CRISTALLOGRAPHIE. — Structure des classes de conjugaison d'un groupe cristallographique.

Note de **Louis Michel,** Membre de l'Académie et **Jan Mozrzymas.**

Remise le 16 avril 1984, acceptée le 4 juin 1984.

Nous montrons les relations et les différences entre les présentations d'un groupe cristallographique G (dans un nombre arbitraire n de dimensions) avec des translations non primitives et les systèmes de facteur. Nous donnons des formules explicites pour ghg^{-1}, $ghg^{-1}h^{-1}=[g, h]$, g, h étant un couple arbitraire d'éléments de G. Nous en obtenons la cardinalité des classes de conjugaisons de G, l'ordre de leurs éléments et une expression pour ν_β le nombre de classes auxquelles appartiennent les éléments $\langle t, \beta\rangle \in G$ correspondant à un élément β du groupe ponctuel.

CRYSTALLOGRAPHY. — Structure of the Conjugation Classes of a Crystallographic Group.

We first study the relations and differences between the presentations of a n-dimensional crystallographic group G by non-primitive translations and by factor system (cocycles). This leads us to a simple lemma: when $-I\in P$ *(the point group)* $2.\,H^2_\Delta(P, T)=0$ *where* $H^2_\Delta(P, T)$ *is the second cohomology group of* P *with the action* Δ *on* T. *For any pair g, h of elements of* G, *we establish general formulae for* ghg^{-1} *and* $ghg^{-1}h^{-1}=[g, h]$. *Then we compute the cardinality of a conjugation class and the ordre of its elements, both as the product of two numbers. If* ν_β *is the number of conjugation classes to which belong the different elements* $\langle t, \beta\rangle\in G$ *corresponding to a given* $\beta\in P$, *and if* $C_p(\beta)$ *is the centralizer of* β *in* P, *we prove the theorem:* ν_β *is the number of orbits of the natural action of* $C_p(\beta)$ *on the set of elements of the quotient* $T/(I-\beta)T$. *This is an action on the group* $T/(I-\beta)T$ *only when the subgroup of* G *generated by* $C_p(\beta)$ *and* T *is symmorphic.*

Conjugation classes of the image of a linear representation of G *are images of its conjugation classes. We apply this method elsewhere for studying the structure of the images of space group unitary representations and we have already emphasized the role of these representation images in physics* ([1], [2], [3]).

Un groupe cristallographique G dans l'espace euclidien à n-dimensions est un sous-groupe fermé du groupe euclidien $E(n)\sim R^n \rtimes O(n)$ dont l'intersection $T=G\cap R^n$ est isomorphe à Z^n ($\rtimes$ signifie produit semi-direct). Le quotient $P=G/T$ est appelé groupe ponctuel. La loi du groupe de $E(n)$ est notée :

$$(1)\qquad s,\ t\in R^n,\qquad \alpha,\ \beta\in O(n),\qquad (s, \alpha)(t, \beta)=(s+\alpha t, \alpha\beta).$$

En général G n'est pas un produit semi-direct (on dit aussi « symorphique ») : $G=T\times P$; on doit alors choisir des représentatifs $(v(\alpha), \alpha)$ des classes translatées de T; les $v(\alpha)$ sont appelées translations non primitives, car elles ne font pas partie de T. On fait toujours la convention $v(I)=0$ où I est l'unité de P. Par une translation c de l'origine, $v(\alpha)$ est changé en $v'(\alpha)=v(\alpha)+(I-\alpha)c$. On peut aussi donner la loi du groupe de G sous la forme :

$$(2)\qquad \langle s, \alpha\rangle\langle t, \beta\rangle=\langle s+\alpha t+f(\alpha, \beta), \alpha\beta\rangle,$$

où f est un 2 cocycle (on dit aussi facteur) $\in Z^2_\Delta(P, T)$ et à valeur dans T (Δ définit l'action de P sur T). En terme de translations non primitives :

$$(3)\qquad f(\alpha, \beta)=v(\alpha)-v(\alpha\beta)+\alpha v(\beta).$$

La fonction f est indépendante du choix d'origine. Comme les $v(\alpha)$ elle dépend du choix des représentatifs des classes de translatées de T. Changer ces représentatifs change f par un cobord $\in B^2_\Delta(P, T)$. Le groupe de cohomologie $H^2_\Delta(P, T)=Z^2_\Delta(P, T)/B^2_\Delta(P, T)$ donne les extensions G de P par T avec l'action Δ.

0249-6305/84/02990387 $ 2.00

Soit $n(\alpha)$ l'ordre de $\alpha \in P$; on introduit l'opérateur :

$$N(\alpha) = \sum_{j=0}^{n(\alpha)-1} \alpha^j, \tag{4}$$

donc $(I-\alpha)\,N(\alpha) = N(\alpha)\,(I-\alpha) = 0$.

Considérons par exemple $-I$, la symétrie par rapport à l'origine. De $(-I)^2 = I$ l'équation (3) implique $f(-I, -I) = 0$; on peut donc choisir l'origine telle que $v(-I) = 0$; on en déduit alors en utilisant à nouveau (3) :

$$2v(\alpha) = f(\alpha, -I) - f(-I, \alpha) \in T, \tag{5}$$

d'où le

Lemme. — *Lorsque le groupe ponctuel* P *contient* $-I$, *les éléments du groupe de cohomologie* $H^2_\Delta(P, T)$ *sont tous d'ordre* 2, *c'est-à-dire* $H^2_\Delta(P, T) \sim Z_2^m$ *pour un certain* m.

En utilisant dans groupe les notations :

$$g * h = ghg^{-1} \quad \text{et} \quad [g, h] = ghg^{-1}h^{-1} \quad \text{(commutateur)}, \tag{6}$$

$$\langle s, \alpha \rangle * \langle t, \beta \rangle = \langle (I - \alpha * \beta)s + \alpha t + f_*(\alpha, \beta), \alpha * \beta \rangle, \tag{7}$$

$$[\langle s, \alpha \rangle, \langle t, \beta \rangle] = \langle (I - \alpha * \beta)\,s + (\alpha - [\alpha, \beta])\,t + \underline{f_*}(\alpha, \beta), [\alpha, \beta] \rangle, \tag{8}$$

où :

$$f_*(\alpha, \beta) = f(\alpha, \beta) - f(\alpha * \beta, \alpha), \qquad \underline{f_*}(\alpha, \beta) = f_*(\alpha, \beta) - f([\alpha, \beta], \beta). \tag{9}$$

Le groupe G′ engendré par les commutateurs de G est aussi un groupe cristallographique dont le groupe ponctuel est P′. S'il existe un élément $\alpha \in P$ dont le spectre ne contient pas 1, en faisant $\beta = \alpha$ dans (8) on voit que G′ contient un sous-groupe des translations $(I-\alpha)\,T$ d'index fini $(= |\det I - \alpha|)$ dans T. Dans ce cas le nombre des représentations irréductibles de dimension 1 de G est fini.

Nous notons $[g]$ la classe de conjugaison de g dans G. Si H est sous-groupe de G et $g \in H$, nous notons $[g]_H$ la classe de conjugaison de g dans H. L'équation (7) nous permet d'étudier la structure de ces classes de conjugaison, CC, pour les groupes cristallographiques. Dans une représentation linéaire les images des CC sont des CC de l'image. On obtient ainsi des renseignements sur la structure des CC de ces images. Nous avons expliqué par ailleurs le rôle des images des représentations unitaires des groupes cristallographiques en physique ([1], [2], [3]).

En notant $C_G(g)$ le centralisateur de g dans G, c'est-à-dire le groupe formé des éléments de G commutant avec g, on sait que la cardinalité $|[g]|$ de la classe $[g]$ est l'index $|G/C_G(g)|$ de $C_G(g)$ dans G. Nous utiliserons les notations suivantes :

$$\operatorname{Im}(I-\alpha) = (I-\alpha)\,T, \qquad \ker(I-\alpha) = \{\, t \in T,\ (I-\alpha)\,t = 0 \,\}, \tag{10}$$

Par définition $C_p(\langle t, \beta \rangle)$ est l'ensemble des $\alpha \in C_p(\beta)$ (c'est-à-dire $[\alpha, \beta] = I$) tels qu'il existe un élément de la forme $\langle s, \alpha \rangle$ commutant avec $\langle t, \beta \rangle$; on vérifie aisément que s est défini modulo $\mathrm{Ker}(\mathrm{I}-\beta)$ et on obtient pour la cardinalité de la classe $[\langle t, \beta \rangle]$:

$$(11) \qquad |[\langle t, \beta \rangle]| = \left|\frac{\mathrm{T}}{\mathrm{Ker}(\mathrm{I}-\beta)}\right| . \left|\frac{\mathrm{P}}{\mathrm{C}_p(\langle t, \beta \rangle)}\right| .$$

En désignant par « g » le sous-groupe engendré par l'élément g d'un groupe, on peut écrire pour l'ordre des éléments de la classe $[\langle t, \beta \rangle]$:

$$(12) \qquad n(\langle t, \beta \rangle) = n(\beta) . |« g »| \qquad \text{où} \quad g = \sum_{j=0}^{n(\beta)-1} f(\beta^j, \beta) = \mathrm{N}(\beta)\, v(\beta) = \tau(\beta),$$

en appelant τ l'homomorphisme $\mathrm{G} \xrightarrow{\tau} \mathrm{T}$ dit de transfert [4].

Nous notons $\langle \mathrm{T}, \beta \rangle = \{\langle t, \beta \rangle, t \in \mathrm{T}\}$ l'ensemble des éléments de la classe translatée de T par un élément de la forme $\langle t, \beta \rangle \in \mathrm{G}$. Soit ν_β le nombre de CC avec lesquelles l'ensemble $\langle \mathrm{T}, \beta \rangle$ a une intersection non vide. Soit $[\beta]$ la classe de conjugaison de β dans P. L'ensemble $\bigcup_{\beta \in [\beta]} \langle \mathrm{T}, \beta \rangle$ est une union disjointe de classes de conjugaison $[\langle t_k, \beta \rangle]$, $k \in \mathrm{K}_\beta$ ou K_β est un ensemble d'indice. Nous allons montrer que sa cardinalité $|\mathrm{K}_\beta| = \nu_\beta$ et prouver un théorème permettant de calculer ce nombre. Auparavant rappelons que si π est l'homomorphisme $\mathrm{G} \xrightarrow{\pi} \mathrm{P}$ de noyau T et si $\mathrm{P}_1 < \mathrm{P}$ (se lit P_1 sous-groupe de P) alors $\pi^{-1}(\mathrm{P}_1)$ est sous-groupe équitranslation de G. Si $\mathrm{P}_2 < \mathrm{P}_1$ et si $\pi^{-1}(\mathrm{P}_1)$ est symorphique, alors $\pi^{-1}(\mathrm{P}_2)$ est symorphique.

THÉORÈME. — *ν_β est le nombre d'orbites dans l'action naturelle du centralisateur* $\mathrm{C}_p(\beta)$ *sur l'ensemble des éléments du groupe quotient* $\mathrm{T}/\mathrm{Im}(\mathrm{I}\text{-}\beta)$. *Cette action devient une action sur le groupe* $\mathrm{T}/\mathrm{Im}(\mathrm{I}\text{-}\beta)$ *quand* $\pi^{-1}(\mathrm{C}_p(\beta))$ *est symorphique.*

$\langle \mathrm{T}, \beta \rangle$ a une intersection non vide avec toute classe de conjugaison contenue dans $\bigcup_{\beta \in [\beta]} \langle \mathrm{T}, \beta \rangle$ ce qui montre que les deux définitions données de ν_β sont équivalentes. Considérons une des intersections de $\langle \mathrm{T}, \beta \rangle$ avec une classe $[\langle t_k, \beta \rangle]$; c'est la classe de conjugaison :

$$[\langle t_k, \beta \rangle]_{\pi^{-1}(\mathrm{C}_p(\beta))} = \langle \mathrm{T}, \beta \rangle \cap [\langle t_k, \beta \rangle]_{\mathrm{G}}.$$

Par l'équation (7) on peut écrire symboliquement l'action du groupe $\pi^{-1}\mathrm{C}_p(\beta)$ sur $\langle \mathrm{T}, \beta \rangle$:

$$(13) \qquad \alpha \in \mathrm{C}_p(\beta), \qquad \langle \mathrm{T}, \alpha \rangle * \langle t_k, \beta \rangle = \langle \mathrm{Im}(\mathrm{I}\text{-}\beta) + \alpha\, t_k + f_-(\alpha, \beta), \beta \rangle,$$

où :

$$(13') \qquad f_-(\alpha, \beta) = f(\alpha, \beta) - f(\beta, \alpha) = (\mathrm{I}\text{-}\beta)\, v(\alpha) - (\mathrm{I}-\alpha)\, v(\beta).$$

Cette relation définit une action du groupe de $\mathrm{C}_p(\beta)$ sur les translatés de $\mathrm{Im}(\mathrm{I}-\beta)$ dans T, donc sur l'ensemble quotient $\mathrm{T}/\mathrm{Im}(\mathrm{I}-\beta)$. En effet il suffit de comparer $\langle \mathrm{T}, \alpha_1 \rangle * (\langle \mathrm{T}, \alpha_2 \rangle * \langle t_k, \beta \rangle)$ et $\langle \mathrm{T}, \alpha_1 \alpha_2 \rangle * \langle t_k, \beta \rangle$ et si $\pi^{-1}(\mathrm{C}_p(\beta))$ n'est pas symorphique, $v(\alpha)$ ou $v(\beta) \neq 0$ et, comme le montrent les équations (13), l'action de $\mathrm{C}_p(\beta)$ sur $\mathrm{T}/\mathrm{Im}(\mathrm{I}-\beta)$ ne respecte pas la loi de groupe.

Nous donnons des applications de ces méthodes générales dans le prétirage [5].

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

[1] L. MICHEL, Invariants polynomiaux des groupes de symétrie moléculaire et crystallographique, *Proc. 5th International Colloquium on Group Theoretical Methods in Physics*, Montreal, 1976, Academic Press, 1977, p. 75-91.

[2] L. MICHEL et J. MOZRZYMAS, Applications of Morse Theory to the Symmetry Breaking in the Landau Theory of Second Order Phase Transitions, *Lecture Notes in Physics*, Springer Verlag, Berlin, 79, 1978, p. 447-461.

[3] L. MICHEL et J. MOZRZYMAS, Weak Equivalence of Irreducible Representations of Little Space Groups, *Comm. Math. Chem., Match.*, 10, 1981, p. 223-225.

[4] C. W. CURTIS et J. REINER, *Methods of Representation Theory, with Applications to Finite Groups and Orders*, I, John Wiley & Sons, New York, 1981.

[5] L. MICHEL et J. MOZRZYMAS, Class-Cardinality-Order Decomposition (COD) of a n-dimensional Space Group, *Institute of Theoretical Physics*, University of Wroclaw, Wroclaw, Poland, April 1984 (Preprint).

Institut des Hautes Études scientifiques,
91440 *Bures-sur-Yvette.*