1}{3}\ .(k\ \tfrac{k}{2})\tfrac{1}{3}\right)\ n_i n_j n_k . n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3 \qquad \left((k\ 0)\tfrac{1}{3}\ .(k\ \tfrac{1}{2})\tfrac{1}{3}\right)(Cs)\ n_i n_j n_k . n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3$$

$$\left(k\ k\ 0\ .(k\ 0)0\ .(k\ \tfrac{1}{2})0\ .(k\ \tfrac{k}{2})0(\Sigma)\right)(C_2v)\ n_i n_j n_k . n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3$$

$$\left.\begin{array}{l}\left((k\ \pm k)\tfrac{1}{4}\ .(k\ \tfrac{1}{4}\pm k)\tfrac{1}{4}\ .(k\ \tfrac{1}{2}\pm k)\tfrac{1}{4}\ .(k\ \tfrac{1}{4})\tfrac{1}{4}\ .(k\ \tfrac{1}{2})\tfrac{1}{4}\right)\left((k\ 0)\tfrac{1}{4}\right)(Cs) \\ \left((k\ \tfrac{k}{2})\tfrac{1}{4}\ .(k\ \tfrac{1}{8}+\tfrac{k}{2})\tfrac{1}{4}\ .(k\ \tfrac{1}{4}+\tfrac{k}{2})\tfrac{1}{4}\ .(k\ \tfrac{3}{8}+\tfrac{k}{2})\tfrac{1}{4}\ .(k\ \tfrac{1}{2}+\tfrac{k}{2})\tfrac{1}{4}\right)\end{array}\right.\ n_i^2 n_j^2$$

$$\left(\tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{8}\ k\ .\tfrac{1}{4}\ \tfrac{1}{4}\ k\right)\left(\tfrac{3}{8}\ 0\ k\right)(Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i n_j n_k n_l$$

$$\left(\tfrac{1}{4}\ 0\ k\right)(Cs)\left(\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{4}\ k(U)\right)(C_2v)\left(\tfrac{1}{2}\ 0\ k(P)\right)(C_3v)\left(0\ 0\ k(\Delta)\right)(C_6v)\ n_i^2 n_j^2 . n_i n_j n_k n_l . n_i^3 n_j^3$$

$$\left((k\ \tfrac{1}{8}+\tfrac{k}{2})0\ .(k\ \tfrac{1}{8}+\tfrac{k}{2})\tfrac{1}{2}\ .(k\ \tfrac{1}{4})0\ .(k\ \tfrac{1}{4})\tfrac{1}{2}\right)(Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k$$

$$\left((k\ \tfrac{3}{8}+\tfrac{k}{2})0\ .(k\ \tfrac{3}{8}+\tfrac{k}{2})\tfrac{1}{2}\ .(k\ \tfrac{1}{4}\pm k)0\ .(k\ \tfrac{1}{4}\pm k)\tfrac{1}{2}\right)(Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i^2 n_j^2 n_k^2$$

$$\left.\begin{array}{l}\left((k\ \pm k)0\ .(k\ \pm k)\tfrac{1}{2}\ .(k\ \tfrac{1}{2}\pm k)0\ .(k\ \tfrac{1}{2}\pm k)\tfrac{1}{2}\right)(Cs) \\ \left((k\ 0)\tfrac{1}{2}\ .(k\ \tfrac{1}{2})\tfrac{1}{2}\ .(k\ \tfrac{k}{2})\tfrac{1}{2}\right)(C_2v)\end{array}\right\}\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^3 n_j^3 . n_i^2 n_j^2 n_k^2$$

$$\left((k\ \tfrac{1}{2}+\tfrac{k}{2})0\ .(k\ \tfrac{1}{2}+\tfrac{k}{2})\tfrac{1}{2}\right)(Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^3 n_j^3$$

$$\left((k\ 0)\tfrac{1}{6}\ .(k\ \tfrac{1}{2})\tfrac{1}{6}\right)(Cs)\left(k\ k\ \tfrac{1}{6}.(k\ \tfrac{1}{2}\pm k)\tfrac{1}{6}\ .(k\ \tfrac{1}{2}\pm k)\tfrac{1}{3}\ .(k\ \tfrac{k}{2})\tfrac{1}{6}\right)\ n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3$$

$$\left.\begin{array}{l}\left(\tfrac{1}{6}\ 0\ k\ .\tfrac{1}{3}\ 0\ k\right)(Cs)\left(\tfrac{1}{6}\ \tfrac{1}{12}k\ .\tfrac{1}{3}\ \tfrac{1}{6}\ k\ .\tfrac{5}{12}\tfrac{1}{12}k\ .\tfrac{1}{12}\tfrac{2}{12}k\right) \\ \left((k\ \tfrac{1}{6})\tfrac{1}{6}\ .(k\ \tfrac{1}{6})\tfrac{1}{3}\ .(k\ \tfrac{1}{3})\tfrac{1}{6}\ .(k\ \tfrac{1}{3})\tfrac{1}{3}\ .(k\ \tfrac{1}{2})\tfrac{1}{6}\ .(k\ \tfrac{1}{2})\tfrac{1}{3}\right) \\ \left((k\ \tfrac{1}{6})0\ .(k\ \tfrac{1}{6})\tfrac{1}{2}\ .(k\ \tfrac{1}{3})0\ .(k\ \tfrac{1}{3})\tfrac{1}{2}\ .(k\ \tfrac{1}{2})0\right)(Cs)\end{array}\right\}\ n_i^3 n_j^3$$

$$\left.\begin{array}{l}\left((k\ \tfrac{1}{4})\tfrac{1}{6}\ .(k\ \tfrac{1}{4})\tfrac{1}{3}\ .(k\ \tfrac{3}{8})\tfrac{1}{6}\ .(k\ \tfrac{3}{8})\tfrac{1}{3}\right) \\ \left((k\ \tfrac{1}{4})0\ .(k\ \tfrac{1}{4})\tfrac{1}{2}\ .(k\ \tfrac{3}{8})0\ .(k\ \tfrac{3}{8})\tfrac{1}{2}\right)\end{array}\right\}\ n_i^2 n_j^2 n_k^2$$

b) Surfaces d'ancrage

$$\left(k'k\ \tfrac{1}{3}\right)\ n_i n_j n_k . n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3 \qquad \left(k'k\ \tfrac{1}{4}\right)\ n_i^2 n_j^2$$

$$\left(k'k\ 0(\Xi)\right)(Cs)\ n_i n_j n_k . n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3$$

$$\left(k'k\ \tfrac{1}{2}(B)\right)(Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3$$

$$\left((k\ \tfrac{1}{4}\pm k)k'.(k\ \tfrac{1}{2}\pm k)k'.(k\ \tfrac{1}{4})k'.(k\ 0)k'.(k\ \tfrac{1}{2})k'.(k\ \tfrac{3}{8}+\tfrac{k}{2})k'\right)\ n_i^2 n_j^2 . n_i n_j n_k n_l$$

$$\left(k\ k\ k'.(k\ \tfrac{k}{2})k'.(k\ \tfrac{1}{4}+\tfrac{k}{2})k'.(k\ \tfrac{1}{2}+\tfrac{k}{2})k'\right)\ n_i^2 n_j^2 . n_i n_j n_k n_l . n_i^3 n_j^3$$

$$\left(k'k\ \tfrac{1}{6}\right) n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3$$

$$\left.\begin{array}{l}\left((k\ \tfrac{1}{6}\pm k)k'.(k\ \tfrac{1}{3}\pm k)k'.(k\ \tfrac{1}{6}+\tfrac{k}{2})k'.(k\ \tfrac{1}{3}+\tfrac{k}{2})k'\right) \\ \left((k\ \tfrac{1}{12}+\tfrac{k}{2})k'.(k\ \tfrac{5}{12}+\tfrac{k}{2})k'\right)\end{array}\right\} n_i^3 n_j^3$$

Table 2.10[b]: Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le systéme hexagonal

a) Points d'ancrage, réseau P

$\frac{2}{5}\ \frac{1}{5}\ \cdot\frac{2}{9}\ \frac{4}{9}\ \frac{1}{9}\ \cdot\frac{2}{7}\ \frac{3}{7}\ \frac{1}{7}\Big)\ n_i^2n_j \qquad \Big(\frac{1}{4}\ \frac{3}{8}\ \frac{1}{8}\Big)\ n_in_jn_k\cdot n_i^2n_j^2n_k^2$

$\frac{2}{5}\ 0\Big)(Cs)\ n_i^2n_j\cdot n_in_jn_k\cdot n_i^2n_j^2n_k^2 \qquad \Big(\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\Big)(C_3v)\ n_i^3\cdot n_i^2n_j\cdot n_i^6\cdot n_i^3n_j^3$

$\frac{1}{3}\ 0\Big)(C_2v)\ n_i^3\cdot n_i^2n_j\cdot n_in_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l\cdot n_i^6\cdot n_i^3n_j^3$

$\frac{1}{3}\ 0\Big)(C_4v)\ n_i^3\cdot n_i^2n_j\cdot n_in_jn_k\cdot n_i^6\cdot n_i^3n_j^3\cdot n_i^2n_j^2n_k^2$

$\frac{1}{4}\ 0\ \cdot\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\Big)(C_2v)\ n_in_jn_k\cdot n_i^4\cdot n_i^3n_j\cdot n_i^2n_j^2\cdot n_i^2n_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l\cdot n_i^2n_j^2n_k^2$

$\frac{1}{2}\ 0(M)\Big)(D_4h)\ n_in_jn_k\cdot n_i^4\cdot n_i^3n_j\cdot n_i^2n_j^2\cdot n_i^2n_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l\cdot n_i^6\cdot n_i^2n_j^2n_k^2\cdot n_i^3n_j^3$

$\left.\begin{array}{l}\frac{1}{2}\ \frac{1}{8}\ \cdot\frac{1}{4}\ \frac{2}{5}\ \frac{1}{5}\ \cdot\frac{2}{5}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{5}\ \cdot\frac{1}{4}\ \frac{3}{10}\frac{1}{10}\cdot\frac{3}{10}\frac{1}{2}\ \frac{1}{10}\cdot\frac{3}{28}\frac{9}{28}\frac{1}{28}\cdot\frac{3}{14}\frac{5}{14}\frac{1}{14}\Big) \\ \frac{3}{7}\ \frac{1}{7}\ \cdot\frac{11}{28}\ \frac{13}{28}\ \frac{5}{28}\cdot\frac{3}{13}\frac{4}{13}\frac{1}{13}\cdot\frac{3}{26}\frac{9}{26}\frac{1}{26}\cdot\frac{7}{26}\frac{11}{26}\ \frac{5}{26}\cdot\frac{5}{13}\frac{6}{13}\frac{2}{13}\Big)\end{array}\right\}n_i^3n_j$

$\frac{3}{10}\frac{1}{10}\cdot\frac{2}{5}\ \frac{2}{5}\ \frac{1}{5}\ \cdot\frac{3}{8}\ \frac{3}{8}\ \frac{1}{8}\Big)(Cs)\ n_i^2n_jn_k \qquad \Big(\frac{1}{5}\ \frac{2}{5}\ 0\ \cdot\frac{1}{10}\frac{3}{10}0\ \cdot\frac{1}{8}\ \frac{3}{8}\ 0\Big)\ n_i^3n_j\cdot n_i^2n_jn_k$

$\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\Big)(C_2v)\ n_in_jn_kn_l\cdot n_i^6\cdot n_i^3n_j^3\ \ \Big(\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ 0\Big)(C_2v)\Big(0\ \frac{1}{4}\ 0\ \cdot\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\Big)(C_4v)n_i^4\cdot n_i^3n_j\cdot n_i^2n_j^2\cdot n_i^2n_jn_k$

$\frac{1}{2}\ 0(X)\Big)(D_4h)\Big(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}(R)\Big)(Oh)\ n_i^4\cdot n_i^3n_j\cdot n_i^2n_j^2\cdot n_i^2n_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l\cdot n_i^6\cdot n_i^2n_j^2n_k^2\cdot n_i^3n_j^3$

$\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\Big)\Big(\frac{1}{6}\ \frac{1}{3}\ 0\Big)(Cs)\Big(\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ 0\Big)(C_2v)\ n_i^6 \qquad \Big(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\Big)(C_3v)\ n_i^4\cdot n_i^3n_j\cdot n_i^2n_j^2\cdot n_i^2n_jn_k$

$\frac{2}{5}\ \frac{1}{2}\ \cdot\frac{1}{10}\frac{2}{10}\frac{1}{2}\ \cdot\frac{1}{8}\ \frac{3}{16}\frac{1}{16}\cdot\frac{1}{8}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{8}\Big)\Big(\frac{1}{10}\frac{2}{10}0\Big)(Cs)\Big(\frac{1}{8}\ \frac{1}{8}\ 0\Big)(C_2v)\ n_i^2n_j^2n_k^2$

$\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ \cdot\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\Big)\Big(\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\Big)(C_2v)\Big(\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\Big)(C_3v)\ n_i^6\cdot n_i^3n_j^3$

$\frac{1}{6}\ 0\ \cdot\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ 0\Big)(C_2v)\Big(0\ \frac{1}{6}\ 0\ \cdot\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ \cdot\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\Big)(C_4v)\ n_i^6\cdot n_i^2n_j^2n_k^2\cdot n_i^3n_j^3$

b) Lignes et surfaces d'ancrage, réseau P

$\frac{k}{2}\ k)\cdot(\frac{k}{2}\ \frac{k}{2}\ 1-k)\Big)(Cs)\ n_in_jn_k\cdot n_i^2n_j^2n_k^2$

$k\ 0)\Big)(C_2v)\ n_in_jn_k\cdot n_i^2n_j^2\cdot n_i^2n_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l\cdot n_i^3n_j^3\cdot n_i^2n_j^2n_k^2$

$\frac{1}{8}\ k)\cdot(\frac{1}{8}\ \frac{3}{8}\ k)\cdot(\frac{3}{10}\frac{1}{10}k)\cdot(\frac{1}{10}\frac{3}{10}k)\cdot(\frac{2}{5}\ \frac{1}{5}\ k)\cdot(\frac{1}{5}\ \frac{2}{5}\ k)\Big)\ n_i^2n_jn_k$

$\frac{1}{4}\ k)\cdot(\frac{1}{4}\ 0\ k)\cdot(0\ \frac{1}{4}\ k)\cdot(\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ k)\cdot(\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ k)\Big)(Cs)\ n_i^2n_j^2\cdot n_i^2n_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l$

$0\ k)\cdot(0\ \frac{1}{2}\ k)\Big)(C_2v)\Big((0\ 0\ k)\cdot(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ k)\Big)(C_4v)\ n_i^2n_j^2\cdot n_i^2n_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l\cdot n_i^3n_j^3$

$\frac{1}{2}-k\ \frac{1}{4})\cdot(k\ \frac{1}{2}-k\ k)\Big)\Big((k\ \frac{1}{2}-k\ \frac{1}{2})\Big)(Cs)\ n_i^2n_j^2\cdot n_in_jn_kn_l$

$k\ \frac{1}{4})\Big)(Cs)\ n_i^2n_j^2\cdot n_i^2n_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l \qquad \Big((k\ \frac{1}{2}-k\ 0)\Big)(Cs)\ n_i^2n_j^2\cdot n_in_jn_kn_l\cdot n_i^2n_j^2n_k^2$

$k\ k(\Lambda)\Big)(C_3v)\Big((k\ k\ \frac{1}{2})\Big)(C_2v)\ n_i^2n_j^2\cdot n_i^2n_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l\cdot n_i^3n_j^3$

$\left.\begin{array}{l}\frac{1}{3}\ k)\cdot(\frac{1}{3}\ \frac{1}{6}\ k)\Big)\Big((0\ \frac{1}{6}\ k)\cdot(\frac{1}{6}\ 0\ k)\cdot(\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ k)\cdot(0\ \frac{1}{3}\ k)\cdot(\frac{1}{3}\ 0\ k)\Big)(Cs) \\ \frac{1}{3}\ k)\cdot(\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ k)\cdot(\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ k)\cdot(\frac{1}{3}\ \frac{1}{2}\ k)\cdot(\frac{1}{2}\ \frac{1}{3}\ k)\Big)(Cs)\Big((k\ k\ \frac{1}{6})\cdot(k\ k\ \frac{1}{3})\Big) \\ \frac{1}{3}-k\ \frac{1}{6})\cdot(k\ \frac{1}{3}-k\ \frac{1}{3})\cdot(k\ \frac{1}{3}-k\ \frac{1}{2})\cdot(k\ \frac{1}{3}-k\ k)\Big)\Big((k\ \frac{1}{3}-k\ 0)\Big)(Cs)\end{array}\right\}n_i^3n_j^3$

$\frac{1}{2}-\frac{k}{2}\ k)\cdot(\frac{1}{2}-\frac{k}{2}\ \frac{k}{2}\ k)\Big)\ n_i^2n_j^2n_k^2$

$'k\ \frac{1}{4})\Big)\ \ n_i^2n_j^2,\ n_in_jn_kn_l \qquad \Big((k'\frac{1}{2}-k'k)\Big)\ n_i^2n_j^2$

$'k\ 0)\cdot(k'k\ \frac{1}{2})\Big)(Cs)\ n_i^2n_j^2\cdot n_i^2n_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l\cdot n_i^3n_j^3$

$'k'k)\Big)(Cs)\ n_i^2n_j^2\cdot n_i^2n_jn_k\cdot n_i^3n_j^3 \qquad \Big((k'k\ \frac{1}{6})\cdot(k'k\ \frac{1}{3})\cdot(k'\frac{1}{3}-k'k)\Big)\ n_i^3n_j^3$

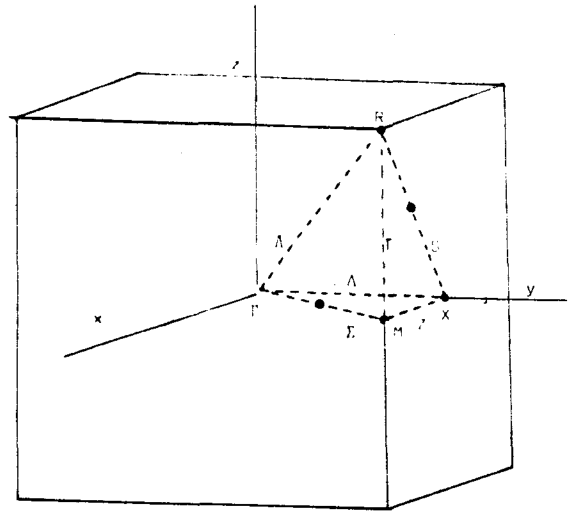


Figure 1: Points et lignes d'ancrage dans le systéme cubique associés aux invariants de degré 4 et 6

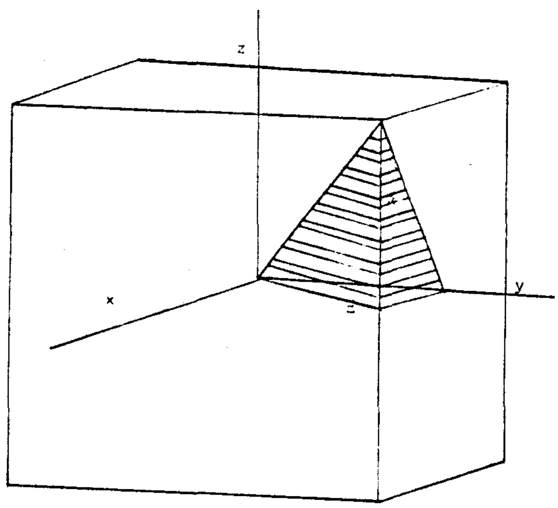


Figure 2: Surfaces d'ancrage dans le systéme cubique associées aux invariants de degré 4 et 6

Table 2.11 Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le réseau cubique P

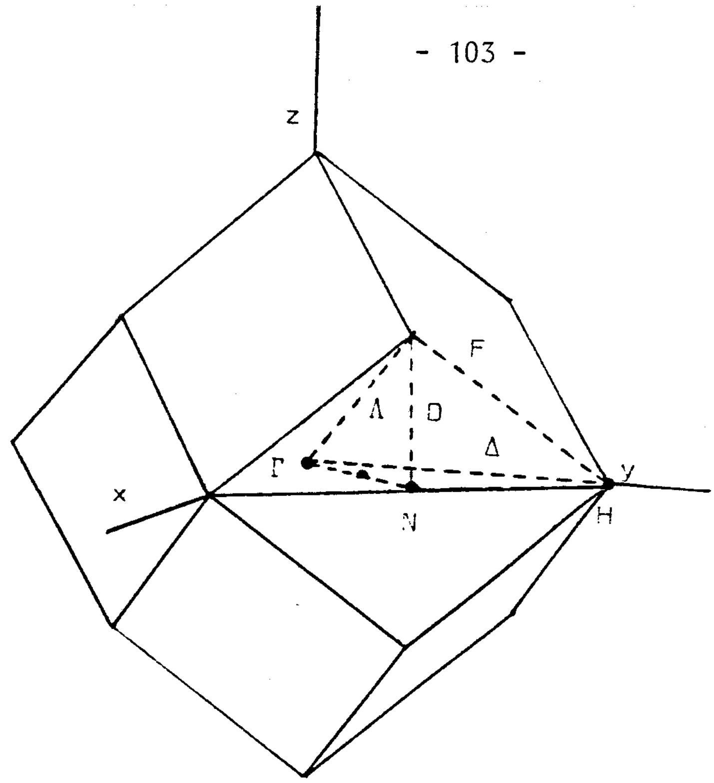


Figure 1: Points et lignes d'ancrage dans le systéme cubique associés au invariants de degré 4 et 6.

) Points d'ancrage, réseau I

$$\left(\frac{1}{3}\,\frac{2}{5}\,\frac{1}{5}\cdot\frac{2}{9}\,\frac{5}{9}\,\frac{1}{9}\cdot\frac{1}{3}\,\frac{2}{3}\,\frac{1}{3}\cdot\frac{4}{9}\,\frac{5}{9}\,\frac{1}{9}\cdot\frac{2}{7}\,\frac{4}{7}\,\frac{1}{7}\cdot\frac{2}{7}\,\frac{3}{7}\,\frac{1}{7}\right)\ n_i^2n_j$$

$$\left(\frac{2}{8}\,\frac{5}{8}\,\frac{1}{8}\right)\ n_in_jn_k\cdot n_i^2n_j^2n_k^2 \qquad \left(\frac{1}{5}\,\frac{3}{5}\,0\right]\,(Cs)\ n_i^2n_j\cdot n_in_jn_k$$

$$\left(\frac{1}{3}\,\frac{1}{3}\,0\right]\,(C_2v)\ n_i^3\cdot n_i^2n_j\cdot n_in_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l\cdot n_i^6\cdot n_i^3n_j^3$$

$$\left(0\,\frac{2}{3}\,0\right]\,(C_4v)\ n_i^3\cdot n_i^2n_j\cdot n_in_jn_k\cdot n_j^6\cdot n_i^3n_j^3\cdot n_i^2n_j^2n_k^2$$

$$\left.\begin{array}{l}\left(\frac{1}{4}\,\frac{5}{8}\,\frac{1}{8}\cdot\frac{1}{4}\,\frac{3}{10}\frac{1}{10}\cdot\frac{3}{28}\frac{19}{28}\,\frac{1}{28}\cdot\frac{3}{28}\frac{9}{28}\frac{1}{28}\cdot\frac{3}{14}\frac{9}{14}\frac{1}{14}\cdot\frac{3}{14}\frac{5}{14}\frac{1}{14}\right]\\ \left(\frac{2}{7}\,\frac{4}{7}\,\frac{1}{7}\cdot\frac{2}{7}\,\frac{3}{7}\,\frac{1}{7}\cdot\frac{3}{26}\frac{17}{26}\,\frac{1}{26}\cdot\frac{3}{26}\frac{9}{26}\frac{1}{26}\cdot\frac{3}{13}\frac{9}{13}\frac{1}{13}\cdot\frac{3}{13}\frac{4}{13}\frac{1}{13}\cdot\frac{5}{13}\frac{6}{13}\frac{2}{13}\right]\end{array}\right\}\ n_i^3n_j$$

$$\left(\frac{1}{3}\,\frac{2}{3}\,0\right]\,(C_2v)\ n_in_jn_kn_l \qquad \left(\frac{2}{5}\,\frac{2}{5}\,\frac{1}{5}\cdot\frac{1}{5}\,\frac{2}{5}\,\frac{1}{5}\cdot\frac{1}{5}\,\frac{3}{5}\,\frac{1}{5}\right]\ n_i^2n_jn_k\left(\frac{1}{5}\,\frac{3}{5}\,0\right]\,(Cs)\ n_i^3n_j\cdot n_i^2n_jn_k$$

$$\left(\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,0\right]\,(C_2v)\ n_i^4\cdot n_i^3n_j\cdot n_i^2n_j^2n_k^2 \quad \left(\frac{1}{4}\,\frac{1}{2}\,0\right]\,(Cs)\left(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{4}\right]\,(C_2v)\left(\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\,\frac{1}{4}\cdot\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\,\frac{1}{4}\right]\,(C_3v)\,n_i^3n_j\cdot n_i^2n_jn_l$$

$$\left(0\,\frac{1}{2}\,0\right]\,(C_4v)\ n_i^4\cdot n_i^3n_j\cdot n_i^2n_jn_k \quad \left(\frac{1}{4}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{4}\right]\,(Cs)\ n_i^4\cdot n_i^3n_j\cdot n_in_jn_kn_l$$

$$\left(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}(P)\right]\,(Td)\ n_i^4\cdot n_i^3n_j\cdot n_i^2n_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l \qquad \left(\frac{1}{4}\,\frac{3}{4}\,0\right]\,(C_2v)\ n_i^4\cdot n_i^3n_j$$

$$\left(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,0(N)\right]\,(D_2h)\ n_in_jn_k\cdot n_i^4\cdot n_i^3n_j\cdot n_i^2n_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l\cdot n_i^6\cdot n_i^3n_j^3\cdot n_i^2n_j^2n_k^2$$

$$\left(0\;1\;0(H)\right]\,(Oh)\ n_i^4\cdot n_i^3n_j\cdot n_i^2n_jn_k\cdot n_in_jn_kn_l\cdot n_i^6\cdot n_i^3n_j^3\cdot n_i^2n_j^2n_k^2$$

$$\left(\frac{2}{16}\frac{5}{16}\frac{1}{16}\right]\left[\frac{1}{5}\,\frac{3}{5}\,0\cdot\frac{1}{10}\frac{1}{10}0\right]\,(Cs)\ n_i^2n_j^2n_k^2 \quad \left(\frac{1}{6}\,\frac{1}{6}\,0\cdot\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{3}\right]\,(C_2v)\left(0\,\frac{1}{3}\,0\right]\,(C_4v)\ n_i^6\cdot n_i^3n_j^3\cdot n_i^2n_j^2n_k^2$$

$$\left.\begin{array}{l}\left(\frac{1}{6}\,\frac{1}{3}\,\frac{1}{6}\cdot\frac{1}{3}\,\frac{2}{3}\,\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{6}\,\frac{2}{3}\,\frac{1}{6}\cdot\frac{1}{3}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{6}\right)\ \left(\frac{1}{6}\,\frac{1}{2}\,0\right]\,(Cs)\\ \left(\frac{1}{3}\,\frac{2}{3}\,0\cdot\frac{1}{6}\,\frac{5}{6}\,0\right]\,(C_2v)\left(\frac{1}{3}\,\frac{1}{3}\,\frac{1}{3}\right]\,(C_3v)\end{array}\right\}\ n_i^6\cdot n_i^3n_j^3$$

Table 2.12[a] Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le réseau cubique I

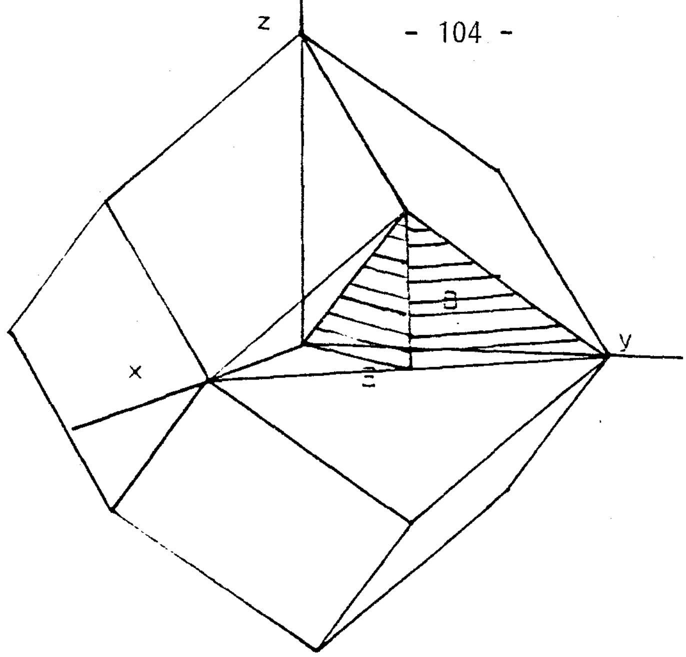


Figure 2: Surface d'ancrage dans le systéme cubique associées aux invariants de degré 4 et 6.

) Lignes et surfaces d'ancrage, réseau I

$\{(\frac{k}{2}\ \frac{k}{2}\ 1-k)\}\ \{(\frac{k}{2}\ \frac{k}{2}\ k)\}\ (Cs)\ n_i n_j n_k \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\{(k\ 1-k\ 0)\}\ (C_2v)\ n_i n_j n_k \cdot n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^2 n_j n_k \cdot n_i n_j n_k n_l$

$\{(k\ k\ 0)\}\ (C_2v)\ n_i n_j n_k \cdot n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^2 n_j n_k \cdot n_i n_j n_k n_l \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2 \cdot n_i^3 n_j^3$

$\{(\frac{1}{5}\ \frac{3}{5}\ k).(\frac{3}{5}\ \frac{1}{5}\ k).(\frac{1}{8}\ \frac{5}{8}\ k).(\frac{5}{8}\ \frac{1}{8}\ k).(\frac{1}{10}\frac{3}{10}k).(\frac{3}{10}\frac{1}{10}k)\}\ n_i^2 n_j n_k$

$\{(\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ k).(\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ k)\}\ n_i^2 n_j^2$ $\quad\{(\frac{1}{2}\ 0\ k).(0\ \frac{1}{2}\ k)\}\ (Cs)\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^2 n_j n_k$

$\{(\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ k).(\frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\ k)\}\{(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ k)\}\ (C_2v)\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^2 n_j n_k \cdot n_i n_j n_k n_l$

$\{(1\ 0\ k).(0\ 1\ k)\}\ (Cs)\ \{(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ k)\}\ (C_2v)\ \{(0\ 0\ k)\}\ (C_4v)\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^2 n_j n_k \cdot n_i n_j n_k n_l \cdot n_i^3 n_j^3$

$\{(k\ k\ \frac{1}{4}).(k\ k\ \frac{3}{4})\}\ n_i^2 n_j n_k \cdot n_i n_j n_k n_l$ $\quad\{(k\ k\ \frac{1}{2})\}\ (Cs)\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^2 n_j n_k \cdot n_i n_j n_k n_l$

$\{(k\ k\ 1)\}\ (Cs)\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^2 n_j n_k \cdot n_i n_j n_k n_l \cdot n_i^3 n_j^3$ $\quad\{(k\ \frac{1}{2}-k\ \frac{1}{2})\}\ n_i n_j n_k n_l$

$\{(k\ \frac{1}{2}-k\ \frac{1}{4}).(k\ \frac{1}{2}-k\ \frac{3}{4})\}\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i n_j n_k n_l$

$\{(k\ \frac{1}{2}-k\ k).(k\ \frac{1}{2}-k\ 1-k).(k\ 1-k\ \frac{1}{2}-k)\}\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i n_j n_k n_l$

$\{k\ k\ k\{\Lambda\}.(k\ k\ 1-k)\}\ (C_3v)\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^2 n_j n_k \cdot n_i n_j n_k n_l \cdot n_i^3 n_j^3$

$$\left.\begin{array}{l}
\{(\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ k).(\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{1}{6}\ \frac{1}{2}\ k).(\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ k).(\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ k).(\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{1}{6}\ \frac{5}{6}\ k).(\frac{5}{6}\ \frac{1}{6}\ k)\} \\
\{(0\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{1}{3}\ 0\ k).(0\ \frac{2}{3}\ k).(\frac{2}{3}\ 0\ k)\}\ (Cs)\ \{(k\ k\ \frac{1}{3}).(k\ k\ \frac{2}{3})\}\ (Cs) \\
\{(k\ \frac{1}{3}-k\ \frac{1}{6}).(k\ \frac{1}{3}-k\ \frac{1}{2}).(k\ \frac{1}{3}-k\ \frac{5}{6}).(k\ \frac{2}{3}-k\ \frac{1}{3}).(k\ \frac{2}{3}-k\ \frac{2}{3}).(k\ \frac{2}{3}-k\ 1)\} \\
\{(k\ \frac{2}{3}-k\ 0).(k\ 1-k\ \frac{1}{6}).(k\ 1-k\ \frac{5}{6})\}\{(k\ k\ \frac{1}{3}-k)\}
\end{array}\right\}\ n_i^3 n_j^3$$

$\{(k\ \frac{1}{2}-k\ 0)\}\ (Cs)\ n_i^2 n_j^2 n_k^2$ $\quad\{(k\ 1-k\ \frac{1}{2})\}\ (Cs)\ n_i^3 n_j^3 \cdot n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\{(k'k\ 0).(k'k'k).(k'1-k'k)\}\ (Cs)\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i^2 n_j n_k \cdot n_i n_j n_k n_l \cdot n_i^3 n_j^3$

$\{(k'k\ \frac{1}{3}).(k'k\ \frac{2}{3}).(k'\frac{1}{3}-k'k).(k'\frac{2}{3}-k'k)\}\ n_i^3 n_j^3$ $\quad\{(k'k\ \frac{1}{2}).(k'\frac{1}{2}-k'k)\}\ n_i^2 n_j^2 \cdot n_i n_j n_k n_l$

Table 2.12[b] Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le réseau cubique I

a) Points d'ancrage, réseau F

$\frac{3}{5}\ \frac{1}{5}\ .\frac{2}{9}\ \frac{4}{9}\ \frac{1}{9}\ .\frac{3}{7}\ \frac{5}{7}\ \frac{1}{7}\Big)\ n_i^2 n_j$ $\quad \Big(\frac{2}{3}\ \frac{2}{3}\ 0\Big)(C_2v)\ n_i^3 . n_i^2 n_j . n_i n_j n_k n_l$

$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\Big)(C_2)\ n_i n_j n_k . n_i^2 n_j^2 n_k^2$ $\quad \Big(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0\Big)(C_2v)\ n_i n_j n_k . n_i^4 . n_i^3 n_j . n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$1\ \frac{1}{3}\Big)(C_2v)\Big(0\ \frac{2}{3}\ 0\Big)(C_4v)\ n_i^3 . n_i^2 n_j . n_i n_j n_k$ $\quad \Big(\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\Big)(C_3v)\ n_i^3 . n_i^2 n_j . n_i^6 . n_i^3 n_j^3$

$1\ 0(X)\Big)(D_4h)\ n_i n_j n_k . n_i^4 . n_i^3 n_j . n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^6 . n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3$

$\left.\begin{array}{l}\frac{3}{5}\ \frac{1}{5}\ .\frac{9}{28}\frac{25}{28}\ \frac{1}{28}.\frac{3}{7}\ \frac{5}{7}\ \frac{1}{7}\ .\frac{11}{28}\ \frac{13}{28}\ \frac{5}{28}.\frac{3}{14}\frac{9}{14}\frac{1}{14}.\frac{8}{14}\frac{12}{14}\ \frac{4}{14}.\frac{9}{26}\frac{23}{26}\ \frac{1}{26}\Big) \\ \frac{9}{13}\frac{1}{13}.\frac{6}{13}\frac{8}{13}\frac{2}{13}.\frac{7}{26}\frac{11}{26}\ \frac{5}{26}.\frac{1}{5}\ \frac{2}{5}\ \frac{1}{4}\ .\frac{2}{5}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{5}\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\Big)\end{array}\right\}\ n_i^3 n_j$

$\frac{7}{10}\frac{1}{10}.\frac{2}{5}\ \frac{4}{5}\ \frac{2}{5}\ .\frac{1}{5}\ \frac{3}{5}\ \frac{1}{5}\ .\frac{3}{8}\ \frac{5}{8}\ \frac{1}{8}\Big)\ n_i^2 n_j n_k$ $\quad \Big(\frac{5}{6}\ \frac{3}{6}\ \frac{1}{6}\Big)(C_2)\ n_i n_j n_k n_l$

$\frac{3}{4}\ 0\ .\frac{1}{5}\ \frac{3}{5}\ 0\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{4}\Big)(Cs)\Big(\frac{1}{4}\ 1\ 0\ .\frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\ 0(K).\frac{1}{4}\ 1\ \frac{1}{4}(U)\Big)(C_2v)\ n_i^3 n_j . n_i^2 n_j n_k$

$\frac{3}{4}\ 0\ .\frac{1}{4}\ \frac{1}{2}\ 0\Big)(Cs)\ n_i^2 n_j n_k . n_i^2 n_j^2$ $\quad \Big(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\Big)(C_3v)\Big(\frac{1}{2}\ 1\ 0(W)\Big)(D_2d)\ n_i^4 . n_i^2 n_j^2 . n_i^3 n_j$

$\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\Big)(Cs)\ n_i^4 . n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l$ $\quad \Big(0\ \frac{1}{2}\ 0\Big)(C_4v)\ n_i^4 . n_i^3 n_j . n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}(L)\Big)(D_3d)\ n_i^4 . n_i^3 n_j . n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^6 . n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3$

$\frac{3}{8}\ \frac{1}{8}\Big)\Big(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ 0\Big)(C_2v)\ n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ .\frac{1}{6}\ \frac{5}{6}\ \frac{1}{6}\Big)\Big(\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ 0\Big)(Cs)\Big(\frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\ \frac{1}{6}\Big)(C_3v)\ n_i^6 . n_i^3 n_j^3$

$\frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\ .\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{6}\Big)(Cs)\Big(\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ 0\Big)(C_2v)\Big(0\ \frac{1}{3}\ 0\ .0\ \frac{2}{3}\ 0\Big)(C_4v)\ n_i^6 . n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3$

b) Lignès et surfaces d'ancrage, réseau F

$\frac{k}{2}\ \frac{k}{2}\ k).(\frac{k}{2}\ \frac{k}{2}\ 1-k).(0\ k\ 1-k)\Big)(Cs)\ n_i n_j n_k . n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$k\ k\ 0)\Big)(C_2v)\ n_i n_j n_k . n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^2 n_j^2 n_k^2 . n_i^3 n_j^3$

$\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ k).(\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ k).(\frac{1}{5}\ \frac{3}{5}\ k).(\frac{3}{5}\ \frac{1}{5}\ k).(\frac{2}{5}\ \frac{4}{5}\ k).(\frac{4}{5}\ \frac{2}{5}\ k)\Big)\ n_i^2 n_j n_k$

$k\ 1-k\ \frac{1}{2}-k).(1-k\ k\ \frac{1}{2}-k)\Big)\Big((k\ k\ \frac{1}{2}-k).(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ k)\Big)(Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i n_j n_k n_l$

$k\ 1-k)\Big)(Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i n_j n_k n_l . n_i^3 n_j^3$

$)\ \frac{1}{2}\ k).(\frac{1}{2}\ 0\ k).(1\ \frac{1}{2}\ k).(\frac{1}{2}\ 1\ k)\Big)(Cs)\Big(\frac{1}{2}\ k\ 1-k\Big)(C_2)\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l$

$)\ 1\ k).(1\ 0\ k)\Big)(C_2v)\Big((0\ 0\ k)\Big)(C_4v)\Big(k\ k\ k(\Lambda)\Big)(C_3v)\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^3 n_j^3$

$\frac{1}{2}-k\ \frac{1}{2})\Big)\Big((\frac{k}{2}\ \frac{k}{2}\ \frac{1}{2}-k).(\frac{k}{2}\ \frac{k}{2}\ \frac{3}{2}-k)\Big)(Cs)\ n_i^2 n_j^2 n_k^2$

$\left.\begin{array}{l})\ \frac{1}{3}\ k).(\frac{1}{3}\ 0\ k).(\frac{1}{3}\ \frac{1}{3}\ k).(0\ \frac{2}{3}\ k).(\frac{2}{3}\ 0\ k).(\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ k).(\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ k)\Big) \\ k\ 0).(k\ k\ \frac{1}{3}).(k\ k\ \frac{2}{3})\Big[(k\ k\ 1)\Big](C_2v)\Big((k\ k\ \frac{1}{3}-k).(k\ \frac{2}{3}-k\ 0)\Big)(Cs) \\ \frac{2}{3}-k\ \frac{1}{3}).(k\ \frac{2}{3}-k\ \frac{2}{3}).(k\ \frac{2}{3}-k\ 1)\Big)\end{array}\right\}\ n_i^3 n_j^3$

$k'k\ \frac{1}{2})\Big)\ n_i^2 n_j^2 . n_i n_j n_k n_l$ $\quad \Big((k'k\ 0).(k'k\ 1)\Big)(Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^3 n_j^3$

$k'k\ 1-k)\Big)\ n_i^2 n_j^2\ n_i^2 n_j n_k\ n_i n_j n_k n_l$ $\quad \Big(k'k'k(\Theta)\Big)(Cs)\ n_i^2 n_j^2 . n_i^2 n_j n_k . n_i n_j n_k n_l . n_i^3 n_j^3$

$k'k\ \frac{1}{3}).(k'k\ \frac{2}{3}).(k'\frac{2}{3}-k\ k)\Big)\ n_i^3 n_j^3$

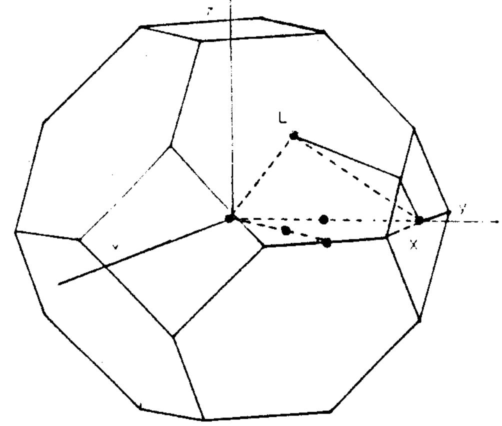


Figure 1: Points et lignes d'ancrage dans le systéme cubique associés aux invariants de degré 4 et 6

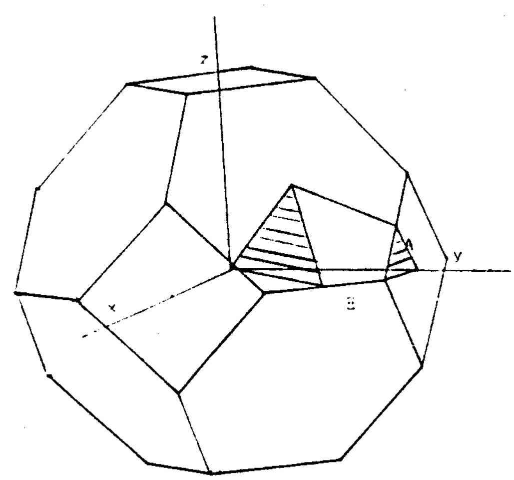


Figure 2: Surfaces d'ancra- d'ancrage dans le systéme cubique associées aux invariants de degré 4 et 6

Table 2.13 Coordonnées des vecteurs d'ancrage dans le réseau cubique F

COMMUNICATION

SYMMETRY DETERMINATION OF POSSIBLE LOCK-IN WAVE VECTORS FOR INCOMMENSURATE SYSTEMS

MARC GUILLUY, PIERRE TOLÉDANO
Groupe de Physique Théorique, Faculté des Sciences, 80000-Amiens (France)
JEAN-CLAUDE TOLÉDANO
C.N.E.T, 196 rue de Paris, 92220-Bagneux (France)

A systematic determination of the possible lock-in wave vectors taking place in incommensurate systems is performed,using the property of the lock-in points to be related to the onset of anisotropic terms of low degree in the free-energy density.The lock-in wave vectors coordinates are determined by equations which express the invariance of the preceding terms by the translations of the commensurate lattice of the high-temperature phase.Lock-in maps are given for the monoclinic and orthorhombic Brillouin zones.A limited number of points,lines and planes are found for anisotropic terms of degree 3,4 and 6.The theoretical results are compared to real examples of lock-in transitions.

Most of the standard properties of incommensurate phase transitions -limited range of stability of the modulated structure,variation of the wave-vector $\vec{k}$ in the incommensurate phase,existence of a lock-in transition to a low symmetry commensurate structure- have received in the last years a phenomenological description through an extended Land au theory.[1,2] This extension consists of the use of a free-energy Φ which can be written as the sum over the volume v of the crystal,of a local density ϕ which depends on the order parameter (OP) components $\eta_i(x_i)$ and of their derivatives with respect to the space coordinates.The possible stable states of the crystal are given by the minimum of Φ.The corresponding values η_i are solutions of nonlinear (Euler) equations which cannot be solved in the general case,so that approximations have to be used for each particular system.In this respect,it has been shown that the existence in ϕ of antisymmetric gradient terms give rise to an incommensurate phase,[1,3] while the anisotropic part of ϕ_1 (anisotropic in the OP space) favors the low-temperature commensurate phase.[2,4] In this paper we infer from this latter property a systematic determination of the coordinates of the possible lock-in wave-vectors which take place in incommensurate systems.The corresponding lock-in "maps" are given for the monoclinic and orthorhombic Brillouin zones (BZ).Illustrative examples of actual lock-in transitions are reported.The whole set of theoretical results for the fourteen BZ and a detailed discussion of experimental data will be given elsewhere.[5]

I. DETERMINATION OF POSSIBLE LOCK-IN WAVE VECTORS

In the extended Landau theory which is under consideration,the lock-in transition comes from the presence in the free-energy local density ϕ of anisotropic terms, which,as the temperature is lowered predomine on magnitude on the energy due to gradient terms.Accordingly in a given BZ a lock-in point should be distinguished from the surrounding rational points by the fact that it corresponds to the onset of additional anisotropic invariants of the OP of low degree.As it is shown below,this condition limits very stongly the number of possible lock-in points in the BZ that can be associated to an incommensurate phase transition,and likewise to first order transitions towards "non-Lifshitz" phases.[6] More generally it contradicts the accepted idea that any arbitrary point of the reciprocal lattice could be related to such transitions,and invalidates in a sense the conclusions reached by Michelson[7] about the allowed types of ordering at second order transitions.Although one cannot exclude the theoretical possibility that very high degree terms should have to be taken into consideration when the transition is strongly discontinuous,the assumption that only low degree invariants are involved in lock-in transitions is conformable to the experimental data, which reveal that in most materials this degree is three ($TaSe_2$), four [$(NH_4)_2BeF_4$], six (K_2Se_4) or at the utmost twelve (Na_2CO_3). If we suppose that the degree n of the relevant anisotropic term is known, the method for calculating the possible lock-in wave vectors relies on the fact that this term must be, at least, invariant by the translations of the Bravais lattice of the high temperature commensurate phase. The anisotropic term can be written under the form:

$$\eta_1^{n_1} \cdot \eta_2^{n_2} \cdot \ldots\ldots \cdot \eta_p^{n_p} \qquad (1)$$

with $n_1+n_2+\ldots+n_p=n$. The components $\eta_i^{\cdot}$ ($i=1,\ldots,p$) of the OP share out on the various arms of the star k^*_1. For the more general asymmetrical point of the BZ, the little group $G(k_1)$ reduces to the identity and the number of inequivalent arms is equal to the order of the crystal's syngony, i.e, the symmetry group K of the lattice [8,9]. Any element g_i of K transforms $\vec{k}_1$ into an inequivalent arm $\vec{k}_i$. The invariance of (1) by the translations of the crystal lattice is thus expressed by the equations:

$$n_1\vec{k}_1 + n_2g_2(\vec{k}_1) + \ldots\ldots + n_pg_p(\vec{k}_1) = p_i\vec{t}_i^* \qquad (i=1,2,3) \qquad (2)$$

$\vec{t}_i^*$ ($i=1,2,3$) are the elementary translations of the reciprocal lattice, p_i ($i=1,2,3$) are integers. Projecting (2) on three axes yields conditions on the coordinates k_{1x}, k_{1y}, k_{1z} of the wave vector $\vec{k}_1$ determining their possible values. It has to be pointed out that for a given crystal, terms of the type (1) must also be invariant by the symmetry operations of the crystal space group other than translations. This reduces further the number of allowed lock-in wave vectors. Similarly when several anisotropic invariants of the same degree figure in the local density their image in the BZ is the intersection of the images corresponding to each invariant. On the other hand the number of possible lock-in vectors is as much reduced as the relevant anisotropic term is of lower degree.

II. LOCK-IN MAPS FOR THE MONOCLINIC AND ORTHORHOMBIC LATTICES

On Tables 1 and 2 are listed the coordinates of the lock-in vectors which can be found respectively in the monoclinic and orthorhombic lattices. They correspond to all the possible anisotropic invariants of the OP components of degree three or four and to one type of degree six (η_i^6). The most remarkable feature of these results is that the wave vector $\vec{k}$ appears to lock-in not only at points, but also at lines and planes of the BZ. Along these lines and planes anisotropic invariants are allowed for any values of the lock-in vectors coordinates. This may be interpreted as if the wave vector ending at one of these lines or planes could undergo a continuous sequence of successive lock-ins until it would reach a special isolated point. The existence of planes in which the thermodynamic potential, when regarded as a function of $\vec{k}$, should vary continuously, has already been considered by Aslanyan and Levanyuk in the cubic system[6]. However, one can see on the tables that lines and planes are associated only with invariants of the type $\eta_i^2\eta_j^2$, $\eta_i^2\eta_j\eta_k$ or $\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l$ which generally coexist in the free energy density with invariants of the η_i^4 type. As these last terms are only

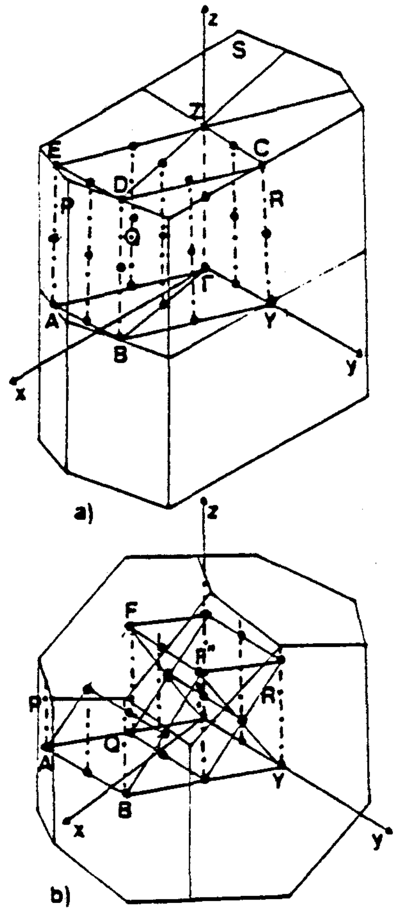


FIGURE 1 Lock-in maps of the monoclinic P(a) and B(b) Brillouin zones. The notation of the lock-in points, lines (dotted) and planes refers to the tables of Zak, et al.[11]

TABLE 1 Lock-in vectors in the monoclinic system

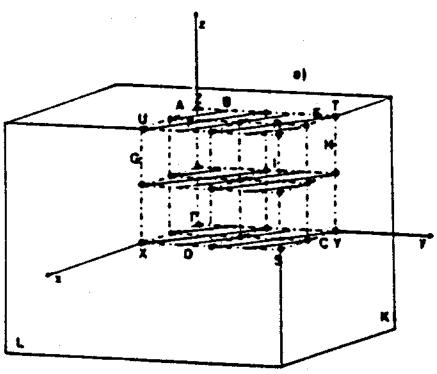
Invariants	Monoclinic P	Monoclinic B
η_i^3	$\frac{n}{3}\ \frac{m}{3}\ \frac{p}{3}$	$\frac{n'}{3}\ \frac{m}{3}\ \frac{p'}{3}$
$\eta_i^2\eta_j$	$n\ m\ \frac{p}{3}$	$n'\ m\ \frac{p'}{3}$
	$\frac{n}{3}\ \frac{m}{3}\ p$	$\frac{n'}{3}\ \frac{m}{3}\ p'$
$\eta_i\eta_j\eta_k$	$n\ m\ p$	$n'\ m\ p'$
η_i^4	$\frac{n}{4}\ \frac{m}{4}\ \frac{p}{4}$	$\frac{n'}{4}\ \frac{m}{4}\ \frac{p'}{4}$
$\eta_i^3\eta_j$	$\frac{n}{2}\ \frac{m}{2}\ \frac{p}{4}$	$\frac{n'}{2}\ \frac{m}{2}\ \frac{p'}{4}$
	$\frac{n}{4}\ \frac{m}{4}\ \frac{p}{2}$	$\frac{n'}{4}\ \frac{m}{4}\ \frac{p'}{2}$
	$\frac{n}{2}\ \frac{m}{2}\ \frac{p}{2}$	$\frac{n'}{2}\ \frac{m}{2}\ \frac{p'}{2}$
$\eta_i^2\eta_j\eta_k$	$k_x\ k_y\ \frac{p}{2}$	$k_x\ k_y\ p$
	$\frac{n}{2}\ \frac{m}{2}\ k_z$	$\frac{n}{2}\ \frac{m}{2}\ k_z$
$\eta_i^2\eta_j^2$	$k_x\ k_y\ \frac{p}{4}$	$k_x\ k_y\ \frac{p}{2}$
	$\frac{n}{4}\ \frac{m}{4}\ k_z$	$\frac{n}{2}\ \frac{m}{4}\ k_z$
η_i^6	$\frac{n}{6}\ \frac{m}{6}\ \frac{p}{6}$	$\frac{n'}{6}\ \frac{m}{6}\ \frac{p'}{6}$

<u>P lattice</u>: $0 \leq n,m,p$ integers$<$<u>Denominator</u>-I
<u>B lattice</u>: $n'=n-m, p'=n+m$, $0 \leq n', m' \leq$ Den

TABLE 2 Lock-in vectors in the orthorhombic system

Invariants	Orthorhombic P	Orthorhombic I	Orthorhombic C	Orthorhombic F
η_i^3	$\frac{n}{3}\ \frac{m}{3}\ \frac{p}{3}$	$\frac{n''}{3}\ \frac{m''}{3}\ \frac{p''}{3}$	$\frac{n'}{3}\ \frac{m'}{3}\ \frac{p}{3}$	$\frac{n'''}{3}\ \frac{m'''}{3}\ \frac{p'''}{3}$
$\eta_i^2\eta_j$	$(\frac{n}{3}\ 0\ \frac{p}{3})$	$(\frac{n''}{3}\ m''\ \frac{p''}{3})$	$(\frac{n'}{3}\ m'\ \frac{p}{3})$	$(\frac{n'''}{3}\ m'''\ \frac{p'''}{3})$
$\eta_i\eta_j\eta_k$, $\eta_i^2\eta_j$	$(0\ 0\ \frac{p}{3})$	$(n''\ m''\ \frac{p''}{3})$	$(n'\ m'\ \frac{p}{3})$	$(n'''\ m'''\ \frac{p'''}{3})$
η_i^4	$\frac{n}{4}\ \frac{m}{4}\ \frac{p}{4}$	$\frac{n''}{4}\ \frac{m''}{4}\ \frac{p''}{4}$	$\frac{n'}{4}\ \frac{m'}{4}\ \frac{p}{4}$	$\frac{n'''}{4}\ \frac{m'''}{4}\ \frac{p'''}{4}$
$\eta_i^3\eta_j$	$(\frac{n}{4}\ \frac{m}{4}\ \frac{p}{2})$	$(\frac{n''}{4}\ \frac{m''}{4}\ \frac{p''}{2})$	$(\frac{n'}{4}\ \frac{m'}{4}\ \frac{p}{2})$	$(\frac{n'''}{4}\ \frac{m'''}{4}\ \frac{p'''}{4})$
	$(\frac{n}{2}\ \frac{m}{2}\ \frac{p}{4})$	$(\frac{n''}{2}\ \frac{m''}{2}\ \frac{p''}{4})$	$(\frac{n'}{2}\ \frac{m'}{2}\ \frac{p}{4})$	$(\frac{n'''}{2}\ \frac{m'''}{2}\ \frac{p'''}{4})$
		$\frac{n''}{2}\ \frac{m''}{2}\ \frac{p''}{2}$		$\frac{n'''}{2}\ \frac{m'''}{2}\ \frac{p'''}{2}$
	$(\frac{n}{2}\ k_y\ k_z)$	$(n\ k_y\ k_z)$	$n\ k_y\ k_z$ $k_x\ m\ k_z$ $k_x\ k_y\ \frac{p}{2}$	$(n\ k_y\ k_z)$
$\eta_i^2\eta_j\eta_k$	$((\frac{n}{4}\ \frac{m}{2})\ k_z)$	$((\frac{n'}{4}\ \frac{m'}{2})\ k_z)$	$(\frac{n'}{4}\ \frac{m'}{2})\ k_z$ $k_x\ m\ \frac{p}{4}$ $n\ k_y\ \frac{p}{4}$	$((n\ \frac{m}{2})\ k_z)$
	$(\frac{n}{2}\ \frac{m}{2}\ k_z)$	$(\frac{n'}{2}\ \frac{m'}{2}\ k_z)$	$\frac{n'}{2}\ \frac{m'}{2}\ k_z$ $k_x\ \frac{m}{2}\ \frac{p}{2}$ $\frac{n}{2}\ k_y\ \frac{p}{2}$	$(n\ m\ k_z)$
$\eta_i\eta_j\eta_k\eta_l$	$\frac{n}{2}\ \frac{m}{2}\ \frac{p}{2}$	$\frac{n''}{2}\ \frac{m''}{2}\ \frac{p''}{2}$	$\frac{n'}{2}\ \frac{m'}{2}\ \frac{p}{2}$	$\frac{n'''}{2}\ \frac{m'''}{2}\ \frac{p'''}{2}$
	$(\frac{n}{4}\ k_y\ k_z)$	$(\frac{n}{2}\ k_y\ k_z)$	$\frac{n}{2}\ k_y\ k_z$ $k_x\ \frac{m}{2}\ k_z$ $k_x\ k_y\ \frac{p}{4}$	$(\frac{n}{2}\ k_y\ k_z)$
$\eta_i^2\eta_j^2$	$(\frac{n}{4}\ \frac{m}{4}\ k_z)$	$(\frac{n'}{4}\ \frac{m'}{4}\ k_z)$	$\frac{n'}{4}\ \frac{m'}{4}\ k_z$ $k_x\ \frac{m}{2}\ \frac{p}{4}$ $\frac{n}{2}\ k_y\ \frac{p}{4}$	$(\frac{n}{2}\ \frac{m}{2}\ k_z)$
η_i^6	$\frac{n}{6}\ \frac{m}{6}\ \frac{p}{6}$	$\frac{n''}{6}\ \frac{m''}{6}\ \frac{p''}{6}$	$\frac{n'}{6}\ \frac{m'}{6}\ \frac{p}{6}$	$\frac{n'''}{6}\ \frac{m'''}{6}\ \frac{p'''}{6}$

<u>P lattice</u>: $0 \leq n,m,k$ Den-I; <u>C and I lattices</u>: $n'=n+m, m'=n-m, m''=m-p, n''=n+p$, $p''=n-m$. $0 \leq (n', m', n'', m'', p'') \leq$ Den. <u>F lattice</u>: $n'''=n+m-p, m'''=n-m+p, p'''=-n+m+p$, $0 \leq (n''', m''', p''') \leq$ Den



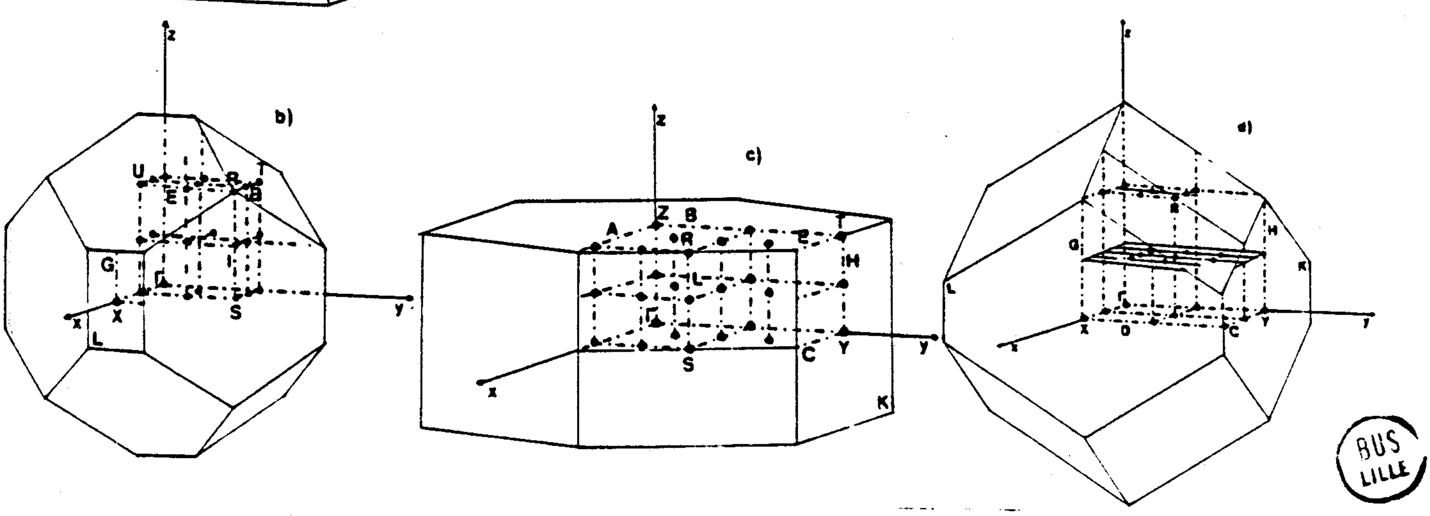


FIGURE 2 Lock-in maps of the orthorhombic P(a), I(b), C(c) and F(d) Brillouin zones.

compatible with points, the wave vector would actually lock-in at points. The lock-in maps corresponding to 1/8 of the first BZ are represented on Figures 1 and 2. For the sake of clarity only points, lines and some planes related to fourth degree invariants have been indicated. In Tables I and II the coordinates are given respectively in the monoclinic and orthorhombic primitive reciprocal lattice vectors

III. ILLUSTRATIVE EXAMPLES

A number of substances undergoing a lock-in transition are listed in Table 3. Most of the observed lock-in points are related to a fourth or sixth order anisotropicinvariant and the corresponding coordinates can be found in our tables. For $LiNH_4SO_4$, $NaNH_4C_4H_4O_6.4H_2O$ and $NaH_3(SeO_3)_2$ the lock-in transition takes place directly from the high-temperature to the low temperature commensurate phases. For $C_{12}H_{10}$, TTF-TCNQ, $NbSe_3$, $P\text{-}C_6F_4Br_2$, and $BaMnF_4$ no lock-in (or a partial one) is observed. This can be interpreted either by the high degree of the relevant anisotropic term, or by the smallness of the corresponding coefficient. In this way, a nearly continuous lock-in transition has been observed in Na_2CO_3 which is interpreted by anisotropic terms of degree twelve.[10]

TABLE 3 Substances undergoing a lock-in transition in the monoclinic and orthorhombic systems. *indicates that the lock-in is partial or has not been observed.

Materials	Lock-in temp(K)	Lock-in point	Crystal. system	Anisotropic invariant	Cell mult. in the low temp comm. phase
$C_{12}H_{10}$*	21	$0,(1-\delta)\frac{b^*}{2},0$		-	-
TTF-TCNQ*	38	$0,0.295b^*,\frac{a^*}{4}$		-	-
$(C_{20}H_{18}O_6S_2)_n$	163	$\frac{a^*}{2},0,0$		4	2
$NaH_3(SeO_3)_2$	194	$0,0,\frac{c^*}{2}$	Mo P	4	2
$NbSe_3$*	58	$0,\delta b^*,\frac{c^*}{2}$		-	-
$P\text{-}C_6F_4Br_2$*	-	$0,0.24b^*,0$		-	-
Na_2CO_3	130	$\frac{a^*}{6},0,\frac{c^*}{3}$	Mo C	12	12
$NaNH_4C_4H_4O_64H_2O$	109	$\frac{a^*}{2},0,0$		4	2
$NaND_4C_4D_4O_64D_2O$*	116	$\delta a^*,0,0$		-	-
$RbD_3(SeO_3)_2$	148	$0,0,\frac{c^*}{2}$		4	2
$LiNH_4SO_4$	283	$\frac{a^*}{2},\frac{b^*}{2},0$		4	4
$BaMnF_4$*	247	$0.39a^*,\frac{b^*}{2},\frac{c^*}{2}$		-	-
$Sr_2Nb_2O_7$	493	$\frac{a^*}{2},0,0$		4	2
K_2SeO_4	93	$\frac{a^*}{3},0,0$		6	3
$(ND_4)_2BeF_4$	164	$\frac{a^*}{2},0,0$	Or P	4	2
$SC(NH_2)_2$	176	$0,\frac{b^*}{9},0$		9	-
	169	$0,0,0$		4	1
Rb_2ZnBr_4	193	$\frac{a^*}{3},0,0$		6	3
K_2ZnCl_4	403	$\frac{a^*}{3},0,0$		6	3
$(N(CH_3)_4)_2CoCl_4$	281	$0,0,\frac{2c^*}{5}$		-	-
	277	$0,0,\frac{c^*}{3}$		6	3
$NaNO_2$	437	$0,0,0$	Or I	4	1

REFERENCES

1. I.E. Dzialoshinskii Sov. Phys. JETP 20, 960 (1964).
2. A.P. Levanyuk and D.G. Sannikov, Sov. Phys. Solid State 18, 245 (1976).
3. E.M. Lifshitz, Z. Eksp. Teor. Fiziki 11,255 (1941).
4. V. Dvorak and Y. Ishibashi, J. Phys. Soc. Japan 45, 775 (1978).
5. M. Guilluy, P. Toledano and J.C. Toledano (to be published).
6. T.A. Aslanyan and A.P. Levanyuk, Sov. Phys. Solid State 19, 812 (1977).
7. A. Michelson, Phys. Rev. B 18, 459 (1978).
8. L.D. Landau and E.M. Lifshitz, Statistical Physics (Pergamon Press, London, 1958).
9. G.Ya. Lyubarskii, The Application of Group Theory in Physics (Pergamon Press, New York, 1960)
10. C.J. DePater and R.B. Helmholdt, Phys. Rev. B 19, 5735 (1979).
11. J. Zak, A. Casher, H. Glück and Y. Gur, The Irreducible Representations of Space Groups (Benjamin, New York, 1969).

RESUME

La thèse porte sur l'application de la théorie de Landau à l'étude des phases incommensurables structurales. Le premier chapitre fait le point sur les développements qui ont été proposés pour décrire les propriétés principales des phases incommensurables. Les chapitres 2 et 3 vérifient deux des principales informations contenues dans la forme de la densité d'énergie libre de Landau de la transition: la détermination des points d'ancrage à l'aide des invariants anisotropes et la forme de la modulation à l'aide des invariants de Lifshitz. Au chapitre 4, le problème des systèmes qui subissent une succession de transitions d'ancrage ou de phases incommensurables est abordé.

MOTS CLES

- SYMETRIE
- THEORIE LANDAU
- TRANSITION PHASE
- MODULATION PHASE