

D. WEIGEL

R. VEYSSEYRE

**Cristallographie à  $n$  dimensions**

*Publications du Département de Mathématiques de Lyon*, 1987, fascicule 1B  
« Actes du colloque Jean Braconnier », , p. 75-99

[http://www.numdam.org/item?id=PDML\\_1987\\_\\_1B\\_75\\_0](http://www.numdam.org/item?id=PDML_1987__1B_75_0)

© Université de Lyon, 1987, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la série « Publications du Département de mathématiques de Lyon » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme  
Numérisation de documents anciens mathématiques  
<http://www.numdam.org/>

## CRISTALLOGRAPHIE A n DIMENSIONS

Symétrie classique : polytopes, molécules, cristaux

Symétrie colorée : structures magnétiques ordonnées

Structure des phases incommensurables dans leur superspace

*D. WEIGEL et R. VEYSSEYRE*

Laboratoires de Chimie Physique du solide et de  
Mathématiques Appliquées à la Physique  
Ecole Centrale des Arts et Manufactures  
92290 Châtenay-Malabry

### 1. Symétrie classique : polytopes, molécules et cristaux

Soit  $E^n$  un espace affine associé à un espace vectoriel  $\vec{E}^n$ , proprement euclidien, de dimension  $n$  sur le corps des réels et on appelle espace objet cet espace affine.

#### 1.1. Isométries vectorielles de $\vec{E}^n$ , isométries affines de $E^n$ (1) (2)

Une isométrie vectorielle, ou opérateur orthogonal, est un endomorphisme de  $\vec{E}^n$  qui conserve la norme : c'est un élément du groupe orthogonal,  $O$ .

Par rapport à une origine fixée de  $E^n$ , une isométrie affine générale de  $E^n$  (application de  $E^n$  dans  $E^n$  qui conserve les distances) est le produit :

- d'une isométrie ponctuelle laissant au moins un point invariant, ou OPS (opération ponctuelle de symétrie)
- et d'une translation.

On appelle OSS (opération spatiale de symétrie), une isométrie générale de  $E^n$ . Les OSS sont les éléments du groupe,  $I_s$ , des isométries affines de  $E^n$  dont le groupe  $O$  et le groupe des translations,  $\Gamma$ , de  $E^n$  sont deux sous-groupes.

*exemples d'OPS de  $E^2$ ,  $E^3$  :*

- rotation d'angle  $2\pi/4$  autour d'un point (d'un axe), notée  $\bar{4}$ .
- rotation inverse produit d'une rotation d'angle  $2\pi/4$  autour d'un axe et d'une symétrie ("inversion") par rapport à un point situé sur l'axe, notée  $\bar{4}$ .

- réflexion (symétrie) sur un miroir droite (plan), notée  $m$ .

Dans  $E^1$  le miroir est un point, dans  $E^2$  une droite, dans  $E^3$  un plan et plus généralement un hyperplan dans  $E^n$  (un hyperplan de  $E^n$  est un sous-espace de  $E^n$  de dimension  $(n-1)$ ).

exemples d'OSS de  $E^3$  :

- rotation hélicoïdale ou vissage

- glissymétrie ou symétrie avec glissement sur un plan (miroir).

Exemples d'OPS de  $E^4$  : On choisit un repère Oxyzt orthonormé et on utilise les symboles WPV (§ 1.4)

- homothétie-1, notée  $\bar{I}_4$ , autour d'un point

- rotation d'angle  $2\pi/3$  dans un plan parallèle à xy, autour d'un plan parallèle à zt tel que (xy) et (zt) ont pour intersection le point O, notée 3 (fig.1a)

- double rotation d'angle  $2\pi/5$  dans un plan parallèle à xy, autour du plan zt et d'angle  $4\pi/5$  dans un plan parallèle à zt autour du plan xy, notée  $5^1_{xy}5^2_{zt}$ , (fig.1b) et qui a pour matrice dans la base choisie :

$$\begin{vmatrix} \cos 2\pi/5 & -\sin 2\pi/5 & 0 & 0 \\ \sin 2\pi/5 & \cos 2\pi/5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos 4\pi/5 & -\sin 4\pi/5 \\ 0 & 0 & \sin 4\pi/5 & \cos 4\pi/5 \end{vmatrix}$$

exemple d'OSS de  $E^4$  :

glissymétrie composée d'une réflexion sur le miroir hyperplan xyz et d'une translation  $\vec{V} \in \vec{E}^3_{xyz}$  (fig.1c)

### 1.2. Définition des groupes de symétrie des objets de $E^n$

- le groupe de symétrie,  $G$ , d'un objet de  $E^n$  est, par définition, l'ensemble de toutes les OSS qui conservent globalement cet objet :  $G \subset I_s$  s'appelle le groupe spatial de symétrie (GSS) de l'objet.

- le groupe de translation,  $T$ , d'un objet infini de  $E^n$  est, par définition, constitué de toutes les translations qui conservent cet objet :  $T \subset \Gamma$  et  $T \subset G$  (sous groupe invariant (normal ou distingué))

- Un cristal parfait de  $E^n$  est un objet de  $E^n$  dont le groupe de translation,  $T$ , est un groupe abélien de rang  $n$ , c'est à dire qu'il est engendré par  $n$  vecteurs linéairement

indépendants (\*); le paralléloétope convexe construit sur ces n vecteurs constitue la maille du cristal.

La figure 2 montre l'exemple d'un cristal hexagone de  $E^2$  où les vecteurs du groupe T s'écrivent  $\vec{t} = u\vec{a}_1 + v\vec{a}_2$  avec  $(u,v) \in Z^2$  et où la maille est un tiers d'hexagone régulier.

- le groupe quotient,  $G/T$ , ou groupe des classes de la partition de G modulo le sous groupe T, est tel que tous les éléments d'une même classe ont la même symétrie d'orientation caractérisée par un élément,  $h_i$ , du groupe orthogonal O.

- le groupe ponctuel de symétrie (GPS), H, de l'objet est, par définition, constitué des p éléments  $h_i$ , caractérisant les p classes du groupe  $G/T : H \subset O$

Par exemple le GPS du cristal de la figure 2 :  $3m$ , est constitué des six OPS : identité, rotations  $\pm 2\pi/3$ , réflexions sur chacun des trois miroirs  $m_1, m_2$  et  $m_3$ .

Enfin si l'objet est fini, par exemple un polytope ou une molécule : H est identique G et T est réduit à l'identité. En résumé

$$\begin{array}{ccccc} O & \subset & I_s & \supset & \Gamma \\ U & & U & & U \\ H & & G & \supset & T \end{array}$$

L'objet est symorphe si  $H \subset G$  et non symorphe si  $H \not\subset G$ .

1.3. Détermination géométrique de l'ordre, q, des groupes ponctuels de symétrie (GPS) des objets de  $E^n$  : Théorème VW (VEYSSEYRE-WEIGEL) (3) (4)

Soient  $a_1, a_2, \dots, a_p$  tous les sommets d'un polytope P de  $E^n$  dont  $\Omega$  est l'isobarycentre et  $(\Omega, a_1, \dots, a_n)$ , avec  $n < p$ ) un repère de  $E^n$ .

Deux sommets  $a_i$  et  $a_j$  du polytope sont dits "équivalents" s'il existe au moins une isométrie laissant le polytope globalement invariant et amenant  $a_i$  en  $a_j$ . C'est une relation d'équivalence dans l'ensemble des sommets.

$Na_1$  est le nombre de sommets de P équivalents à  $a_1$  et situés à la même distance de  $\Omega$  que  $a_1$ , y compris  $a_1$  lui-même.

$Na_2(a_1)$  est le nombre de sommets de P équivalents à  $a_2$  et situés à la même distance de  $a_1$  que  $a_2$  y compris  $a_2$  lui-même.

$Na_3(a_1, a_2)$  est le nombre de sommets de P équivalents à  $a_3$  et situés à la même distance de  $a_1$  et de  $a_2$  que  $a_3$ , y compris  $a_3$  lui-même.

\* le module du vecteur de n'importe quelle translation est toujours supérieur à un nombre  $d > 0$  c'est à dire que les images d'un point quelconque de la structure par toutes les translations n'ont aucun point d'accumulation.

On définit de même  $Na_i (a_1 \dots a_{i-1})$

Alors

$$q = Na_1 \times Na_2(a_1) \times Na_3(a_1, a_2) \dots \times Na_n(a_1, \dots, a_{n-1})$$

le nombre de facteurs étant égal à la dimension de l'espace.

*Application* : l'octaèdre régulier de  $E^3$  a six sommets équidistants de  $\Omega$  situés sur trois axes orthogonaux, (fig 3) : configuration des noyaux à l'équilibre (de vibration) de la molécule  $SF_6$  où  $\Omega$  est le noyau de l'atome S (soufre) et  $a_1, \dots, a_6$ , six noyaux de fluor, F. On vérifie immédiatement que

$$Na_1 = 6; \quad Na_2(a_1) = 4; \quad Na_3(a_1, a_2) = 2, \quad \text{d'où :}$$

$q = 6 \times 4 \times 2 = 48$ , ordre du groupe de symétrie du cube dans lequel l'octaèdre régulier est inscrit.

#### 1.4. Symboles géométriques WPV des groupes ponctuels dans $E^n$ et application aux simplexes réguliers (5) (6) (7) (8)

Les symboles WPV (Weigel, Phan, Veysseyre) généralisent dans  $E^4, E^5, \dots$  les symboles HERMANN MAUGUIN utilisés par les physiciens du solide dans  $E^2$  et  $E^3$  ainsi qu'on le montre sur l'exemple des simplexes réguliers : segment ( $E^1$ ), triangle équilatéral ( $E^2$ ), tétraèdre régulier ( $E^3$ ), pentatope régulier ( $E^4$ ),... (fig.4).

Le segment de  $E^1$  a un GPS d'ordre deux, noté  $m$ , qui comprend l'identité et la réflexion sur un miroir (point) (fig.4a).

Le triangle équilatéral de  $E^2$  a un GPS, d'ordre six, noté  $3m$ , qui comprend trois réflexions sur les miroirs (droites bissectrices) (fig. 4b et §1.2).

Le tétraèdre régulier de  $E^3$  a un GPS, d'ordre vingt quatre, noté  $\hat{4}3m$ , qui comprend 4 axes d'ordre 3 (les 4 hauteurs), donc 4 triangles équilatéraux, et trois axes "inverses" d'ordre 4, notés  $\bar{4}$ , (les 3 droites des milieux des arêtes opposées) (fig. 4c et § 1.1).

Le pentatope régulier de  $E^4$  a un GPS, d'ordre cent vingt ( $q = 5 \times 4 \times 3 \times 2$ ) noté  $55 (\bar{4}, 3, m)$ . En effet, il contient cinq tétraèdres réguliers ( $\bar{4}, 3, m$ ) et il est engendré en appliquant à l'un d'entre eux la rotation  $55 (5^1 5^2)$  autour de couples de plans supplémentaires orthogonaux fixés par rapport au pentatope (§ 1.1) et ses quatre puissances distinctes différentes de l'identité (y compris  $5^1 5^2$ ).

Notons qu'il s'agit de GPS cristallographiques, (§ 1.5) appartenant aux systèmes cristallins : hexagone de  $E^2$ , cubique de  $E^3$ , rhombotope particulier ( $\cos \alpha = -1/4$ ) de  $E^4$  (7) (un rhombotope est un hypercube étiré suivant l'une de ses hyperdiagonales). On

rappelle que la rotation simple d'angle  $2\pi/5$ , notée 5, est interdite en cristallographie dans  $E^2, E^3, \dots, E^n, \forall n$  entier positif.

1.5. Mailles des cristaux (parallélotopes) et noms des familles cristallines de  $E^n$  : (Un parallélotope est un parallélépipède généralisé )

On a défini les mailles des cristaux de  $E^n$  (§ 1.2). Donnons quatre exemples :

- carré ou hexagone régulier de  $E^2$  (en fait un tiers d'hexagone, (fig.2));
- prisme droit à base carrée (tétragonal ou quadratique) ou prisme droit à base un tiers d'hexagone régulier (hexagonal) de  $E^3$ .

Les familles cristallines des espaces  $E^4, E^5, E^6$  ont été tabulées, de façon abstraite, (9) (10) (11) alors que nous donnons des noms géométriques simples à leurs mailles (5) (6), par exemple carré hexagone orthogonaux pour la famille XV de  $E^4$  que nous dessinons fig.5 et décrivons succinctement:

Le polytope complet est engendré par un hexagone régulier translaté parallèlement aux côtés et à la diagonale d'un carré situé dans le plan supplémentaire orthogonal : on a donc 24 sommets chacun appartenant à un des 4 hexagones et à un des 6 carrés. Le théorème VW donne l'ordre de son GPS :

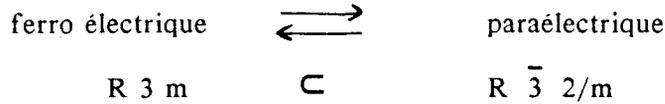
$$q = 24 \times 2 \times 2 \times 1 = 96 = 8 \times 12$$

En effet le GPS du carré dans  $E^2$  est 4 mm, d'ordre 8 ( § 1.3 et analogie avec 3m) et le GPS de l'hexagone régulier dans  $E^2$  est 6mm, d'ordre 12. Le symbole WPV du GPS de l'holohédrie du polytope de  $E^4$  est donc  $m, m, 4 \perp 6, m, m$ , d'ordre 96 (l'holohédrie correspond à toute la symétrie du réseau de translation du cristal). Le polytope complet n'étant pas un parallélotope, la maille du cristal correspondant est trois fois plus petite, (fig.5 et fig.2).

1.6. Groupes polaires et transitions ferro  $\rightleftharpoons$  para électriques

Donnons d'abord un exemple classique dans  $E^3$  où le cristal de tantalate de lithium est rhomboédrique (R), le rhomboèdre étant un cube étiré suivant l'une de ses quatre diagonales (z) (fig.6). Aux températures supérieures à 610°C le GPS du cristal est  $\bar{3} 2/m$ , d'ordre 12 qui correspond à l'holohédrie (toute la symétrie) du rhomboèdre ( $q = 2 \times 3 \times 2$  d'après le théorème VW). En effet on observe un centre de symétrie ( $\bar{1}$ ) où se trouve le tantale, un axe ternaire ( $\bar{3}$ , donc  $\bar{3} = 3 \times \bar{1}$ ), trois axes binaires orthogonaux à z et trois miroirs orthogonaux aux axes binaires (trois fois 2/m).

Aux températures inférieures à 610°C le tantale se fixe spontanément, sur l'axe z, dans une position légèrement plus haute ou plus basse que le centre de symétrie : le barycentre des charges positives ne coïncide plus avec celui des charges négatives et il apparaît une polarisation spontanée,  $\vec{P}$ , vecteur polaire, égale au moment dipolaire électrique par unité de volume (12). Le cristal se trouve donc dans l'un de ses deux états ferro électriques  $\uparrow$  ou  $\downarrow$  où son GPS n'est plus que d'ordre 6 et se note 3m. A 610°C on observe la transition de phase ferroïque (13) de Li Ta O<sub>3</sub> :



qui satisfait à la théorie de LANDAU (14) sur les transitions de phase à structures apparentées. On remarque que la phase paraélectrique, où la polarisation spontanée est nulle correspond à la superposition des deux états ferro électriques  $\uparrow$  et  $\downarrow$  ce qui entraîne que son GPS est le produit direct de 3m par le groupe binaire  $\bar{1}$  (identité et "inversion" ou symétrie par rapport au point) donc égal à  $\bar{3}\ 2/m$ .

Dans la table de caractères de  $\bar{3}\ 2/m$  on voit que la phase para appartient (\*) à la RI (représentation irréductible) triviale alors que la phase ferro appartient à la RI A<sub>2u</sub> et que la transition ferroélectrique  $\rightleftharpoons$  paraélectrique est permise à cause de la coordonnée z du vecteur polaire. En effet la probabilité de cette transition est proportionnelle au carré de

$\bar{3}\ 2/m$	1	2.3 <sub>xy</sub>	3.2	1	2.3 <sub>xy</sub>	3.m	BASES DES RI	(**)
A <sub>1g</sub>	1	1	1	1	1	1	phase PARA	
A <sub>2g</sub>	1	1	-1	1	1	-1		
E <sub>g</sub>	2	-1	0	2	-1	0		
A <sub>1u</sub>	1	1	1	-1	-1	-1	phase FERRO, z (x,y)	
A <sub>2u</sub>	1	1	-1	-1	-1	1		
E <sub>u</sub>	2	-1	0	-2	1	0		

l'intégrale (\*\*\*)  $\langle \text{para} | P | \text{ferro} \rangle$ . Celle-ci n'est différente de zéro que si le produit des RI auxquelles appartiennent "para", "ferro" et P<sub>x</sub>, P<sub>y</sub> ou P<sub>z</sub> contient la RI triviale, A<sub>1g</sub> :

\*"appartient à" signifie : est une base possible pour la RI

\*\* 3.2 signifie 3 rotations d'angle (2)

\*\*\* écrite avec le formalisme de DIRAC

opportunité qui ne se produit que pour  $P_z$  qui appartient à la même RI que "ferro", "para" appartenant à  $A_{1g}$ .

Dans  $E^3$ ,  $3m$  est un *GPS polaire* car toutes ses OPS conservent un même vecteur polaire, (§ 2.2) alors que  $3m$  n'est pas un groupe polaire dans  $E^2$  (15).

Dans  $E^3_{xyz}$  l'holohédrie de la famille cristalline cubique, d'ordre 48, notée  $4/m\bar{3}2/m$  (\*) est un GPS non polaire. Dans  $E^4, E^5, \dots$  le GPS de même symbole existe aussi et est un groupe polaire constitué des 48 matrices suivantes (dans une base orthonormée)

$$\left| \begin{array}{ccc|c} & & & 0 \\ & & & 0 \\ & & & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right| \quad \left| \begin{array}{ccc|c} & & & 0 \\ & & & 0 \\ & & & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right|$$

où A est l'une des 48 matrices orthogonales 3x3 représentant chacune des 48 OPS du cube dans  $E^3$ .

Dans  $E^4$  :  $4/m\bar{3},2/m$  (\*\*) est une hémihédrie (moitié de la symétrie totale de la maille vide) de la famille cristalline XVII dont la maille est un hyperprisme droit à base cube (fig.7), l'holohédrie de cette famille étant  $(4/m\bar{3},2/m) \perp m_t$  GPS d'ordre 96 qui n'est pas polaire.

#### 1.7. Exemples de groupes cristallographiques dans $E^6, E^7, E^9, \dots$

Dans  $E^6$  on peut faire le raisonnement de la fin du § 1.6 en se plaçant, soit dans l'espace  $E^3_{xyz}$  soit dans l'espace  $E^3_{tuv}$ . Alors les symboles WPV suivants définissent parfaitement les groupes ponctuels :

- Famille cristalline di cubes orthogonaux de  $E^6$  :

$4/m\bar{3},2/m \perp 4/m\bar{3},2/m$ , ordre 2304 ( $48^2$ ), 4 générateurs :  $4, \bar{3}, 4, \bar{3}$

$4/m\bar{3},2/m \perp \bar{4},3,m$ , ordre 1152, 4 générateurs :  $4, \bar{3}, 4, 3$

---

\* le cube contient trois axes d'ordre 4 orthogonaux à 3 miroirs, 4 axes  $\bar{3}$  d'ordre 6 et six axes binaires orthogonaux à 6 autres miroirs

\*\* on a rajouté des virgules dans le symbole WPV afin de distinguer rotation double (4 3) de deux rotations simples (4,3)

- Famille cristalline cube rhombotope particulier ( $\cos \alpha = -1/4$ ) orthogonaux de  $E^7$   
 $4/m, \bar{3}, 2/m \perp 55(\bar{4}, 3, m)$  ordre 5.760 (48 x 120), 5 générateurs : 4,  $\bar{3}$ ,  $\bar{4}$ , 3, 55
- Famille cristalline tri cubes orthogonaux de  $E^9$   
 $4/m, \bar{3}, 2/m \perp 4/m, \bar{3}, 2/m \perp 4/m, \bar{3}, 2/m$  ordre 110.592 ( $48^3$ ), 6 générateurs: 4,  $\bar{3}$ , 4,  $\bar{3}$ , 4,  $\bar{3}$ .

\*  
\*       \*

## 2. symétrie colorée : structures magnétiques ordonnées

On présente d'abord sur un exemple artistique le type de raisonnement qu'on utilisera ensuite pour décrire la symétrie de ces structures magnétiques.

### 2.1. Dessins périodiques colorés de M.C. ESCHER (16)

Si on considère le dessin *incolore* de la figure 8, supposé infini, où on ne garde que les contours des poissons, on a un cristal de  $E^2_{xy}$  où le GPS est d'ordre 4, les centres 4 se trouvant aux points de rencontre de 4 queues ou de 4 nageoires dorsales. Avec le dessin *quadricolore* on a perdu toute la symétrie ponctuelle, sauf l'identité. Pour retrouver la symétrie d'ordre 4 on doit représenter un deuxième groupe cyclique d'ordre 4 dans le plan (zt) qu'on prendra d'abord supplémentaire orthogonal à (xy) et où les quatre sommets de la maille carrée d'un cristal carré représentent les 4 permutations circulaires (y compris l'identité) des 4 couleurs : blanc, noir, pointillé, gris.

Le GPS de ce cristal de  $E^4_{xyzt}$ , d'ordre 4, noté  $44^*$  comprend l'identité 1, deux doubles rotations  $4^1_{xy} 4^1_{zt}$ ,  $4^3_{xy} 4^3_{zt}$  et une troisième double rotation totalement dégénérée  $\bar{1}_4 = 2_{xy} 2_{zt} = 2_{\alpha\beta} 2_{\gamma\delta} = \dots$  (§ 1.1. et (1)). Par exemple l'OPS  $4^1_{xy} 4^1_{zt}$  qui correspond à une rotation  $\pi/2$  de la figure 8, dans le sens trigonométrique, et aux changements de couleur (blanc  $\rightarrow$  noir, noir  $\rightarrow$  pointillé,...) conserve globalement le dessin quadricolore initial.

*Remarque* : Le GPS  $44^*$  appartient-il à la famille cristalline XIV de  $E^4$  : di carrés orthogonaux ? Non, car l'holohédrie de cette famille est  $m, m, 4 \perp 4, m, m$ , d'ordre  $64 = 8 \times 8$ , (§ 1.5 et (5) (7) (9)).

En fait les OPS  $4^1 4^1$  et  $4^3 4^3$  qu'on appelle aussi déplacements de CLIFFORD (17) sont partiellement dégénérés, car les deux angles de la double rotation sont égaux,

et leurs supports géométriques ne sont pas définis de façon unique. Pour cette raison 44\* est l'holohédrie de la famille cristalline VIII de  $E^4$  : di carrés dicliniques.

La symétrie de translation est superflue dans le plan (zt) et on pourrait se contenter d'un semi cristal (dim 2) de  $E^4$ , (§ 2.3)

## 2.2. vecteurs polaires et vecteurs axiaux : effet HALL

Les vecteurs polaires sont les éléments de  $E^n$ , définis  $\forall n$ , dont nous avons donné un exemple concret dans  $E^3$  (§ 1.6 (\*)). Le GPS du vecteur polaire dans  $E^3$  est un groupe de LIE, noté  $C_{\infty v}$  (avec les symboles des chimistes), constitué de toutes les rotations autour de l'axe du vecteur et des réflexions sur tous les miroirs passant par cet axe (fig. 9.a). Dans  $E^2$  le GPS d'un vecteur polaire est  $m$ .

Dans  $E^3$  il existe un deuxième type de vecteurs qui se transforment, par une OPS, de façon différente des vecteurs polaires : les vecteurs axiaux qui s'expriment par un produit vectoriel, par exemple un moment cinétique ou magnétique ou un vecteur magnétisation,  $\vec{J}$ , égal à un moment magnétique par unité de volume. Leur signe, qui correspond à une rotation autour d'une droite, dépend du sens d'orientation de l'espace et le GPS d'un vecteur axial est  $C_{\infty h}$ , constitué de toutes les rotations autour de la droite et de leur produit par la réflexion sur un miroir plan orthogonal à celle-ci (fig. 9.b).

$C_{\infty v}$  et  $C_{\infty h}$  qui sont deux sous-groupes du groupe orthogonal de  $E^3$  sont isomorphes au même groupe mathématique abstrait.

L'effet HALL traduit le résultat expérimental suivant : lorsqu'on applique à un matériau un champ électrique  $\vec{E}$  et un champ magnétique  $\vec{H}$  perpendiculaires on observe un courant électrique  $\vec{j}$  dans un plan orthogonal à  $\vec{H}$ . Ce résultat était prévisible, car la seule OPS commune à  $C_{\infty v}$  associé à  $\vec{E}$  et à  $C_{\infty h}$  associé à  $\vec{H}$  est la réflexion sur le plan qui contient  $\vec{j}$ , (fig. 9.c).

## 2.3. Semi cristaux de $E^4$ et structures magnétiques ordonnées de l'espace physique $E^3_{xyz}$

Présentons ces notions à partir d'un exemple physique concret de  $E^3$  : si on refroidit un cristal de boracite,  $Ni_3B_7O_{13}I$  en dessous de la température 60K, il apparaît une polarisation  $\vec{P}$  et une magnétisation  $\vec{J}$  spontanées (18) (Fig. 10).

---

\* un vecteur champ électrique,  $\vec{E}$ , ou un vecteur conductivité électrique  $\vec{j}$  constituent deux autres exemples de vecteurs polaires

Les structures électrique et atomique (empilement des "ions") possèdent le GPS polaire  $mm2$  de  $E^3$  (d'ordre 4, isomorphe au groupe de KLEIN) comprenant l'identité, 1, la rotation d'angle  $\pi$ ,  $2_{xy}$ , et les deux réflexions  $m_x$  et  $m_y$ . Si deux éléments (1 et  $m_x$ ) conservent aussi le vecteur  $\vec{J}$ , les deux autres ( $2_{xy}$  et  $m_y$ ) changent son signe.

On doit donc ajouter à ces deux éléments une opération appelée "inversion du temps" qui change le signe de tous les vecteurs axiaux (sans toucher aux vecteurs polaires et à la symétrie des structures atomiques) et qu'on représente à l'aide d'une quatrième dimension.

Finalement les éléments du cristal de boracite, à  $T < 60K$ , s'écrivent avec les matrices  $4 \times 4$  suivantes dans une base orthonormée de  $E^4_{xyzt}$ , le cristal étant "devenu" un objet de  $E^4$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & & \bar{1} & \\ \hline & 1 & & \\ \hline & & 1 & \\ \hline & & & 1 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & & \bar{1} & \\ \hline & 1 & & \\ \hline & & 1 & \\ \hline & & & 1 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & & \bar{1} & \\ \hline & 1 & & \\ \hline & & 1 & \\ \hline & & & \bar{1} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \bar{1} & & 1 & \\ \hline & \bar{1} & & \\ \hline & & \bar{1} & \\ \hline & & & 1 \\ \hline \end{array}$$

Les OPS correspondant aux deux premières matrices, qui conservent le temps, sont des OPS blanches qu'on note, comme dans  $E^3$ , 1 et  $m_x$  avec les deux types de symboles (Shubnikov (19) et WPV). Les OPS correspondant aux deux dernières matrices, qui inversent le temps, sont des OPS noires notées  $m'_y$  et  $2'_{xy}$  avec les symboles de Shubnikov et  $2^*_{yt}$  et  $\bar{1}^*_z$  avec les symboles WPV.

Les symboles du GPS d'ordre 4 de  $E^4$  qui conservent globalement la phase ferromagnétique, ferroélectrique de la boracite ( $T < 60K$ ) sont donc  $m'm2'$  avec la notation de Shubnikov et  $2^*/m$  avec la notation WPV. Ce GPS appartient à la famille IV cristalline de  $E^4$  : parallélogramme rectangle orthogonaux

Le groupe de translation, T, de la boracite dans  $E^4$  est un groupe abélien de rang 3, car les vecteurs  $\vec{\tau}$  (éléments de T) sont contenus dans l'espace physique  $E^3$ , le changement périodique de l'origine du temps n'ayant pas d'intérêt physique : l'objet de  $E^4$  n'est donc pas un cristal (§ 1.2).

*définition d'un semi-cristal dim p (p < n) de  $E^n$  : (2)*

C'est un objet infini de  $E^n$  dont le groupe de translation est un groupe abélien de rang  $p < n$ , engendré par p vecteurs linéairement indépendants.

*exemples de semi cristaux*

- le semi cristal dim 1 de  $E^3$  représenté figure 11 où les vecteurs  $\vec{c}$ , éléments de T sont égaux à  $w\vec{c}$  avec  $w \in Z$ . et où le GPS est l'holohédrie du système orthorhombique de  $E^3$ , soit  $2/m 2/m 2/m$  d'ordre 8
- les structures magnétiques ordonnées de l'espace physique : semi cristaux dim 3 de  $E^4$

#### 2.4 Transition de phase ferro-paramagnétique

Lorsqu'on chauffe le cristal de boracite, au-dessus de 60K il perd sa magnétisation,  $\vec{J}^D$ , (et sa polarisation,  $\vec{P}$ ) (fig.10) : le cristal devient paramagnétique. On note que la phase paramagnétique correspond à la superposition des deux états ferromagnétiques  $\varphi^x$  et  $\varphi^y$ , ce qui entraîne que le GPS est le produit direct de  $m'm2'$ , ou  $2'/m$ , et du groupe binaire constitué de l'identité et de l'inversion du temps, noté  $1'$  avec les symboles de Shubnikov et  $m_t$  avec la notation WPV (réflexion sur le miroir hyperplan que constitue l'espace physique) : le groupe produit s'appelle un groupe gris (\*).

Ainsi la transition de phase ferroïque (13), ferro  $\rightleftharpoons$  paramagnétique, de la boracite qui satisfait à la théorie de LANDAU (14) correspondrait aux relations de groupe à sous-groupe suivantes, dans le superespace  $E^4_{xyzt}$ , s'il n'y avait pas d'autres transitions couplées, telles que ferro  $\rightleftharpoons$  paraélectrique.

ferro magnétique	$\rightleftharpoons$	paramagnétique	symboles
$m'm2'$	$\subset$	$m'm2' \times 1'$	Shubnikov
$2'/m$	$\subset$	$2'/m, 2'/m, 2'/m$	WPV
(groupe polaire, d'ordre 8, de $E^4$ )			

\*  
\*   \*  
\*

---

\* il est constitué pour moitié d'OPS blanches qui forment un sous-groupe d'index 2 et pour moitié d'OPS noires qui forment un sous-ensemble d'index 2.

### 3. Structure des phases incommensurables dans leur superspace

Les phases incommensurables (PI) sont des solides cristallisés de l'espace physique,  $E^3_{xyz}$ , qui présentent une, deux, trois, ... modulations dont la période est dans un rapport irrationnel avec celles du groupe de translation de la structure moyenne du cristal non modulé appelée encore structure de base. Les PI ne sont donc plus des cristaux dans l'espace physique, alors que ce sont des cristaux dans leur superspace, ainsi que nous le montrons d'abord sur un exemple simple.

#### 3.1. Phase incommensurable de l'espace physique $E^1_x$ ; représentation dans son superspace $E^2_{xt}$

Soit un cristal de  $E^1_x$ , (fig. 12.a) dont la maille est  $\vec{a}$  et le groupe spatial pm. En effet les éléments de son groupe de translation étant les vecteurs  $u\vec{a}$ ,  $u \in Z$ , la lettre p précise que la maille est primitive (un seul vecteur  $u\vec{a}$  par maille); quant au GPS, m, d'ordre 2, on l'a défini § 1.4. On appelle ce cristal la structure de base (SB) et la densité de matière  $\rho$  est égale à  $\rho(x) = \sum_u \delta(x-u\vec{a})$  où  $\delta$  est une distribution de DIRAC.

A une température inférieure à  $T_I$  (§ 3.4) apparaît une modulation incommensurable spontanée d'amplitude  $\alpha_0$  et de vecteur d'onde  $q$  ( $q = 2\pi/\lambda$ ) tel que  $\lambda/a$  est IRRATIONNEL. La densité de matière devient :

$$\rho(x) = \sum_u \delta[x - (ua - \alpha_0 \sin 2\pi ua q)] \quad \text{avec } u \in Z$$

et cet objet infini n'est plus un cristal dans  $E^1_x$ , car il n'est plus conservé globalement par un groupe de translation, (§ 1.2. et fig. 1.b).

On remarque que si le rapport  $\lambda/a$  est rationnel, par exemple égal à 3, la phase modulée est encore un cristal dans  $E^1_x$  (avec la maille  $3\vec{a}$ ). C'est alors une surstructure commensurable de la SB (structure de base) qui apparaît d'ailleurs aux plus basses températures lorsque la modulation devient commensurable en s'ancrant sur le réseau cristallin de la SB.

Lorsque des rayons X, électrons ou neutrons sont diffractés par la PI (phase incommensurable) l'amplitude de l'onde diffractée en un point de l'espace réciproque (dual)  $E^{1*}_{x^*}$  repéré par le vecteur  $\vec{k} = x^*\vec{a}^*$  où  $a^* = 1/a$  vaut

$$\mathcal{A}(k) = f(k) \exp 2\pi i k (ua + \alpha_0 \sin ua q)$$

où  $f$  est le facteur de diffusion de l'atome ou le facteur de structure de la maille (20), soit :

$$A(k) \sim \sum_{p=-\infty}^{+\infty} f(k) J_m(k \alpha_0) \sum_u \exp 2\pi i u a (k + m q)$$

où  $J_m$  est la fonction de Bessel d'ordre  $m$  de première espèce  
d'où l'intensité diffractée :

$$I(k) = A A^* f(k)^2 \sum_{m=-\infty}^{+\infty} |J_m(k \alpha_0)|^2 \delta(k - m q - h a^*)$$

où  $h \in Z$  est l'indice de MILLER caractérisant les taches de BRAGG et  $m \in Z$  l'indice de MILLER caractérisant les taches satellites de diffraction dues à la modulation (fig. 13); en effet le diagramme de diffraction du cristal de la figure 12.a comporterait seulement les taches de BRAGG.

L'existence de deux indices de MILLER conduit à un réseau réciproque (20) à deux dimensions dans le superspace réciproque  $E^{2*}$  (fig.13) dont la projection sur  $E^{1*}$  donne le diagramme diffraction "expérimental" de l'espace physique, d'où les deux vecteurs de la base du réseau réciproque

$$\boxed{\vec{a}^* \text{ et } \vec{d}^* = \vec{d}^* + \vec{q}^* \text{ avec } \vec{d}^* \perp E^{1*} \text{ et } \vec{q}^* = \vec{q}}$$

où  $\vec{d}^*$  est un vecteur de longueur arbitraire porté par la normale à l'espace  $E^{1*}$ .

La figure de diffraction dans le superspace réciproque  $E^{2*}$  (fig.13) est le résultat de la diffraction de rayons X, ..... par le cristal PI dans son superspace  $E^{2*}_{xt}$ , (21); la maille est donc la base duale de  $(\vec{a}^*, \vec{d}^*)$ , soit :

$$\boxed{\vec{a}' = \vec{a} - q\vec{d}' \text{ et } \vec{d}'}$$

où  $\vec{d}'$  est le vecteur de longueur  $1/d^*$ , orthogonal à l'espace physique  $E^1$  (fig. 12.c). La densité de matière du cristal dans son superspace est :

$$\rho(x) = \sum_u \delta[x - (ua - \alpha_0 \sin 2\pi \{uaq + t/d\})]$$
, avec  $u \in Z$   
dont la section par l'espace physique  $E^1_x$  ( $t=0$ ) est égale à la densité de matière de la PI de  $E^1_x$ .

Notons que la propagation d'un phonon (20) longitudinal (de fréquence  $\omega = 1/d$ ) et de vecteur d'onde  $q$ ) dans la SB de  $E^1_x$  (fig. 12.a) est une représentation physique du cristal PI dans  $E^2_{xt}$ .

En généralisant ce modèle on voit que les PI de l'espace physique  $E^3_{xyz}$  sont des cristaux dans leur superspace  $E^4, E^5, \dots$ . C'est donc dans le superspace qu'on détermine leur structure à partir du diagramme de diffraction expérimental (21) (22) : on fait ensuite la section du cristal de  $E^4$ , par l'espace physique pour obtenir la structure du "non cristal" PI dans  $E^3_{xyz}$ .

On illustre maintenant ces notions par deux exemples concrets.

### 3.2. Phase mono incommensurable du carbonate de sodium, cristal dans son superspace $E^4$

La SB de  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  dans  $E^3_{xyz}$  est monoclinique avec le GPS 2/m, et une maille prisme droit à base parallélogramme ( $\vec{a}, \vec{c}$ ) dont les génératrices sont parallèles au vecteur  $\vec{b}$ . La base duale de l'espace réciproque  $E^{3*}$  est  $(\vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*)$  où le vecteur  $\vec{b}^*$  est orthogonal au parallélogramme  $(\vec{a}^*, \vec{c}^*)$ .

Le diagramme expérimental de diffraction de la variété  $\gamma$  du carbonate présente des taches de BRAGG (hkl) et une famille de rangées parallèles de taches satellites de vecteur  $\vec{q}^* = 0,182 \vec{a}^* + 0,318 \vec{c}^*$  où on observe jusqu'à 4 satellites de part et d'autre de chaque tache de BRAGG (23).  $\gamma\text{Na}_2\text{CO}_3$  est donc une PI avec un diagramme de diffraction à quatre indices de MILLER (hkml) dans un réseau réciproque de  $E^{4*}$  obtenu en généralisant la figure 13

$$\vec{H} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* + m(\vec{d}^* + \vec{q}^*)$$

où  $\vec{d}^*$  est un vecteur de longueur arbitraire orthogonal à  $E^{3*}$ .

La maille du cristal PI dans son superspace  $E^4_{xyzt}$  est donc la base duale de celle du réseau de diffraction, soit :

$\vec{a} - 0,182\vec{d}, \vec{b}, \vec{c} - 0,318\vec{d}, \vec{d}$
--

où  $\vec{d}$  est le vecteur de longueur  $1/d^*$ , orthogonal à l'espace physique  $E^3_{xyz}$ .

Ce type de maille est celui de la famille cristalline n°II de  $E^4$  : hyperprisme droit à base parallélépipède oblique, le vecteur  $\vec{b}$  étant parallèle aux huit génératrices de l'hyperprisme.

Les vecteurs  $\vec{a}, \vec{c}$  et  $\vec{d}$  intervenant en combinaisons linéaires sont transformés de façon identique par les OPS, éléments du GPS du cristal, d'où les quatre OPS du GPS

de  $E^4$  engendrés par les quatre éléments (1, 2, m et  $\bar{1}$ ) du GPS 2/m de la SB dans  $E^3$  (§ 1.1)

$$1 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad \bar{1}_{xzt} = \begin{vmatrix} \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{1} \end{vmatrix} \quad m_y = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad \bar{1}_4 = \begin{vmatrix} \bar{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{1} \end{vmatrix}$$

Le GPS du cristal PI dans  $E^4$  est donc m  $\perp$  1, holohédrie de la famille n°II (5) (7). Le symbole du GSS du cristal se trouve en (6). La structure a été déterminée dans  $E^4$  d'où sa section par l'espace physique (23).

### 3.3. Phase tri incommensurable d'une wüstite, cristal dans son superspace $E^6$

Les oxydes ferreux dérivent de la structure idéale FeO, analogue à celle du chlorure de sodium NaCl. Leur SB dans  $E^3_{xyz}$  est donc cubique à faces centrées (F) et son GPS, d'ordre 48, est 4/m  $\bar{3}$  2/m (§ 1.6)  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  sont les trois côtés du cube. La formule chimique des oxydes ferreux réels, nommés wüstites, est  $Fe_{1-Z}$  où Z varie de façon continue dans l'intervalle (0,045 - 0,18) (24). Dans la wüstite la plus simple ( $W_1$  à l'état trempé) les défauts ponctuels (lacunes en  $Fe^{2+}$ ,  $Fe^{3+}$  interstitiels, ....) se groupent en amas identiques qui s'organisent de façon périodique le long des trois arêtes du cube avec une longueur d'onde  $\lambda$  telle que  $\lambda/a$  soit irrationnel (sauf pour quelques valeurs particulières de Z) (25). On a donc une PI avec un diagramme de diffraction expérimental à six indices de MILLER, comportant trois familles de rangées parallèles de taches satellites, de vecteurs  $q\vec{a}_1^*, q\vec{a}_2^*$  et  $q\vec{a}_3^*$  dans  $E^{3*}$ , soit, dans le superspace réciproque  $E^{6*}$  :

$$\vec{H} = h\vec{a}_1^* + k\vec{a}_2^* + l\vec{a}_3^* + m(\vec{d}_1^* + q\vec{a}_1^*) + n(\vec{d}_2^* + q\vec{a}_2^*) + p(\vec{d}_3^* + q\vec{a}_3^*)$$

où  $\vec{d}_1^*, \vec{d}_2^*, \vec{d}_3^*$  sont les trois côtés d'un cube de l'espace à trois dimensions  $E^{3*}$  supplémentaire orthogonal à  $E^{3*}$ .

La maille du cristal PI dans son superspace  $E^6$  est donc la base duale de celle du réseau de diffraction dans  $E^{6*}$ , soit :

$$\begin{aligned} \vec{a}'_1 &= \vec{a}_1 - q\vec{d}_1 & \vec{d}_1 \\ \vec{a}'_2 &= \vec{a}_2 - q\vec{d}_2 & \vec{d}_2 \\ \vec{a}'_3 &= \vec{a}_3 - q\vec{d}_3 & \vec{d}_3 \end{aligned} \quad \text{avec } d = 1/d^*$$

où  $\vec{d}_1, \vec{d}_2, \vec{d}_3$  sont les trois côtés d'un cube de l'espace à trois dimensions  $E^{3*}_{tuv}$  supplémentaire orthogonal à l'espace physique  $E^3_{xyz}$ .

Il s'agit donc de la famille cristalline LXVI de  $E^6$  (11) : dicubes monocliniques ( $\vec{a}'_i$  et  $\vec{d}'_i$  avec  $i = 1, 2, 3$ ). En effet les trois vecteurs  $\vec{a}'_i$  forment une base orthonormée : ils ont la même longueur ( $a\sqrt{1+q^2}$ ), sont orthogonaux entre eux et chaque vecteur  $\vec{a}'_i$  fait le même angle  $\theta$  ( $\text{tg}\theta = qd/a$ ) avec le vecteur  $\vec{d}'_i$  correspondant (fig. 14).

Les vecteurs  $\vec{a}'_i$ ,  $\vec{d}'_i$  et  $\vec{a}''_i$  intervenant en combinaisons linéaires sont transformés de façon identique par les OPS, éléments du GPS du cristal PI de  $E^6$  :

$$E^6_{xyztuv} = E^3_{xyz} \oplus E^3_{tuv} = E^3_{x'y'z'} \oplus E^3_{tuv}$$

où  $x'y'z'$  sont les axes des vecteurs  $\vec{a}'_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ).

Chacun des 48 éléments du GPS correspond à une matrice du type

$$\begin{vmatrix} A_{3 \times 3} & 0 \\ 0 & A_{3 \times 3} \end{vmatrix}$$

où les deux matrices orthogonales  $A_{3 \times 3}$  traduisent le même élément du GPS du cube ( $4/m \bar{3} 2/m$ ) dans  $E^3_{tuv}$  et  $E^3_{x'y'z'}$ . Par exemple si  $A_{3 \times 3} = 4^1$  l'OPS de  $E^6$  est  $4^1_{xy} 4^1_{tu}$  et (\*) si  $A_{3 \times 3} = \bar{3}^1$  l'OPS de  $E^6$  est  $6^5_{\alpha\beta} 6^5_{\xi\epsilon} 2_{\gamma\eta}$  soit une triple rotation du type 662 ( $\eta$  est l'axe support d'une des 4 diagonales du cube  $tuv$ ,  $\xi$  et  $\epsilon$  étant orthogonaux à  $\eta$  etc ...); si  $A_{3 \times 3} = m$ , l'OPS de  $E^6$  est 2 et si  $A_{3 \times 3} = 2$  l'OPS de  $E^6$  est  $\bar{1}_4$  (§1.1).

Le symbole WPV du GPS, d'ordre 48, de la wüstite  $W_1$  dans  $E^6$  est donc (\*\*):  $4_4/2, 662, \bar{1}_4/2$ , holohédrie de la famille cristalline LXVI qui contient 9 groupes de BRAVAIS (11) (26) dont les six premiers correspondent à l'holohédrie.

Un groupe de BRAVAIS correspond à un GPS d'une famille cristalline *et* à un type de groupe de translation cristallographique, T, dont les éléments t contenus dans une maille de BRAVAIS (par exemple dicubes monocliniques) ont leur origine au coin

$$* \bar{3}^1_{xy} = 3^1_{xy} 2_{xy} m_z = 6^5_{xy} m_z ; \bar{3}^1_{tu} = 3^1_{tu} 2_{tu} m_v = 6^5_{tu} m_v ; m_z m_v = 2_{zv}$$

$6^5$  signifie un sixième de tour dans le sens négatif, cf aussi § 1.6 [ $\bar{3}_{xv} = 3_{xv} \bar{1}_{xvz}$ ]

\*\* on précise les supports géométriques, par exemple  $4_4/2 : 4_{xy} 4_{tu} 2_{zv} ; \bar{1}_4/2 : \bar{1}_4_{x+y,z,t+u,v} 2_{x-y,t-u}$  (§2.1) déplacements de CLIFFORD (1) (7) (17)  $4_{xy} 4_{tu}$  au lieu de  $4_{x'y'}$   $4_{tu}$  etc ....

de la maille et leurs extrémités sur des noeuds qu'on précise à l'aide de leurs coordonnées relatives ( $1/2 = a'/2$  ou  $d/2$ ).

A titre d'exemple voici les deux premiers groupes de BRAVAIS de la famille LXVI de  $E^6$  (25) :

n°1 primitif P (000 000) : un noeud par maille

n°2 cube primitif (tuv) cube à faces centrées ( $x'y'z'$ ) monocliniques P F (000 000)  $(000 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$   $(000 \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$   $(000 \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$  : quatre noeuds par maille.

Le second est celui de la wüstite  $W_1$  tri incommensurable dans  $E^6$ , car sa SB est cubique à faces centrées dans l'espace physique.

Le symbole WPV du GSS de la wüstite W est donc

$$\boxed{P \perp F \quad \frac{4}{2}, 6, 6, 2, \frac{1}{2}}_4$$

YAMAMOTO en a déterminé la structure dans  $E^6$  ainsi que sa section dans l'espace physique (27)

### 3.4. La transition de phase $T_I$ : ferro (MI) para incommensurable (SB)

L'un de nous et E.F. BERTAUT ont montré que la transition  $T_I$  entre la SB et sa PI (mono incommensurable), dans leur super espace  $E^4$  est une transition de phase ferroïque où le paramètre d'ordre est l'amplitude,  $\alpha_0$ , de la modulation (§ 3.1 et (28)).

En effet la SB est une PI où l'amplitude de la modulation est nulle ( $\alpha_0 = 0$ ). La SB est donc la superposition de deux états ferro (PI mono incommensurables) déphasés de l'angle  $\pi$ , qu'on schématise sur la figure 12' dans le cas particulier où l'espace physique est à une dimension, (§ 3.1) et analogie avec les transitions ferroïques électriques (§ 1.6) et magnétiques (§ 2.4).

Dans tous les cas la superposition correspond au produit du GPS de la PI dans son superespace  $E^4$  par le groupe binaire,  $m_t$ , composé de l'identité et de la réflexion sur le miroir hyperplan, que constitue l'espace physique. Le GPS de la SB dans son superespace  $E^4$  est donc un groupe gris comme en magnétisme, (§ 2.4), comme on le vérifie sur le cas particulier du carbonate de sodium (§ 3.2).

Le GPS de la SB de  $\gamma$   $\text{Na}_2\text{CO}_3$  dans  $E^3$  dans  $E^3$  est  $2/m$  (auquel correspond le GPS polaire  $2/m$  de  $E^4$  (§ 1.6)) et le GPS de la PI dans  $E^4$  est  $m \perp \bar{1}$ . Le GPS gris de la SB dans  $E^4$  est donc le sur groupe minimum des deux précédents, soit :

$$2 \perp 2, m, m = (m \perp \bar{1}) \times m_z = (2/m) \times m_z$$

holohédrie de la famille cristalline IV de  $E^4$  : parallélogramme rectangle orthogonaux.

On généralise en outre la démonstration du paragraphe 1.6 dans le superspace avec la table de caractères du GPS de la phase para dans  $E^4$  :  $2 \perp 2, m, m$

	1	$\bar{1}_{xzt}$	$m_y$	$\bar{1}_4$	$m_t$	$2_{xz}$	$2_{yt}$	$\bar{1}_{xyz}$	BASES DES RI
$\Gamma_1$	1	1	1	1	1	1	1	1	SB, $x^2, y^2, z^2, t^2, xz$
$\Gamma_2$	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	y
$\Gamma_3$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	x, z
$\Gamma_4$	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	xy, yz
$\Gamma_5$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	PI, xt, zt
$\Gamma_6$	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	
$\Gamma_7$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	t
$\Gamma_8$	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	yt

La phase para (SB) appartient à la RI triviale ( $\Gamma_1$ ) alors que la phase ferro (PI) appartient à la RI  $\Gamma_5$  et la transition est permise à cause des composantes  $\epsilon_{xt}$  et  $\epsilon_{zt}$  du tenseur des déformations (de rang 2) dans le superspace  $E^4$ . Ceci signifie que les axes x, z et t se transforment de façon identique comme on le voit dans les quatre matrices 4x4 du paragraphe 3.2.

\*  
\*      \*

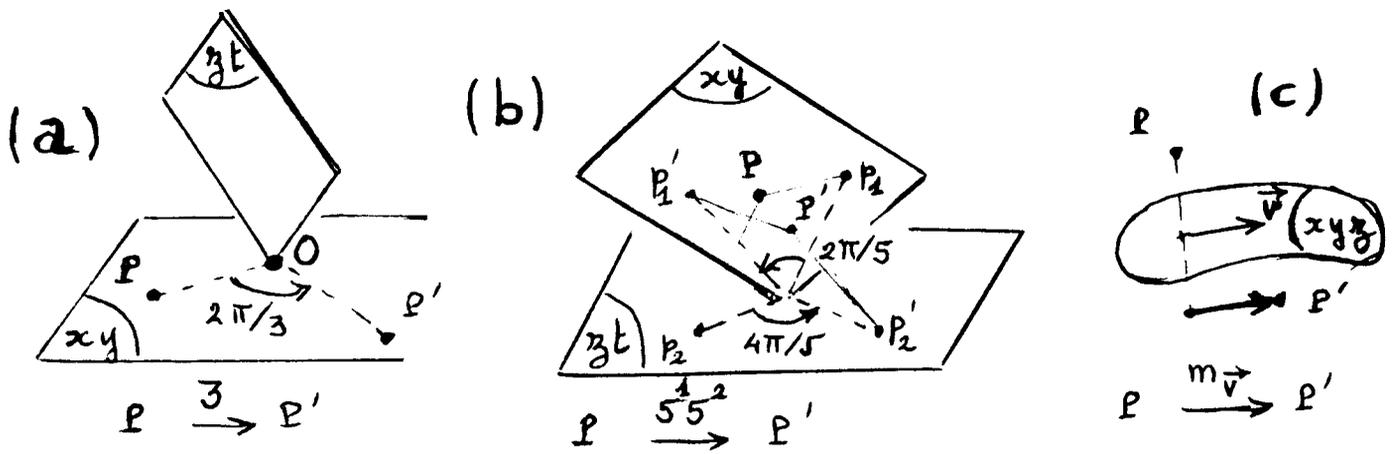


Figure 1 - OPS et OSS de  $E^4$  (a) rotation simple 3; (b) double rotation 55; (c) glissymétrie  $m_{\vec{v}}$ .

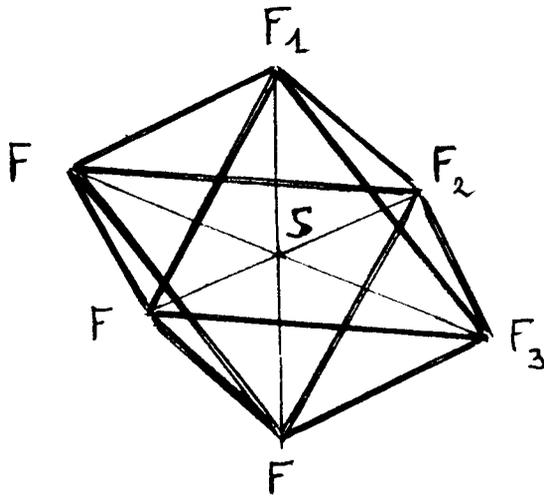


Figure 3 - ordre du groupe de symétrie de la molécule  $SF_6$  (octaèdre régulier)

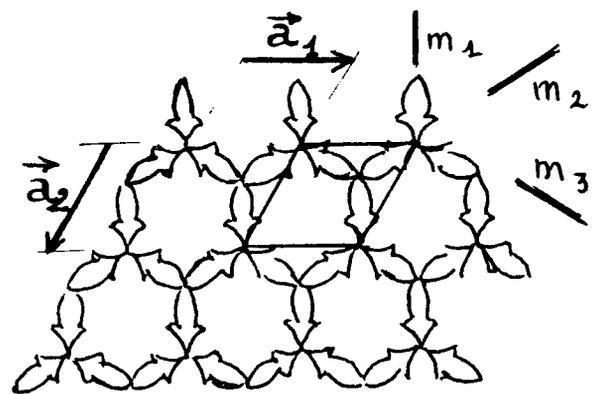


Figure 2 - cristal hexagone de  $E^2$   
G :  $p31m$

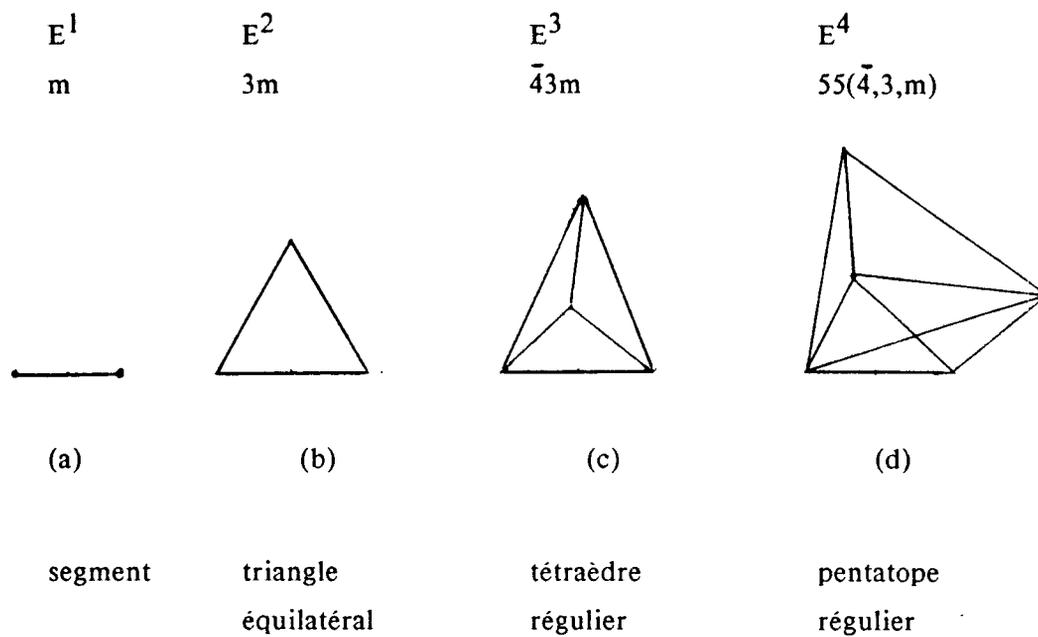


Figure 4 - symboles géométriques des GPS des simplexes réguliers de  $E^n$

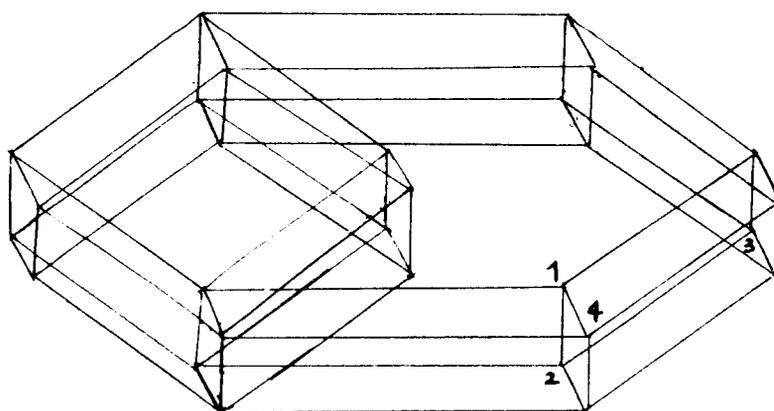


Figure 5 - maille du cristal  
carré hexagone orthogonaux de  $E^4$

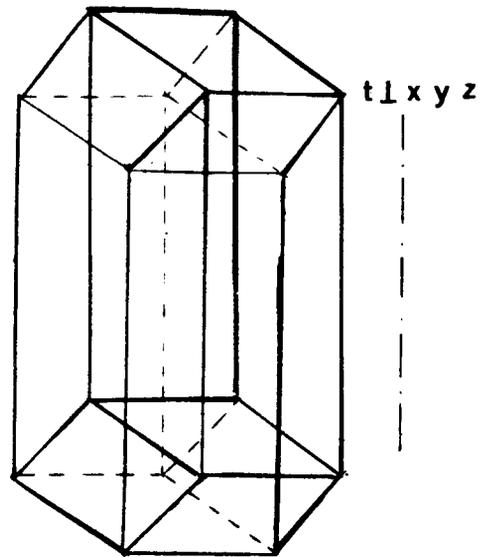
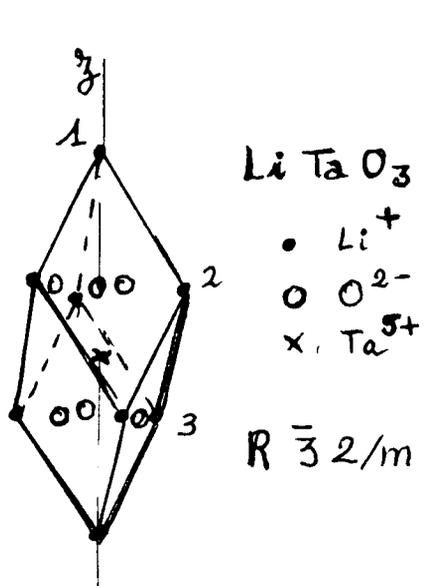


Figure 6 - structure de  $\text{LiTaO}_3$

Figure 7 - hyperprisme droit à base cube



Figure 8 - dessin périodique (infini) quadricolore  
 "aux poissons" de M.C. ESCHER

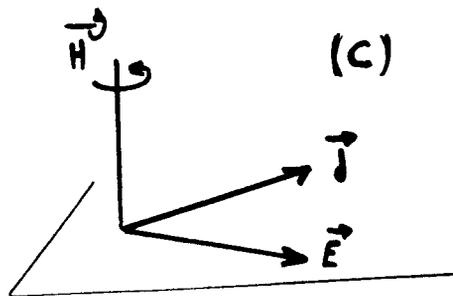
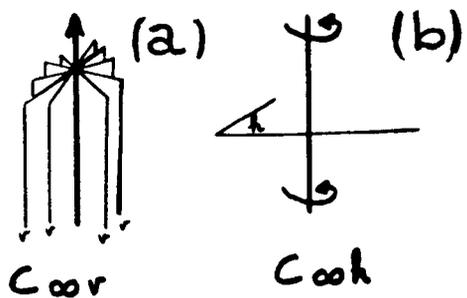


Figure 9-a. GPS du vecteur polaire  
 b. GPS du vecteur axial  
 c. effet HALL

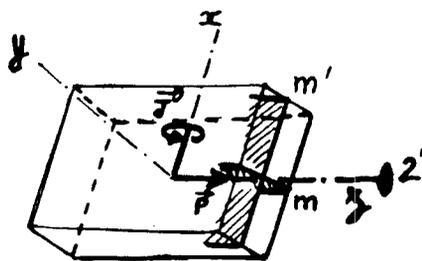


Figure 10 - état ferromagnétique (et ferro électrique) d'un cristal de boracite

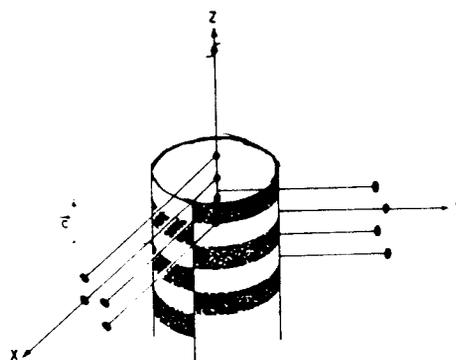


Figure 11 - semi cristal, dim1, de  $E^3$

PHASE INCOMMENSURABLE dans  $E^2$  CRISTAL

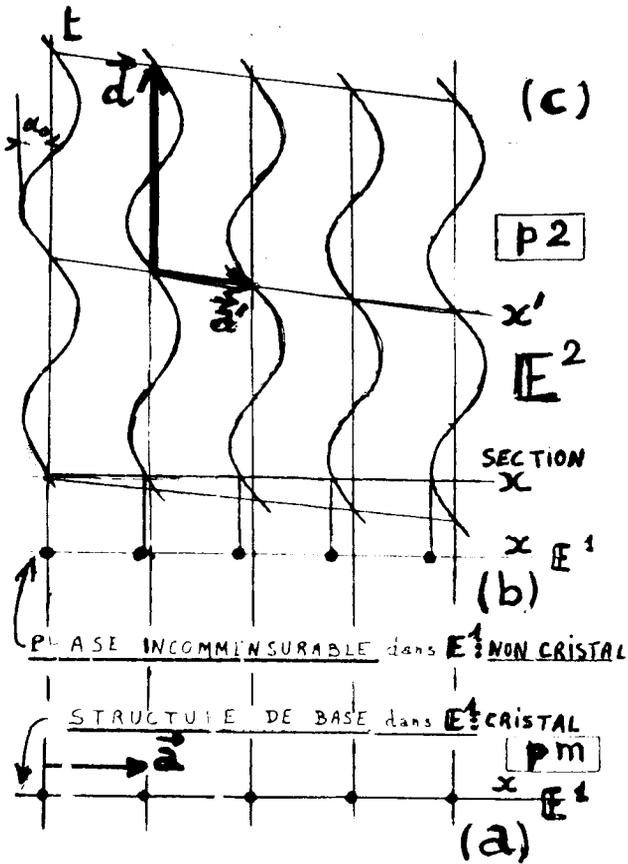


Figure 12 - phase incommensurable dans un espace physique à une dimension et dans son superspace à deux dimensions

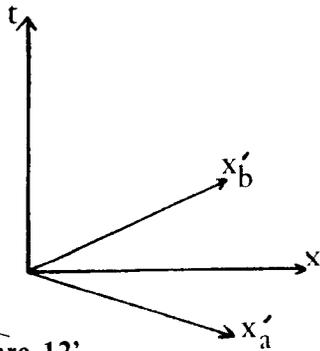


Figure 12'

- $x$  espace physique
- $t$  normale à l'espace physique
- $x'_a$  PI dans le premier état mono-incommensurable
- $x'_b$  PI dans le deuxième état mono-incommensurable (déphasé de l'angle  $\pi$  par rapport au premier)

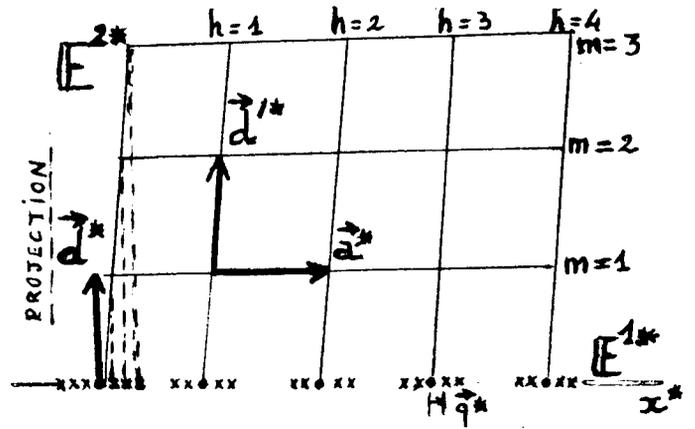


Figure 13 - diagramme de diffraction de la phase incommensurable

- $o$  taches de BRAGG
- $x$  satellites

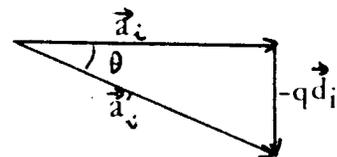


Figure 14

- (1) D. WEIGEL, R. VEYSSEYRE, T. PHAN, J.M. EFFANTIN and Y. BILLIET  
Acta Cryst. A. 40 p.323 (1984)
- (2) D. WEIGEL et J.F. BERAR  
Acta Cryst. A. 34 p.432 (1978)  
D. WEIGEL Algèbre et géométrie cristalline et moléculaire, Masson Paris (1972)
- (3) D. WEIGEL, R. VEYSSEYRE et J.L. CHARON  
C.R. Acad. Sc. Paris 291, B, p.287 (1980)
- (4) R. VEYSSEYRE, Thèse Université Paris VI (1987)
- (5) D. WEIGEL, T. PHAN et R. VEYSSEYRE  
C.R. Acad. Sc. Paris 298, II, 19, p.825 (1984)
- (6) R. VEYSSEYRE, T. PHAN et D. WEIGEL  
C.R. Acad. Sc. Paris 300, II, 2, p.51 (1985)
- (7) D. WEIGEL, T. PHAN and R. VEYSSEYRE  
Acta Cryst. (1987) sous presse
- (8) International Tables for crystallography Vol A T. HAHN  
Reidel Pub. Cy Dordrecht - Boston 1983
- (9) H. WONDRATSCHEK, R. BULOW and J. NEUBUSER  
Acta Cryst A, 27, p.523 (1971)
- (10) W. PLESKEN Match 10, p.97 (1981)
- (11) W. PLESKEN and W. HANRATH Mathematics of computation  
43 n°168, p.573 (1984)
- (12) S.C. ABRAHAMAS et J.L. BERNSTEIN  
J. Phys. Chem. Solids 28 n°9, p.1685 (1967)
- (13) J.C. TOLEDANO J. of solid state Chem 27 p.41 (1979)
- (14) L. LANDAU et E. LIFCHITZ Physique Statistique,  
p.510 Editions MIR, Moscou (1984)
- (15) D. WEIGEL et R. VEYSSEYRE  
C. R. Acad. Sc. Paris 295, II, p.317 (1982)
- (16) Symmetry aspects of M.C. ESCHER'S periodic drawings  
C.H. MAC GILLAVRY, International Union of Crystallography, Utrecht (1976)
- (17) Regular polytopes H.S.M. COXETER, Dover Pub. York (1973)
- (18) E. ASCHER, H. RIEDER, H. SCHMID and H. STOESSEL, J. Appl. Phys.  
USA 37, n°3, p. 1404 (1966)
- (19) The mathematical theory of symmetry in solids. C.J. BRADLEY and  
A.P. CRACKNELL, Clarendon, Oxford (1972)

- (20) Physique de l'état solide, C. KITTEL chap 2 et 4, Dunod (1983)
- (21) D. WEIGEL Acta Cryst. A 39, p. 76 (1983)
- (22) P. SCIAU, D. GREBILLE, J.F. BERAR et J. LAPASSET  
Mat. Res. Bul. 21, p.843 (1986)
- (23) W. van AALST, J den HOLLANDER, W.J.A. PETERSE and P.M. de WOLF  
Acta Cryst B 32, p. 47 (1976)
- (24) P. VALLET et C. CAREL Mat. Res. Bull. 14, p.1181 (1979)
- (25) D. WEIGEL, R. VEYSSEYRE et C. CAREL  
C.R. Acad. Sc. Paris, à paraître 1987
- (26) W. PLESKEN, Communication personnelle
- (27) A. YAMAMOTO, Acta cryst. B. 38, p.1451 (1982)
- (28) D. WEIGEL et E.F. BERTAUT, C.R. Acad. Sc. Paris 303, II, n°5, p.341 (1986)