



HAL
open science

Effets des symétrie des cristaux, des échantillons et de la diffraction sur la définition et la détermination de la fonction de texture

Claude Esling

► **To cite this version:**

Claude Esling. Effets des symétrie des cristaux, des échantillons et de la diffraction sur la définition et la détermination de la fonction de texture. Cristallographie. Université Paul Verlaine - Metz, 1981. Français. NNT : 1981METZ004S . tel-01775570

HAL Id: tel-01775570

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01775570v1>

Submitted on 24 Apr 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

S/M3
81/4

EFFETS DES SYMÉTRIES DES CRISTAUX, DES ÉCHANTILLONS ET DE LA DIFFRACTION SUR LA DÉFINITION ET LA DÉTERMINATION DE LA FONCTION DE TEXTURE

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE
- METZ

| |
|-----------|
| 19810075 |
| S/M2 81/4 |
| |

par

Claude ESLING

Docteur de 3^e cycle ès sciences
Maître-Assistant à l'Université de Metz

Thèse soutenue le 20 mai 1981

à l'U.E.R. des Sciences Exactes et Naturelles de l'Université de METZ
en vue de l'obtention du grade de **Docteur ès Sciences**

Jury

| | | |
|-------------|-------------------------------------------------|--------------------------|
| MM H. BUNGE | Professeur à l'Université de Clausthal (R.F.A.) | Président |
| R. BARO | Professeur à l'Université de Metz | } Rapporteurs |
| P. COULOMB | Professeur à l'Université de Toulouse | |
| M. CAZIN | Professeur au C.N.A.M., Paris | } Examineurs |
| B. HOCHÉID | Professeur au C.N.A.M., Paris | |
| P. PERIO | Professeur à l'Université d'Orsay | |
| C. TAVARD | Professeur à l'Université de Metz | |
| M. GERL | Professeur à l'Université de Nancy | } Rapporteurs extérieurs |
| H. WENK | Professeur à l'Université de Berkeley (U.S.A.) | |



"Marcellus.

*Horatio says'tis but our fantasy,
And will not let belief take hold of him,
Touching this dreaded sight, twice seen of us"*

Shakespeare, Hamlet, Act I.

"Spectre, fantôme, ou diable, je veux voir ce que c'est"

Molière, Don Juan, Acte V.

*"Die ich rief, die Geister
Werd ich nun nicht los"*

Goethe, Der Zauberlehrling.

"Gestaltlosigkeit ist die Gestalt des Gespenstes"

Werfel, Zwischen Oben u. Unten

"Ghost.

Adieu, adieu ! Hamlet, remember me"

[Exit.

Shakespeare, Hamlet, Act I.

Au Professeur Hans Joachim BUNGE
en hommage à l'occasion de sa réception comme
Docteur *honoris causa* de l'Université de Metz,
avec toute mon admiration

à mes parents
à leurs enfants
Jean et Norbert, mes frères
et à leurs petits-enfants
Solange (+ 1981)
Ghislaine et Isabelle, mes nièces
et à ceux qui, je l'espère, sont encore à naître
avec toute mon affection

- AVANT-PROPOS -

La rédaction de cet avant-propos a été une tâche délicate à plus d'un titre. Il est, en effet, empreint de plus de subjectivité que l'exposé des résultats scientifiques qui lui font suite. Par ailleurs, il fait revivre en accéléré toute une tranche de vie passionnante.

Mes remerciements vont, en premier lieu, à M. le Professeur BARO qui avait bien voulu m'accueillir dans le Laboratoire de métallurgie structurale de l'Université de Metz, dont il assurait la direction. Dès le premier entretien, il m'avait promis que le métier de chercheur, quoique difficile, était certainement l'un des plus beaux du monde.

Je le remercie d'avoir confié ma formation initiale de chercheur au brillant physicien qu'est M. le Professeur TAVARD, lequel a su me communiquer son sincère enthousiasme pour la science.

Ensuite il m'a confié au Professeur BUNGE, principal créateur de l'analyse tridimensionnelle des textures. Par sa sérénité et la profondeur de sa pensée, j'ai retrouvé en M. BUNGE l'image que, jeune adolescent déjà fasciné par les sciences exactes, je me faisais du savant.

Enfin, je suis redevable au Professeur BARO de m'avoir témoigné sa confiance en me laissant toute liberté quant à l'orientation de mon activité de recherche; la liberté constitue, me semble-t-il, une condition *sine qua non* du jeu de l'imagination et de la créativité.

Je remercie M. le Professeur COULOMB, spécialiste de renom international et auteur - français de surcroît - d'un ouvrage sur les textures, pour avoir bien voulu être rapporteur de ma thèse et membre du jury de soutenance.

Je remercie MM. CAZIN et HOCHÉID, professeurs titulaires au prestigieux Conservatoire national des arts et métiers, et dont les travaux font école, de l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de siéger au jury de ma thèse.

Je remercie M. le Professeur PERIO d'avoir accepté de participer au jury et d'avoir confirmé, à cette occasion, sa réputation de débateur scientifique redouté.

Enfin, la difficulté quasi-insurmontable de réunir à une même date un grand nombre de scientifiques renommés et, par voie de conséquence, très sollicités, fait que MM. les Professeurs GERL et WENK ont été empêchés d'assister au jury oral. Ils n'en ont pas moins cautionné mon travail de thèse par leurs rapports écrits. Qu'ils en soient ici sincèrement remerciés.

Je suis redevable à mes collègues de laboratoire, notamment à mon amie Evelyne BECHLER-FERRY qui m'a prodigué sans cesse son aide généreuse et efficace;

Michel HUMBERT et Francis WAGNER avec lesquels j'ai pu partager les joies du travail au sein d'une équipe liée par l'amitié;

Albert VADON pour m'avoir toujours aidé sans réserve;

Daniel RUER pour ses abondantes critiques qui ont constitué pour moi - et furent ainsi constructives - un stimulant certain;

Jean-Julien HEIZMANN et tous les autres chercheurs du laboratoire pour l'amabilité avec laquelle ils ont toujours accepté de me rendre service et pour un soutien qui ne m'a jamais fait défaut.

En outre, je conserve un souvenir exceptionnellement plaisant des discussions passionnées avec mon ami Jacques MULLER; Jacques est un des rares mathématiciens - qu'il m'ait été donné de rencontrer - sachant comprendre et parler non seulement le langage de ses pairs, mais également celui de ses collègues physiciens.

Je remercie chaleureusement mon collègue de l'I.U.T., Lucien GARDONI, agrégé de grammaire, qui a aimablement veillé, en bon disciple de GREVISSE, à ce que la correction de l'expression écrite soit à l'image de la rigueur scientifique exigée.

Je ne saurais clore cet avant-propos sans exprimer ma reconnaissance à

Mme Claude BUISSON, secrétaire, pour son dévouement et l'excellence de son travail;

M. Christian LARUELLE, ingénieur, pour sa grande disponibilité, que le problème posé soit d'ordre théorique ou pratique;

M. Armand THIL, technicien de dessin attitré et en outre, tout spécialement, à Mme Evelyn BECHLER-FERRY et à M. Christian LARUELLE dont l'aimable suppléance a permis que les dessins soient achevés en temps utile.

- TABLE DES MATIERES -

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1. INTRODUCTION | 1 |
| 2. DESCRIPTION DE LA TEXTURE CRISTALLOGRAPHIQUE | 5 |
| 2.1. Description traditionnelle des orientations sur $SO(3)$ | 5 |
| 2.2. Description des orientations sur le groupe orthogonal $O(3)$ | 10 |
| 2.2.1. Définition de la fonction de texture sur $O(3)$ | 10 |
| 2.2.2. Définition de la fonction de distribution axiale sur $O(3)$ | 13 |
| 3. DESCRIPTION DES SYMETRIES DE LA FONCTION DE TEXTURE ET DE LA FONCTION AXIALE SUR LE GROUPE ORTHOGONAL $O(3)$ | 17 |
| 3.1. Conditions d'invariance liées aux symétries cristallines..... | 17 |
| 3.1.1. Effets des symétries de rotation..... | 19 |
| 3.1.2. Le projecteur orthogonal caractéristique du sous- espace invariant | 23 |
| 3.1.3. Dualité des points de vue de BUNGE et ROE..... | 35 |
| 3.1.4. Effets des symétries de seconde espèce..... | 39 |
| 3.2. Conditions d'invariance liées aux symétries d'échantillon..... | 40 |
| 3.2.1. Définition des symétries d'échantillon conventionnelles..... | 40 |
| 3.2.2. Définition des symétries d'échantillon non- conventionnelles. Leur description au moyen des groupes colorés..... | 42 |
| 4. DETERMINATION DE LA FONCTION DE TEXTURE A PARTIR DE LA FONCTION AXIALE: FORMULE D'INVERSION | 45 |
| 4.1. Notations et énoncé du problème de l'inversion | 46 |
| 4.2. Résolution de l'équation intégrale : formule d'inversion | 47 |
| 4.2.1. Réduction au calcul de la valeur en l'identité d'une fonction f^g | 47 |
| 4.2.2. Réduction au calcul d'une fonction centralisée..... | 48 |
| 4.2.3. Retour à la fonction de texture initiale..... | 51 |
| 4.3. Relation entre la fonction $P^g(\cos \theta)$ et la fonction de distri- bution angulaire $W_{hy}(\cos \theta)$ | 52 |

| | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 5. DESCRIPTION DES POSSIBILITES DE DETERMINATION EN DIFFRACTION | 55 |
| POLYCRISTALLINE | 55 |
| 5.1. Fonction de densité axiale déterminable $\tilde{A}(\vec{h}, \vec{y})$ | 57 |
| 5.2. Fonction de densité des orientations déterminable \tilde{f} | 58 |
| 5.2.1. Cas des cristaux énantiomorphes | 58 |
| 5.2.2. Cas des cristaux non-énantiomorphes..... | 58 |
| 6. EXPRESSIONS INTEGRALES DE LA FONCTION DETERMINABLE \tilde{f} ET DU FANTÔME f_G . | 63 |
| 6.1. Notations utilisées | 65 |
| 6.2. Expression intégrale de la partie paire \tilde{f} en fonction de f | 65 |
| 6.2.1. Réduction au calcul de la valeur en l'identité d'une fonction \tilde{f}^a | 65 |
| 6.2.2. Réduction au calcul d'une fonction centralisée | 65 |
| 6.2.3. Retour à la fonction de texture initiale..... | 67 |
| 6.3. Développements en séries d'harmoniques sphériques généralisés des termes f_π et f_Ω | 67 |
| 6.4. Généralisation aux distributions (fonctions généralisées)..... | 68 |
| 6.5. Etude de la décomposition de δ ou l'apparition des fantômes... | 70 |
| 6.6. Expression intégrale de $\tilde{f}(g)$ et de f_G dans le cas de cristaux non-centrosymétriques | 73 |
| 7. DESCRIPTION DES SYMETRIES ADDITIONNELLES, INTRODUITES PAR LE PROCESSUS DE LA DIFFRACTION | 75 |
| 7.1. Mesures effectuées en diffraction normale..... | 77 |
| 7.2. Mesures effectuées en diffraction anormale..... | 78 |
| 8. APPROXIMATION DE LA PARTIE NON-DETERMINABLE $\tilde{f}(g)$ | 79 |
| 8.1. Principe de la méthode du domaine nul | 79 |
| 8.2. Méthode de résolution globale et méthode de résolution itérative | 81 |
| 8.3. Exemples d'application de la méthode du domaine nul | 83 |
| 8.3.1. Fonction modèle du type fonction gaussienne..... | 84 |
| 8.3.2. Fonction de texture d'un échantillon de cuivre laminé | 88 |

| | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 9. EPILOGUE : CONSEQUENCES SUR LE CALCUL DE GRANDEURS PHYSIQUES MOYENNES. | 93 |
| 10. CONCLUSION | 97 |
| APPENDICES | |
| I : Formules commentées de méthodes mathématiques de l'analyse des textures..... | 101 |
| I.1. Harmoniques sphériques | 102 |
| I.2. Opérateurs de projection | 109 |
| II : Résolution d'une équation intégrale au moyen de la transformation d'ABEL | 121 |
| III : Calcul de la partie paire $\tilde{f}(g)$ d'une fonction centrale, en l'identité $g = 1$ | 123 |
| BIBLIOGRAPHIE | 127 |

1. INTRODUCTION

On appelle texture cristallographique d'un polycristal la statistique d'orientation des cristaux individuels au sein d'un échantillon polycristallin. Elle est traditionnellement décrite par la fonction de densité des orientations $f(g)$ - ou fonction de texture - définie sur le groupe continu des rotations, $SO(3)$.

Il était légitime de se demander si les transformations orthogonales à déterminant +1, i.e. les rotations, suffisent à décrire la texture cristallographique et ses symétries.

En effet, le polycristal le plus général d'un matériau énantiomorphe (i.e. dont le groupe ponctuel de symétrie possède exclusivement des rotations) peut contenir des formes cristallines droites et gauches, qui sont images l'une de l'autre par un miroir. Lorsque les cristallites sont, au contraire, non-énantiomorphes, leur groupe ponctuel de symétrie possède des opérations de symétrie de seconde espèce, à déterminant -1. Ainsi, il apparaît dans les deux cas la nécessité de recourir également à des transformations orthogonales à déterminant -1.

Le premier objectif de ce travail est de donner une représentation unifiée de la fonction de distribution des orientations (F.D.O.) et de ses propriétés de symétries sur le groupe orthogonal complet $O(3)$, au lieu d'en restreindre la description au sous-groupe des rotations. Dans notre formalisme du groupe orthogonal, la fonction de texture se décompose en un couple de composantes $f^R(g)$ et $f^L(g)$, définies sur $SO(3)$, appelées respectivement statistique droite et gauche.

Nous montrerons que les composantes $f^R(g)$ et $f^L(g)$, considérées séparément, ne sont invariantes que par les symétries du sous-groupe des rotations du groupe ponctuel de la symétrie cristalline. Les opérations de symétrie de seconde espèce (à déterminant -1) n'impliquent aucune symétrie additionnelle sur les composantes f^R et f^L prises isolément, mais établissent une relation entre les composantes droites et gauches, dont une seule sera une fonction indépendante.

Le deuxième objectif de ce travail consiste à étudier l'implication de ces symétries, décrites sur le groupe orthogonal complet, sur les possibilités de détermination de la fonction de texture.

En effet, dans l'expérience de diffraction polycristalline, il n'est pas possible de mesurer la F.D.O. elle-même, mais uniquement des intégrales de celle-ci, appelées fonctions de distribution axiale $A(\vec{h}, \vec{y})$ - ou figures de pôles \vec{h} - qui représentent la densité de distribution des directions cristallines \vec{h} dans les directions \vec{y} du repère de l'échantillon. Dans notre formalisme du groupe orthogonal, cette fonction de distribution axiale se décompose également en un couple de fonctions $A^R(\vec{h}, \vec{y})$ et $A^L(\vec{h}, \vec{y})$ qui distingue - ou colorie en noir et blanc, dans le langage des groupes colorés - les directions cristallines \vec{h} selon qu'elles sont comptabilisées dans la statistique droite ou dans la statistique gauche.

Nous démontrerons rigoureusement que si ces fonctions axiales $A^R(\vec{h}, \vec{y})$ et $A^L(\vec{h}, \vec{y})$ étaient séparément accessibles à la mesure, leurs inversions respectives détermineraient sans ambiguïté les fonctions de densité $f^R(g)$ et $f^L(g)$, conduisant ainsi à la détermination de la fonction de texture complète, sur le groupe orthogonal.

Cependant, par son principe même, l'expérience de diffraction polycristalline sélectionne les plans cristallographiques qui participent à la diffraction, d'après leur seule distance interréticulaire $d_{\vec{h}}$ (loi de Bragg). Cette distance est bien entendu indépendante du caractère de couleur \vec{h}^R ou \vec{h}^L , induit par le caractère droit ou gauche de la composante $f^R(g)$ ou $f^L(g)$ dans laquelle la direction cristallographique \vec{h} est comptabilisée.

Ainsi, l'expérience de diffraction polycristalline ne permet que la mesure de la fonction axiale superposée $\tilde{A}(\vec{h}, \vec{y})$, ou grise, en termes de groupes colorés. L'inversion de cette fonction axiale fournit une fonction de texture $\tilde{f}(g)$, que nous appelons la "partie déterminable" de la fonction de texture.

Dans le cas de cristaux non-centrosymétriques, cette "partie déterminable" est encore diminuée par la symétrie additionnelle introduite par le processus de la diffraction, et connue sous le nom de la loi de Friedel.

Enfin, le dernier objectif de ce travail consiste à proposer des techniques qui permettent d'augmenter la "partie déterminable" de la fonction de texture.

Ainsi, dans le cas de cristaux non-centrosymétriques, il est possible de violer la loi de Friedel en se plaçant dans les conditions de la diffraction anormale.

De plus, nous proposons une méthode de calcul approché de la partie, notée $f(g)$, qui n'a pas pu être déterminée par les méthodes conventionnelles de l'analyse des textures. Son principe consiste en l'exploitation de la condition de positivité de la fonction de texture.

L'efficacité de cette méthode - dite du domaine nul - est démontrée sur une fonction de texture théorique, du type fonction gaussienne. Cette méthode est également appliquée pour déterminer la fonction de texture complète d'un échantillon de cuivre laminé, à partir de ses figures de pôles expérimentales.

2. DESCRIPTION DE LA TEXTURE CRISTALLOGRAPHIQUE

Un solide polycristallin constitue un milieu complexe, si bien que sa description au moyen de modèles formalisés et l'étude de ses propriétés physiques nécessitent de nombreuses hypothèses simplificatrices /1,2/. Ainsi, un échantillon polycristallin est-il formé par un ensemble de cristallites ou grains, qui sont des domaines monocristallins, diversement orientés au sein du polycristal, et séparés les uns des autres par des joints de grains. Dans la quasi-totalité des études, chaque cristallite est considéré comme un domaine monocristallin, soit parfait, soit possédant, à l'échelle de la taille des grains, une répartition homogène de défauts. Par ailleurs, le joint de grains est généralement considéré comme la frontière entre deux cristallites voisins, sans prendre en considération sa structure propre en tant que, par exemple, empilement de dislocations. Enfin, en dehors de la mention expresse du contraire, les études portent sur des polycristaux monophasés.

Parmi les multiples paramètres contribuant à caractériser un polycristal, on appelle texture cristallographique la distribution des orientations des grains.

2.1. Description traditionnelle des orientations sur $SO(3)$

Un repère de référence cartésien K_a étant lié à l'échantillon, et un repère K_b lié au réseau cristallin d'un grain, l'orientation de ce dernier est traditionnellement définie par la rotation g qui transforme K_a en K_b :

$$K_b = g K_a \quad , \quad g \in SO(3) \quad (2.1.)$$

Il est à noter que K_a et K_b ne sont définis qu'à une translation près; en conséquence, la transformation de K_a en K_b n'est définie, elle aussi, qu'à une translation près.

$SO(3)$ désigne le groupe continu des rotations de l'espace à trois dimensions. Une description précise du polycristal requerrait la connaissance du champ de rotations:

$$g : \begin{array}{l} V \longrightarrow SO(3) \\ \vec{r} \longrightarrow g(\vec{r}) \end{array} \quad (2.2.)$$

où le vecteur de situation \vec{r} parcourt tout le volume V du polycristal (fig. 2.1.).

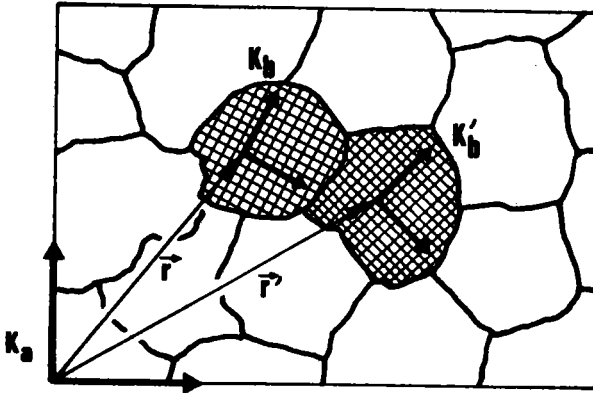


Fig. 2.1.: Le champ $g(\vec{r})$ définit l'orientation g du réseau en tout point \vec{r} du polycristal (représentation schématique bi-dimensionnelle).

En général, le champ $g(\vec{r})$ est constant sur chaque grain (constant par morceaux) et présente une discontinuité aux joints de grains. Cependant, dans le cas de polycristaux fortement déformés, les orientations cristallines peuvent varier continûment d'un grain à l'autre. Les champs $g(\vec{r})$ correspondants présentent alors des variations quasi continues.

La définition du champ $g(\vec{r})$ offre un grand intérêt pour la description formelle du polycristal, ainsi que l'a souligné BUNGE /1a,b/. Toutefois, sa détermination expérimentale serait véritablement laborieuse. Ainsi, en dehors de travaux sur l'arrangement topographique des cristallites dans la surface d'un cristal laminé (HAESSNER et collaborateurs / 3/) la détermination complète de $g(\vec{r})$ n'a-t-elle, à notre connaissance, jamais été entreprise.

D'ailleurs, $g(\vec{r})$ représenterait une caractérisation, certes très précise, à l'échelle microscopique, mais valable uniquement pour un polycristal particulier (ou expérience particulière, dans le langage de la statistique). Il apparaît plus utile de décrire toute une classe de polycristaux qui, elle seule, possède une signification statistique. Une telle description est réalisée par la fonction de densité des orientations $f(g)$ - dans l'acception propre en théorie statistique - qui intègre le volume des cristallites dont l'orientation est g , indépendamment de leur situation dans le polycristal:

$$f(g) = \frac{1}{V} \int_{V(g)} d\vec{r} \quad (2.3.)$$

où $V(g)$ désigne le volume total des cristallites en orientation g , et V leur volume total. La différence entre l'étude à l'échelle microscopique du champ d'orientations $g(\vec{r})$ et celle, plus statistique, à l'échelle de la fonction de distribution des orientations, apparaît nettement dans le calcul de valeurs moyennes de grandeurs physiques, tels les champs de contraintes $\sigma(\vec{r})$, de déformations $\epsilon(\vec{r})$ etc. Ces grandeurs physiques sont représentées par des champs tensoriels $\phi(\vec{r})$ définis sur le volume V du polycristal, à valeurs réelles

$$\begin{array}{ccc} V & \longrightarrow & R \\ \phi & & \\ \vec{r} & \longrightarrow & \phi(\vec{r}) \end{array} \quad (2.4.)$$

La valeur moyenne correspondante est définie par l'expression classique :

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{V} \int_V d\vec{r} \phi(\vec{r}) \quad (2.5.)$$

En fait, il est possible de décomposer l'intégrale ci-dessus en une première intégrale, effectuée à g constant, suivie d'une intégrale sur l'espace des orientations $SO(3)$, selon le schéma :

$$V \xrightarrow{g} SO(3) \xrightarrow{\phi} R \quad (2.6.)$$

Compte tenu de cette décomposition, la formule de la moyenne éq. (2.5.) peut être réécrite sous la forme :

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{V} \int_{SO(3)} dg \int_{V(g)} d\vec{r} \phi(\vec{r}) = \int_{SO(3)} dg f(g) \phi(g) \quad (2.7.)$$

Le calcul selon l'éq. (2.7.) de la valeur moyenne, qui sera dorénavant notée $\langle f|\phi \rangle$ plutôt que $\langle \phi \rangle$, renonce bien entendu à une description microscopique exacte. En revanche, il présente un caractère statistique qui permet de définir, au-delà de la texture d'un échantillon particulier (ou événement, dans le langage de la théorie des probabilités), la notion de type de texture (ce qui correspond, en théorie des probabilités, à la notion de loi de probabilité).

Ainsi, lorsque le métallurgiste décrit, par exemple, la texture d'une tôle de cuivre laminé, il s'intéresse évidemment davantage au type de "texture de laminage du cuivre", qu'à son échantillon de tôle particulier. Dans le cas d'une telle étude statistique, la texture est décrite par une fonction de densité des orientations /1,2/, notée F.D.O. en écriture abrégée:

$$\begin{aligned} f &: SO(3) \longrightarrow R^+ \\ g &\longrightarrow f(g) = \frac{1}{V} \frac{dV}{dg} \end{aligned} \quad (2.8.)$$

La fonction de texture traditionnelle $f(g)$ possède des propriétés intrinsèques, qui sont totalement indépendantes de la représentation choisie pour cette fonction. Notamment, la F.D.O. est toujours une fonction positive de la variable g . En vue d'établir des résultats théoriques ou d'effectuer des calculs numériques, la fonction de densité $f(g)$ est soit représentée par une suite de valeurs numériques discrètes f_i (méthode de WILLIAMS /4/, ou méthode vectorielle de RUER, BARO, et VADON /5,9/), soit développée en une série d'harmoniques sphériques généralisés, conformément à la méthode de BUNGE /1,10/ et ROE /11/.

Cette deuxième représentation de la texture est particulièrement commode pour étudier les propriétés d'invariance de la FDO qui résultent des symétries, et qui sont, bien entendu, valables en toute généralité, quelle que soit la représentation choisie.

Aussi, dans le cadre de ce travail, la fonction $f(g)$ est-elle toujours représentée par son développement en série d'harmoniques sphériques généralisés :

$$f(g) = \sum_{l=0(1)}^{\infty} \sum_{m=-l(1)}^{+l} \sum_{n=-l(1)}^{+l} C_l^{mn} T_l^{mn}(g) \quad (2.9.)$$

Dans cette représentation, la fonction $f(g)$ est supposée indéfiniment dérivable, et à dérivées continues; c'est-à-dire qu'elle est de classe C^∞ selon la dénomination mathématique précise.

La série éq. (2.9.) converge d'autant plus rapidement avec les rangs l croissants que la F.D.O. est une fonction plus lisse. Ainsi, la série éq. (2.9.) peut-elle être approximée par une série tronquée au rang maximal L , et la F.D.O. est-elle entièrement déterminée par un nombre limité de coefficients de texture C_l^{mn} :

$$\{C_l^{mn}\} \quad \text{avec} \quad l = 0(1) L ; \quad -1 \leq m, n \leq +1 \quad (2.10.)$$

Ce sont les expériences de diffraction polycristalline qui sont le plus couramment utilisées, en vue de la détermination de la F.D.O. Celles-ci ne permettent pas la mesure directe de la F.D.O., mais seulement celle des fonctions de distribution axiale, qui représentent la fraction des directions cristallines \vec{h} dont l'orientation, dans le repère K_a lié à l'échantillon, est \vec{y} :

$$A(\vec{h}, \vec{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{h}=\vec{g}\vec{y}} f(g) dg \quad ; \quad g \in SO(3) \quad (2.11.)$$

Dans la définition traditionnelle de la F.D.O., sur le groupe continu des rotations $SO(3)$, l'intégrale éq. (2.11.) est une intégrale curviligne /1/ effectuée sur une trajectoire linéaire - ou "fil", selon la terminologie de MATTHIES /12/ - d'amplitude 2π et qui se referme sur elle-même, en boucle. Il est aisé de calculer l'intégrale éq. (2.11.), ce qui conduit à l'expression de $A(\vec{h}, \vec{y})$ en fonction des coefficients de texture /1/ :

$$A(\vec{h}, \vec{y}) = \sum_{l=0(1)}^{\infty} \sum_{m=-1(1)}^{+1} \sum_{n=-1(1)}^{+1} \frac{4\pi}{2l+1} C_l^{mn} k_l^{*m}(\vec{h}) k_l^n(\vec{y}) \quad (2.12)$$

2.2. Description des orientations sur le groupe orthogonal $O(3)$

2.2.1. Définition de la fonction de texture sur $O(3)$

La fonction de densité $f(g)$ traditionnelle, définie sur $SO(3)$, ne permet de décrire que les transformations g qui sont des rotations pures, c'est-à-dire les isométries à déterminant $+1$.

Cependant, les cristaux possèdent des symétries dont la description requiert, en général, des isométries à déterminant -1 aussi bien que des rotations pures. Par ailleurs, les procédés de mise en forme peuvent induire des plans de symétrie dans l'échantillon formé. Ainsi, la géométrie des rouleaux du laminoir possède trois plans de symétrie, perpendiculaires deux à deux, et cette symétrie orthorhombique se retrouve, avec une bonne approximation, dans les échantillons de tôles laminées.

Il est donc nécessaire de recourir à une structure plus vaste que $SO(3)$, qui permette de tenir compte également des isométries à déterminant -1 , notamment des symétries par rapport à un plan, ou miroirs.

Cette structure élargie est le groupe $O(3)$ des transformations orthogonales de l'espace à trois dimensions, qui contient $SO(3)$ en tant que sous-groupe. En effet, une transformation orthogonale O est soit une rotation g (déterminant $+1$), soit le produit $g\bar{I}$ d'une telle rotation - y compris l'identité 1 - par l'inversion centrale \bar{I} (à déterminant -1). Aussi, l'éq. (2.1.) se généralise-t-elle en

$$K_b = O K_a \quad O \in O(3) \quad (2.13.)$$

définissant l'orientation d'un cristallite par la transformation orthogonale O qui réalise, toujours à une translation près, la coïncidence de K_a avec K_b . De façon similaire, la fonction de texture éq. (2.8.) se généralise en une fonction définie sur le groupe orthogonal $O(3)$ /13a,b/

$$f: O(3) \longrightarrow R^+ \quad (2.14.)$$

$$O \longrightarrow f(O) = \frac{1}{V} \frac{dV}{dO}$$

Le déterminant de la transformation orthogonale étant égal, soit à +1, soit à -1. Ces deux types d'opérations ne peuvent être transformés continûment l'un en l'autre. Aussi, l'espace $O(3)$ est constitué de deux composantes connexes qui contiennent respectivement les éléments à déterminant +1 et -1. En effet, le groupe $O(3)$ est le produit cartésien du groupe des rotations, par le groupe binaire constitué de l'identité 1 et de la symétrie centrale $\bar{1}$

$$O(3) = SO(3) \cdot \{1, \bar{1}\} \quad (2.15.)$$

La fonction de texture f se scinde donc en un couple de fonctions $M^R f^R$ et $M^L f^L$ définies chacune sur l'espace $SO(3)$ des rotations

$$f(O) = \{M^R f^R(g), M^L f^L(g)\} \quad (2.16.)$$

de sorte que

$$f(O) \begin{cases} = f(g) = M^R f^R(g) & \text{si } O = g \\ = f(g\bar{1}) = M^L f^L(g) & \text{si } O = g\bar{1} = \bar{1}g \end{cases} \quad (2.17.)$$

La norme de la fonction de texture est, sur le groupe orthogonal $O(3)$, égale à l'unité :

$$\int_{O(3)} f(O) dO = 1 \quad (2.18.)$$

Cette intégrale se décompose en la somme de deux intégrales sur $SO(3)$:

$$M^R \int_{SO(3)} f^R(g) dg + M^L \int_{SO(3)} f^L(g) dg = M^R + M^L = 1 \quad (2.19.)$$

Si l'on suppose le repère K_a droit, alors le repère K_b lié à un cristal dont l'orientation est décrite par une rotation g est également droit. En revanche, un cristal dont l'orientation est décrite par une transformation orthogonale \bar{g} sera repéré au moyen d'un trièdre gauche. Lorsque les cristallites sont énantiomorphes, ils présentent deux formes cristallines distinctes, appelées respectivement forme droite et forme gauche. Les répartitions statistiques des formes droites et gauches sont indépendantes l'une de l'autre; elles sont respectivement décrites par les composantes $f^R(g)$ et $f^L(g)$ qui sont, elles aussi, indépendantes l'une de l'autre (Fig. 2.2.). Lorsque les cristallites sont non-énantiomorphes, ils ne présentent qu'une forme cristalline unique qui peut être simultanément considérée comme une forme droite, ou comme une forme gauche. Lorsque la fonction de texture est définie sur le groupe orthogonal, un tel cristallite non-énantiomorphe doit être comptabilisé à la fois dans la fonction de densité $f^R(g)$ et $f^L(g)$. La fonction de densité $f^R(g)$ est alors égale à la fonction de densité $f^L(g)$ - ou plus précisément, à la translattée $f^L(g) \bar{g}_b = f^L(\bar{g}_b g)$, comme il sera vu par la suite - et il suffit d'une seule composante $f^R(g)$, par exemple, l'indice R pouvant être omis. Dorénavant, nous emploierons l'expression raccourcie "cristal droit" quand le cristal est comptabilisé dans la fonction de densité $f^R(g)$. Sauf mention expresse du contraire, un tel cristal ne sera pas nécessairement énantiomorphe, et ce même cristal pourrait aussi bien être dénommé "cristal gauche", s'il était comptabilisé dans la fonction de densité $f^L(g)$.

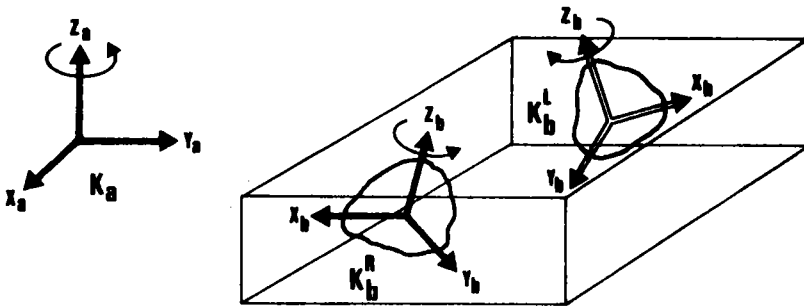


Fig. 2.2.: Polycristal composé de cristaux énantiomorphes
Un repère droit K_b^R est lié à un cristal droit
Un repère gauche K_b^L est lié à un cristal gauche.

2.2.2. Définition de la fonction de distribution axiale sur $O(3)$

Dans la description traditionnelle sur le groupe des rotations, la fonction de densité axiale $A(\vec{h}, \vec{y})$ intègre les rotations g qui orientent la direction cristalline \vec{h} dans la direction d'échantillon \vec{y} :

$$\vec{h} = g \vec{y} \quad (2.20.)$$

Lorsque l'on effectue l'extension au groupe orthogonal, les directions \vec{h} qui sont déduites de \vec{y} par une rotation pure seront comptabilisées dans la fonction axiale droite

$$M^R A^R(\vec{h}, \vec{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{h}=g\vec{y}} f(g) dg = M^R \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{h}=g\vec{y}} f^R(g) dg \quad (2.21.)$$

En revanche, celles qui seront déduites de \vec{y} par une transformation orthogonale à déterminant -1

$$\vec{h} = g \bar{1} \vec{y} \quad (2.22.)$$

seront comptabilisées dans la fonction de densité axiale gauche. Cette dernière intègre donc toutes les transformations orthogonales de seconde espèce qui réalisent la condition éq. (2.22.)

$$M^L A^L(\vec{h}, \vec{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{h}=g\bar{1}\vec{y}} f(g\bar{1}) d(g\bar{1}) = M^L \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{h}=-g\vec{y}} f^L(g) dg \quad (2.23.)$$

Pour établir les relations éq. (2.21.) et (2.23.) il suffit de faire appel à la définition des composantes de la fonction de texture éq. (2.17.) et, pour la seconde des relations, à la condition d'invariance, par translation, de la mesure $d\theta$ de l'intégration sur le groupe orthogonal

$$d(\theta\theta_0) = d(\theta_0\theta) = d\theta \quad (2.24.)$$

En effet, lorsque $\theta = g$ et $\theta_0 = \bar{1}$, l'éq. (2.24.) se particularise en l'éq. suivante :

$$d(g \bar{1}) = d(\bar{1} g) = dg \quad (2.25.)$$

Ainsi, de même que la fonction de texture, la fonction de densité axiale se scinde, dans l'extension au groupe orthogonal $O(3)$, en un couple de fonctions définies sur $SO(3)$:

$$A(\vec{h}, \vec{y}) = \{M^R A^R(\vec{h}, \vec{y}), M^L A^L(\vec{h}, \vec{y})\} \quad (2.26.)$$

La comparaison des éq. (2.11.) et (2.21.) montre immédiatement que la fonction de densité $A(\vec{h}, \vec{y})$ traditionnelle correspond, dans l'extension au groupe orthogonal, à la composante droite $A^R(\vec{h}, \vec{y})$. Il en résulte notamment que l'expression éq. (2.12.) est valable telle quelle pour cette composante, pour peu que l'on précise, au moyen de l'indice supérieur R, la nature droite des quantités qui interviennent :

$$A^R(\vec{h}, \vec{y}) = \sum_{l=0(1)}^{\infty} \sum_{m=-l(1)}^{+l} \sum_{n=-l(1)}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} C_l^{Rmn} k_1^{*m}(\vec{h}) k_1^n(\vec{y}) \quad (2.27.)$$

En revanche, pour la composante gauche $A^L(\vec{h}, \vec{y})$, les éq. (2.22.) et (2.23.) montrent que l'inversion centrale $\bar{1}$ opère, soit sur le vecteur \vec{h} , soit sur le vecteur \vec{y} .

Il résulte alors de l'opération bien connue de l'inversion centrale sur les harmoniques sphériques simples :

$$k_1^m(-\vec{h}) = (-1)^l k_1^m(\vec{h}) \quad (2.28.)$$

l'apparition du facteur $(-1)^l$ dans l'expression de la fonction axiale gauche :

$$A^L(\vec{h}, \vec{y}) = \sum_{l=0(1)}^{\infty} \sum_{m=-l(1)}^{+l} \sum_{n=-l(1)}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} (-1)^l C_l^{Lmn} k_1^{*m}(\vec{h}) k_1^n(\vec{y}) \quad (2.29.)$$

Lorsque la distinction entre les directions cristallographiques droites \vec{h}^R et celles gauches \vec{h}^L n'est pas requise, ou encore, lorsqu'elle est impossible à réaliser, il convient de définir également, en addition aux composantes droite et gauche, la fonction axiale superposée :

$$\bar{A}(\vec{h}, \vec{y}) = M^R A^R(\vec{h}, \vec{y}) + M^L A^L(\vec{h}, \vec{y}) \quad (2.30.)$$

3. DESCRIPTION DES SYMETRIES DE LA FONCTION DE TEXTURE ET DE LA FONCTION AXIALE SUR LE GROUPE ORTHOGONAL O(3)

3.1. Conditions d'invariance liées aux symétries cristallines

Les cristaux possèdent, en général, des symétries. Vu que l'orientation des cristaux est, dans les études de textures, toujours définie à une translation près, la symétrie à considérer est celle qui est décrite par le groupe ponctuel - et non le groupe spatial - de la symétrie cristalline. Le groupe ponctuel O_b le plus général comporte nécessairement des rotations g_b qui forment le sous-groupe G_b des rotations. On désigne par $|G_b|$ l'ordre de ce sous-groupe, c'est-à-dire le nombre de ses éléments. Dans le cas des réseaux cristallins énantiomorphes, les opérations de la symétrie cristalline sont toutes des rotations pures, et le groupe orthogonal complet s'identifie au groupe des rotations G_b . En cas particulier, le groupe de rotations G_b des cristaux tricliniques se limite à la seule transformation identique 1 :

$$G_b = \{1\} \quad (3.1.)$$

En d'autres termes, les cristaux tricliniques ne possèdent aucune symétrie. Lorsque les réseaux cristallins possèdent des opérations de symétrie de 2^{ème} espèce, leur nombre est égal à celui des rotations. De plus, les opérations de seconde espèce sont toutes engendrées en multipliant l'une quelconque d'entre elles $\bar{g}_b \bar{1}$, par le sous-groupe des rotations G_b . Aussi, le groupe orthogonal le plus général peut-il s'écrire :

$$O_b = \{1, \bar{g}_b \bar{1}\} G_b \quad (3.2.)$$

Il est à noter que la rotation \bar{g}_b n'appartient pas nécessairement au sous-groupe des rotations G_b de la symétrie cristalline. Ainsi, le cristal peut posséder un axe binaire inverse, ou miroir $m = \bar{2} = 2 \cdot \bar{1}$, sans que l'axe binaire 2 soit, lui-même, un élément de symétrie /14/. Le choix de l'opération de symétrie de seconde espèce $\bar{g}_b \bar{1}$ est arbitraire. Toutefois, lorsque le groupe orthogonal O_b renferme explicitement l'inversion centrale $\bar{1}$, il est naturel de la choisir comme élément générateur, ce qui correspond à $\bar{g}_b = 1$ (identité).

Le repère K_b qui sert à définir l'orientation d'un cristal est constitué de directions cristallographiques équivalentes dans chaque cristal. En raison de la symétrie cristalline, les repères K'_b qui sont déduits de K_b par une opération de symétrie O_b sont équivalents à K_b :

$$K'_b = O_b K \equiv K_b \quad , \quad O_b \in O_b \quad (3.3.)$$

Note : Il convient de distinguer le groupe de symétrie, symbolisé par un caractère typographique droit O_b , de ses éléments - les diverses opérations de symétrie - qui sont représentés en écriture ronde o_b .

Ainsi, dans le cas précédemment évoqué du cristal triclinique, le repère K_b qui est lié à chaque cristallite est unique. Lorsque le cristal possède une symétrie énantiomorphe, il existe $|G_b|$ repères droits qui lui sont liés, si le cristal possède la forme droite, et $|G_b|$ repères gauches, si la forme du cristal est gauche. Enfin, dans le cas le plus courant des cristaux non-énantiomorphes, il convient de lier $|G_b|$ repères droits, et un nombre égal de repères gauches, à tout cristal.

Il résulte de l'éq. (3.3.) que l'orientation d'un cristallite est définie par la classe à gauche :

$$\{O_b O\} \equiv O \quad , \quad O_b \in O_b \quad (3.4.)$$

de toutes les transformations orthogonales équivalentes induites par le groupe ponctuel O_b de la symétrie cristalline. La fonction de texture f , éq. (2.14.), doit vérifier les conditions correspondantes d'invariance à gauche :

$$f(O_b O) = f(O) \quad , \quad O_b \in O_b \quad (3.5.)$$

Il est naturel de se demander si la condition d'invariance éq. (3.5.) induit une condition analogue sur chacune des composantes $f^R(g)$ et $f^L(g)$, ou si elle établit, au contraire, une relation de dépendance entre ces deux composantes. On peut également se demander si cette condition d'invariance se traduit différemment, ou non, selon que l'opération de symétrie O_b est de première ou de seconde espèce. Afin de sérier les problèmes, nous allons étudier successivement l'effet des symétries rotationnelles, puis celui des symétries de seconde espèce (à déterminant -1), sur la fonction de texture.

3.1.1. Effets des symétries de rotation

Lorsque $O_b = g_b$ est une rotation pure, la condition d'invariance éq. (3.5.) conduit, conformément à la définition de la fonction de texture éq. (2.17.), aux deux relations suivantes :

$$f^R(g_b g) = f^R(g) \quad , \quad f^L(g_b g) = f^L(g) \quad (3.6.)$$

selon que la transformation orthogonale O de l'éq. (3.5.) est de première ou de seconde espèce. Par ailleurs, la symétrie cristalline induit, sur les fonctions de distribution axiales, les conditions d'invariance correspondantes en la variable \vec{h} .

En effet, si l'on remplace dans la relation de définition éq. (2.21.) la direction cristalline \vec{h} par la direction cristalline \vec{h}' équivalente par symétrie :

$$\vec{h}' = g_b \vec{h} \quad , \quad g_b \in G_b \quad (3.7.)$$

on obtient :

$$M^R A^R(g_b \vec{h}, \vec{y}) = M^R \frac{1}{2\pi} \int f^R(g) dg \quad (3.8.)$$

$$g_b \vec{h} = g \vec{y}$$

En raison des relations de symétrie éq. (3.6.) de la fonction f^R , et de l'invariance de la mesure d'intégration dg par translation, il est possible de remplacer, dans l'intégrale ci-dessus, la variable d'intégration g par la variable $g_b^{-1} \cdot g$:

$$M^R A^R (g_b \vec{h}, \vec{y}) = M^R \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{h}=g_b^{-1} g \vec{y}} f^R(g_b^{-1} g) d(g_b^{-1} g) = M^R A^R (\vec{h}, \vec{y}) \quad (3.9.)$$

Avec une justification identique en tous points, pour la composante gauche, on obtient les conditions de la symétrie de rotation sur les fonctions axiales

$$A^R (g_b \vec{h}, \vec{y}) = A^R (\vec{h}, \vec{y}) \quad ; \quad A^L (g_b \vec{h}, \vec{y}) = A^L (\vec{h}, \vec{y}) \quad (3.10.)$$

Les conditions d'invariance éq. (3.6.) et (3.10.) prouvent que les composantes gauches f^L et $A^L (\vec{h}, \vec{y})$ possèdent les mêmes symétries rotationnelles que les composantes droites; dans la suite de l'étude de ces symétries de rotation, l'indice R ou L pourra donc être omis.

En conséquence, pour imposer les conditions d'invariance à la fonction de texture $f(g)$, il suffit de symétriser l'harmonique sphérique généralisé $T_1^{mn}(g)$, élément générique de la base du développement en série éq. (2.9.), et qui peut être considéré comme une F.D.O. particulière (abstraction faite, bien entendu, de la condition de positivité qui n'est pas respectée pour chaque fonction de base considérée isolément). La combinaison linéaire suivante d'harmoniques sphériques généralisés :

$$T_1^{mn}(g) = \frac{1}{|G_b|} \sum_{g_b \in G_b} T_1^{mn}(g_b g) \quad (3.11.)$$

possède l'invariance requise. Dorénavant, nous sous-entendrons l'indice b qui caractérise la symétrie microscopique. En revanche, nous dénombrerons les $|G_b|$ rotations pures du sous-groupe des rotations par un indice inférieur tel que i, j ou k , selon le problème traité. Cette notation est bien adaptée à l'écriture de sommes, telle l'expression (3.11.), qui peut ainsi se récrire :

$$T_1^{mn}(g) = \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{|G|} T_1^{mn}(g_i g) \quad (3.12.)$$

Pour démontrer que la combinaison d'harmoniques sphériques éq. (3.12.) (ou encore, éq. (3.11.)) possède la symétrie escomptée :

$$T_1^{mn}(g_j g) = \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{|G|} T_1^{mn}(g_j g_i g) = T_1^{mn}(g) \quad (3.13.)$$

il suffit de remarquer que, quel que soit $g_j \in G$ donné, les rotations $g_j g_i$ - qui sont au nombre de $|G|$ - parcourent, avec g_i , tout le groupe G . Compte tenu de la relation d'addition éq. (I.22.) des harmoniques sphériques, l'éq. (3.12.) peut s'écrire :

$$T_1^{mn}(g) = \sum_{p=-1}^{+1} \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{|G|} T_1^{mp}(g_i) T_1^{pn}(g) \quad (3.14.)$$

Cette relation est valable quel que soit l'indice n , qui n'est pas affecté par la symétrisation. En particulier, pour $n = 0$, l'éq. précédente conduit, d'après l'éq. (I.25.), à une relation analogue, valable pour les harmoniques sphériques simples :

$$k_1^m(\vec{h}) = \sum_{p=-1}^{+1} \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{|G|} T_1^{mp}(g_i) k_1^p(\vec{h}) \quad (3.15.)$$

En définitive, le problème de la symétrisation de la fonction de texture $f^R(g)$, $f^L(g)$ se réduit donc au problème, plus particulier, de la construction d'un harmonique sphérique simple $k_1^m(\vec{h})$ adapté aux symétries rotationnelles.

Par ailleurs, bien que nous effectuions ultérieurement une étude détaillée des symétries d'échantillon, remarquons dès à présent que leur description conventionnelle est analogue à celle des symétries cristallines, si ce n'est que les opérations O_a de la symétrie d'échantillon opèrent à droite. Ainsi, l'orientation d'un cristal est définie par la classe à droite :

$$(OO_a) \equiv O \quad , \quad O_a \in O_a \quad (3.16.)$$

ce qui implique les relations d'invariance suivantes sous les rotations pures g_a :

$$f^R(g g_a) = f^R(g) \quad , \quad f^L(g g_a) = f^L(g) \quad (3.17.)$$

Les composantes de la fonction de densité axiale vérifient, en la variable \vec{y} , des relations de conservation analogues à celles qui rendaient compte, éq. (3.10.), de la symétrie cristalline

$$A^R(\vec{h}, g_a \vec{y}) = A^R(\vec{h}, \vec{y}) \quad , \quad A^L(\vec{h}, g_a \vec{y}) = A^L(\vec{h}, \vec{y}) \quad (3.18.)$$

Enfin, de même que pour les symétries cristallines, la prise en compte des symétries rotationnelles d'échantillon de la fonction de texture $f^R(g)$, $f^L(g)$ se réduit à la construction d'un harmonique sphérique simple adapté aux symétries :

$$k_1^n(\vec{y}) = \sum_{p=-1}^{+1} \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{|G|} T_1^{pn}(g_i) k_1^p(\vec{y}) \quad (3.19.)$$

Nous proposons une solution rigoureuse de ce problème au moyen des opérateurs de projection, en théorie de la représentation des groupes. Toutefois, afin d'alléger au maximum l'exposé proprement dit de cette méthode, les techniques mathématiques utilisées sont-elles regroupées, et décrites succinctement dans l'appendice mathématique I. Cet appendice précise

notamment la technique de calcul du projecteur orthogonal associé à un groupe de symétrie G_b donné, à partir des angles d'EULER des opérations de symétrie rotationnelle g_b .

3.1.2. Le projecteur orthogonal caractéristique du sous-espace invariant

Dans ce paragraphe, nous proposons d'obtenir les harmoniques sphériques simples, adaptés à un groupe de symétrie G_b , en appliquant un opérateur de projection orthogonal aux harmoniques sphériques usuels $k_1^m(\phi, \beta)$.

Comme le montre la relation de fermeture éq. (I.20), les $(2l + 1)$ harmoniques sphériques $k_1^m(\phi, \beta) = |lm\rangle$ pour un rang l donné, forment une base orthonormée complète de $V_l/15$ (éq.(I.7.), fig. I.3.). Ces harmoniques sphériques se transforment, par une rotation g_i , selon l'éq. (I.31); ils ne sont pas invariants sous le groupe de symétrie G .

En revanche, les images - ou projections - $P_1|lm\rangle$ de ces harmoniques sphériques sont invariantes sous le groupe G d'après l'éq. (I.32).

Ainsi, en notant P_1 la restriction à V_l de l'opérateur de projection /16-18/ éq.(I.26)

$$P_1 = \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{|G|} T_1(g_i) \quad (3.20.)$$

L'image $\text{Im}(P_1)$ est le sous-espace invariant recherché, et le noyau $\text{Ker}(P_1)$ en est le supplémentaire (orthogonal, puisque le projecteur est orthogonal)

$$V_l = \text{Im}(P_1) \oplus \text{Ker}(P_1) \quad (3.21.)$$

où le symbole \oplus désigne la somme directe.

En effet, comme le montre l'éq. (I.32), les $(2l + 1)$ projections $P|lm\rangle$ - dont certaines sont, éventuellement, nulles - constituent une famille génératrice du sous-espace invariant $\text{Im}(P_1)$. La dimension $M(l)$ de ce sous-espace invariant se calcule facilement grâce aux propriétés de la trace - ou caractère - de la représentation (éq. (I.37)).

$$M(l) = \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{|G|} x_l(|g_i|) \quad (3.22.)$$

où $|g_i|$ désigne l'angle ω_i de la rotation g_i .

Deux cas peuvent alors se présenter, selon que le nombre des vecteurs $P|m\rangle$ non nuls est, soit égal, soit supérieur à $M(1)$. Dans la première hypothèse, les $M(1)$ vecteurs $P|m\rangle$ constituent une base du sous-espace invariant. Dans la seconde hypothèse, il est toujours possible d'extraire une base de la famille génératrice $P|m\rangle$ (au moyen, par exemple, du procédé d'orthonormalisation de Schmidt).

En pratique, sur l'ensemble des groupes G de symétrie rotationnelle susceptibles d'intervenir dans les études de texture, seuls ceux qui sont caractéristiques du système cristallin cubique nécessitent, après l'application du projecteur, l'extraction ultérieure d'une base par un procédé d'orthonormalisation de Schmidt.

Groupes n'appartenant pas au système cubique

Ces groupes possèdent au plus un axe de rotation A_n d'ordre n , supérieur à 2; s'ils possèdent des axes de symétrie additionnels, ce sont des axes binaires situés dans un plan perpendiculaire à l'axe A_n . Ces groupes, de type diédral, ont des structures très semblables; le plus simple est de traiter, à titre d'exemple, l'un d'eux : le sous-groupe des rotations correspondant à l'holoédrie trigonale, noté 32 en notations de HERMANN-MAUGUIN /14/. Si le repère cartésien, lié aux éléments de symétrie, est tel que l'axe Oz est l'axe ternaire, et l'axe Oy coïncide avec l'un des axes binaires fig.(3.1.), les angles d'Euler des 6 rotations g_k ont des valeurs données dans la table 3.1.; ils se répartissent en une famille correspondant à l'axe ternaire ($\phi_k = 0$), et une famille correspondant aux axes binaires ($\phi_k = \pi$) /18/.

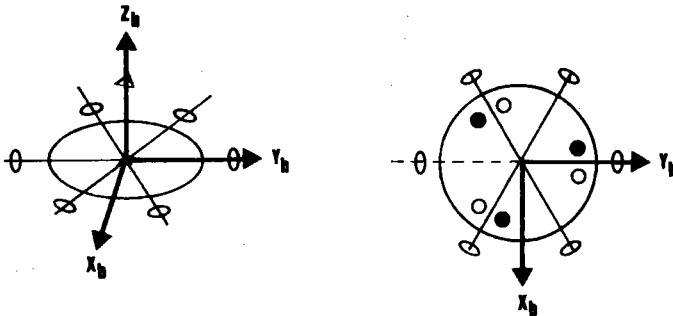


Fig. 3.1.: Cristal appartenant à l'holoédrie trigonale
Orientation du repère K_b par rapport aux éléments de symétrie.

| | | | |
|--------------|------------------------------------------|--------------|------------------------------------------------|
| $\phi_k = 0$ | $g_k = (\varphi_{1k}, 0, \varphi_{2k})$ | $\phi = \pi$ | $g_k = (\varphi_{1k}, \pi, \varphi_{2k})$ |
| $g_1 = 1$ | $\varphi_1 + \varphi_2 = 0$ | g_4 | $\varphi_1 - \varphi_2 = \pi$ |
| g_2 | $\varphi_1 + \varphi_2 = \frac{2\pi}{3}$ | g_5 | $\varphi_1 - \varphi_2 = \pi + \frac{2\pi}{3}$ |
| g_3 | $\varphi_1 + \varphi_2 = \frac{4\pi}{3}$ | g_6 | $\varphi_1 - \varphi_2 = \pi + \frac{4\pi}{3}$ |

Table 3.1. : Angles d'Euler des rotations de l'holoédrie trigonale.

L'opérateur qui représente, conformément à l'éq. (I.9), les rotations associées à l'axe ternaire, s'écrit

$$T(g_k) = e^{i\varphi_{2k} j_z} e^{i\varphi_{1k} j_z} = e^{i(\varphi_{1k} + \varphi_{2k}) j_z} \quad (3.23.)$$

De façon similaire, les rotations associées aux 3 axes binaires sont représentées, éq. (I.9), par les opérateurs

$$T(g_k) = e^{i\varphi_{2k} j_z} e^{i\pi j_x} e^{i\varphi_{1k} j_z} \quad (3.24.)$$

dont l'expression est simplifiée par la relation de commutation, éq. (I.12)

$$T(g_k) = e^{i\varphi_{2k} j_z} e^{+i\pi j_x} e^{i\varphi_{1k} j_z} = e^{i\pi j_x} e^{i(\varphi_{1k} - \varphi_{2k}) j_z} \quad (3.25.)$$

Le projecteur P_{3z} caractéristique de l'axe ternaire s'écrit

$$P_{3z} = \frac{1}{3} \left(1 + e^{i \frac{2\pi}{3} j_z} + e^{i \frac{4\pi}{3} j_z} \right) \quad (3.26.)$$

où 1 désigne l'opérateur identité.

L'opérateur de projection, éq. (3.20), associé au groupe 32 s'écrit, compte tenu des éq. (3.24) et (3.25)

$$P = \frac{1}{2} (P_{3z} + e^{i\pi j_x} e^{i\pi j_z} P_{3z}) \quad (3.27.)$$

Un calcul simple, basé sur la relation de commutation éq. (I.12), montre que les opérateurs $e^{i\pi j_x}$ et P_{3z} commutent. Il est ainsi possible, compte tenu également de l'éq. (I.27) d'idempotence de P_{3z} , de donner une formule plus symétrique pour le projecteur P :

$$P = P_{3z} \frac{1 + e^{i\pi j_x} e^{i\pi j_z}}{2} P_{3z} \quad (3.28.)$$

Le projecteur P_{3z} , caractéristique de l'axe ternaire, sélectionne les vecteurs $|1n\rangle$ dont l'indice n est multiple de 3 :

$$P_{3z} |1n\rangle = \frac{1}{3} \left(1 + e^{i n \frac{2\pi}{3}} + e^{i n \frac{4\pi}{3}} \right) |1n\rangle \quad (3.29.)$$

Les seuls éléments de matrice non nuls de P s'écrivent donc

$$P_{3m}^1 = \langle 1 3m | P | 1 3n \rangle = \frac{1}{2} (\langle 1 3m | 1 3n \rangle + \langle 1 3m | e^{i\pi j_x} e^{i\pi j_z} | 1 3n \rangle) \quad (3.30.)$$

soit, compte tenu des éq. (I.15) et (I.17)

$$P_{3m}^1 = \frac{1}{2} (\delta_{3m} + (-1)^{1+n} \delta_{3m-3n}) \quad (3.31.)$$

De ces éléments de matrice, résulte, avec l'éq. (I.33), l'expression suivante des fonctions invariantes

$$P_{k_1}^{3n}(\vec{y}) = \frac{1}{2} (k_1^{3n}(\vec{y}) + (-1)^{1+n} k_1^{-3n}(\vec{y})) \quad (3.32.)$$

qui forment une base orthogonale de symétrie. Le nombre des fonctions de symétrie, pour un rang 1 donné, se calcule simplement, dans le cas de ces groupes non cubiques, d'après l'éq. (3.32)

$$\left\{ \begin{array}{l} M(1) = \left[\frac{1}{3} \right] + 1 \quad \text{si } 1 \text{ est pair} \\ M(1) = \left[\frac{1}{3} \right] \quad \text{si } 1 \text{ est impair} \end{array} \right. \quad (3.33.)$$

où les crochets indiquent la division entière.

Enfin, il est commode de normer les fonctions éq. (3.32) à l'unité et de leur attribuer un indice μ qui numérote, par valeurs entières consécutives, entre 1 et $M(1)$, cette base ainsi orthonormée, de fonctions adaptées aux symétries :

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1^1(\vec{y}) = \frac{1}{2} [1 + (-1)^1] k_1^0(\vec{y}) \\ k_1^\mu(\vec{y}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (k_1^{3(\mu-1)}(\vec{y}) + (-1)^{1+n} k_1^{-3(\mu-1)}(\vec{y})), \mu > 1 \end{array} \right. \quad (3.34.)$$

Groupes appartenant au système cubique

La plupart des métaux d'usage courant possèdent une maille cubique, soit centrée, soit à faces centrées. Le sous-groupe des rotations de l'holoédrie cubique (4 3 2 en notation de HERMANN-MAUGUIN /14/) possède 24 rotations, qui résultent de l'existence de 4 axes ternaires, 3 axes quaternaires, 6 axes binaires, dont les orientations par rapport à la maille sont rappelées dans la fig.3.2.

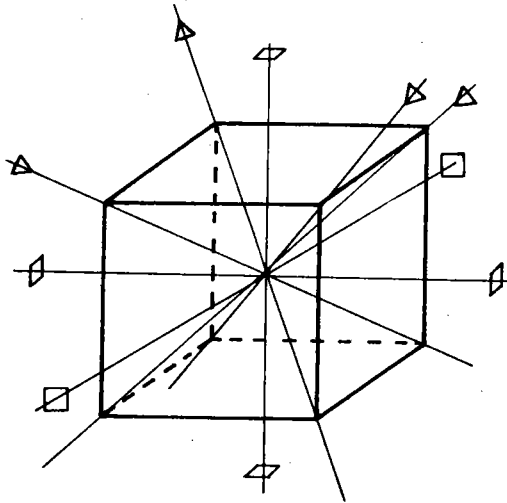


Fig. 3.2. : Orientation des axes d'ordre 4 et 3 dans la maille cubique.

Si le repère cartésien K est lié à la maille selon la convention habituelle (les 3 axes de coordonnées parallèles aux axes quaternaires) les angles d'EULER des 24 rotations g_k ont les valeurs données dans la table 3.2.; ils se répartissent, suivant les valeurs de l'angle de déclinaison ϕ_k , en trois familles.

| $\phi=0 \quad g_k = (\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ | $\phi = \frac{\pi}{2} \quad g_k = (\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ | | | | $\phi=\pi \quad g_k = (\varphi_1, \phi, \varphi_2)$ |
|---------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------|----------------------------------------|---------------------------------------------------|-----------------------------------------------------|
| $\varphi_1 + \varphi_2 = 0$ | $(0, \frac{\pi}{2}, 0)$ | $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, 0)$ | $(\pi, \frac{\pi}{2}, 0)$ | $(\frac{3\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, 0)$ | $\varphi_1 - \varphi_2 = 0$ |
| $\varphi_1 + \varphi_2 = \frac{\pi}{2}$ | $(0, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ | $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ | $(\pi, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ | $(\frac{3\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ | $\varphi_1 - \varphi_2 = \frac{\pi}{2}$ |
| $\varphi_1 + \varphi_2 = \pi$ | $(0, \frac{\pi}{2}, \pi)$ | $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \pi)$ | $(\pi, \frac{\pi}{2}, \pi)$ | $(\frac{3\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \pi)$ | $\varphi_1 - \varphi_2 = \pi$ |
| $\varphi_1 + \varphi_2 = \frac{3\pi}{2}$ | $(0, \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2})$ | $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2})$ | $(\pi, \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2})$ | $(\frac{3\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2})$ | $\varphi_1 - \varphi_2 = \frac{3\pi}{2}$ |

$$P_{4m,4n}^1 = \frac{1}{6} \left[\delta_{4m,4n} + (-1)^l \delta_{-4m,4n} + 4 P_1^{4m,4n} \left(\frac{\pi}{2} \right) \right]$$

TABLE 3.2. : Angles d'EULER des rotations de l'holoédrie cubique.

Les axes du repère cristallin sont parallèles aux axes quaternaires.

Comme l'axe z du repère K est un axe quaternaire, il convient d'introduire le projecteur P_{4z}

$$P_{4z} = \frac{1}{4} \left(1 + e^{i \frac{\pi}{2} j_z} + e^{i \pi j_z} + e^{i \frac{3\pi}{2} j_z} \right) \quad (3.35.)$$

Des calculs, analogues à ceux effectués pour le groupe de symétrie trigonale, conduisent à l'expression de l'opérateur de projection

$$P = P_{4z} \frac{1 + e^{i \pi j_x} + 4 e^{i \frac{\pi}{2} j_x}}{6} P_{4z} \quad (3.36.)$$

dont les seuls éléments de matrice non nuls correspondent à des indices m et n multiples de 4

$$P_{4m, 4n}^l = \frac{1}{6} \left(\delta_{mn} + (-1)^l \delta_{m-n} + 4 P_1^{4m, 4n} \left(\frac{\pi}{2} \right) \right) \quad (3.37.)$$

Les propriétés de symétrie de ces éléments de matrice résultent de celles des polynômes $P_1^{mn}(\phi)$; ces polynômes sont respectivement réels ou imaginaires purs, selon que la différence $m - n$ de leurs indices est paire ou impaire /1/.

Les éléments de matrice $P_{4m, 4n}$ sont donc réels (en vue de simplifier les notations, l'indice supérieur l est omis, lorsqu'aucune confusion n'est à craindre)

$$P_{4m, 4n}^* = P_{4m, 4n} \quad (3.38.)$$

De plus, les relations de symétrie suivantes sont induites par celles de l'éq. (I.16)

$$P_{4m \ 4n} = P_{4n \ 4m} = (-1)^1 P_{4m \ -4n} \quad (3.39.)$$

L'expression des images $P|14m\rangle$, éq. (I.33)

$$P|14n\rangle = \sum_{4m=-1}^{+1} |14m\rangle \langle 14m| P|1n\rangle = \sum_{4m=-1}^{+1} P_{4m \ 4n} |14m\rangle \quad (3.40.)$$

se simplifie, compte tenu des éq. (3.39.)

$$P|14n\rangle = P_{0 \ 4n} |10\rangle + \sum_{4m>0}^1 P_{4m \ 4n} (|14m\rangle + (-1)^1 |1-4m\rangle) \quad (3.41.)$$

La structure de cette équation et les propriétés de symétrie éq. (3.39.) incitent à introduire une nouvelle base d'harmoniques sphériques, au moyen des combinaisons linéaires suivantes

$$|1 \ 0 \ +\rangle = |1 \ 0\rangle$$

$$|1 \ 4n \ +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1 \ 4n\rangle + (-1)^1 |1 \ -4n\rangle) \quad (3.42.)$$

$$|1 \ 4n \ -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1 \ 4n\rangle - (-1)^1 |1 \ -4n\rangle)$$

dont l'intérêt essentiel est que les combinaisons $|14n-\rangle$ ont, compte tenu des éq. (3.39.) et (3.41.), une projection nulle :

$$P|1 \ 4n-\rangle = 0 \quad (3.43.)$$

Le nombre de vecteurs $P|14m\rangle$ de la famille génératrice, qui sont à considérer en vue de la recherche de la base de fonctions symétrisées, est ainsi réduit de moitié. Dorénavant, le signe distinctif + est omis et les $P_{4m\ 4n}$ désignent les éléments de matrice de l'opérateur P, dans cette nouvelle base.

L'espace de symétrie est donc engendré par les fonctions:

$$\left\{ \begin{array}{ll} P |1\ 0\rangle & \\ P |1\ 4n\rangle & 0 < 4n \leq l, \text{ lorsque } l \text{ est pair} \\ P |1\ 4n\rangle & 0 < 4n \leq l, \text{ lorsque } l \text{ est impair.} \end{array} \right. \quad (3.44.)$$

Le nombre de ces fonctions est respectivement $[l/4] + 1$, $[l/4]$; il convient de le comparer, pour chaque rang l, à la dimension $M(l)$ de l'image $\text{Im}(P)$, qui est l'espace de symétrie.

Calcul de la dimension $\text{Im}(P)$ de l'espace invariant

Le calcul de la dimension $M(l)$, par application de l'éq.(1.37), nécessite la classification des 24 rotations g_k du groupe G selon les valeurs respectives de leurs angles ω_k (Table 3.3.)

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|
| $\omega_k = 0$ | 1 rotation |
| $\left\{ \begin{array}{l} \omega_k = \frac{\pi}{2} \\ \omega_k = \frac{3\pi}{2} = -\frac{\pi}{2} \end{array} \right.$ | 3 rotations |
| $\left\{ \begin{array}{l} \omega_k = \frac{2\pi}{3} \\ \omega_k = \frac{4\pi}{3} = -\frac{2\pi}{3} \end{array} \right.$ | 3 rotations |
| $\left\{ \begin{array}{l} \omega_k = \frac{2\pi}{3} \\ \omega_k = \frac{4\pi}{3} = -\frac{2\pi}{3} \end{array} \right.$ | 4 rotations |
| $\left\{ \begin{array}{l} \omega_k = \frac{2\pi}{3} \\ \omega_k = \frac{4\pi}{3} = -\frac{2\pi}{3} \end{array} \right.$ | 4 rotations |
| $\omega_k = \pi$ | 9 rotations |

Table 3.3. : Classification des rotations du groupe cubique en fonction des angles de rotation.

Comme les caractères $\chi_1(\omega_k)$ sont des fonctions paires en ω_k , conformément à l'éq. (I.24), il est possible de regrouper, dans l'éq. (I.37), les couples de rotations ayant des angles ω_k opposés.

Il en résulte l'expression analytique simple :

$$M(l) = \frac{1}{24} \left[(2l + 1) + 6 \frac{\sin(2l+1) \frac{\pi}{4}}{\sin \frac{\pi}{4}} + 8 \frac{\sin(2l+1) \frac{\pi}{3}}{\sin \frac{\pi}{3}} + 9(-1)^l \right] \quad (3.45.)$$

Cette expression montre la propriété de périodicité suivante :

$$M(l + 12) = M(l) + 1 \quad (3.46.)$$

qui permet de limiter le calcul aux valeurs de $l < 12$ (Fig. 3.3.).

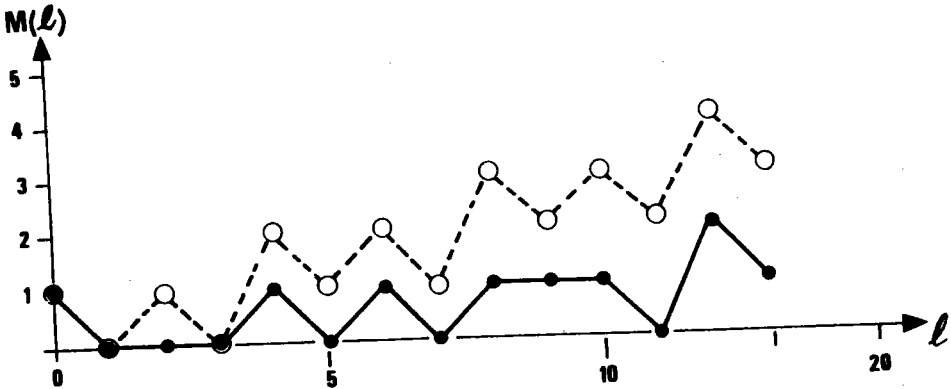


Fig. 3.3.: Représentation du nombre $M(l)$ de fonctions adaptées à la symétrie cubique (En traits pointillés, le nombre de fonctions génératrices, éq. (3.44.).

Le nombre d'éléments de la famille génératrice, éq. (3.44.), ainsi que la dimension $M(l)$ du sous-espace de symétrie, sont représentés sur le même graphe; ce nombre est toujours supérieur à $M(l)$. Pour extraire une base de la famille génératrice, il suffit d'appliquer, par exemple, un procédé d'orthonormalisation.

Application du procédé d'orthonormalisation de SCHMIDT

La $(p + 1)^e$ étape du procédé de SCHMIDT consiste à orthogonaliser les vecteurs $p^{(p)}|14n\rangle$, consécutifs au vecteur $p^{(p)}|14p\rangle$, à celui-ci

$$p_{4m\ 4n}^{(p+1)} = p_{4m\ 4n}^{(p)} - \frac{p_{4p\ 4n}^{(p)}}{p_{4p\ 4p}^{(p)}} p_{4m\ 4p}^{(p)} \quad (3.47.)$$

où l'indice supérieur p dénombre les différentes itérations. Les éléments de matrice de l'opérateur $p^{(p+1)}$ s'expriment, compte tenu des eq. (I.34) et (I.35), en fonction de ceux de $p^{(p)}$ /17/

$$p^{(p+1)}|1\ 4n\rangle = p^{(p)}|1\ 4n\rangle - \frac{\langle 1\ 4p|p^{(p)}p^{(p)}|1\ 4n\rangle}{\langle 1\ 4p|p^{(p)}p^{(p)}|1\ 4p\rangle} p^{(p)}|1\ 4p\rangle \quad (3.48.)$$

Cette relation de récurrence permet de vérifier que l'opérateur $p^{(p+1)}$ obéit, de même que $p^{(p)}$, aux eq. (I.27) et (I.29); il est donc également un projecteur hermitien /17/.

Par ailleurs, la relation (3.48.) indique qu'une réduction de type GAUSS, est effectuée sur les lignes de la matrice P . Ainsi, en raison des propriétés particulières des opérateurs de projection, l'orthonormalisation de SCHMIDT devient ici équivalente à la réduction de GAUSS. Lorsque les $M(1)$ premiers vecteurs non nuls sont issus de l'algorithme, la matrice P est échelonnée par lignes. A titre d'exemple, pour $M(1) = 3$, on obtient la matrice

$$\begin{array}{cccccccc} \mu = 1 & p_{00}^{(0)} & p_{04}^{(0)} & p_{08}^{(0)} & \dots & p_{0\ 4m}^{(0)} & & \\ \mu = 2 & 0 & p_{44}^{(1)} & p_{48}^{(1)} & \dots & p_{4\ 4m}^{(1)} & & \\ \mu = 3 = M(1) & 0 & 0 & p_{88}^{(2)} & \dots & p_{8\ 4m}^{(2)} & & \\ & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & & \\ & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & & \\ & 0 & 0 & 0 & & 0 & & \end{array} \quad (3.49.)$$

dont les éléments non nuls sont, à un facteur de norme près, les coefficients de symétrie $\dot{A}_1^{4m\mu}$ selon BUNGE /1a,b/. Ces coefficients de symétrie sont généralement tabulés et utilisés dans une normalisation légèrement différente /1/.

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{B}_1^{0\mu} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \dot{A}_1^{0\mu} \\ \dot{B}_1^{4m\mu} = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \dot{A}_1^{4m\mu} \end{array} \right. \quad (3.50.)$$

Ces coefficients $\dot{B}_1^{4m\mu}$ sont présentés dans la table I.1. de l'annexe I, pour les valeurs paires et impaires de l inférieures à 34.

3.1.3. Dualité des points de vue de BUNGE et ROE

Les simplifications successives effectuées au paragraphe 3.1.1. permettent de ramener le problème de la symétrisation d'une série d'harmoniques sphériques généralisés à celle d'une série d'harmoniques (simples); ceci vaut également pour l'approche selon ROE /19/. De plus, compte tenu des éq. (I.7) et (I.20), l'étude peut également se restreindre à un sous-espace fermé V_1 , correspondant à un rang l donné. Ainsi, pour traduire l'invariance d'un développement en série d'harmoniques sphériques simples, de rang l donné, sous l'action du projecteur de symétrie P, éq. (3.20)

$$P \sum_n c_1^n |1n\rangle = 1 \sum_n c_1^n |1n\rangle \quad (3.51.)$$

ROE conserve les harmoniques sphériques non symétrisés éq. (I.3), et impose aux coefficients c_1^n de vérifier les relations de dépendance linéaire induites par l'éq. (3.51.). En raison de la linéarité de l'opérateur identique 1 et du projecteur P, l'éq. (3.51.) s'écrit

$$\sum_n c_1^n (1 - P) |1n\rangle = 0 \quad (3.52.)$$

La multiplication des deux membres de l'éq. (3.52.) par les vecteurs "bras" $\langle 1m |$ conduit, pour les coefficients C_1^n , aux relations linéaires suivantes

$$\phi_m (C_1^n) = \sum_n (1 - P)_{mn} C_1^n = 0 \quad (3.53.)$$

où $(1 - P)_{mn}$ sont les éléments de matrice de l'opérateur $1 - P$, sur la base des harmoniques sphériques. Ainsi, les formes linéaires $\langle 1m | (1 - P)$ constituent une famille génératrice de l'image $\text{Im}(1 - P)$, c'est-à-dire du noyau $\text{Ker}(P)$. En effet, comme P est un projecteur opérant sur l'espace V_1 des harmoniques sphériques $|1m\rangle$ de rang 1 donné

$$V_1 = I_m (P_1) \oplus \text{Ker}(P_1) \quad (3.54.)$$

où le symbole \oplus désigne la somme directe.

En vue d'obtenir les formes linéaires ϕ_m (éq.(3.53)) indépendantes, il est donc suffisant de rechercher une base de $\text{Im}(1 - P)$. De même que pour l'approche de BUNGE, il convient de faire la distinction entre les groupes selon qu'ils appartiennent, ou non, à la classe de symétrie cubique.

Groupes n'appartenant pas au système cubique

Le traitement de ces différents groupes de type diédral est à nouveau analogue; il suffit de l'illustrer sur l'exemple du groupe de symétrie trigonale 32 précédemment choisi.

Les formes ϕ_m , pour lesquelles m n'est pas multiple de 3, donnent d'après les éq. (3.53.) et (3.31)

$$\phi_m (C_1^n) = \sum_n \delta_{mn} C_1^n = C_1^m = 0 \quad (3.55.)$$

Ces formes opèrent donc la sélection des coefficients C_1^{3m} ; les autres coefficients sont nécessairement nuls.

L'expression des formes ϕ_{3m} s'obtient à partir de l'expression des éléments de matrice du projecteur, éq. (3.31)

$$\phi_{3m}(C_1^{3n}) = \sum_{3n} \frac{1}{2} (\delta_{3m,3n} - (-1)^{1+n} \delta_{3m,-3n}) C_1^{3n} = 0 \quad (3.56.)$$

Ces formes imposent aux coefficients C_1^{3m} non nuls de vérifier les conditions additionnelles de symétrie

$$C_1^{-3m} = (-1)^{1+m} C_1^{3m} \quad (3.57.)$$

Groupes appartenant au système cubique

Dans le cas de l'holoédrie cubique, les formes linéaires ϕ_m (éq. (3.53.)), pour lesquelles m n'est pas multiple de 4 s'écrivent, compte tenu de la nullité des éléments de matrice P correspondants

$$\phi_m(C_1^n) = \sum_n \delta_{mn} C_1^n = C_1^m = 0 \quad (3.58.)$$

Pour les indices $4n$ retenus par cette règle de sélection, les considérations de symétrie éq. (3.41.) qui ont guidé dans le changement de base éq. (3.42.), sont également valables. Dorénavant, c'est cette base qui est implicitement utilisée. Ainsi, les coefficients C_1^{4n} (avec $4n \geq 0$) et les éléments de matrice $(1-P)_{4m,4n} = Q_{4m,4n}$ correspondent à cette nouvelle base. A un rang l donné, le nombre total de formes ϕ_{4m} est toujours donné par $\left[\frac{l}{4} \right] + 1$. Le nombre $N(l)$ de ces formes linéairement indépendantes est complémentaire, en raison de l'éq. (3.54.) du nombre $M(l)$, éq. (3.45.)

$$\left\{ \begin{array}{ll} N(l) = \left[\frac{l}{4} \right] + 1 - M(l) & \text{lorsque } l \text{ est pair} \\ N(l) = \left[\frac{l}{4} \right] - M(l) & \text{lorsque } l \text{ est impair} \end{array} \right. \quad (3.59.)$$

Les $N(1)$ formes linéairement indépendantes sont extraites par la même orthonormalisation de SCHMIDT, qui conduit à une matrice Q échelonnée selon les lignes. A titre d'exemple, les $N(1)$ premières lignes de la matrice suivante, dénombrées par l'indice v , sont les formes indépendantes recherchées ($N(1) = 4$).

$$\begin{array}{rcccccccc}
 v = 1 & Q_{00}^{(0)} & \textcircled{Q_{04}^{(0)}} & \textcircled{Q_{08}^{(0)}} & \textcircled{Q_{012}^{(0)}} & \dots & Q_{0\ 4m}^{(0)} \\
 v = 2 & 0 & Q_{44}^{(1)} & \textcircled{Q_{48}^{(1)}} & \textcircled{Q_{412}^{(1)}} & \dots & Q_{4\ 4m}^{(1)} \\
 v = 3 & 0 & 0 & Q_{88}^{(2)} & \textcircled{Q_{812}^{(2)}} & \dots & Q_{8\ 4m}^{(2)} \quad (3.60.) \\
 v = 4 & 0 & 0 & 0 & Q_{12\ 12}^{(3)} & \dots & Q_{12\ 4m}^{(3)} \\
 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0
 \end{array}$$

Il est possible de donner une expression plus simple de ces $N(1)$ formes, à condition de renoncer à leur orthogonalité. Cette étape supplémentaire de réduction consiste à utiliser chaque terme diagonal de l'éq. (3.60.) pour éliminer, par combinaisons linéaires sur les lignes, les termes situés au-dessus, dans la même colonne (entourés d'un cercle dans l'éq. (3.60)). Les formes ainsi obtenues constituent la base canonique du sous-espace vectoriel $\text{Im}(Q)$ engendré par les $N(1)$ formes non nulles /20/; les coefficients correspondants sont, à un facteur de norme près, les coefficients de symétrie recherchés. Ces coefficients de symétrie, que nous notons $R_1^{4\mu}$ dans la normalisation équivalente à celle de l'éq. (3.50.) des coefficients $B_1^{4\mu}$, sont présentés dans la table I.2. de l'annexe I, pour les rangs pairs et impairs de 1, inférieurs à 34.

Pour être en accord avec ROE /19/, la réduction a été effectuée pour que les $N(l)$ formes indépendantes expriment les coefficients C_1^{4m} en fonction des $M(l)$ premiers coefficients $C_1^0, C_1^4, \dots, C_1^{4(M-1)}$ (lorsque l est pair) ou $C_1^4, \dots, C_1^{4(M-1)}, C_1^{4M}$ (lorsque l est impair), choisis comme coefficients indépendants, respectivement :

$$\left\{ \begin{aligned} C_1^{4m} &= \sum_{\mu=1}^{M(l)} R_1^{4m \mu} C_1^{4(\mu-1)} \\ C_1^{4m} &= \sum_{\mu=1}^{M(l)} R_1^{4m \mu} C_1^{4\mu} \end{aligned} \right. \quad (3.61.)$$

3.1.4. Effets des symétries de seconde espèce

Ainsi que le montre l'écriture générale éq. (3.2.) du groupe O_b de la symétrie cristalline, les éléments de seconde espèce de O_b sont tous obtenus en multipliant l'un d'entre eux, $\bar{g}_b \bar{i}$, choisi comme élément générateur, par le sous-groupe des rotations G_b . Les conditions de la symétrie cristalline sont donc connues sur $f(0)$ dès qu'elles sont définies pour l'élément générique $\bar{g}_b \bar{i}$. En donnant à O_b la valeur particulière $\bar{g}_b \bar{i}$ dans l'éq. (3.5.), celle-ci se particularise en

$$f(\bar{g}_b \bar{i} 0) = f(0) \quad (3.62.)$$

Si l'on tient comme précédemment compte de la définition éq. (2.17.) de la fonction de texture, l'équation (3.62.) se scinde en deux relations, selon que la transformation orthogonale O est de première ou de seconde espèce :

$$f^L(\bar{g}_b g) = f^R(g) \quad , \quad f^R(\bar{g}_b g) = f^L(g) \quad , \quad M^R = M^L = \frac{1}{2} \quad (3.63.)$$

Les symétries cristallines de seconde espèce induisent également les conditions d'invariance correspondantes, en la variable \bar{h} , sur les fonctions de distribution axiales. Si \bar{h}' désigne une direction cristalline équivalente à la direction \bar{h} , par la relation de symétrie :

$$\bar{h}' = \bar{g}_b \bar{i} \bar{h} \quad \bar{g}_b \bar{i} \in O_b \quad (3.64.)$$

l'inversion centrale \bar{i} opère indifféremment sur le vecteur \bar{h} , ou sur le vecteur \bar{h}' , pour conduire au vecteur opposé $-\bar{h}$ ou $-\bar{h}'$. Ainsi, en partant de la composante droite de la fonction de distribution axiale éq. (2.21.),

on peut effectuer les transformations successives :

$$\frac{1}{2\pi} \int_{\vec{g}_b \vec{h} = \vec{g}_b \vec{1} g \vec{y}} f(g) dg = \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{g}_b \vec{1} \vec{h} = \vec{g}_b \vec{1} g \vec{y}} f(\vec{g}_b \vec{1} g) d(\vec{g}_b \vec{1} g) \quad (3.65.)$$

en faisant appel à la relation de symétrie éq. (3.62.) que vérifie la fonction de texture $f(0)$ et à l'invariance de la mesure dg par translation. Compte tenu des définitions éq. (2.21.) et (2.23.) des composantes de la fonction de distribution axiale, l'éq. (3.65.) conduit à la première des deux conditions d'invariance suivantes :

$$A^R(\vec{h}, \vec{y}) = A^L(-\vec{g}_b \vec{h}, \vec{y}) \quad , \quad A^L(\vec{h}, \vec{y}) = A^R(-\vec{g}_b \vec{h}, \vec{y}) \quad (3.66.)$$

La seconde de ces relations se justifie de façon similaire.

En conclusion de l'étude des symétries cristallines, il est utile d'insister sur la différence fondamentale qui existe entre les symétries de première espèce et celles de seconde espèce. En effet, les composantes droites et gauches - de la fonction de texture aussi bien que de la fonction axiale - possèdent chacune toutes les symétries décrites par le sous-groupe des rotations G_b . En revanche, les symétries de seconde espèce n'imposent, sur les composantes droites et gauches considérées isolément, aucune symétrie additionnelle. Ces dernières symétries requièrent uniquement l'existence de relations entre les composantes droites et gauches, dont une seule peut être choisie comme une fonction indépendante.

3.2. Conditions d'invariance liées aux symétries d'échantillon

3.2.1. Définition des symétries d'échantillon conventionnelles

La distribution statistique des orientations de cristaux dans l'échantillon polycristallin peut également posséder des symétries. Une première description de ces symétries d'échantillon - dite conventionnelle - est quasi identique à la description des symétries cristallines, si ce n'est

que le groupe

$$O_a = \{1, \bar{g}_a \bar{I}\} G_a \quad (3.67.)$$

des symétries d'échantillon opère à droite, et non à gauche. Ainsi, tous les systèmes de référence cartésiens K'_a , transformés de K_a par les opérations du groupe orthogonal O_a sont équivalents à K_a :

$$K'_a = O_a K_a \equiv K_a \quad , \quad O_a \in O_a \quad (3.68.)$$

Ceci est le cas lorsque la statistique des orientations est la même du point de vue du système de référence K'_a que du système K_a . Une autre interprétation possible consiste à considérer que lorsque la statistique des orientations est transformée, dans son ensemble, par l'opération de symétrie O_a , elle demeure globalement invariante. Cette invariance est réalisée lorsque chaque cristal en orientation O possède son pendant en orientation OO_a .

En raison de cette symétrie d'échantillon, l'orientation d'un cristal est définie par la classe à droite :

$$\{OO_a\} \equiv O \quad , \quad O_a \in O_a \quad (3.69.)$$

de toutes les transformations orthogonales équivalentes. La fonction de texture doit obéir aux conditions d'invariance correspondantes

$$f(OO_a) = f(O) \quad , \quad O_a \in O_a \quad (3.70.)$$

De même que pour les symétries cristallines, l'éq. (3.70.) donne lieu à deux types distincts de relations de symétrie sur les composantes $f^R(g)$ et $f^L(g)$. Ainsi, l'éq. (3.70.) se traduit par les relations:

$$f^R(gg_a) = f^R(g) \quad , \quad f^L(gg_a) = f^L(g) \quad (3.71.)$$

pour les rotations pures g_a , et par les relations :

$$f^L(g\bar{g}_a) = f^R(g) \quad , \quad f^R(g\bar{g}_a) = f^L(g) \quad , \quad M^R = M^L = \frac{1}{2} \quad (3.72.)$$

pour les opérations $\bar{g}_a \bar{1}$ de seconde espèce.

Les éq. (3.71.) et (3.72.) induisent les conditions d'invariance correspondantes, en la variable \vec{y} , sur les fonctions de distribution axiale :

$$A^R(\vec{h}, \vec{y}) = A^R(\vec{h}, g_a \vec{y}) \quad , \quad A^L(\vec{h}, \vec{y}) = A^L(\vec{h}, g_a \vec{y}) \quad (3.73.)$$

et

$$A^R(\vec{h}, \vec{y}) = A^L(\vec{h}, -\bar{g}_a \vec{y}) \quad , \quad A^L(\vec{h}, \vec{y}) = A^R(\vec{h}, -\bar{g}_a \vec{y}) \quad , \quad M^R = M^L = \frac{1}{2} \quad (3.74.)$$

3.2.2. Définition des symétries d'échantillon non-conventionnelles.

Leur description au moyen des groupes colorés.

L'analyse des symétries d'échantillon est en fait plus complexe que celle des symétries cristallines. En effet, les symétries d'échantillon n'ont pas le caractère de rigueur géométrique des symétries cristallines, et ne peuvent être interprétées que du point de vue de l'étude statistique. Ainsi, pour l'observateur extérieur à l'échantillon, deux directions \vec{y} et \vec{y}' seront dites équivalentes si elles présentent la même distribution de directions cristallographiques \vec{h} coïncidant avec elles. Lors de l'étude des composantes $A^R(\vec{h}, \vec{y})$ et $A^L(\vec{h}, \vec{y})$ de la fonction de distribution axiale, nous avons vu qu'il convient d'établir la distinction entre les directions cristallines droites et gauches. En effet, dans une direction d'échantillon \vec{y} donnée, la statistique $A^R(\vec{h}, \vec{y})$ comptabilise les directions cristallines droites, qui sont orientées par une rotation pure, $\vec{y} = g\vec{h}$ (éq. (2.20.)).

En revanche, la statistique $A^L(\vec{h}, \vec{y})$ comptabilise les directions cristallines gauches, qui sont orientées par une transformation orthogonale de seconde espèce, $\vec{h} = \bar{g}\vec{y}$ (éq. (2.22.)). Les directions cristallines \vec{h} sont

ainsi marquées d'un caractère supplémentaire, auquel on peut affecter les valeurs "droit" et "gauche", ou encore, dans la terminologie des groupes colorés, les valeurs "noir" et "blanc". Il est donc nécessaire d'ajouter, aux opérations conventionnelles de symétrie, celle de la symétrie de couleur, traduite par :

$$A^R(h,y) = A^L(h,y) \quad , \quad A^L(h,y) = A^R(h,y) \quad , \quad M^R = M^L = 1/2 \quad (3.75.)$$

Les relations précédentes définissent un nouvel opérateur de symétrie $1'$ qui permute les couleurs "noir" et "blanc"

$$\begin{aligned} A^R(\vec{h}, \vec{y}) &\xrightarrow{1'} A^L(\vec{h}, \vec{y}) \\ A^L(\vec{h}, \vec{y}) &\xrightarrow{1'} A^R(\vec{h}, \vec{y}) \end{aligned} \quad (3.75.a)$$

En d'autres termes, l'involution non-conventionnelle $1'$ inverse les couleurs "noir" et "blanc", et ceci en une seule et même direction d'échantillon \vec{y} donnée, contrairement aux symétries conventionnelles de seconde espèce qui inversent les couleurs, mais tout en échangeant les couples $(\vec{y}, -\vec{y})$ de directions d'échantillon opposées (cf. éq. (3.74.)).

Aussi le groupe O_a , enrichi de l'involution de couleur $1'$, est-il généralisé à un groupe coloré $/21a/$, identique aux groupes de SHUBNIKOV $/21b/$:

$$O'_a = \{1, 1'\} O_a \quad (3.76.)$$

4. DETERMINATION DE LA FONCTION DE TEXTURE A PARTIR DE LA FONCTION AXIALE :

FORMULE D'INVERSION.

Nous avons vu, éq. (2.21.), que la fonction de distribution axiale droite est une intégrale de la fonction de texture droite

$$A^R(\vec{h}, \vec{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{h}=\vec{g}\vec{y}} f^R(g) dg \quad (4.1.)$$

et qu'une relation analogue, éq. (2.23.), existe pour les fonctions gauches, si l'on remplace les indices supérieurs R par L, et le chemin de l'intégrale curviligne $\vec{h} = \vec{g}\vec{y}$ par l'éq. (2.22.), $\vec{h} = -\vec{g}\vec{y}$. Dorénavant, on pourra omettre ces indices R et L, à condition de se remémorer que le caractère droit ou gauche doit être le même dans les deux membres de l'éq. (4.1.). En revanche, pour rappeler que toute fonction de distribution axiale est entièrement déterminée par la fonction de texture f dont elle est issue, elle sera marquée de l'indice supérieur f , soit $A^f(\vec{h}, \vec{y})$. Il est légitime de se poser le problème inverse, à savoir si la fonction f est déterminée par sa fonction axiale A^f associée. En effet, l'éq. (4.1.) montre que la fonction f apparaît comme la solution d'une équation intégrale, qui était traditionnellement résolue par l'intermédiaire des développements en séries d'harmoniques sphériques /1,2/. Récemment, S. MATTHIES /22/ a proposé, sans démonstration, une formule d'inversion qui n'est pas basée sur un développement en série.

Nous montrerons qu'une telle formule d'inversion directe peut être rigoureusement établie /23/, au prix d'un minimum de calculs, en faisant appel à des méthodes efficaces de la théorie des groupes.

Afin d'être en accord avec les conventions de base en théorie des groupes, les rotations seront toutes décrites dans le système de référence fixe, K_a , lié à l'échantillon. Ceci a pour effet de permuter le produit des rotations par rapport à la convention du repère mobile, utilisée - sauf mention expresse du contraire - dans ce travail, pour être en accord avec l'ouvrage de référence de H.J. BUNGE /1a,b/.

Note : Les conventions du repère mobile et du repère fixe sont comparées de façon plus détaillée dans l'appendice I (cf. notamment les éq. I.9-10 illustrées par les fig. I.3 a-b).

4.1. Notations et énoncé du problème de l'inversion

Le groupe $SO(3)$, que l'on notera G , est le groupe continu des matrices de rotation (à déterminant +1). Ainsi, g désigne la matrice de passage du repère K_a , qui est lié à l'échantillon, vers le repère K_b , qui est lié au cristal :

$$K_a \xrightarrow{g} K_b \quad (4.2.)$$

On notera :

$$\text{Tr}(g) = g_{11} + g_{22} + g_{33} = 2 \cos \omega + 1 \quad (4.3.)$$

la trace de la matrice g , où ω est l'angle de la rotation g . Si g parcourt G , la trace varie entre les limites -1 et +3.

Une fonction $f(g)$ est centrale lorsqu'elle vérifie l'équation de conjugaison :

$$f(g') = f(g g' g^{-1}) \quad \forall g \in G \quad (4.4.)$$

Dans ce cas, $f(g)$ ne dépend que de $\text{Tr}(g)$, par l'intermédiaire d'une fonction h définie sur l'intervalle $[-1, +3]$:

$$f(g) = h(\text{Tr}(g)) = h(2 \cos \omega + 1). \quad (4.5.)$$

κ désigne le sous-groupe des rotations d'axe Z :

$$\kappa = \{R_Z(\psi) \mid \psi \in [0, 2\pi]\} \quad (4.6.)$$

S_2 désigne la sphère unité de l'espace R^3 , dont le pôle nord $(0,0,1)$ est noté \vec{N} .

Dans la convention du repère fixe, le trajet de l'intégrale curviligne éq. (4.1.) est défini, au moyen de la matrice de passage g , par la relation

$$\vec{y} = g\vec{h} \quad (4.7.)$$

remplaçant dorénavant, dans le repère fixe, la relation précédente $\vec{h} = g\vec{y}$, qui était valable dans le repère mobile. Pour l'écriture explicite du trajet éq. (4.7.), il est commode de décomposer, avec BUNGE /1a,b/, la rotation g en un produit de rotations défini de la manière suivante. Soient \vec{y}, \vec{h} deux points de S_2 et g_1, g_2 deux rotations telles que :

$$\vec{y} = g_1 \vec{N} \quad ; \quad \vec{h} = g_2 \vec{N} \quad (4.8.)$$

alors

$$A^f(g_2, g_1) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(g_1 R_Z(\psi) g_2^{-1}) d\psi = A^f(\vec{h}, \vec{y}) \quad (4.9.)$$

Note : Les deux premiers angles d'Euler de la rotation g_1 fixent l'orientation de \vec{y} , lequel est invariant sous l'effet de la troisième et dernière rotation (autour de \vec{y}); ceci vaut également pour g_2 et \vec{h} . La notation $A^f(g_2, g_1)$, bien que surabondante, permet de se restreindre à un problème défini entièrement dans le groupe $SO(3) = G$ des rotations.

4.2. Résolution de l'équation intégrale : formule d'inversion

Le calcul de $f(g)$ peut être ramené au calcul de la valeur en 1 (identité) d'une fonction centralisée /24/.

4.2.1. Réduction au calcul de la valeur en l'identité d'une fonction f^g

Nous posons

$$f^g(g') = f(g.g') \quad ; \quad (4.10.)$$

alors

$$\begin{aligned} A^{f^g}(g_2, g_1) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f^g(g_1 R_Z(\psi) g_2^{-1}) d\psi \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(g g_1 R_Z(\psi) g_2^{-1}) d\psi = A^f(g_2, g g_1) \end{aligned} \quad (4.11.)$$

En d'autres termes, une rotation g du repère d'échantillon transforme $f(1)$ en $f(g)$:

$$\begin{cases} f^g(1) = f(g) \\ A^{f^g}(\vec{h}, \vec{y}) = A^f(\vec{h}, g\vec{y}) \end{cases} \quad (4.12.)$$

4.2.2. Réduction au calcul d'une fonction centralisée

Nous définissons une fonction centralisée par

$$f^C(g') = \int_G f(g g' g^{-1}) dg \quad ; \quad \int_G dg = 1 \quad (4.13.)$$

Conformément à l'éq. (4.4.), f^C est une fonction centrale qui possède les propriétés suivantes :

$$f^C(1) = f(1) \quad (4.14.)$$

$$A^{f^C}(g_2, g_1) = A^{f^C}(\vec{h}, \vec{y}) = \int_G A^f(g\vec{h}, g\vec{y}) dg \quad (4.15.)$$

En effet :

$$\begin{aligned} A^{f^C}(g_2, g_1) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f^C(g_1 R_Z(\psi) g_2^{-1}) d\psi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\psi \int_G f(g g_1 R_Z(\psi) g_2^{-1} g^{-1}) dg \\ &= \int_G dg \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(g g_1 R_Z(\psi) (g g_2)^{-1}) d\psi = \int_G dg A^f(g g_2, g g_1). \end{aligned} \quad (4.16.)$$

Propriétés de A^{f^C} . De l'éq. (4.15.) il résulte que

$$A^{f^C}(\vec{h}, \vec{y}) = A^{f^C}(g\vec{h}, g\vec{y}) \quad \forall g \in G \quad (4.17.)$$

Pour $\vec{h} = \vec{N}$, on obtient la figure de pôles* (001) :

$$A^{f^C}(\vec{N}, \vec{y}) = P_{\vec{N}}^{\vec{y}}(\vec{y}) \quad (4.18.)$$

* Note : Il convient de préciser que la figure de pôles est à comprendre dans l'acception mathématique du terme. Sauf mention expresse du contraire, ces figures de pôles mathématiques ne comptabilisent que les directions cristallines droites h^R , ou que les gauches h^L , suivant le cas. De plus, elles ne sont pas symétrisées par la loi de FRIEDEL, i.e. elles ne sont pas centrosymétriques, a priori.

Propriétés de $P_{\vec{N}}^{\vec{y}}(\vec{y})$. Si dans l'éq. (4.17.), g désigne une rotation autour du pôle nord \vec{N} , on a :

$$P_{\vec{N}}^{\vec{y}}(R_Z(\psi) \vec{y}) = P_{\vec{N}}^{\vec{y}}(\vec{y}) = P(\cos \theta) \quad (4.19.)$$

où θ désigne l'angle de déclinaison de \vec{y} par rapport au pôle nord \vec{N} . (La dépendance explicite de P en fonction de $\cos \theta$ sera donnée ultérieurement, dans l'éq. (4.23.)). Cette figure de pôles, constante sur les parallèles, possède une symétrie axiale. De l'éq. (4.17.) résulte

$$P_{g\vec{N}}^{\vec{y}}(\vec{y}) = P_{\vec{N}}^{\vec{y}}(g^{-1} \vec{y}) \quad (4.20.)$$

i.e. cette unique figure de pôles détermine toutes les autres figures de pôles, par changement de repère d'échantillon. (Cette dernière propriété résulte de la centralisation; elle est bien entendu fautive sur la fonction de texture de départ).

Comme f^C est centrale, il existe d'après l'éq. (4.5.) une fonction $h : [-1, 3] \longrightarrow \mathbb{R}$ telle que :

$$f^C(g) = h(\text{Tr}(g)) = h(2 \cos \omega + 1)$$

$$f(1) = f^C(1) = h(\text{Tr}(1)) = h(3) \quad (4.21.)$$

Si l'on pose $g_2 = 1$ et $g_1 = R_X(\theta)$, il résulte des éq. (4.8.) et (4.9.)

$$P(\cos \theta) = P_{\vec{N}}(R_X(\theta) \vec{N}) = A^{f^C}(\vec{N}, R_X(\theta) \vec{N})$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f^C(R_X(\theta) R_Z(\psi)) d\psi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} h(\text{Tr}(R_X(\theta) R_Z(\psi))) d\psi \quad (4.22.)$$

En effectuant le produit des matrices $R_X(\theta)$ et $R_Z(\psi)$, on obtient :

$$P(\cos \theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} h(\cos \theta \cos \psi + \cos \theta + \cos \psi) d\psi \quad (4.23.)$$

On a donc ramené le problème de la détermination de f , fonction à trois variables, à celui de la détermination de h , fonction centrale à une seule variable. Pour déterminer h , connaissant P , il est nécessaire de résoudre l'équation intégrale (4.23.). Celle-ci peut être aisément résolue, ainsi que le montre l'appendice II, au moyen de la transformée d'ABEL /25/.

La formule d'inversion ainsi obtenue pour l'éq. intégrale (4.23.) s'écrit, pour des valeurs particulières des arguments (éq. (II.7.))

$$h(3) = P(-1) + 2 \int_0^\pi \frac{d}{d \cos \theta} P(\cos \theta) \cos \frac{\theta}{2} d\theta \quad (4.24.)$$

Comme la valeur $h(3)$ est obtenue, dans l'éq. (4.5.), pour $g = 1$, transformation identique, l'éq. (4.24.) fournit la valeur $f(1)$:

$$f(1) = P(-1) + 2 \int_0^\pi \frac{d}{d \cos \theta} P(\cos \theta) \cos \frac{\theta}{2} d\theta$$

avec

$$P(\cos \theta) = \int_G A^f(g' \vec{N}, g' R_X(\theta) \vec{N}) dg' \quad (4.25.)$$

4.2.3. Retour à la fonction de texture initiale

Si l'on tient compte de l'éq. (4.12.), on obtient l'expression de la fonction de texture, par translation g de la relation précédente :

$$f(g) = p^g(-1) + 2 \int_0^{\pi} d\theta \frac{d}{d \cos \theta} p^g(\cos \theta) \cos \frac{\theta}{2} \quad (4.26.)$$

où $p^g(\cos \theta)$ est donné par les expressions suivantes :

$$p^g(\cos \theta) = A^{(f^g)^c}(\vec{N}, R_X(\theta) \vec{N}) \quad (4.27.)$$

$$= \int_G A^{f^g}(g' \vec{N}, g' R_X(\theta) \vec{N}) dg' \quad (4.28.)$$

$$= \int_G A^f(g' \vec{N}, g g' R_X(\theta) \vec{N}) dg' \quad (4.29.)$$

obtenues en considérant successivement les équations (4.22.), (4.15.), et (4.11.).

4.3. Relation entre la fonction $p^g(\cos \theta)$ et la fonction de distribution angulaire $W_{\vec{h}\vec{y}}(\cos \theta)$

L'utilisation de la formule d'inversion nécessite le calcul de la fonction $p^g(\cos \theta)$. Ce dernier calcul est grandement facilité par le calcul préalable des fonctions de distributions angulaires $W_{\vec{h}\vec{y}}(\cos \theta)$, qui avaient été introduites par BUNGE dès 1969 /1a,b/.

$W_{\vec{h}\vec{y}}$ est la valeur moyenne de la figure de pôles $P_{\vec{h}}$ sur le cercle de colatitude θ centré sur \vec{y} (figure 4.1., d'après BUNGE /1a,b/).

Le calcul effectif de l'intégration éq. (4.29.) sur le groupe G est obtenu par une intégration partielle, à \vec{h} fixé, sur la variable ψ (angle de la rotation autour de h) :

$$W_{\vec{h}\vec{y}}(\cos \theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} P_{\vec{h}}(g_1 R_Z(\psi) R_X(\theta) \vec{N}) d\psi \quad (4.30.)$$

où $\vec{y} = g_1 \vec{N}$;

ce premier calcul est complété par l'intégration en la variable \vec{h} , étendue à toute la sphère des pôles S_2 :

$$p^g(\cos \theta) = \int_{S_2} W_{\vec{h}} g_{\vec{h}}(\cos \theta) d\vec{h} \quad (4.31.)$$

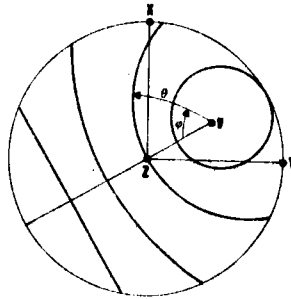


Fig. 4.1. , d'après H.J. BUNGE /1a,b/

$W_{\vec{h}\vec{y}}$ est la valeur moyenne de la figure de pôles $P_{\vec{h}}$ sur des cercles de colatitude θ , centrés en \vec{y} .

En particulier :

$$W_{\vec{h}\vec{y}}(\cos \pi) = P_{\vec{h}}(-g_1 \vec{N}) = P_{\vec{h}}(-\vec{y}) \quad (4.32.)$$

et

$$p^g(\cos \pi) = \int_{S_2} P_{\vec{h}}(-g_{\vec{h}}) d\vec{h} \quad (4.33.)$$

La formule d'inversion s'écrit donc :

$$f(g) = \int_{S_2} P_{\vec{h}}(-g\vec{h}) d\vec{h} + 2 \int_0^\pi d\theta \cos \frac{\theta}{2} \frac{\partial}{\partial \cos \theta} \int_{S_2} d\vec{h} W_{\vec{h}} g\vec{h}(\cos \theta) \quad (4.34.)$$

Cette formule d'inversion est donc analogue à celle qui a été proposée par S. MATTHIES, sans justification, dans une note brève /22/.

Depuis cette note, S. MATTHIES a donné des indications complémentaires sur sa démonstration de la formule d'inversion /26,27/; elle nécessite de laborieux calculs sur des fonctions généralisées, ou distributions, et n'est encore pas publiée de façon complète à ce jour /28/.

Il convient de noter que dans la formule (4.34.), l'intégrale en θ porte sur la sphère des pôles complète (fig. 4.1.) - et non sur la demi-sphère, comme dans la formule de MATTHIES - en vue de permettre l'inversion de figures de pôles mathématiques, non-centrosymétriques.

La formule d'inversion présente un intérêt théorique considérable puisqu'elle fournit une solution exacte, sans erreur de troncature, à l'équation intégrale fondamentale éq. (4.1.). Il en résulte que le passage, dans l'éq. (4.1.), de la fonction de densité des orientations f^R à la fonction de distribution axiale $A^R(\vec{h}, \vec{y})$ s'effectue sans aucune perte d'information. Ainsi, s'il était possible de mesurer séparément la fonction $A^R(\vec{h}, \vec{y})$, - qui est identique au continuum des figures de pôles $P_{\vec{h}^R}(\vec{y})$, pour les directions cristallines droites -, son inversion restituerait f^R . De même, la mesure séparée de la fonction axiale $A^L(\vec{h}, \vec{y})$ conduirait, par inversion, à la composante f^L de la fonction de texture, qui serait ainsi totalement déterminée.

5. DESCRIPTION DES POSSIBILITES DE DETERMINATION EN DIFFRACTION
POLYCRISTALLINE

5.1. Fonction de densité axiale déterminable $\bar{A}(\bar{h}, \bar{y})$

Le chapitre précédent étudiait les possibilités de calculer la fonction de texture, par inversion des fonctions axiales $A^R(\bar{h}, \bar{y})$ et $A^L(\bar{h}, \bar{y})$, sans tenir aucun compte des techniques expérimentales utilisées en vue de leur détermination. Parmi celles-ci, la goniométrie de texture, due à SCHULZ, est la plus répandue. Un angle de BRAGG $\theta_{\bar{h}}$ est fixé; il correspond à la distance interréticulaire $d_{\bar{h}}$ d'une famille de plans cristallins. L'échantillon polycristallin subit une rotation par rapport au système fixe source-détecteur. Pour une orientation donnée du polycristal, les plans dont les normales \bar{h} sont parallèles au vecteur (fixe) de diffraction \bar{s} - dont l'orientation est \bar{y} dans le repère K_a lié à l'échantillon - participent à la diffraction (Fig. 5.1.).

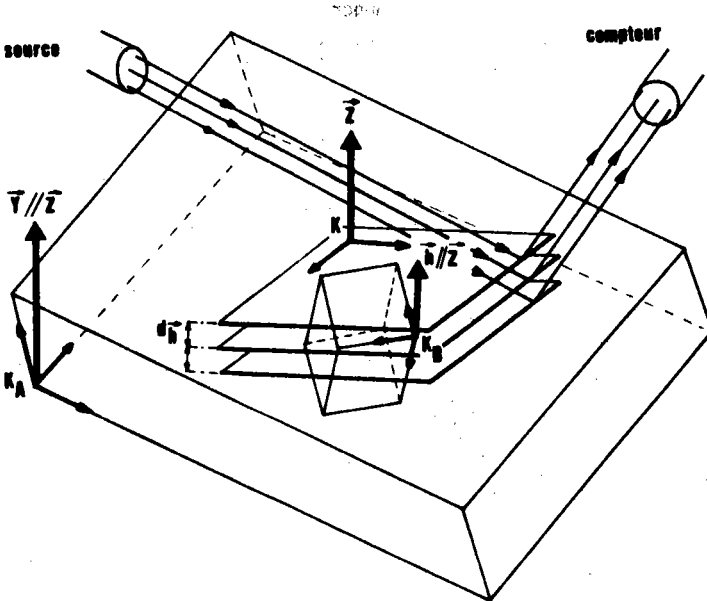


Fig. 5.1. : Les plans cristallographiques $d_{\bar{h}}$ sélectionnés par l'angle de BRAGG $\theta_{\bar{h}}$ diffractent lorsque leur normale \bar{h} est parallèle au vecteur de diffraction.

En plus des repères K_a et K_b qui définissent l'orientation O d'un cristallite, considérons le repère cartésien intermédiaire K , lié à ce même cristallite, de sorte que son axe \vec{Z} soit perpendiculaire à la famille des plans qui diffractent; la rotation autour de l'axe \vec{Z} , qui fixe l'orientation de l'axe \vec{X} dans le plan orthogonal, est arbitraire.

D'ailleurs, tout cristallite déduit de celui de la Fig. 5.1. par une rotation quelconque autour de \vec{Z} participe également à la diffraction. Si la normale \vec{Z} du repère intermédiaire coïncide avec les directions \vec{y} et \vec{h} , dans les repères respectivement liés à l'échantillon et au cristallite, la condition de diffraction s'écrit (dans la convention, encore, du repère fixe) :

$$\vec{y} = O \vec{h} \quad (5.1.)$$

L'ensemble des transformations orthogonales qui vérifient l'éq. (5.1.) est la réunion de deux familles d'orientations, qui correspondent aux deux composantes connexes du groupe orthogonal :

$$\{O|y = O \vec{h}\} = \{g|\vec{y} = g \vec{h}\} \cup \{g \bar{1}|\vec{y} = g \bar{1} \vec{h}\} \quad (5.2.)$$

Une orientation O qui satisfait l'éq. (5.1.) participe d'autant plus à la diffraction, que son poids statistique $f(O)$ est plus important. L'intensité totalisée dans le compteur, dans l'expérience de diffraction polycristalline décrite dans la fig. 5.1., est donc égale à l'intégrale de la F.D.O. sur les orientations O qui vérifient l'éq. (5.1.)

$$\int_{\vec{y}=O \vec{h}} f(O) dO = \int_{\vec{y}=g \vec{h}} f(g) dg + \int_{\vec{y}=g \bar{1} \vec{h}} f(g \bar{1}) dg \quad (5.3.)$$

On reconnaît aisément, dans le second membre de cette équation, la somme des fonctions de densité axiale droite et gauche. Ainsi, il est démontré que dans l'expérience de diffraction polycristalline, dans laquelle les conditions de la diffraction sont fixées par la seule loi de BRAGG, les contributions des statistiques droite et gauche sont totalisées dans le compteur :

$$\tilde{A}(\vec{h}, \vec{y}) = M^R A^R(\vec{h}, \vec{y}) + M^L A^L(\vec{h}, \vec{y}) \quad (5.4.)$$

Aussi, la diffraction polycristalline perd-elle le caractère de couleur - caractère noir ou blanc - pour réaliser une projection grise. La véritable couleur grise de la théorie des groupes colorés n'est obtenue que pour les matériaux non énantiomorphes, qui présentent autant de directions cristallographiques \vec{h} "noires" que "blanches". En revanche, les matériaux énantiomorphes permettraient de réaliser toutes les nuances de gris selon les proportions relatives de cristaux droits et gauches dans le polycristal.

5.2. Fonction de densité des orientations déterminable \tilde{f}

A partir de l'expression des distributions axiales A^R et A^L en fonction des coefficients de texture C^R et C^L , on obtient aisément celle de la distribution axiale déterminable :

$$\tilde{A}(\vec{h}, \vec{y}) = \sum_{l,m,n} \frac{4\pi}{2l+1} \tilde{C}_1^{mn} k_1^{*m}(\vec{h}) k_1^n(\vec{y}) \quad (5.5.)$$

avec

$$\tilde{C}_1^{mn} = M^R C_1^{Rmn} + (-1)^l M^L C_1^{Lmn} \quad (5.6.)$$

Par définition, nous appellerons fonction de texture déterminable, la fonction $\tilde{f}(g)$, dont l'éq. (5.6.) donne les coefficients du développement en série d'harmoniques sphériques généralisés :

$$\tilde{f}(g) = \sum_{lmn} \tilde{C}_1^{mn} T_1^{mn}(g) \quad (5.7.)$$

Il est en effet clair que l'application de la formule d'inversion à la fonction axiale superposée $\tilde{A}(\vec{h}, \vec{y})$ conduit à la détermination de la fonction \tilde{f} . Afin de sérier les différentes superpositions - ou projections - qui affectent les mesures expérimentales, nous ne considérons pas, pour l'instant, celle qui résulte de la loi de FRIEDEL. Les conséquences de cette symétrisation additionnelle, ainsi que les possibilités de violer la loi de FRIEDEL ne seront considérées que par la suite (Chapitre 7). Nous allons préciser la signification de la fonction de texture déterminable $\tilde{f}(g)$, selon que les cristaux sont - ou non - énantiomorphes.

5.2.1. Cas des cristaux énantiomorphes

Ainsi que nous l'avons vu, le polycristal peut renfermer des cristaux droits et des cristaux gauches, dont les orientations sont décrites par les composantes $f^R(g)$ et $f^L(g)$. Ces deux fonctions de texture (ainsi que les coefficients de texture correspondants) sont indépendantes l'une de l'autre. Cependant, l'expérience de diffraction polycristalline ne donne accès qu'à une fonction de texture fictive, qui mélange les deux composantes indépendantes selon l'éq. (5.6.).

5.2.2. Cas des cristaux non-énantiomorphes

Les cristaux non-énantiomorphes peuvent être caractérisés par l'opération de symétrie cristalline $\bar{g}_b \cdot \bar{1}$, à déterminant -1 , qui engendre toutes les symétries de seconde espèce par multiplication avec le sous-groupe des rotations. Nous pouvons nous affranchir du sous-groupe des rotations G_b . En effet, nous avons vu au paragraphe 3.1. que les composantes f^R et f^L possèdent séparément les symétries rotationnelles et que l'application de l'opérateur de projection P_{G_b} conduit aisément à des fonctions adaptées à ces symétries rotationnelles. Par ailleurs, l'opération de seconde espèce $\bar{g}_b \cdot \bar{1}$ implique la relation de symétrie éq. (3.63.)

$$f^L(g) = f^R(\bar{g}_b g) \quad ; \quad M^R = M^L = \frac{1}{2} \quad (5.8.)$$

qui permet d'exprimer la composante f^L en fonction de f^R . La fonction f^R de l'éq. (5.8.) est translatée de \bar{g}_b ; cette translation est obtenue par l'application de l'opérateur $T(\bar{g}_b)$, similaire à celui défini par les éq. (I. 8-9), mais opérant dans l'espace des F.D.O. :

$$f^R(\bar{g}_b g) = \bar{g}_b f^R(g) = T(\bar{g}_b) f^R(g) \quad (5.9.)$$

Les coefficients \bar{C}_1^{mn} de la fonction de texture déterminable éq. (5.6.) peuvent donc s'exprimer en fonction des seuls coefficients C_1^{Rmn} de la composante droite :

$$\bar{C}_1^{mn} = \frac{1 + (-1)^l T_1(\bar{g}_b)}{2} C_1^{Rmn} \quad (5.10.)$$

Le symbole $T_1(\bar{g}_b) C_1^{Rmn}$ représente les coefficients de la fonction translátée définie par l'éq. (5.9.).

Ainsi, bien que l'inversion centrale \bar{I} n'opère pas sur les harmoniques sphériques généralisés $T_1^{mn}(g)$ (définis sur $SO(3)$, groupe continu des rotations), les coefficients C_1^{mn} de la fonction déterminable sont affectés par elle. L'opérateur d'inversion centrale \bar{I} doit en effet être représenté sur les harmoniques sphériques généralisés, avec la représentation naturelle (et familière) qu'il possède sur les harmoniques sphériques simples :

$$\bar{I} |1m\rangle = (-1)^1 |1m\rangle \quad (5.11.)$$

L'opération de l'inversion centrale sur la fonction de texture f^R se traduit par une involution, qui est définie par le biais du développement de f^R en série d'harmoniques sphériques généralisés :

$$\left\{ \begin{array}{l} f^R(g) = \sum_{1mn} C_1^{Rmn} T_1^{mn}(g) \\ \bar{I} f^R(g) = \sum_{1mn} C_1^{Rmn} \bar{I} T_1^{mn}(g) = \sum_{1mn} (-1)^1 C_1^{Rmn} T_1^{mn}(g) \end{array} \right. \quad (5.12.)$$

Le recours à cette involution présente l'avantage de définir la fonction de texture déterminable \bar{f} comme l'image de f^R par un opérateur de projection

$$\bar{f}^R = \frac{1 + \bar{I} T(\bar{g}_b)}{2} f^R(g) \quad (5.13.)$$

Dorénavant, il est légitime d'omettre l'indice R de la fonction de texture droite, choisie comme seule composante indépendante. L'expression éq. (5.13.) de la fonction déterminable $\bar{f}(g)$ fournit une justification immédiate de la décomposition canonique de f :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{f}(g) = \frac{1}{2} f(g) + f_G(g) \\ f_G(g) = \frac{1}{2} \bar{I} T(\bar{g}_b) f(g) \end{array} \right. \quad (5.14.)$$

qui prouve que $\bar{f}(g)$ ne restitue que la moitié de $f(g)$, flanquée d'un fantôme (ou "ghost", selon la terminologie introduite par J. POSPIECH /29a/ et reprise par S. MATTHIES /30/, dans le cas particulier qui correspond à $\bar{g}_b = 1$, dans notre étude).

Note : M. MATSUNO /29b/ a été le premier à "voir", avec J. POSPIECH, les fantômes; ses travaux, parus en japonais, n'ont malheureusement pas connu la diffusion internationale qu'ils méritaient.

Les éléments de symétrie de seconde espèce $\bar{1} \bar{g}_b$ sont les axes inverses des groupes ponctuels de la cristallographie, dont la liste complète est :

$$\{\bar{g}_b \bar{1}\} = \{\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}\} \quad (5.15.)$$

Puisque $(\bar{3})^3 = \bar{1}$ et que, de façon similaire, $(\bar{6})^3 = \bar{2}$, il est toujours possible de se ramener aux opérations :

$$\{\bar{g}_b \bar{1}\} = \{\bar{1}, \bar{2}, \bar{4}\} \quad (5.16.)$$

Le calcul de l'opérateur $T(\bar{g}_b)$ de l'éq. (5.13.) est particulièrement simple lorsque l'axe inverse coïncide avec l'axe Z du repère K_b lié au cristal. Ce choix ne restreint pas la généralité, puisque la relation d'addition éq. (I.21.) et (I.22.) permet aisément d'effectuer un changement de repère. Le calcul explicite du projecteur de l'éq. (5.13.) s'effectue selon la technique classique, qui est détaillée dans le paragraphe 3.1., ainsi que dans l'appendice I. A titre d'exemple, les éléments de matrice du projecteur éq. (5.13.) s'écrivent, dans le cas de l'axe inverse $\bar{2}$ (miroir perpendiculaire à l'axe Z) :

$$\begin{aligned} P_{mn}^{\bar{2}} &= \langle 1m | \frac{1 + \bar{1} e^{i\pi J_Z}}{2} | 1n \rangle = \frac{1 + (-1)^1 e^{im\pi}}{2} \langle 1m | 1n \rangle \\ &= \frac{1 + (-1)^{1+m}}{2} \delta_{m,n} \end{aligned} \quad (5.17.)$$

L'application de ce projecteur au développement en série d'harmoniques de la fonction de texture f opère donc selon la règle de sélection :

$$l + m \quad \text{pair} \quad ; \quad (5.18.)$$

Les termes impairs correspondants ont une projection nulle.

Aussi, la fonction de texture f subit-elle, en raison de la symétrie cristalline, la décomposition canonique :

$$f(g) = \tilde{f}(g) + \bar{f}(g) \quad (5.19.)$$

dont seule la partie $\tilde{f}(g)$ est déterminable, par principe. La table 5.1. réunit la définition des parties déterminables $\bar{f}(g)$ et non-déterminables $\tilde{f}(g)$ par principe, sous la forme de règles de sélection sur les coefficients \bar{C}_l^{mn} et \tilde{C}_l^{mn} des développements respectifs en séries d'harmoniques sphériques généralisés /31/.

| $\bar{g}_b \bar{l}$ | $\bar{1}$ | $\bar{2}$ (miroir) | $\bar{4}$ |
|---------------------|-----------|--------------------|--------------------------|
| $\bar{f}(g)$ | l pair | 1 + m pair | $1 + \frac{m}{2}$ pair |
| $\tilde{f}(g)$ | l impair | 1 + m impair | $1 + \frac{m}{2}$ impair |

Table 5.1. : Définition des règles de sélection sur les coefficients des parties déterminables et non déterminables, par principe.

Il convient de préciser que si les caractères $\bar{f}(g)$ et $\tilde{f}(g)$ sont empruntés à la terminologie de S. MATTHIES, leur signification en est différente. Pour cet auteur, la décomposition éq. (5.19.) est une conséquence de la loi de FRIEDEL - ce qui limite l'étude à la première colonne du tableau 5.1. - alors que ce travail montre qu'elle résulte de la symétrie des cristaux. Nous verrons, au chapitre 7, que dans le cas des cristaux non centrosymétriques, la loi de FRIEDEL introduit une symétrie additionnelle, qui limite encore davantage la partie déterminable $\bar{f}(g)$.

6. EXPRESSIONS INTEGRALES DE LA FONCTION DETERMINABLE \tilde{f} ET DU

FANTÔME f_G

Il est intéressant de fournir, en plus de l'éq. (5.14.), des expressions intégrales pour la fonction déterminable \tilde{f} et pour le fantôme f_G . Ces expressions intégrales permettent en effet d'étudier la localisation et l'intensité de la composante fantôme f_G qui existe dans \tilde{f} , mais disparaît de la fonction complète f .

Le calcul de ces expressions intégrales peut s'effectuer en deux étapes. Les éq. (5.13.) et (5.14.) montrent en effet que l'opérateur $T(\bar{g}_b)$ réalise simplement une translation additionnelle, par rapport aux expressions valables dans le cas particulier $\bar{g}_b = 1$, qui correspond aux cristaux centro-symétriques. (Première colonne de la table 5.1.). Dans une première étape, on calcule donc l'expression intégrale de la partie paire de la fonction de texture

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{f}(g) = \frac{1 + \bar{1}}{2} f(g) = \sum_{lmn} C_{21}^{mn} T_{21}^{mn}(g) \\ f_G(g) = \frac{1}{2} \bar{1} f(g) \end{array} \right. \quad (6.1.)$$

L'utilisation de la même méthode de centralisation, qui a déjà permis d'établir la formule d'inversion (chapitre 4) conduit - toujours au prix d'un minimum de calculs - à l'expression intégrale de $f(g)/32$.

6.1. Notations utilisées

Les notations introduites dans le chapitre 4, sur la formule d'inversion, sont conservées. Ainsi G désigne toujours le groupe continu $SO(3)$ des matrices de rotation g .

L'angle ω de cette rotation g est noté :

$$\omega = |g| \quad (6.2.)$$

Si par ailleurs $\vec{\sigma}$, vecteur unitaire de la sphère S_2 de l'espace R^3 , désigne l'axe de la rotation g , cette dernière sera notée :

$$g = R_{\vec{\sigma}}(\omega) = e^{\omega \vec{\sigma}} \quad (6.3.)$$

Rappelons qu'une fonction f est centrale si elle vérifie l'équation de conjugaison :

$$f(g') = f(g g' g^{-1}) \quad \forall g \in G \quad (6.4.)$$

Elle ne dépend alors que de $\cos |g|$, ce qui peut s'écrire, en notation simplifiée :

$$f(g) = f(\cos |g|) = f(|g|) = f(\omega) \quad (6.5.)$$

Une telle fonction centrale peut être développée en série selon les caractères $/1a, h/$

$$f = \sum_{l=0}^{\infty} c_l x_l \quad (6.6.)$$

Les caractères de g :

$$x_l(g) = \sum_{m=-l}^{+l} T_l^{mm}(g) = \frac{\sin(2l+1)\frac{\omega}{2}}{\sin \frac{\omega}{2}} = x_l(\omega) \quad (6.7.)$$

forment une base orthornormée complète de l'espace des fonctions centrales.

Compte tenu de la formule d'intégration sur $SO(3)$:

$$\int_G f(g) dg = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} d\omega \sin^2 \frac{\omega}{2} \int_{S_2} d\vec{\sigma} f(e^{\omega \vec{\sigma}}) \quad (6.8.)$$

$$\int_G dg = 1 \quad ; \quad \int_{S_2} d\vec{\sigma} = 1$$

et de l'orthonormalité des caractères, les coefficients c_l du développement éq. (6.6.) sont obtenus par :

$$c_1 = \int dg f(g) x_1(g) = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi d\omega \sin^2 \frac{\omega}{2} f(\omega) x_1(\omega) \quad (6.9.)$$

6.2. Expression intégrale de la partie paire \tilde{f} en fonction de f

De même que pour la démonstration de la formule d'inversion (chapitre 4), le calcul de l'expression intégrale de $\tilde{f}(g)$ peut être réduit au calcul de la valeur en $g = 1$ (identité) d'une fonction centralisée /23, 24, 32/.

6.2.1. Réduction au calcul de la valeur en l'identité d'une fonction \tilde{f}^g

Nous définissons la fonction de texture f^g :

$$f^g(g') = f(gg') \quad (6.10.)$$

qui est obtenue par une rotation g du système de coordonnées lié à l'échantillon.

En utilisant l'unicité du développement en séries d'harmoniques sphériques généralisés et la relation d'addition, on obtient :

$$(\tilde{f}^g) = (\tilde{f})^g \quad (6.11.)$$

ce qui donne en l'identité $g' = 1$

$$\tilde{f}(g) = \tilde{f}^g(1) \quad (6.12.)$$

6.2.2. Réduction au calcul d'une fonction centralisée

Nous définissons la fonction centralisée de f par :

$$f^c(g') = \int_G dg f(gg'g^{-1}) \quad (6.13.)$$

La fonction centralisée de f peut s'écrire, compte tenu des éq. (6.3.) et (6.5.) :

$$\begin{aligned} f^C(\omega) &= f^C(|e^{\omega \vec{N}}|) = \int_G dg f(ge^{\omega \vec{N}} g^{-1}) = \int_G dg f(e^{\omega g \vec{N}}) \\ &= \int_{S_2} d\vec{\sigma} f(e^{\omega \vec{\sigma}}) \end{aligned} \quad (6.14.)$$

où $\vec{\sigma} = g\vec{N}$ désigne le point de S_2 transformé du pôle nord \vec{N} par g .

f^C est, conformément à l'éq. (6.4.), une fonction centrale qui vérifie :

$$(\tilde{f}^C) = (\tilde{f})^C \quad (6.15.)$$

pour les mêmes raisons que celles invoquées au paragraphe précédent 6.2.1.

De plus

$$\tilde{f}^C(1) = \tilde{f}(1) \quad (6.16.)$$

La détermination de la valeur $\tilde{f}^C(1)$ (éq. (6.16.)) en l'identité $g = 1$, de la partie paire de la fonction centralisée f^C ne fait appel qu'à des techniques classiques de l'analyse mathématique, notamment à la théorie des séries de FOURIER. L'exposé détaillé de ce calcul fait l'objet de l'appendice 3.

En se rappelant que l'angle $\omega = |g| = 0$ est associé à l'identité $g = 1$, le résultat de ce calcul peut s'écrire sous la forme (f est supposée centrale) :

$$\tilde{f}(0) = \frac{f(0)}{2} + \frac{f(\pi)}{2} + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\omega \operatorname{tg}^2 \frac{\omega}{2} (f(\pi) - f(\omega)) \quad (6.17.)$$

cette dernière relation étant donnée en la variable ω .

6.2.3. Retour à la fonction de texture initiale

En remplaçant dans l'éq. (6.17.) f par $(f^g)^c$, conformément aux éq. (6.10.) et (6.14.)

$$(f^g)^c(\omega) = \int_{S_2} d\vec{\sigma} f(g e^{\omega\vec{\sigma}}) \tag{6.18.}$$

on obtient :

$$\begin{aligned} \tilde{f}(g) &= \frac{1}{2} f(g) + \frac{1}{2} \int_{S_2} d\vec{\sigma} f(g e^{\pi\vec{\sigma}}) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\omega \operatorname{tg}^2 \frac{\omega}{2} \int_{S_2} d\vec{\sigma} (f(g e^{\pi\vec{\sigma}}) - f(g e^{\omega\vec{\sigma}})) \\ &= \frac{1}{2} f(g) + f_\pi(g) + f_\Omega(g) \end{aligned} \tag{6.19.}$$

Une formule analogue a été donnée, sans preuve, par S. MATTHIES /22/, pour laquelle toutefois l'ordre d'intégration $\int_0^\pi d\omega \dots \int_{S_2} d\vec{\sigma} \dots$

dans le dernier terme f_Ω a été permuté. Cette écriture, appliquée littéralement, peut conduire à des intégrales divergentes, comme le montre l'exemple très simple $f(g) = f(\varphi_1, \phi, \varphi_2) = \cos \phi / 32/$. Depuis sa note brève /22/, S. MATTHIES a proposé une vérification de la formule intégrale - en effectuant les intégrations dans l'ordre requis - sur les fonctions de base $T_1^{mn}(g)$ /26,33/. Cette dernière référence annonce une publication plus complète de sa démonstration /28/.

6.3. Développements en séries d'harmoniques sphériques généralisés des termes f_π et f_Ω

Soit $f(g) = T_1^{mn}(g)$ (6.20.)

Alors, compte tenu des éq. (6.10.) et (6.14.), on obtient

$$(f^g)^c(\omega) = \int_G dg' f(gg' e^{\omega\vec{N}} \sigma'^{-1}) = \frac{x_1(\omega)}{21+1} f(g) \tag{6.21.}$$

en utilisant les relations d'addition et d'orthogonalité des harmoniques sphériques généralisés.

Il en résulte :

$$f_{\Pi}(g) = \frac{1}{2} (f^g)^c(\Pi) = \frac{1}{2} \frac{x_1(\Pi)}{(2l+1)} f(g) = \frac{1}{2} \frac{(-1)^l}{(2l+1)} f(g) \quad (6.22.)$$

et

$$f_{\Omega}(g) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} d\omega \quad \operatorname{tg}^2 \frac{\omega}{2} ((f^g)^c(\Pi) - (f^g)^c(\omega))$$

$$= \frac{1}{2\pi} \frac{f(g)}{(2l+1)} \int_0^{\pi} d\omega \operatorname{tg}^2 \frac{\omega}{2} (x_1(\Pi) - x_1(\omega)) = \frac{1}{2} \frac{2l(-1)^l}{(2l+1)} f(g) \quad (6.23.)$$

l'intégrale en ω étant obtenue par récurrence sur l .

De ces calculs effectués pour un harmonique sphérique généralisé, on déduit immédiatement les développements en série :

$$f_{\Pi}(g) = \frac{1}{2} \sum_{l \geq 0} \frac{(-1)^l C_1^{mn}}{(2l+1)} T_1^{mn}(g) \quad (6.24.)$$

et

$$f_{\Omega}(g) = \frac{1}{2} \sum_{l \geq 0} \frac{(-1)^l 2l C_1^{mn}}{2l+1} T_1^{mn}(g) \quad (6.25.)$$

formules qui présentent surtout un intérêt pour le calcul numérique des termes f_{Π} et f_{Ω} . Des formules similaires ont été données, sans preuve, par S. MATTHIES et J. POSPIECH /34a/ et appliquées à une illustration numérique. Leur justification a été publiée ultérieurement par S. MATTHIES /33/, dans un travail où il utilise l'ordre d'intégration correct, discuté au paragraphe 6.2.3.

6.4. Généralisation aux distributions (fonctions généralisées)

Dans le cas de l'orientation idéale représentée par la distribution de DIRAC $\delta(g)$ centrée en l'origine 1 , il est possible d'expliciter la décomposition éq. (6.19.) sans recourir aux développements en séries

d'harmoniques éq. (6.24.) et (6.25.). Cependant, la formule (6.19.) n'ayant été démontrée que pour les fonctions différentiables, il est nécessaire de l'étendre au cas des distributions /34b/.

Rappelons qu'une distribution D est caractérisée par la règle d'intégration selon laquelle elle opère sur les fonctions différentiables f

$$\langle D, f \rangle = \int_G D(g) f(g) dg \quad (6.26.)$$

Ainsi, dans le cas de la distribution de DIRAC $D = \delta$, on obtient

$$\langle \delta, f \rangle = \int_G \delta(g) f(g) dg = f(1) \quad (6.27.)$$

Il est naturel d'étendre aux distributions la formule

$$\langle \tilde{D}, f \rangle = \langle D, \tilde{f} \rangle \quad (6.28.)$$

qui est évidente si D est une fonction différentiable, en raison des relations d'orthogonalité. En particulier, la distribution $\tilde{\delta}$ est donc définie par la règle d'intégration

$$\langle \tilde{\delta}, f \rangle = \langle \delta, \tilde{f} \rangle = \tilde{f}(1) \quad (6.29.)$$

ce qui revient à poser $g = 1$ dans l'éq. (6.19.).

On a donc la décomposition suivante de $\tilde{\delta}$:

$$\tilde{\delta} = \frac{1}{2} \delta + \delta_{\Pi} + \delta_{\Omega} \quad (6.30.)$$

avec

$$\langle \delta_{\Pi}, f \rangle = f_{\Pi}(1) = \frac{1}{2} \int_{S_2} d\vec{\sigma} f(e^{\Pi\vec{\sigma}}) \quad (6.31.)$$

et

$$\langle \delta_{\Omega}, f \rangle = f_{\Omega}(1) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} d\omega \operatorname{tg}^2 \frac{\omega}{2} \int_{S_2} d\vec{\sigma} (f(e^{\Pi\vec{\sigma}}) - f(e^{\omega\vec{\sigma}})) \quad (6.32.)$$

6.5. Etude de la décomposition de $\bar{\delta}$ ou l'apparition des fantômes

Le premier terme de la décomposition éq. (6.30.) montre que $\bar{\delta}$ restitue, par $1/2 \delta$, la moitié de la distribution réelle. La composante fantôme δ_{Π} est une distribution uniformément concentrée sur une surface définie par $|g| = \pi$, que nous appellerons surface- π avec S. MATTHIES /30/. Cette distribution étant positive, elle peut être interprétée comme fonction de texture d'une répartition de cristallites qui se déduisent de l'orientation réelle définie par δ par une rotation d'angle π autour d'axes $\vec{\sigma}$ répartis uniformément sur la sphère S_2 .

Enfin, la distribution fantôme

$$\delta_{\Omega}(g) = -\frac{1}{4} \text{PP} \frac{1}{\cos^2 \frac{|g|}{2}} \quad (6.33.)$$

est la partie principale de la fonction $-1/4 \cos^2 \frac{|g|}{2}$, le recours à la partie principale étant nécessaire à cause des singularités non intégrables de cette dernière fonction au voisinage de la surface- π , où le dénominateur s'annule.

Note : Lorsqu'une fonction présente une singularité non intégrable, il est possible de l'étendre en une distribution - ou fonction généralisée - appelée partie principale de cette fonction, et notée PP.

En effet, si f est une fonction nulle au voisinage de la surface- π , l'éq. (6.32.) peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\Omega}, f \rangle &= -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} d\omega \sin^2 \frac{\omega}{2} \frac{1}{\cos^2 \frac{\omega}{2}} \int_{S_2} d\vec{\sigma} f(e^{i\omega\vec{\sigma}}) \\ &= -\frac{1}{4} \int_G \frac{1}{\cos^2 \frac{|g|}{2}} f(g) dg \end{aligned} \quad (6.34.)$$

en vertu de la formule d'intégration sur G éq. (6.8.). Cette équation montre qu'en dehors de la surface- π , la distribution $\delta_{\Omega}(g)$ coïncide avec la fonction $-\frac{1}{4} \frac{1}{\cos^2 \frac{|g|}{2}}$.

Il est suggestif, du point de vue heuristique, de faire une représentation graphique des termes de cette décomposition donnée dans les fig. 6.1. et 6.2.

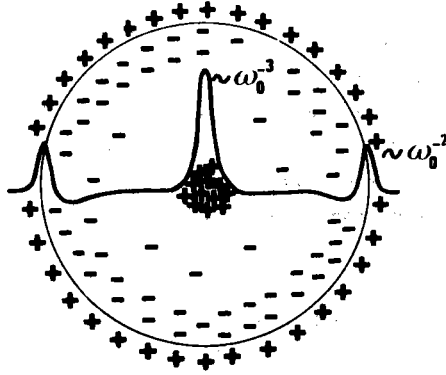


Fig. 6.1. : Représentation schématique de la décomposition de la partie paire d'une orientation idéale, centrée en l'origine, ou texture cube sur face; ω_0 ($= 1/5$ rd dans la figure) fixe la largeur à mi-hauteur de la distribution gaussienne. La charge positive n'est restituée que pour moitié en l'origine ($1/2 \delta_1$), flanquée d'une charge positive fantôme distribuée sur la surface- Π .

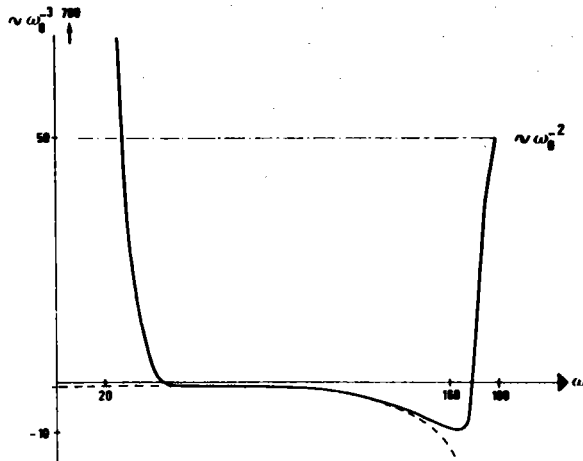


Fig. 6.2. : Représentation schématique de la section radiale de la figure 1, en la variable $\omega = |g|$, angle de la rotation g . La courbe en pointillé représente la distribution volumique $\delta_\Omega(|g|)$, dans le cas limite d'une distribution de DIRAC ($\omega_0 \rightarrow 0$).

La fig. 6.1. donne une représentation de l'espace G des orientations, dans laquelle la rotation $e^{\omega \vec{\sigma}}$ est représentée par le vecteur $\omega \vec{\sigma}$ appartenant à la boule fermée de rayon π . Sur cette frontière, sphère de rayon π , il faut identifier tout couple de points diamétralement opposés. Dans cette représentation qui respecte la structure topologique de G , les répartitions des diverses composantes $\delta(g)$, $\delta_{\pi}(g)$ et $\delta_{\Omega}(g)$ apparaissent de façon nettement plus compréhensible que dans le traditionnel cube paramétré par les angles d'EULER $\{\varphi_1, \phi, \varphi_2\}$. Ainsi, la surface- π , support de la distribution positive δ_{π} , est représentée fig.6.1 par la sphère de rayon π alors qu'elle se présente sous la forme compliquée d'une double-selle en les paramètres d'EULER /30/.

Bien qu'il ne soit pas possible, en toute rigueur, de définir la restriction à une droite d'une distribution en volume, la figure 6.2., tracée en la variable $\omega = |g|$, peut être schématiquement considérée comme section radiale de la figure 6.1. Cette figure montre que la distribution réelle, qui n'est restituée que pour moitié en l'origine, est flanquée d'une distribution fantôme dont la masse positive se concentre essentiellement au voisinage de $\omega = \pi$. Par ailleurs, la distribution fantôme $\delta_{\Omega}(\omega)$, fonction différentiable en dehors du voisinage de π , présente une discontinuité pour $\omega \longrightarrow \pi$. Dans le voisinage de $\omega = \pi$, δ_{Ω} (qui ne peut plus être représentée par une fonction différentiable) et δ_{π} se livrent un combat dont l'issue dépend, en toute généralité, de la régularisation choisie pour les fonctions généralisées δ_{Ω} et δ_{π} . Toutefois, avec les régularisations classiques par les fonctions gaussiennes, la courbe δ_{Ω} , après avoir longtemps suivi les valeurs négatives de l'équation idéale (6.33.) - courbe tracée en pointillés dans la fig. 6.2. -, remonte brutalement au voisinage de π pour atteindre un maximum positif. Ainsi, pour les fonctions gaussiennes étroites (faible largeur à mi-hauteur), la distribution δ_{Ω} est prédominante, au voisinage de π , par rapport à la distribution δ_{π} /35,36/. Il en résulte que la courbe fig. 6.2., somme des deux fantômes, présente un minimum négatif assez plat, immédiatement suivi d'une remontée brutale jusqu'à un maximum atteint en π .

6.6. Expression intégrale de $\bar{f}(g)$ et de f_G dans le cas de cristaux

non-centrosymétriques

Les résultats obtenus jusqu'à présent concernent le calcul de l'expression intégrale de la fonction déterminable $\bar{f}(g)$ dans le cas de cristaux centrosymétriques, correspondant à la première colonne de la table 5.1. L'extension de ces résultats au cas des cristaux non-centrosymétriques, correspondant aux deux colonnes de droite de la même table, est obtenue en complétant l'expression (6.1.) de $f_G(g)$:

$$f_G(g) = \frac{1}{2} \bar{1} f(g) \quad (6.35.)$$

par l'opérateur de translation $T(\bar{g}_b)$. On obtient ainsi l'extension de la formule (6.19.)

$$\bar{f}(g) = \frac{1}{2} f(g) + \bar{g}_b f_{\Pi}(g) + \bar{g}_b f_{\Omega}(g) \quad (6.36.)$$

Les fonctions translatées par \bar{g}_b s'écrivent, dans la convention du repère fixe :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{g}_b f_{\Pi}(g) = f_{\Pi}(g \cdot \bar{g}_b) \\ \bar{g}_b f_{\Omega}(g) = f_{\Omega}(g \cdot \bar{g}_b) \end{array} \right. \quad (6.37.)$$

L'ensemble des propriétés établies au chapitre 6, pour le fantôme $f_G(g)$ reste valable, à condition de considérer la translation \bar{g}_b :

$$\bar{g}_b f_G(g) = \bar{g}_b f_{\Pi}(g) + \bar{g}_b f_{\Omega}(g) \quad (6.38.)$$

Cette translation peut s'interpréter, simplement, comme un changement du repère K_b lié au cristal; dans les développements en série d'harmoniques sphériques généralisés, elle est réalisée au moyen de la formule d'addition, éq. (I.22.).

7. DESCRIPTION DES SYMETRIES ADDITIONNELLES, INTRODUITES PAR LE PROCESSUS DE LA DIFFRACTION

Ce chapitre étudie les symétries additionnelles qui sont introduites par le processus de la diffraction, lors de la mesure des figures de pôles. Cette étude n'a pas l'ambition d'analyser les principes de la théorie de la diffraction des rayons X ou des neutrons. Elle a simplement pour but de préciser les limitations supplémentaires de la fonction déterminable $\tilde{f}(g)$, par effet de la loi de FRIEDEL, en diffraction normale. Par ailleurs, la possibilité de lever cette indétermination additionnelle, en violant la loi de FRIEDEL (en diffraction anormale), est examinée.

Au chapitre 5, nous avons vu que la fonction de densité axiale déterminable $\tilde{A}(\vec{h}, \vec{y})$ est la superposition des statistiques droite et gauche (éq. 5.4.) :

$$\tilde{A}(\vec{h}, \vec{y}) = M^R A^R(\vec{h}, \vec{y}) + M^L A^L(\vec{h}, \vec{y}) \quad (7.1.)$$

A ce stade de l'analyse des symétries, on suppose que l'éq. (7.1.) distingue les contributions respectives des directions cristallographiques $+\vec{h}$ et $-\vec{h}$. En d'autres termes, cela revient à supposer la fonction $\tilde{A}(\vec{h}, \vec{y})$ non-centrosymétrique en la variable \vec{h} :

$$\tilde{A}(-\vec{h}, \vec{y}) \neq \tilde{A}(\vec{h}, \vec{y}) \quad (7.2.)$$

En fait, l'expression éq. (5.5.) montre que cette propriété de non-centrosymétrie se transporte immédiatement en la variable \vec{y} :

$$\tilde{A}(\vec{h}, -\vec{y}) \neq \tilde{A}(\vec{h}, \vec{y}) \quad (7.3.)$$

puisque si l'on change les deux vecteurs \vec{h} et \vec{y} en leurs opposés, l'expression (5.5.) est invariante. On supposait donc implicitement - au chapitre 5 - que même si les diffractions dues aux normales $+\vec{h}$ et $-\vec{h}$ avaient été initialement superposées dans le compteur, elles étaient ultérieurement séparées par le calcul. Nous allons examiner plus attentivement le problème de cette superposition.

Les expériences de diffraction polycristalline sont essentiellement effectuées par la goniométrie de texture, due à SCHULZ. La fonction de densité axiale grise $\tilde{A}(\vec{h}, \vec{y})$ n'est pas mesurable pour le continuum des vecteurs \vec{h} , mais uniquement pour des valeurs discrètes de \vec{h} sélectionnées, en vertu de la loi de BRAGG, d'après leur distance interréticulaire $d_{\vec{h}}$:

$$2 d_{\vec{h}} \sin \theta_{\vec{h}} = n\lambda \quad (7.4.)$$

Ainsi, les figures de pôles accessibles à la mesure :

$$\tilde{P}_{\vec{h}}(\vec{y}) = \tilde{A}(\vec{h}, \vec{y}) \quad (7.5.)$$

correspondent à des valeurs discrètes particulières de \vec{h} (pics ou raies de diffraction). Comme la loi de BRAGG éq. (7.4.) sélectionne uniquement une distance interréticulaire $d_{\vec{h}}$, il est clair que le compteur totalise la diffraction due aux plans cristallographiques $+\vec{h}$ et celle due aux plans cristallographiques $-\vec{h}$. Dans cette superposition, les contributions des plans $+\vec{h}$ et $-\vec{h}$ entrent avec des intensités proportionnelles à leurs facteurs de structure $|F_{+\vec{h}}|$ et $|F_{-\vec{h}}|$ respectifs. En fait, il est préférable d'introduire les facteurs de structure $\phi_{\vec{h}}$, définis à partir des précédents par la condition de norme :

$$\phi_{+\vec{h}} = \frac{|F_{+\vec{h}}|^2}{|F_{+\vec{h}}|^2 + |F_{-\vec{h}}|^2} \quad (7.6.)$$

et une relation similaire pour $\phi_{-\vec{h}}$.

Ainsi, l'expression de l'intensité totalisée dans le compteur peut s'écrire :

$$\tilde{A} = \phi_{+\vec{h}} \tilde{A}(\vec{h}, \vec{y}) + \phi_{-\vec{h}} \tilde{A}(-\vec{h}, \vec{y}) \quad (7.7.)$$

En raison de l'opération - rappelée éq. (5.11.) - de l'inversion centrale \bar{i} sur les harmoniques sphériques simples :

$$k_1^{*m}(-\vec{h}) = (-1)^l k_1^{*m}(\vec{h}) \quad (7.8.)$$

la fonction superposée \bar{A} peut s'écrire, compte tenu de l'éq. (5.5.) :

$$\bar{A}(\vec{h}, \vec{y}) = \sum_{lmn} \frac{4\pi}{2l+1} (\phi_{+\vec{h}} + (-1)^l \phi_{-\vec{h}}) \bar{C}_1^{mn} k_1^{*m}(\vec{h}) k_1^n(\vec{y}) \quad (7.9.)$$

7.1. Mesures effectuées en diffraction normale

Il est bien connu que, dans les conditions de la diffraction normale, le processus de diffraction est centrosymétrique. Cette centrosymétrie se traduit par la loi de FRIEDEL :

$$|F_{+\vec{h}}|^2 = |F_{-\vec{h}}|^2 \quad (7.10.)$$

En raison de cette relation de symétrie, les termes impairs du développement en série éq. (7.9.) disparaissent. Si l'on reprend la table, analogue à la table 5.1., des coefficients de texture \bar{C}_1^{mn} de la fonction de texture $\bar{f}(g)$ déterminable en diffraction polycristalline normale, on obtient la table 7.1.

| $\bar{g}_b \bar{l}$ | I | $\bar{2}$ (miroir) | $\bar{4}$ |
|---------------------|----------|------------------------|------------------------------------|
| $\bar{f}(g)$ | l pair | l+m pair et l pair | $l+\frac{m}{2}$ pair et l pair |
| $\bar{\bar{f}}(g)$ | l impair | l+m impair ou l impair | $l+\frac{m}{2}$ impair ou l impair |

Table 7.1. : Définition des règles de sélection sur les coefficients des parties déterminables et non déterminables, par principe, dans les conditions de la diffraction normale.

Dans le cas de cristaux centrosymétriques, la loi de FRIEDEL ne rajoute aucune restriction additionnelle. Ceci est compréhensible, puisque le centre

de symétrie $\bar{1}$ implique déjà la centrosymétrie de la diffraction, sans qu'il soit nécessaire de faire appel à la loi de FRIEDEL. En revanche, dans les deux dernières colonnes du tableau, la loi de FRIEDEL enrichit artificiellement la symétrie cristalline en une symétrie *apparente*, qui est celle de la classe de LAUE correspondante. Il en résulte une perte d'information supplémentaire.

7.2. Mesures effectuées en diffraction anormale

Pour des cristaux non centrosymétriques, la loi de FRIEDEL peut être violée par le recours à la diffraction anormale /37,38/. En effet, lorsque la longueur d'onde utilisée se situe au voisinage d'une discontinuité d'absorption d'un atome - qui doit nécessairement être fortement absorbant - la diffraction peut s'écarter d'autant plus de la centrosymétrie, que le rapport de BIJVOET r est plus élevé:

$$r = 2 \frac{\phi_{\vec{h}} - \phi_{-\vec{h}}}{\phi_{\vec{h}} + \phi_{-\vec{h}}} = 2 (\phi_{\vec{h}} - \phi_{-\vec{h}}) \quad (7.11.)$$

Ainsi, si les mesures de figures de pôles sont effectuées dans les conditions de la diffraction anormale, la partie impaire de l'éq. (7.9.) est accessible à la mesure /39/:

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{C}_{21}^{mn} = \bar{C}_{21}^{mn} \\ \bar{C}_{21+1}^{mn} = \frac{r}{2} \bar{C}_{21+1}^{mn} \end{array} \right. \quad (7.12.)$$

La condition de symétrie additionnelle 1 pair de la table 7.1. ne conduit donc pas à une indéterminabilité de principe. Le recours à la diffraction anormale devrait permettre, en général, de ramener la définition de la partie non déterminable $\bar{f}(g)$ à celle qui est résumée dans la table 5.1.

En effet, les valeurs du rapport r de BIJVOET ont été rapportées dans la littérature comme variant de quelques pour cent jusqu'à 0.9 /40/, et pouvant même être plus importantes pour un choix approprié de la longueur d'onde, au voisinage d'une discontinuité d'absorption (cf. Tables Internationales de la Cristallographie /41/). La diffraction anormale a été également observée en diffraction de neutrons; dans le cas du tartrate pentahydraté de cadmium, une valeur moyenne de 0,177 a été trouvée pour les rapports de BIJVOET, dont la valeur maximale était de 0.56 /42/. Ces valeurs sont présumées suffisamment élevées pour permettre d'appliquer la méthode qui est décrite dans ce chapitre.

8. APPROXIMATION DE LA PARTIE NON-DETERMINABLE $\tilde{f}(g)$

8.1. Principe de la méthode du domaine nul

Il a été montré dans les chapitres précédents que, dans le cas de matériaux non énantiomorphes, la composante $f^R(g)$ de la fonction de texture peut être choisie comme seule composante indépendante, et l'indice R peut donc être omis. Cette fonction de texture $f(g)$ peut être décomposée de façon canonique, ainsi qu'il a été vu, en la somme :

$$f(g) = \tilde{f}(g) + \tilde{\tilde{f}}(g) \quad (8.1.)$$

Au chapitre 5, nous avons vu que le processus de la diffraction polycristalline ne donne pas directement accès aux fonctions $\tilde{f}(g)$ ou $\tilde{\tilde{f}}(g)$ de l'éq. (8.1.), mais uniquement à la fonction de densité axiale grise :

$$\tilde{A}(\vec{h}, \vec{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{y}=\vec{g}\vec{h}} f(g) dg + \frac{1}{2\pi} \int_{\vec{y}=-\vec{g}\vec{h}} g_b f(g) dg \quad (8.2.)$$

Le passage de la fonction de texture $f(g)$ aux fonctions de distributions axiales $\tilde{A}(\vec{h}, \vec{y})$ peut être décrit, au point de vue mathématique, comme une opération de projection. Il n'est pas nécessaire, pour les besoins de cet exposé, de donner la définition mathématique précise de cet opérateur de projection, que nous noterons de façon symbolique $P_{\vec{h}}$. En revanche, il convient de définir l'action de $P_{\vec{h}}$ sur les deux composantes de l'éq. (8.1.)

$$P_{\vec{h}}(\tilde{f}(g)) = \tilde{A}(\vec{h}, \vec{y}) = \tilde{P}_{\vec{h}}(\vec{y}) \quad (8.3.)$$

et

$$P_{\vec{h}}(\tilde{\tilde{f}}(g)) = 0 \quad (8.4.)$$

Les chapitres 4 et 5 montrent en effet que l'inversion des fonctions de densité axiales - soit encore, celle des figures de pôles $\tilde{P}_{\vec{h}}(\vec{y})$ - conduit

uniquement à la partie déterminable de la fonction de texture $\tilde{f}(g)$. Pour cette même raison, la partie $\tilde{f}(g)$, qui disparaît totalement des figures de pôles (éq.(8.4.)), a été dénommée "la partie non-déterminable par principe".

En fait, cette partie $\tilde{f}(g)$ ne peut pas varier de façon totalement arbitraire; elle est restreinte par la condition de positivité de la fonction de texture éq. (8.1.) :

$$f(g) = \tilde{f}(g) + \tilde{\tilde{f}}(g) \geq 0 \quad (8.5.)$$

La considération de cette information additionnelle fournit, de façon indirecte, une information sur $\tilde{\tilde{f}}(g)$. En effet, si l'on désigne par Z^0 le domaine nul de l'espace des orientations G - i.e., l'ensemble des rotations g en lesquelles $f(g)$ prend la valeur zéro - l'équation (8.5.) devient une égalité qui détermine, sur le domaine Z^0 , $\tilde{\tilde{f}}(g)$ comme l'opposé de la partie déterminable :

$$\tilde{\tilde{f}}(g) = -\tilde{f}(g) \quad \forall g \in Z^0 \quad (8.6.)$$

Le domaine nul Z^0 est obtenu à partir des domaines nuls $Z_{\vec{h}}^0$ correspondants dans les figures de pôles. Ainsi, l'éq. (8.2.) montre que si une figure de pôles $\tilde{A}(\vec{h}, y_0)$ s'annule en un point y_0 , la fonction positive $f(g)$ est nécessairement nulle sur tout le trajet de l'intégrale curviligne, défini par la relation :

$$\vec{y}_0 = g\vec{h} \quad (8.7.)$$

De même, la fonction positive $g_b f(g)$ s'annule sur le trajet de l'intégrale du second terme, défini par l'équation

$$\vec{y}_0 = -g\vec{h} \quad (8.8.)$$

L'ensemble des orientations g définies par les éq. (8.7.) et (8.8.) constitue le domaine nul de l'espace des orientations, qui est déterminé à partir du domaine nul $Z_{\vec{h}}^0$ de la figure de pôles $P_{\vec{h}}(\vec{y})$. Le domaine nul Z^0

que l'on recherche contient la réunion des domaines nuls déterminés à partir des différentes figures de pôles $P_h(\vec{y})$ disponibles.

La partie non déterminable, par principe, est ainsi connue exactement dans le domaine nul Z^0 , d'après l'éq. (8.6.). Lorsque ce domaine nul est suffisamment vaste, une approximation de $\tilde{f}(g)$ peut être étendue à tout l'espace des orientations G , à partir de la condition de minimisation de l'écart quadratique sur le domaine connu Z^0 .

La résolution pratique de cette condition de minimum quadratique est particulièrement commode si l'on considère les développements en séries d'harmoniques sphériques généralisés des fonctions $\tilde{f}(g)$ et $\tilde{f}(g) / 43a, b/ :$

$$\int_{Z^0} (-\tilde{f}(g) - \tilde{f}(C_1^{mn}, g))^2 dg = \min \quad (8.9.)$$

Les coefficients de texture \tilde{C}_1^{mn} fournis par la condition de minimum éq. (8.9.) sont définis par la table 5.1. lorsque les figures de pôles sont déterminées en diffraction anormale, et par la table 7.1. lorsqu'elles sont déterminées dans les conditions de la diffraction normale.

8.2. Méthode de résolution globale et méthode de résolution itérative

La fonction $\tilde{f}(g)$ de l'éq. (8.9.) peut être développée en une série d'harmoniques sphériques généralisés :

$$\tilde{f}(g) = \sum_{l,mn}^{\tilde{l}_{\max}} \tilde{C}_1^{mn} T_1^{mn}(\alpha) \quad (8.10.)$$

Dans cette expression, le caractère $\tilde{}$, symbole de la partie non déterminable, indique que les indices l et m vérifient les règles de sélection définies dans la table 5.1. ou dans la table 7.1., selon les conditions de mesure. Le rang maximal \tilde{l}_{\max} peut être différent du rang maximal \tilde{l}_{\max} de la série correspondante pour la partie $\tilde{f}(g)$ déterminable par les méthodes classiques de l'analyse des textures.

En posant :

$$\int_{Z^0} \tilde{f}(g) T_1^{mn}(g) dg = -\tilde{a}_1^{mn} \quad (8.11.)$$

$$\int_{Z^0} T_1^{mn}(g) T_1^{m'n'}(g) dg = \tilde{\alpha}_{11'}^{mm' nn'} \quad (8.12.)$$

Les coefficients \tilde{C}_1^{mn} peuvent être obtenus par la résolution du système d'équations linéaires :

$$\sum_{1mn}^{\tilde{l}_{\max}} \tilde{C}_1^{mn} \tilde{\alpha}_{11'}^{mm' nn'} = \tilde{a}_{11'}^{m'n'} \quad (8.13.)$$

La somme porte, dans les équations linéaires (8.13.), sur toutes les valeurs de l, m et n compatibles avec les règles de sélection qui caractérisent les coefficients \tilde{C}_1^{mn} (Table 5.1. ou 7.1.)

Dans la méthode de résolution globale, le système d'équations linéaires est résolu tel qu'il se présente éq. (8.13.); la solution fournit tous les coefficients \tilde{C}_1^{mn} , jusqu'au rang maximal \tilde{l}_{\max} .

En fait, il est naturel d'ordonner les coefficients \tilde{C}_1^{mn} d'après les rangs l croissants. De plus, la série qui représente $\tilde{f}(g)$, éq. (8.10.), n'est significative qu'à la condition que les coefficients \tilde{C}_1^{mn} se situent, en fonction des rangs l croissants, sur une courbe de convergence régulière. Ainsi, le choix de la valeur \tilde{l}_{\max} optimale est critique. Ce choix peut être facilité si la condition de minimisation éq. (8.9.) est réalisée par itérations successives sur les rangs l croissants :

$$\int_{Z_0} (-\tilde{f}(g) - \sum_{\lambda=\tilde{l}_0}^{\tilde{l}-1} \Delta f_\lambda - \Delta f_\lambda)^2 = \min \quad (8.14.)$$

Dans cette expression, Δf_λ désigne la contribution du rang λ à la fonction $\tilde{f}(g)$.

En vue de la détermination des coefficients \tilde{C}_1^{mn} de rang l donné, au moyen de la condition de minimum éq. (8.9.), la partie $\tilde{f}(g)$ connue par les méthodes classiques est complétée par les contributions Δf_λ déjà déterminées par les itérations précédentes, jusqu'au rang l-1. Le premier rang qui contribue à la partie non déterminable par principe est noté \tilde{l}_0 . A titre d'exemple, dans le cas de cristallites appartenant à l'holoédrie cubique, la partie $\tilde{f}(g)$ coïncide avec la partie impaire, et le premier rang impair à posséder des fonctions harmoniques adaptées à la symétrie cubique est $\tilde{l}_0 = 9$. Dans cette méthode de résolution itérative, la fonction déterminable $\tilde{f}(g)$ est progressivement résorbée par celle à déterminer $f(g)$, ainsi que l'indique la condition de minimisation éq. (8.14.). Les coefficients \tilde{C}_1^{mn} sont obtenus, pour un rang l donné, comme solutions du système d'équations linéaires /21a/

$$\sum_{mn} \tilde{C}_1^{mn} \alpha_{11}^{mm'nn'} = \tilde{a}_1^{m'n'} - \sum_{\lambda=\tilde{l}_0}^{l-1} \sum_{m''n''} \tilde{C}_\lambda^{m''n''} \alpha_{1\lambda}^{m'm''n'n''} \quad (8.15.)$$

Les constantes $\tilde{a}_1^{m'n'}$ et $\alpha_{1\lambda}^{m'm''n'n''}$ qui entrent dans l'écriture de ce système d'équations linéaires conservent la même signification que dans la méthode de résolution globale. Elles sont définies par les éq. (8.11.) et (8.12.).

Les coefficients $\tilde{C}_\lambda^{m''n''}$ qui apparaissent dans l'expression du second membre du système éq. (8.15.) sont déjà déterminés par les itérations précédentes, pour les rangs inférieurs au rang l, rang actuel du calcul.

8.3. Exemples d'application de la méthode du domaine nul

La méthode du domaine nul a été appliquée à deux exemples qui correspondent tous deux à des cristallites appartenant à l'holoédrie cubique. La symétrie cristalline cubique intervient en effet très fréquemment dans les études pratiques de texture, en raison de l'intérêt industriel qu'offrent de nombreux matériaux cubiques, tels le fer, le cuivre, l'aluminium, le laiton etc... Rappelons que dans le cas de cristaux centrosymétriques, les parties déterminable $\tilde{f}(g)$ et non déterminable $f(g)$ coïncident respectivement avec les parties paires et impaires de la fonction de texture $f(g)$. Par ailleurs, le premier rang auquel apparaissent des fonctions de symétrie cubique impaires est $\tilde{l}_0 = 9$. La première étude porte sur un modèle théorique, la seconde sur un échantillon de cuivre laminé.

8.3.1. Fonction modèle du type fonction gaussienne

La validité de la méthode du domaine nul a été démontrée sur une fonction de texture théorique. Une fonction de distribution gaussienne a été centrée sur l'orientation :

$$g_0 = \{110\langle 112 \rangle \quad (8.16.)$$

Cette même orientation, typique de la texture de laminage du laiton, a été choisie par S. MATTHIES et J. POSPIECH /34/ dans un travail récent qui proposait de montrer l'effet de la partie $\bar{f}(g)$ de la fonction de texture par le biais d'illustrations numériques. La dispersion autour de l'orientation g_0 de l'éq. (8.16.) a été supposée de forme gaussienne, ne dépendant que de la distance ω de g_0 . Si g désigne une orientation dans le voisinage de g_0 , alors ω :

$$\omega = |gg_0^{-1}| \quad (8.17.)$$

désigne la distance de l'orientation g à g_0 . La fonction de texture a été supposée de la forme

$$f(g) = S_0 e^{-\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)^2} \quad (8.18.)$$

avec $\omega_0 = 7^\circ$. Ce choix correspond à une largeur totale à mi-hauteur égale à :

$$b = \sqrt{4 \ln 2} \omega_0 = 11.7^\circ \quad (8.19.)$$

pour la fonction gaussienne. Pour cette fonction théorique éq. (8.18.), les coefficients pairs \bar{C}_1^{mn} et impairs \bar{C}_1^{mn} ont pu être calculés /1/. A partir des coefficients \bar{C}_1^{mn} pairs, quatre figures de pôles expérimentales correspondant à la diffraction des plans (111), (200), (220) et (311) ont été calculées, fig. 8.1. Les domaines nuls Z_h^0 de ces figures de pôles théoriques, recalculées à partir des coefficients \bar{C}_1^{mh} pairs, ont été définis par l'inégalité :

$$P_h^{\rightarrow}(\vec{y}_0) \leq 0.05 \quad (8.20.)$$

A partir des domaines nuls Z_h^0 des figures de pôles, le domaine nul Z^0 de l'espace des orientations G a été déterminé; il est représenté dans la figure 8.2.

Ensuite, la méthode du domaine nul a pu être appliquée au calcul des coefficients \tilde{C}_1^{mn} impairs. Ceux qui ont été obtenus par la méthode de résolution globale présentent un accord remarquable avec les coefficients "théoriques" prévus par le calcul direct; les valeurs moyennes des différences relatives $\frac{\Delta C_1}{C_1}$ sont inférieures à 2% (fig. 8.3.). La méthode de résolution itérative conduit à des résultats similaires à ceux de la méthode de résolution globale (fig. 8.4.). Cependant, les coefficients impairs ainsi obtenus sont systématiquement inférieurs à ceux obtenus par la méthode de résolution globale (fig. 8.4.); dorénavant, seule cette dernière méthode de résolution sera considérée. La figure 8.3. montre que dans le cas particulier d'une fonction de texture gaussienne, les valeurs moyennes des coefficients impairs sont aussi élevées que les valeurs moyennes des coefficients pairs; en effet, les courbes respectives de convergence des coefficients pairs et impairs se croisent. La figure 8.5.a montre les sections, à φ_2 constant, de la fonction de texture paire $f(g)$. La figure 8.5.b présente les sections, à φ_2 constant, de la fonction de texture vraie $\tilde{f}(g) + f(g)$, la partie paire ayant été complétée par la méthode du domaine nul (variante de la résolution globale).

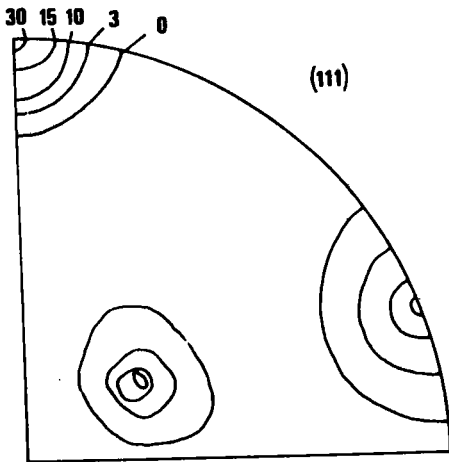


Fig. 8.1.a

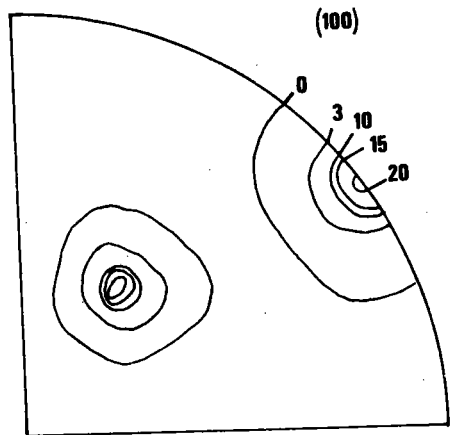


Fig. 8.1.b

Figures de pôles calculées pour une fonction de texture théorique correspondant à une distribution gaussienne centrée sur l'orientation $g_0 = \{110\}\langle 112 \rangle$.

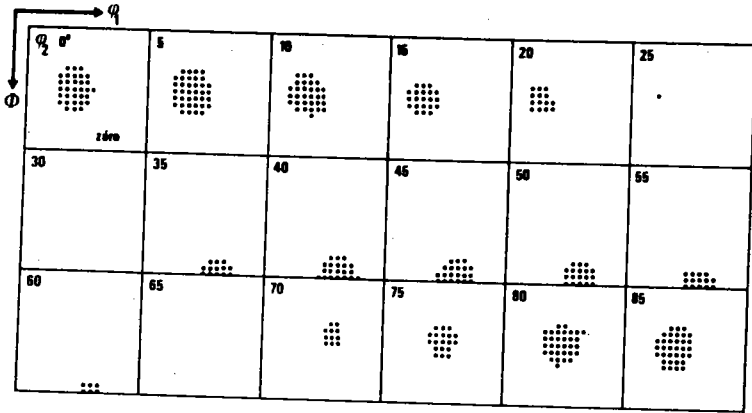


Fig. 8.2. : Domaine nul Z^0 dans l'espace des orientations G , déterminé à partir des domaines nuls Z_h^0 des figures de pôles correspondant à la gaussienne Fig. 8.1. (Les points marquent les orientations présentes. Le domaine nul est, au contraire, vide de "points d'orientation").

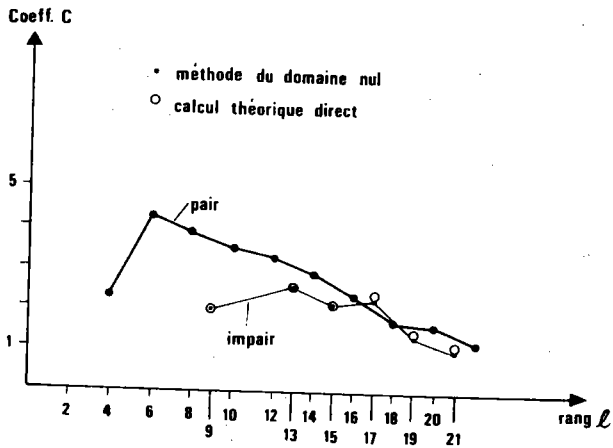


Fig. 8.3. : Fonction de texture théorique gaussienne : valeurs moyennes des coefficients C pairs et impairs. Coefficients impairs obtenus par :
 • la méthode du domaine nul (résolution globale)
 ○ le calcul théorique direct

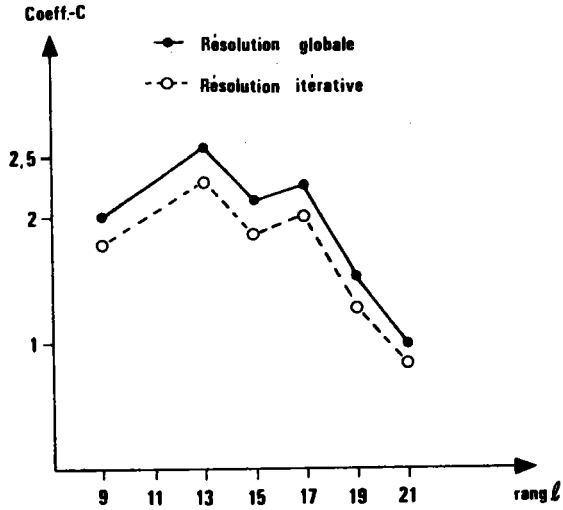


Fig. 8.4. : Fonction de texture théorique gaussienne : valeurs moyennes des coefficients impairs obtenues par les deux approximations de la méthode des domaines nuls (méthode globale et méthode itérative).

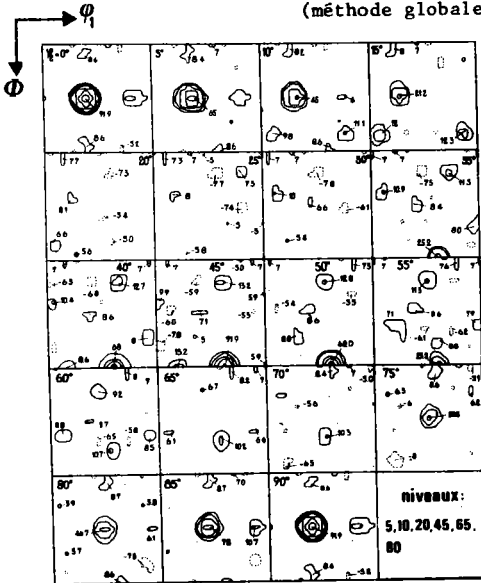


Fig. 8.5.a

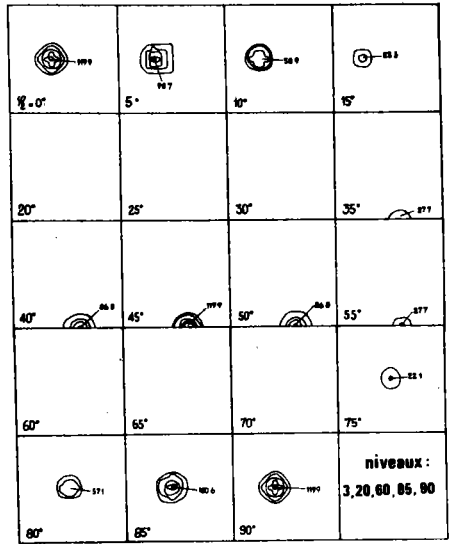


Fig. 8.5.b

La fonction de distribution des orientations déterminée à partir des figures de pôles de la distribution gaussienne.

a) la partie paire $\tilde{f}(g)$

b) la fonction vraie $f(g) + \tilde{f}(g)$

8.3.2. Fonction de texture d'un échantillon de cuivre laminé

La même méthode du domaine nul a été appliquée à la texture d'un échantillon de cuivre laminé à froid, au taux de réduction de 95%. Les quatre figures de pôles (111), (200), (220) et (311) ont été mesurées, en diffraction neutronique, au pas angulaire de 2.5° en déclinaison et 2.4° en rotation azimutale. Ces mesures ont été obligeamment mises à notre disposition par le Dr P.I. WELCH, de l'Université de Clausthal-Zellerfeld /44/. Le domaine nul Z_h^0 a été défini par la relation :

$$N \leq 2 \sqrt{N_h^b} \quad (8.21.)$$

Dans cette équation, N désigne le nombre d'impulsions déjà corrigé du nombre d'impulsions N_h^b correspondant au bruit de fond de la figure de pôles $\tilde{P}_h(\vec{y})$. A titre d'illustration, les figures de pôles expérimentales (111) et (100) sont présentées dans les figures 8.6.a et b. Pour chacune de ces figures de pôles, le domaine nul correspondant Z_h^0 a été indiqué. A partir des domaines nuls Z_h^0 des quatre figures de pôles disponibles, le domaine nul Z^0 de l'espace des orientations a été déterminé. A cette fin, toutes les orientations g ont été testées au pas angulaire de 5° x 5° x 5° pour déterminer si un pôle h tombait dans le domaine nul Z_h^0 de la figure de pôles correspondante. A titre d'exemple, la section $\varphi_2 = 15^\circ$ du domaine nul Z^0 ainsi obtenu est présentée à la figure 8.7. Le domaine nul Z^0 est très vaste; il représente les 2/3 de tous les points d'orientation dans l'espace des orientations tout entier (ou espace d'EULER). La partie paire $\tilde{f}(g)$ de la fonction de texture a été calculée au moyen de l'analyse tridimensionnelle classique jusqu'au rang $\tilde{l}_{\max} = 34$. Les coefficients impairs \tilde{C}_1^{mn} ont été ensuite calculés au moyen de la méthode du domaine nul, dans l'approximation de la méthode de résolution globale, qui avait fourni les meilleurs résultats sur le modèle théorique. Les coefficients \tilde{C}_1^{mn} impairs ont été calculés jusqu'au rang maximal $\tilde{l}_{\max} = 21$. Les valeurs moyennes des coefficients de texture pairs et impairs sont données dans la figure 8.8., qui présente également les valeurs moyennes des erreurs

sur les coefficients pairs.

Note : Les figures de pôles calculées centrosymétriques fig. 8.1. peuvent être obtenues sur la sphère des pôles complète, avec la précision de calcul de l'ordinateur. En revanche, les figures de pôles mesurées en diffraction de rayons X ne peuvent, en général, être mesurées que de façon incomplète; il est donc nécessaire de recourir à une technique indirecte pour déterminer leur facteur de norme /45,46/. De toute façon, les figures de pôles expérimentales, même mesurées complètement grâce à la diffraction de neutrons (fig. 8.6.), sont entachées d'erreurs multiples /47-51/. Notamment, le manque de compatibilité entre les figures de pôles expérimentales peut être mis à profit pour calculer les erreurs absolues ΔC_1 des coefficients de texture /1/ présentés fig. 8.8. pour l'échantillon de cuivre étudié dans ce travail.

Les coefficients impairs se révèlent légèrement plus petits que les coefficients pairs, bien qu'ils soient du même ordre de grandeur. Ce résultat ne pouvait pas être prévu a priori, et il constitue donc un des résultats des calculs numériques présentés /52a, b/. En effet, contrairement au cas de la fonction modèle gaussienne, la courbe de convergence des coefficients impairs se situe toujours distinctement en-dessous de celle des coefficients pairs. Une bonne convergence des coefficients impairs, telle que celle présentée à la figure 8.8., doit être requise a priori pour que la contribution de la partie impaire à la fonction de texture totale soit significative. Par ailleurs, l'ordre de grandeur des coefficients impairs est nettement supérieur à l'ordre de grandeur des erreurs des coefficients pairs. Aussi, la partie impaire de la fonction de texture contribue-t-elle de façon significative aux caractéristiques de la fonction de texture totale. L'importance de la partie impaire de la fonction de texture est clairement confirmée par l'examen des sections, à φ_2 - constant, de la partie paire $\tilde{f}(g)$ (fig. 8.9.a) et de la fonction de texture vraie $\tilde{f}(g) + \tilde{f}(g)$ (fig. 8.9.b). Enfin, la fig. 8.10. indique de quelle manière la partie impaire $\tilde{f}(g)$ modifie la densité des orientations le long de la ligne de squelette de la texture de laminage du cuivre.

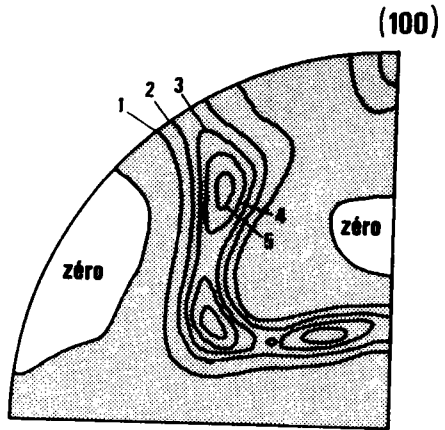
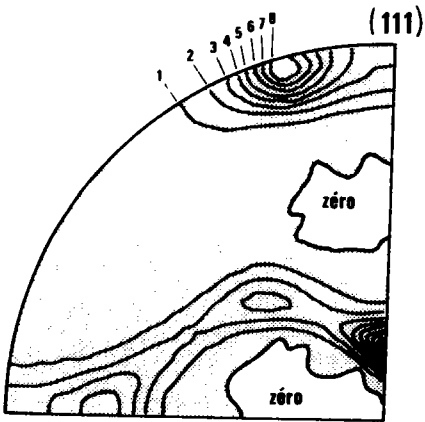


Fig. 8.6.a

Fig. 8.6.b

Figures de pôles mesurées par diffraction neutronique sur un échantillon de cuivre laminé à froid, à un taux de réduction de 95%. Le domaine nul déterminé selon l'éq. (8.21.) a été reporté dans les figures de pôles. (Figures de pôles obligeamment fournies par le Dr P.I. WELCH /44/).

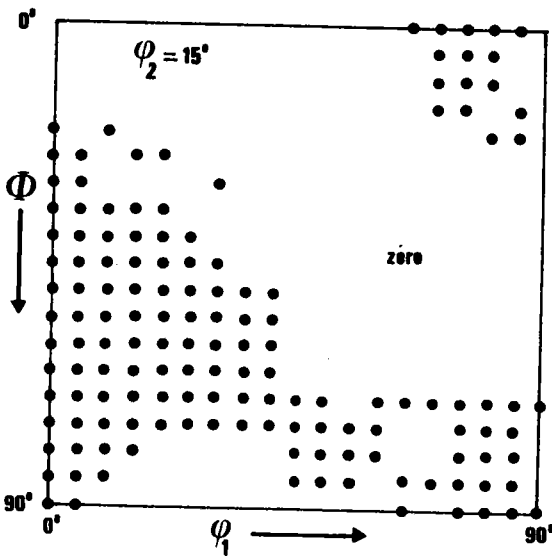


Fig. 8.7. : La section $\varphi_2 = 15^\circ$ du domaine nul Z^0 de l'espace des orientations, pour l'échantillon de cuivre laminé.

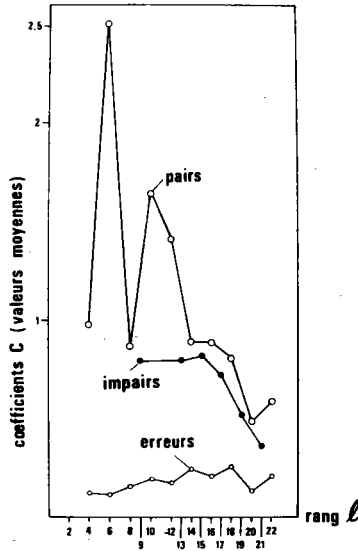


Fig. 8.8. : Valeurs moyennes des coefficients C_1^{mn} et des erreurs ΔC_1^{mn} en fonction du rang l, pour l'échantillon de cuivre laminé.

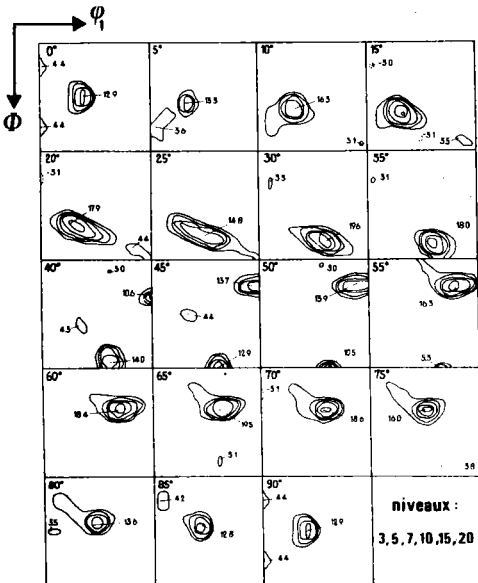


Fig. 8.9.a

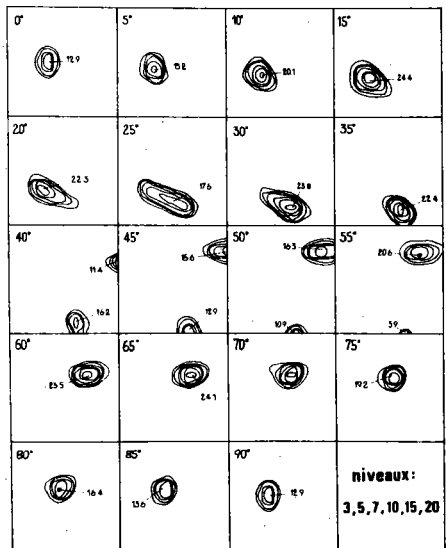


Fig. 8.9.b

La fonction de texture de l'échantillon de cuivre laminé à froid, au taux de 95°. Cette fonction de texture a été déterminée à partir de 4 figures de pôles expérimentales, dont celles représentées aux fig. 8.6.a et 8.6.b.

a) la partie paire $f(g)$

b) la fonction vraie $f(g) + \tilde{f}(g)$

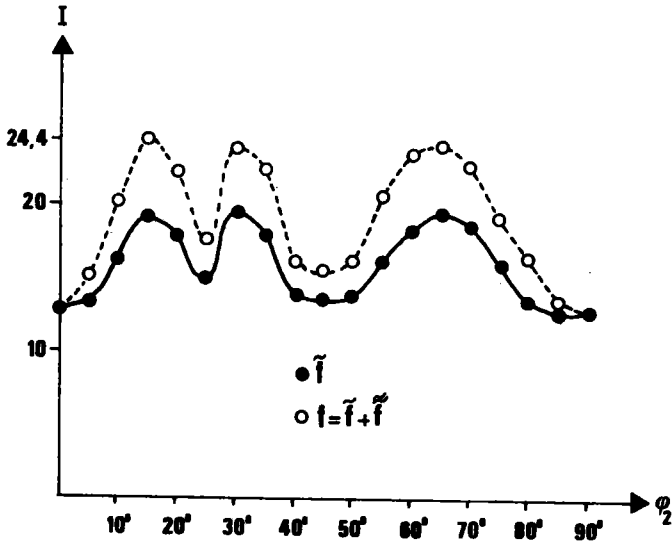


Fig. 8.10. : Densité des orientations le long de la ligne de squelette de la F.D.O. de l'échantillon de cuivre laminé.

9. EPILOGUE : CONSEQUENCES SUR LE CALCUL DE GRANDEURS PHYSIQUES MOYENNES

La fonction de texture s'introduit, ainsi qu'il a été vu au chapitre 2, de façon naturelle dans le calcul de grandeurs physiques moyennes /1,2/. Les grandeurs physiques sont représentées par des champs tensoriels $\phi(\vec{r})$, définis sur le volume V du polycristal. Les valeurs moyennes correspondantes sont définies par l'expression (cf. éq. (2.5.)) :

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{V} \int_V d\vec{r} \phi(\vec{r}) \quad (9.1.)$$

qui peut être décomposée en intégrant, en premier lieu, sur le volume V(0) des cristallites ayant une orientation 0 donnée :

$$\langle f | \phi \rangle = \frac{1}{V} \int_{O(3)} dO \int_{V(O)} d\vec{r} \phi(\vec{r}) = \int_{O(3)} dO f(O) \phi(O) \quad (9.2.)$$

Dans le cas le plus courant des matériaux non énantiomorphes, seule une des composantes de la fonction de texture, par exemple $f^R(g)$, peut être considérée comme indépendante. L'expression de la valeur moyenne peut se récrire, au moyen de cette composante f(g) (l'indice R peut être omis), comme une intégrale sur SO(3) :

$$\langle f | \phi \rangle = \frac{1}{V} \int_{SO(3)} dg \int_{V(g)} d\vec{r} \phi(\vec{r}) = \int_{SO(3)} dg f(g) \phi(g) \quad (9.3.)$$

L'expression éq. (9.3.) est exacte, à condition de définir correctement les grandeurs $\phi(g)$ qui représentent les valeurs moyennes du champ $\phi(\vec{r})$, sur les cristaux ayant une orientation g donnée. Le calcul de cette première moyenne fait appel à un modèle de comportement du polycristal, qui peut être plus ou moins compliqué selon qu'il prend en considération les corrélations entre cristallites, les effets de joints de grains etc. Dans de nombreux cas, il est suffisant de considérer que le champ $\phi(\vec{r})$ ne dépend en fait que du champ d'orientation, $g(\vec{r})$, et non des coordonnées d'espace \vec{r} elles-mêmes.

Dans ce modèle élémentaire, la grandeur moyenne $\langle f|\phi \rangle$ apparaît comme une simple somme des grandeurs $\phi(g)$, chacune étant pondérée par son poids statistique $f(g)$ au sein du polycristal.

De toute façon, quel que soit le modèle physique utilisé, la fonction de texture $f(g)$ se décompose, de façon canonique, en partie $\tilde{f}(g)$ déterminable et $\tilde{\tilde{f}}(g)$ "non-déterminable" par les méthodes classiques de l'analyse des textures :

$$f(g) = \tilde{f}(g) + \tilde{\tilde{f}}(g) \quad (9.4.)$$

En raison de l'orthogonalité des harmoniques sphériques généralisés, l'expression éq. (9.3.) subit la même décomposition :

$$\langle f|\phi \rangle = \langle \tilde{f}|\tilde{\phi} \rangle + \langle \tilde{\tilde{f}}|\tilde{\tilde{\phi}} \rangle \quad (9.5.)$$

avec

$$\langle \tilde{f}|\tilde{\phi} \rangle = \int_{SO(3)} dg \tilde{f}(g) \tilde{\phi}(g) \quad (9.6.)$$

$$\langle \tilde{\tilde{f}}|\tilde{\tilde{\phi}} \rangle = \int_{SO(3)} dg \tilde{\tilde{f}}(g) \tilde{\tilde{\phi}}(g)$$

Lorsque la fonction de texture est déterminée à partir d'expériences de diffraction polycristalline, i.e. de figures de pôles, au moyen de l'analyse tridimensionnelle classique (sans recours à la diffraction anormale ni à la méthode du domaine nul), la contribution, à la valeur moyenne, du terme :

$$\langle \tilde{\tilde{f}}|\tilde{\tilde{\phi}} \rangle = 0 \quad (9.7.)$$

est nulle, puisque la partie $\tilde{\tilde{f}}$ de la fonction de texture possède une projection nulle dans toutes les figures de pôles expérimentales. Mais en fait, l'élimination du terme $\tilde{\tilde{\phi}}(g)$ dans le calcul de la grandeur physique moyenne $\langle f|\phi \rangle$ est uniquement justifiée si la grandeur physique $\phi(g)$ possède la propriété de symétrie :

$$\tilde{\tilde{\phi}}(g) = 0 \quad (9.8.)$$

ce qui n'est pas nécessairement vérifié.

Une telle situation favorable se présente pour le calcul du module de YOUNG de métaux polycristallins courants, tels le fer, le cuivre, l'aluminium etc., qui sont tous centrosymétriques. Le module de YOUNG est une grandeur physique uniaxiale; il ne dépend pas de l'orientation g complète, mais uniquement de la direction cristalline \vec{h} :

$$E(g) = E(\vec{h}) \quad (9.9.)$$

Ainsi, l'intégrale éq. (9.3.) sur $SO(3)$ se sépare en le produit d'une intégrale sur le paramètre de rotation autour du vecteur \vec{h} , et d'une intégrale sur la sphère S_2 des vecteurs \vec{h} :

$$\langle f|E \rangle = \int_{S_2} E(\vec{h}) A(\vec{h}, \vec{y}) d\vec{y} \quad (9.10.)$$

Lorsque la valeur moyenne est calculée à partir de la fonction de distribution axiale mesurée dans l'expérience de diffraction polycristalline, la partie déterminable $\tilde{A}(\vec{h}, \vec{y})$ de la fonction axiale coïncide avec la partie paire (première colonne des tables 5.1. et 7.1., pour les cristaux centrosymétriques), et la valeur moyenne obtenue s'écrit :

$$\langle f|E \rangle = \langle \tilde{f}|\tilde{E} \rangle \quad (9.11.)$$

Dans le cas particulier du module de YOUNG, l'expression (9.11.) est exacte. En effet, le groupe de symétrie de toute grandeur physique contient, au minimum, le groupe de la symétrie cristalline en tant que sous-groupe; la symétrie de la grandeur $E(g)$ peut être éventuellement supérieure à la symétrie cristalline. Ainsi, le module de YOUNG, par exemple, est toujours centrosymétrique, même pour des cristaux non centrosymétriques /21 a/11 en résulte que :

$$\tilde{E}(h) \equiv 0 \quad (9.12.)$$

Il est donc nécessaire d'étudier de façon détaillée la décomposition selon l'éq. (9.5.), en fonction des différentes symétries cristallines, et pour des études aussi variées que les propriétés magnétiques /53,54/, élastiques /55,56/ et plastiques /57-64/. De même, les études de transformations de textures, que ce soit par déformation plastique /65-68/ ou par changement de phases /69-72/, devront examiner attentivement les implications de la décomposition éq. (9.5.), notamment lorsqu'il est fait appel à des modèles compliqués qui sont susceptibles d'établir des couplages entre des rangs l différents du développement en série d'harmoniques sphériques généralisés.

Bien entendu, cet épilogue n'a nullement l'ambition de définir les thèmes de recherche avec précision, mais uniquement de dégager les perspectives d'étude des propriétés physiques des polycristaux, telles qu'elles se dessinent au vu des résultats présentés dans ce travail.

10. CONCLUSION

Les résultats présentés dans ce travail tentent de répondre à trois objectifs essentiels :

- donner une présentation unifiée de la fonction de distribution des orientations (F.D.O.) et de ses propriétés de symétrie sur le groupe orthogonal complet, au lieu de restreindre la description au sous-groupe des rotations $SO(3)$;

- étudier l'implication de ces symétries, décrites sur le groupe orthogonal complet, sur les possibilités de détermination de la fonction de texture, en veillant à distinguer les indéterminations de principe, conséquences inéluctables des symétries cristallines, de celles qui résultent de la symétrie additionnelle de la diffraction (loi de FRIEDEL);

- augmenter la partie déterminable de la fonction de texture, par le recours à la diffraction anormale et par une méthode de calcul approché de la partie $f(g)$ "non déterminable par principe", basée sur l'exploitation de la condition de positivité de la fonction de texture.

Les propriétés de symétrie constituent toujours, en physique, des propriétés fondamentales. Les principes de symétrie se situent en-dehors des méthodes d'analyse particulières; ils s'imposent ainsi à toutes les méthodes, quelles qu'elles soient.

Ce travail a donc l'ambition de se situer résolument en-dehors des différentes méthodes d'analyse des textures.

Ainsi, si le choix des harmoniques sphériques a été fait pour décrire certains résultats fondamentaux, c'est uniquement parce qu'ils constituent une base orthonormée complète, qui permet de démontrer aisément des propriétés intrinsèques. En outre, un développement en série d'harmoniques sphériques permet de traduire des propriétés générales qui ne sont aucunement tributaires de la base particulière que constituent les harmoniques sphériques. Le caractère

intrinsèque des propriétés établies est garanti aussi longtemps que les développements en séries d'harmoniques sphériques - simples ou généralisés - sont supposés infinis (BUNGE - ROE). Ce n'est qu'à partir du moment où les développements en séries d'harmoniques sphériques sont tronqués à un rang fini qu'il convient de parler d'une méthode *particulière* d'analyse des textures.

Ce travail démontre donc que si les figures de pôles expérimentales sont inversées sans qu'aucune autre information additionnelle soit prise en considération, elles conduisent à la "partie déterminable" $\tilde{f}(g)$ de la fonction de texture, et ce, indépendamment de la méthode particulière d'analyse de texture utilisée.

Cette "fonction déterminable" ne restitue que la moitié de fonction de texture vraie, $f(g)$, flanquée d'une distribution fantôme $f_G(g)$ qui dépend essentiellement de la symétrie cristalline : la détermination de la fonction de texture vraie $f(g)$ à partir de figures de pôles expérimentales nécessite donc l'anéantissement du fantôme $f_G(g)$ au moyen d'une procédure de correction.

Dans la méthode d'analyse des textures de BUNGE-ROE, l'information additionnelle provient de l'exploitation de la condition de positivité de la fonction, qui livre de l'information dans les domaines nuls.

Dans les méthodes discrètes d'analyse des textures, qu'elles soient utilisées dans la variante originelle de WILLIAMS, ou dans les variantes ultérieures de BARO, RUER et VADON (Méthode Vectorielle) et de IMHOF /73,74/ l'information additionnelle provient également de l'exploitation des domaines nuls que contiennent éventuellement les figures de pôles, bien que la technique d'exploitation des domaines nuls diffère d'une méthode d'analyse à l'autre.

Une troisième technique de correction des fantômes est développée par K. LÜCKE et J. POSPIECH /75,76/; elle consiste à éliminer le fantôme $f_G(g)$ de telle sorte que la fonction de texture totale $f(g)$ soit du type fonction gaussienne.

Des techniques efficaces de correction de fantômes $f_G(g)$ ne pourront être développées, dans l'avenir, que par la confrontation de ces différentes méthodes, qui se complètent mutuellement.

Notamment, les mesures d'orientations individuelles (F. WAGNER et H.R. WENK /77,78/), ne subissent pas la superposition des densités d'orientations $f^R(g)$, $f^L(g)$, et leur exploitation permet ainsi de déterminer la fonction de texture totale $f(g)$.

Lorsque des expériences de diffraction polycristalline classique peuvent être effectuées sur ces mêmes échantillons, dont la texture est déjà déterminée au moyen de mesures d'orientations individuelles, ils constituent de précieux échantillons de référence qui permettent de contrôler l'efficacité des techniques de correction des fantômes.

APPENDICE I : FORMULES COMMENTEES DE METHODES MATHÉMATIQUES DE L'ANALYSE

DES TEXTURES

Cet appendice rassemble quelques techniques mathématiques qui sont utilisées dans le cadre de ce travail. Le but visé n'est pas de donner un exposé rigoureux et complet de ces méthodes, mais bien davantage de réunir, dans une notation et convention uniques, les formules et les propriétés auxquelles il est nécessaire de faire référence dans le courant de l'exposé.

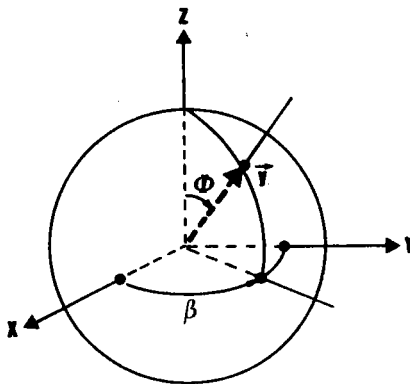


Fig. I.1.: Les harmoniques sphériques simples $k_1^m(\phi, \beta)$ sont définis sur la sphère S_2 .

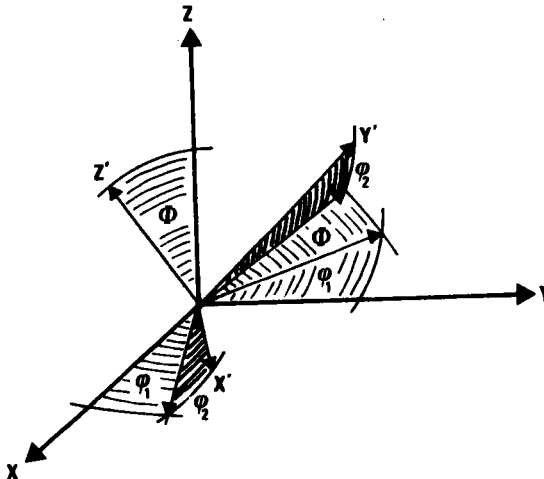


Fig. I.2. : Description des angles d'EULER $\{\varphi_1, \phi, \varphi_2\}$ dans la convention du repère mobile (d'après H.J. BUNGE /1/).

I.1. HARMONIQUES SPHERIQUES

Les harmoniques sphériques $k_1^m(\phi, \beta)$ forment une base orthonormée et complète sur S_2 , sphère unité de l'espace à trois dimensions (fig. I.1.)

$$k_1^m(\vec{y}) = k_1^m(\phi, \beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \bar{P}_1^m(\phi) e^{im\beta} \quad \text{I.1.}$$

où les $\bar{P}_1^m(\phi)$ sont des polynômes associés à ceux de LEGENDRE.

La relation d'orthonormalité se traduit par l'intégrale suivante sur la sphère S_2 :

$$\int_{S_2} k_1^{m'}(\phi, \beta) k_1^m(\phi, \beta) \sin\phi \, d\phi \, d\beta = \delta_{11'} \delta_{mm'} \quad \text{I.2.}$$

L'écriture des harmoniques sphériques et de leurs relations d'orthonormalité est élégante et simple dans les notations introduites par DIRAC /79/

Dans ces notations, les harmoniques sphériques constituent la base de l'espace vectoriel des "kets"

$$k_1^m(\vec{y}) = |1m\rangle \quad \text{I.3.}$$

La base duale est définie par les vecteurs "bras"

$$k_1^{m*}(\vec{y}) = \langle 1m| \quad \text{I.4.}$$

si bien que le produit scalaire (plus généralement hermitien) éq. I.2. s'écrit alors sous la forme compacte d'un "bracket"

$$\langle 1'm' | 1m\rangle = \delta_{11'} \delta_{mm'} \quad \text{I.5.}$$

Les harmoniques sphériques constituent un système de fonctions propres pour les opérateurs \vec{J}^2 et J_z du moment cinétique. Les équations aux valeurs propres correspondantes s'écrivent :

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 |lm\rangle &= l(l+1) |lm\rangle \\ J_z |lm\rangle &= m |lm\rangle \end{aligned} \quad \text{I.6.}$$

où les valeurs propres $l(l+1)$ sont obtenues en donnant à l les valeurs entières positives 0, 1, 2 ... et les valeurs propres m prennent, pour un rang l donné, les $2l+1$ valeurs entières $= -l \leq m \leq +l$.

L'espace vectoriel des harmoniques sphériques, muni du produit hermitien éq. I.2. et I.5., est un espace de HILBERT V ; il est la somme directe de sous-espaces V_l , associés chacun à un rang l donné /15/ :

$$V = \bigoplus_l V_l \quad \text{I.7.}$$

Sur l'espace vectoriel V est construite la représentation T du groupe continu des rotations. Ainsi, si $g \in SO(3)$ est une rotation d'axe \vec{J} et d'angle ω , la représentation T lui associe l'opérateur

$$T(g) = e^{i\omega\vec{J}} \quad \text{I.8.}$$

La rotation g se décompose en un produit de trois rotations d'angles $\varphi_1, \phi, \varphi_2$ effectuées successivement autour des axes O_z, O_x, O_z du repère mobile. Ce triplet $\varphi_1, \phi, \varphi_2$ - ou angles d'EULER - réalise une paramétrisation de $SO(3)$.

L'opérateur $T(g)$ est obtenu par la composition effectuée - dans la convention du repère mobile - de la droite vers la gauche, des opérateurs associés aux angles d'EULER (fig. I.2).

$$T(g) = e^{i\varphi_2 J_z} e^{i\phi J_x} e^{i\varphi_1 J_z} \quad \text{I.9.}$$

←

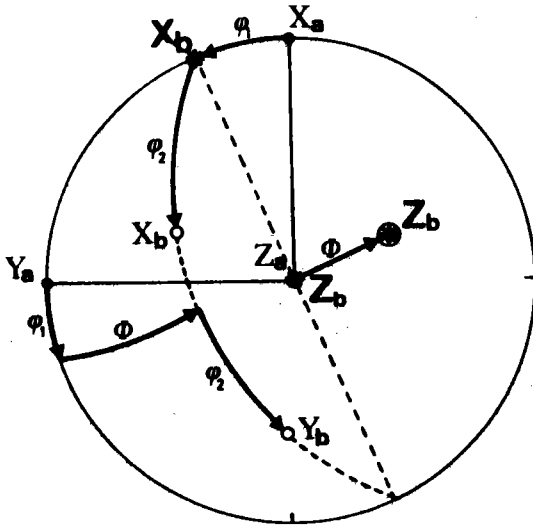


Fig. I.3.a. : Convention du repère mobile.

L'orientation finale de K_b est obtenue par la succession des rotations éq. I.9 autour des axes Z_b (initial), X_b (intermédiaire) et Z_b (final) du repère mobile K_b .

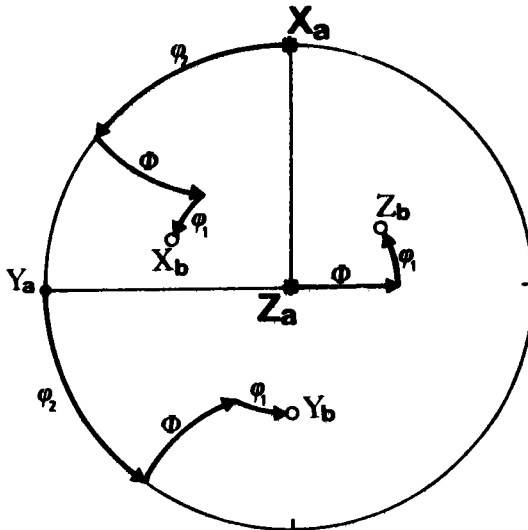


Fig. I.3.b. : Convention du repère fixe.

La même orientation finale de K_b est obtenue par la succession des rotations éq. I.10 autour des axes Z , X et Z du repère de référence K_a .

Fig. I.3. : L'orientation finale du repère K_b est représentée en projection stéréographique dans le repère de référence fixe K_a .

Par contre, si la rotation g est décrite dans le repère fixe, la composition est effectuée dans l'ordre inverse. De plus, conformément aux notations et conventions couramment utilisées dans la littérature anglo-saxonne, l'opérateur $D(g)$ s'écrit alors /15/

$$D(g) = \underline{e^{-i\varphi_2 J_z} e^{-i\phi J_x} e^{-i\varphi_1 J_z}} \quad \text{I.10.}$$

Afin d'être en accord avec les ouvrages de référence /1a-c/, c'est la convention du repère mobile qui est choisie, sauf mention contraire, dans ce travail.

L'ordre dans lequel les opérateurs éq. I.9. sont composés doit être respecté; cette non-commutativité se traduit par l'équation de commutation /80/

$$e^{i\alpha j_p} j_q e^{-i\alpha j_p} = j_q \cos \alpha + i [j_p, j_q] \sin \alpha \quad \text{I.11.}$$

où les opérateurs j_p et j_q désignent l'une quelconque des composantes j_x , j_y ou j_z du moment cinétique, et le symbole $[j_p, j_q]$ leur commutateur.

Dans le cas particulier $\alpha = \pi$, l'éq. I.11. donne, compte tenu du développement en série de l'exponentielle, la relation

$$e^{i\pi j_p} e^{i\beta j_q} = e^{-i\beta j_q} e^{i\pi j_p} \quad \text{I.12.}$$

qui permet de simplifier l'expression des opérateurs de projection.

Les harmoniques sphériques généralisés $T_1^{mn}(g)$ sont les éléments de matrice de la représentation T :

$$T_1^{mn}(g) = \langle 1m | T(g) | 1n \rangle \quad \text{I.13.}$$

soit, compte tenu des éq. I.9. et I.6.

$$T_1^{mn}(g) = e^{im\varphi_2} \langle 1m | e^{i\phi j_x} | 1n \rangle e^{in\varphi_1} \quad \text{I.14.}$$

Les harmoniques sphériques $|1m\rangle$ ne sont pas fonctions propres pour l'opérateur $e^{i\phi j_x}$; les crochets qui subsistent dans l'éq. I.14. sont des polynômes associés aux polynômes de JACOBI

$$P_1^{mn}(\phi) = P_1^{mn}(\cos \phi) = \langle 1m | e^{i\phi j_x} | 1n \rangle \quad \text{I.15.}$$

L'expression analytique de ces polynômes, au demeurant compliquée, nous intéresse moins que leurs propriétés de symétrie /1a,b/

$$\begin{aligned} P_1^{nm}(\phi) &= P_1^{mn}(\phi) = P_1^{-m-n}(\phi) \\ P_1^{mn}(\pi-\phi) &= (-1)^{1+m+n} P_1^{-m-n}(\phi) \end{aligned} \quad \text{I.16.}$$

et leurs valeurs pour les arguments particuliers

$$\begin{aligned} P_1^{mn}(0) &= \delta_{mn} \\ P_1^{mn}(\pi) &= (-1)^1 \delta_{m-n} \end{aligned} \quad \text{I.17.}$$

On obtient ainsi l'expression des harmoniques sphériques généralisés

$$T_1^{mn}(g) = e^{im\varphi_2} P_1^{mn}(\phi) e^{in\varphi_1} \quad \text{I.18.}$$

Comme la représentation T est unitaire, elle est égale à l'inverse de son adjointe, ou trans-conjuguée, notée T^\dagger :

$$\begin{aligned} T(g) &= T^\dagger(g^{-1}) \\ T_1^{mn}(g) &= T_1^{rm*}(g^{-1}) \end{aligned} \quad \text{I.19.}$$

où * désigne la conjugaison complexe.

La relation de fermeture

$$\sum_{m=-1}^{+1} |1m\rangle\langle 1m| = 1_1 \quad \text{I.20.}$$

où 1_1 désigne l'homomorphisme identité de V_1 , traduit que les harmoniques sphériques forment un système complet dans V_1 .

De la propriété d'homomorphisme de groupe de la représentation T

$$T(g'.g) = T(g') T(g) \quad \text{I.21.}$$

découle, compte tenu de la relation de fermeture éq. (I.20), la relation d'addition des harmoniques sphériques généralisés

$$T_1^{mn}(g'.g) = \sum_{s=-1}^{+1} T_1^{ms}(g') T_1^{sn}(g) \quad \text{I.22.}$$

La relation de fermeture éq. (I.20), et en conséquence la relation d'addition éq. (I.22), montrent que la représentation sur les harmoniques sphériques est, conformément à la décomposition éq. (I.7), la somme directe de sous-représentations T_1 sur les espaces V_1 ; la matrice associée à chaque sous-représentation T_1 est une matrice carrée d'ordre $2l + 1$. (fig. I.4.).

| | | | | | | | | | | | |
|-------|--------------------------------------|------|-------|--------------------------------------------------------------|------|-------|-------|------|------|------|-------|
| | | 0 0> | 1 -1> | 1 0> | 1 1> | 2 -2> | 2 -1> | 2 0> | 2 1> | 2 2> | - - - |
| <0 0 | T_0^{00} | | | | | | | | | | |
| <1 -1 | T_1^{-1-1} T_1^{-10} T_1^{-11} | | | | | | | | | | |
| <1 0 | | | | | | | | | | | |
| <1 1 | | | | | | | | | | | |
| <2 -2 | | | | T_2^{-22} T_2^{-2-1} T_2^{-20} T_2^{-21} T_2^{-22} | | | | | | | |
| <2 -1 | | | | | | | | | | | |
| <2 0 | | | | | | | | | | | |
| <2 1 | | | | | | | | | | | |
| <2 2 | | | | | | | | | | | |

Fig. I.4. : Décomposition de la représentation $T(g)$ en une somme directe de sous-représentations $T_l(g)$ irréductibles.

Par définition, le caractère $\chi_l(g)$ de la représentation T_l est la trace de la matrice associée

$$\chi_l(g) = \sum_{m=-l}^{+l} T_l^{mm}(g) \tag{I.23.}$$

Le caractère ne dépend que de l'angle $\omega = |g|$ de la rotation g

$$\chi_l(\omega) = \frac{\sin(2l+1) \frac{\omega}{2}}{\sin \frac{\omega}{2}} \tag{I.24.}$$

Les harmoniques sphériques généralisés $T_1^{mn}(g)$ qui correspondent aux valeurs particulières $m = 0$ ou $n = 0$ sont égaux, à un facteur de norme près, aux harmoniques sphériques simples.

$$\left\{ \begin{array}{l} T_1^{m0}(\varphi, \varphi_2) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} k_1^m(\varphi, \varphi_2 - \frac{\pi}{2}) \\ T_1^{0n}(\varphi_1, \varphi) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} k_1^n(\varphi, \varphi_1 - \frac{\pi}{2}) \end{array} \right. \quad \text{I.25.}$$

I.2. OPERATEURS DE PROJECTION

Si G désigne le sous-groupe des rotations g_i d'un groupe de symétrie donné, l'opérateur de projection associé s'écrit /16-18/

$$P = \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{|G|} T(g_i) \quad \text{I.26.}$$

où $|G|$ désigne l'ordre du groupe et $T(g_i)$ les opérateurs associés, selon l'éq. (I.9), aux symétries rotationnelles.

L'opérateur P est bien un projecteur, puisqu'il est idempotent

$$P^2 = P \quad \text{I.27.}$$

L'idempotence résulte de la relation d'addition éq. (I.21)

$$P^2 = \frac{1}{|G|^2} \sum_{i,j=1}^N T(g_j) T(g_i) = \frac{1}{|G|^2} \sum_{i,j=1}^N T(g_j g_i) = P \quad \text{I.28.}$$

(Pour chaque indice j fixé, les $|G|$ rotations $g_i \cdot g_j$ parcourent tout le groupe G).

De plus, le projecteur éq. (I.26) est hermitien ou auto-adjoint

$$P^\dagger = P \quad \text{I.29.}$$

En effet, l'unitarité de la représentation T , éq. (I.19), donne

$$P^\dagger = \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{|G|} T^\dagger(g_i) = \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{|G|} T(g_i^{-1}) = P \quad \text{I.30.}$$

puisque les $|G|$ rotations g_i^{-1} parcourent tout le groupe G .

Le transformé de l'harmonique sphérique $|ln\rangle$ par une rotation g_i du repère (mobile) s'obtient au moyen de la relation de fermeture éq. (I.20)

$$\left. \begin{aligned} T(g_i) |ln\rangle &= \sum_{m=-l}^{+l} |lm\rangle \langle lm| T(g_i) |ln\rangle \\ k_l^n(\phi'\beta') &= \sum_{m=-l}^{+l} T_l^{mn}(g_i) k_l^m(\phi,\beta) \end{aligned} \right\} \quad \text{I.31.}$$

Cette relation montre que l'harmonique $|ln\rangle$ n'est, en général, pas invariant sous la rotation g_i . Par contre, la projection $P|ln\rangle$ est invariante sous toute rotation g_i , puisque l'on peut écrire

$$T(g_i) P|ln\rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N T(g_i g_j) |ln\rangle = P |ln\rangle \quad \text{I.32.}$$

avec les mêmes justifications que pour l'éq. (I.28).

Ainsi, l'image $\text{Im}(P)$ du projecteur P est le sous-espace de symétrie, invariant sous le groupe G ; $\text{Im}(P)$ est le sous-espace vectoriel de V engendré par la famille génératrice $\{P|ln\rangle\}$. L'expression de ces vecteurs $P|ln\rangle$ en

fonction des éléments de matrice P_{mn}^1 , est obtenue au moyen de la relation de fermeture éq. (I.20) (à ne pas confondre avec les polynômes de JACOBI, éq. I.15. notés $P_1^{mn}(\phi)$)

$$P |1n\rangle = \sum_{m=-1}^{+1} \langle 1m|P|1n\rangle |1m\rangle = \sum_{m=-1}^{+1} P_{mn}^1 |1m\rangle \quad \text{I.33.}$$

Les produits hermitiens (scalaires) de ces vecteurs $P|1n\rangle$ conduisent, en raison des propriétés éq. (I.27) et (I.29), aux éléments de matrice P_{mn}^1 de l'opérateur de projection. Le produit hermitien des vecteurs $P|1m\rangle$ et $P|1n\rangle$ s'écrit en effet

$$\langle 1m|P^+P|1n\rangle = \langle 1m|P|1n\rangle = P_{mn}^1 \quad \text{I.34.}$$

En particulier, le carré de la norme du vecteur ligne $P|1n\rangle$ de la matrice du projecteur est égal au terme diagonal

$$\langle 1n|P^+P|1n\rangle = \langle 1n|P|1n\rangle = P_{nn}^1 \quad \text{I.35.}$$

Enfin, si P_1 désigne la restriction de l'opérateur de projection éq. (I.26) au sous-espace V_1 (éq. (I.7) et Fig. I.4.), la dimension du sous-espace invariant est donnée par

$$\dim(\text{Im}(P_1)) = \text{Tr}(P_1) = \sum_{m=-1}^{+1} \langle 1m|P_1|1m\rangle \quad \text{I.36.}$$

Si l'on note cette dimension $M(1)$, en accord avec BUNGE /1a,b/, il en résulte, compte tenu des éq. (I.23) et (I.26)

$$M(1) = \sum_{m=-1}^{+1} \langle 1m| \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{|G|} T_1(g_i) |1m\rangle = \frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^{|G|} x_1(|g_i|) \quad \text{I.37.}$$

où $|g|$ désigne l'angle ω_i de la rotation g_i .

TABLE I.1. : Coefficients de symétrie $B_1^{4m\mu}$, introduits par H.J. BUNGE /1a,b/.
Ce sont les coefficients des combinaisons linéaires d'harmoniques
sphériques adaptées à la symétrie cubique.

| | | | | | |
|---------|-------------|---------|-------------|---------|-------------|
| MU M | | | L= 4 | | |
| (1, 0) | 0.30469720 | (1, 4) | 0.36418281 | | |
| MU M | | | L= 6 | | |
| (1, 0) | -0.14104740 | (1, 4) | 0.52775103 | | |
| MU M | | | L= 8 | | |
| (1, 0) | 0.28646862 | (1, 4) | 0.21545346 | (1, 8) | 0.32826995 |
| MU M | | | L= 9 | | |
| (1, 0) | 0.00000000 | (1, 4) | -0.47483629 | (1, 8) | 0.30469720 |
| MU M | | | L=10 | | |
| (1, 0) | -0.16413497 | (1, 4) | 0.33078546 | (1, 8) | 0.39371345 |
| MU M | | | L=12 | | |
| (1, 0) | 0.26141975 | (1, 4) | 0.27266871 | (1, 8) | 0.03277460 |
| (2, 0) | 0.09298802 | (2, 4) | -0.23773812 | (2, 8) | 0.49446631 |
| | | | | (1,12) | 0.32589402 |
| | | | | (2,12) | 0.00000000 |
| MU M | | | L=13 | | |
| (1, 0) | 0.00000000 | (1, 4) | -0.44370187 | (1, 8) | -0.12875807 |
| | | | | (1,12) | 0.32382078 |
| MU M | | | L=14 | | |
| (1, 0) | -0.17557309 | (1, 4) | 0.25821932 | (1, 8) | 0.27709173 |
| | | | | (1,12) | 0.33645360 |
| MU M | | | L=15 | | |
| (1, 0) | 0.00000000 | (1, 4) | 0.16910989 | (1, 8) | -0.45704580 |
| | | | | (1,12) | 0.28429012 |
| MU M | | | L=16 | | |
| (1, 0) | 0.24370673 | (1, 4) | 0.29873515 | (1, 8) | 0.06447688 |
| (1,16) | 0.32574495 | | | (1,12) | 0.00377000 |
| (2, 0) | 0.12039646 | (2, 4) | -0.25330128 | (2, 8) | 0.23950998 |
| (2,16) | 0.00000000 | | | (2,12) | 0.40962508 |
| MU M | | | L=17 | | |
| (1, 0) | 0.00000000 | (1, 4) | -0.41566875 | (1, 8) | -0.19764468 |
| (1,16) | 0.32557592 | | | (1,12) | -0.02159338 |

| | | | |
|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| MU M | | L=18 | |
| (1, 0)-0.16914245 | (1, 4) 0.17017340 | (1, 8) 0.34598142 | (1,12) 0.07433932 |
| (1,16) 0.32696037 | | | |
| (2, 0)-0.06901768 | (2, 4) 0.16006562 | (2, 8)-0.24743528 | (2,12) 0.47110273 |
| (2,16) 0.00000000 | | | |
| MU M | | L=19 | |
| (1, 0) 0.00000000 | (1, 4) 0.21950324 | (1, 8)-0.36729917 | (1,12)-0.18180666 |
| (1,16) 0.31963396 | | | |
| MU M | | L=20 | |
| (1, 0) 0.23067026 | (1, 4) 0.31151832 | (1, 8) 0.09287682 | (1,12) 0.01089683 |
| (1,16) 0.00037564 | (1,20) 0.32573563 | | |
| (2, 0) 0.13615420 | (2, 4)-0.25048007 | (2, 8) 0.12882081 | (2,12) 0.28642879 |
| (2,16) 0.34620433 | (2,20) 0.00000000 | | |
| MU M | | L=21 | |
| (1, 0) 0.00000000 | (1, 4)-0.38704231 | (1, 8)-0.24503942 | (1,12)-0.04858614 |
| (1,16)-0.00282954 | (1,20) 0.32572258 | | |
| (2, 0) 0.00000000 | (2, 4)-0.08431638 | (2, 8) 0.21737195 | (2,12)-0.44006168 |
| (2,16) 0.26513353 | (2,20) 0.00000000 | | |
| MU M | | L=22 | |
| (1, 0)-0.16109560 | (1, 4) 0.10244188 | (1, 8) 0.36285175 | (1,12) 0.13377513 |
| (1,16) 0.01314399 | (1,20) 0.32585583 | | |
| (2, 0)-0.09620055 | (2, 4) 0.20244115 | (2, 8)-0.22389483 | (2,12) 0.17928946 |
| (2,16) 0.42017231 | (2,20) 0.00000000 | | |
| MU M | | L=23 | |
| (1, 0) 0.00000000 | (1, 4) 0.24724582 | (1, 8)-0.28925823 | (1,12)-0.25687091 |
| (1,16)-0.04378248 | (1,20) 0.32497615 | | |
| MU M | | L=24 | |
| (1, 0) 0.22050742 | (1, 4) 0.31770654 | (1, 8) 0.11661736 | (1,12) 0.02049853 |
| (1,16) 0.00150861 | (1,20) 0.00003426 | (1,24) 0.32573505 | |
| (2, 0) 0.13651722 | (2, 4)-0.21386648 | (2, 8) 0.00522051 | (2,12) 0.33939435 |
| (2,16) 0.10837396 | (2,20) 0.32914497 | (2,24) 0.00000000 | |
| (3, 0) 0.05378596 | (3, 4)-0.11945819 | (3, 8) 0.16272298 | (3,12)-0.26449730 |
| (3,16) 0.44923956 | (3,20) 0.00000000 | (3,24) 0.00000000 | |
| MU M | | L=25 | |
| (1, 0) 0.00000000 | (1, 4)-0.36047640 | (1, 8)-0.27572179 | (1,12)-0.07851106 |
| (1,16)-0.00879594 | (1,20)-0.00031974 | (1,24) 0.32573408 | |
| (2, 0) 0.00000000 | (2, 4)-0.12765450 | (2, 8) 0.25841719 | (2,12)-0.29816697 |
| (2,16)-0.21893166 | (2,20) 0.31368799 | (2,24) 0.00000000 | |
| MU M | | L=26 | |
| (1, 0)-0.15435003 | (1, 4) 0.05261630 | (1, 8) 0.35524646 | (1,12) 0.18578869 |
| (1,16) 0.03259103 | (1,20) 0.00186197 | (1,24) 0.32574594 | |
| (2, 0)-0.11306511 | (2, 4) 0.22072681 | (2, 8)-0.18706142 | (2,12) 0.05439948 |
| (2,16) 0.28122966 | (2,20) 0.35634355 | (2,24) 0.00000000 | |

MU M L=27
(1, 0) 0.00000000 (1, 4) 0.26006122 (1, 8)-0.21389471 (1,12)-0.30181075
(1,16)-0.08789922 (1,20)-0.00787673 (1,24) 0.32565174 (2,12) 0.24468471
(2, 0) 0.00000000 (2, 4) 0.04887363 (2, 8)-0.12030002 (2,24) 0.00000000
(2,16)-0.42494386 (2,20) 0.24698434 (2,24) 0.00000000

MU M L=28
(1, 0) 0.21225019 (1, 4) 0.32031716 (1, 8) 0.13604702 (1,12) 0.03132468
(1,16) 0.00362703 (1,20) 0.00018294 (1,24) 0.00000294 (1,28) 0.32573501
(2, 0) 0.13219496 (2, 4)-0.17206256 (2, 8)-0.08742608 (2,12) 0.32671661
(2,16) 0.17973107 (2,20) 0.02567515 (2,24) 0.32619598 (2,28) 0.00000000
(3, 0) 0.07989184 (3, 4)-0.16735346 (3, 8) 0.18839770 (3,12)-0.20705337
(3,16) 0.12926808 (3,20) 0.42715602 (3,24) 0.00000000 (3,28) 0.00000000

MU M L=29
(1, 0) 0.00000000 (1, 4)-0.33678345 (1, 8)-0.29478544 (1,12)-0.10749517
(1,16)-0.01811467 (1,20)-0.00131538 (1,24)-0.00003274 (1,28) 0.32573494
(2, 0) 0.00000000 (2, 4) 0.15916432 (2, 8) 0.26588018 (2,12)-0.18214199
(2,16)-0.28245490 (2,20)-0.06715810 (2,24) 0.32375554 (2,28) 0.00000000

MU M L=30
(1, 0)-0.14878368 (1, 4) 0.01524973 (1, 8) 0.33628434 (1,12) 0.22632587
(1,16) 0.05790047 (1,20) 0.00609812 (1,24) 0.00022898 (1,28) 0.32573594
(2, 0)-0.11721726 (2, 4) 0.20915005 (2, 8)-0.11723436 (2,12)-0.07815329
(2,16) 0.31318947 (2,20) 0.13655742 (2,24) 0.33241385 (2,28) 0.00000000
(3, 0)-0.04297703 (3, 4) 0.09317876 (3, 8)-0.11831248 (3,12) 0.17355132
(3,16)-0.28164031 (3,20) 0.42719361 (3,24) 0.00000000 (3,28) 0.00000000

MU M L=31
(1, 0) 0.00000000 (1, 4) 0.26400089 (1, 8)-0.14633715 (1,12)-0.32012423
(1,16)-0.13483032 (1,20)-0.02099736 (1,24)-0.00117345 (1,28) 0.32572665
(2, 0) 0.00000000 (2, 4) 0.08175123 (2, 8)-0.17339343 (2,12) 0.26266221
(2,16)-0.23945225 (2,20)-0.24775941 (2,24) 0.30634588 (2,28) 0.00000000

MU M L=32
(1, 0) 0.20533892 (1, 4) 0.32087437 (1, 8) 0.15187897 (1,12) 0.04249238
(1,16) 0.00670516 (1,20) 0.00054977 (1,24) 0.00002018 (1,28) 0.00000024
(1,32) 0.32573501 (2, 4)-0.13523423 (2, 8)-0.14935701 (2,12) 0.28227378
(2, 0) 0.12775091 (2,20) 0.05661270 (2,24) 0.00469819 (2,28) 0.32578978
(2,16) 0.23670434 (2,32) 0.00000000 (3, 8) 0.18610682 (3,12)-0.14407046
(2,32) 0.00000000 (3, 4)-0.19373733 (3,24) 0.36633402 (3,28) 0.00000000
(3, 0) 0.09703829 (3,20) 0.26897090 (3,24) 0.36633402 (3,28) 0.00000000
(3,16) 0.00220535 (3,32) 0.00000000

MU M L=33
(1, 0) 0.00000000 (1, 4)-0.31590161 (1, 8)-0.30597249 (1,12)-0.13373130
(1,16)-0.02996836 (1,20)-0.00337720 (1,24)-0.00017242 (1,28)-0.00000313
(1,32) 0.32573500 (2, 4)-0.18043837 (2, 8) 0.25132442 (2,12)-0.07638575
(2, 0) 0.00000000 (2,20)-0.12232659 (2,24)-0.01522534 (2,28) 0.3254556
(2,16)-0.30925104 (2,32) 0.00000000 (3, 8) 0.07340134 (3,12)-0.14424448
(2,32) 0.00000000 (3, 4)-0.03084513 (3,24) 0.22972892 (3,28) 0.00000000
(3, 0) 0.00000000 (3,20)-0.41050072 (3,24) 0.22972892 (3,28) 0.00000000
(3,16) 0.26434451 (3,32) 0.00000000

| MU | M | | | L=34 | | | |
|---------|-------------|---------|-------------|---------|-------------|---------|-------------|
| (1, 0) | -0.14409234 | (1, 4) | -0.01343681 | (1, 8) | 0.31248977 | (1,12) | 0.25557722 |
| (1,16) | 0.08571889 | (1,20) | 0.01351208 | (1,24) | 0.00095792 | (1,28) | 0.00002550 |
| (1,32) | 0.32573508 | | | | | | |
| (2, 0) | -0.11527834 | (2, 4) | 0.18472133 | (2, 8) | -0.04403280 | (2,12) | -0.16908618 |
| (2,16) | 0.27227021 | (2,20) | 0.21086614 | (2,24) | 0.04041752 | (2,28) | 0.32688152 |
| (2,32) | 0.00000000 | | | | | | |
| (3, 0) | -0.06773139 | (3, 4) | 0.14120811 | (3, 8) | -0.15835721 | (3,12) | 0.18357456 |
| (3,16) | -0.19364673 | (3,20) | 0.08377174 | (3,24) | 0.43116318 | (3,28) | 0.00000000 |
| (3,32) | 0.00000000 | | | | | | |

TABLE I.2. : Coefficients de symétrie R_1^{4m} , introduits par R.J. ROE /8/.
Ce sont les coefficients des relations de dépendance linéaire,
éq. (3.61.), que vérifient les coefficients de texture dans le
cas de la symétrie cubique.

| | | |
|---------|------------------|------------------|
| M | | L= 4 |
| w(4) = | 0.5976143 w(0) | |
| M | | L= 6 |
| w(4) = | -1.8708287 w(0) | |
| M | | L= 8 |
| w(4) = | 0.3760507 w(0) | |
| w(8) = | 0.5729597 w(0) | |
| M | | L= 9 |
| w(8) = | -0.6416889 w(4) | |
| M | | L=10 |
| w(4) = | -1.0076629 w(0) | |
| w(8) = | -1.1993588 w(0) | |
| M | | L=12 |
| w(8) = | 0.8149151 w(0) | -1.4423922 w(4) |
| w(12) = | 0.4427061 w(0) | 0.3463169 w(4) |
| M | | L=13 |
| w(8) = | 0.2901905 w(4) | |
| w(12) = | -0.7298161 w(4) | |
| M | | L=14 |
| w(4) = | -0.7353613 w(0) | |
| w(8) = | -0.7891065 w(0) | |
| w(12) = | -0.9581582 w(0) | |
| M | | L=15 |
| w(8) = | -2.7026557 w(4) | |
| w(12) = | 1.6810970 w(4) | |

M L=16
w(8) = 0.4497647 w(0) -0.5179990 w(4)
w(12) = 0.6311516 w(0) -1.0171612 w(4)
w(16) = 0.4222794 w(0) 0.4014267 w(4)

M L=17
w(8) = 0.4754860 w(4)
w(12) = 0.0519485 w(4)
w(16) = -0.7832581 w(4)

M L=18
w(8) = -3.1798277 w(0) -4.2880159 w(4)
w(12) = 2.2268365 w(0) 4.8635359 w(4)
w(16) = -1.7070715 w(0) -1.4721226 w(4)

M L=19
w(8) = -1.6733201 w(4)
w(12) = -0.8282642 w(4)
w(16) = 1.4561697 w(4)

M L=20
w(8) = 0.3163591 w(0) -0.1703671 w(4)
w(12) = 0.4589014 w(0) -0.6446265 w(4)
w(16) = 0.5386767 w(0) -0.7965430 w(4)
w(20) = 0.4071663 w(0) 0.4426492 w(4)

M L=21
w(12) = 1.1297868 w(4) -1.5862311 w(8)
w(16) = -0.6140975 w(4) 0.9815206 w(8)
w(20) = -0.6756460 w(4) -0.2620762 w(8)

M L=22
w(8) = -2.1178228 w(0) -3.1187645 w(4)
w(12) = -0.1914726 w(0) 0.7036609 w(4)
w(16) = 0.8872353 w(0) 2.9187611 w(4)
w(20) = -1.4493438 w(0) -1.3774637 w(4)

M L=23
w(8) = -1.1699216 w(4)
w(12) = -1.0389292 w(4)
w(16) = -0.1770808 w(4)
w(20) = 1.3143848 w(4)

M L=24
w(12) = 0.9960080 w(0) -0.3779049 w(4) -2.5613076 w(8)
w(16) = -0.1588211 w(0) -0.6512131 w(4) 2.3876867 w(8)
w(20) = 0.7169718 w(0) -0.6468540 w(4) -0.9488398 w(8)
w(24) = 0.3694861 w(0) 0.4742437 w(4) 0.1038941 w(8)

M L=25
W(12) = 0.7985929 W(4) -0.7593264 W(8)
W(16) = 0.4880175 W(4) -0.6061285 W(8)
W(20) = -0.6732194 W(4) 0.8913211 W(8)
W(24) = -0.6558240 W(4) -0.3239679 W(8)

M L=26
W(8) = -1.5692481 W(0) -2.4551428 W(4)
W(12) = -0.6782731 W(0) -0.4484211 W(4)
W(16) = 0.1351977 W(0) 1.4126147 W(4)
W(20) = 0.3260742 W(0) 1.9484665 W(4)
W(24) = -1.2784593 W(0) -1.3097560 W(4)

M L=27
W(12) = -4.2553035 W(4) -3.7627328 W(8)
W(16) = 3.8556389 W(4) 5.0987767 W(8)
W(20) = -2.5814782 W(4) -3.1018328 W(8)
W(24) = 1.8806039 W(4) 0.7640226 W(8)

M L=28
W(12) = 0.6484740 W(0) -0.0444512 W(4) -1.6884919 W(8)
W(16) = 0.3679195 W(0) -0.4611645 W(4) -0.0355468 W(8)
W(20) = 0.0961931 W(0) -0.7661776 W(4) 1.5051323 W(8)
W(24) = 0.6352276 W(0) -0.4450832 W(4) -0.9341155 W(8)
W(28) = 0.3590608 W(0) 0.4867616 W(4) 0.1278635 W(8)

M L=29
W(12) = 0.6028991 W(4) -0.3241383 W(8)
W(16) = 0.6454474 W(4) -0.6759538 W(8)
W(20) = 0.1476364 W(4) -0.1642080 W(8)
W(24) = -0.6993064 W(4) 0.7990475 W(8)
W(28) = -0.6346499 W(4) -0.3799216 W(8)

M L=30
W(12) = -7.1704715 W(0) -11.3029439 W(4) -5.1593406 W(8)
W(16) = 11.7539490 W(0) 20.0881146 W(4) 9.6619234 W(8)
W(20) = -10.3690054 W(0) -15.7032484 W(4) -8.4449635 W(8)
W(24) = 4.3304872 W(0) 8.3786610 W(4) 3.4526384 W(8)
W(28) = -1.7703564 W(0) -2.2620192 W(4) -0.4953223 W(8)

M L=31
W(12) = -2.7783781 W(4) -2.8247786 W(8)
W(16) = 0.3449013 W(4) 1.5435899 W(8)
W(20) = 0.9645940 W(4) 1.8836709 W(8)
W(24) = -1.3318413 W(4) -2.3947018 W(8)
W(28) = 1.6703408 W(4) 0.7875294 W(8)

M L=32
W(12) = 0.4674189 W(0) 0.0879759 W(4) -1.1699804 W(8)
W(16) = 0.4278142 W(0) -0.2151026 W(4) -0.6582068 W(8)
W(20) = 0.2473107 W(0) -0.5873904 W(4) 0.5758748 W(8)
W(24) = 0.2077551 W(0) -0.7335477 W(4) 0.9881316 W(8)
W(28) = 0.5772487 W(0) -0.3040555 W(4) -0.9184905 W(8)

w(32) = 0.3502993 w(0) 0.4955448 w(4) 0.1505621 w(8)

M

L=33

w(16) = 1.8498894 w(4) -0.6856124 w(8) -2.5770792 w(12)

w(20) = -0.9450566 w(4) -0.2825628 w(8) 2.9041710 w(12)

w(24) = 0.7881393 w(4) -0.0355014 w(8) -1.7792364 w(12)

w(28) = -0.9943598 w(4) 0.7638207 w(8) 0.6013167 w(12)

w(32) = -0.5653075 w(4) -0.4366552 w(8) -0.1013148 w(12)

M

L=34

w(12) = -5.0009656 w(0) -8.1451332 w(4) -4.1443567 w(8)

w(16) = 4.3720229 w(0) 8.0397275 w(4) 4.6519834 w(8)

w(20) = 0.8006938 w(0) 2.3513361 w(4) 0.8827624 w(8)

w(24) = -4.8905058 w(0) -7.0316372 w(4) -4.8094173 w(8)

w(28) = 2.9243380 w(0) 6.1252243 w(4) 2.9603478 w(8)

w(32) = -1.5983113 w(0) -2.1195137 w(4) -0.5227475 w(8)

II. RESOLUTION D'UNE EQUATION INTEGRALE AU MOYEN DE LA TRANSFORMATION D'ABEL

Dans le chapitre 4, la méthode de centralisation a permis de ramener le calcul de la fonction de texture f à celui de h , fonction centralisée de f . La fonction centrale h apparaît comme la solution de l'équation intégrale éq. (4.23.), que nous rappelons ci-dessous :

$$P(\cos \theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} h(\cos \theta \cos \psi + \cos \theta + \cos \psi) d\psi \quad \text{II.1.}$$

Avec le changement de variables :

$$\begin{cases} u = 1 + \cos \theta \\ 2v - 1 = \cos \theta \cos \psi + \cos \theta + \cos \psi \end{cases} \quad \text{II.2.}$$

on obtient pour l'équation intégrale :

$$P(u-1) = \frac{1}{\pi} \int_0^u \frac{h(2v-1)}{\sqrt{v} \sqrt{u-v}} dv \quad \text{II.3.}$$

$P(u-1)$ est donc la transformée d'ABEL de $\frac{1}{\pi} \frac{h(2v-1)}{\sqrt{v}}$. Rappelons que la transformée d'ABEL $Af(u)$ d'une fonction $f(v)$ est définie par /25/ :

$$Af(u) = \int_0^u \frac{f(v)}{\sqrt{u-v}} dv \quad \text{II.4.}$$

dont l'inversion bien connue est donnée par :

$$f(v) = \frac{d}{dv} \frac{1}{\pi} \int_0^v \frac{Af(u)}{\sqrt{v-u}} du \quad \text{II.5.}$$

Transformation d'ABEL réciproque

L'application de la formule d'ABEL réciproque à l'équation intégrale de départ donne :

$$\frac{h(2v-1)}{\sqrt{v} \pi} = \frac{1}{\pi} \frac{d}{dv} \int_0^v \frac{P(u-1)}{\sqrt{v-u}} du = \frac{1}{\pi} \frac{d}{dv} \int_0^v \frac{P(v-u-1)}{\sqrt{u}} du$$

II.6.

$$= \frac{1}{\pi} \frac{P(-1)}{\sqrt{v}} + \frac{1}{\pi} \int_0^v \frac{P'(v-u-1)}{\sqrt{u}} du$$

En fixant $v = 2$ et en posant $1-u = \cos \theta$, on obtient :

$$\frac{h(3)}{\sqrt{2}} = \frac{P(-1)}{\sqrt{2}} + \int_0^2 \frac{P'(1-u)}{\sqrt{u}} du$$

$$= \frac{P(-1)}{\sqrt{2}} + \frac{2}{\sqrt{2}} \int_0^\pi \frac{d}{d \cos \theta} P(\cos \theta) \cos \frac{\theta}{2} d\theta$$

II.7.

III. CALCUL DE LA PARTIE PAIRE $\tilde{f}(g)$ D'UNE FONCTION CENTRALE, EN L'IDENTITE

$g = 1$

L'objet du chapitre 6 est le calcul d'une expression intégrale de la partie déterminable $f(g)$, fonction à trois variables. La technique de centralisation a ramené ce problème à celui, plus simple, du calcul de la fonction centralisée, en l'identité $g = 1$. De plus, la remarque du début du chapitre 6 permet de restreindre le calcul, conformément à l'éq.(6.1.), à celui de la partie paire.

A partir du développement en série de caractères

$$f = \sum_{l \geq 0} c_l \chi_l \tag{III.1.}$$

on déduit :

$$\tilde{f}(1) = \tilde{f}(|1|) = \tilde{f}(\omega = 0) = \sum_{l \geq 0} c_{2l} \chi_{2l}(0) = \sum_{l \geq 0} c_{2l} (4l+1) \tag{III.2.}$$

D'après les éq. (6.9.) et (6.7.) on obtient

$$c_l = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi d\omega f(\omega) \chi_l(\omega) \sin^2 \frac{\omega}{2} = a_l - a_{l+1} \tag{III.3.}$$

les coefficients a_l étant définis par :

$$a_l = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\omega f(\omega) \cos l\omega \tag{III.4.}$$

En considérant l'éq. (III.3.), la série (III.2.) s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \tilde{f}(0) &= \sum_{l \geq 0} a_{2l} (4l + 1) - \sum_{l \geq 0} a_{2l+1} (4l+1) \\ &= \sum_{l \geq 0} 2a_l (-1)^l + \sum_{l \geq 0} a_l \end{aligned} \tag{III.5.}$$

$$\text{Calcul de la s\u00e9rie } \sum_{l \geq 0} 2a_l (-1)^l$$

En utilisant la d\u00e9finition \u00e9q. (III.4.) et la propri\u00e9t\u00e9 de parit\u00e9 de f, on peut \u00e9crire :

$$2a_l (-1)^l = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} d\omega f(\omega) \frac{d}{d\omega} \sin l(\pi + \omega) \quad \text{III.6.}$$

soit en faisant successivement un changement de variable lin\u00e9aire et une int\u00e9gration par parties

$$= - \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} d\omega \sin l\omega \frac{d}{d\omega} f(\omega + \pi) \quad \text{III.7.}$$

En notant $g(\omega) = \frac{d}{d\omega} f(\omega + \pi)$ on obtient :

$$\sum_{l=0}^L 2 a_l (-1)^l = - \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} d\omega g(\omega) \sum_{l=0}^L \sin l\omega$$

$$= - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} d\omega \frac{g(\omega) \cos \frac{\omega}{2}}{\sin \frac{\omega}{2}} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} d\omega \frac{g(\omega) \cos (2L+1) \frac{\omega}{2}}{\sin \frac{\omega}{2}} \quad \text{III.8.}$$

Comme g(\omega) est impaire, en tant que d\u00e9riv\u00e9e de la fonction paire f(\omega + \pi), la fonction g(\omega)/(\sin \omega/2) est continue en l'origine \omega = 0, et le dernier terme de l'\u00e9q. (III.8.) converge donc vers zero lorsque l devient infini.

On obtient donc :

$$\sum_{l \geq 0} 2 a_l (-1)^l = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} d\omega g(\omega + \pi) \operatorname{tg} \frac{\omega}{2} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} d\omega \operatorname{tg} \frac{\omega}{2} \frac{df}{d\omega} \quad \text{III.9.}$$

Calcul de la série $\sum_{l \geq 0} a_l$

 $l \geq 0$

Comme la fonction f est paire, sa série de FOURIER s'écrit :

$$f(\omega) = a_0 + 2 \sum_{l > 0} a_l \cos l\omega \quad \text{III.10.}$$

soit

$$\sum_{l \geq 0} a_l = \frac{f(0) + a_0}{2} \quad \text{III.11.}$$

Calcul de $\tilde{f}(0)$

La relation (III.5.) s'écrit donc, en considérant les éq. (III.9.) et (III.11.)

$$\tilde{f}(0) = \frac{f(0)}{2} + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\omega f(\omega) + \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\omega \operatorname{tg} \frac{\omega}{2} \frac{df}{d\omega} \quad \text{III.12.}$$

Le dernier terme de l'éq. précédente peut être transformé au moyen d'une intégration par parties :

$$\begin{aligned} \int_0^\pi d\omega \operatorname{tg} \frac{\omega}{2} \frac{df}{d\omega} &= \int_0^\pi d\omega \operatorname{tg} \frac{\omega}{2} \frac{d}{d\omega} (f(\omega) - f(\pi)) \\ &= \left[\operatorname{tg} \frac{\omega}{2} (f(\omega) - f(\pi)) \right]_0^\pi + \frac{1}{2} \int_0^\pi d\omega \frac{f(\pi) - f(\omega)}{\cos^2 \frac{\omega}{2}} \end{aligned} \quad \text{III.13.}$$

La singularité en $\omega = \pi$ n'est qu'apparente. En effet, la fonction $f(\omega)$ étant paire (éq. III.10.), la fonction $f(\pi + \omega)$ est également paire : $f(\pi - \omega) = f(-\pi + \omega) = f(2\pi - \pi + \omega) = f(\pi + \omega)$. En conséquence, le développement en série de TAYLOR de $f(\pi + \omega) - f(\pi)$, au voisinage de $\omega = 0$, commence par le terme en ω^2 :

$$f(\pi + \omega) - f(\pi) \sim \omega^2 \quad \text{III.14.}$$

Ceci assure la nullité du premier terme et l'intégrabilité du second dans l'éq. (III.13.).

L'éq. (III.12.) peut donc s'écrire :

$$\bar{f}(0) = \frac{f(0)}{2} + \frac{f(\pi)}{2} + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} d\omega \operatorname{tg}^2 \frac{\omega}{2} (f(\pi) - f(\omega)) \quad \text{III.15.}$$

- BIBLIOGRAPHIE -

- /1a/ BUNGE, H.J., Mathematische Methoden der Texturanalyse (Akademie Verlag, Berlin) 1969.
- /1b/ BUNGE, H.J., Texture Analysis in Materials Science - Mathematical Methods (Butterworth, London) sous presse.
- /1c/ BUNGE, H.J. and ESLING, C., Quantitative Texture Analysis (D.G.M. Metallurgy Information, New-York, Oberürsel) à paraître 1982.
- /2/ COULOMB, P., Les textures dans les Métaux de Réseau Cubique (Dunod, Paris) 1972.
- /3/ GOTTHARDT, R., HOSCHEK, G., REIMOLD, O. and HAESSNER, F., Texture 1 (1971) 99.
- /4/ WILLIAMS, R.O., Trans. Met. Soc. AIME 242 (1968) 105.
- /5/ RUER, D., Thèse de Doctorat d'Etat (Université de Metz) 1976.
- /6/ RUER, D. et BARO, R., in Texture of Materials (Springer-Verlag, Berlin) 1978.
- /7/ RUER, D. et BARO, R., Mém. Sc. Rev. Métall., Juillet (1979) 455.
- /8/ RUER, D., VADON, A. et BARO, R., Texture of Crystall. Sol. 3 (1979) 245.
- /9/ RUER, D., VADON, A. and BARO, R., Advances in X-Ray Analysis (1979) 349.
- /10/ BUNGE, H.J., Z. Metallkde 56 (1965) 872.
- /11/ ROE, R.J., J. Appl. Phys. 36 (1965) 2024.
- /12/ MATTHIES, S., Kristall und Technik 15 (1980) 431.

- /13a/ ESLING, C., BUNGE, H.J. and MULLER J., J. Physique Lett. 41 (1980) L-543.
- /13b/ ESLING, C., BUNGE, H.J. et MULLER J., C.R. Hebd. Séan. Acad. Sci. 291 B (1980) 253.
- /14/ WEIGEL, D., Cristallographie et structure des solides (Masson, Paris) 1972.
- /15/ BRINK, D.M. and SATCHLER, G.R., Angular Momentum (Clarendon Press, Oxford) 1968.
- /16/ ESLING, C. et TAVARD, C., C.R. Hebd. Séan. Acad. Sci. 274 B (1972) 125.
- /17/ ESLING, C., Thèse de Doctorat de 3ème Cycle (Université de Metz) 1972.
- /18a/ ESLING, C., BECHLER, E. and BARO, R., Supplément to Acta Cryst. A 31 (1975) part S3, S7.
- /18b/ BECHLER-FERRY, E., Thèse de docteur ingénieur (Institut National Polytechnique de Lorraine) 1981.
- /18c/ ESLING, C., BECHLER-FERRY, E. and BUNGE, H.J., The Sixth International Conference on Textures of Materials, à paraître 1982.
- /19/ ROE, R.J., J. Appl. Phys. 37 (1966) 2069.
- /20/ DADE, E.C., Réduction d'une matrice par lignes (Département de Mathématique, Strasbourg) 1970.
- /21a/ BUNGE, H.J., ESLING, C. and MULLER, J., J. Appl. Crystallogr. 13 (1980) 544.
- /21b/ SHUBNIKOV, A. and BELOV, N.V., Colored Symmetry (Pergamon Press, Oxford) 1964.

- /22/ MATTHIES, S., Phys. Status Solidi (b) 92 (1979) k135.
- /23/ MULLER, J., ESLING, C. and BUNGE, H.J., J. Physique 42 (1981) 161.
- /24/ FARAUT, J., Département de Mathématique, Strasbourg, Communication privée.
- /25/ COURANT, R. and HILBERT, D., Methods of Mathematical Physics (Interscience Publishers, New York) 1962, Vol. 2, p. 535.
- /26/ MATTHIES, S., Séminaire, Université de Metz, Juin 1980.
- /27/ MATTHIES, S., Kristall u. Technik 15 (1980) 1189.
- /28/ MATTHIES, S., Publication du Zentralinstitut für Kernforschung, à paraître.
- /29a/ POSPIECH, J., Institut de Métallurgie, Cracovie, Communication privée.
- /29b/ MATSUO, M., Nippon Steel Corporation, Communication privée.
- /30/ MATTHIES, S., Kristall u. Technik 15 (1980) 601.
- /31/ BUNGE, H.J., ESLING, C. et MULLER, J., Acta Cryst., A37 (1981) 889.
- /32/ ESLING, C., MULLER, J. and BUNGE, H.J., J. Physique, 43 (à paraître 1982).
- /33/ MATTHIES, S., Kristall u. Technik 15 (1980) 823.
- /34a/ MATTHIES, S. and POSPIECH, J., Phys. Stat. Sol. (b) 97 (1980) 547.
- /34b/ GUELFAND, I.M. and CHILOV, G.E., Les Distributions. (Dunod, Paris) 1965, Tome 1.
- /35/ MATTHIES, S., Zentralinstitut für Kernforschung, Dresde, communication privée.
- /36/ MATTHIES, S., Phys. Status Solidi (b) 101 (1980) K 111.
- /37/ COSTER, D., KNOLL, K.S. and PRINS, J.A., Z. Phys. 63 (1930) 345.

- /38/ BIJVOET, J.M., Proc. Koninkl. Ned. Akad. Wetenschap. B 52 (1949) 313.
- /39/ BUNGE, H.J. and ESLING, C., J. Appl. Cryst. 14 (1981) 253.
- /40/ RAMACHANDRAN, G.N. and SRINIVASAN, R., Fourier Methods in Crystallography (Wiley Interscience, New-York) 1970.
- /41/ International Tables for X-Ray Crystallography, vol. IV, (Kynoch Press, Birmingham) 1974.
- /42/ SIKKA, S.K. et RAJAGOPAL, H., in Anomalous Scattering edited by RAMASESHAN, S. and ABRAHAMS, S.C. (Munksgaard, Copenhagen) 1975.
- /43a/ BUNGE, H.J. and ESLING, C., J. Physique Lett. 40 (1979) L-627.
- /43b/ BUNGE, H.J. et ESLING, C., C.R. Hebd. Séan. Acad. Sci. 289 B (1979) 163.
- /44/ WELCH, P.I., Institut für Metallkunde, Clausthal-Zellerfeld, Communication privée.
- /45/ HUMBERT, M. and BERGMANN, H.W., J. Appl. Crystallogr. 13 (1980) 500.
- /46/ MORRIS, P.R., Adv. X-Ray Anal. 18 (1975) 514.
- /47/ HUMBERT, M., WAGNER, F., ESLING, C. and BARO, R., Fourth European Colloquium on Textures, Cambridge, 1975.
- /48/ HUMBERT, M., Thèse de Doctorat de 3ème cycle (Université de Metz) 1976.
- /49/ HUMBERT, M., WAGNER, F. and BARO, R., Texture 3 (1978) 27.
- /50/ DERVIN, P., Thèse Docteur-Ingénieur (Paris XI) 1978.
- /51/ DERVIN, P., PERNOT, M. et PENELLE, R., J. Appl. Crystallogr. 13 (1980) 494.
- /52a/ ESLING, C., BECHLER-FERRY, E. and BUNGE, H.J., J. Physique Lett., 42 (1981) L-141.
- /52b/ ESLING, C., BECHLER-FERRY, E. et BUNGE, H.J., C.R. Hebd. Séan. Acad. Sci., 292 B (1981) 159.

- /53/ BUNGE, H.J., *J. Magnetism Magnetic Mat.* 4 (1977) 305.
- /54/ MORRIS, P.R. and FLOWER, J.W., *Texture*, 4 (1981) 129.
- /55/ BUNGE, H.J., *Kristall Techn.* 9 (1974) 413.
- /56/ MORRIS, P.R., *Int. J. Eng. Sci.* 9 (1971) 917.
- /57/ BUNGE, H.J., *Kristall Techn.* 5 (1970) 145.
- /58/ VAN HOUTTE, P., GIL SEVILLANO, J. and AERNOUDT, E., *Z. Metallkde* 70 (1979) 503.
- /59/ CLEMENT, A. and COULOMB, P., in *Texture of Materials* (Springer-Verlag, Berlin) 1978.
- /60/ CLEMENT, A., *Archivum Hutnietwa. A paraitre.*
- /61/ ROYER, F., MOHR, J.M. and TAVARD, C., *J. Appl. Cryst.* 11 (1978) 35.
- /62/ ROYER, F. and TAVARD, C., *J. Appl. Cryst.* 13 (1980) 597.
- /63a/ GUILLAUME, M.J., GONCALVES, J.J., BEAUVAIS, C. et HOCHÉID, B., *C.R. Hebd. Séan. Acad. Sci.* B117 (1981).
- /63b/ GUILLAUME, M.J., GONCALVES, J.J., BEAUVAIS, C. et HOCHÉID, B., *Mém. Sci. Rev. Met.*, 9 (1981) 491.
- /64/ GUILLAUME, M.J., VINCENT, A., BEAUVAIS, C. et HOCHÉID, B., *Mém. Sci. Revue de Métallurgie*, 4 (1981) 189.
- /65/ VAN HOUTTE, P., *Thèse (Université Catholique de Louvain)* 1975.
- /66/ VAN HOUTTE, P., DE VOS, J., AERNOUDT, E. and DELAEY, L., *Strength of Metals and Alloys* (Pergamon Press) 1979.
- /67/ CLEMENT, A. and COULOMB, P., *Scripta Met.* 13 (1979) 899.
- /68/ CLEMENT, A., *Thèse de Doctorat d'Etat (Université de Toulouse)* 1980.

- /69/ WAGNER, F., ESLING, C., BARO, R. and ENGLANDER, M., Z. Metallkde 68 (1977) 701.
- /70/ ESLING, C., WAGNER, F., BARO, R. and ENGLANDER, M., in Texture of Materials (Springer-Verlag, Berlin) 1978.
- /71/ BERGMANN, H.W., BECHLER, F. and ESLING, C., The sixth International Conference on Texture of Materials. A paraitre.
- /72/ WAGNER, F., BERGMANN, H.W., HUMBERT, M. and ESLING, C., The sixth International Conference on Texture of Materials. A paraitre.
- /73/ IMHOF, J., Z. Metallkde 68 (1977) 38.
- /74/ IMHOF, J., in Texture of Materials (Springer-Verlag, Berlin) 1978.
- /75/ JURA, J., LÜCKE, K. and POSPIECH, J., Z. Metallkde. 71 (1980) 714.
- /76/ LÜCKE, K., POSPIECH, J., VIRNICH, K.H. and JURA, J., Acta Met. sous presse.
- /77/ WENK, H.R., WAGNER, F., ESLING, C. and BUNGE, H.J., Tectonophysics 78 (1981) 119.
- /78/ WAGNER, F., WENK, H.R., ESLING, C. and BUNGE, H.J., Phys. Stat. Sol. (a) 67 (1981) 269.
- /79/ MESSIAH, A., Mécanique Quantique, Tome 1, (Dunod, Paris) 1960.
- /80/ PETIAU, G., Mécanique Quantique Générale (Faculté des Sciences, Paris) 1960.
-

Service de reprographie de l'U.E.R. des
Sciences de l'Université de Metz
Imprimé en offset par Mlle J. PETERSHEIM et M. F. LAVIGNE.

*La qualité de ce volume est le meilleur
compliment qui leur puisse être adressé.*