C. R. Acad. Sci. Paris, t. 322, Série II *b*, p. 223-230, 1996
Solides, fluides : structure, propriétés mécaniques et thermiques/
Solids, fluids: structure, mechanical and thermal properties
(Solides, fluides : propriétés électroniques, électriques, magnétiques et optiques/
Solids, fluids: electronic, electrical, magnetic and optical properties)

Extrema des fonctions sur la zone de Brillouin, invariantes par le groupe de symétrie du cristal et le renversement du temps

Louis MICHEL

IHES, 91440 Bures-sur-Yvette, France.
internet : michel@ihes.fr

Résumé. La plupart des propriétés physiques des cristaux sont exprimées par des fonctions définies sur la zone de Brillouin, invariantes par le groupe de symétrie du cristal et par le « renversement du temps ». En supposant que ces fonctions sont continues, que leurs extrema ne sont pas dégénérés et en négligeant s'il y a lieu les effets de spin, nous déterminons le nombre minimum des extrema de ces fonctions en précisant leur nature (minimum, maximum, points cols) et leur position (ce n'est pas toujours possible de le faire complètement). L'étude des 17 (respectivement 230) groupes cristallographiques en dimension 2 (resp. 3) est ramené finalement à l'étude de 4 (resp. 16) cas. Les résultats peuvent donc être donnés en un, (resp. deux) tableaux.

Extrema of functions on the Brillouin zone, invariant by the crystal symmetry group and time reversal

Abstract. *Most physical properties of crystals are described by functions on the Brillouin zone, invariant by the crystal symmetry group and by time reversal. If we assume that these functions are continuous, have non degenerate extrema and neglecting, if necessary, spin effects, we determine the minimum number of extrema of these functions, we precise their nature (maxima, minima, saddle points) and, as far as possible, their positions. This study for the 17 (respectively 230) crystal symmetry groups in dimension 2 (resp. 3) can be reduced to the study of 4 (resp. 16) cases. So the full results can be given in one (resp. two) tables.*

Abridged English Version

The arithmetic classes ([ITC], p. 719) define all possible actions of point groups on the Brillouin zone (=BZ). Here time reversal requires that the arithmetic class G contains $-I$ (*see* table I). In

Note présentée par Louis MICHEL.

the action of G on BZ a stratum is the set of points with a given conjugacy class of stabilizers (=little group). When strata have only a finite set of points, their orbits are called "critical": indeed they are orbits of extrema for *every* invariant function (Michel, 1971). A generalization of Morse theory is the other tool used for obtaining the results of that note. Here are the translation of the long captions of the tables of results.

Table I. *Arithmetic classes (in dimension 3) obtained by adding* $-I_3$.

This table gives the application, by adding $-I$, of the 73 three dimensional arithmetic classes onto the 24 ones containing $-I$ (columns 1,3). In physical applications $-I$ might also represent the effect of time reversal on the Brillouin zone. For the labels of the arithmetic classes and for the order in their listing, we follow the *International Tables for Crystallography* [ITC].

Table II. *Extrema common to all functions on the two dimensional Brillouin zone, invariant by the crystallographic group and time reversal.*

Column 1 gives the crystallographic system; each contains one Bravais class except the orthorhombic one which contains two: *pmm* and *cmm*. Column 2 gives the number of corresponding space groups. Column 3 indicates the number of sides of the geometrical Brillouin zone. Columns 4, 5 list respectively the arithmetic class containing $-I$, and those which yield that arithmetic class when $-I$ is added to them. Column 6, 7, 8 list the critical orbits. When the BZ has 6 sides, the 3 points satisfying $2k = 0$ are the middle of them; the 2 points $3k = 0$ represent the 6 vertices. We choose R to correspond to the pair of shrinking symmetric edges when the Brillouin zone is transformed into a 4 side one (rectangle). Then R represents the 4 vertices and is invariant by the full point group. The points of the orbits between [ ] have to be maxima or minima because the stabilizer acts as a 2-dimensional representation irreducible on the real. Column 9 gives the minimal number of extrema. Columns 10 to 12 give the orbits of extrema with a given Morse index. Column 13 gives the corresponding polynomial $Q(t)$ (defined in (2)).

Table III. Minimum number of extrema and their positions for the functions on the 3-dimensional Brillouin zone, invariant by the crystallographic group and time reversal.

Column 2 list the 24 arithmetic classes obtained from table I. Column 1 recalls their crystallographic systems (cs) and the combinatorial type of their Brillouin cell: $14, \overline{12}, 12, 8, 6$ these number indicating their number of faces. "is a short for $(14, \overline{12}, 12)$. Column 3 gives the number of corresponding space groups. In columns 4 to 8 (depending on the order of k), the critical orbits are listed by their number of points $k \in BZ$. The points of the orbits between [ ] have to be maxima or minima because the stabilizer acts as an irreducible 3-dimensional representation. Column 9 gives the minimum number "nb" of extrema for any invariant function. When Morse theory requires that it **must** have extrema outside the critical orbits, the smallest orbit of those extrema is given between parentheses ( ); this occurs with (2) for the orthorhombic F Bravais class and with (6) for the Cubic I Bravais class, so the minimal number of extrema is 16 for the latter case. For two arithmetic classes of hexagonal P, there is a 2-component closed stratum (corresponding to two "vertical" edges of the hexagonal prism); each orbit (of the infinite family of them) has a point in each connected component (only the "horizontal" components of k satisfy $3k = 0$). On this stratum, there must be 2 orbits of 2 extrema (the Morse index for the 2 orbits must differ by 1): each orbit is indicated by $\{2\}c$. Because the arithmetic class $Fm\bar{3}$ has only 3 critical orbits, Morse theory requires more extrema; since the closure of a stratum contain 6 circles meeting at $k = 0$, there must be an orbit of 6 extrema on them (1 extremum on each circle); they are indicated by $\{6\}$. Columns 10 to 13 give the orbits of extrema with a given Morse index. The last column gives the corresponding polynomial $Q(t)$.

---

1. Introduction

Nous ne considérons ici que les cristaux périodiques de dimension $d = 2, 3$: ils ont un réseau de translations dans leur groupe de symétrie. Beaucoup de propriétés physiques des cristaux sont décrites et mesurées par leur transformée de Fourier, c'est-à-dire par des fonctions réelles sur la zone de Brillouin. Dans un article bien connu sous le vocable des « singularités de Van Hove » (Van Hove, 1953), cet auteur avait montré que des singularités (logarithmiques pour $d = 2$, discontinuité dans les dérivées pour $d = 3$) de certaines de ces fonctions sont dues aux extrema d'autres. Et il rappelait la prédiction de la théorie de Morse (1927): le nombre minimum d'extrema d'une fonction de Morse sur un tore de dimension d (topologie de la zone de Brillouin) est 2^d. Malgré des remarques très pertinentes, Van Hove n'essayait ni de déterminer le nombre minimum d'extrema imposé par la symétrie du crystal, ni de les localiser. Des essais de le faire par Phillips (1956), Philips et Rosenstock (1958), bien qu'intéressants, n'aboutirent qu'à quelques résultats très partiels.

Ici nous obtenons des résultats complets en utilisant, en plus de la théorie de Morse, des théorèmes établis par Michel (1971) et en tenant compte de *la symétrie par renversement du temps*, mais en ne considérant que les cas où les effets de spin peuvent être négligés: laissant à des futurs thésards le soin de considérer les groupes magnétiques, nous nous restreignons donc aux 230 groupes S de symétrie crystallographique. Sous ces hypothèses nous donnons la position des extrema communs à *toutes les fonctions continues invariantes*. En dimension 3, leur nombre varie de 8 à 14. En admettant en plus que ces fonctions n'ont que des extrema isolés et non dégénérés (elles sont alors dites « fonctions de Morse » invariantes) la théorie de Morse montre que dans certains cas le nombre d'extrema de chaque fonction doit être plus grand (il peut atteindre 16). Elle permet aussi de déterminer, avec très peu d'ambiguïté, la nature (maxima, minima, cols) des extrema des fonctions qui en ont le nombre minimum.

2. Les orbites critiques communes à toutes les fonctions invariantes par un groupe G

Dans une action de G sur la variété M, nous notons $g.m$ le transformé de $m \in M$ par $g \in G$, par $G.m$ et G_m l'orbite et le stabilisateur de m, par $M|G$ l'espace des orbites. Puisque $G_{g.m} = gG_mg^{-1}$, les stabilisateurs d'une orbite forment une classe de conjugaison $[H]_G$ de sous-groupes de G. Les orbites qui ont la même classe de conjugaison de stabilisateurs sont dites de *même type*. Par définition, les *strates* de l'action sont les unions des orbites de même type. Nous notons $[H]$ la strate union des orbites de type $[H]_G$ et par $M\|G$ l'ensemble des strates: il s'identifie à une partie de l'ensemble $CCSG(G)$ des classes de conjugaisons des sous-groupes de G et il hérite ainsi de l'ordre partiel qui existe naturellement sur $CCSG(G)$ (relation de sous-groupe à groupe, modulo les conjugaisons). Nous notons par $\overline{[H]}$ l'union des strates $\geq [H]$.

Nous rappelons les résultats de la littérature sur les actions différentiables de groupes de Lie compacts (on trouvera les références dans l'exposé, Michel (1972)) dans le cas particulier qui nous intéresse ici: G est fini, M est compact. Il existe alors une unique strate minimale (sa symétrie est minimale): elle est ouverte dense dans M. Toutes les $\overline{[H]}$ sont fermées. En particulier les strates maximales (c'est-à-dire de symétrie maximale) sont fermées. Les champs de vecteurs sur M qui sont covariants pour G, sont tangents aux strates. C'est le cas pour les gradients des fonctions de $\mathcal{M}^G$, l'ensemble des fonctions de Morse sur M, invariantes par G. On en déduit dans Michel (1971) pour les strates maximales les résultats :

Si une strate maximale a un nombre fini d'orbites, tous ses points sont des extrema communs à toutes les fonctions de $\mathcal{M}^G$. On dira que ces orbites sont *critiques*.

Si une strate maximale a une infinité d'orbites, toute fonction de $\mathcal{M}^G$ *a au moins deux orbites d'extrema sur cette strate.*

3. Symétrie des cristaux et analyse de Fourier

Ces notions de base des actions de groupe ont été appliquées à la cristallographie par Michel et Mozrzymas (1989). Dans l'espace orthogonal V_d de dimension d, un réseau R est engendré par d

vecteurs $\vec{b}_i$ linéairement indépendants. Soit b la matrice dont les élements $b_{i\alpha}$ sont les composantes de ces vecteurs dans une base orthonormale de V_d. Notons que $b \in GL_d(R)$. Si b' est une autre base de R, on a $b' = mb$ avec $m \in GL_d(Z)$. On peut donc identifier $\mathcal{L}_d$, l'ensemble des réseaux de dimension d, à l'espace des orbites $GL_d(R) \,|\, GL_d(Z)$ (où $GL_d(Z)$ agit sur $GL_d(R)$ par multiplication à gauche). La transformation orthogonale $r \in O_d$ agit sur b par $b \mapsto br^{-1} = br^{\top}$. Elle est une symétrie du réseau engendré par b si br^{-1} est une autre base de ce réseau, *i.e.* $\exists m \in GL_d(Z)$, $mb = br^{-1}$. Cela implique que l'holohédrie d'un réseau R (nom donné en cristallographie à son groupe de symétrie) est conjuguée dans $GL_d(R)$ à un sous-groupe *fini* de $GL_d(Z)$ que nous appelons *groupe de Bravais du réseau*. L'orbite $O_d.R$ est l'ensemble des positions du réseau R. Appelons réseau intrinsèque, le concept de réseau modulo ses positions. L'ensemble $\mathcal{L}_d^i$ des réseaux intrinsèques de V_d est par définition l'espace d'orbites $\mathcal{L}_d|O_d$. Nous allons en donner une autre expression. La matrice de Gram, $bb^{\top}$, de b est invariante par O_n et son orbite par $GL_d(Z)$, soit $\{mbb^{\top}m^{\top}, m \in GL_d(Z)\}$, représente le cristal intrinsèque. L'ensemble des $bb^{\top}$ est le cône convexe $\mathcal{C}_d^+$ des formes quadratiques positives de d variables. Nous avons donc établi:

$$\mathcal{L}_d^i = \mathcal{L}_d|O_n = \mathcal{C}_d^+ \,|\, GL_d(Z)\,. \tag{1}$$

Les strates $\mathcal{L}_d||O_n$ sont appelées *Bravais systems* ([ITC], p. 722) et celles de $\mathcal{C}_d^+ || GL_d(Z)$, *Bravais classes*. Les stabilisateurs des classes de Bravais forment les classes de conjugaison des groupes de Bravais. Il existe une application naturelle, surjective, des classes de Bravais sur les systèmes de Bravais; elle préserve l'ordre partiel sur ces ensembles.

TABLEAU I

Dans l'ensemble des 73 classes arithmétiques de $GL_3(Z)$, ce tableau donne l'application définie en ajoutant $-I_3$ aux générateurs d'une classe arithmétique des colonnes 2, 4). Les 24 classes ainsi obtenues sont indiquées sur la même ligne, dans les colonnes 1, 3. Rappelons que $-I$ peut aussi représenter l'action du « renversement du temps » sur la zone de Brillouin. La nomenclature des classes arithmétiques et l'ordre de leur liste sont ceux des *International Tables for Crystallography* [ITC].

$P\bar{1}$	$P1;$	$R\bar{3}m$	$R32, R3m;$
$P2/m$	$P2, Pm;$	$P\bar{3}$	$P3;$
$C2/m$	$C2, Cm;$	$P\bar{3}1m$	$P312, P31m;$
$Pmmm$	$P222, Pmm2;$	$P\bar{3}m1$	$P321, P3m1;$
$Cmmm$	$C222, Cmm2, Amm2;$	$P6/m$	$P6, P\bar{6};$
$Fmmm$	$F222, Fmm2;$	$P6/mmm$	$P622, P6mm, P\bar{6}m2, P\bar{6}2m;$
$Immm$	$I222, Imm2;$	$Pm\bar{3}$	$P23;$
$P4/m$	$P4, P\bar{4};$	$Pm\bar{3}m$	$P432, P\bar{4}3m;$
$P4/mmm$	$P422, P4mm, P\bar{4}2m, P\bar{4}m2;$	$Fm\bar{3}$	$F23;$
$I4/m$	$I4, I\bar{4};$	$Fm\bar{3}m$	$F432, F\bar{4}3m;$
$I4/mmm$	$I422, P4mm, I\bar{4}m2, I\bar{4}2m;$	$Im\bar{3}$	$I23;$
$R\bar{3}$	$R3;$	$Im\bar{3}m$	$I432, I\bar{4}3m;$

Les *Tables Internationales de Cristallographie*, [ITC], p. 719, appellent *classes arithmétiques* les classes de conjugaison des sous-groupes finis G de $GL_d(Z)$. Il y en a respectivement 13 et 73 pour $d = 2$ et 3. Parmi elles, 5 et 14 correspondent aux groupes de Bravais. Comme on l'a vu, toute action d'un sous-groupe de O_d qui stabilise un réseau appartient à une classe arithmétique. Un cristal étant défini par un réseau de translations R et par la nature et la position d'atomes dans un domaine fondamental de R, son groupe de symétrie S a donc R comme sous-groupe invariant et le quotient S/R est un sous-groupe G du groupe de Bravais de R. Pour chaque classe arithmétique il y a donc un produit semi-direct $S = R \rtimes G$ (appelé symmorphique en cristallographie) et d'autres extensions: celles-ci contiennent des translations ou rotations avec glissement.

La plupart des expériences physiques mesurent les transformées de Fourier des fonctions définies sur l'espace du cristal. Les représentations irréductibles du réseau de translation R sont de la forme $t \mapsto \exp i\vec{k}.\vec{t} = \exp i \sum_{\ell} k_\ell n_\ell$ où les entiers n_ℓ sont les coordonnées de $\vec{t}$ dans la base b et les k_ℓ les coordonnées de $\vec{k}$ dans la base duale $\hat{b} = (b^{-1})^\top$. Les k_ℓ sont donc définis modulo 2π; ils forment donc un groupe (additif) isomorphe à $(U_1)^d$ dont la topologie est un tore de dimension d. Il est appelé par les mathématiciens, le groupe dual du groupe R des translations et par les physiciens, la *zone de Brillouin* ($= ZB$). Celle-ci peut aussi être représentée géométriquement par la cellule de Dirichlet-Voronoï (ensemble des points de l'espace plus près de l'origine que des autres points d'un réseau) du réseau réciproque $\hat{R}$, engendré par la base $2\pi\hat{b}$. Nous l'appellerons *cellule de Brillouin* et nous rappelons que les points de sa surface différant par une translation de $\hat{R}$, doivent être identifiés dans la zone de Brillouin. Nous avons déjà vu que l'action du groupe S sur R ne dépend que de son quotient $G = S/R$. Il est est de même pour l'action de S sur ZB. Il n'y a donc que 13, 73 cas à étudier en dimension 2, 3 pour étudier les fonctions de Morse sur ZB invariantes par S. Ici nous ne considérons que les phénomènes où les effets de spin peuvent être négligés. Dans ce cas la symétrie physique de « renversement du temps » (notée T dans la suite) exige simplement pour toute fonction physiquement observable sur ZB la condition $f(\vec{k}) = f(-\vec{k})$. Pour les 7, 24 classes arithmétiques contenant $-I_d$, l'invariance par G implique l'invariance par T. Pour les autres classes arithmétiques il suffit d'exiger l'invariance par le groupe G' engendré par G et $-I_d$ pour tenir compte aussi de l'invariance T. Le tableau I donne pour la dimension 3, la classe arithmétique obtenue en ajoutant $-I_3$ à celles qui ne le contiennent pas (nous avons ainsi réduit l'étude de notre problème à 24 cas). Pour la dimension 2, la même information est donnée directement dans le tableau II.

Sur ZB il y a exactement 2^d points invariants par $-I_d$, c'est-à-dire satisfaisant $\vec{k} = -\vec{k} \Leftrightarrow 2\vec{k} = 0$. En plus de $\vec{k} = 0$, il y a tous ceux dont une ou plusieurs coordonnées sont π, les autres étant 0. Ces 4, 8 points (pour $d = 2, 3$) appartiennent à des orbites critiques. Dans 2 (parmi 7), 7 (parmi 24) cas il existe d'autres orbites critiques; leur liste complète se trouve dans les tableaux II et III.

4. Application de la théorie de Morse

Au point m (de coordonées m_i) le hessian $H(m) = (\partial^2 f/\partial m_i \partial m_j)(m)$ d'une fonction réelle deux fois différentiable sur la variété M de dimension d, est une matrice symétrique, donc ses valeurs propres sont réelles. Si m est un extremum $((\partial f/\partial m_i)(m) = 0)$, on appelle *indice de Morse de* m le nombre de valeurs propres négatives de $H(m)$. Pour une fonction de Morse, $\det H(m) \neq 0$; alors $0, d$ sont les indices de Morse des minima et maxima. Dû à l'existence des singularités de Van Hove, il est nécessaire d'utiliser une généralisation de la théorie de Morse: e.g. Goresky et MacPherson (1980), mais nous ne l'expliquerons pas dans cette note. Remarquons que les points critiques dont la représentation du stabilisateur est irréductible sur les réels sont nécessairement des minima ou maxima (puisque $H(m)$ est un multiple de l'identité). Soient c_k, $0 \leq k \leq d$, le nombre d'extrema d'index k d'une fonction de Morse f. Nous définissons son *polynome de Morse* M_f par: $M_f = \sum_{k=0}^{d} c_k \lambda^k$. La théorie de Morse donne des relations entre les c_k et les nombres de Betti b_k de la variété compacte M sur laquelle la fonction est donnée. La présentation moderne de la théorie de Morse se fait en

Tableau II

Extrema communs à toutes les fonctions sur la zone de Brillouin de dimension 2 et invariantes par le groupe de symétrie du cristal et le renversement du temps. La colonne 1 donne le système cristallographique (en anglais); chacun contient une classe de Bravais, sauf l'orthorhombique qui en contient deux: *pmm* et *cmm*. La colonne 2 indique le nombre de côtés de la cellule de Brillouin. La colonne 3 donne le nombre des groupes de symétrie cristallographiques correspondants. Les colonnes 4,5 indiquent respectivement la classe arithmétique contenant $-I$, et celles qui deviennent cette classe quand on leur ajoute $-I$. Les colonnes 6,7,8 donnent la liste des orbites critiques (les orbites sont séparées par une virgule). O est le centre de la cellule de Brillouin. Quand elle a 6 côtés, les points R, A, B représentent leurs milieux et les points C, C' ses 6 sommets. Quand elle est un rectangle, les points A, B représentent chacun une paire de milieux des côtés opposés, le point R les 4 sommets; ce point est donc invariant par le groupe ponctuel. Les points des orbites entre [ ] doivent être maxima or minima car leur stabilisateur agit selon une représentation de dimension 2, irréductible sur les réels La colonne 9 donne le nombre minimum d'extrema. Les colonnes 10 à 12 donnent la liste des orbites d'extrema ayant un indice de Morse fixé. La colonne 13 donne le polynome $Q(t)$ correspondant (*voir* (2)).

cr. syst.	Z	sg	classe arithm.		$k=0$	$2k=0$	$3k=0$	nb	$0,2$	1	$2,0$	$Q(t)$
diclinic	6	2	$p2$	$p1$	O	R, A, B		4	1	1, 1	1	0
ortho-	4	5	pmm	pm	O	R, A, B		4	1	1, 1	1	0
rhombic	6	2	cmm	cm	O	R, AB		4	1	2	1	0
square	4	1	$p4$		$[O]$	$[R], AB$		4	[1]	2	[1]	0
	4	2	$p4m$		$[O]$	$[R], AB$		4	[1]	2	[1]	0
hexa-	6	2	$p6$	$p3$	$[O]$	RAB	$[CC']$	6	[2]	3	[1]	1
gonal	6	3	$p6m$	$p3m1$ $p31m$	$[O]$	RAB	$[CC']$	6	[1]	3	[2]	t

comparant M_f et le polynome de Poincaré: $P_M = \sum_{k=0}^{d} b_k \lambda^k$ de M (on la trouve par exemple dans Doubrovine *et al.* (1987), 3, chap. 1, §20, théorème 2). Elle impose:

$$M_f(\lambda) - P_M(\lambda) = (1+\lambda)Q(\lambda). \tag{2}$$

où *les coefficients de* $Q(\lambda)$ *sont des entiers* ≥ 0. Pour savoir si l'ensemble des extrema des orbites critiques sont compatibles avec la théorie de Morse, il faut non seulement appliquer celle-ci à M, mais aussi à *tous les* $\overline{[H]}$ (qui ne sont pas nécessairement des sous-variétés, mais l'extension de la théorie de Morse est valable pour ces sous-espaces) en tenant compte qu'aux points où les représentations des stabilisateurs sur ces sous-espaces sont irréductibles, la restriction de toute fonction doit avoir un maximum ou un minimum relatif (*voir* l'erratum placé avant les références). Ou bien les extrema des orbites critiques forment un ensemble minimum possible (et la théorie de Morse donne leur nature), ou bien la théorie de Morse requiert d'ajouter les points d'une ou plusieurs orbites pour obtenir le nombre minimum d'extrema.

L'application de la théorie de Morse à ZB de dimension 2 est facile à faire: les résultats sont dans le tableau II qui se lit aisément. Les résultats pour $d = 3$ sont plus divers et plus compliqués, bien que, comme le montre le tableau III, les solutions se répartissent en 16 cas seulement: un pour chaque classe de Bravais, excepté pour hexagonal P et cubic F qui comportent 2 cas chacune. Pour 8 classes de Bravais les orbites ont 8 points critiques; ils sont suffisants et $c_0 = 1 = c_3$, $c_1 = 3 = c_2$. Ces points satisfont $2\vec{k} = 0$; ils sont situées au milieu des vecteurs de couronne du réseau réciproque, c'est-à-dire les vecteurs dont les cellules de Brillouin ont au moins un point commun avec celles de l'origine. Pour les 2 classes de Bravais $Immm$, $I4/mmm$ le nombre de points des orbites critiques

TABLEAU III

Nombre minimum et position des extrema des fonctions sur la zone de Brillouin, invariantes par le groupe de symétrie du cristal et le renversement du temps. La colonne 2 contient la liste des 24 classes arithmétiques obtenues en tableau I. La colonne 1 indique leur système cristallographique (sc) et le type combinatoriel de leur cellule de Brillouin: $14, \overline{12}, 12, 8, 6$; $''$ est mis pour $(14, \overline{12}, 12)$. La colonne 3 donne le nombre de groupes de symétrie correspondants. Dans les colonnes 4 à 8, pour les différents ordres de $k \in ZB$, les orbites critiques sont données par leur nombre de points. Ceux entre [ ] doivent être des maxima ou minima car leur stabilisateur agit par une représentation irréductible sur les réels. La colonne 9 donne le nombre minimum « nb » d'extrema pour toute fonction invariante. Quand la théorie de Morse requiert plus d'extrema que ceux qui sont critiques, la plus petite orbite suffisante pour ces extrema non critiques est donnée entre ( ). Pour $P\bar{3}$ et $P\bar{3}1m$ il existe une strate fermée à 2 composantes connexes (correspondant aux 2 familles de cotés « verticaux » du prisme hexagonal de ZB), chacune de ses orbites ayant 2 points (un dans chaque nappe). Sur cette strate fermée doit donc exister 2 orbites de 2 extrema dont les indices de Morse diffèrent par 1. Chaque orbite est indiquée par $\{2\}c$. Puisque la classe arithmétique $Fm\bar{3}$ (cubique F) a seulement 3 orbites critiques, la théorie de Morse requiert d'autres extrema. Or il existe une strate contenant des orbites de 6 points, chacun appartenant à une composante connexe différente. On ferme la strate en ajoutant le point $k = 0$. On obtient ainsi 6 cercles se coupant en ce point. Cette strate doit donc contenir au moins une orbite d'extrema: elle est indiquée par $\{6\}$. Les colonnes de 10 à 13 donne les orbites d'extrema ayant un indice de Morse fixé. La dernière colonne fournit le polynome $Q(t)$ correspondant.

cs	arith. class	sg	0	$2k=0$	$4k=0$	$3k=0$	$6k=0$	nb	0, 3	1, 2	2, 1	3, 0	$Q(t)$
tc	$P\bar{1}$	2	1	1, 1, 1, 1, 1, 1, 1				8	1	1 + 1 + 1	1 + 1 + 1	1	0
m 8	$P2/m$	8	1	1, 1, 1, 1, 1, 1, 1				8	1	1 + 1 + 1	1 + 1 + 1	1	0
$''$	$C2/m$	5	1	1, 1, 1, 2, 2				8	1	1 + 2	1 + 2	1	0
or 6	$Pmmm$	30	1	1, 1, 1, 1, 1, 1, 1				8	1	1 + 1 + 1	1 + 1 + 1	1	0
8	$Cmmm$	15	1	1, 1, 1, 2, 2				8	1	1 + 2	1 + 2	1	0
$''$	$Fmmm$	5	1	1, 1, 1, 4				8 + (2)	1 1 + 1	4 4	1 + 1 + (2) 1 + (2)	1 1	t $1, t^2$
14	$Immm$	9	1	1, 2, 2, 2	2 W			10	1 2	2 + 2 2 + 2	2 + 2 1 + 2	1 1	t $1, t^2$
tt 6	$P4/m$ $P4/mmm$	9 40	1	1, 1, 1, 2, 2				8	1	1 + 2	1 + 2	1	0
14 $\overline{12}$	$I4/m$ $I4/mmm$	5 14	1	1, 2, 4	2 P			10	1 2	4 4	2 + 2 1 + 2	1 1	t $1, t^2$
rh 14 12	$R\bar{3}$ $R\bar{3}m$	2 5	1	1, 3, 3				8	1	3	3	1	0
hx 8	$P\bar{3}$ $P\bar{3}1m$	4 7	1	1, 3, 3		$\{2\}c$	$\{2\}c$	8 + {4}	1 {2} {2}	{2} + 3 {2} + 3 1 + 3	{2} + 3 1 + 3 1 + 3	1 1 {2}	$2t$ $1+t, t(1+t)$ $1+t^2$
8	$P\bar{3}m1$ $P6/m$ $P6/mmm$	7 9 18	1	1, 3, 3		2 K	2 H	12	1 2 2	2 + 3 2 + 3 1 + 3	2 + 3 1 + 3 1 + 3	1 1 2	$2t$ $1+t, t(1+t)$ $1+t^2$
cu 6	$Pm\bar{3}$ $Pm\bar{3}m$	5 10	[1]	[1], 3, 3				8	[1]	3	3	[1]	0
14	$Fm\bar{3}$	3	[1]	3, 4	$\{6\}c$			8 + {6}	[1] [1]	3 4	{6} {6}	4 3	$3t^2, 3$ $t+2t^2, 2t+t^2$
14	$Fm\bar{3}m$	8	[1]	3, 4	6 W			14	[1] [1]	3 4	6 6	4 3	$3t^2, 3$ $t+2t^2, 2t+t^2$
12	$I\bar{3}m$ $Im\bar{3}m$	4 6	[1]	1, 6	[2] P			10 + (6)	~~[1]~~ ~~[1]~~ [2] [2]	~~(6)~~ ~~6~~ (6) 6	~~1 + 6~~ ~~1 + (6)~~ 6 (6)	~~[2]~~ ~~[2]~~ [1] + [1] [1] + [1]	~~$3t+t^2, 1+3t$~~ ~~$3t+t^2, 1+3t$~~ $1+2t+t^2$ $1+2t+t^2$

est plus grand: 10, 10 mais suffisant. Le nombre des points critiques 8, 10 pour les classes de Bravais $Fmmm$, $Im\bar{3}m$ est insufisant; il faut rajouter une orbite de 2, 6 extrema (dont le stabilisateur est un groupe de rotations autour d'un axe). Pour une partie des classes arithmétiques des classes de Bravais $P/6mmm$, $Fm\bar{3}m$, le nombre des points critiques 12, 14 est suffisant. Mais les orbites critiques ne satisfaisant pas $2\vec{k} = 0$, ne sont plus critiques pour les autres classes arithmétiques. Pour $P\bar{3}$, $P\bar{3}1m$ il existe une strate fermée contenant une infinité d'orbites: chaque fonction a au moins deux d'entre elles comme orbites d'extrema. Pour $Fm\bar{3}$, le sous-espace $\overline{[Fmm2]}$ est un bouquet de 6 cercles se coupant à l'origine o (qui est la frontière de la strate $Fmm2$). La théorie de Morse appliquée à ce sous-espace requiert des extrema sur une orbite non critique de 6 points (elle a un point dans chaque cercle).

Nous avons ainsi défini pour les 230 groupes S le nombre minimum d'extrema des fonctions de Morse invariantes sur ZB. Nous reportons à plus tard l'étude de ces fonctions lorsqu'elles ont plus d'extrema; dans ces cas les prédictions sont moins contraignantes.

Erratum. – Une partie des résultats obtenus ici ont déjà été publiés dans un article en l'honneur de Léon Van Hove, mort en 1990: Michel (1993). Sa table 7.2 (qui correspond à notre tableau III) traite des 14 classes de Bravais; elle contient une erreur pour $P6/mmm$. En effet elle donne une quatrième possibilité pour les colonnes 10 à 13 (extrema d'indice de Morse donné): 3, 2+3, 1+2, 1. Cette solution est compatible avec l'équation (2); mais elle est éliminée par l'étude de la sous-variété $\overline{[Pm]}$ de dimension 2, composée de 2 composantes connexes. Dans la cellule de Brillouin (prisme hexagonal régulier dont, pour simplifier l'énoncé de précisions à venir, nous positionnons l'axe de symétrie d'ordre 6 verticalement) l'une des composantes connexes est représentée par les 2 faces horizontales (identifiées dans ZB), l'autre par l'intersection avec le plan de symétrie horizontal. Dans ZB ces 2 composantes sont 2 tores disjoints de dimension 2, chacun étant une copie de la zone de Brillouin de $p6m$. Chacun a donc 3 orbites critiques de 1, 2, 3 points respectivement. Les stabilisateurs $P6/mmm$ et $P\bar{3}m1$ des 2 premières agissent sur le plan tangent de leurs points critiques par des représentations irréductibles de dimension 2, en accord avec le tableau II. Donc les extrema des orbites critiques de 3 points doivent être des cols en dimension 2 et, par conséquent, en dimension 3.

Note remise le 15 janvier 1996, acceptée le 22 janvier 1996.

Références bibliographiques

Doubrovine B., Novikov S. et Fomenko A., 1987. *Géométrie contemporaine. Méthodes et applications*, Mir, Moscou.

Goresky M. et MacPherson R., 1980. *Stratified Morse Theory*, Springer-Verlag.

ITC, 1983. *International Tables of Crystallography*, A, **Hahn T.** éd., Reidel, Holland.

Michel L., 1971. Points critiques des fonctions invariantes sur une *G*-variété, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 272, série B, p. 433-436.

Michel L., 1972. Non linear group actions; smooth actions of compact Lie groups on manifolds, p. 133-150 in *Statistical mechanics and field theory*, Israël University Press, Jerusalem.

Michel L. et Mozrzymas J., 1989. Les concepts fondamentaux de la cristallographie, *C.R. Acad. Sci. Paris*, 308, serie II, p. 151-158.

Michel L., 1993. Extrema of P-invariant functions on the Brillouin zone, p. 81-108 in *Scientific Highlights in Memory of Léon Van Hove*, **Nicodemi F.** éd., World Scientific.

Morse M., 1925. Relations between the critical points of a real function of n independent variables, *Trans. Amer. Math. Soc.*, 27, p. 345-396.

Phillips J. C., 1956. Critical points and lattice vibration spectra, *Phys. Rev.*, 104, p. 1263-1277.

Phillips J. C. et Rosenstock H. R., 1958. Topological methods of locating critical points, *J. Phys. Chem. Solids*, 5, p. 288-292.

Van Hove L., 1953. The occurence of singularities in the elastic frequency distribution of a crystal, *Phys. Rev.*, 89, p. 1189-1193.