

INVARIANTS POLYNOMIAUX DES GROUPES DE SYMETRIE MOLECULAIRE ET CRISTALLOGRAPHIQUE

Louis Michel

Cette conférence est une revue de quelques aspects de ce problème. L'utilité pour la physique des fonctions invariantes par le groupe de symétrie du problème étudié, est évidente. Beaucoup de travaux récents donnent des tables de polynomes invariants (généralement calculés par ordinateurs) des groupes *ponctuels* (groupes de symétrie des molécules, et quotients par les translations des groupes cristallographiques)¹. Souvent ces travaux s'ignorent les uns les autres et plus généralement ils ignorent les résultats directement utilisables obtenus par les mathématiciens. Les tables de polynomes invariants peuvent être fort utiles puisque leur forme explicite dépend de la base choisie, le choix d'une base étant souvent déterminé par des considérations physiques. Par contre il est aussi fort utile de connaître la *structure* de l'algèbre des polynomes invariants. C'est à ce problème que va être consacrée la majeure partie de cette conférence.

1. CONCEPTS DE BASE

Définissons d'abord les concepts de base afin de pouvoir

¹ Les articles à ce sujet sont si nombreux que j'ai renoncé à préparer une bibliographie.

ensuite préciser notre sujet. Soit G un groupe fini, de $|G|$ éléments, agissant linéairement et effectivement² sur un espace vectoriel E sur le corps K , et de dimension finie m . Ces données définissent aussi une action de G sur la n^e puissance tensorielle $\otimes^n E = E^{(n)}$ de E , ainsi que sur les puissances complètement symétriques $E^{\{n\}}$ et complètement antisymétriques $E^{[n]}$, de dimensions respectives

$$s_n = \binom{n+m-1}{n} \quad \text{et} \quad a_n = \binom{m}{n}, \quad (1)$$

ainsi que sur leur somme directe:

$$S = \bigoplus_{n=0}^{\infty} E^{\{n\}}, \quad A = \bigoplus_{n=0}^m E^{[n]}, \quad (2)$$

les espaces vectoriels des algèbres tensorielles symétriques et extérieures sur E ($E = E^{(1)} = E^{\{1\}} = E^{[1]}$ et $E^{(0)} = E^{\{0\}} = E^{[0]} = K$, le corps de définition de E). Dans cette conférence nous nous limitons à la caractéristique zéro pour K , les applications physiques étant pour les complexes et les réels.

Soit R l'espace dual de S . C'est l'espace des polynômes sur E , le dual R_n de $E^{\{n\}}$ étant l'espace des polynômes homogènes de degré n . L'ensemble des polynômes sur E forme, comme S , un anneau et aussi une K -algèbre.

Soit $g \rightarrow D(g)$ la représentation linéaire de G sur E dont nous notons x_1, x_2, \dots les éléments; $D^{\{n\}}(g)$ est la représentation correspondante sur $E^{\{n\}}$ dont nous notons $x^{\{n\}}$ les éléments. Nous dénotons $g \rightarrow D_\alpha(g)$ les représentations irréductibles de G à une équivalence près (D_{α_1} et D_{α_2} sont inéquivalentes si $\alpha_1 \neq \alpha_2$) et $\chi_\alpha(g) = \text{tr } D_\alpha(g)$ est le caractère de cette représentation. Par la propriété d'orthogonalité des caractères, l'expression

$$c_n(\chi_\alpha) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi_\alpha(g^{-1}) \text{tr } D^{\{n\}}(g) \quad (3)$$

² Effectivement signifie que seul l'identité du groupe laisse fixe tous les points de E .

donne la multiplicité de la représentation D_α dans la décomposition de la représentation $D^{\{n\}}$ en représentation irréductible. D'autre part, en diagonalisant $D(g)$ on voit que les valeurs propres de $D^{\{n\}}(g)$ sont les produits de n valeurs propres de $D(g)$, donc $\text{tr } D^{\{n\}}(g)$ est le coefficient de t^n dans le développement de $[\det(I-tD(g))]^{-1}$. La relation (3) peut donc s'écrire pour tous les n à la fois [M3].

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n(\chi_\alpha) t^n = F_{\chi_\alpha}(t) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \frac{\chi_\alpha(g-1)}{\det[I-tD(g)]}. \quad (4)$$

Nous sommes plus particulièrement intéressés par l'ensemble R^G (respectivement S^G) des polynômes invariants (resp. des vecteurs invariants de S) c'est-à-dire:

$$p(x_1, \dots, x_m) = p(D(g)x_1, \dots, D(g)x_m), \quad (5)$$

qui correspondent à la représentation triviale $\chi_0(g) = 1$ et nous écrivons simplement $F(t)$ pour $F_{\chi_0}(t)$. La somme et le produit de polynômes invariants étant encore des polynômes invariants, R^G est un anneau; c'est aussi une K -algèbre. Par le célèbre théorème de Hilbert [H1] nous savons qu'on peut trouver un nombre fini de générateurs pour cette algèbre, un tel système de générateurs étant en général appelé une *base d'intégrité*³. Nous donnerons l'énoncé de théorèmes importants ou utiles pour la construction de telles bases. Nous aurons pour cela besoin de la notion d'*invariant relatif*. Pour toute représentation irréductible de G de dimension 1, et de caractère $\chi_A(g)$ (A pour *abelien*), nous désignons par $R_{\chi_A}^G$ l'ensemble des polynômes invariants relatifs de poids χ_A définis par la relation

$$\forall g \in G, \quad p(D(g)x_1, \dots, D(g)x_m) = \chi_A(g)p(x_1, \dots, x_m). \quad (6)$$

³ Ce résultat n'est pas vrai pour les groupes de Lie de dimension fini comme l'a montré le contre exemple de Nagata [N1].

Le produit par un invariant ne changeant pas la nature d'un invariant relatif, $R_{\chi_A}^G$ est un R^G -module⁴.

2. GROUPES G ENGENDRES PAR (PSEUDO-) REFLEXIONS

Une pseudo-réflexion P dans l'espace E_m de dimension m est un opérateur diagonalisable qui a $m-1$ fois la valeur propre 1 et qui est d'ordre fini, c'est-à-dire il existe un plus petit entier $c > 1$ tel que $P^c = I$. Donc une pseudo-réflexion satisfait:

$$P \text{ diagonalisable, } (P-I)^{m-1}(P-\rho I) = 0, \rho^c = 1$$

pour un entier minimum $c > 1$. (7)

Pour $c = 2$, P est une réflexion.

On prouve aisément que toute base d'intégrité de R^G sur E_m doit contenir au moins m polynomes. Chevalley [C1] prouva en 1955 que pour les groupes finis engendrés par des réflexions, toute base d'intégrité de R^G (c'est-à-dire tout ensemble minimum de polynomes invariants) a exactement m éléments. Coxeter a déterminé pour toutes les dimensions finies m , tous les groupes engendrés par réflexions: ils sont symbolisés par un diagramme de Dynkin (généralisé) de m points⁵. Ceux qui laissent invariant un réseau de dimension m (= un cristal à m dimension; il existe donc une base de E_m pour laquelle les éléments de matrice de la représentation de G sont entiers) sont les groupes de Weyl d'un groupe de Lie semi-simple de rang m ; l'espace E_m est une sous-algèbre de Cartan. Aux groupes de Lie simples correspondent les diagrammes de Dynkin connexes. Le théorème de Chevalley s'applique donc

⁴ A étant un anneau d'éléments α_1, α_2 on définit sur le groupe abélien E une structure de A -module si pour tout $\alpha \in A$ et tout $x \in E$, αx est défini comme élément de E , cette correspondance satisfaisant les propriétés $\alpha(x_1+x_2) = \alpha x_1 + \alpha x_2$, $(\alpha_1+\alpha_2)x = \alpha_1 x + \alpha_2 x$, $\alpha_1(\alpha_2 x) = (\alpha_1 \alpha_2)x$, $1x = x$.

⁵ Ils ont été définis dans le cours du professeur Zassenhaus à l'école d'été qui a précédé cette conférence. Voir aussi [B2].

aussi aux invariants des groupes de Lie semi-simples. Shephard et Todd [S2] ont montré que la réciproque du théorème de Chevalley était vraie à condition de l'étendre aux pseudo-réflexions:

Théorème 1. [S2]. Un sous-groupe fini G de $GL(m, K)$ a une base d'intégrité de m polynômes invariants si et seulement si il est engendré par pseudo-réflexions. On peut alors trouver pour la base d'intégrité m polynômes homogènes θ_i ($i = 1$ à m) de degré d_i avec $d_1 \leq d_2 \leq \dots \leq d_m$. Le polynôme invariant le plus général de R^G est de la forme $q(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)$ où q est un polynôme de m variables. Nous pouvons calculer les degrés d_i en remarquant que

$$\sum_{n=0}^{\infty} t^n \dim R_n^G = \prod_{i=1}^m \frac{1}{(1-t^{d_i})} \quad (8)$$

ce qui est encore la fonction de Molien $F(t)$:

$$F(t) = \prod_{i=1}^m \frac{1}{(1-t^{d_i})} = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \frac{1}{\det[I-tD(g)]}. \quad (9)$$

Soit G_k le sous-ensemble d'éléments de G dont l'ensemble des points fixes dans E_m est une variété linéaire de dimension $m-k$; par exemple G_0 ne contient que l'identité du groupe, G_1 contient les r (pseudo-) réflexions, etc. En définissant:

$$P(t) = \prod_{k=1}^m P_k(t) \quad \text{et} \quad P_k(t) = 1 + t + t^2 + \dots + t^{d_k-1}, \quad (10)$$

et en multipliant les deux membres de (9) par $|G|(1-t)^m$, on obtient

$$\frac{|G|}{P(t)} = 1 + \sum_{k=1}^m (1-t)^k Q_k(t), \quad (11)$$

où

$$Q_k(t) = \sum_{g \in G_k} \frac{(1-t)^{m-k}}{\det[I-tD(g)]}; \quad (12)$$

entre autre

$$Q_1(t) = \sum_{g \in G_1} \frac{1}{1 - \rho(g)t}, \quad (12')$$

où $\rho(g)$ est la valeur propre différente de 1 de la pseudo-réflexion $g \in G_1$.

En faisant $t = 1$ dans (11) on trouve

$$\prod_{i=1}^m d_i = |G|. \quad (13)$$

De même en multipliant (11) par $P(t)$ pris en dérivant par rapport à t et faisant $t = 1$ on obtient après division par $|G|$

$$\sum_i \frac{d_i - 1}{2} = \sum_{g \in G_1} \frac{1}{1 - \rho(g)},$$

soit encore

$$\sum_i d_i = m + |G_1| = m + r, \quad (14)$$

où $|G_1| = r$ est le nombre de (pseudo-) réflexions.

Plus généralement Steinberg [S6] a montré l'égalité⁶:

$$\prod_{k=1}^m (1 + (d_k - 1)t) = \sum_{k=0}^m |G_k| t^k. \quad (15)$$

(En faisant $t = 1$ on obtient (13), tandis que (14) est donnée par le coefficient de t .) Remarquons que ces résultats étaient connus depuis plusieurs siècles dans le cas des fonctions symétriques de m variables. En effet le groupe symétrique S_m des permu-

⁶ Quand on connaît le degré des invariants de la base (voir aussi plus loin (16), (17), (18)) il est assez facile de les construire en moyennant sur les orbites exceptionnelles (c'est-à-dire les plus petites), qui correspondent aux plus grands stabilisateurs. Pour une étude systématique voir [F1].

tations de m objets est engendré par les transpositions qui sont des réflexions sur E_m . Les d_i prennent toutes les valeurs de 1 à m et une base d'intégrité est donnée par

$$\theta_k = \sum_{i=1}^m x_i^k.$$

Pour les groupes engendrés par réflexions Coxeter [C2] avait montré que les opérateurs

$$W = \prod_{g \in G_1} D(g)$$

produit de toutes les réflexions et qui dépendent donc de l'ordre dans lequel est effectué ce produit, sont tous conjugués les uns des autres, leurs valeurs propres étant

$$\text{Spectre } W = \{\exp 2\pi i(d_k - 1)/h, k=1 \text{ à } m\} \text{ et } h = \frac{2r}{m}. \quad (16)$$

Puisque W est un opérateur orthogonal réel, ses valeurs propres sont complexes conjuguées:

$$d_k + d_{m-k} = 2\left(1 + \frac{r}{m}\right) \quad (17)$$

qui est plus précis que (14). Notons que, pour m impair,

$$\frac{d_{m+1}}{2} = 1 + \frac{r}{m}. \quad (18)$$

Finalement les nombres de Betti d'un groupe de Lie simple sont égaux à $2d_k - 1$, les d_k étant les degrés des polynômes invariants de la base d'intégrité de son groupe de Weyl [S3].

Dans son article de 1954 Chevalley montre un second théorème. La représentation linéaire de G sur l'espace quotient $R/I(R_+^G)$ est la représentation régulière, $I(R_+^G)$ étant l'idéal engendré par les polynômes non constants de R^G .

Revenons au cas général d'un groupe engendré par pseudo-

réflexions, l'équation des hyperplans invariants étant

$$\ell_{\alpha}(x) = \sum_{i=1}^m n_i^{(\alpha)} x_i = n^{(\alpha)} \cdot x = 0, \quad (19)$$

(le point \cdot désignant un produit scalaire orthogonal); les différentes pseudo-réflexions d'hyperplan $\ell_{\alpha} = 0$ engendrent un groupe cyclique d'ordre $c_{\alpha} > 1$ (pour les réflexions $c_{\alpha} = 2$). Soit $p_i(x_1, \dots, x_n)$ un polynome invariant. Si on choisit la 1^{ère} coordonnée dans la direction $n^{(\alpha)}$, l'invariance par rapport à la pseudo-réflexion qui laisse l'hyperplan $\ell_{\alpha} = 0$ invariant, exige que p_i ne contiennent que des puissances de x_1 multiples de c_{α} . Les $\partial p_i / \partial x_j$, $j = 1$ à m , se transforment suivant la représentation contragrédiente de E_m , et ils s'annulent tous pour $x_1 = 0$. Si on forme le jacobien de m polynomes invariants linéairement indépendants, ce jacobien doit s'annuler sur chaque hyperplan invariant. Or en comptant les degrés on vérifie que: [B2]

Théorème 2. Si θ_i , $i = 1$ à m , sont les m polynomes d'une base d'intégrité d'un groupe fini G engendré par pseudo-réflexions, on a

$$\det \left(\frac{\partial \theta_i}{\partial x_j} \right) = K \prod_{\alpha} \ell_{\alpha}^{c_{\alpha}-1}(x), \quad (20)$$

où K est une constante.

Remarquons que $\det(\partial \theta_i / \partial x_j)$ n'est pas un invariant de G . Si G est engendré par réflexions, c'est un invariant relatif de poids $\det(g)$. Mais c'est un invariant du sous-groupe invariant H , d'index 2, des éléments de déterminant 1.

3. SOUS-GROUPES INVARIANTS H DES GROUPES G ENGENDRES PAR PSEUDO-REFLEXIONS DONT LE QUOTIENT G/H EST ABELIEN

Soit G' le groupe engendré par les commutateurs d'un groupe G engendré par pseudo-réflexions: G' est sous-groupe invariant de

G , ainsi que tout sous-groupe $H < G$ contenant G' ; de plus le groupe quotient G/H est abélien. Un preprint de R.P. Stanley [S5] permet de construire explicitement l'algèbre R^H .

C'est un résultat bien connu de la théorie des groupes que toute représentation commutative (= abélienne) $g \rightarrow \chi(g)$ irréductible de G est unidimensionnelle et son noyau contient G' , c'est-à-dire:

$$G' < \ker \chi \iff \chi(G') = 1. \tag{21}$$

L'ensemble de ces représentations abéliennes irréductibles forment un groupe abélien A_G , dual de G/G' et qui lui est isomorphe puisque G/G' est fini. Les invariants relatifs de A de poids $\chi_A \in A_G$ tel que $\chi_A(H) = 1$, sont évidemment des invariants de H , le travail récent de Stanley permet de préciser:

Lemme. [S5]. Si $G' < H < G$, engendré par pseudo-réflexions:

$$R^H = \sum_{\substack{\chi_A \in A_G \\ \chi_A(H)=1}} R_{\chi_A}^G, \tag{22}$$

\sum indiquant une somme d'espaces vectoriels; mais Stanley montre ensuite qu'il s'agit même d'une somme de R^H -modules, chaque $R_{\chi_A}^G$ étant un R^H -module de dimension 1 engendré par le polynôme f_{χ_A} :

$$f_{\chi_A}(x) = \prod_{\alpha=1}^r \ell_{\alpha}^{s_{\alpha}}(x), \tag{23}$$

où s_{α} est le plus petit entier $0 \leq s_{\alpha} < c_{\alpha}$ tel que $\chi(P_{\alpha}) = (\det P_{\alpha})^{s_{\alpha}}$ pour la pseudo-réflexion P_{α} .

Par exemple, si G est engendré par réflexions, $f_{\chi_A}(x)$ est le produit des équations des hyperplans dont les réflexions sont représentées par -1 dans la représentation abélienne χ_A de G ; de telles réflexions n'appartiennent pas à H puisque $\chi_A(H) = 1$. Et

si H est le sous-groupe d'index 2, noyau de la représentation abélienne, $g \rightarrow \det(g)$, f_{\det} est le produit de tous les ℓ_α ; c'est le jacobien de la formule (20) avec $c_\alpha = 2$.

Pour l'espace E à trois dimensions, les sous-groupes discrets de $O(3)$ qui sont engendrés par réflexions⁷ sont

$$C_{nv}, D_{nh}, T_d, O_h, Y_i \quad (24)$$

(les trois derniers étant les groupes de symétrie respectivement du tétraèdre, de l'octaèdre ou du cube, de l'icosaèdre ou du dodécaèdre). Tous les autres groupes discrets de $O(3)$ sont des sous-groupes invariants à quotient abélien d'un des groupes de la liste (24). Excepté pour les sous-groupes S_{2n} , les R^H sont des R^G modules de dimension 2, c'est-à-dire les polynômes invariants de H , sous-groupe discret de $O(3)$ non engendré par réflexion, sont de la forme

$$q_0(\theta_1, \theta_2, \theta_3) + \varphi_1 q_1(\theta_1, \theta_2, \theta_3), \quad (25)$$

où $\theta_1(x)$, $\theta_2(x)$, $\theta_3(x)$ sont 3 polynômes formant une base d'intégrité pour G (de la liste 24), q_0 et q_1 sont des polynômes arbitraires de 3 variables et φ_1 est le polynôme calculé en (23). Pour les groupes $C_{n,i}$ il faut remplacer (25) par un R^G module de dimension 4:

$$q_0(\theta_1, \theta_2, \theta_3) + \varphi_1(x)q_1(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \\ + \varphi_2(x)q_2(\theta_1, \theta_2, \theta_3) + \varphi_3(x)q_3(\theta_1, \theta_2, \theta_3). \quad (25')$$

Nous donnons dans la table 1 des bases d'intégrité θ_1 , θ_2 , θ_3 et éventuellement φ_1 , φ_2 , φ_3 pour tous les sous-groupes discrets de $O(3)$ ainsi que la fonction génératrice donnant la dimension de R_n^G , i.e. le nombre de polynômes homogènes invariants de degré n

⁷ Nous suivons ici les notations et les définitions de Landau et Lifshitz [L1].

linéairement indépendants. Bethe dans son travail de pionnier [B1] en 1929 avait donné les invariants des groupes de symétrie cubique; ceux de l'icosaèdre étaient connus de F. Klein et W. Burnside [B3]. La plus ancienne table publiée équivalente à la table 1, est à ma connaissance celle de Meyer [M2] de 1954, Killingbeck (sans citer Meyer) a publié l'équivalent de la table 2, mais l'équation (1) de la table 1 ne semblait pas être connue dans la littérature physique.

4. LES PROJETS ANNONCÉS DES PHYSICIENS

Certainement de nombreuses autres tables de polynômes invariants ont été annoncées et paraîtront dans un avenir proche. J'espère que la vulgarisation que je viens de faire de résultats mathématiques établis ces vingt-cinq dernières années, aidera ces projets (cf. [K2], [M1]). Il y a beaucoup à faire si l'on tient compte de toutes les représentations irréductibles, non seulement des groupes ponctuels mais aussi des 230 groupes cristallographiques. Jean Mozrzymas, qui a établi des tables très condensées de ces représentations, et moi avons réfléchi à cette question. Nous n'annonçons aucun projet, mais je vous livre informellement quelques unes de nos réflexions:

i) Les représentations irréductibles projectives des groupes cristallographiques pour lesquelles il serait le plus utile aux physiciens de connaître l'algèbre R^G des polynômes invariants sont celles qui ont pour image un groupe fini⁸.

ii) Il n'y a pas de méthodes pour déduire simplement l'algè-

⁸ Dans tout groupe cristallographique G les translations forment un sous-groupe invariant $\sim Z^3$, dont le groupe dual $\sim T_3$ (le tore à 3 dimensions) est appelé zone de Brillouin. Le quotient $G/Z^3 = Q$ agit effectivement sur T_3 . Les points de T_3 (en dehors de la strate générique ouverte dense) c'est-à-dire les vecteurs d'onde $0 \neq k \in T$, qui ont un stabilisateur (= petit groupe) maximal, fournissent - par le mécanisme des représentations induites - de telles représentations.

bre R^G pour une représentation quelconque de G , en supposant que le problème ait été résolu pour les représentations irréductibles.

iii) Obtient-on R^G pour une représentation isotypique (= factorielle = somme directe de représentations irréductibles équivalentes) par polarisation des polynomes invariants pour la représentation irréductible correspondante: [K2]? Pas toujours.

iv) Au lieu de la représentation la plus générale, on aura donc simplement à considérer les représentations sommes directes de représentations irréductibles toutes inéquivalentes. Pour un groupe fini de n classes de conjugaison (= $|G|$ pour un groupe abélien), cela fait 2^n cas à considérer.

v) Si G est abélien, la méthode de Stanley s'applique à toutes les représentations. Soit m la dimension d'une telle représentation. $G \times G \times \dots \times G$ m fois, est alors engendré par pseudo-réflexions, le sous-groupe G , identifié au diagonal G^d est sous-groupe invariant à quotient abélien.

vi) La méthode de Stanley n'est pas la panacée, mais d'autres outils comparables peuvent être développés. Par exemple si $G' \leq H \leq G$ mais c'est H qui est engendré par pseudo-réflexions, G agit sur R^H et on peut trouver une base d'intégrité transformée en elle-même. On est alors ramené au problème de la détermination des polynomes invariants par G/H (agissant linéairement sur l'espace à une dimension de la base), que l'on sait résoudre (cas iv).

Autre remarque

Au lieu de considérer l'action d'un sous-groupe discret G de $O(3)$ sur les polynomes définis sur notre espace à 3 dimensions, on peut considérer l'algèbre enveloppante U de $O(3)$. C'est ce que viennent de faire Patera et Winternitz dans un preprint récent [P1] (un programme plus général avait été esquissé en [J1]). Les générateurs L_x, L_y, L_z de U étant les composantes d'un pseudo-vecteur, seul le sous-groupe $G \cap SO(3)$ de G agit effectivement.

On est ramené à étudier la famille de groupes C_n , D_n , T , O , Y . Dès qu'on connaît trois invariants d'une base, le quatrième est engendré par les relations de commutations dans U ; quelle est la généralité de ce phénomène? Cette approche est intéressante pour attaquer le problème de l'*étiquette manquante* dont a parlé R. Sharp le premier jour. Voir aussi la conférence de P. Winternitz le dernier jour.

REMERCIEMENTS

Je remercie spécialement Jan Mozrzymas; nous avons ensemble étudié la littérature mathématique et réfléchi à ce problème. Tous deux nous avons beaucoup bénéficié de conversations à l'IHES avec P. Cartier, P. Deligne, D. Eisenbud - qui nous a aussi communiqué le preprint de Stanley - et D. Mumford. J'ai aussi bénéficié de discussions avec W. Opechowski (Vancouver), J. Patera, P. Winternitz, M. Kibler et R. Sharp (Montréal) qui de plus m'ont donné une bibliographie plus complète que celle qui apparaît ici.

BIBLIOGRAPHIE

- B1. H.A. BETHE, Ann. Phys. Leipzig. 3, 133 (1929).
- B2. N. BOURBAKI, *Groupes et Algèbres de Lie*, Ch. IV, V, VI, Hermann (Paris).
- B3. W. BURNSIDE, *Theory of Groups of Finite Order*, 2nd Ed., Cambridge, 1911; reprint, Dover, 1955.
- C1. C. CHEVALLEY, Amer. J. Math. 77, 778 (1955).
- C2. H.S.M. COXETER, Duke Mat. J. 18, 765 (1951).
- F1. L. FLATTO et M.M. WEINER, Amer. J. Math. 91, 591 (1969).
- H1. D. HILBERT, Math. Ann. 36, 473 (1890).
- J1. B.R. JUDD, W. MILLER, Jr., J. PATERA et P. WINTERNITZ, J. Math. Phys. 15, 1787 (1974).
- K1. J. KILLINGBECK, J. Phys. (Solid State Phys.) C5, 2497 (1972).
- K2. V. KOPSKY, J. Phys. (Solid State Phys.) C8, 3251 (1975).
- L1. L.D. LANDAU et E.M. LIFSHITZ, *Mécanique Quantique* (Mir, Moscou).

- M1. A.G. McLELLAN, J. Phys. (Solid State Phys.) C7, 3326 (1974).
 M2. B. MEYER, Can. J. Math. 6, 135 (1953).
 M3. J. MOZRZYMAS, Bull. Acad. Polon. Sci. Ser. Math. et Phys. 23, 485, 493, 499 (1975), et preprint "Algebraic description of space groups and their representations", Stony Brook, N.Y.
 M4. T. MOLIEN, Sitzungsber. König Preuss Akad. Wiss., 1152 (1897).
 N1. M. NAGATA, Amer. J. Math. 81, 766 (1959).
 P1. J. PATERA et P. WINTERNITZ, J. Chem. Phys. 65, 2725 (1976).
 S1. G.C. SHEPHARD, Enseignement Mathématique 2, 42 (1956).
 S2. G.C. SHEPHARD et J.A. TODD, Can. J. Math. 6, 274 (1954).
 S3. L. SOLOMON, Nagoya Math. J. 22, 57 (1963).
 S4. L. SOLOMON, Trans. Amer. Math. Soc. 113, 274 (1964).
 S5. R.P. STANLEY, "Relative invariants of finite groups generated by pseudo-reflexions", preprint, 1976.
 S6. R. STEINBERG, Can. J. Math. 12, 616 (1960).

TABLE 1. Base d'intégrité de l'algèbre des polynomes (en x, y, z) invariants par un sous-groupe discret de $O(3)$.

Cette base est donnée par les polynomes $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ et, éventuellement $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$, qui sont des polynomes en x, y, z . Le polynome invariant le plus général est de la forme:

$$p_0(\theta_1, \theta_2, \theta_3) + \sum_i \varphi_i p_i(\theta_1, \theta_2, \theta_3), \quad (1)$$

où p_0 et p_i sont des polynomes *arbitraires* de 3 variables et où, suivant les groupes, la somme \sum_i comprend 0, 1 ou 3 termes.

La dimension c_n , de l'espace vectoriel R_n^G des polynomes invariants homogènes de degré n , est donnée par

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n t^n = \frac{N(t)}{(1-t^{d_1})(1-t^{d_2})(1-t^{d_3})}, \quad d_i = \text{degré de } \theta_i,$$

où selon qu'il y a 0, 1 ou 3 polynomes φ_i ,

$$N(t) = 1 \quad \text{ou} \quad 1 + t^{\delta_1} \quad \text{ou} \quad 1 + t^{\delta_1} + t^{\delta_2} + t^{\delta_3}, \quad \delta_i = \text{degré de } \varphi_i.$$

G	G	θ_1	θ_2	θ_3	φ_1	Notations
C_n $n > 1$	n	z	ρ	γ_n	σ_n	$\rho = x^2 + y^2$ $\gamma_n = \text{Re}(x+iy)^n$, $\sigma_n = \text{Im}(x+iy)^n$
C_{nv}	2n	z	ρ	γ_n		notons que $\gamma_n^2 + \sigma_n^2 = \rho^n$
C_{nh} $n > 1$	2n	z^2	ρ	γ_n	σ_n	
S_{2n}	2n	z^2	ρ	γ_{2n}	σ_{2n}	$\varphi_2 = z\gamma_n, \quad \varphi_3 = z\sigma_n$
D_n	2n	z^2	ρ	γ_n	$z\sigma_n$	
D_{nd}	4n	z^2	ρ	γ_{2n}	$z\sigma_n$	$\tau_n = x^n + y^n + z^n$
D_{nh}	4n	z^2	ρ	γ_n		$K = (1 + \sqrt{5})/2$
T	12	τ_2	τ_4	β	α_0	$\alpha_m = (K^m x^2 - y^2)(K^m y^2 - z^2)$ $\times (K^m z^2 - x^2)$
T_h	24	τ_2	τ_4	β^2	α_0	
T_d	24	τ_2	τ_4	β		$\beta = xyz$
O	24	τ_2	τ_4	β^2	$\beta\alpha_0$	$\chi_1(x, y, z) = K^4 x^4 + K^{-4} y^4 +$ $z^4 - 2x^2 y^2 - 2z^2 (Kx^2 + K^{-1} y^2)$
O_h	48	τ_2	τ_4	β^2		
Y	60	τ_2	α_2	$\tau_4^{\alpha_4}$	$\beta\chi_1\chi_2\chi_3$	$\chi_2(x, y, z) = \chi_1(z, x, y)$
Y_h	120	τ_2	α_2	$\tau_4^{\alpha_4}$		$\chi_3(x, y, z) = \chi_1(y, z, x)$

La nomenclature et la présentation des groupes sont celles de Landau et Lifschitz, *Mécanique quantique*.

La table 2 donne explicitement ces bases pour les 32 groupes cristallographiques ponctuels.

TABLE 2. Base d'intégrité de l'algèbre des polynomes invariants des 32 groupes ponctuels cristallographiques.

G	G	θ_1	θ_2	θ_3	φ_1	
C_1	1	z	x	y	$\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$	
$C_i =$						
S_2	2	z^2	x^2	y^2		
$C_S =$					xy xy	
C_{1h}	2	z^2	x	y		
C_2	2	z	x^2	y^2		
C_{2h}	4	z^2	x^2	y^2		
C_{2v}	4	z	$\left. \vphantom{\begin{matrix} z \\ z^2 \\ z^2 \end{matrix}} \right\} x^2$	$\left. \vphantom{\begin{matrix} y \\ y^2 \\ y^2 \end{matrix}} \right\} y^2$	xyz	
D_2	4	z^2				
D_{2h}	8	z^2				
C_3	3	z	$\left. \vphantom{\begin{matrix} z \\ z \\ z^2 \\ z^2 \\ z^2 \end{matrix}} \right\} x^2 + y^2$	$\left. \vphantom{\begin{matrix} x(x^2 - 3y^2) \\ x^6 - 15x^4y^2 \\ +15x^2y^4 - y^6 \end{matrix}} \right\}$	$y(3x^2 - y^2)$	
C_{3v}	6	z			$x(x^2 - 3y^2)$	$zy(3x^2 - y^2)$
D_3	6	z^2				$\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$
S_6	6	z^2				
D_{3h}	12	z^2				
C_4	4	z	$\left. \vphantom{\begin{matrix} z \\ z \\ z^2 \\ z^2 \\ z^2 \\ z^2 \\ z^2 \\ z^2 \end{matrix}} \right\} x^2 + y^2$	$\left. \vphantom{\begin{matrix} x^2y^2 \end{matrix}} \right\} x^2y^2$	$xy(x^2 - y^2)$	
C_{4v}	8	z				
S_4	4	z^2				$\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$
C_{4h}	8	z^2				$xy(x^2 - y^2)$
D_{2d}	8	z^2				xyz
D_4	8	z^2				$xyz(x^2 - y^2)$
D_{4h}	16	z^2				

TABLE 2. (suite)

G	G	θ_1	θ_2	θ_3	φ_1									
C_{3h}	6	z^2	} x^2+y^2	$x(x^2-3y^2)$	$y(3x^2-y^2)$									
C_6	6	z		} $x^6-15x^4y^2$ $+15x^2y^4-y^6$	$xy(3x^2-y^2)(x^2-3y^2)$	$zy(3x^2-y^2)$								
D_{3d}	12	z^2			} $x^6-15x^4y^2$ $+15x^2y^4-y^6$	$xy(3x^2-y^2)(x^2-3y^2)$	$zxy(3x^2-y^2)(x^2-3y^2)$							
C_{6v}	12	z				} $x^6-15x^4y^2$ $+15x^2y^4-y^6$	$xy(3x^2-y^2)(x^2-3y^2)$	$zxy(3x^2-y^2)(x^2-3y^2)$						
C_{6h}	12	z^2					} $x^6-15x^4y^2$ $+15x^2y^4-y^6$	$xy(3x^2-y^2)(x^2-3y^2)$	$zxy(3x^2-y^2)(x^2-3y^2)$					
D_6	12	z^2						} $x^6-15x^4y^2$ $+15x^2y^4-y^6$	$xy(3x^2-y^2)(x^2-3y^2)$	$zxy(3x^2-y^2)(x^2-3y^2)$				
D_{6h}	24	z^2							} $x^6-15x^4y^2$ $+15x^2y^4-y^6$	$xy(3x^2-y^2)(x^2-3y^2)$	$zxy(3x^2-y^2)(x^2-3y^2)$			
T	12	} $x^2+y^2+z^2$	} $x^4+y^4+z^4$							xyz	$(x^2-y^2)(y^2-z^2)(z^2-x^2)$			
T_h	24			} $x^4+y^4+z^4$						} $x^4+y^4+z^4$	$x^2y^2z^2$	$(x^2-y^2)(y^2-z^2)(z^2-x^2)$		
T_d	24				} $x^4+y^4+z^4$						} $x^4+y^4+z^4$	xyz	$(x^2-y^2)(y^2-z^2)(z^2-x^2)$	
O	24					} $x^4+y^4+z^4$						} $x^4+y^4+z^4$	$x^2y^2z^2$	$(x^2-y^2)(y^2-z^2)(z^2-x^2)$
O_h	48						} $x^4+y^4+z^4$						} $x^4+y^4+z^4$	$x^2y^2z^2$
								} $x^4+y^4+z^4$						} $x^4+y^4+z^4$
		} $x^4+y^4+z^4$	} $x^4+y^4+z^4$											
				} $x^4+y^4+z^4$					} $x^4+y^4+z^4$					
					} $x^4+y^4+z^4$					} $x^4+y^4+z^4$				
						} $x^4+y^4+z^4$					} $x^4+y^4+z^4$			

G	φ_1	φ_2	φ_3
$C_i = S_2$	xy	yz	zx
S_4	zxy	$z(x^2-y^2)$	$xy(x^2-y^2)$
$C_{3i} = S_6$	$xz(x^2-3y^2)$	$yz(3x^2-y^2)$	$xy(3x^4-10x^2y^2+3y^4)$