



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي



Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

Université Mohamed Khider –Biskra

جامعة محمد خيضر بسكرة

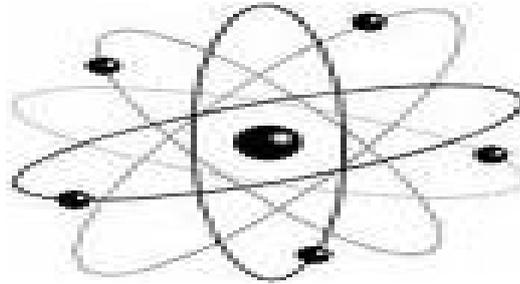
faculte des sciences exactes.des sciences de la nature et de la vie.

كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة

Departement des sciences de la matiere.

قسم علوم المادة

المرجع:.....: Réf. :



Polycopie de Symétries Et Théories Des Groupes En Physique.

2^{eme} semestre 2021/2022

M1 (Ph): M. Condensée

Lakel Abdelghani
Université M. Khider de Biskra
Département des sciences de la matière

Avant-propos

La cristallographie est la science des cristaux. Elle concerne la forme extérieure, la structure interne, la croissance et les propriétés physicochimiques de la matière cristallisée. Le mot « cristal » d'origine grecque (krustallas) signifie « solidifié par le froid ». Les grecs pensaient que le cristal de roche, le quartz, provenait de la transformation par le froid de la glace. À l'origine, la cristallographie, était purement descriptive et constituait une branche de la minéralogie. Ultérieurement, on a constaté que l'état cristallin n'était pas le fait des seuls minéraux et que c'était un état de la matière très courant. La cristallographie est également l'étude des relations étroites qui relient les formes des cristaux et leurs propriétés physiques et la façon dont les atomes sont arrangés à l'échelle microscopique. Il est destiné à des étudiants de second cycle en physique, chimie et géologie. Le contenu de ce manuscrit résume tout ce qu'un étudiant devrait connaître sur la matière cristalline avant d'aborder l'étude des autres disciplines des sciences des matériaux (comme l'optique cristalline, la physique atomique, les défauts dans les matériaux et autres). Il comprend six chapitres. Le premier chapitre décrit de façon, simple, claire et facile la notion de la symétrie qui caractérise les matériaux cristallins. Dans le quel, les différentes opérations de symétrie ont été décrites, que ce soit pour une figure finie (la maille) ou une figure périodique infinie (le cristal). Quelques notions sur les 32 groupes ponctuels et les 230 groupes spatiaux ont été également données.

Le deuxième chapitre a été réservé à l'utilisation des groupes ponctuels de symétrie pour la prédiction des propriétés physiques des matériaux, notion indispensable pour l'étude des symétries à l'échelle macroscopique permet de discuter les caractéristiques d'anisotropie des propriétés physiques dans un matériau. A l'échelle microscopique, l'identification des symétries simplifie la description structurale des assemblées d'atomes.

Est consacré à l'exposé de quelques notions sur les groupes infinis (groupes contenant un nombre infini d'éléments) et tout particulièrement les groupes ayant la puissance du continu (ensembles non dénombrables) sont données au troisième chapitre.

Une partie de ce chapitre est consacré à l'exposé de quelques notions sur Rôle des symétries en physique subatomique sont donnés dans le quatrième chapitre.

Le chapitre cinq décrit de réduire à un nombre minimum d'axiomes simples les hypothèses qui sont à la base de la mécanique quantique.

Le dernier chapitre (chapitre six), nous avons donné une description générale sur les rayonnements ionisants et leurs interactions avec la matière, et les particules chargées lourdes (les protons, les particules α , et les ions lourdes) qui déposent l'énergie au milieu par une seule étape, par le processus d'interaction coulombienne entre la particule incidente et les électrons orbitales.

Chaque chapitre a été consolidé par une série d'exercices pour approfondir la compréhension et tester le degré de maîtrise de chaque notion présentée auparavant.

Symétries et théories des groupes en physique

Programme présentiel :

- 1– formalisme de base de la théorie des groupes de rotation, symétries du « papier peint » à deux dimensions.
- 2 –Utilisation des groupes ponctuels de symétrie pour la prédiction des propriétés physiques des matériaux.
- 3 –Introduction aux groupes continus de Lie.
- 4 –Rôle des symétries en physique subatomique.
- 5 –les symétries discrètes C (conjugaison de charge), P (parité) et T (inversion du temps).
- 6–Interaction des particules lourdes chargées avec la matière.

| | |
|---------------------------|---|
| Avant- propos..... | 1 |
| Programme présentiel..... | 2 |
| Table des matières..... | 3 |
| Introduction..... | 6 |

Chapitre 1:

| | |
|---|-----------|
| Formalisme de base de la théorie des groupes de rotation, symétries du « papier peint » à deux dimensions..... | 8 |
| Introduction..... | 9 |
| II - Symétrie des figures finies et opérations de symétrie :..... | 9 |
| II - 1 - La rotation :..... | 9 |
| II - 2 - La Réflexion:..... | 10 |
| II - 3 - L'inversion:..... | 10 |
| II - 4 - La translation pure:..... | 13 |
| III - Symétries d'orientation :..... | 14 |
| III – 1 - Rotation (rotation propre) :..... | 15 |
| III – 2 – Inversion :..... | 15 |
| III - 3 - Roto-inversion (rotation impropre)..... | 16 |
| III - 4 – Réflexion :..... | 16 |
| Série de TD N° = 1..... | 17 |

Chapitre 2:

| | |
|---|-----------|
| Utilisation des groupes ponctuels de symétrie pour la prédiction des propriétés physiques des matériaux..... | 18 |
| I - Classes de Laue:..... | 19 |
| II - Construction du groupe d'espace d'un cristal :..... | 22 |
| III - Utilisation des tables inter nationales..... | 25 |
| IV - Propriétés physiques :..... | 31 |
| IV – 1- Cas des tenseurs de propriétés physiques d'ordre 2 :..... | 31 |
| IV – 2 - Symétrie et anisotropie des propriétés physiques :..... | 32 |
| IV – 2 - 1- <u>Représentation tensorielle des propriétés physiques</u> :..... | 32 |
| IV – 2 – 2 - <u>Loi de Curie appliquée aux tenseurs</u> :..... | 32 |
| CONCLUSIONS..... | 34 |
| Série de TD N° = 2..... | 35 |

Chapitre 3:

| | |
|--|----|
| Introduction aux groupes continus de Lie : | 36 |
| I - Propriétés générales | 37 |
| I - 1- <u>Les groupes continus</u> | 37 |
| I – 1 - 1- <i>Définitions :</i> | 37 |
| II - Transformations continues, générateurs infinitésimaux | 38 |
| II – 1 - <u>Groupes des translations R, R^d</u> | 38 |
| II – 2 - <u>Groupe des phases $U(1)$</u> | 39 |
| II – 3 - <u>Groupe de rotation à deux dimensions $SO(2)$</u> | 39 |
| II – 4 - <u>Groupe de rotation à trois dimensions $SO(3)$</u> | 41 |
| II – 4 - 1 - <i>Groupe de Lie, algèbre de Lie, et leur dimension</i> | 41 |
| II – 4 - 3 - <i>Transformations infinitésimales, algèbres de Lie</i> | 41 |
| II – 4 - 2 - <i>Dimension d'une algèbre de Lie</i> | 42 |
| Série de TD N° = 3 | 44 |

Chapitre 4:

| | |
|--|----|
| Rôle des symétries en physique subatomique | 45 |
| I - Introduction : | 46 |
| II – C, P et T | 46 |
| II – 1 – <u>La parité, ou inversion de l'espace (P)</u> | 46 |
| II – 2 – <u>Rotations et pseudo – rotations</u> | 47 |
| II – 3 – <u>Scalars, pseudo-scalaires, vecteurs polaires et axiaux</u> | 47 |
| II – 3 – <u>Parité du champ de Dirac</u> | 48 |
| II – 4 – Composantes droite et gauche d'un spineur de Dirac..... | 49 |
| III - L'inversion du temps (T) | 50 |
| IV - Théorème CPT | 51 |
| Série de T D N° = 4 | 53 |

Chapitre 5:

Les symétries discrètes C (conjugaison de charge), P (parité) et T

| | |
|---|----|
| (inversion du temps) | 54 |
| I - Théorème de Wigner | 55 |
| I – 1 - <u>Théorème de Wigner</u> : | 55 |
| I – 2 - <u>Invariance d'un système quantique</u> : | 56 |
| II - Covariance des grandeurs et invariance des lois de la physique | 58 |
| III - Symétries discrètes en physique quantique : parité, renversement du temps. | 59 |
| III – 1 - <u>Transformation d'un état quantique sous l'effet de la parité</u> | 59 |
| VI - SYMETRIES DISCRETES : P, C, T | 60 |
| IV - MOLECULE DIATOMIQUE : | 60 |
| Série de TD N° = 5..... | 61 |

Chapitre 6:

| | |
|--|----|
| Interaction des particules lourdes chargées avec la matière : | 62 |
| I - INTRODUCTION : | 63 |
| II - Rayonnements directement ionisants (Particules chargées) : | 63 |
| III -1 - <u>Caractéristiques de l'interaction</u> :..... | 63 |
| III -1 – 1- <u>Pouvoir d'arrêt</u> : | 63 |
| III - 1 – 2 - <u>Pouvoir d'arrêt par collision</u> :..... | 63 |
| III - 1 – 3 - <u>Pouvoir d'arrêt par freinage</u> : | 63 |
| III - 2 - <u>Transfert d'énergie linéaire(TEL)</u> : | 64 |
| III – 3 - <u>Densité linéique d'ionisation(DLI)</u> : | 64 |
| III – 4 - <u>Le parcours</u> : | 64 |
| VI - Forme des distributions | 69 |
| Série de TD N° = 6 | 71 |
| Références | 72 |

Introduction

Toutes les combinaisons possibles entre les 7 systèmes cristallins avec les 4 modes de réseaux (présence des atomes) aboutissant aux 14 réseaux de Bravais. Voici ces 14 types de réseaux (Figure 2).

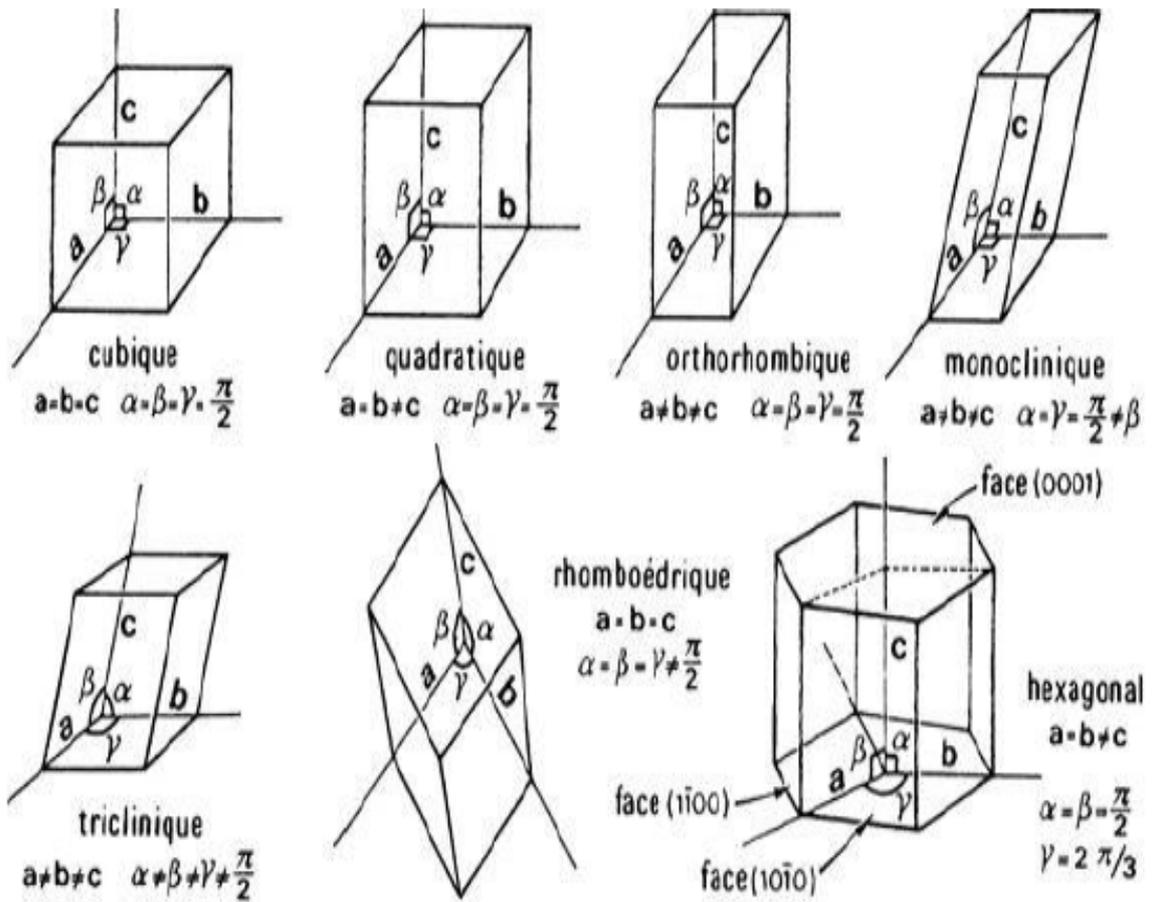


Figure 1: Les 7 systèmes cristallins

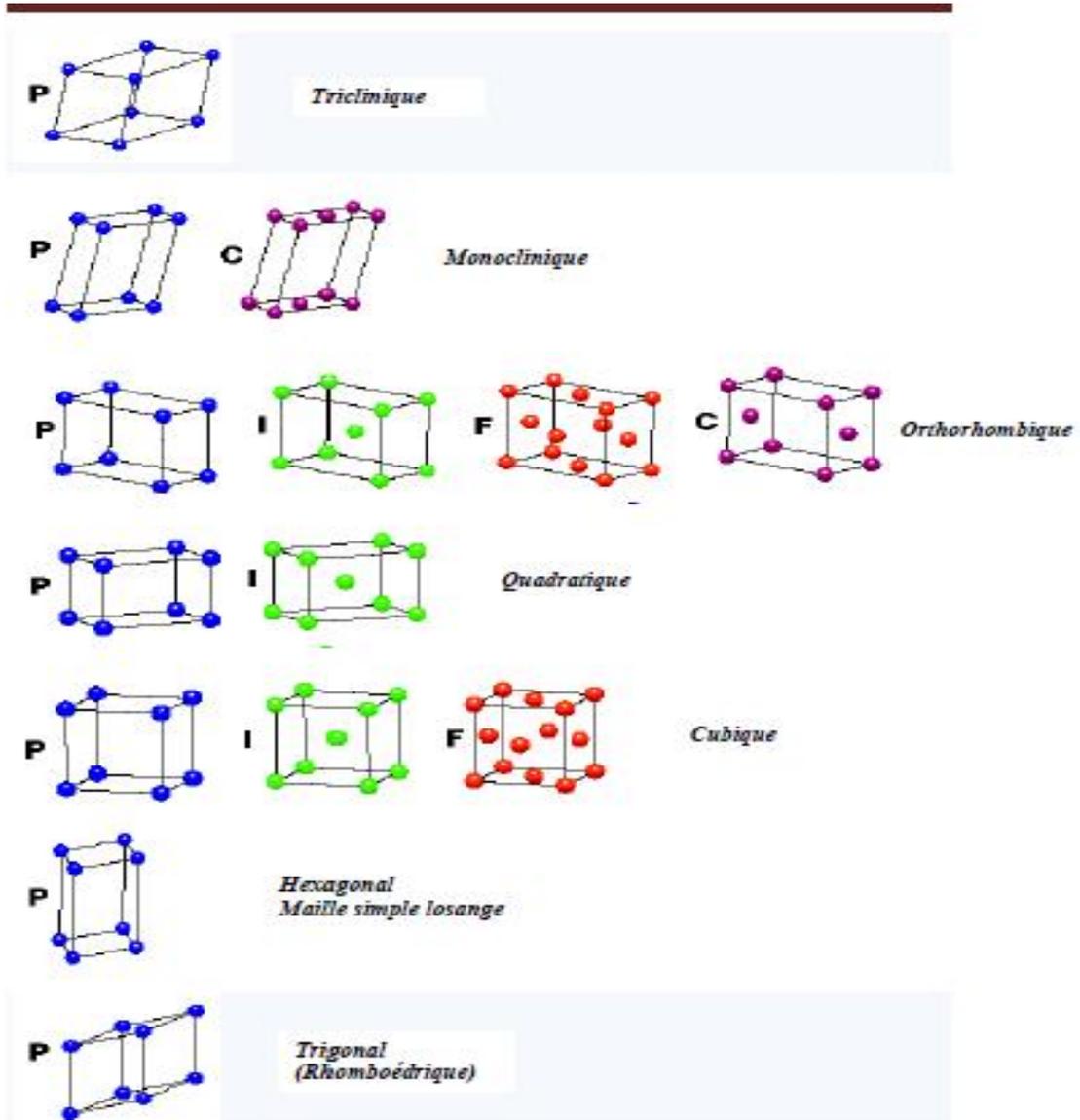


Figure 2: Les 14 réseaux de Bravais

Chapitre 1:

**Formalisme de base de la théorie des groupes de rotation, symétries du « papier peint »
à deux dimensions**

I- Introduction :

Les différentes classes de symétrie (groupes ponctuels) sont représentés par des symboles Internationaux appelés symboles d'Hermann-Mauguin. Ces symboles permettent de Retrouver l'ensemble des opérations de symétrie constituant la classe (groupe).

Les seuls axes de symétrie compatibles avec la périodicité d'un réseau cristallin sont les axe net \bar{n} suivants 1,2,3,4,6 et $\bar{1}, \bar{2} (m), \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$.

Les différentes associations possibles entre les opérateurs de symétrie ponctuelle, conduisent à l'établissement de 32 groupes ponctuels de symétrie ou 32 classes de symétrie répartis comme suit:

- 5 groupes cycliques n: 1,2,3,4,6.
- 5 groupes cycliques \bar{n} : $\bar{1}, \bar{2}(m), \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$.
- 6 groupes ne combinant que les axes directs: 222,322,422,622,233,432.
- 16 groupes ne combinant que les axes directs: 2/m, 4/m, 6/m, mm2, 3mm, 4mm, 6mm, $\bar{3}2m$,
- $\bar{4}2m, \bar{6}2m, \bar{4}3m, mmm, 4/m\bar{3}m, 6/mmm, m\bar{3}, m\bar{3}m$.

Les symboles d'Hermann-Mauguin sont des symboles orientés: l'orientation de chaque élément.

De symétrie peut se lire à partir du symbole, en sachant que dans chaque système cristallin les directions de symétrie son données dans un ordre conventionnel.

La matière cristallisée présente dans sa structure et dans toutes ses propriétés des caractères de symétrie.

II- Symétrie des figures finies et opérations de symétrie :

Les points, droits et plans restant immobiles lors d'une opération de symétrie sont appelés « éléments de symétrie ».

Parmi les opérations (mouvements ou transformations) qui peuvent « restituer » une figure symétrique finie, nous distinguons différentes opérations de symétrie.

La rotation, la réflexion, l'inversion, l'inversion rotatoire, la rotation suivie d'une réflexion, la réflexion suivie d'une inversion et la translation.

II-1- La rotation :

Opération de symétrie s'effectuant par rotation d'un angle de $\theta=2\pi/n$ autour d'une ligne appelée axe de symétrie. n est toujours un nombre entier qui représente l'ordre de l'axe. L'axe d'ordre 1 (rotation d'un tour complet $\theta=2\pi$) correspond à l'opération « identité », ce qui équivaut à une absence de symétrie. N'importe quelle ligne dans n'importe quelle figure est un axe d'ordre 1.

Quand l'axe 2 est dans le plan du dessin on le représente par : 

Quand l'axe 2 est perpendiculaire au plan du dessin on le représente par : 

Représentations graphiques et symboles:

| Symbole de l'axe | Représentation graphique d'un axe perpendiculaire au plan du dessin | Terminologie |
|------------------|---|------------------------|
| 1 | . | Identité |
| 2 |  | Axe binaire |
| 3 |  | Axe ternaire |
| 4 |  | Axe quaternaire |
| 5 |  | Axe quinaire |
| 6 |  | Axe sénaire |

II-2- La Réflexion:

Une figure possède cette symétrie si une moitié de la figure est l'image spéculaire de l'autre moitié dans un plan de symétrie (miroir).

Un miroir est symbolisé par : m

Représentation graphique :

Pour un miroir perpendiculaire au plan du dessin 

Pour un miroir dans le plan du dessin 

II -3- L'inversion:

Une figure possède la symétrie d'inversion par rapport à un point, appelé centre d'inversion ou de symétrie, si à tout point de coordonnées (x, y, z) correspond un symétrique en (x, y, z) .

Sachant que le centre de symétrie étant à l'origine des axes.

La figure est dite alors centrosymétrique.

Symbole d'un centre de symétrie : C ou 1

Opérateurs :

en coordonnées cartésiennes (figure 4):

$C X (x, y, z) (\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ 

En coordonnées sphériques :

$C X (r, \theta, \varphi) \longrightarrow (r, \pi - \theta, \varphi + \pi)$

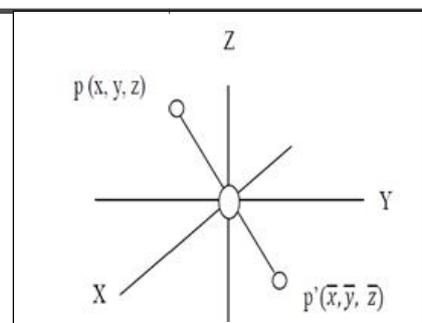


Figure 4. L'opérateur inversion C transforme le point $p(x, y, z)$ au point $p'(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ si le centre d'inversion est à l'origine des axes.

Opération qui consiste en une rotation d'un angle $\theta=2\pi/n$ suivie nécessairement d'une inversion dans un centre situé sur l'axe de rotation. L'élément de symétrie est appelé axe d'inversion. Les deux opérations partielles successives ne peuvent pas être dissociées. L'existence d'un axe d'inversion n'implique pas à priori l'existence indépendante d'un axe de rotation ordinaire (axe de rotation direct) et d'un centre de symétrie (centre d'inversion).

Symbole d'un axe d'inversion : \bar{n}

Opérateurs :

* En coordonnées cartésiennes ($\bar{2} // Z$ figure 5):

$$2 X (x, y, z) \longrightarrow (x, y, \bar{z})$$

* En coordonnées sphériques :

$$\bar{n} X (r, \theta, \varphi) \longrightarrow (r, \pi - \theta, \varphi + (2\pi/n) + \pi)$$

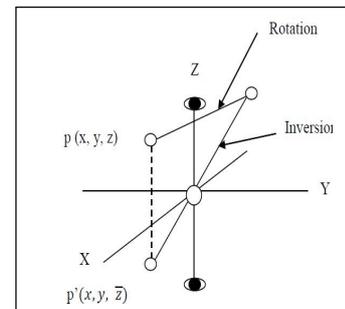
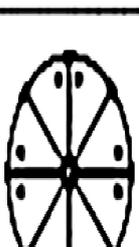


Figure 5. L'inversion rotatoire d'ordre 2, $\bar{2}$ transforme un point $p(x, y, z)$ en $p'(x, y, \bar{z})$. Cette opération est donc équivalente à une réflexion dans un miroir situé à $Z=0$.

Représentations graphiques et symboles des axes d'inversion:

| <i>Symbole de l'axe</i> | <i>Représentation graphique d'un axe perpendiculaire au plan du dessin</i> | <i>Terminologie Axe d'inversion</i> |
|-------------------------|--|-------------------------------------|
| $\bar{1}$ | | d'ordre 1 (centre de symétrie) |
| $\bar{2}$ | | d'ordre 2 |
| $\bar{3}$ | | d'ordre 3 |
| $\bar{4}$ | | d'ordre 4 |
| $\bar{6}$ | | d'ordre 6 |

| | | | | | | | |
|--|---|---|---|--|---|---|---|
|  1 (C ₁) |  $\bar{1}$ (C _i) | | | | | | |
|  2 (C ₂) |  $\bar{2}$ (C _s) |  2/m (C _{2h}) | | |  222 (D ₂) |  mm2 (C _{2v}) |  mmm (D _{2h}) |
|  3 (C ₃) |  $\bar{3}$ (S ₆) |  32 (D ₃) |  3m (C _{3v}) |  $\bar{3}m$ (D _{3d}) | | | |
|  4 (C ₄) |  $\bar{4}$ (S ₄) |  4/m (C _{4h}) |  4mm (C _{4v}) |  422 (D ₄) |  $\bar{4}2m$ (D _{2d}) |  4/mmm (D _{4h}) | |
|  6 (C ₆) |  $\bar{6}$ (C _{3h}) |  6/m (C _{6h}) |  6mm (C _{6v}) |  622 (D ₆) |  $\bar{6}2m$ (D _{3h}) |  6/mmm (D _{6h}) | |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
|  e (C _{oo}) |  \bar{e} (C _{3v}) |  e _{1u} (C _{6v}) |  e _{2u} (C _{6v}) |  e _{3g} (D ₆) |  e _{2u} (D _{3h}) |  e _{1u} e _{2u} e _{3g} (D _{6h}) |
|---|---|---|---|---|---|---|

II -4- La translation pure:

Représentée par le vecteur de translation: $T = u.a + v.b + w.c$

a, b et c les périodes suivant les trois directions de l'espace (les paramètres de maille)

u, v et w des entiers.

La translation associée à une rotation:

C'est une rotation d'un angle de $\theta=2\pi/n$ autour d'un axe, suivie nécessairement d'une translation d'une valeur τ parallèlement à l'axe de rotation. L'élément de symétrie de cette opération s'appelle axe hélicoïdal. Tel que :

$$n.\tau = k. d \quad ; k \text{ entier et } d \text{ période (dans le cas général)}$$

$$0 \leq \tau < d.$$

Il s'en suit que : $0 \leq k < n$, mais puisque ($k=0$) signifierait une absence de translation donc:

$$1 \leq k < n.$$

D'autre part, les seuls axes possibles dans les figures périodiques infinies sont les axes d'ordre 1, 2, 3, 4, et 6. Pour l'axe d'ordre 5 il est absent dans les figures périodiques infinies, parce qu'il ne vérifie pas la périodicité (par exemple à deux dimensions on ne peut pas remplir une surface avec une figure de forme pentagone sans laisser des lacunes).

Ces considérations permettent de justifier la limitation du nombre des axes hélicoïdaux. On note un axe hélicoïdal: nk . L'indice k donne la valeur de translation τ par rapport à d : $\tau=k/n.d$

Exemples:

L'axe hélicoïdal 2_1 est une rotation de 180° ($\theta=2\pi/2$) suivie d'une translation égale à la moitié de la période parallèlement à la direction de l'axe de rotation.

Donc si on prend $d = 1$ (pour simplifier) pour l'axe de rotation d'ordre 2 ($n = 2$), k prend une seule valeur ($k=1$) ce qui donne un seul axe hélicoïdal 2_1 .

Pour l'axe de rotation d'ordre 3 correspond deux axes hélicoïdaux: 3_1 et 3_2

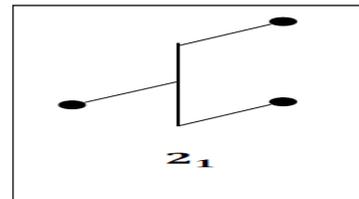
Pour l'axe de rotation d'ordre 4 correspond trois axes hélicoïdaux: 4_1 , 4_2 et 4_3

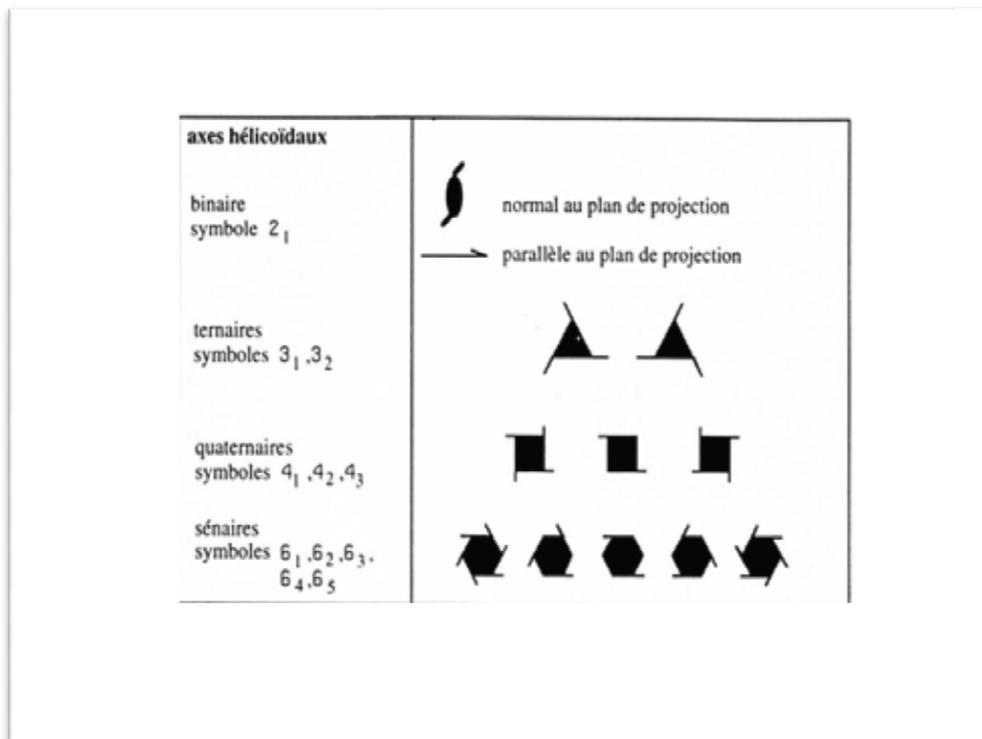
Pour l'axe de rotation d'ordre 6 correspond cinq axes hélicoïdaux: 6_1 , 6_2 , 6_3 et 6_4 .

*Opérateurs (axe suivant z) :

$$2_1 X(x, y, z) \longrightarrow (x, y, z + 1/2)$$

$$4_1 X(x, y, z) \longrightarrow (x, y, z + 1/4)$$





III - Symétries d'orientation :

Opérations de symétrie d'orientation

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

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

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

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

Un élément de symétrie est le support d'une opération de symétrie. Il est constitué de l'ensemble des points invariants par l'application de l'opération de symétrie. L'ordre ou degré de symétrie n de l'élément de symétrie correspond au nombre de points distincts obtenus par

applications successives de l'opération de symétrie correspondante, en commençant par un point en dehors de l'élément de symétrie.

III – 1- Rotation (rotation propre)

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

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

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

Les rotations transforment le trièdre direct $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$ en un autre trièdre direct $(\vec{u}'_x, \vec{u}'_y, \vec{u}'_z)$, et ne changent donc pas l'orientation de l'espace. Ce sont des **opérations propres de symétrie**. Cela se traduit par une valeur positive déterminant de $R(u, \Phi) = +1$. L'élément de symétrie est l'axe de rotation porté par \vec{u} . Celui-ci peut être d'ordre fini n (rotations d'angle $2\pi/n$) ou infini (symétrie de révolution). A deux dimensions, l'élément de symétrie est un point.

III –2 – Inversion :

L'inversion est une opération de symétrie qui transforme un vecteur en son opposé. La matrice associée est notée I . Dans le repère orthonormé $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$, l'effet d'une inversion par rapport au point origine O s'écrit :

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

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

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

III - 3 - Roto-inversion (rotation impropre) :

Il s'agit d'une rotation $R(u, \varphi)$ immédiatement suivie de l'inversion I . Par convention, on n'utilise que les roto-inversions construites à partir de rotations propres d'ordre fini n . La matrice associée est notée $R(u, \varphi) = I.R(u, \varphi) = R(u, \varphi).I$. Dans le repère orthonormé $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$, l'effet d'une roto-inversion d'angle φ , d'axe uz et de centre O s'écrit :

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

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

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

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

III - 4 – Réflexion :

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

La transformation en réflexion se fait par rapport à un plan miroir. Elle est représentée par la matrice $\sigma(u_1, u_2)$, où u_1 et u_2 sont 2 vecteurs non-colinéaires définissant le plan de réflexion. Dans le repère orthonormé $(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$, l'effet d'une réflexion par rapport au plan (u_x, u_y) passant par l'origine s'écrit :

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

En tant que roto-inversion particulière, la réflexion est une opération impropre de symétrie. Le déterminant de $\sigma(u_1, u_2)$ vaut donc nécessairement -1 .

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

Série de TD N° = 1

Exercice 01: projections stéréographiques des différents axes de symétrie.

En utilisant la projection stéréographique, représenter les éléments de symétrie et

Les points liés par la symétrie dans une figure finie des classes cristallines suivantes :

1, 2, 3, 4, 6 et $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$ et $2_1, 3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 4_3, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4$.

Exercice 02: la projection stéréographique

En utilisant la projection stéréographique, représenter les éléments de symétrie et

Les points liés par la symétrie dans une figure finie des classes cristallines suivantes :

- 222, 322, 422, 622, 233, 432.

Exercice 0 3: la projection stéréographique

En utilisant la projection stéréographique, représenter les éléments de symétrie et

Les points liés par la symétrie dans une figure finie des classes cristallines suivantes :

- $2/m, 4/m, 6/m, mm2, 3mm, 4mm, 6mm, \bar{3}2m$.

- $\bar{4}2m, \bar{6}2m, \bar{4}3m, mmm, 4/mmm, 6/mmm, m\bar{3}, m\bar{3}m$.

Exercice 0 4: les opérateurs de symétrie

Donner les points équivalents obtenus par les opérateurs de symétrie suivants:

$2 // oz$ $X(x, y, z) \longrightarrow$

$2 (2 // oz \text{ et } m \text{ dans le plan } xoy)$ $X(x, y, z) \longrightarrow$

(le miroir dans le plan xoz) $X(x, y, z) \longrightarrow$

$\bar{1}X(x, y, z) \longrightarrow$

Exercice 0 5: Répondre par vrai ou faux :

1- Les symboles d'Hermann-Mauguin sont des symboles non orientés et 32 groupes ponctuels.

2- Il existe 7 systèmes cristallins et 10 types de réseaux de Bravais.

3- 4^2 est un axe hélicoïdal.

4- L'axe 2 est plus symétrique que l'axe 3.

5- La maille simple pour la structure (cfc) est un rhomboèdre.

Chapitre 2:

Utilisation des groupes ponctuels de symétrie pour la prédiction des propriétés physiques des matériaux

I - Classes de Laue :

La mise en évidence expérimentale de la présence ou de l'absence d'un centre de symétrie dans un cristal est souvent délicate. En particulier, les méthodes classiques de diffraction des rayons X utilisées en radiocristallographie introduisent de manière systématique un centre de symétrie dans la figure de diffraction, même si le cristal étudié est non centrosymétrique (loi de Friedel). On est donc amené à regrouper les classes de symétrie qui ne diffèrent que par la présence ou par l'absence de l'inversion.

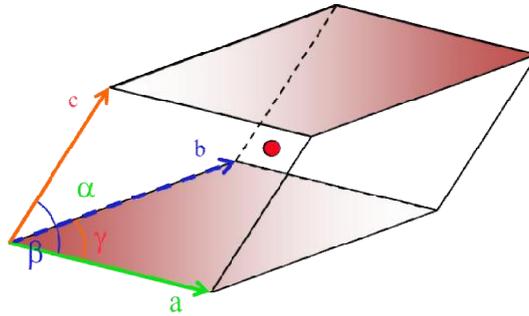
La classification obtenue selon ce critère constitue les **classes de Laue**. Les 32 groupes ponctuels se partagent entre ces 11 classes selon la répartition précisée par le tableau 1. Dans ce tableau, le groupe placé en tête de la liste de chacune des classes est le groupe centrosymétrique. C'est lui qui définit la symétrie ponctuelle de la classe de Laue considérée.

| Crystal system | Groupes Ponctuels | | | Holoédrie | Systèmes cristallins | Classes de Laue |
|----------------|-----------------------|-----------------|-------------------|-------------|----------------------|-----------------|
| | Non Centro-symétrique | | Centro-symétrique | | | |
| Triclinic | 1 | | $\bar{1}$ | $\bar{1}$ | Triclinique | $\bar{1}$ |
| Monoclinic | 2 | m | 2/m | 2/m | Monoclinique | 2/m |
| Orthorhombic | 222 | mm2 | mmm | mmm | Orthorhombique | mmm |
| Tetragonal | 4 | $\bar{4}$ | 4/m | 4/mmm | Quadratique | 4/m |
| | 422 | 4mm -42m | 4/mmm | | | 4/mmm |
| Trigonal | 3 | | $\bar{3}$ | $\bar{3}m$ | Rhomboédrique | $\bar{3}$ |
| | 32 | 3m | $\bar{3}m$ | | | $\bar{3}m$ |
| Hexagonal | 6 | $\bar{6}$ | 6/m | 6/mmm | Hexagonal | 6/m |
| | 622 | 6mm $\bar{6}2m$ | 6/mmm | | | 6/mmm |
| Cubic | 23 | | $m\bar{3}$ | $m\bar{3}m$ | Cubique | $m\bar{3}$ |
| | 432 | $\bar{4}3m$ | $m\bar{3}m$ | | | $m\bar{3}m$ |

Tableau1 Les 11 classes de Laue.

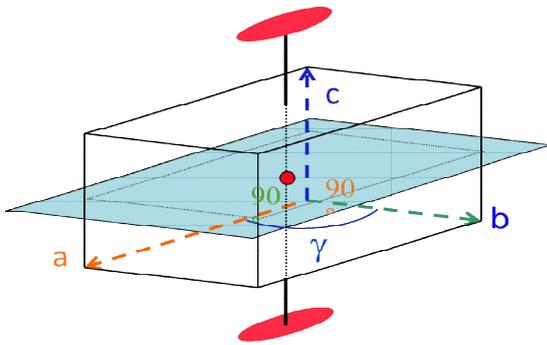
SYSTÈME TRICLINIQUE

Le moins symétrique :



$a \neq b \neq c$ Groupes ponctuels (classes cristallines)
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ quelconques $\mathbf{1}, \bar{\mathbf{1}}$

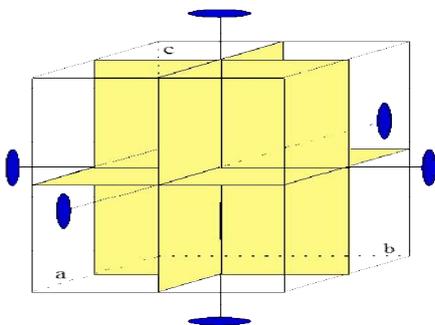
SYSTÈME MONOCLINIQUE



$a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ$
 $\gamma > 90^\circ$
 L'axe 2 était traditionnellement pris parallèle à **b**, mais depuis la dernière édition des tables internationales il est pris soit parallèle à **b** soit parallèle à **c**. Les deux possibilités sont traitées dans les tables.

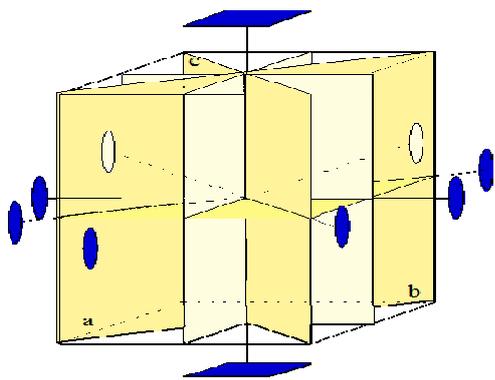
Éléments de symétrie :
2, m, 2/m

SYSTÈME ORTHORHOMBIQUE



$a \neq b \neq c$
 $\alpha = \gamma = \beta = 90^\circ$
Éléments de symétrie :
 - 3 axes de symétrie $2 \perp$ entre eux
 - 3 miroirs \perp entre eux et aux axes 2
 - un centre de symétrie
222, 2mm, mmm

SYSTÈME QUADRATIQUE



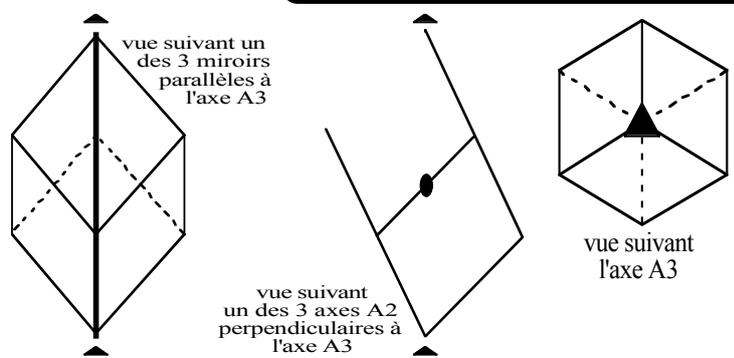
$|a| = |b| \neq |c|$
 $\alpha = \gamma = \beta = 90^\circ$

La base est carrée.

Éléments de symétrie :

- 1 axe de symétrie 4 avec 1 miroir \perp
- 4 axes de symétrie 2 avec 4 miroirs \perp
- un centre de symétrie
- **$4, \bar{4}, 4/m, 4mm, \bar{4}22, 42m, 4/mmm$**

SYSTÈME TRIGONAL

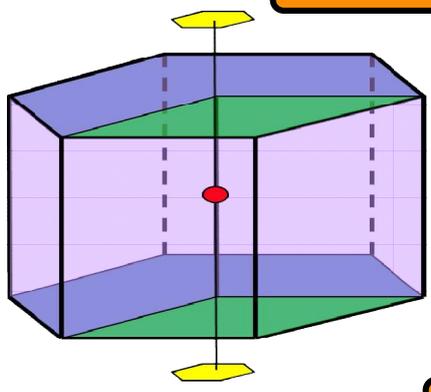


$a = b = c$
 $\alpha = \gamma = \beta$ quelconques

Éléments de symétrie :

- 1 axe de symétrie 3
- 3 axes de symétrie 2 avec 3 miroirs \perp
- un centre de symétrie
- **$3, \bar{3}, 32, 3m, \bar{3}m$**

SYSTÈME HEXAGONAL



$a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \pi/2 \quad \gamma = 2\pi/3$

Classes cristallines (groupes ponctuels) :

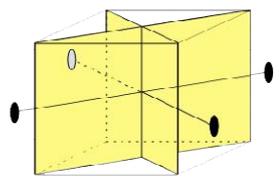
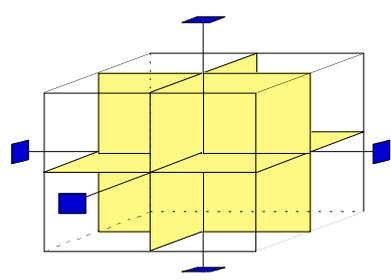
- 1 axe de symétrie 6 avec un miroir \perp
- 6 axes de symétrie 2 avec 6 miroirs \perp
- un centre de symétrie
- **$6, \bar{6}, 6/m, 6mm, 622, \bar{6}2m, 6/mmm$**

SYSTÈME CUBIQUE

$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma = \pi/2$

Groupes ponctuels

- (classes cristallines):
- 2 axes de symétrie 4
 - 4 axes de symétrie 3
 - 2 axes de symétrie 2
 - $23, m\bar{3}, 432, \bar{4}3m, m\bar{3}m$**



II- Construction du groupe d'espace d'un cristal:

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

Les opérations de symétrie de position possibles sont : les rotations propres (incluant l'identité), les rotations impropres (incluant l'inversion et la réflexion par rapport à un plan), les translations pures, les translations hélicoïdales et les réflexions avec glissement. L'ordre d'un groupe d'espace est toujours infini, du fait de la présence de l'ensemble des translations pures. Les positions générales équivalentes d'un groupe d'espace, indénombrables, sont données en se limitant à une maille cristallographique ; les autres se déduisent par l'application des translations du réseau.

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

| | |
|----------------|--|
| Triclinique | C_1, C_i |
| Monoclinique | C_2, C_s, C_{2h} |
| Orthorhombique | D_2, C_{2v}, D_{2h} |
| Trigonal | $C_3, C_{3i}, D_3, C_{3v}, D_{3d}$ |
| Tétragonal | $C_4, S_4, C_{4h}, C_{4v}, D_4, D_{2d}, D_{4h}$ |
| Hexagonal | $C_6, C_{3h}, C_{6h}, C_{6v}, D_6, D_{3h}, D_{6h}$ |
| Cubique | T, T_h, O, T_d, O_h |

Tableau 2: Notation de Schönflies (groupe du réseau en gras).

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

| Système cristallin | Axe primaire | Axe secondaire | Axe tertiaire |
|-----------------------------------|-----------------------|-----------------------------|-----------------------|
| Triclinique | -- | -- | -- |
| Monoclinique | [010] | -- | -- |
| Orthorhombique | [100] | [010] | [001] |
| Tétragonal | [001] | $\langle 100 \rangle$ | $\langle 110 \rangle$ |
| Hexagonal | [001] | $\langle 100 \rangle$ | $\langle 120 \rangle$ |
| Trigonal (axes hexagonaux) | [001] | $\langle 100 \rangle$ | -- |
| Trigonal (axes rhomboédriques) | [111] | $\langle \bar{1}10 \rangle$ | -- |
| Cubique | $\langle 100 \rangle$ | $\langle 111 \rangle$ | $\langle 110 \rangle$ |

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

Les 230 groupes d'espace sont répertoriés dans les tables internationales de cristallographie. Un exemple de fiche correspondant au groupe d'espace orthorhombique $P222_1$ est donné en (Figure 3). Les indications données dans chaque fiche comprennent:

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

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

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

Les classes de symétrie permettent de discuter l'anisotropie des propriétés physiques macroscopiques d'un cristal. En effet, la partie translatoire des opérations de symétrie des cristaux est à l'échelle de l'atome, et donc imperceptible au niveau macroscopique. Les projections stéréographiques des classes de symétrie cristalline, au nombre de 32. Les classes de symétrie sont également appelées groupes ponctuels cristallographiques. Les classes de symétrie peuvent être réparties dans 7 systèmes cristallins en fonction de leurs symétries (Tableau 4). A chaque système cristallin est associée une métrique particulière de la maille cristallographique, déjà décrite au chap. I. Le type de maille

conventionnelle utilisé pour décrire un cristal doit être compatible avec ses symétries. Dans un même système cristallin, la classe holoèdre désigne le groupe ponctuel de plus haute symétrie. Celui-ci décrit la symétrie des réseaux de ce système cristallin. Le cristal, obtenu par l'adjonction d'un motif aux nœuds d'un réseau, peut présenter une symétrie inférieure à ce réseau (Figure 2), auquel cas sa classe de symétrie est un sous-groupe de la classe holoèdre. Les classes holoèdres sont encadrées dans le Tableau 4; les autres classes sont des sous-groupes de la classe holoèdre correspondante.

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

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

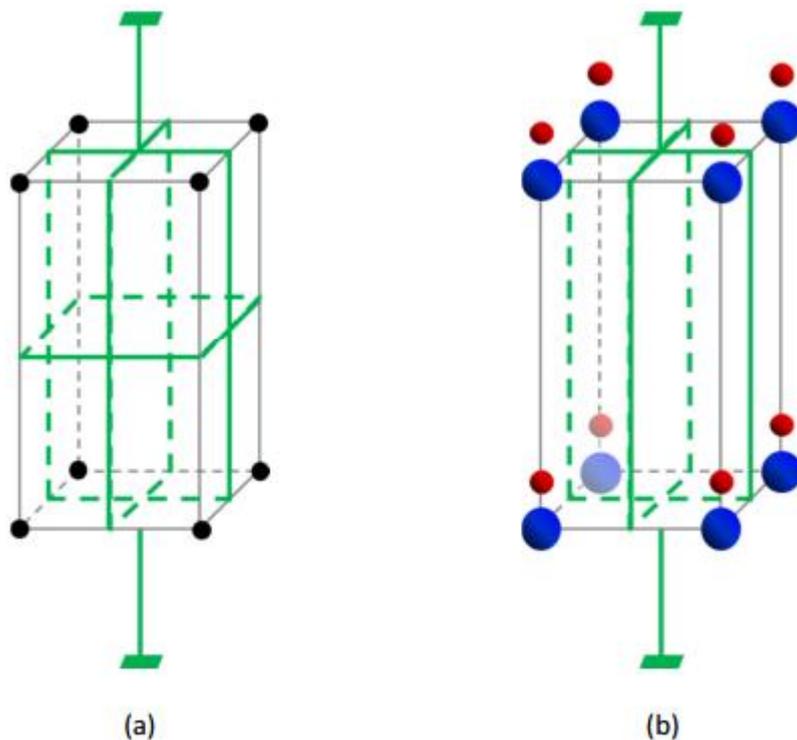


Figure 2 : (a) Visualisation des éléments de symétrie associés à la classe holoèdre du système cristallin tétragonal, $4/m\bar{3}m$ (groupe ponctuel associé à tous les réseaux tétragonaux, qu'ils soient centrés ou non). (b) Exemple de cristal tétragonal appartenant à la classe de symétrie $4mm$. Le motif de ce cristal entraîne la perte du plan miroir d'axe c .

III -Utilisation des tables inter nationales

Les informations qui suivent sont destinées à faciliter l'utilisation des « Tables internationales de cristallographie » par un lecteur non familier de celles-ci. Ce lecteur trouvera de nombreuses informations complémentaires dans les articles explicatifs qui figurent dans l'introduction du volume A de ces tables.

Il est fait ici référence au volume A de la troisième édition des « Tables internationales de cristallographie » publiées en 1983 et révisées en 1989 par « L'Union Internationale de Cristallographie ».

Il est conseillé d'utiliser cette troisième édition de préférence à la deuxième (édition de 1952) car de nombreuses améliorations ont été apportées :

- Pour les groupes monocliniques les projections qui correspondent aux deux conventions admises (axe binaire orienté suivant **b** ou suivant **c**) sont représentées. Pour ces deux choix, trois projections orthogonales avec soit $[100]$, $[010]$ ou $[001]$ normal au plan de projection, sont tracées.

- Pour les groupes orthorhombiques on effectue habituellement le choix des axes de la maille afin d'obtenir comme nom du groupe le nom standard. Ce nom standard qui est sensé indiquer le mieux possible la symétrie du cristal n'est pas toujours le plus approprié. Les projections sont données pour les 6 choix de repères directs envisageables avec les noms correspondants.
- Les projections des groupes cubiques sont maintenant tracées et de nouveaux symboles spécifiques aux groupes cubiques ont été introduits.
- Les opérations de symétrie du groupe sont listées et le choix optimal des générateurs à utiliser est précisé.

En regard de la reproduction de chacune des deux pages des « Tables internationales » consacrées au groupe Pma_2 , pris ici comme exemple, figurent les explications relatives aux divers éléments des tables.

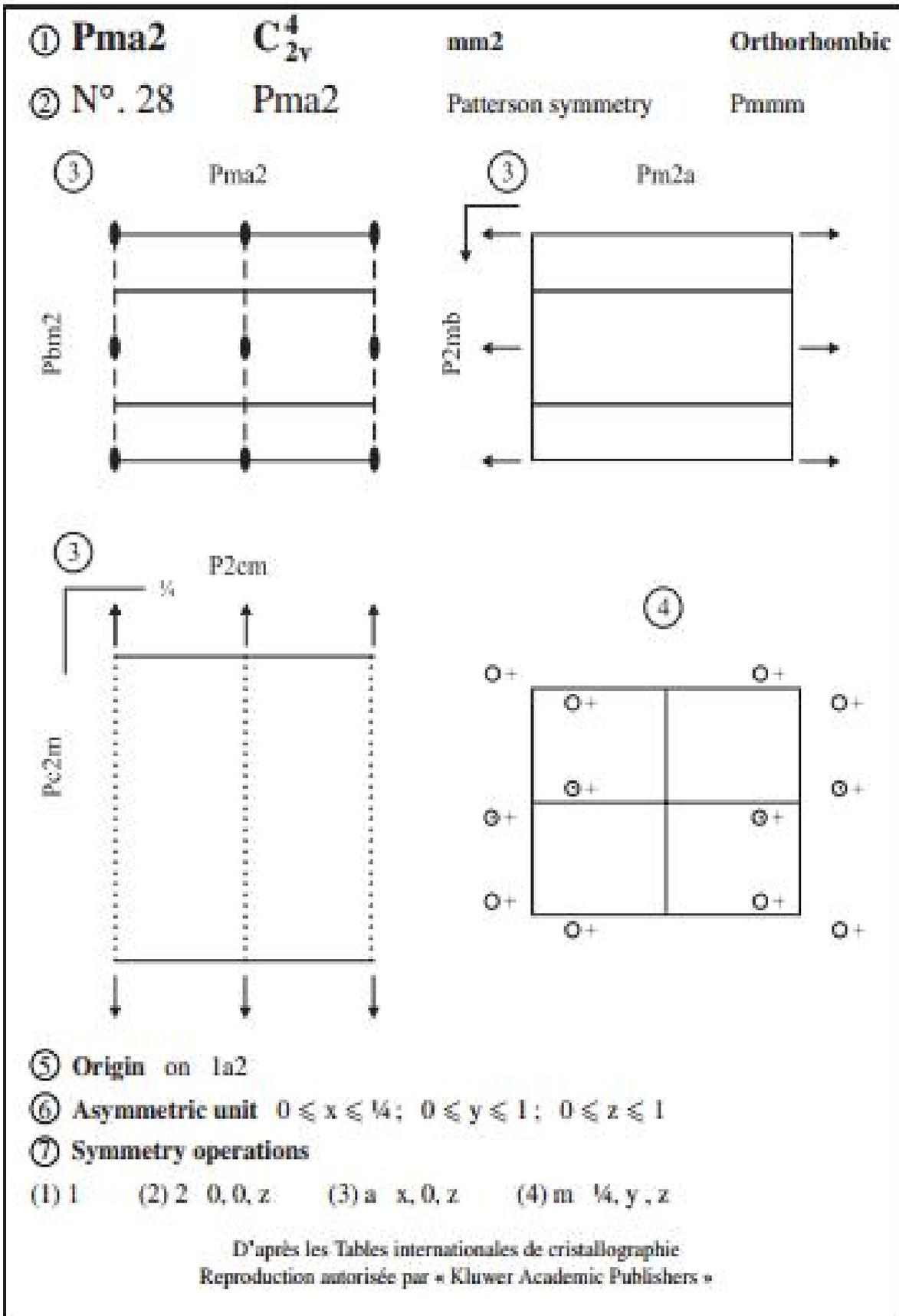


Figure 3 : la table internationale de cristallographie.

1- L'en-tête comporte :

Le nom standard du groupe en notation Hermann-Mauguin abrégée (Pma2).

Le symbole de Schönflies du groupe C_{2v}^4 .

La classe ou groupe ponctuel (mm2).

Le système cristallin (orthorhombique).

2 - Indication du numéro du groupe (choix initial arbitraire).

Symbole du groupe en notation Hermann-Mauguin complète : par exemple le groupe

P21/c se note P 1 2₁/c Groupe de symétrie de la fonction de Patterson.

(toujours centro-symétrique et symmorphique).

3 - Représentation du ou des diagrammes des éléments de symétrie du groupe ; le nombre de diagrammes est fonction du système cristallin.

Si, sur le diagramme c'est la projection de l'axe qui figure alors le nom de l'axe est indiqué avec un « p » (ap est la projection de **a** sur le plan de projection).

4 - Illustration d'un ensemble de positions générales équivalentes.

La position d'un atome est repérée par le symbole auquel est adjointe la cote.

Dans l'expression de la cote, la lettre z est systématiquement omise.

– correspondent à +z et -z ; de même $\frac{1}{2} +$ désigne $\frac{1}{2} + z$.

Objet initial.

– Objet déduit de l'atome initial par une inversion, une roto-inversion ou un mirage.

(Énantiomorphe de l'objet initial).

– Notation de deux positions superposées en cas d'existence d'un miroir parallèle au plan de projection.

5 - Position de l'origine.

La position de l'origine est précisée par sa symétrie (éléments de symétrie sécants au point considéré). Dans l'exemple, l'origine est choisie à l'intersection du binaire et du miroir a.

6 - Définition du volume minimal dont la répétition par les éléments de symétrie du groupe permet de générer entièrement le cristal.

7 - Énumération des éléments de symétrie du groupe.

Chaque élément est repéré par un numéro d'ordre : (1), (2)...

La nature de l'élément de symétrie est précisée : 1, 2, a...

Enfin figure la position de l'élément dans la maille 0, 0, z...

| | | |
|---|---|---|
| ① CONTINUED | N° 28 | Pma2 |
| ② Generators selected | (1); t(1, 0, 0); t(0, 1, 0); t(0, 0, 1); (2); (3) | |
| ③ Positions | | |
| Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry | Coordinates | Reflection conditions |
| 4 d 1 | (1) x, y, z (2) \bar{x}, \bar{y}, z (3) $x + \frac{1}{2}, \bar{y}, z$ (4) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y, z$ | General : h01 : h = 2n h00 : h = 2n Special : as above plus |
| 2 c m.. | $\frac{1}{4}, y, z$ $\frac{3}{4}, \bar{y}, z$ | no extra condition |
| 2 b ..2 | $0, \frac{1}{2}, z$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$ | hkl : h = 2n |
| 2 a ..2 | $0, 0, z$ $\frac{1}{2}, 0, z$ | hkl : h = 2n |
| ④ Symmetry of special projections | | |
| Along [001] p2mg a' = a b' = b Origin at 0, 0, z | Along [100] p1m1 a' = b b' = c Origin at x, 0, 0 | Along [010] p11m a' = c b' = $\frac{1}{2}a$ Origin at 0, y, 0 |
| ⑤ Maximal non-isomorphic subgroup | | |
| I | [2]P112(P2) 1;2 ○ [2]P1a1(Pc) 1;3 [2]Pm11(Pm) 1;4 | |
| IIa | none | |
| IIb | [2]Pba2 (b' = 2b) [2]Pnm2 ₁ (c' = 2c); [2]Pca2 (c' = 2c)(Pcn2); □ [2]Ama2 (b' = 2b, c' = 2c); [2]Aba2 (b' = 2b, c' = 2c) | |
| ⑥ Maximal isomorphic subgroups of lowaest index | | |
| IIc | [2]Pma2 (a' = 3a); [2]Pma2 (b' = 2b); [2]Pma2 (c' = 2c) | |
| ⑦ Minimal non-isomorphic supergroups | | |
| I | [2]Pccm; [2]Pmma; [2]Pmna; [2]Pbcm | |
| II | [2]Ama2; [2]Bma2 (Abma2); [2]Cmm2; [2]Ima2; [2]Pmm2 (2a' = a) | |
| D'après les Tables internationales de cristallographie Reproduction autorisée par « Kluwer Academic Publishers » | | |

Figure 4 : la table internationale de cristallographie.

1 - En-tête simplifié.

2 - Un ensemble minimal de générateurs est précisé. Les opérations de symétrie sont notées par leur numéro d'ordre dans la liste des opérations du groupe et les translations sont indiquées par les composantes du vecteur.

3 - Liste des positions générales et particulières.

Pour chaque ensemble de positions sont indiqués :

La multiplicité (classement par multiplicités décroissantes).

Le symbole de Wyckoff du site.

La symétrie locale du site.

Les coordonnées des positions équivalentes précédées du numéro de l'opération de symétrie qui génère la position.

Les conditions d'existence des taches de diffraction.

4 - Pour chaque groupe trois projections orthographiques réalisées suivant des axes de symétrie sont étudiées. Pour chaque projection figurent la direction de projection, le nom du groupe plan de la projection, ses axes et son origine.

5 - Sous-groupes d'ordre maximal.

I : Les translations sont les mêmes que celles du groupe initial.

II : La classe cristalline est identique à celle du groupe initial.

a : Même maille (groupes centrés), **b, c** : Maille plus grande.

6 - Sous-groupes ayant même symbole standard que le groupe initial.

[2] : Ordre du sous-groupe ; **P1a1** : Symbole complet du sous-groupe ;

(b = 2b) : Base du réseau ; (Pour les **IIa, b et c**)

(Pc) : Symbole conventionnel du sous-groupe ;

1 ; 3 : liste des opérations de symétrie.

7 - Super-groupes d'ordre minimal.

Tables inverses des tables de sous-groupes. Les notations sont identiques à celles utilisées pour les sous-groupes.

IV - Propriétés physiques :

IV – 1- Cas des tenseurs de propriétés physiques d'ordre 2 :

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

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

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

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

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

On voit que l'étude des symétries permet de comprendre et prédire l'anisotropie des propriétés physiques. Nous pouvons citer en exemple l'anisotropie de la conductivité électrique dans le graphite (Figure 4 a) et le phénomène de biréfringence dans les matériaux non-cubiques (Figure 4 b).

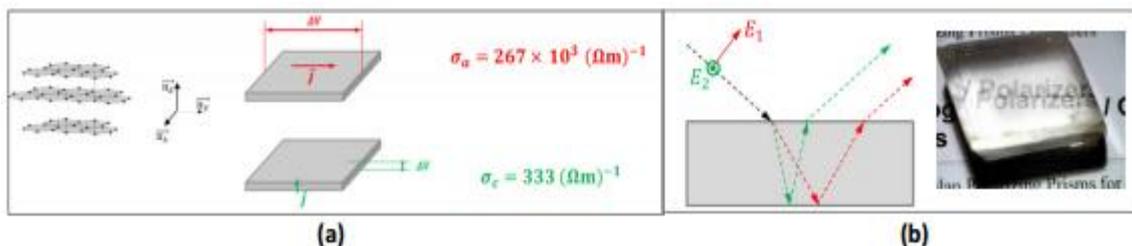


Figure 4 : (a) La conductivité du graphite dépend fortement de la direction de mesure.

Rappelant que le graphite est un cristal du système hexagonal et que le tenseur de conductivité électrique est un tenseur d'ordre 2, on peut démontrer que les valeurs de la conductivité suivant \vec{u}_x et \vec{u}_y sont égales et différent de la valeur de la conductivité suivant \vec{u}_z .

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

IV – 2 - Symétrie et anisotropie des propriétés physiques:

IV – 2 - 1- Représentation tensorielle des propriétés physiques: Une propriété physique est une relation entre deux quantités mesurées. Du point de vue mathématique, le cas le plus simple que l'on puisse examiner implique des quantités mesurées et une propriété physique modélisables par des grandeurs scalaires. Ainsi, la capacité calorifique C permet de calculer l'énergie à fournir pour élever la température d'un milieu de ΔT : $\Delta E = C \Delta T$.

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

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

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

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

| Propriété physique | Grandeur physique 1 | Grandeur physique 2 | relation tensorielle | rang du tenseur ppté |
|-----------------------------|--------------------------|------------------------------|---|----------------------|
| Chaleur spécifique | Quantité de chaleur | Variation de température | $\Delta E = C \Delta T$ | 0 |
| Pyroélectricité | Variation de température | Variation de la polarisation | $\Delta \underline{P} = \underline{p} \Delta T$ | 1 |
| Susceptibilité diélectrique | Champ électrique | Polarisation | $\underline{P} = \epsilon_0 \underline{\chi} \underline{E}$ | 2 |
| Conductivité électrique | Champ électrique | Courant d'électrons | $\underline{j} = \underline{\sigma} \underline{E}$ | 2 |
| Conductivité thermique | Gradient de température | Flux de chaleur | $\underline{j} = \underline{\sigma} \underline{grad} T$ | 2 |
| Dilatation thermique | Température | Déformation | $\underline{\epsilon} = \underline{\alpha} T$ | 2 |
| Piézoélectricité | Contrainte | Polarisation | $\underline{P} = \underline{d} \underline{\sigma}$ | 3 |
| Modules d'élasticité | Contrainte | Déformation | $\underline{\epsilon} = \underline{S} \underline{\sigma}$ | 4 |

Tableau 5 : Exemples de propriétés physiques pouvant être modélisées par un tenseur polaire de rang n.

La relation tensorielle caractérisant chaque propriété physique est donnée avec les notations suivantes : les vecteurs (tenseurs de rang 1) sont soulignés d'un trait, les tenseurs de rang 2 et 3 sont soulignés de 2 et 3 traits, respectivement. Les grandeurs scalaires sont assimilables à des tenseurs de rang nul et sont représentés non soulignées.

IV – 2 – 2 - Loi de Curie appliquée aux tenseurs : méthode de Neumann En vertu du principe de Curie, les propriétés physiques doivent posséder les symétries du milieu dans lequel elles sont observées. Ainsi, un tenseur doit être invariant par l'application de toutes les opérations de symétrie d'orientation du milieu.

Cette condition se traduit par les équations : $O_i t = t$, où O_i est la matrice de transformation associée à la $i^{\text{ème}}$ opération du groupe ponctuel du milieu, et où t est le tenseur représentant la propriété physique. La résolution de ce système d'équations permet d'établir des relations entre les différentes composantes du tenseur. On obtient alors une forme réduite du tenseur, tenant compte de l'équivalence des directions dans le milieu. Cette méthode de réduction des tenseurs est appelée méthode de Neumann.

CONCLUSIONS

Cette étude rapide de quelques exemples simples montre le principe de la construction des groupes d'espace qui se répartissent de la manière suivante dans les différents systèmes :

| | | | | | |
|---------------------|----------------|----|---------|------------|----|
| Système | triclinique | 2 | Système | tétragonal | 68 |
| Système | monoclinique | 13 | Système | hexagonal | 27 |
| Système | orthorhombique | 59 | Système | cubique | 36 |
| Système trigonal 25 | | | | | |

(La liste des noms standards des 230 groupes figure dans l'annexe C.)
Pour certains groupes (en particulier pour les groupes cubiques) le travail de construction peut être long et délicat. L'utilisation des « Tables internationales de cristallographie » permet de disposer rapidement de la totalité des informations relatives à chacun des 230 groupes d'espace.

Série de TD N° = 2

Exercice 01: La symétrie dans une maille.

- Dénombrer les différents éléments de symétrie dans une maille cubique.

Exercice 0 2: Groupe C_{2v} .

- Indiquer le groupe ponctuel qui correspond à ce groupe et tracer la projection stéréographique des éléments de symétrie sur (001).

- En déduire le nombre de positions générales pour le groupe.

Compléter la projection du groupe donnée ci-dessous.

($m \Rightarrow$ miroir $m \perp$ à Ox : $c \Rightarrow$ miroir $c \perp$ à Oy : $2_1 \Rightarrow$ Axe $2_1 //$ à Oz en O).

Déterminer les coordonnées des positions générales équivalentes à x, y, z .

Indiquer les positions de quelques coordonnées particulières.

Déterminer les conditions d'extinction systématique du groupe.

Exercice 0 4: le groupe d'espace

Déterminer pour le groupe d'espace N°.74 : $Im\bar{3}m$

1 – Le groupe ponctuel.

2 – La classe de Laue correspondante.

3 – Le système cristallin.

4 – Le mode de réseau de Bravais et sa multiplicité.

5 – La projection stéréographique du G P et son degré de symétrie.

6 – Le nombre des positions générales équivalentes.

7 – La projection conventionnelle de maille sur le plan (001).

8 – Tous les éléments de symétrie engendrés.

9 – Les coordonnées des positions générales équivalentes et quelques positions spéciales.

10 – Les conditions d'extinction systématiques.

Chapitre 3:
Introduction aux groupes continus de Lie.

I - Propriétés générales

I-1-Les groupes continus

I-1- 1- *Définitions* :

Nous allons considérer un groupe dont G les éléments sont repérés par un nombre fini n de paramètres réels a_1, a_2, \dots, a_n . Ces derniers peuvent être notés de façon plus condensée par un vecteur $\vec{a} \in \mathbb{R}^n$, de composantes a_1, a_2, \dots, a_n :

$$g = g(a_1, a_2, \dots, a_n) = g(\vec{a})$$
$$\vec{a} \in \mathbb{R}^n$$

Les paramètres seront supposés essentiels : le groupe ne peut pas être décrit par un nombre de paramètres.

Un ensemble infini est dénombrable si on peut établir une correspondance biunivoque entre ses éléments et les entiers naturels 1, 2, 3, Sinon, on dit que l'ensemble a la puissance du continu.

Exemple :

Pour le groupe $T_{(i)}$ des translations dans un espace à 1 dimension, le paramètre unique a est essentiel. Mais si on avait introduit deux paramètres a_1, a_2 pour définir une translation d'un vecteur $(a_1 + a_2)\vec{e}_x$, on n'aurait évidemment pas des paramètres essentiels.

Pour décrire tout le groupe, \vec{a} doit varier dans un certain domaine D de \mathbb{R}^n , fini ou infini. Nous supposons que D est tel qu'il existe une correspondance biunivoque entre les éléments de G et ceux de D (dans D, il n'y a pas deux points \vec{a}_1 et \vec{a}_2 qui correspondent au même élément g de G).

Se donner un vecteur \vec{a} de composantes a_1, a_2, \dots, a_n ou un élément $g \in G$ revient alors au même. Il sera souvent commode de raisonner sur les vecteurs \vec{a} au lieu des g. L'entier n est appelé dimension du groupe.

Produit :

Si $g(\vec{a})$ et $g(\vec{b})$ sont deux éléments de G, le produit $g(\vec{a})g(\vec{b})$ appartient également à G, et peut suite être décrit une valeur \vec{c} du paramètre dans D :

$$g(\vec{c}) = g(\vec{a})g(\vec{b}) \text{ la valeur de } \vec{c} \text{ est une fonction de } \vec{a} \text{ et } \vec{b} : \vec{c} = \Phi_1(\vec{a}, \vec{b}).$$

La fonction Φ_1 donne donc, dans D, le reflet de la loi de composition interne dans G. Elle n'est d'ailleurs pas quelconque. De l'associativité de la loi de multiplication dans G découle que :

$$\Phi_1(\vec{a}, \Phi_1(\vec{b}, \vec{c})) = \Phi_1(\Phi_1(\vec{a}, \vec{b}), \vec{c}).$$

Inverse :

L'élément $g^{-1}(a)$ est décrit par une valeur à du paramètre de D : $g^{-1}(\vec{a}) = g(\vec{a}^1)$ avec : $\vec{a}^1 = \Phi_2(\vec{a})$.

Exemple :

Pour le groupe $T(i)$, ou plus généralement pour un groupe de translations repérées par leur

$$\text{vecteur } \vec{a} : \begin{cases} \Phi_1(\vec{a}, \vec{b}) = \vec{a} + \vec{b} \\ \Phi_2(\vec{a}) = -\vec{a} \end{cases}$$

II-Transformations continues, générateurs infinitésimaux

II-1-Groupes des translations \mathbb{R}, \mathbb{R}^d

Considérons le plus simple des groupes continus, celui des translations à une dimension :

$t(a) : x \mapsto x' = x + a$, avec x et a des variables réelles $x, a \in \mathbb{R}$. Pour toute fonction réelle $f(x)$, définissons la nouvelle fonction $f' = t(a)f$ par $f'(x') = f(x)$ ou de façon équivalente, $f'(x) = f(x - a)$. La loi de composition de ces transformations (loi de groupe) est $t(b) \circ t(a) = t(a + b)$. (1)

La loi est commutative, le groupe est abélien. Ce groupe est en fait \mathbb{R} avec la loi de groupe fournie par l'addition des réels.

Si a est infinitésimal, on peut écrire $f'(x) \approx f(x) - a \frac{d}{dx} f(x)$ ou encore

$$f'(x) = (1 - a \frac{d}{dx}) f(x)$$

soit encore, en définissant la variation de la fonction

$$\Delta f(x) = f'(x) - f(x) = -a \left(\frac{d}{dx} \right) f(x).$$

La variation infinitésimale de la fonction est linéaire dans le paramètre a (on travaille au 1^{er} ordre !) et dans la fonction f , et donnée par l'action du générateur infinitésimal

$$T_a = -a T = -a \frac{d}{dx}.$$

Noter que la loi de groupe (1) et sa propriété de commutativité se traduisent au niveau infinitésimal par la commutativité des générateurs $[T_a, T_b] = T_a T_b - T_b T_a = 0$.

Les transformations continues (et différentiables) du groupe impliquent donc l'existence des générateurs infinitésimaux avec des propriétés qui reflètent la loi de groupe. Inversement une fois connu le générateur infinitésimal $T = -\frac{d}{dx}$, il est possible de reconstruire la transformation finie par action exponentielle

$$\begin{aligned}
\exp(-aT)f(x) &= (1 - aT + \frac{1}{2}a^2T^2 + \frac{-a^3}{3!}T^3 + \dots)f(x) \\
&= \left(1 - a\left(\frac{d}{dx}\right) + \frac{a^2}{2}\left(\frac{d}{dx}\right)^2 + \frac{(-a)^3}{3!}\left(\frac{d}{dx}\right)^3 + \dots\right)f(x) \\
&= f(x - a)
\end{aligned}$$

qui n'est autre que la série de Taylor, que nous supposons convergente (f analytique réelle).

Ces considérations s'étendent sans difficulté à des translations $t(\vec{a})$ dans l'espace \mathbb{R}^d et à des fonctions f des d variables (coordonnées) x_1, \dots, x_d . La loi de groupe est toujours additive et donc commutative $t(\vec{a}) \circ t(\vec{b}) = t(\vec{a} + \vec{b}) = t(\vec{b}) \circ t(\vec{a})$, le groupe n'est autre que \mathbb{R}^d avec son addition. L'opérateur infinitésimal est maintenant l'opérateur différentiel

$T_{\vec{a}} = -\vec{a} \cdot \vec{T}$ avec \vec{T} le vecteur gradient $\vec{T} = \vec{\nabla} = (d/dx_1, \dots, d/dx_d)$, et la formule de Taylor à d variables s'applique.

II - 2 - Groupe des phases U(1)

Considérons le groupe multiplicatif des nombres complexes de module 1, $\zeta_\alpha = e^{i\alpha}$. Le nombre réel α est défini modulo 2π . La loi de groupe est $e^{i\alpha}e^{i\beta} = e^{i(\alpha+\beta)}$. (2)

Il s'agit donc encore d'un groupe abélien. Sa dénomination mathématique est U(1) (groupe unitaire à 1 dimension). On s'intéresse maintenant à l'action de ce groupe sur les nombres complexes non nuls

$$z \rightarrow z' = e^{i\alpha z}$$

Et sur les puissances entières (positives ou négatives) de z $z^p \rightarrow z'^p = e^{ip\alpha} z^p$.

Ces puissances entières z^p sont invariantes par l'action de $\zeta_{2\pi} = e^{i(2\pi)}$. (Noter qu'en revanche, pour une puissance r non entière de z , l'action de $e^{i(2\pi)}$ n'est pas l'identité.) Inversement, les théorèmes sur les séries de Fourier nous disent que toute fonction (suffisamment régulière) f de z telle que $f(z) = f(e^{2i\pi}z)$ peut se développer sur les puissances z^p , p entier positif ou négatif, $p \in \mathbb{Z}$. Il suffit donc d'étudier l'action du groupe sur les z^p .

A' nouveau, on peut considérer des transformations infinitésimales, avec $|\alpha| \ll 1$, $z \rightarrow z' \approx (1 + i\alpha)z$ $z^p \rightarrow z'^p = (1 + ip\alpha)z^p$ Le générateur infinitésimal s'écrit $T_\alpha = i\alpha z \frac{d}{dz}$. On a encore commutation $[T_\alpha, T_\beta] = T_\alpha T_\beta - T_\beta T_\alpha = 0$, reflétant la commutativité de la loi de groupe.

II - 3 - Groupe de rotation à deux dimensions SO(2)

Considérons maintenant le groupe des rotations à deux dimensions, noté SO(2). L'élément générique $R(\alpha)$ dépend d'un paramètre continu, l'angle α de rotation défini modulo 2π . La rotation $R(\alpha)$ agit sur les vecteurs \vec{x} du plan par $\vec{x} \rightarrow \vec{x}' = R(\alpha)\vec{x}$

Où la notation doit être comprise comme l'action d'un opérateur linéaire sur le vecteur \vec{x} , ou encore, dans un repère orthogonal, comme l'action d'une matrice orthogonale sur les composantes x_1, x_2 de \vec{x}

$$\vec{x}' = \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad (3)$$

(la matrice est orthogonale par définition de $SO(2)$, ou encore, géométriquement, parce que les transformations considérées préservent la norme $\|\vec{x}'\| = \|\vec{x}\|$, or $\vec{x}' \cdot \vec{x}' = x'^T (R^T(\alpha) \cdot R(\alpha)) x = \vec{x} \cdot \vec{x}$ donc $R^T(\alpha) \cdot R(\alpha) = 1$). Ces rotations se composent comme on sait bien

$$R(\alpha)R(\beta) = R(\alpha + \beta) = R(\beta)R(\alpha) \quad (4)$$

De façon nouvelle additive et commutative. En fait la loi est la même que celle (4.2) du groupe $U(1)$. En effet il s'agit de deux descriptions équivalentes de la même géométrie du plan, la première à l'aide d'une variable complexe z , la seconde à l'aide de vecteurs à deux composantes \vec{x} .

Dans ce dernier langage, les générateurs infinitésimaux sont des opérateurs, ou des matrices 2×2 . En effet, prenant α infinitésimal et développant au premier ordre, $\cos \alpha \approx 1$, $\sin \alpha \approx \alpha$,

$$\text{donc } \alpha \ll 1 \quad R(\alpha) = 1 - i\alpha j = 1 - i\alpha \begin{pmatrix} 0 & -\alpha \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ avec } j = \begin{pmatrix} 0 & -\alpha \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Où l'apparition du i peut paraître curieuse dans ce problème réel, mais est utile si on veut considérer le générateur J comme hermitien (plutôt qu'antisymétrique réel donc antihermitien). Considérons maintenant la loi de groupe (4) pour $\beta = d\alpha$ infinitésimal, en faisant usage de (5) :

$$R(\alpha + d\alpha) = R(d\alpha)R(\alpha) = (1 - id\alpha J)R(\alpha) = R(\alpha) - id\alpha JR(\alpha)$$

Donc $dR(\alpha) = -id\alpha JR(\alpha)$. On obtient donc l'équation différentielle

$$\frac{d}{d\alpha} R(\alpha) = -iJR(\alpha) \quad (6)$$

où J est, rappelons-le, une matrice fixe, indépendante de α . Cette équation différentielle du premier ordre à coefficients constants et homogène, complétée par la condition initiale $R(0) = 1$, se résout immédiatement en $R(\alpha) = \exp -i\alpha J$. (7)

De la même façon qu'on a dans le sous-paragraphe précédent appliqué les transformations du groupe $U(1)$ à des puissances quelconques (entières) de z , on peut aussi étudier l'application des transformations à des tenseurs à p indices, se transformant donc comme le tenseur de composantes $(x_{i_1}, \dots, x_{i_p})$. Cela fait apparaître de nouveaux générateurs infinitésimaux, qui sont des matrices $2p \times 2p$ agissant sur les composantes des tenseurs. Et à nouveau, l'action

pour une transformation finie s'obtient par exponentiation de la transformation infinitésimale. On parlera de représentation du groupe SO(2) pour cette action sur les tenseurs et on analysera les choses de façon plus systématique.

II – 4 - Groupe de rotation à trois dimensions SO(3)

Comme on le sait bien après le cours de Physique Quantique, les rotations infinitésimales du groupe SO(3) font apparaître trois générateurs infinitésimaux indépendants, notés J_i , $i = 1, 2, 3$ et dotés de relations de commutation non triviales

$$[J_i, J_j] = i \sum_k \epsilon_{ijk} J_k. (8)$$

L'exponentiation permettant de reconstruire la transformation finie à partir de ces générateurs infinitésimaux est plus délicate à mettre en œuvre, à cause de ces relations de commutation.

II – 4 - 1 - *Groupe de Lie, algèbre de Lie, et leur dimension*

Les groupes \mathbb{R}^d , U(1), SO(2) et SO(3) que nous venons d'évoquer sont des exemples de groupes dont les éléments dépendent de façon différentiable de leurs paramètres (ici, des translations ou des angles de rotation). On appelle *groupes de Lie* de tels groupes. D'autres exemples fréquemment rencontrés par le physicien sont le groupe linéaire GL(n) et ses sous-groupes U(n), SU(n), O(n), SO(n). Rappelons la définition des groupes orthogonaux O(n), SO(n). Le groupe O(n) est le groupe des matrices $n \times n$ orthogonales réelles, c'est-à-dire satisfaisant $O.O^T = I$ ou de façon équivalente $O^T.O = I$. Le groupe SO(n) est le sous-groupe du groupe O(n) constitué des matrices orthogonales de déterminant 1.

SO(n) = {O : O.O^T = I, det O = 1}. Le groupe U(n) est le groupe de matrices $n \times n$ complexes et unitaires, U.U⁺ = I ou de façon équivalente U⁺.U = I. (On rappelle que X⁺ = (X^T)^{*}.) Le groupe SU(n) est le sous-groupe du groupe U(n) constitué des matrices unitaires de déterminant 1 SU(n) = {U : U.U⁺ = I, det U = 1}.

II – 4 - 2 - *Transformations infinitésimales, algèbres de Lie*

Les transformations d'un groupe de Lie étant différentiables, on peut considérer un élément infinitésimalement proche de l'identité et le développer au voisinage de l'identité. Par exemple,

Pour une matrice de O(n) infinitésimalement proche de l'identité, écrivons $O = I + X$, avec X infinitésimal : la relation d'orthogonalité s'écrit alors

$$O.O^T = (I + X).(I + X^T) = I \text{ donc au premier ordre en } X,$$

$$o(n) : X + X^T = 0, \tag{9}$$

qui exprime que X est une matrice réelle antisymétrique. On notera par $o(n)$ l'ensemble de ces matrices $n \times n$ antisymétriques. De la même façon, vérifier qu'une matrice unitaire

infinitésimalement proche de l'identité est de la forme $U = I + X$ avec X complexe antihermitique, c'est-à-dire satisfaisant $u(n) : X + X^+ = 0$. (10)

On note $u(n)$ l'ensemble de ces matrices $n \times n$ antihermitiques. Passant alors de $U(n)$ à $SU(n)$ et à sa version infinitésimale, il faut imposer aussi que le déterminant de $U = I + X$ est 1. En utilisant l'identité $\det A = \exp(\text{tr} \log A)$ (vraie pour toute matrice diagonalisable), on a $\det(I + X) = \exp \text{tr} \log(I + X) = \exp \text{tr} (X + \dots) = 1 + \text{tr} X + O(X^2) = 1$ (11)

Au premier ordre, la condition sur les matrices X est donc d'être antihermitiques et de trace nulle. Cela définit un ensemble de matrices que nous noterons $su(n)$. $su(n) : X + X^+ = 0$ et $\text{tr} X = 0$. (12)

II - 4 - 3 - Dimension d'une algèbre de Lie

Il est aisé de compter le nombre de paramètres réels dont dépend une matrice satisfaisant (9), (10) ou (12). Par définition, ce nombre est appelé la *dimension* de l'algèbre de Lie ou du groupe de Lie correspondant.

Ainsi une matrice réelle $n \times n$ dépend de n^2 paramètres, mais les conditions (9) imposent $n + (n - 1) + (n - 2) + \dots + 1 = n(n + 1)/2$ conditions indépendantes $X_{ij} = -X_{ji}$, $i \leq j$. Il demeure donc $n(n - 1)/2$ éléments indépendants, qui est la dimension de l'algèbre de Lie $\mathfrak{o}(n)$ (= $\mathfrak{so}(n)$) ou des groupes de Lie $O(n)$ et $SO(n)$.

Exercice : vérifier que les dimensions des algèbres de Lie précédentes sont données par le tableau suivant

| Groupe de Lie G | Algèbre de Lie \mathfrak{g} | Dimension d |
|-------------------|-------------------------------|--------------------|
| $O(n)$ | $\mathfrak{o}(n)$ | $\frac{n(n-1)}{2}$ |
| $SO(n)$ | $\mathfrak{so}(n)$ | $\frac{n(n-1)}{2}$ |
| $U(n)$ | $\mathfrak{u}(n)$ | n^2 |
| $SU(n)$ | $\mathfrak{su}(n)$ | $n^2 - 1$ |
| \mathbb{R}^d | \mathbb{R}^d | d |

Puisque les algèbres de Lie sont des espaces vectoriels, on peut y choisir une base. On appelle système de générateurs infinitésimaux du groupe de Lie G toute base de son algèbre de Lie. La dimension d'une algèbre de Lie (ou du groupe de Lie correspondant) est donc le nombre maximal de générateurs infinitésimaux indépendants. Par exemple, dans le cas de $SO(3)$, un système de générateurs infinitésimaux, c'est-à-dire une base de matrices antisymétriques 3×3 est donnée par (13)

$$T_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad T_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Noter que ces formules peuvent s'exprimer de façon compacte sous la forme

$$(T_k)_{ij} = -\epsilon_{ijk} \quad (14)$$

à l'aide du tenseur antisymétrique ϵ_{jk} et que les relations de commutation de ces générateurs

$$\text{sont } [T_i, T_j] = \epsilon_{ijk} T_k, \quad (15)$$

à nouveau en termes de ce même tenseur.

Série de TD N° = 3

Exercice 01:

Pour $j = \begin{pmatrix} 0 & -\alpha \\ i & 0 \end{pmatrix}$ vérifier que l'exponentiation de $-i\alpha J$ reproduit bien la matrice de $R(\alpha)$ donnée plus haut. (Indication : calculer les puissances successives J^2, J^3, \dots, J^n et construire $\exp i\alpha J$ par son développement en série.)

Exercice 02: algèbres de Lie

Vérifier que les dimensions des algèbres de Lie précédentes sont données par le tableau suivant

| Groupe de Lie G | Algèbre de Lie \mathfrak{g} | Dimension d |
|-------------------|-------------------------------|--------------------|
| $O(n)$ | $\mathfrak{o}(n)$ | $\frac{n(n-1)}{2}$ |
| $SO(n)$ | $\mathfrak{so}(n)$ | $\frac{n(n-1)}{2}$ |
| $U(n)$ | $\mathfrak{u}(n)$ | n^2 |
| $SU(n)$ | $\mathfrak{su}(n)$ | $n^2 - 1$ |
| \mathbb{R}^d | \mathbb{R}^d | d |

Exercice 0 3: les équations d'E-L:

$\lambda/2(\varphi^*\varphi)^2$. Ecrire les équations d'E-L pour ce lagrangien. Montrer que L est invariant par la transformation $\varphi(x) \rightarrow e^{-iq\alpha}\varphi(x)$, (α indépendant de x !), dont on écrira la version infinitésimale. En déduire l'expression du courant de Noether. Vérifier qu'il est bien de divergence nulle en utilisant les équations d'E-L. Quelle est la charge conservée correspondante ? Quel est le groupe ? Un tel champ complexe est associé à une particule chargée, électriquement par exemple, et la charge de Noether conservée est alors la charge électrique.

Chapitre 4:

Rôle des symétries en physique subatomique

I- Introduction : La symétrie est une caractéristique centrale des théories des particules élémentaires. On peut affirmer que ces théories ont évolué au cours du XXe siècle en donnant à la symétrie un rôle de plus en plus important. En particulier, les théories des interactions fondamentales (forte, électromagnétique et faible) sont basées sur le concept de symétrie locale, ou symétrie de jauge. Également importante est la manière dont certaines symétries, présentent à un niveau fondamental, sont dissimulées dans les faits par un phénomène appelé « brisure spontanée de la symétrie ». Même imparfaites, les symétries constituent un aspect extrêmement important de notre compréhension de l'Univers.

II – C,P et T

Parmi les symétries de la nature, trois jouent un rôle particulier, du fait de leur simplicité :

1. La symétrie miroir, par laquelle on effectue une réflexion de l'espace, comme si l'Univers était examiné dans un miroir. En trois dimensions, cette réflexion est équivalente à une inversion des coordonnées $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$; elle porte aussi le nom de **transformation de parité** et est notée par la lettre P.

2. L'échange entre matière et antimatière, aussi appelé **conjugaison de charge** et noté C.

3. L'**inversion du temps**, ou **inversion du mouvement**, qui est obtenue en changeant le signe du temps t dans les équations microscopiques. Cette opération est notée T. Ces trois opérations de symétrie discrètes ont ceci de particulier que leur carré est égal à l'unité : $P^2 = C^2 = T^2 = 1$. On peut aussi démontrer que le produit CPT des trois opérations est une symétrie exacte de toute théorie raisonnable, même si les symétries individuelles P, C et T peuvent être brisées par certaines interactions fondamentales (en particulier les interactions faibles). Nous allons commencer ce chapitre en étudiant ces trois symétries à tour de rôle.

II – 1 – La parité, ou inversion de l'espace (P)

En général, la transformation de parité est définie par la réflexion de l'espace par rapport à un plan donné, par exemple le plan $x = 0$. Son effet sur les coordonnées dans l'espace-temps serait donc :

$$(t, x, y, z) \rightarrow (t, -x, y, z) \quad (\text{réflexion}) \quad (1)$$

Comme on suppose généralement que les lois fondamentales de la Nature soit invariantes par rotation dans l'espace, on peut ajouter à cette réflexion, en trois dimensions, une rotation de π par rapport à l'axe des x , ce qui fait qu'une transformation équivalente est l'inversion de l'espace :

$$(t, x, y, z) \rightarrow (t, -x, -y, -z) \quad (\text{inversion}) \quad (2)$$

Cette équivalence n'est cependant pas valable en deux dimensions, ou plus généralement dans un nombre pair de dimensions spatiales.

Selon les règles générales de la mécanique quantique, cette transformation de symétrie doit correspondre à un opérateur unitaire Π agissant dans l'espace des phases, tel que $\Pi^2 = 1$ et donc tel que $\Pi^\dagger = \Pi$. Suite à une telle transformation le hamiltonien H est généralement modifié comme suit : $H' = \Pi H \Pi$ (3)

Si le système décrit par le hamiltonien H est invariant par inversion de l'espace, alors $H' = H$ et l'opérateur Π commute avec le hamiltonien : $[H, \Pi] = 0$. Les états propres du hamiltonien sont alors des états propres de Π . Comme $\Pi^2 = 1$, les valeurs propres de Π sont ± 1 .

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste à une particule, un système invariant par inversion est souvent décrit par un potentiel $V(\mathbf{r})$ tel que $V(-\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$. En particulier, en une dimension d'espace, un potentiel symétrique $V(-x) = V(x)$ mène à des solutions à l'équation de Schrödinger qui sont soit paires ($\Pi|\psi\rangle = |\psi\rangle$) ou impaires ($\Pi|\psi\rangle = -|\psi\rangle$).

II – 2 – Rotations et pseudo-rotations

Une rotation est définie comme une transformation préservant la norme des vecteurs et qui peut être obtenue de manière continue de la transformation identité. On montre facilement qu'une rotation est caractérisée par une matrice orthogonale R , donc une matrice telle que $R^T R = I$. Cependant, toutes les matrices orthogonales ne sont pas des rotations : la matrice $-I$, qui effectue une inversion de l'espace, est orthogonale, et toute matrice de la forme $-R$, où R est une matrice de rotation, est aussi orthogonale. Plus précisément, une matrice orthogonale O satisfait nécessairement à la propriété $\det(O^T O) = (\det O)^2 = 1$, d'où $\det O = \pm 1$. Les matrices R dont le déterminant est 1 peuvent être obtenues de manière continue de la matrice identité et correspondent aux vraies rotations. Les autres peuvent toujours être mises sous la forme $-R$, où R est une vraie rotation, et constituent ce qu'on appelle des **pseudo-rotations**.

II – 3 – Scalars, pseudo-scalaires, vecteurs polaires et axiaux

Généralement, une quantité invariante par rotation est qualifiée de **scalaire**, alors qu'une quantité qui se transforme comme les coordonnées (x, y, z) lors d'une rotation est qualifiée de **vecteur**. Cette définition doit être nuancée de la manière suivante : un vrai scalaire est invariant suite à une rotation ou à une pseudo-rotation. Par contre, un **pseudo-scalaire** est une

quantité qui, tout en étant invariante suite à une vraie rotation, change de signe suite à une pseudo-rotation, c'est-à-dire une inversion de l'espace.

De même, un **vecteur polaire** se transforme comme les coordonnées suite à une rotation ou une pseudo-rotation ; en particulier, il change de signe suite à une inversion de l'espace. Par contre, un **vecteur axial** se transforme comme un vecteur suite à une rotation, mais ne change pas de signe suite à une inversion. Parmi les vecteurs polaires, on note la position \mathbf{r} et ses dérivées par rapport au temps (vitesse, accélération), l'impulsion \mathbf{p} , le champ électrique \mathbf{E} . Les vecteurs axiaux, quant à eux, impliquent généralement un produit vectoriel : le moment cinétique \mathbf{J} (orbital ou de spin), le champ magnétique \mathbf{B} . Le produit scalaire d'un vecteur polaire par un vecteur axial, par exemple $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$, est un pseudo-scalaire.

L'opérateur du moment cinétique \mathbf{L} étant un vecteur axial, on a la relation opératorielle $\Pi \mathbf{L} \Pi = -\mathbf{L}$, ou encore $[\Pi, \mathbf{L}] = 0$. Ceci signifie que les états propres d'une composante de \mathbf{L} auront aussi une parité bien définie (ce seront des états propres de Π). On montre sans peine, d'après l'expression des harmoniques sphériques, qu'une fonction d'onde appartenant à un multiplet de nombre quantique orbital l a une parité $(-1)^l$.

II – 3 – Parité du champ de Dirac

Quel est l'effet de l'inversion de l'espace sur un spineur de Dirac ψ ? Rappelons que, dans la représentation chirale, le spineur de Dirac à quatre composantes est formé des spineurs droit et gauche à deux composantes de la manière suivante :

$$\psi = \begin{pmatrix} \chi_L \\ \chi_R \end{pmatrix} \quad (\text{rep. chirale}) \quad (4)$$

(dorénavant la notation $\chi_{L,R}$ est utilisée pour les spineurs de Weyl). On est donc en droit de supposer que l'opération d'inversion va simplement échanger les deux spineurs de Weyl, ce qui est obtenu d'une multiplication par la matrice γ^0 (la représentation chirale des matrices de Dirac est la plus appropriée pour cet exercice, mais le résultat est indépendant de la représentation). On définit donc l'opération d'inversion sur un spineur de Dirac comme $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi^0(\mathbf{r}, t) = \eta \gamma^0 \psi(-\mathbf{r}, t)$. (5)

où $\eta = \pm 1$ est la **parité intrinsèque** du champ de Dirac considéré. Un état de fermion ou d'antifermion avec vecteur d'onde \mathbf{k} non nul n'est pas un état propre de la parité, puisque \mathbf{k}

serait transformé en $-\mathbf{k}$ suite à une inversion de l'espace. Par contre, si on considère les états représentant des particules au repos, alors on voit clairement, à partir de la représentation de Dirac de la matrice γ_0 et les équations déterminent maintenant la forme des vecteurs propres associés. Pour faciliter les choses, commençons par le cas de particules immobiles ($\mathbf{p} = 0$). L'équation aux valeurs propres prend alors la forme très simple $\begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & -m \end{pmatrix} \psi_0 = E\psi_0$ et les vecteurs propres normalisés, notés $u_i (i = 1, 2, 3, 4)$ sont simplement

$$E = m : \quad u_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad E = -m : \quad u_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

que les antifermions ont une parité opposée à celle des fermions.

II – 4 – Composantes droite et gauche d'un spineur de Dirac

Dans le but d'extraire ces composantes dans le cadre de spineurs à quatre composantes, on introduit la matrice suivante : $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ (6)

La forme explicite de cette matrice est la suivante, dans les deux représentations utilisées des matrices de Dirac :

$$\gamma^5 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{rep. chirale}) \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{rep. de Dirac}) \quad (7)$$

On montre facilement les propriétés suivantes de γ^5 :

$$\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0 \quad (\gamma^5)^2 = 1 \quad \gamma^0\gamma^5\gamma^0 = (\gamma^5)^+ \quad (8)$$

On définit ensuite les composantes droite et gauche du spineur de Dirac comme

$$\psi_R = \frac{1}{2}(1 + \gamma^5)\psi \quad \psi_L = \frac{1}{2}(1 - \gamma^5)\psi \quad (9)$$

En effet, dans la représentation chirale,

$$\psi_R = \frac{1}{2}(1 + \gamma^5)\psi = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \psi = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_R \end{pmatrix}$$

$$\psi_L = \frac{1}{2}(1 - \gamma^5)\psi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \psi = \begin{pmatrix} \chi_L \\ 0 \end{pmatrix}$$

III - L'inversion du temps (T)

La dernière des trois grandes symétries discrètes est l'inversion du temps, qui revient à changer t en $-t$ dans les équations fondamentales. L'inversion du temps est parfois appelée **inversion dumouvement**, car elle revient à passer le film des événements à l'envers. Comme l'irréversibilité est une caractéristique fondamentale des phénomènes complexes, il semble que l'inversion du cours du temps ne soit pas une symétrie de la nature. Par contre, sauf une très rare exception qui sera discutée au chapitre suivant, les phénomènes microscopiques semblent respecter cette symétrie. C'est vrai en mécanique classique si on excepte les processus dissipatifs, et c'est vrai en mécanique quantique si on assortit l'inversion d'une conjugaison complexe. Considérons à cet effet l'équation de Schrödinger générale :

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad (8.33)$$

En appliquant une conjugaison complexe en même temps que la transformation $t \rightarrow -t$, on obtient

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle^* = H^* |\psi\rangle^* \quad (8.34)$$

L'équation de Schrödinger est encore valable pour le nouvel état, en autant que $H = H^*$. L'invariance par inversion du temps de l'équation de Schrödinger impose donc une condition au hamiltonien, qui n'est pas toujours respectée pour un hamiltonien non fondamental. Par exemple, l'imposition du champ magnétique statique brise l'invariance par inversion du temps.

L'opération d'inversion du temps n'est pas représentée par un opérateur, comme Π ou C , avec des valeurs propres bien définies, même si le carré de cette opération est manifestement

l'unité. La raison en est que, d'après Wigner, l'opération d'inversion du temps est représentée par un opérateur **antilinéaire**, c'est-à-dire un opérateur T tel que

$$T\lambda|\psi\rangle = \lambda^*T|\psi\rangle \quad (8.35)$$

Un opérateur anti-linéaire qui préserve la norme des états est qualifié d'**antiunitaire**. Un opérateur anti-linéaire ne peut pas vraiment être représenté par une matrice, et la notion de valeur propre n'a pas de sens dans ce cas. Par contre, un opérateur A devient TAT^{-1} par inversion du temps.

Les quantités qui changent de signe lors de l'inversion du temps sont celles qui sont habituellement associées à une vitesse, comme l'impulsion **p**, le moment cinétique **J** et le champ magnétique **B**.

Une conséquence immédiate de la symétrie d'inversion du temps est le principe du **bilan détaillé** ou encore de **micro réversibilité**, qui stipule qu'une réaction qui se produit dans un sens ($A + B \rightarrow C + D$) doit aussi se produire dans l'autre sens ($C + D \rightarrow A + B$) pour des conditions identiques d'énergie, si on échange les états initiaux et finaux. C'est ce qui est observé dans le cadre des interactions électromagnétiques et fortes; seules les interactions faibles pourraient en principe briser (très faiblement) ce principe, mais leur faiblesse empêche toute confirmation expérimentale de cette violation de la micro réversibilité.

IV - Théorème CPT

Un théorème célèbre, attribué à SCHWINGER, LÜDERS et PAULI, stipule que pour toute théorie des champs invariante de Lorentz, l'action consécutive de C, P et T doit laisser la théorie invariante, même si l'une des trois opérations n'est pas une symétrie de la théorie. Autrement dit, si on échange particules et antiparticules, qu'on reflète l'Univers dans un miroir et qu'on inverse le sens du temps, on devrait observer les mêmes processus avec les mêmes probabilités. Parmi les conséquences du théorème CPT, mentionnons :

1. La masse d'une particule doit être strictement égale à celle de son antiparticule. Ceci est vérifié de manière très précise dans les systèmes de kaons neutres, où la différence relative de masse entre le K^0 et le \bar{K}^0 est inférieure à 6×10^{-19} .

2. Une particule subatomique ne doit pas posséder de moment dipolaire électrique permanent. L'expérience la plus précise à ce sujet donne la limite supérieure suivante au moment dipolaire électrique du neutron : $|\mathbf{d}/e| < 6 \times 10^{-27} \text{m}$.

Exercice 01: le champ de Dirac.

On définit l'opération de parité – ou inversion de l'espace – par la transformation $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$.

L'effet

de cette transformation sur le champ de Dirac est le suivant :

$$\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi^0(\mathbf{r}, t) = \eta \gamma^0 \psi(-\mathbf{r}, t)$$

où $\eta = \pm 1$ est la *parité intrinsèque* du champ de Dirac.

Partez de l'action associée au champ de Dirac :

$$S = \int d^4x (i\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi - m\bar{\psi}\psi)$$

et démontrez que cette action est invariante lorsqu'on procède à une transformation de parité.

Exercice 02: Composantes droite et gauche d'un spineur de Dirac.

Vérifiez l'équation $\mathcal{L}_D = i\bar{\psi}_L\gamma^\mu\partial_\mu\psi_L + i\bar{\psi}_R\gamma^\mu\partial_\mu\psi_R - m(\bar{\psi}_L\psi_R + \bar{\psi}_R\psi_L)$ en substituant les expressions des projections droite et gauche et en utilisant les propriétés de la matrice γ^5 .

Exercice 03: Composantes droite et gauche d'un spineur de Dirac.

- Démontrez les propriétés $\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0$ $(\gamma^5)^2 = 1$ $\gamma^0\gamma^5\gamma^0 = (\gamma^5)^+$.

Exercice 04: le champ de Dirac.

Démontrez, à partir de la transformation de parité $\psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \psi^0(\mathbf{r}, t) = \eta\gamma^0\psi(-\mathbf{r}, t)$, que l'expression $\bar{\psi}_1\gamma^5\psi_2$ est un pseudo - scalaire. ψ_1 et ψ_2 sont deux spineurs de Dirac quelconques ayant la même parité intrinsèque.

De même, démontrez que la partie spatiale du quadrivecteur $\bar{\psi}_1\gamma^5\gamma^\mu\psi_2$ est un vecteur axial, ou pseudo-vecteur.

Chapitre 5:

Les symétries discrètes C (conjugaison de charge), P (parité) et T (inversion du temps)

I - Théorème de Wigner

I – 1 - Théorème de Wigner : Dans un système quantique, les états (purs) sont représentés par les vecteurs $|\psi\rangle$ normalisés d'un espace de Hilbert H , ou plus précisément par ces vecteurs à une phase près, $|\psi\rangle \sim |\psi\rangle e^{i\alpha}$, ce qu'on appelle les *rayons*. Les "observables" A sont des opérateurs auto-adjoints sur H ,

$A = A^\dagger$. Les quantités observables sont les $|\langle \phi | A | \psi \rangle|$. Supposons qu'il existe une transformation inversible (une "bijection") g du système (états *et* observables) qui laissent inchangées ces quantités, c'est-à-dire

$|\phi\rangle \rightarrow |{}^g\phi\rangle$, $|\psi\rangle \rightarrow |{}^g\psi\rangle$, $A \rightarrow {}^gA$ telle que $|\langle \phi | A | \psi \rangle| = |\langle {}^g\phi | {}^gA | {}^g\psi \rangle|$. On démontre alors le théorème suivant :

Théorème de Wigner Si une bijection entre les rayons et les opérateurs auto-adjoints d'un espace de Hilbert H préserve les modules des produits scalaires

$$|\langle \phi | A | \psi \rangle| = |\langle {}^g\phi | {}^gA | {}^g\psi \rangle| \quad (1)$$

alors cette bijection est réalisée par un opérateur $U(g)$, linéaire ou anti linéaire, unitaire sur H , et unique à une phase près, c'est-à-dire

$|{}^g\psi\rangle = U(g) |\psi\rangle$, ${}^gA = U(g)AU^\dagger(g)$; $U(g)U^\dagger(g) = U^\dagger(g)U(g) = I$. (2) Rappelons d'abord ce qu'on entend par opérateur anti linéaire. Un tel opérateur satisfait

$$U(\lambda |\phi\rangle + \mu |\psi\rangle) = \lambda^* U|\phi\rangle + \mu^* U|\psi\rangle \quad (3)$$

Et son adjoint est défini par

$$\langle \phi | U^\dagger | \psi \rangle = \langle U\phi | \psi \rangle^* = \langle \psi | U\phi \rangle \quad (4)$$

De façon à être compatible avec la linéarité :

$$\langle \lambda \phi | U^\dagger | \psi \rangle = \lambda^* \langle \phi | U^\dagger | \psi \rangle. \quad (5)$$

S'il est en outre unitaire, on a

$$\langle \psi | \phi \rangle^* = \langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi | U^\dagger U | \psi \rangle = \langle U\phi | U\psi \rangle^* \quad (6)$$

Donc $\langle U\phi | U\psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle$. Nous admettons ce théorème de Wigner, dont la preuve est un peu laborieuse.

Une fois déterminée la transformation des états par l'opérateur $U(g)$, on connaît celle des observables ${}^gA = U(g)AU^\dagger(g)$ de façon à avoir

$$\begin{aligned} \langle {}^g\phi | {}^gA | {}^g\psi \rangle &= \langle U\phi | UAU^\dagger | U\psi \rangle = \langle \phi | U^\dagger UAU^\dagger U | \psi \rangle^\# \quad (7) \\ &= \langle \phi | A | \psi \rangle^\# \end{aligned}$$

Avec rien ou *selon que U est linéaire ou anti linéaire. Le cas anti linéaire n'a pas qu'un intérêt académique. Il se rencontre dans l'étude du renversement du sens du temps.

Les transformations d'un système quantique, c'est-à-dire les bijections du théorème de Wigner, forment un groupe G : si g_1 et g_2 sont de telles bijections, leur composition g_1g_2 en est une aussi, ainsi que g_1^{-1} etc. Cette transformation g_1g_2 est réalisée sur les états soit par $U(g_1)U(g_2)$ soit par $U(g_1g_2)$ et le théorème de Wigner nous dit que ces deux expressions doivent coïncider à une phase près. Les opérateurs $U(g)$ qu'on va supposer linéaires jusqu'à nouvel ordre satisfont donc :

$$U(g_1)U(g_2) = e^{i\zeta(g_1, g_2)}U(g_1g_2) \quad (6.8)$$

Et forment ce qu'on appelle une représentation à une phase près de G . La mécanique quantique nous force donc à élargir un peu le cadre de la théorie des représentations. Le problème n'est pas académique, on montre par exemple que les représentations à une phase près du groupe des rotations $SO(3)$ se ramènent à des représentations à un signe près : on a d'une part les vraies représentations, avec des représentations irréductibles décrites par un spin j entier ; et de l'autre les représentations irréductibles à un signe près de spin demi-entier.

I – 2 - Invariance d'un système quantique

Supposons maintenant que sous l'action d'un certain groupe de transformations G , le système est invariant, en ce sens que sa dynamique, contrôlée par son hamiltonien H , est inchangée.

Supposons aussi pour simplifier que H est indépendant du temps. On va écrire

$$H = U(g)HU^+(g) \quad (9)$$

$$\text{Ou encore } [H, U(g)] = 0. \quad (10)$$

On définit donc une invariance (ou symétrie) d'un système quantique sous l'action d'un groupe G comme l'existence d'une représentation projective unitaire (linéaire ou anti linéaire) de ce groupe dans l'espace des états, qui commute avec l'hamiltonien. On sait aussi que l'hamiltonien H est le générateur infinitésimal de l'évolution temporelle. Si à l'instant $t = 0$ le système est dans un état (pur) décrit par le vecteur $|\psi_0\rangle$, il est décrit à tout instant t par $|\psi(t)\rangle$ solution de $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$ avec la condition initiale $|\psi(0)\rangle = |\psi_0\rangle$, donc, avec l'hypothèse faite que H ne dépend pas du temps, $|\psi(t)\rangle = \exp(-iHt/\hbar) |\psi_0\rangle$.

L'évolution temporelle des états est donc fournie par l'opérateur unitaire

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Ht\right) \quad (11)$$

Et l'hypothèse d'invariance (6.10) peut se redire sous la forme $[U(t), U(g)] = 0$ (12)

L'évolution temporelle commute avec l'action du groupe d'invariance.

- Ce formalisme est très général et couvre des situations très variées : les transformations laissant le système invariant peuvent être de natures très différentes, transformations géométriques –translations, rotations, réflexions, inversion, dilatation, etc, permutations de composantes du système, “symétries internes” ou de jauge, . . .

- L'hypothèse d'invariance implique l'existence de lois de conservation. En effet toute observable F fonction des $U(g)$ commute avec H , donc est une quantité conservée

$$i \hbar \partial F(U(g))/\partial t = [F(U(g)), H] = 0 \quad (13)$$

et chacune de ses valeurs propres est un “bon nombre quantique” : si le système appartient à un sous-espace propre de F au temps $t = 0$, il y demeure lors de son évolution dans le temps. Si G est un groupe de Lie, pour g une transformation infinitésimale et si T désignent les générateurs infinitésimaux dans la représentation considérée.

$U(g) = I + i \delta\alpha^j T_j$ (où on choisit les T auto-adjoints pour avoir U unitaire), les T_j sont des observables commutant avec H , donc des quantités conservées.

Exemples. Groupe des translations d'espace ou de temps $\rightarrow \vec{P}$, Impulsion et énergie : groupe des rotations $\rightarrow \vec{J}$ moment cinétique. Sous-groupe des rotations $SO(2)$ autour de l'axe $Oz \rightarrow$ composante J_z de \vec{J} . Un autre exemple sur lequel nous revenons plus bas concerne l'inversion d'espace et la parité. Considérons l'opération P d'inversion d'espace, $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$. Dans l'espace de Hilbert d'une théorie quantique, elle est représentée par un certain opérateur unitaire $U(P)$. Comme $U(P)^2 = I$, les valeurs propres de $U(P)$ sont ± 1 , et ses vecteurs propres, qui engendrent des représentations de dimension 1, sont indexés par cette valeur propre nommée *parité*. Si l'hamiltonien est invariant par P , c'est-à-dire commute avec $U(P)$, on peut diagonaliser simultanément H et $U(P)$, c'est-à-dire trouver des états stationnaires (états propres de H) de parité donnée. Les états propres d'énergie ont donc une parité fixée. Autre manifestation de cette commutation, si le système a été préparé à l'instant $t = 0$ dans un état de parité donnée, l'évolution temporelle le fera rester dans cette parité. C'est en ce sens que la parité est une quantité conservée, ou “un bon nombre quantique”. Par abus de langage, on donne aussi parfois le nom de parité à la transformation P .

- Mais l'hypothèse d'invariance (6.10) faite plus haute a une autre conséquence, d'application fréquente et importante. L'espace des états H qui “porte une représentation” du groupe

G est décomposé en représentations irréductibles. Si ces représentations $D(\rho)$ sont supposées de multiplicité 1, dans chaque espace $E(\rho)$, l'Hamiltonien est multiple de l'identité en vertu du Corollaire 1 du lemme de Schur. On a donc dans ce cas une information complète sur la nature du spectre : les espaces propres sont les $E(\rho)$ et les multiplicités des valeurs propres de H sont égales à $\dim E(\rho)$ (Il peut arriver que la multiplicité d'une valeur propre de H soit plus élevée, soit à cause de l'existence d'un groupe de symétrie plus grand que G , soit parce que certaines représentations viennent en paires complexes conjuguées, soit pour une autre raison et on parle alors de "dégénérescence accidentelle").

Si certaines représentations $D^{(\rho)}$ apparaissent avec une multiplicité m_ρ supérieure à 1, le lemme de Schur n'interdit pas que H ait des éléments de matrice entre

les espaces $E^{(\rho,i)}$, $i = 1, \dots, m_\rho$; il faut encore diagonaliser H dans la somme de ces espaces $\bigoplus_{i=1}^{m_\rho} E^{(\rho,i)}$, ce qui est tout de même plus simple que le problème de diagonalisation dans l'espace H de départ. On verra plus bas que le théorème de Wigner-Eckart permet de réduire encore la complexité de ce dernier calcul. La théorie des groupes va donc nous simplifier considérablement la tâche. . .

II - Covariance des grandeurs et invariance des lois de la physique

Toutes les lois de la Physique que nous connaissons sont invariantes par l'action des rotations. Dans le point de vue passif, cela signifie que les dites lois ne dépendent pas de l'orientation du repère de coordonnées, une chose heureuse pour l'expérimentation ! Dans le point de vue actif, cela veut dire qu'elles s'appliquent de la même façon à un système qu'au système obtenu par rotation. Cela implique aussi que toute équation du mouvement (par exemple

$\vec{J} = \vec{M}$, moment des forces appliquées, en mécanique) ou de contrainte (par exemple $\operatorname{div} \vec{E} = \rho$ en électricité) reliant différentes quantités physiques implique au membre de gauche et au membre de droite des objets de nature tensorielle identique, se transformant donc de la même façon par rotation.

Cela est apparent sur les lois de la mécanique, sur celles de l'électromagnétisme, y compris les lois de Maxwell, sur les lois de Hooke, de Fick qu'on vient de rappeler, etc. Cela est dû au caractère *covariant* des grandeurs considérées. Ce mot "covariant" couvre les différentes situations rencontrées ci-dessus, scalaire, vecteur, tenseur de rang approprié. . .

Il est naturel de se demander si cette invariance des lois de la physique s'étend à d'autres transformations que les rotations.

– translations d'espace ou de temps (la réponse est oui, sinon les lois de la physique dépendraient de l'endroit ou du moment de l'expérience !);

– transformations de Galilée mêlant transformations d'espace et de temps, dans lesquelles les deux repères de coordonnées diffèrent non seulement par une combinaison des transformations précédentes (rotation R et translation d'espace \vec{a} et de temps δ) mais par une translation de vitesse constante \vec{v} : $\vec{x}' = R\vec{x} + \vec{v}t + \vec{a}$, $t' = t + \delta$ (repères *inertiels*) ; l'invariance de Galilée, vraie pour les lois de la mécanique, ne l'est plus pour celles de l'électromagnétisme : on doit lui substituer l'invariance relativiste.

– ou encore réflexions et inversion/parité. Pour ces deux dernières, les choses sont plus

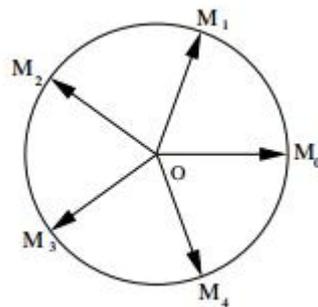


Figure 1. – La somme des vecteurs OM_i est nulle par symétrie de rotation de $2\pi/5$.

Considérons le problème d'un électron placé dans le champ de trois protons fixés aux trois sommets d'un triangle équilatéral. Le problème admet la symétrie du groupe (de rotations et réflexions) du triangle : il s'agit d'un groupe d'ordre 6, qui a trois représentations inéquivalentes de dimensions 1, 1 et 2 (on a bien $1^2 + 1^2 + 2^2 = 6$). Sur la seule base de la théorie des groupes, nous apprenons immédiatement et sans aucun calcul que le spectre d'énergie de l'électron est constitué de niveaux de multiplicité 1 ou 2.

III - Symétries discrètes en physique quantique : parité, renversement du temps.

III – 1 - Transformation d'un état quantique sous l'effet de la parité

Intéressons-nous d'abord à la transformation d'un état quantique sous l'effet de l'inversion/parité, $P : \vec{x} \rightarrow -\vec{x}$. Selon le théorème de Wigner, cette transformation est réalisée par un opérateur unitaire $U(P)$. Comme la parité est "involutive" (c'est-à-dire de carré égal à

la transformation identité), le groupe qu'elle engendre est le groupe Z_2 . Ses représentations irréductibles sont de dimension 1 par le lemme de Schur. On s'attend à ce que dans une représentation irréductible $U(P) = \eta_P$, avec $\eta_P = 1$ ou $= -1$ (La possibilité d'avoir des représentations à une phase près élargit les possibilités à des représentations dans lesquelles $U(P) = e^{i\alpha}$, mais nous ne considérerons pas cette possibilité ici).

Pour un état à une particule $|\varphi\rangle$ de parité donnée, on écrit

$$|\varphi'\rangle = U(P) |\varphi\rangle = \eta_P |\varphi\rangle \quad (14)$$

et sa fonction d'onde

$$\varphi(\vec{x}) = \langle \vec{x} | \varphi \rangle = \langle \vec{x} | U^\dagger(P) U(P) | \varphi \rangle = \langle -\vec{x} | \varphi' \rangle = \varphi'(-\vec{x}) = \eta_P \varphi(-\vec{x}) \quad (15)$$

VI - SYMETRIES DISCRETES : P, C, T

Est une fonction paire ou impaire, selon le signe de la parité intrinsèque η_P de la particule considérée. Cette parité intrinsèque a un certain arbitraire et peut parfois être redéfinie, voir des exemples ci-dessous. L'opérateur $U(P)$ ne commute pas avec l'opérateur impulsion (mais anti commute !) : on ne peut trouver de vecteur propre commun à $U(P)$ et à \vec{p} . Agissant sur un état d'impulsion \vec{p} et de spin s_z fixés, $U(P)$ renverse le sens de \vec{p} mais n'affecte pas s_z (rappelons que classiquement, le moment cinétique est un pseudo-vecteur : il est invariant par inversion/parité). On écrit donc pour la transformation d'un état à une particule d'impulsion \vec{p} et de spin s_z donnés :

$$U(P) |\vec{p}, s_z\rangle = \eta_P |-\vec{p}, s_z\rangle \quad (16)$$

IV - Molécule diatomique :

D'autres symétries Z_2 que la parité peut être à l'œuvre : considèrent ainsi les symétries d'une molécule diatomique. Soit Oz l'axe de symétrie de la molécule. Le groupe d'invariance est $C_{\infty v}$. L'invariance par rotation autour de Oz implique que la composante

$\Lambda = |L_z|$ du moment angulaire est conservée et on note Σ, Π, Δ etc les états correspondant à

$\Lambda = 0, 1, 2, \dots$. En ce qui concerne l'invariance par réflexion dans tout plan passant par Δ , on peut distinguer les états pairs ou impairs dans cette réflexion : cela est noté par un indice supérieur \pm ; enfin si les deux atomes de la molécule sont identiques, le groupe est $D_{\infty h}$ et on peut distinguer les états pairs (g) ou impairs (u) dans l'inversion des coordonnées électroniques. Un état sera finalement noté

$2S+1 \Pi^{\pm u, \Sigma^{\pm} g}$ etc. Empiriquement le fondamental de la molécule a la symétrie maximale, c'est un état $1 \Sigma^+$ ou $1 \Sigma^+ g$.

Exercice 01: le groupe des quaternions Q .

On considère le groupe constitué des éléments $\pm e, \pm i, \pm j$ et $\pm k$ satisfaisant les relations $i^2 = j^2 = k^2 = -e, i, j, k$, etc par permutation cyclique. C'est le *groupe des quaternions* Q . Montrer qu'on peut trouver une représentation de dimension 2 de Q en termes des matrices de Pauli $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ et $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. En déduire que Q a cinq représentations irréductibles et cinq classes. Que sont ces classes ? Quelles sont les valeurs possibles des caractères pour les classes de i, j ou k ?

Exercice 0 2: groupe $SO(3)$.

Décomposition d'une représentation de $SO(3)$ en représentations irréductibles de son sous-groupe O .

On étudie la décomposition de la représentation de dimension 5 de $SO(3)$ en représentations irréductibles du groupe du cube O . On rappelle que $\chi_{j=2}(\theta) = \sin(5\theta/2) / \sin \theta/2$.

- Calculer la valeur que prend $\chi_{j=2}$ dans les différentes classes du groupe O .
- En utilisant la table des caractères de O construite en TD, déterminer combien de représentations irréductibles de O apparaissent dans cette décomposition.
- Déterminer quelles sont ces représentations.

Exercice 0 3 : groupe $U(1)$.

On cherche toutes les fonctions f dérivables satisfaisant $f(x)f(y) = f(x + y)$.

- Montrer que f satisfait $f'(x) = k f(x)$ où k est une constante arbitraire et en déduire que $f(x) = e^{kx}$.
- Appliquer ce résultat à la détermination des représentations complexes irréductibles du groupe $U(1)$.

Chapitre 6:

Interaction des particules lourdes chargées avec la matière

I -INTRODUCTION : D'une manière générale, on peut définir un rayonnement ou radiation comme un mode de propagation de l'énergie dans l'espace, sous forme d'ondes électromagnétiques ou de particules. Les rayonnements ne peuvent être détectés et caractérisés que grâce à leurs interactions avec la matière dans laquelle ils se propagent. Ils peuvent céder au milieu qu'ils traversent, la totalité ou une partie de leur énergie au cours de ces interactions. Un rayonnement est dit ionisant quand il est susceptible d'arracher des électrons à la matière. Une définition plus exhaustive est donnée : « un rayonnement ionisant est un transport d'énergie sous la forme des particules ou d'ondes électromagnétiques d'une longueur d'ondes inférieure ou égale à 100 nanomètres, soit d'une fréquence supérieure ou égale à 3×10^{15} hertz, pouvant produire des ions directement ou indirectement. ». L'équivalent en énergie correspond à 12,4 eV. Parmi ces rayonnements, on distingue ceux qui sont directement ionisants, particules chargées, de ceux qui sont dits indirectement ionisants car n'étant pas chargés.

II - Rayonnements directement ionisants (Particules chargées) : Une particule chargée pénétrante dans un milieu, interagit par la force coulombienne, avec les noyaux ou les électrons orbitaux des atomes cibles. Quel que soit le mécanisme d'interaction entre les particules chargées et la matière, il y a transfert progressif d'énergie et ralentissement des particules incidentes.

III- Caractéristiques de l'interaction:

III -1 - **Pouvoir d'arrêt :** Le pouvoir d'arrêt S est la perte moyenne d'énergie de la particule par distance parcourue, mesurée par exemple en $\text{KeV} \cdot \mu\text{m}^{-1}$.

$$S = S_c + S_f$$

III - 2 - **Pouvoir d'arrêt par collision :** Le pouvoir d'arrêt par freinage est défini comme la perte de l'énergie cinétique de la particule chargée incident par le processus collision avec les électrons atomique le long de son parcours

$$S_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta x} \quad (1)$$

ΔE_c : L'énergie cinétique perdue lors de collision avec les électrons atomiques.

ΔX : la longueur du parcours de la particule incidente dans la matière.

III - 3 - ***Pouvoir d'arrêt par freinage :***

Le pouvoir d'arrêt par freinage est défini comme la perte de l'énergie cinétique de la particule chargée incident par le processus de freinage (radiation) le long de son parcours.

$$S_f = \frac{\Delta E_f}{\Delta x} \quad (2)$$

ΔE_f : L'énergie cinétique perdue lors de l'émission par freinage.

ΔX : la longueur du parcours de la particule incidente dans la matière.

III -2 - Transfert d'énergie linéaire(TEL) : On appelle Transfert d'énergie linéaire : la quantité d'énergie transférée au milieu cible par la particule incidente par le processus de collision, par unité de longueur de parcours. Le TEL s'exprime en $\text{KeV} \cdot \mu\text{m}^{-1}$.

$$\text{TEL} = S_c(3)$$

III-3 - Densité linéique d'ionisation(DLI): On définit la densité linéique d'ionisation comme le nombre d'ionisations produit par une particule incidente, par unité de longueur de trajectoire. La DLI s'exprime en (paires d'ion). μm^{-1} .

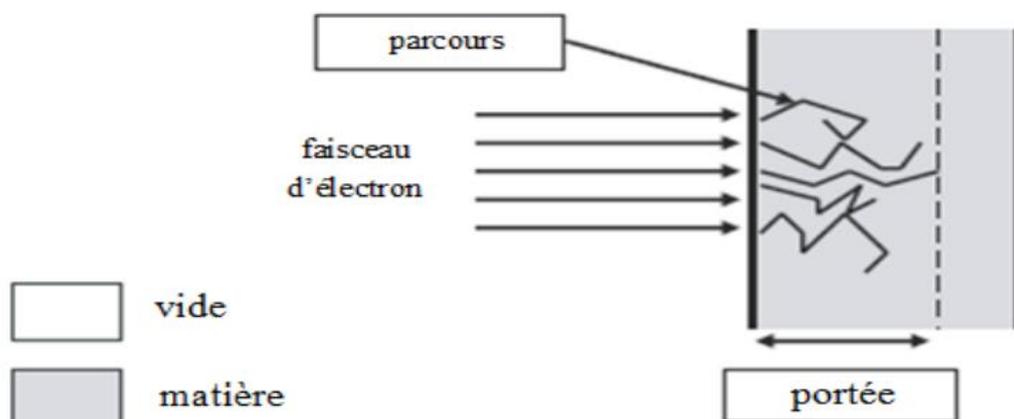
$$DLI = \frac{TEL}{w_i} \quad (4)$$

w_i est l'énergie moyenne transférée pour chaque ionisation.

III – 4 - Le parcours : Les électrons ont une trajectoire très sinueuse : en effet, on observe généralement une déviation lors de chaque mode d'interaction (ionisation, excitation, freinage). Certains peuvent même subir une déviation de 180° (phénomène de rétrodiffusion). Pour caractériser la trajectoire d'électrons ou de rayonnements électroniques, deux grandeurs peuvent être définies.

– le parcours : il s'agit de la longueur réelle de la trajectoire de l'électron. Cette grandeur est peu utilisée en radioprotection.

– la portée : elle représente la profondeur maximale atteinte par un faisceau d'électrons dans un milieu considéré. Cette grandeur est très utilisée en radioprotection lors de la conception d'écran.



1) Interaction électromagnétique :

- Particule massive chargée
 - Electron atomique : excitation ou ionisation de l'atome
 - Noyau : diffusion (élastique ou inélastique), bremsstrahlung, production de paires
 - Rayonnement cohérent : effet Cherenkov, rayonnement de transition
- Particule massive neutre : (presque) pas d'interaction
- Photon
 - Electron atomique : diffusion Compton, effet photoélectrique
 - Noyau : production de paires.

2) Interaction forte

Négligeable sauf entre les hadrons de haute énergie et les noyaux

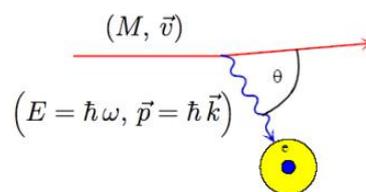
3) Interaction faible :

Négligeable la plupart du temps, sauf pour les neutrinos

Les particules neutres sont détectées par le biais des particules chargées secondaires créées lors de l'interaction avec la matière

Généralement, à basse énergie, les interactions avec les atomiques sont dominantes, tandis qu'à haute énergie, les interactions avec les noyaux sont dominantes

On ne considère ici que des particules telles que $m > m_{\mu} \approx 200 m_e$ (ie tout sauf e^{\pm}) : $\mu^{\pm}, \pi^{\pm}, \alpha, p, \dots$



A basse énergie, une particule lourde perd de l'énergie dans la matière lors de collisions avec les électrons atomiques de la cible (échange d'un photon) :

Excitation de l'atome

Si $\hbar\omega$ est suffisamment grand, on peut observer une ionisation

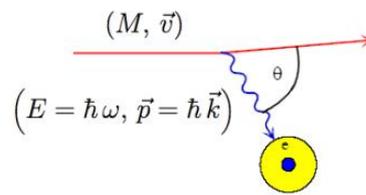
Parfois appelé pertes par collision

Dans certains cas, le photon peut s'échapper du milieu au lieu d'ioniser l'atome (effet

Cherenkov et rayonnement de transition).

Voir ultérieurement

Les collisions avec le noyau sont négligeables ($m_e \ll m_{\text{Noy}}$) tant que l'énergie n'est pas trop élevée



Le terme « collision » est à prendre au sens de la mécanique quantique et non de la physique galiléenne.

Rien à voir avec une collision automobile mais plutôt comme une interaction à plus ou moins grande distance.

La section efficace est très faible ($\sigma \approx 10^{-16}-10^{-17} \text{ cm}^2$) mais le nombre d'atomes est très élevé ($N_A \approx 10^{23} \text{ atomes/cm}^3$).

Un proton de 10 MeV perd toute son énergie dans 250 μm de cuivre.

Le nombre d'interactions est régi par la statistique, mais il est très grand :

\Rightarrow les fluctuations relatives sont très petites

En pratique, on observe une diminution « continue » de l'énergie jusqu'à l'énergie thermique des atomes du milieu

On utilise la perte d'énergie moyenne par unité de longueur sur le parcours : $\left\langle \frac{dE}{dx} \right\rangle$

Les électrons libérés sont parfois assez énergétiques pour ioniser d'autres atomes du milieu.

Ce sont les électrons δ .

La mécanique quantique relativiste permet d'écrire la formule de Bethe – Bloch pour décrire l'énergie moyenne perdue par les particules par ionisation :

$$\left\langle \frac{dE}{dx} \right\rangle = -4\pi N_A r_e^2 m_e c^2 z^2 \frac{Z}{A\beta^2} \left[\ln \left(\frac{2m_e c^2 \gamma^2 \beta^2}{I^2} \right) - \beta^2 - \frac{\delta}{2} - \frac{C}{Z} \right]$$

Domaine de validité :

Dès que la particule incidente a une vitesse, vitesse des électrons atomiques

$$\beta_{\min} = \frac{v}{c} \approx 0.01$$

Tant que le rayonnement de freinage ne domine pas (voir plus loin)

• Typiquement, il faut $E < 1 \text{ TeV}$ pour des μ^\pm

$$\left\langle \frac{dE}{dx} \right\rangle = -4\pi N_A r_e^2 m_e c^2 z^2 \frac{Z}{A\beta^2} \left[\ln \left(\frac{2m_e c^2 \gamma^2 \beta^2}{I^2} \right) - \beta^2 - \frac{\delta}{2} - \frac{C}{Z} \right]$$

L'énergie moyenne s'exprime en $\text{MeV g}^{-1} \text{ cm}^2$.

$N_A \approx 6,02 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$: Nombre d'Avogadro

$r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} = 2,8 \cdot 10^{-15} \text{ m}$: Rayon classique.

m_e : masse de l'électrons' exprime eng/mol.

A : masse atomique de la cible.

Dépendances :

- Ne dépend pas de la masse M de la particule incidente mais uniquement de sa charge z et de sa vitesse β !

- Dépend de la cible par l'intermédiaire de I , δ et C

On pose :

$$K = 4\pi N_A r_e^2 m_e c^2 \approx 0,307 \text{ MeV g}^{-1} \text{ cm}^2$$

On gardera Bethe-Block sous la forme :

$$\left\langle \frac{dE}{dx} \right\rangle = -K \frac{z^2 Z}{\beta^2 A} \left[\ln \left(\frac{2 m_e c^2 \gamma^2 \beta^2}{I^2} \right) - \beta^2 - \frac{\delta}{2} - \frac{C}{Z} \right]$$

Formule précise à quelques % près de quelques MeV ($\beta \approx 0,1$) à des centaines de GeV.

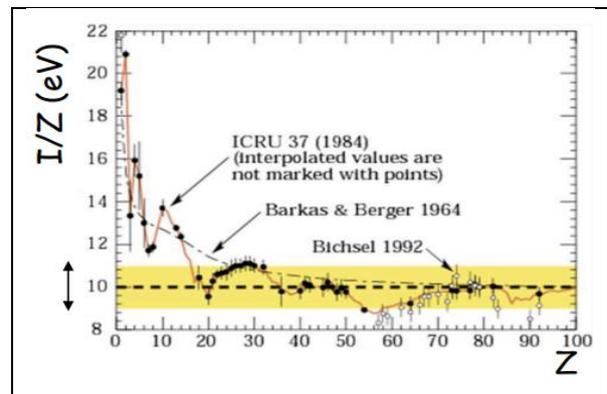
Bethe-Block fournit une valeur moyenne, mais par paresse on écrit simplement $\left\langle \frac{dE}{dx} \right\rangle$.

Constantes

Potentiel d'excitation I : Tient compte des propriétés du cortège électronique

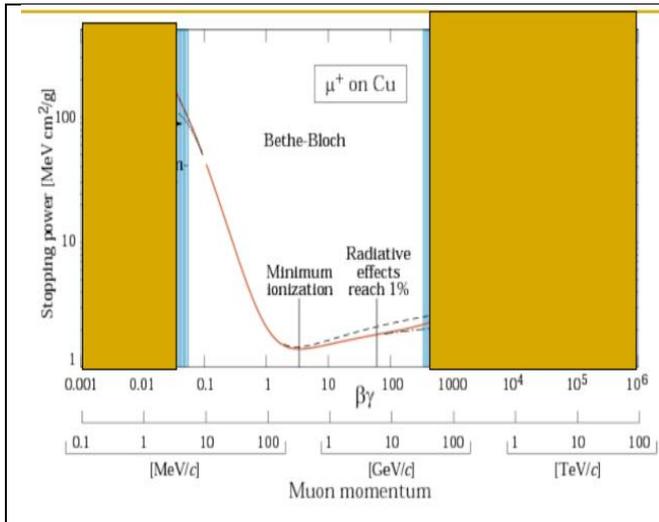
(fermeture des couches, niveaux d'excitation..)

$\updownarrow \frac{I}{Z} \approx 10 \text{ eV}$ (Une bonne paramétrisation)



C/Z : tient compte des effets de liaisons des électrons (important à basse énergie)

δ traduit un effet de densité : à très haute énergie, la polarisation du milieu écran le champ E_T pour les atomes les plus lointains.



•Energie perdue par des muons dans du cuivre en fonction de $\beta\gamma$.

• $\langle \frac{dE}{dx} \rangle$ décroît comme $\beta^{-5/3}$ pour $\beta\gamma < 3$.

• $\langle \frac{dE}{dx} \rangle$ a un minimum pour $\beta\gamma \approx 3,5$

(Minimum Ionizing Particle ou MIP) pour lesquelles $\langle \frac{dE}{dx} \rangle \approx 1 - 2 \text{ MeVg}^{-1}\text{cm}^2$

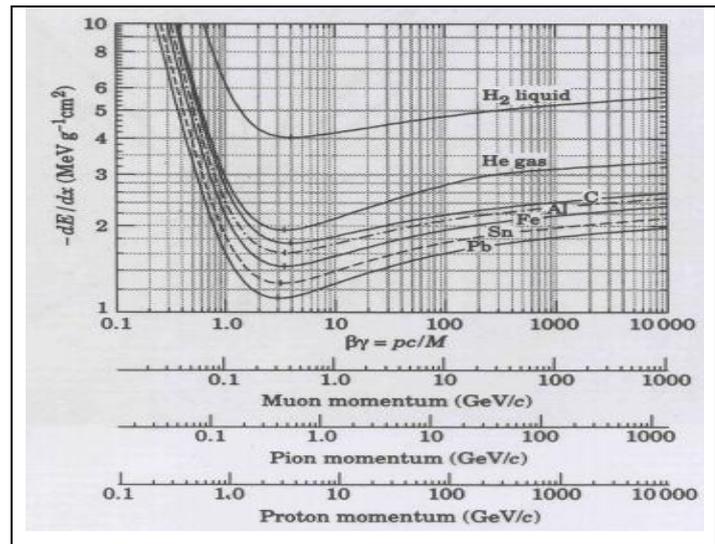
Au-delà du minimum, $\langle \frac{dE}{dx} \rangle$ remonte en $\ln(\gamma^2)$

Dû au champ électrique transverse E_T qui a un effet sur des atomes de plus en plus éloignés.

A très haute énergie, la remontée relativiste est interrompue par l'effet de densité : la polarisation du milieu le long de la trace écranter les atomes lointains (plateau de Fermi).

•Les courbes pour différentes particules sont différentes car β varie (à p constant).

•Les détecteurs réels ne mesurent pas $\langle \frac{dE}{dx} \rangle$ mais l'énergie ΔE déposée dans l'épaisseur Δx



Forme des distributions de $\frac{dE}{dx}$:

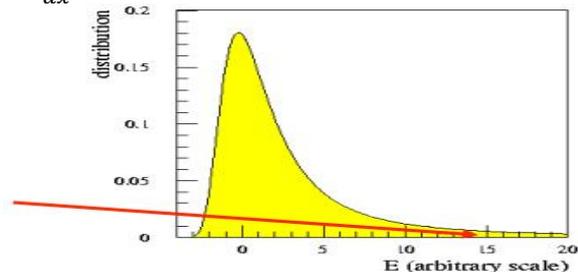
Grandes épaisseurs (et matériaux de haute densité) :

- Beaucoup de collisions (diffusion multiple).
- Les distributions de $\frac{dE}{dx}$ sont gaussiennes (théorème central limite).

Petites épaisseurs (et matériaux de basse densité) :

- Peu de collisions, mais certaines d'entre elles ont un grand transfert d'énergie
- Les fluctuations (dues aux électrons δ)

$\frac{dE}{dx}$ typique dans un gaz sur quelques cm.



deviennent importantes

- Les distributions de $\frac{dE}{dx}$ présentent de grandes fluctuations vers les pertes élevées (**Queues de Landau**)

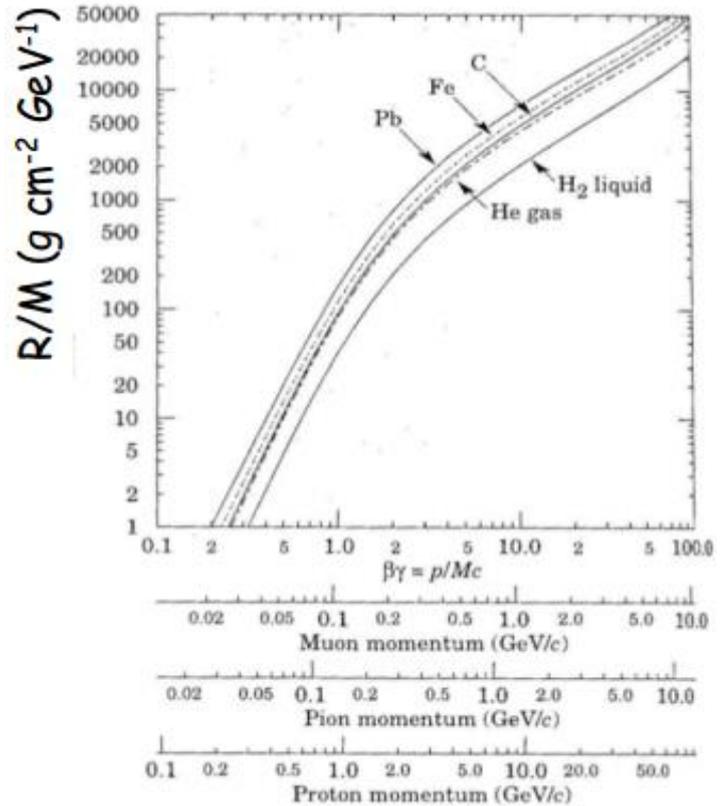
Parcours

Le **parcours** R est la distance parcourue dans le matériau par une particule jusqu'à ce qu'elle s'arrête.

$$R(E_0) = \int_0^{E_0} \frac{1}{dE/dx} dE$$

On pourrait montrer que R/M est une fonction universelle de $\beta\gamma$

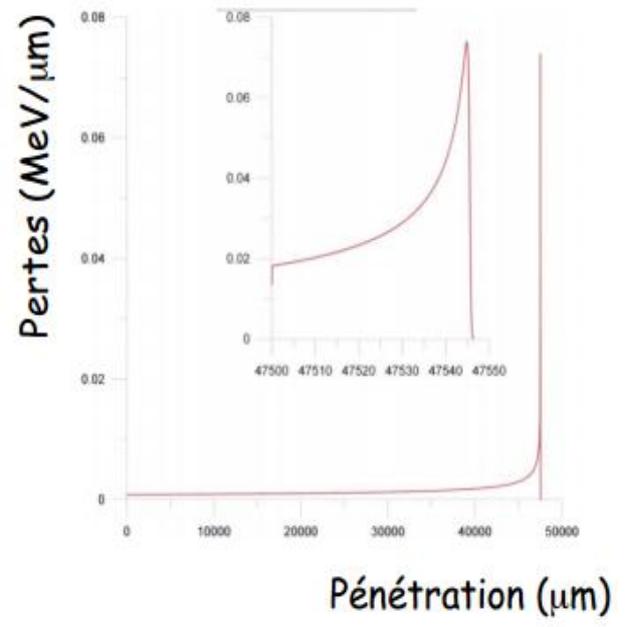
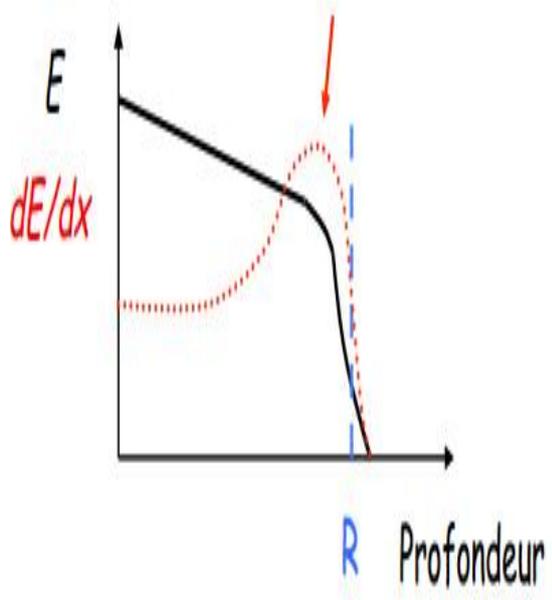
Parcours des particules lourdes de charge ± 1



- On appelle **courbe de Bragg** la relation entre la distance parcourue et dE/dx . On a typiquement :

Freinage dû à la remontée de dE/dx en $\beta^{-5/3}$

Courbe de Bragg de protons de 70 MeV dans de l'eau.



Série de TD N° = 6

Exercice 01: l'énergie moyenne

En utilisant la forme simplifiée du pouvoir d'arrêt linéique

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \left(\frac{4\pi e^4}{c^2 m_e}\right) \left(\frac{Z_p^2}{\beta_p^2}\right) (N \times Z_m) \text{Ln}\left(\frac{2m_e c^2 \beta^2}{I}\right)$$

Montrer que le pouvoir d'arrêt massique est donné par

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = 0,307 \left(\frac{Z_m}{M_{at}}\right) \left(\frac{Z_p^2}{\beta_p^2}\right) \text{Ln}\left(\frac{2m_e c^2 \beta^2}{I}\right)$$

Exercice 02: Particule chargée.

Quelle est l'énergie d'un proton dont le parcours est approximativement égal à la distance parcourue par une particule α de 10 MeV ?

Exercice 03: Particule chargée

Montrer que des particules et des protons de même vitesse initiale, ont approximativement le même parcours. Pourquoi ceci n'est pas exactement vrai.

Exercice 04: Le parcours

On désire se protéger du rayonnement γ émis par une source de Co^{60} . On dispose de briques de plomb de différentes épaisseurs ; 2, 4, 6, 8 et 10 cm. Sachant que le coefficient d'atténuation linéique du plomb est $0,6 \text{ cm}^{-1}$.

- 1 – Quelle est l'épaisseur minimum à choisir pour éliminer 75% de gamma incidents ?
- 2 – Calculer l'épaisseur moitié.
- 3 – Calculer le libre parcours moyen

Références

- Cours et exercices de cristallographie Université d'Oran des Sciences et de la Technologie - Mohamed Boudiaf-Abbas Belfar 2014/2015.
- Eléments de cristallographie géométrique Université de M'sila, Latelli H'mida 2011.
- Eléments de radiocristallographie ,Ed.Publisud-Paris, OPU. R. Ouahas 1984.
- Cristallographie géométrique et radiocristallographie. Université du Maine (Le Mans) Jean-Jacques Rousseau Alain Gibaud.
- International Tables for Crystallography edited by Theo Hahn Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Holland (1989).
- Introduction aux Groupes de Lie destinée aux physiciens. F. Delduc, Lab oratoire de physique de l'ENS Lyon Septembre 2008.
- Symétries en Physique (MP059) Universités Sorbonne .Jean-Bernard Zuber 2012.
- Physique subatomique (PHQ636) Université De Sherbrooke. David Sénéchal 2018.
- Introduction to Solid State Physics, John Wiley & Sons, C. Kittel (7th edition 1995).
- Group Theory and Quantum Mechanics, McGraw-Hill, M. Tinkham.
- Description de la symétrie, EDP, J. Sivadère.
- Physique subatomique : noyaux et particules, Hermann, L. Valentin.