C. R. Acad. Sc. Paris, t. 307, Série I, p. 905–910, 1988

Cristallographie/ *Crystallography*

Les concepts fondamentaux de la cristallographie

Louis MICHEL et Jan MOZRZYMAS

Résumé – Nous introduisons un nouvel ensemble de définitions des concepts de la cristallographie en dimension n. Il est basé sur les propriétés générales des actions de groupe. Enfin nous précisons comment on détermine le système cristallographique et la classe de Bravais d'un groupe cristallographique.

Fondamental Concepts of Crystallography.

Abstract – *We introduce a new set of definitions of the fundamental concepts of n-dimensional crystallography. It is based on general properties of group actions. We also show how to determine the crystallographic system and the Bravais class of a crystallographic group.*

Abridged English Version – In the action of a group G on the mathematical structure M, we denote by $g.m$ the transform of $m \in M$ by $g \in G$. The set of transforms of m, $G.m$, is the orbit of m. The set $G_m = \{g \in G, g.m = m\}$ is the stabilizer of m; it is a subgroup of G. Since $G_{g.m} = gG_mg^{-1}$, the set of stabilizers of the points of an orbit is a conjugation class $[H]_G$ of G subgroups, (H is one of the stabilizers). There is a natural notion of equivalence of group actions (see however the second notion of weak equivalence in the French text). Orbits are equivalent when they have same set of stabilizers. An orbit with set of stabilizers $[H]_G$ is often denoted by $G : H$. Finally, a *stratum* $S_{[H]}$ is the disjoint union of all orbits of an equivalence class. For instance the Wyckoff positions of [1] are the strata of the action of a crystallographic group on the Euclidean space $\mathcal{E}_3$. We denote respectively by $M|G$, $M||G$ the set of orbits and strata existing in the action of G on M. So there is a natural injective map from $M||G$ into the set of conjugation classes of G-subgroups (see (1)). There is a natural partial order on the set of conjugation classes of finite G-subgroups. The injective mapφ of (1) induces an order on $M||G$. When the stabilizers are compact (this includes finite), there is a unique minimal symmetry stratum, open dense, the generic one; the maximal symmetry strata are closed [8],[9].

A lattice $L_n < R^n$ ($<$ reads "closed subgroup") is a discrete, closed subgroup of the translation group R^n of $\mathcal{E}_n$, generated (by additions and substractions) from a basis $\{b_i\}$ of vectors of R^n. Let $\{e_i\}, e_i.e_j = \delta_{ij}$ an orthonormal basis of R^n and b the matrix of components of the basis vectors: its matrix elements are $b_{ij} = b_i.e_j$. Then $b \in GL_n(R)$ and every element of $GL_n(R)$ defines a lattice basis. All possible basis matrices of L_n are $mb, m \in GL_n(Z)$ (see (2)). So $\mathcal{L}_n$ the set of lattices of R^n, is the orbit $\mathcal{L}_n = GL_n(R) : GL_n(Z)$. The Grammian (matrix of the scalar products of the basis vectors) of b has for matrix elements $b_i.b_j$ and can be identified with the positive definite quadratic form $bb^\top$. We denote by $\mathcal{Q}_n$ the set of positive definite $n \times n$ quadratic forms, by $L_n^0 = O_n.L_n$ the orbit of lattices transformed from L_n by O_n, the orthogonal group, and by $\mathcal{L}_n^0$ the set of L_n^0's; this is the orbit space $\mathcal{L}_n^0|O_n$ (see(4)) and also the set of double cosets $GL_n(Z) \setminus GL_n(R) / O_n$: indeed the set of all bases of all lattices in L_n^0 is the double coset (5). Double cosets are the ors of the action of the direct product $GL_n(Z) \times O_n$ acting on $GL_n(R)$ by left and right multiplication. We denote by π_z, π_o the canonical projection of $GL_n(Z) \times O_n$ on its factors. The symmetry of the lattices $\in \mathcal{L}_n^0$ is given by the conjugation class of stabilizers $[H]_{GL_n(Z)\times O_n}$ which are called *holohedries*; they are finite groups. The *crystallographic system* and *Bravais class* of the lattice L_n

Note présentée par Louis MICHEL

are respectively defined by the conjugation classes $[\pi_o(H)]_{O_n}$ and $[\pi_z(H)]_{GL_n(Z)}$. We establish the equivalent definitions: the *crystallographic systems are the strata* $\mathcal{L}_n || O_n$ and the *Bravais classes are the strata* $\mathcal{Q}_n^z || GL_n(Z)$ where $\mathcal{Q}_n^z$ is the set of integral positive definite quadratic forms, and the action of $GL_n(Z)$ on them is defined in (8).

A crystallographic group G is a closed subgroup of the Euclidean group E_n whose intersection with the translations is a lattice $L_n = G \cap R^n$. The quotient group $G/L_n = P$ is called the *point group*; it acts effectively on L_n, the action is defined by the injective homomorphism $P \xrightarrow{\iota} \mathrm{Aut}\, L_n = GL_n(Z)$. Any finite subgroup of $GL_n(Z)$ can be a point group; the conjugation class $[P]_{GL_n(Z)}$ is called an *arithmetic class*. By the application ϕ defined in lemma 2, we obtain the conjugation class $[P]_{O_n}$, called the *geometric class* of P. The *crystallographic class* of G is the set of E_n subgroups conjugate to G by an element of $aff_n{}^+$, the connected affine group. There is an obvious map α from $\{CC\}$, the set of cristallographic classes, to $\{CA\}$, the set of arithmetic classes. We can consider the set $\mathcal{Q}_n^{[P]}$ of the quadratic forms invariant by any group of a given arithmetic class $[P]_{GL_n(Z)}$; this is a union of $GL_n(Z)$ orbits: it contains a unique minimal stratum which is the Bravais class $\gamma([P]_{GL_n(Z)})$ of the arithmetic class $[P]_{GL_n(Z)}$. In the text we give an explicit construction of $\beta = \gamma \circ \alpha$ in diagram 1, and we give a new and explicit proof of its factorization.

Already in dimension 3, there does not exist a map from the set $\{CG\}$ of geometric classes to $\{SC\}$, the set of crystallographic systems. Another notion of crystallographic system is often made in the literature; its definition is *ad hoc* for the existence of a map from $\{SC\}$, but with no map from $\{CB\}$. When more emphasis is given to the macroscopic physical properties of crystals, depending very little on the crystal lattice and essentially on the geometric class, it is convenient to define the concept of "crystal family" (as in [1-3]): it is the smallest disjoint union of crystallographic systems, such that there exists a map from the set of geometric classes to that of crystal families, which makes diagram 1 to contain only commutative loops of maps. These physical considerations are irrelevant for n-dimension crystallography. In this note, we have emphasized the natural concepts from the geometrical point of view: group actions play the main role and guide the esthetics.

1. INTRODUCTION. – La majorité des concepts utilisés pour classer et décrire la symétrie des cristaux furent introduits au XIX^e siècle sans être bien définis mathématiquement. Dans la dernière édition des "tables internationales de cristallographie" [1], des définitions des concepts utilisés sont enfin données. Elles doivent pouvoir être données pour toute dimension n de l'espace; ce qui était proposé dans deux traités [2],[3] antérieurs à [1], (et dans des articles préliminaires cités dans ces traités); ce n'est pas si facile comme le montre [4]: deux des auteurs avaient chacun proposé une définition des "systèmes cristallographiques", le troisième avait montré qu'elle n'était pas valide pour $n = 7$. Plusieurs autres livres ont abordé cette étude (au moins partiellement): [5],[6],[7]. L'intérêt scientifique de posséder de telles définitions généralisant la situation à trois dimensions, est non seulement naturel pour les mathématiques, mais il est devenu important pour l'étude des cristaux modulés et des cristaux apériodiques récemment découverts. Ceux-ci peuvent être décrits comme projection ou intersection à trois dimensions de cristaux périodiques dans un espace de dimension $n > 3$.

Le but de cette note est de proposer un *nouvel ensemble de définitions* plus simple et plus naturel, car il est basé sur les propriétés générales des actions de groupes (que nous commençons par rappeler afin de rendre cette note lisible par le non spécialiste).

2. NOTATIONS ET RAPPEL DE DÉFINITIONS. – Nous notons R^n l'espace vectoriel à n dimensions, $GL_n(R)$ le groupe linéaire général réel: $GL_n(R) = \mathrm{Aut}\, R^n$, le groupe d'automorphismes de l'espace vectoriel R^n. Celui-ci devient un espace orthogonal lorsqu'on

le munit d'un produit scalaire défini positif; son groupe d'automorphismes est alors le groupe orthogonal $O_n < GL_n(R)$ (nous écrivons $<$ pour sous-groupe *fermé* et $\triangleleft$ pour sous-groupe fermé invariant). Nous notons $\mathcal{E}_n$ l'espace affine de dimension n, et Aff_n son groupe d'automorphismes; celui-ci est le produit semi-direct: $Aff_n = R^n \rtimes GL_n(R)$ où R^n est le groupe des translations sur $\mathcal{E}_n$. Lorsque $\mathcal{E}_n$ est muni d'une métrique, il devient un espace euclidien dont le groupe d'automorphismes est le groupe euclidien $E_n = R^n \rtimes O_n < Aff_n$. Un réseau de translations $L < R^n$ est engendré par n vecteurs linéairement indépendants de R^n par addition ou soustraction de vecteurs; il est isomorphe à Z^n, il est discret (et fermé) dans R^n.

Nous notons G le groupe de symétrie d'un cristal idéal (on fait abstraction de ses défauts et aussi de sa surface en le supposant d'extension infinie). Le groupe cristallographique $G < E_n$ (en physique: le groupe d'espace) est un sous-groupe discret (et fermé) du groupe euclidien qui contient un réseau de translations $L_n = G \cap R^n$; ainsi $L_n \triangleleft G$ et le quotient $G/L_n = P$ est appelé le groupe ponctuel. Si $G = L_n \rtimes P$ on dit qu'il est *symorphique*; la majorité des groupes cristallographiques ne le sont pas.

3. Actions de groupes. – L'action d'un groupe G sur une structure mathématique M dont le groupe d'automorphismes est $\mathrm{Aut}\, M$, est définie par l'homomorphisme $G \xrightarrow{f} \mathrm{Aut}\, M$. L'action est effective si $\mathrm{Ker}\, f$, le noyau de f, est trivial. Cette action s'étend naturellement aux sous-ensembles et aux sous-structures de M. Nous utilisons simplement la notation $g.m$ pour $f(g)m$, le transformé de $m \in M$ par $g \in G$. L'*orbite* $G.m$ est l'ensemble des transformés de m. Les éléments de G qui laissent fixe $m \in M$ forment un sous-groupe G_m appelé le stabilisateur de m (en physique on dit aussi le "petit groupe" de m). Par restriction, l'action $G \xrightarrow{f} \mathrm{Aut}\, M$ définit une action sur M pour tout sous-groupe H de G; alors $H_m = H \cap G_m$.

Dans l'action de G sur lui-même par automorphismes intérieurs, $G.x$ est la classe de conjugaison de x : $[x]_G \equiv \{gxg^{-1}, g \in G\}$ et le stabilisateur G_x est appelé le centralisateur de x. Pour l'action correspondante de G sur l'ensemble $\{\leq G\}$ de ses sous-groupes, l'orbite $G.H$ du sous-groupe H est la classe de conjugaison $[H]_G$ de H. Le stabilisateur de H est appelé le *normalisateur* de H et noté $N_G(H)$; c'est le plus grand sous-groupe de G dont H est sous-groupe invariant. Le *centralisateur* de H est $C_G(H) = \cap_{x \in H} G_x$. On a: $C_G(H) \triangleleft N_G(H)$.

Deux actions $G \xrightarrow{f_1} \mathrm{Aut}\, M$, $G \xrightarrow{f_2} \mathrm{Aut}\, M$ sont équivalentes, $(G, f_1, M) \approx (G, f_2, M)$, s'il existe $\alpha \in \mathrm{Aut}\, M$ tel que $\forall g \in G, f_2(g) = \alpha \circ f_1(g) \circ \alpha^{-1}$. Lorsque M est un espace vectoriel, alors $\mathrm{Aut}\ M$ est le groupe linéaire $GL(M)$ et f_1, f_2 définissent deux représentations linéaires de G sur M; la définition de l'équivalence des représentations linéaires n'est qu'un cas particulier de celle des actions de groupe. Mais on a parfois besoin d'une notion plus faible d'équivalence: les actions f_1, f_2 de G sur M sont faiblement équivalentes, $(G, f_1, M) \sim (G, f_2, M)$ quand les images $\Im f_1 = f_1(G)$, $\Im f_2 = f_2(G)$ sont des sous-groupes conjugués de $\mathrm{Aut}\ M$. Lorsque nous parlerons d'équivalence d'actions de groupe, il s'agira d'équivalence forte $\approx$, sauf mention explicite du contraire.

On montre aisément que $G_{g.m} = gG_mg^{-1}$ et l'on en déduit que l'ensemble des stabilisateurs d'une orbite est une classe de conjugaison $[G_m]_G$ de sous-groupes. On montre aussi que deux orbites sont équivalentes (c'est-à-dire les actions de G sur ces deux orbites sont équivalentes) si, et seulement si, leurs stabilisateurs forment la même classe de conjugaison. Un prototype d'orbite de classe $[H]_G$ est obtenu en considérant l'action de G par translation à gauche $xH \mapsto gxH$), sur les classes à gauche xH du sous-groupe H. Cette action est équivalente à l'action $Hx \mapsto Hxg^{-1}$ sur les classes à droite. Nous notons souvent $G : H$ une orbite de ce type.

La réunion des orbites équivalentes, ayant même classe $[H]_G$ de stabilisateurs, forme une *strate* que nous dénotons $S_{[H]}$. Par exemple les positions de Wyckoff (voir [1]) correspondent aux différentes strates de l'action d'un groupe cristallographique G sur l'espace euclidien $\mathcal{E}_3$. L'ensemble des orbites et l'ensemble des strates sont notés respectivement $M|G$ et $M||G$ et sont appelés *espace des orbites, espace des strates.* Nous notons $\{[\leq G]_G\}$ l'ensemble des classes de conjugaison des sous-groupes de G. Pour toute action de G il y a donc une injection naturelle:

$$M||G \xrightarrow{\varphi} \{[\leq G]_G\} \tag{1}$$

Il existe un ordre partiel naturel (par inclusion à une conjugaison près) sur l'ensemble des classes de conjugaison des sous-groupes finis d'un groupe et, plus généralement, sur $\{[\leq G]_G\}$ pour les groupes compacts, ainsi que pour ceux que nous considérons ici. Par l'équation (1), un ordre partiel correspondant est défini sur $M||G$, l'ensemble des strates.

Dans le cas de l'action indéfiniment différentiable d'un groupe compact, les orbites sont fermées et il existe sur $M||G$ une unique strate minimale [8]; elle est ouverte dense et nous l'appelons la strate générique. Il peut exister plusieurs strates maximales; elles sont fermées. Ces résultats s'étendent aussi au cas où tous les stabilisateurs sont compacts [9] (en particulier s'ils sont finis); c'est par exemple le cas de l'action d'un groupe cristallographique sur l'espace euclidien.

4. Holohédrie et système cristallographique d'un réseau. – Par raison de simplicité nous n'étudions ici que les réseaux de translations, mais il est aisé d'étendre ces considérations aux réseaux cristallins dans l'espace euclidien en faisant jouer à E_n et Aff_n le rôle que joueront dans cette section O_n et $GL_n(R)$. Choisissons une fois pour toute une base orthonormale, $\{e_i\}, e_i.e_j = \delta_{ij}$, dans R^n. Ce choix définit une bijection entre $GL_n(R)$ et l'ensemble $\mathcal{B}_n$ des bases de R^n; en effet l'ensemble $\{b_i\}$ des vecteurs d'une base peut être défini par la matrice b des coordonnées: $b_{ij} = b_i.e_j$, et dire que celle-ci est inversible est équivalent à dire que les vecteurs b_i sont linéairement indépendants.

Chaque base $b \in \mathcal{B}_n$ définit un réseau L_n dont toute autre base est de la forme:

$$L_n = \{\sum_{i=1}^{n} n_i b_i,\ n_i \in Z\}; \quad b_i' = \sum_{j=1}^{n} m_{ij} b_j,\ m_{ij} \in GL_n(Z)\,. \tag{2}$$

La seconde relation montre que $\mathcal{L}_n$, l'ensemble des réseaux en dimension n, est la variété:

$$\mathcal{L}_n = GL_n(R) : GL_n(Z) \equiv \mathcal{B}_n|\,GL_n(Z)\,. \tag{3}$$

Nous notons L_n^0 l'ensemble des réseaux obtenus de L_n par une transformation orthogonale; ce sont d'eux que nous voulons classer les symétries. Nous désignons par $\mathcal{L}_n^0$ leur ensemble:

$$\mathcal{L}_n^0 = \mathcal{L}_n|O_n. \tag{4}$$

Les systèmes cristallographiques des réseaux sont les strates $\in \mathcal{L}_n||O_n$ de l'action de O_n sur $\mathcal{L}_n$, la variété des réseaux.

Avec les équations (2),(3) nous en déduisons que $\mathcal{L}_n^0$ est l'ensemble des doubles classes: $GL_n(Z) \setminus GL_n(R) \,/ O_n$. En effet, si b est une base de L_n l'ensemble des bases des réseaux de L_n^0 est la double classe:

$$GL_n(Z)\, b\, O_n \equiv \{mbr^{-1}, \forall m \in GL_n(Z), \forall r \in O_n\}. \tag{5}$$

On peut encore la considérer comme une orbite du produit direct $GL_n(Z) \times O_n$ agissant sur $GL_n(R)$ par l'action $b \mapsto mbr^{-1}$. Le stabilisateur H de b est le sous-groupe $\{(m, r) \in$

$GL_n(Z) \times O_n, mbr^{-1} = b\}$ ou encore $m = brb^{-1}$. Il est isomorphe au sous-groupe de $GL_n(R)$ intersection des sous-groupes fermés $GL_n(Z)$ (qui est discret) et bO_nb^{-1} (qui est compact); donc H est fini. Soient π_z et π_o les projections canoniques de $GL_n(Z) \times O_n$ sur ses facteurs: $\pi_z(m,r) = m$, $\pi_o(m,r) = r$. La signification géométrique de H est claire: $\pi_o(H)$ est le groupe des transformations orthogonales r qui transforment le réseau L_n en lui-même puisque toute base $m'b$ de L_n est transformée dans la base $m'br^{-1} = m'mb$. Le stabilisateur H est appelé l'*holohèdrie* du réseau. Il est défini à une conjugaison près dans $GL_n(Z) \times O_n$; de plus on a les isomorphismes: $\pi_z(H) \sim H \sim \pi_o(H)$. Nous l'avons déjà vu: la classe de conjugaison $[\pi_o(H)]_{O_n}$ définit le système cristallographique du réseau L_n.

5. Classe de Bravais d'un réseau. – Similairement, la classe de conjugaison $[\pi_z(H)]_{GL_n(Z)}$ définit la *classe de Bravais* du réseau L_n. Nous voulons aussi définir les classes de Bravais comme les strates d'une action. Nous aurons besoin des deux lemmes, dont le premier est bien connu.

Lemme 1. – *Tout sous-groupe fini de $GL_n(R)$ est conjugué d'un sous-groupe de $O_n < GL_n(R)$.*

Lemme 2. – *Il existe une application naturelle ϕ des classes de conjugaison des sous-groupes finis de $GL_n(Z)$ dans celles de O_n.*

En effet, il y a une application naturelle des classes de conjugaison de $GL_n(Z) < GL_n(R)$ dans celles de $GL_n(R)$; si deux sous-groupes finis de O_n sont conjugués dans $GL_n(R)$, ils le sont dans O_n (utiliser la décomposition polaire de l'opérateur de conjugaison); on complète la preuve en utilisant le lemme 1. On vérifie que:

$$\phi([\pi_z(H)]_{GL_n(Z)}) = [\pi_o(H)]_{O_n} \tag{6}$$

La restriction de ϕ aux classes de Bravais donne une application $\tilde{\phi}$ de $\{CB\}_n$, l'ensemble des classes de Bravais, sur $\{SC\}_n$, l'ensemble des systèmes cristallographiques à n dimensions. Mais il serait faux de croire que toutes les classes de conjugaison de $GL_n(Z)$ dans l'image réciproque par ϕ des classes de conjugaison dans O_n définissant les systêmes cristallographiques, soient toujours des classes de Bravais!

Etant donnée une base b du réseau L_n, $bb^\top$, dont les éléments sont $(bb^\top)_{ij} = b_i.b_j$, est une matrice symétrique (= forme quadratique) définie positive, souvent appelée le "grammian" des n vecteurs b_i. Nous notons $\mathcal{Q}_n$ l'ensemble de ces formes quadratiques; c'est un cône convexe puisque la somme de deux élements de $\mathcal{Q}_n$ est dans $\mathcal{Q}_n$. La décomposition polaire des matrices inversibles: $b = \sqrt{bb^\top}s = s\sqrt{b^\top b}$, $s \in O_n$ montre que:

$$\mathcal{Q}_n = GL_n(R) : O_n = GL_n(R)\,|O_n; \tag{7}$$

c'est-à-dire que $\mathcal{Q}_n$ peut être identifié à l'orbite des classes à gauche de O_n dans $GL_n(R)$ ou encore à l'espace des orbites de O_n agissant par multiplication à gauche sur $GL_n(R)$. L'action de $GL_n(Z) \times O_n$ sur $b \in GL_n(R)$ peut être transportée sur $bb^\top \in \mathcal{Q}_n$. Le groupe O_n agit trivialement et $GL_n(Z)$ agit par:

$$\forall m \in GL_n(Z), \quad bb^\top \mapsto mbb^\top m^\top; \tag{8}$$

cette orbite de $GL_n(Z)$ est l'ensemble des formes quadratiques associées à toutes les bases de tous les réseaux de L_n^0. Ce qui nous donne une nouvelle définition: *les classes de Bravais des réseaux sont les strates $\mathcal{Q}_n||GL_n(Z)$* de l'action (8), la forme $bb^\top$ étant associée à la base b de L_n. Nous notons respectivement $\mathcal{Q}_n^q, \mathcal{Q}_n^z$ les formes quadratiques rationnelles et intégrales. Remarquons que pour tout sous-groupe fini H de $GL_n(Z)$ et toute forme quadratique $bb^\top$ de $\mathcal{Q}_n, \mathcal{Q}_n^q, \mathcal{Q}_n^z$ respectivement, par l'opération $bb^\top \mapsto$

$\sum_{m\in H} mbb^\top m^\top$, on obtient une forme quadratique de même nature invariante par H. En prenant pour H un stabilisateur de l'action de $GL_n(Z)$ sur $\mathcal{Q}_n$, on montre que toute strate de $\mathcal{Q}_n || GL_n(Z)$ contient des éléments de $\mathcal{Q}_n^q$ et donc (en multipliant par le plus petit commun dénominateur des éléments), de $\mathcal{Q}_n^z$. D'où une nouvelle définition des *classes de Bravais: ce sont les strates* $\mathcal{Q}_n^z || GL_n(Z)$.

6. Classes cristallographiques, arithmétiques et géométriques. – Si G est un groupe cristallographique, groupe de symétrie d'un cristal idéal, l'orbite $E_3 : G$ correspond aux différentes positions du cristal. L'état du cristal dépend de la température, de la pression,...; son groupe de symétrie en dépend aussi. Mais tant qu'il n'y a pas de changement de phase, il s'agit de la même classe de symétrie cristalline; d'où la définition, inspirée par la physique, du concept: une *classe cristallographique est l'ensemble de sous-groupes cristallographiques de E_n, conjugués d'un même sous-groupe par des éléments de $aff_n{}^+$, le plus grand sous-groupe connexe de* Aff_n (la partie linéaire de ses éléments a un déterminant positif). Il est souvent plus intéressant (et c'est ce que nous faisons pour $n > 3$) de considérer la conjugaison dans tout le groupe affine; Bieberbach [10] a montré que ces classes se confondaient alors avec les classes d'isomorphie des groupes cristallographiques.

Puisque le réseau des translations est un sous-groupe abélien invariant, $L_n \triangleleft G$, du groupe cristallographique G, le groupe ponctuel $P = G/L_n$ agit sur L_n. Cette action est effective et est donné par l'homomorphisme injectif $P \xrightarrow{\iota} \mathrm{Aut}\, L_n = GL_n(Z)$. Le groupe ponctuel est donc un sous-groupe de l'holohèdrie H du réseau L_n. *Tout sous-groupe fini de $GL_n(Z)$ peut être un groupe ponctuel*; (par le lemme 1 nous savons qu'à une conjugaison près $P < O_n$). Ce n'est pas l'équivalence forte qui est utilisée ici, mais l'équivalence faible tempérée du fait que P est considéré non comme un groupe abstrait, mais comme un sous-groupe de O_n. Les classes d'équivalence des actions des groupes ponctuels sont donc les classes de conjugaison des sous-groupes finis de $GL_n(Z)$: on les appelle les *classes arithmétiques.* Il est donc possible qu'une classe arithmétique $[P]_{GL_n(Z)}$ contienne l'image de plusieurs classes d'équivalence sur Z, de représentations linéaires fidèles de P par des matrices de $GL_n(Z)$; le nombre de ces classes est l'ordre du groupe $N_{O_n}(P)/(P.C_{O_n}(P))$.

A toute classe arithmétique $[P]_{GL_n(Z)}$, il correspond par ϕ (voir (6)) une classe de conjugaison $[P]_{O_n}$ qui est appelée *classe géométrique.* Etant donnée une classe arithmétique et donc une action $P \xrightarrow{\iota} \mathrm{Aut}\, L_n$, les classes d'équivalence des extensions G, $G/L_n = P$ forment le second groupe de cohomologie $H^2_\iota(P, L_n)$, mais comme il a été montré, [11], [2], les extensions sur une même orbite de l'action $N_{GL_n(Z)}(\iota(P)) \cap GL_n(Z)$ sur $H^2_\iota(P, L_n)$ appartiennent à la même classe cristallographique. Il existe donc une application naturelle $\{CC\} \xrightarrow{\alpha} \{CA\}$ de l'ensemble des classes cristallographiques sur l'ensemble des classes arithmétiques ainsi que $\{CC\} \xrightarrow{\phi\circ\alpha} \{CG\}$ où $\{CG\}$ est l'ensemble des classes géométriques.

7. Classe de Bravais et système cristallographique d'un groupe d'espace. – On peut définir une application $\{CA\} \xrightarrow{\gamma} \{CB\}$, des classes arithmétiques sur les classes de Bravais en considérant l'ensemble $\mathcal{Q}_n^{[P]}$ des formes quadratiques positives invariantes par chacun des sous-groupes de la classe arithmétique $[P]_{GL_n(Z)}$; c'est une réunion d'orbites de $GL_n(Z)$ qui contient plusieurs strates si $[P]_{GL_n(Z)}$ n'est pas une classe de Bravais maximale; il existe une seule strata minimale [9]: c'est la classe de Bravais $\gamma([P]_{GL_n(Z)})$ correspondant à cette classe arithmétique ainsi que (par $\gamma\circ\alpha$) aux différentes classes cristallographiques qui lui correspondent.

Il n'est pas immédiat de définir directement l'application naturelle de $\{CC\}$ sur $\{CB\}$, l'ensemble des classes de Bravais. En effet, le réseau de translations L_n d'un groupe cristallographique G a non seulement une symétrie plus large que le groupe pontuel $P = G/L_n$, quand P n'est pas une holohèdrie, mais pour un G donné la symétrie de L_n peut être riche et variée: prendre comme exemple $P = \{I, -I\}$ où $-I$ est la réflexion par rapport à l'origine; on montre alors que $G = L_n \rtimes P$ et L_n peut-être n'importe quel réseau de translations. Ce qu'il faut faire, étant donné un groupe cristallographique G, c'est de considérer l'ensemble de tous les groupes de sa classe cristallographique (sous-groupes de E_n appartenant à $[G]_{aff_n^+}$) et l'ensemble $\mathcal{L}_{[G]}$ de leurs réseaux. L'ensemble de toutes les bases $\{b\}$ de $\mathcal{L}_{[G]}$ est une union disjointe d'orbites de $GL_n(Z) \times O_n$ qui se décompose en strates: l'une d'elle est est générique ([8],[9]); la classe de conjugaison $[H]_{GL_n(Z) \times O_n}$ des holohèdries de réseaux appartenant à cette strate générique détermine la classe de Bravais et le système cristallographique de G. Appliqué à l'ensemble des groupes cristallographiques cela définit une application $\{CG\} \xrightarrow{\beta} \{CB\}$ des classes cristallographiques sur les classes de Bravais, qui peut être composée avec $\tilde{\phi}$ (définie après (6)); voir le diagramme 1. {CC?

Il nous reste à montrer que cette application β se factorise à travers les classes arithmétiques, c'est-à dire qu'il existe une application $\{CA\} \xrightarrow{\gamma} \{CB\}$ telle que $\beta = \gamma \circ \alpha$. Puisque nous avons établi β à partir de l'ensemble des réseaux $\mathcal{L}_{[G]}$ des groupes appartenant à la classe cristallographique de G, il nous suffit de montrer que cet ensemble est le même pour tous les groupes cristallographiques d'une même classe arithmétique. Soit L_n le réseau de translations d'un groupe cristallographique G appartenant à la classe arithmétique $a = \alpha[G]$ et dont nous notons $[G_s]$ la classe du groupe symorphique. Soit k le plus petit commun multiple de l'ordre des éléments de $H_a^2(P, Z^n)$ (k est aussi le plus petit entier positif tel que $kH_a^2(P, Z^n) = 0$). Il y a un isomorphisme naturel $H_\iota^2(P, L_n) = H_\iota^1(P, R^n/L_n)$ [11]; les cocycles de ce dernier groupe sont appelés "translations non primitives". On peut écrire la loi de groupe de G, comme sous-groupe de E_n, avec des translations "non primitives" à valeurs dans le réseau $k^{-1}L_n$; en d'autres termes, parmi les sous-groupes d'indice k^n du groupe symorphique $(k^{-1}L_n) \rtimes P$ de la classe arithmétique a, et ayant le réseau de translation L_n on trouve des représentants de toutes les classes cristallographiques appartenant à la pré-image $\alpha^{-1}(a)$ de la classe arithmétique a.

$$\begin{array}{ccccc} \{CC\} & \xrightarrow{\alpha} & \{CA\} & \xrightarrow{\phi} & \{CG\} \\ & \searrow_{\beta} & \downarrow{\scriptstyle\gamma} & & \\ & & \{CB\} & \xrightarrow{\tilde{\phi}} & \{SC\} \end{array}$$

Diagramme 1.– Ensemble des classes: cristallographiques $\{CC\}$, arithmétiques $\{AC\}$, géométriques $\{GC\}$, de Bravais $\{CB\}$; systêmes cristallographiques: $\{CS\}$.

Par contre, pour $n > 2$, on ne peut pas factoriser $\tilde{\phi} \circ \gamma$ à travers les classes géométriques $\{CG\}$, car il n'existe pas d'application *naturelle* des classes géométriques sur les systèmes cristallographiques (voir diagramme 1). En effet , en dimension 3 déjà, l'image réciproque par ϕ de la classe géométrique $\bar{3}m = D_{3d}$ contient trois classes arithmétiques (de deux classes cristallographiques chacune): l'une, $R\bar{3}m$, est la classe de Bravais du système trigonal, les deux autres: $P\bar{3}m1$ et $P\bar{3}1m$ appartiennent au système hexagonal (dont la classe de Bravais est $P6/mm$).

Insatisfaits de cette situation, de nombreux cristallographes préfèrent privililégier les classes géométriques; en effet, tandis que le réseau cristallin joue un rôle essentiel dans la forme des cristaux et dans la nature de leurs défauts (ainsi que dans les transitions de phase du second ordre), il intervient peu dans leurs propriétés physiques macroscopiques, celles-ci étant surtout décrites par des tenseurs du groupe ponctuel. Un autre concept de "système cristallographique" est défini ou adopté, celui que nous avons utilisé ici étant appelé "French crystallographic system" dans [2] et dans [1], plus récent, "Bravais system". Cette autre définition d'un système cristallographique est *ad hoc* pour permettre l'existence d'une application surjective de $\{CG\}$, l'ensemble des classes géométriques, sur l'ensemble (que nous notons $\{?SC?\}$) de ces systêmes cristallographiques; le prix à payer est l'absence d'application depuis les classes de Bravais $\{CB\}$ sur $\{?SC?\}$. Ce qui est plus raisonnable, c'est de définir des "familles cristallographiques" (voir [1],[2],[3]), qui sont les plus petites réunions de systèmes crystallographiques (dans les deux sens où ils ont été définis) permettant de créer une application $\{SC\} \xrightarrow{\rho} \{FC\}$ sur l'ensemble $\{FC\}$ des familles cristallographiques, telle que l'application $\rho\circ\bar{\phi}\circ\gamma$ se factorise à travers $\{CG\}$, l'ensemble des classes géométriques.

Les considérations sur les propriétés physiques des cristaux perdent leur poids en cristallographie mathématique à n dimensions et le rôle du réseau ne doit pas être diminué. Dans ce domaine, ce sont les notions géométriques d'actions de groupes qui suggèrent les définitions naturelles (et esthétiques). C'est la voie suivie dans cette note.

Note remise le 28 novembre 1988, acceptée le 7 décembre 1988.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

[1] *International Tables for Crystallography*, Vol.A, édit. T. HAHN, Reidel Pub.Co, Dordrecht, 1983.
[2] H. BROWN, R. BÜLOW, J. NEUBÜSER, H. WONDRATSCHEK, H. ZASSENHAUS, *Crystallographic group of four dimensional space*, John Wiley and sons, New-York, 1978.
[3] R.L.E. SCHWARZENBERGER, *N-dimensional crystallography*, Pitman advanced publ. program, 1980.
[4] J. NEUBÜSER, W. PLESKEN, H. WONDRATSCHEK, An emendatory discussion for defining crystal systems. *Match*, 10, 1981, p. 77-96.
[5] J. MOZRZYMAS, (a) *Applications de la théorie des groupes à la physique*, (en polonais), 3e édition 1977; (b) *Introduction à la théorie moderne des groupes cristallographiques et de leurs représentations*, (en polonais) 1987, Editions scientifiques polonaises, Varsovie.
[6] P. ENGEL, *Geometric crystallography: an axiomatic introduction to crystallography*, D.Reidel Publ. Co, 1986.
[7] W. OPECHOWSKI, *Crystallographic and Metacrystallographic groups*, North-Holland, Amdsterdam, 1986.
[8] D. MONTGOMERY, C.T. YANG, The existence of a slice. *Ann. of Math.*, 65, 1957, p. 108-116.
[9] R. PALAIS, On the existence of slices for actions of non compact Lie groups, *Ann. of Math.*, 73, 1961, p. 295-323.
[10] L. BIEBERBACH, Über die Bewegungsgruppen der Euklidischen Räume Die Gruppen mit einem endlichen Fundamental Bereich, *Math. Ann.*, 72, 1912, p. 400-412.
[11] E. ASCHER, A. JANNER, Algebraic Aspects of Crystallography, *Helv. Phys. Acta*, 38, 1965, p. 551–572, *ibid.* II, *Commun. math. Phys.*, 11, 1968, p. 138–167.

I.H.E.S., 91440 Bures-sur-Yvette.
adresse permanente de J.M. : *Institut de Physique Théorique, Université de Wrocław, Cybulskiego 36, 50-205 Wrocław, Pologne.*

That document differs slightly from the reprint of this publication. Indeed it contains a paragraph suppressed by the printer because he was not able to present the figure as here, but he needed the full width of the page.