

Introduction à l'utilisation des tenseurs en optique

Thierry Ruchon

Sommaire

A. Exemple introductif, définitions et propriétés élémentaires des tenseurs.	3
A.1 Exemple de tenseur de rang 2	3
A.2 Relations de changement de base d'un tenseur	6
A.3 Produit extérieur.	7
A.4 Contractions de tenseurs.	7
A.5 Tenseurs isotropes.	8
A.6 Quelques propriétés des tenseurs	9
A.7 Moyenne isotrope de tenseurs.	10

A. Introduction

Dans ce chapitre nous introduisons des techniques d'analyse tensorielle utiles pour le calcul des propriétés optiques d'un ensemble de molécules

ou d'atomes. L'ambition est seulement de donner des éléments pratiques utilisables directement et ne vise pas du tout la rigueur mathématique. Le résultat le plus important est le suivant : *quand une propriété tensorielle (la polarisabilité par exemple) est connue pour une **orientation particulière** de la molécule ou de l'atome par rapport au champ exciteur, la propriété correspondante pour un milieu isotrope constitué d'un ensemble des mêmes molécules ou atomes **orientées aléatoirement** s'en déduit immédiatement.* Par ailleurs, ce sont des techniques qui peuvent aussi être utilisées pour la résolution de l'équation d'onde (voir le chapitre en ligne correspondant).

B. Exemple de tenseur de rang 2

En premier lieu, afin d'introduire les notations et propriétés élémentaires des tenseurs utilisés dans le texte, nous allons détailler un modèle très schématique de la susceptibilité électrique d'un milieu anisotrope. Cette approche est très fortement inspirée des références [1, 2, 3].

Ce modèle considère un électron retenu dans un solide cristallin par trois paires de ressorts de raideurs différentes modélisant le champ cristallin (figure 1.a). Ceux-ci sont alignés sur les axes d'un repère orthonormé $(O, \vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$. Une excitation de cet électron par un champ E_i dirigé sur l'axe \vec{e}_i conduit à une polarisation proportionnelle à E_i dirigée sur le même axe. On la note :

$$p_i = \alpha_i E_i. \quad (1)$$

Supposons maintenant que les ressorts, qui étaient jusqu'alors dirigés sur les axes \vec{e}_1 et \vec{e}_2 , soient tournés d'un angle θ par rapport à \vec{e}_1 . On note $\vec{e}_{1'}$ et $\vec{e}_{2'}$ les nouveaux axes 1 et 2 et ϕ l'angle entre \vec{e}_1 et $\vec{e}_{2'}$ (figure 1.b). L'excitation par un champ E_1 encore dirigé sur \vec{e}_1 , a une composante sur $\vec{e}_{1'}$ qui vaut $E_1 \cos \theta$ et une autre sur $\vec{e}_{2'}$ qui vaut $E_1 \cos \phi$. Les polarisations induites par les oscillateurs alignés avec $\vec{e}_{1'}$ et $\vec{e}_{2'}$ valent, d'après la formule (1)

$$\begin{cases} p_{1'} = \alpha_{1'} E_1 \cos \theta \\ p_{2'} = \alpha_{2'} E_1 \cos \phi. \end{cases} \quad (2)$$

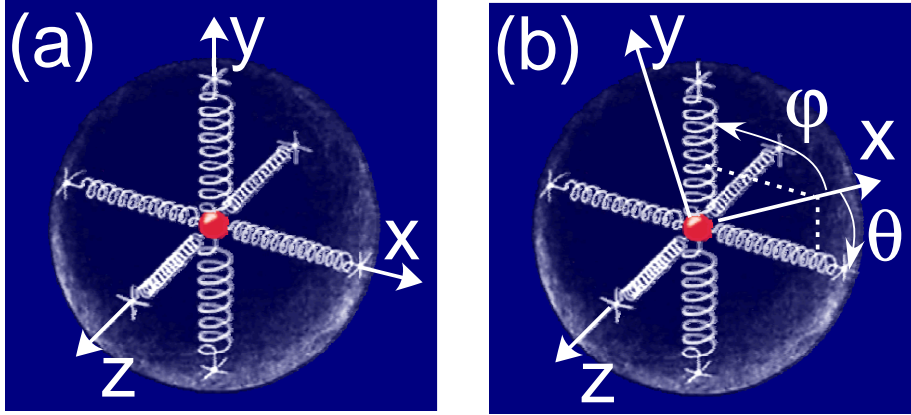


Figure 1 - Modèle élémentaire d'un électron dans un champ cristallin. L'électron est retenu par trois paires de ressorts de constantes différentes (d'après [2]).

On en déduit que les polarisations sur les axes \vec{e}_1 et \vec{e}_2 s'écrivent

$$\begin{cases} p_1 = p_{1'} \cos \theta + p_{2'} \cos \phi = (\alpha_{1'} \cos \theta \cos \theta + \alpha_{2'} \cos \phi \cos \phi) E_1 \\ p_2 = -p_{1'} \cos \phi + p_{2'} \cos \theta = (-\alpha_{1'} \cos \theta \cos \phi + \alpha_{2'} \cos \theta \cos \phi) E_1 \end{cases} \quad (3)$$

La deuxième ligne de cette équation montre que, bien que l'excitation soit sur l'axe \vec{e}_1 , la polarisation a une composante sur l'axe \vec{e}_2 . Les relations du type de (1) deviennent donc insuffisantes et il est nécessaire de définir de nouvelles polarisabilités α_{11} et α_{21} telles que, pour une excitation sur \vec{e}_1

$$\begin{cases} p_1 = \varepsilon_0 \alpha_{11} E_1 \\ p_2 = \varepsilon_0 \alpha_{21} E_1 \end{cases} \quad (4)$$

avec, d'après (3)

$$\begin{cases} \alpha_{11} = \alpha_{1'} \cos \theta \cos \theta + \alpha_{2'} \cos \phi \cos \phi \\ \alpha_{21} = -\alpha_{1'} \cos \theta \cos \phi + \alpha_{2'} \cos \theta \cos \phi \end{cases} \quad (5)$$

Dans le cas général, des relations analogues vont exister pour une excitation sur \vec{e}_2 et pour les autres directions de \vec{p} . Il faut aussi tenir compte de la rotation possible par rapport à l'axe \vec{e}_3 . La polarisabilité doit donc être

définie par neuf grandeurs telles que

$$\begin{cases} p_1 = \varepsilon_0 (\alpha_{11}E_1 + \alpha_{12}E_2 + \alpha_{13}E_3) \\ p_2 = \varepsilon_0 (\alpha_{21}E_1 + \alpha_{22}E_2 + \alpha_{23}E_3) \\ p_3 = \varepsilon_0 (\alpha_{31}E_1 + \alpha_{32}E_2 + \alpha_{33}E_3) \end{cases} \quad (6)$$

La polarisabilité est un exemple de *tenseur*. Comme chacune de ces neuf grandeurs se rapporte à deux axes (e.g. α_{21} permet de calculer la polarisation sur l'axe 2 pour une excitation sur l'axe 1) la polarisabilité est un tenseur de rang 2. On le note $[\boldsymbol{\alpha}]_{ij}$. De façon plus générale, on note $[\mathbf{A}]_{i_1 i_2 \dots i_n}$ un tenseur de rang n . Quand il n'y a aucun doute sur le rang d'un tenseur, nous laissons tomber l'écriture des indices $\{i_1, i_2 \dots i_n\}$. Les tenseurs de rang 1 sont les vecteurs habituels (nous utilisons la polarisation comme exemple de tenseur de rang 1 dans la suite)¹. Les tenseurs de rang 0, qui ne se rapportent à aucune direction, sont les scalaires; nous les notons comme un scalaire habituel (e pour la charge de l'électron par exemple).

C. Relations de changement de base d'un tenseur

Le calcul des propriétés tensorielles d'une molécule, comme sa polarisabilité par exemple, est en général beaucoup plus facile dans un système d'axes orienté d'une façon particulière par rapport à cette molécule. Pour obtenir les propriétés de cette molécule dans le repère du laboratoire, il faut alors connaître les relations de changement de base d'un tenseur. C'est l'objet de ce paragraphe. On considère deux bases \mathcal{B} et \mathcal{B}' dont les axes sont numérotés u et u' . On note $\lambda_{u',u}$ le cosinus directeur de l'axe u' de \mathcal{B}' par rapport à l'axe u de \mathcal{B} ². Le schéma utilisé pour démontrer les égalités de gauche de la formule (3) peut être généralisé à un changement de base plus complexe. On obtient alors qu'un vecteur $\vec{\mathbf{p}}$ (de composantes

¹Nous faisons parfois une exception pour leur notation en la conservant sous la forme habituelle, $\vec{\mathbf{p}}$ par exemple.

²Par exemple, $\vec{\mathbf{e}}_{1'} = (\lambda_{1',1}, \lambda_{1',2}, \lambda_{1',3})$ dans la base \mathcal{B} .

(p_1, p_2, p_3) dans la base \mathcal{B} s'écrit dans la base \mathcal{B}'

$$\begin{cases} p_{1'} = \lambda_{11}p_1 + \lambda_{12}p_2 + \lambda_{13}p_3 \\ p_{2'} = \lambda_{21}p_1 + \lambda_{22}p_2 + \lambda_{23}p_3 \\ p_{3'} = \lambda_{31}p_1 + \lambda_{32}p_2 + \lambda_{33}p_3 \end{cases} \quad (7)$$

Pour un tenseur de rang 2, comme par exemple $[\alpha]_{ij}$, une démarche similaire permet de généraliser la formule (5) sous la forme

$$\alpha_{i'j'} = \sum_{i,j=1}^3 \lambda_{i'i} \lambda_{j'j} \alpha_{ij}. \quad (8)$$

On a adopté, quand cela allège les expressions, la convention des sommations d'Einstein : *quand deux indices dans une expression tensorielle ont le même symbole, il est implicite qu'il faut faire la sommation sur toutes les valeurs de cet indice*. Par exemple, l'expression précédente s'écrit avec cette convention :

$$\alpha_{i'j'} = \lambda_{i'i} \lambda_{j'j} \alpha_{ij}. \quad (9)$$

Enfin, la relation de changement de base (9) se généralise à un tenseur de rang n :

$$\alpha_{i'_1 i'_2 \dots i'_n} = \lambda_{i'_1 i_1} \lambda_{i'_2 i_2} \dots \lambda_{i'_n i_n} \alpha_{i_1 i_2 \dots i_n}. \quad (10)$$

D. Produit extérieur.

On considère deux tenseurs de rang 1, notés \vec{p} et \vec{q} . Le *produit extérieur* de ces deux tenseurs, noté $\vec{p} \vec{q}$, est le tenseur de rang deux formé par les quantités obtenues en multipliant chaque composante p_α par une composante q_β . Si on appelle $[\mathbf{T}]_{\alpha\beta}$ ce tenseur, on a donc

$$T_{\alpha\beta} = p_\alpha q_\beta. \quad (11)$$

De façon plus générale, si on prend deux tenseurs de rangs m et n notés $[\mathbf{A}]_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m}$ et $[\mathbf{B}]_{\beta_1 \beta_2 \dots \beta_n}$, leur produit extérieur est un tenseur de rang

$m + n$. On le note $[\mathbf{C}]$. En notation contractée, on écrit

$$[\mathbf{C}] = [\mathbf{A}] [\mathbf{B}]. \quad (12)$$

avec \mathbf{C} défini par

$$C_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m, \beta_1 \beta_2 \dots \beta_n} = A_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m} B_{\beta_1 \beta_2 \dots \beta_n}. \quad (13)$$

E. Contractions de tenseurs.

Une contraction tensorielle est obtenue en prenant deux indices égaux et en sommant sur les trois valeurs de cet indice. Par exemple, si on note S la contraction du tenseur $[\mathbf{T}]$ du paragraphe précédent, elle s'écrit

$$S = T_{\alpha\alpha} = T_{11} + T_{22} + T_{33} = p_1 q_1 + p_2 q_2 + p_3 q_3 \quad (14)$$

On note « \cdot » la contraction. On remarque que $\vec{\mathbf{p}} \cdot \vec{\mathbf{q}}$ est le produit scalaire de $\vec{\mathbf{p}}$ et $\vec{\mathbf{q}}$.

Pour des tenseurs d'ordre plus élevés, par exemple deux tenseurs de rangs deux notés $[\mathbf{P}]_{\alpha\beta}$ et $[\mathbf{Q}]_{\gamma\delta}$, le résultat de la contraction est un tenseur de rang 2 noté $([\mathbf{P}] \cdot [\mathbf{Q}])_{\alpha\delta}$ défini par

$$([\mathbf{P}] \cdot [\mathbf{Q}])_{\alpha\delta} = [\mathbf{P}]_{\alpha\beta} [\mathbf{Q}]_{\beta\delta}. \quad (15)$$

Avec cette règle, pour la contraction d'un tenseur de rang 2 avec un tenseur de rang 1, on retrouve le produit matriciel habituel. Par exemple, l'équation (6) s'écrit

$$\vec{\mathbf{p}} = \varepsilon_0 [\boldsymbol{\alpha}] \cdot \vec{\mathbf{E}}. \quad (16)$$

Enfin, on peut faire des contractions multiples en itérant le procédé. Par exemple, on obtient un scalaire en faisant la double contraction, notée $[\mathbf{P}] : [\mathbf{Q}]$, de $[\mathbf{P}]_{\alpha\beta}$ et $[\mathbf{Q}]_{\gamma\delta}$. Elle est définie par

$$[\mathbf{P}] : [\mathbf{Q}] = [\mathbf{P}]_{\alpha\beta} [\mathbf{Q}]_{\beta\alpha}. \quad (17)$$

F. Tenseurs isotropes.

Les tenseurs qui décrivent les propriétés des milieux isotropes, qu'on appelle *tenseurs isotropes*, doivent être invariants par une rotation quelconque des axes du repère. Par exemple un scalaire est un tenseur isotrope de rang 0. En utilisant les relations (10), il est possible de trouver les tenseurs isotropes d'autres rangs [4]. On montre ainsi qu'il n'y a pas de tenseur isotrope d'ordre 1. A un facteur multiplicatif près, il y a un seul tenseur isotrope d'ordre 2 : c'est le tenseur identité noté $[\delta]$ dont les composantes sont définies par

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha = \beta \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} . \quad (18)$$

Il y a également un seul tenseur isotrope d'ordre 3 : c'est le tenseur de *Levy-Civita* noté $[\epsilon]$ et défini par

$$\epsilon_{\alpha\beta\gamma} = \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha\beta\gamma \text{ est une permutation circulaire de } 123 \\ -1 & \text{si } \alpha\beta\gamma \text{ est une permutation circulaire de } 321 \\ 0 & \text{si deux indices sont égaux} \end{cases} . \quad (19)$$

On peut montrer [5] que les tenseurs isotropes de rang supérieur peuvent s'exprimer comme des produits extérieurs de $[\delta]$ et $[\epsilon]$.

Par exemple, pour former un tenseur isotrope de rang 4, il faut faire le produit extérieur de deux tenseurs $[\delta]$ (qui sont de rang 2). Si on note ce produit $[\zeta]_{\alpha\beta\gamma\delta}$, on voit qu'il n'y a que trois produits différents (que l'on nomme $[\zeta^{(1)}]$, $[\zeta^{(2)}]$ et $[\zeta^{(3)}]$), à savoir

$$[\zeta^{(1)}]_{\alpha\beta\gamma\delta} = [\delta]_{\alpha\beta} [\delta]_{\gamma\delta} \quad (20a)$$

$$[\zeta^{(2)}]_{\alpha\beta\gamma\delta} = [\delta]_{\alpha\gamma} [\delta]_{\beta\delta} \quad (20b)$$

$$[\zeta^{(3)}]_{\alpha\beta\gamma\delta} = [\delta]_{\alpha\delta} [\delta]_{\beta\gamma} . \quad (20c)$$

Ce sont les trois seuls tenseurs isotropes de rang 4.

Les tenseurs isotropes de rang 5 sont formés par le produit extérieur d'un tenseur $[\epsilon]$ (de rang 3) et d'un tenseur $[\delta]$ (de rang 2). Il y en a autant que de combinaisons de 3 indices parmi 5, c'est-à-dire 10. On les

note $[\boldsymbol{\eta}^{(i)}]_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon}$ et on les définit par

$$\begin{aligned}
[\boldsymbol{\eta}^{(1)}]_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon} &= [\boldsymbol{\epsilon}]_{\alpha\beta\gamma} [\boldsymbol{\delta}]_{\delta\epsilon} & [\boldsymbol{\eta}^{(5)}]_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon} &= [\boldsymbol{\epsilon}]_{\alpha\gamma\epsilon} [\boldsymbol{\delta}]_{\beta\delta} & [\boldsymbol{\eta}^{(9)}]_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon} &= [\boldsymbol{\epsilon}]_{\beta\delta\epsilon} [\boldsymbol{\delta}]_{\alpha\gamma} \\
[\boldsymbol{\eta}^{(2)}]_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon} &= [\boldsymbol{\epsilon}]_{\alpha\beta\delta} [\boldsymbol{\delta}]_{\gamma\epsilon} & [\boldsymbol{\eta}^{(6)}]_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon} &= [\boldsymbol{\epsilon}]_{\alpha\delta\epsilon} [\boldsymbol{\delta}]_{\beta\gamma} & [\boldsymbol{\eta}^{(10)}]_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon} &= [\boldsymbol{\epsilon}]_{\gamma\delta\epsilon} [\boldsymbol{\delta}]_{\alpha\beta} \\
[\boldsymbol{\eta}^{(3)}]_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon} &= [\boldsymbol{\epsilon}]_{\alpha\beta\epsilon} [\boldsymbol{\delta}]_{\gamma\delta} & [\boldsymbol{\eta}^{(7)}]_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon} &= [\boldsymbol{\epsilon}]_{\beta\gamma\delta} [\boldsymbol{\delta}]_{\alpha\epsilon} & & \\
[\boldsymbol{\eta}^{(4)}]_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon} &= [\boldsymbol{\epsilon}]_{\alpha\gamma\delta} [\boldsymbol{\delta}]_{\beta\epsilon} & [\boldsymbol{\eta}^{(8)}]_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon} &= [\boldsymbol{\epsilon}]_{\beta\gamma\epsilon} [\boldsymbol{\delta}]_{\alpha\delta} . & &
\end{aligned} \tag{21}$$

G. Quelques propriétés des tenseurs isotropes de rangs 2 et 3

Les propriétés qui suivent sont utilisées pour les démonstrations des paragraphes suivants :

$$\delta_{ij}\delta_{ij} = 3 \tag{22a}$$

$$\delta_{ij}\delta_{ik} = \delta_{jk} \tag{22b}$$

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ijk} = 6 \tag{22c}$$

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ijl} = 2\delta_{kl} \tag{22d}$$

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl} \tag{22e}$$

$$\epsilon_{ijk}a_ib_j = (\vec{\mathbf{a}} \wedge \vec{\mathbf{b}})_k \tag{22f}$$

H. Moyenne isotrope de tenseurs.

Pour modéliser les propriétés optiques d'un milieu composé d'une collection isotrope de molécules, il faut souvent moyenner, sur toutes les orientations possibles de la molécule, ses propriétés microscopiques calculées dans une orientation donnée. Par exemple, on calcule une grandeur tensorielle de rang 3 que l'on note $[\mathbf{P}]_{\alpha\beta\gamma}$ dans le référentiel de la molécule désigné par des indices grecs et on cherche à calculer la moyenne de ce tenseur pour toutes les orientations de la molécule dans le repère du laboratoire. On note $\langle [\mathbf{P}]_{ijk} \rangle$ cette moyenne, les lettres romaines étant utilisées pour le repère du laboratoire. Quelque soit l'orientation de la molécule, les grandeurs $[\mathbf{P}]_{\alpha\beta\gamma}$ attachées à la molécule ne changent pas. La relation (10)

permet de relier les tenseurs $[\mathbf{P}]$ dans les deux référentiels

$$P_{ijk} = \lambda_{i\alpha} \lambda_{j\beta} \lambda_{k\gamma} P_{\alpha\beta\gamma}. \quad (23)$$

On peut donc écrire

$$\begin{aligned} \langle P_{ijk} \rangle &= \langle \lambda_{i\alpha} \lambda_{j\beta} \lambda_{k\gamma} P_{\alpha\beta\gamma} \rangle \\ &= \langle \lambda_{i\alpha} \lambda_{j\beta} \lambda_{k\gamma} \rangle P_{\alpha\beta\gamma}. \end{aligned} \quad (24)$$

Pour un tenseur de rang n , l'opération revient donc à moyennner des produits de cosinus directeurs. Le problème est donc formellement résolu et une procédure générale permettant ce calcul a été proposée [5]. Nous présentons les expressions obtenues jusqu'au rang 5 dans la suite de ce chapitre.

H.1 Moyenne d'un tenseur de rang 2.

D'après la remarque précédente, comme les seuls tenseurs isotropes de rang 2 sont proportionnels à $[\boldsymbol{\delta}]$, la moyenne d'un tenseur de rang 2 noté $[\mathbf{P}]$ s'écrit

$$\langle P_{ij} \rangle = x \delta_{ij}. \quad (25)$$

x est une constante que l'on cherche à calculer. Pour cela, on multiplie cette équation à gauche et droite par δ_{ij} . Comme $[\boldsymbol{\delta}]$ est invariant par rotation, on peut le rentrer dans la moyenne et, en tenant compte de (22a) on obtient :

$$\langle P_{ij} \rangle \delta_{ij} = \langle P_{ij} \delta_{ij} \rangle = x \delta_{ij} \delta_{ij} = 3x. \quad (26)$$

Or $\langle P_{ij} \delta_{ij} \rangle = \langle P_{ii} \rangle$ est la moyenne de la trace de $[\mathbf{P}]$ (notée $\text{Tr}([\mathbf{P}])$). Comme c'est un scalaire, on peut supprimer le symbole moyenne et on en déduit :

$$\langle P_{ij} \rangle = \frac{1}{3} \text{Tr}([\mathbf{P}]) \delta_{ij} = \frac{1}{3} (P_{\alpha\alpha}) \delta_{ij}. \quad (27)$$

H.2 Moyenne d'un tenseur de rang 3.

Les seuls tenseurs isotropes de rang 3 sont proportionnels à $[\epsilon]$. La moyenne d'un tenseur $[\mathbf{P}]_{ijk}$ de rang 3 s'écrit donc

$$\langle P_{ijk} \rangle = x \epsilon_{ijk} \quad (28)$$

où x est une constante que l'on cherche à calculer. On multiplie à gauche et à droite cette équation par ϵ_{ijk} . Comme $[\epsilon]$ est invariant par rotation, en utilisant la formule (22c), on obtient

$$\langle P_{ijk} \rangle \epsilon_{ijk} = x \epsilon_{ijk} \epsilon_{ijk} \quad (29a)$$

$$\langle P_{ijk} \epsilon_{ijk} \rangle = 6x. \quad (29b)$$

Le membre de gauche de la dernière équation est la moyenne isotrope d'un scalaire, elle est donc égale à ce scalaire et on en déduit

$$\langle P_{ijk} \rangle = \frac{1}{6} (P_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma}) \epsilon_{ijk}. \quad (30)$$

H.3 Moyenne d'un tenseur de rang 4.

Nous avons vu qu'il y a trois tenseurs isotropes de rang 4 : $[\zeta^{(1)}]$, $[\zeta^{(2)}]$ et $[\zeta^{(3)}]$. La moyenne d'un tenseur $[\mathbf{P}]_{ijkl}$ de rang 4 s'écrit donc comme une combinaison linéaire de ces trois tenseurs, soit

$$\langle P_{ijkl} \rangle = x_1 \zeta_{ijkl}^{(1)} + x_2 \zeta_{ijkl}^{(2)} + x_3 \zeta_{ijkl}^{(3)} \quad (31)$$

où x_1 , x_2 et x_3 sont des constantes à déterminer. On multiplie les deux membres de cette égalité successivement par $\zeta_{ijkl}^{(1)}$, $\zeta_{ijkl}^{(2)}$ et $\zeta_{ijkl}^{(3)}$. Compte tenu des définitions des tenseurs $[\zeta]$ et des relations (22), on en déduit le système d'équations suivantes

$$\langle P_{ijkl} \rangle \zeta_{ijkl}^{(1)} = 9x_1 + 3x_2 + 3x_3 \quad (32a)$$

$$\langle P_{ijkl} \rangle \zeta_{ijkl}^{(2)} = 3x_1 + 9x_2 + 3x_3 \quad (32b)$$

$$\langle P_{ijkl} \rangle \zeta_{ijkl}^{(3)} = 3x_1 + 3x_2 + 9x_3 \quad (32c)$$

Les tenseurs $[\zeta]$ sont invariants par rotation. On peut donc les rentrer dans la moyenne dans les membres de gauche. On obtient alors des scalaires. On peut donc supprimer le signe $\langle \cdot \rangle$ et on obtient un système d'équations linéaires dont la résolution donne

$$x_1 = \frac{1}{30} \left(4 \zeta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(1)} - \zeta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(2)} - \zeta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(3)} \right) P_{\alpha\beta\gamma\delta} \quad (33a)$$

$$x_2 = \frac{1}{30} \left(-\zeta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(1)} + 4 \zeta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(2)} - \zeta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(3)} \right) P_{\alpha\beta\gamma\delta} \quad (33b)$$

$$x_3 = \frac{1}{30} \left(-\zeta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(1)} - \zeta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(2)} + 4 \zeta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(3)} \right) P_{\alpha\beta\gamma\delta} \quad (33c)$$

H.4 Moyenne d'un tenseur de rang 5.

Il y a dix tenseurs isotropes de rang 5 que l'on a noté $[\eta^{(1)}]$ à $[\eta^{(10)}]$. La moyenne d'un tenseur $[\mathbf{P}]_{ijklm}$ de rang 5 s'écrit donc

$$\langle P_{ijklm} \rangle = x_1 \eta_{ijklm}^{(1)} + x_2 \eta_{ijklm}^{(2)} + \dots + x_{10} \eta_{ijklm}^{(10)} \quad (34)$$

où x_1 à x_{10} sont des constantes à déterminer. On multiplie les deux membres de cette égalité successivement par $\eta_{ijklm}^{(1)}$ à $\eta_{ijklm}^{(10)}$ ce qui, compte tenu des définitions des tenseurs $[\eta]$ et des relations (22), conduit à un système d'équations linéaires à résoudre sur le modèle du paragraphe précédent. La résolution de ce système montre que *les tenseurs $[\eta]$ ne sont pas linéairement indépendants* : les quatre derniers peuvent être exprimés en fonction des 6 premiers sous la forme suivante [6]

$$[\eta^{(7)}] = [\eta^{(1)}] - [\eta^{(2)}] + [\eta^{(4)}] \quad (35a)$$

$$[\eta^{(8)}] = [\eta^{(1)}] - [\eta^{(3)}] + [\eta^{(5)}] \quad (35b)$$

$$[\eta^{(9)}] = [\eta^{(2)}] - [\eta^{(3)}] + [\eta^{(6)}] \quad (35c)$$

$$[\eta^{(10)}] = [\eta^{(4)}] - [\eta^{(5)}] + [\eta^{(6)}] \quad (35d)$$

Il y a donc plusieurs expressions possibles de la moyenne que l'on cherche. Une solution du système, qui a l'avantage d'être symétrique est

$$x_i = \frac{1}{30} [\eta^{(i)}]_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon} P_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon}. \quad (36)$$

I. Conclusion

Pour conclure, nous reprenons l'exemple initial. On déduit immédiatement que la polarisabilité d'un ensemble isotropes d'atomes ayant des polarisabilités dans un système d'axes propres $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ vaut simplement $\frac{1}{3}(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3)$. La puissance de cette analyse devient encore plus évidente quand, comme pour l'activité optique par exemple, ce sont des tenseurs de rang 3 qu'il faut moyenner, voire, en optique non linéaire des tenseurs de rang 4 ou 5. Par exemple, la magnétochiralité d'une molécule peut s'exprimer comme une combinaison linéaire de composantes d'un tenseur de rang 5 déterminé numériquement à partir de la structure atomique et des polarisabilités propres de ses constituants.

Bibliographie

- [1] T. FREEGARDE : *Light and matter* (2004). <http://www.phys.soton.ac.uk/quantum/phys3003.htm> Department of Physics and Astronomy, University of Southampton. **2**
- [2] E. HECHT : «*Optics, 3rd ed.*». Addison-Wesley, Reading, Massachussets (U. S. A.) (1998). **2, 3**
- [3] J. B. APPLEQUIST : *Tensors in a nutshell* (1998). <http://www.public.iastate.edu/~jba/tensors.pdf> Disponible sur les pages de l'Iowa State University. **2**
- [4] H. JEFFREYS : «*Cartesian tensors*». Cambridge University press, London (U.K.) (1961). **7**
- [5] H. JEFFREYS : «*On isotropic tensors*». Proceedings of the Cambridge philosophical magazine, **73**, 173–176 (1973). **7, 9**
- [6] W. P. HEALY : «*On the isotropic averaging of fifth-order cartesian tensors*». Journal of physics A : math. gen., **8** (9), L87–L89 (1975). **11**