CRISTALLOGRAPHIE. — *Représentation de vibration d'un cristal construite par induction de représentations.* Note (*) de **Louis Michel**, Membre de l'Académie et **Jan Mozrzymas.**

La représentation de vibration du groupe d'espace G_k d'un vecteur d'onde k est le produit tensoriel de la représentation vectorielle du groupe ponctuel P_k de k et d'une représentation induite donnée explicitement. L'utilisation du théorème de réciprocité de Frobenius simplifie l'étude de la décomposition de la représentation de vibration de G_k en somme directe de représentations irreductibles.

CRYSTALLOGRAPHY. — Vibration Representation of a Crystal Constructed by Induction from Representations.

A wave vector $\mathbf{k}$ *of the Brillouin zone is also a character of the translation group; its kernel* Ker $\mathbf{k}$ *is the subgroup* $\{t \in T,\ e^{-i\mathbf{k}.t}=1\}$. *If* G_k *is the space group of* k, *we can define the quotient groups* $G_k \xrightarrow{\theta_k} P_k = G_k/T$ *and* $G_k \xrightarrow{\varphi_k} P(k) = G_k/\mathrm{Ker}\,k$ *where* P_k *is the usual point group of* k *and* $P(k)$ *is the Herring extended point group of* k. *The vibration representation of* G_k *is:*

$$G_k \ni g \mapsto V(\theta_k(g)) \otimes [\bigoplus_{\alpha,\, i} F_{\alpha,\, i}(\varphi_k(g))],$$

where V *is the (3 dimensional) vector representation of* P_k *and the representation* $F_{\alpha,\, i}$ *of* $P(k)$ *is obtained by induction from a one-dimensional representation of the isotropy group (=little group)* $G_{k,\, \alpha,\, i}$ *of the i-th atom of type* α *in a fundamental cell. This unidimensional representation is given explicity. The use of the Frobenius reciprocity theorem simplifies the decomposition of the vibration representation into irreducible constituents.*

La représentation de vibration d'un cristal de groupe cristallographique G pour un vecteur d'onde k est une représentation du groupe d'isotropie G_k dont la construction est classique (*voir* par exemple [1], [2] équation (9) [16]). Nous dérivons ici cette construction en utilisant explicitement la théorie de l'induction des représentations. Nous pouvons alors utiliser la réciprocité de Frobenius (*voir* par exemple [3], [4]) pour simplifier l'étude de la décomposition de la représentation de vibration en somme directe de représentations irréductibles de G_k. Cette Note est en partie la suite de la Note [5].

Dans un cristal idéalisé (c'est-à-dire sans défauts et infini), le groupe des translations T d'un groupe cristallographique G est sous-groupe invariant de G et le quotient P défini par $G \xrightarrow{\theta} G/T = P$ est le groupe ponctuel de G. Parmi les 230 types de groupes cristallographiques (à 3 dimensions) 73 sont des produits semi-directs $G = T \,\square\, P$; ce sont les groupes symmorphiques; les autres sont des extensions non triviales de P par T. Soit $\mathbf{a}$ la position moyenne d'un atome a; l'ensemble des positions des atomes homologues par translation est le réseau $T\,.\,\mathbf{a}$. Soit R l'ensemble de ces réseaux $R = \{r(\alpha, i)\}$ où α étiquette les différents types d'atomes et i les différents réseaux formés des mêmes atomes. G agit sur R par son quotient P puisque par définition, chaque translation laisse chaque réseau invariant, nous notons $P_{r(\alpha,\, i)}$ et $G_{r(\alpha,\, i)} = \theta^{-1}(P_{r(\alpha,\, i)})$ les groupes d'isotropie du réseau $r(\alpha, i)$ pour ces deux actions de groupe. Il est aisé de démontrer (et bien connu des cristallographes) que les groupes cristallographiques $G_{r(\alpha,\, i)}$ sont symmorphiques.

Soit $\mathbf{k}$ un vecteur d'onde *arbitraire* de la zone de Brillouin T* (on dit aussi $\mathbf{k} \in T^*$, le dual du groupe T); $\mathbf{k}$ est un caractère de T; son noyau Ker $\mathbf{k}$ est le sous-groupe de T formé des translations $\mathbf{t}$ telles que $\mathbf{k}(\mathbf{t}) \equiv e^{-i\mathbf{k}.t} = 1$; l'image de $\mathbf{k}$, Im $\mathbf{k}$, est l'ensemble $\{e^{-i\mathbf{k}.t}\}$ (quand toutes les composantes de $\mathbf{k}/2\pi$ sont rationnelles, Im $\mathbf{k}$ est un groupe cyclique $Z_{n(\mathbf{k})}$). G agit sur T* uniquement par son quotient P et les groupes d'isotropie de k sont notés respectivement G_k et $P_k = \theta(G_k)$ (si k est considéré simplement comme un vecteur de l'espace dual, son invariance est modulo un vecteur du réseau dual). On montre aisément que Ker $\mathbf{k}$ est sous-groupe invariant de G_k, d'où le quotient (qui fut introduit par Herring) :

(1) $$G_k \xrightarrow{\varphi_k} G_k/\operatorname{Ker} k = P(k).$$

Notons que l'homomorphisme θ_k, restriction de θ à G_k se factorise :

(2) $$\theta_k = \rho_k \circ \varphi_k, \qquad P(k) \xrightarrow{\rho_k} P(k)/\operatorname{Im} k = P_k.$$

On montre de plus :

(3) $$\operatorname{Im} k < \text{Centre de } P(k).$$

La représentation de vibration de G_k est le produit tensoriel :

(4) $$G_k \ni g \mapsto V(\theta_k(g)) \otimes F(\varphi_k(g)),$$

où V est la représentation vectorielle (de dimension 3) de P_k et F une représentation en général réductible de $P(k)$ qui se décompose en une somme directe de représentation de $P(k)$: $F = \bigoplus_{\alpha, i} F_{\alpha, i}$, où chaque $F_{\alpha, i}$ est définie par une orbite (α, i) de G_k sur l'ensemble R des réseaux d'atomes homologues par translation. Soit $G_{k, r(\alpha, i)} = G_k \cap G_{r(\alpha, i)}$ le groupe d'isotropie du réseau $r(\alpha, i)$ appartenant à l'orbite (α, i) pour l'action de G_k. Nous avons déjà remarqué qu'un tel groupe est symmorphique et son image dans $P(k)$ par φ_k est donc un produit semi-direct de sous-groupe invariant $\operatorname{Im} k$ et de quotient $P_{k, r(\alpha, i)} < P_k$; mais c'est en fait un produit direct puisque $P(k)$ est une extension centrale de P_k par $\operatorname{Im} k$ [*cf.* (2) et (3)]. En résumé :

(5) $$\varphi_k(G_{k, r(\alpha, i)}) = \operatorname{Im} k \times P_{k, r(\alpha, i)} < P(k).$$

Soit ψ_k l'homomorphisme de projection :

(6) $$\operatorname{Im} k \times P_{k, r(\alpha, i)} \xrightarrow{\psi_k} \operatorname{Im} k.$$

Il définit une représentation unidimensionnelle de $\operatorname{Im} k \times P_{k, r(\alpha, i)}$. Son induction $\psi_k \uparrow$ à $P(k)$ est la représentation $F_{\alpha, i}$. Sa dimension est le nombre de réseaux de l'orbite de G_k dans R. Et la dimension de F est donc le nombre de réseaux. T.**a**, ce qui est aussi le nombre d'atomes dans une maille définie par la symétrie de translation seulement ou bien la maille de Wigner-Seitz invariante par P.

Étant donnés un groupe G, un sous-groupe H et l'une de ses représentation irréductible Γ_H, on peut former la représentation $\Gamma_{H\uparrow G}$ de G induite par la représentation Γ_H de H. Dans le cas qui nous intéresse $\Gamma_{H\uparrow G}$ est unitaire et de dimension finie; le théorème de réciprocité de Frobenius prédit alors que la multiplicité de la représentation irréductible Δ_G de G dans $\Gamma_{H\uparrow G}$ est égale à la multiplicité de la représentation Γ_H dans $\Delta_{G|H}$, la restriction de la représentation Δ_G au sous-groupe H. Appliquons ce théorème à la représentation $F_{\alpha, i} = \psi_k \uparrow$ de $P(k)$, induite par la représentation unidimensionnelle ψ_k de $\operatorname{Im} k \times P_{k, r(\alpha, i)}$ définie en (6). Soit $\Delta(P(k))$ une représentation irréductible de $P(k)$. Elle est dite *permise* si son noyau satisfait la condition :

(7) $$\operatorname{Im} k \cap \operatorname{Ker} \Delta(P(k)) = \{1\}.$$

Ce qui implique que le sous-groupe de $P(k)$ engendré par $\mathrm{Im}\, k$ et $\mathrm{Ker}\, \Delta(P(k))$ est le produit direct $(\mathrm{Im}\, k) \times \mathrm{Ker}\,(\Delta(P(k))$ et que l'on peut identifier $\mathrm{Ker}\, \Delta\,(P(k))$ à un sous-groupe de P_k (au-dessus duquel l'extension centrale de P_k par $\mathrm{Im}\, k$ se scinde). Soit $K_{\alpha, i}$ le plus grand sous-groupe invariant de $P(k)$ contenu dans $P_{k, r(\alpha, i)}$:

(8) $$K_{\alpha, i} = \bigcap_{g \in P(k)} g\, P_{k, r(\alpha, i)}\, g^{-1}.$$

Puisque $\psi_k(P_{k, r(\alpha, i)}) = \{1\}$ et $\psi_k \uparrow = F_{\alpha, i}$ on peut prouver l'égalité:

(9) $$K_{\alpha, i} = \mathrm{Ker}\, F_{\alpha, i}.$$

En plus de (7) on déduit donc une autre condition nécessaire ($\triangleleft$ signifiant sous-groupe invariant) :

(10) $$K_{\alpha, i} \triangleleft \mathrm{Ker}\, \Delta,$$

pour que la représentation irréductible Δ de $P(k)$ apparaisse dans la décomposition de $F_{\alpha, i}$; sa multiplicité $\mu_{k, \alpha, i}$ est alors donnée par la relation de Frobenius qui se simplifie à :

(11) $$\mu_{k, \alpha, i} = |P_{k, r(\alpha, i)}|^{-1} \sum_{g \in P_{k, r(\alpha, i)}} \mathrm{tr}\, \Delta(g),$$

où $|G|$ signifie le nombre d'élément du groupe G. [Notons que $P(k)$ étant une extension centrale d'un groupe fini P_k par un groupe abélien non nécessairement fini, ses représentations irréductibles Δ sont de dimension finie $= \dim \Delta$]. Dans le cas particulier $K_{\alpha, i} = P_{k, r(\alpha, i)}$, on obtient :

(12) $$\left\{\begin{array}{ll} P_{k, r(\alpha, i)} \triangleleft P_k; & \mathrm{Im}\, k \cap \mathrm{Ker}\, \Delta = \{1\}, \\ P_{k, r(\alpha, i)} \triangleleft \mathrm{Ker}\, \Delta & \Rightarrow \quad \mu_{k, \alpha, i} = \dim \Delta. \end{array}\right.$$

Dans tous les cas il faut faire le produit tensoriel de $F_{\alpha, i}$ par $V(P_k)$ et la somme directe $\bigoplus_{\alpha, i}$ pour étudier la décomposition de la représentation de vibration.

Par définition de $P(k)$ les représentations irréductibles de G_k sont données par les représentations permises de $P(k)$. Dans un travail à paraître nous classons les $P(k)$ (à une isomorphie près) et leur représentations permises, ainsi que les noyaux et images de celles-ci.

(*) Remise le 28 juin 1982, acceptée le 5 juillet 1982.

[1] H. Poulet et J. P. Mathieu, *Spectre de vibration et symétrie des cristaux*, Gordon and Breach, New York, 1970.

[2] H. W. Streitwolf, *Group Theory in Solid State Physics*, MacDonald, London, 1971.

[3] J. P. Serre, *Représentations linéaires des groupes finis*, Hermann, Paris, 1967.

[4] C. W. Curtis et J. Reiner, *Representation Theory of Finite Groups and Associative Algebras*, J. Wiley et Sons, New York, 1962.

[5] J. Mozrzymas, *Comptes rendus*, 291, série B, 1980, p. 71.

Institut des Hautes Études scientifiques, 35, route de Chartres, 91440, Bures-sur-Yvette
et *Institut de Physique théorique,*
Université de Wrocław, ul. Cybulskiego 36, 50205 Wrocław, Pologne.