Acta Cryst. (1977). A33, 509–511

Remarques sur les Coreprésentations des Groupes Ponctuels Magnétiques

PAR JEAN SIVARDIÈRE

Laboratoire de Chimie Physique Nucléaire, Département de Recherche Fondamentale, Centre d'Etudes Nucleaires de Grenoble, 85X, 38041 *Grenoble Cédex, France*

(*Reçu le* 13 *septembre* 1976, *accepté le* 10 *décembre* 1976)

The derivation of the representations of a simple or double point group G^+ is compared with that of the corepresentations of a non-trivial magnetic group G_m^+, isomorphous with G^+, starting from the representations of their common invariant subgroup H^+ of index two.

Les coreprésentations des groupes magnétiques ont été déterminées par divers auteurs (Dimmock & Wheeler, 1962; Cracknell, 1966; Cracknell & Wong, 1967), à partir des considérations générales de Wigner (Wigner, 1959). Nous réexaminons leurs résultats d'un point de vue géométrique après avoir discuté la structure algébrique des groupes magnétiques.

I. Structure algébrique des groupes magnétiques

Soit G un groupe ponctuel, G^+ le groupe double associé, et G_m^+ le groupe double paramagnétique correspondant. Si G est d'ordre g, G^+ est d'ordre $2g$, et G_m^+ d'ordre $4g$. Cependant G_m^+ n'est pas un produit direct. Soit en effet E l'identité, $\bar{E}$ l'opérateur de Bethe, R l'opérateur anti-unitaire renversement du temps, noté θ dans G_m^+: $\theta^2=\bar{E}$, $\theta^4=E$. G^+ est l'extension de G par $(E,\bar{E})$ (Sivardière, 1969), et de même G_m^+ est l'extension du groupe (E,R) par G^+. G_m^+ peut également être considéré comme l'extension de G par le groupe cyclique d'ordre 4 $(E,\theta,\bar{E},\theta\bar{E})$, ou encore comme l'extension du produit direct $G\times(E,R)$ par le groupe $(E,\bar{E})$.

Soit maintenant G_m un groupe magnétique mixte, isomorphe du groupe trivial G, H leur sous-groupe invariant d'indice 2 commun: seuls les éléments de G_m qui appartiennent à H sont unitaires. Soit enfin G_m^+ le groupe double associé à G_m: les éléments unitaires u de G_m^+ forment un sous-groupe invariant d'indice 2, qui n'est autre que le groupe double H^+. Soit $a_0=\theta v_0$ un élément antiunitaire de G_m^+, tel que $G_m^+=H^+ + a_0H^+$. G_m^+ est une extension par H^+ du groupe (E,v_0).

En résumé, tout groupe magnétique peut s'écrire: $G_m^+=H^+ + a_0H^+$; si $a_0=\theta$, G_m^+ est paramagnétique.

II. Coreprésentations des groupes paramagnétiques

Wigner (1959) a montré comment construire les coreprésentations irréductibles D de G_m^+ à partir des représentations irréductibles Δ_i de H^+. Considérons la représentation Δ_j de H^+ définie par:

$$\Delta_j(u)=\Delta_i(a_0^{-1}ua_0)^*=\Delta_i(v_0^{-1}uv_0)^*. \tag{1}$$

Trois cas sont alors à distinguer. (*a*) Δ_i et Δ_j sont équivalentes. On peut définir la matrice β telle que:

$$\Delta_j(u)=\beta^{-1}\Delta_i(u)\beta\,. \tag{2}$$

Si: $\beta\beta^*=\Delta_i(a_0^2)$ la coreprésentation D de G_m^+ correspondant à Δ_i se réduit suivant Δ_i quand on la restreint aux éléments de H^+. (*b*) Δ_i et Δ_j sont équivalentes, mais: $\beta\beta^*=-\Delta_i(a_0^2)$; la coreprésentation D se réduit suivant $2\Delta_i$. (*c*) Δ_i et Δ_j ne sont pas équivalentes, nous dirons qu'elles forment une co-orbite: la coreprésentation D de G_m^+ associée à cette co-orbite se réduit suivant $\Delta_i+\Delta_j$.

Dimmock & Wheeler (1962) ont donné un critère permettant de déterminer à quel cas appartient une représentation Δ_i et se réduisant à celui de Frobenius & Schur (1906) si $a_0=\theta$. L'utilisation de ce critère peut être évitée. Considérons tout d'abord le cas des groupes G_m^+ paramagnétiques. Puisque: $a_0=\theta$, $v_0=E$ et $\Delta_j=\Delta_i^*$. Si Δ_i est une représentation vectorielle Δ_i et Δ_i^* sont soit identiques – et alors $\beta=\Delta_i(\theta^2)=1$ (cas *a*) – soit complexes conjuguées – et elles forment une co-orbite (cas *c*). Si Δ_i est une représentation spinorielle, Δ_i et Δ_i^* sont soit identiques – et alors $\beta\beta^*=1$, $\Delta_i(\theta^2)=-1$ (cas *b*) – soit équivalentes non réelles – et alors β est de la forme $\left(\begin{smallmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{smallmatrix}\right)$ d'où $\beta\beta^*=-1$, $\Delta_i(\theta^2)=-1$ (cas *a*) car Δ_i est la réduction de la représentation $D_{1/2}$ du groupe des rotations ou s'en déduit par induction – soit complexes conjuguées – et elles forment une co-orbite (cas *c*).

On retrouve également ces résultats en considérant la classification des fonctions de spin $|J,M\rangle$ suivant les représentations Δ_i des groupes ponctuels H^+ (Sivardière, 1976). Puisque:

$$\theta|J,M\rangle=(-)^{J-M}|J,M\rangle \tag{3}$$

quand on ajoute l'opération θ au groupe H^+, les fonctions $|J,M\rangle$ et $|J,-M\rangle$ deviennent partenaires d'une même coreprésentation si elles n'étaient pas déjà partenaires d'une même représentation de H^+. Ainsi si $H^+=3^+$, les représentations $\Gamma_2(\mu=1)$ et $\Gamma_3(\mu=-1)$ forment une coorbité, de même que $\Gamma_4(\mu=\frac{1}{2})$ et $\Gamma_5(\mu=-\frac{1}{2})$; la représentation $\Gamma_1(\mu=0;\ \pm 3)$ est au contraire du type (*a*), et la représentation $\Gamma_6(\mu=\pm\frac{3}{2})$ du type (*b*) en vertu du théorème de Kramers (Tableau 1): les notations utilisées sont celles de Koster, Dimmock, Wheeler & Statz (1963); μ est le nombre quantique cristallin, identique au module du vecteur **k** défini par Altmann (1963). La considération des fonctions $|J,M\rangle$ ne permet pas de distinguer les cas (*a*) et (*b*).

Tableau 1. *Groupements en orbites et co-orbites des représentations du groupe* 3^+

3^+	$3'$; $\bar{3}'$	$6'$; $\bar{6}'$	$32'$; $3m'$	32; $3m$
Γ_1 ($\mu=0$)	$-a$	$-a$	$-a$	$<\Gamma_1, \Gamma_2$
Γ_2 ($\mu=1$) Γ_3 ($\mu=-1$)	$>c$	$>c$	$-a$ $-a$	$>\Gamma_3$
Γ_4 ($\mu=\frac{1}{2}$) Γ_5 ($\mu=-\frac{1}{2}$)	$>c$	$>c$	$-a$ $-a$	$>\Gamma_4$
Γ_6 ($\mu=\pm\frac{3}{2}$)	$-b$	$-a$	$-a$	$<\Gamma_5, \Gamma_6$

On peut remarquer qu'une rotation binaire autour d'un axe 2_y a la même action sur $|J,M\rangle$ que l'opération θ: de ce fait les représentations du groupe 32, et les co-représentations du groupe 3_m^+ sont très semblables, à ceci près qu'à Γ_6 de 3^+ correspondent par induction deux représentations Γ_5 et $\Gamma_6=\Gamma_5^*$ de 32^+ de dimension 1, et non une représentation de dimension 2.

Les remarques précédentes s'appliquent aux groupes diédriques et cubiques paramagnétiques, et nous les utilisons dans la suite pour étudier les coreprésentations des groupes magnétiques mixtes.

III. Coreprésentations des groupes magnétiques mixtes

(*A*) Considérons tout d'abord les 21 groupes anticentrés: $a_0=\theta.\bar{1}$, $v_0=\bar{1}$. v_0 commute avec tous les éléments de H^+ donc, d'après la relation (1), $\Delta_j=\Delta_i^*$ et les représentations Γ_i de H^+ se groupent en co-orbites comme dans le groupe paramagnétique $H^+ + \theta H^+$. La considération des fonctions $|J,M\rangle$ confirme ce point de vue: en effet, les opérateurs θ et $\theta.\bar{1}$ agissent de la même manière sur $|J,M\rangle$.

(*B*) $\Delta_j=\Delta_i^*$ également pour les groupes cycliques $G_m^+=4'$, $\bar{4}'$, $6'$, $\bar{6}'$. Pour les groupes $4'$ et $\bar{4}'$, $H^+=2^+$ et $a_0=\theta.4$ ou $\theta.\bar{4}$: Γ_1 est du type (*a*), Γ_3 et Γ_4 du type (*c*), et Γ_2 du type (*b*). En effet, $\Gamma_2[(\theta.4)^2]=\Gamma_2(\bar{E}2)=-1$ et $\beta=+1$. De même pour les groupes $6'$ et $\bar{6}'$, $H^+=3^+$; Γ_1 est du type (*a*), Γ_2 et Γ_3, Γ_4 et Γ_5 du type (*c*), et Γ_6 du type (*a*): en effet, $\Gamma_6[(\theta.6)^2]=\Gamma_6(\bar{E}3)=+1$, et $\beta=+1$ (Tableau 1).

(*C*) Considérons les groupes G_m^+ tels que H^+ est centrosymétrique: $H^+=K^+\times\bar{1}$. Etudions d'abord le groupe mixte (K^+,a_0). Le groupe mixte (H^+,a_0) est le produit direct $(K^+,a_0)\times\bar{1}$ et ses coreprésentations se déduisent de celles de (K^+,a_0): elles sont paires ou impaires par rapport à l'inversion. Cette situation est celle des dix groupes mixtes $G_m^+(H^+)$:

$$\frac{2'}{m'}(\bar{1});\ m'm'm\left(\frac{2}{m}\right);\ \frac{4'}{m}\left(\frac{2}{m}\right);\ \frac{4'}{m}mm'\,(mmm);$$

$$\frac{4}{m}m'm'\left(\frac{4}{m}\right);\ \bar{3}m'(\bar{3});\ \frac{6'}{m'}(\bar{3});\ \frac{6'}{m'}m'm(\bar{3}m);\ \frac{6}{m}m'm'\left(\frac{6}{m}\right);$$

$$m3m'(m3)\,.$$

(*D*) Nous envisageons maintenant le cas où H^+ n'est pas centrosymétrique et où v_0 ne commute pas avec tous les éléments de H^+, et tout d'abord les groupes diédriques $n2'$, nm', $\bar{n}2'$ tels que: $H^+=n$ ou $\bar{n}$. L'opération $\bar{1}$ laissant les fonctions $|J,M\rangle$ invariantes, elles se classent de la même manière suivant les représentations de n et $\bar{n}$. Puisque: $2_y\theta|J,M\rangle=|J,M\rangle$, chaque représentation de H^+ forme une co-orbite, et toutes les coreprésentations sont du type (*a*) puisque: $\Delta(a_0^2)=\Delta(\theta^2v_0^2)=\Delta(\bar{E}^2)=1$, et $\beta=1$. Les 13 groupes suivants sont ainsi décrits: $2'$; m'; $22'2'$; $2m'm'$; $2'mm'$; $42'2'$; $4m'm'$; $\bar{4}m'2'$; $32'$; $3m'$; $\bar{6}2'm'$; $62'2'$; $6m'm'$.

(*E*) Nous envisageons enfin (Tableaux 2 et 3) les dix cas où H^+ n'est pas abelien. $H^+=222^+$ pour les groupes $4'22'$, $\bar{4}'2m'$, $4'mm'$, $\bar{4}'m2'$; $H^+=32^+$ pour les groupes $\bar{6}'m2'$, $6'mm'$, $\bar{6}'m'2$ et $6'22'$; $H^+=23^+$ pour les groupes $\bar{4}'3m'$ et $4'32'$.

Tableau 2. *Groupements en orbites et co-orbites des représentations du groupe* 222^+

222^+	$222.1'$; $m'm'm'$	$4'22'$; $4'mm'$; $\bar{4}'2m'$; $\bar{4}'2'm$	422; $4mm$; $\bar{4}2m$
Γ_1 $\|J,0\rangle$ J pair	$-a$	$-a$	$<\Gamma_1, \Gamma_3$
Γ_3 $\|J,0\rangle$ J impair	$-a$	$-a$	$<\Gamma_2, \Gamma_4$
Γ_2 $\frac{\|1\rangle+\|-1\rangle}{\sqrt{2}}$	$-a$	$>c$	$>\Gamma_5$
Γ_4 $\frac{\|1\rangle-\|-1\rangle}{\sqrt{2}}$	$-a$		
Γ_5 $\|\pm\frac{1}{2}\rangle$	$-a$	$-a$	$<\Gamma_6, \Gamma_7$

Tableau 3. *Groupements en orbites et co-orbites des représentations du groupe* 23^+

222^+	23^+		$23.1'$; $m'3$	$4'32'$; $\bar{4}'3m'$	432; $\bar{4}3m$
Γ_1	Γ_1	$\|0\rangle_{111}$	$-a$	$-a$	$<\Gamma_1, \Gamma_2$
Γ_1	Γ_2 Γ_3	$\|1\rangle_{111}$ $\|-1\rangle_{111}$	$>c$	$-a$ $-a$	$>\Gamma_3$
Γ_2, Γ_3, Γ_4	Γ_4		$-a$	$-a$	$<\Gamma_4, \Gamma_5$
Γ_5	Γ_5	$\|\pm\frac{3}{2}\rangle_{111}$	$-a$	$-a$	$<\Gamma_6, \Gamma_7$
Γ_5	Γ_6 Γ_7	$\|\frac{1}{2}\rangle_{111}$ $\|-\frac{1}{2}\rangle_{111}$	$>c$	$-a$ $-a$	$>\Gamma_8$

Le Tableau 2 illustre le cas où $H^+=222^+$. Les fonctions $(1\rangle+|-1\rangle)/\sqrt{2}=|0\rangle_y$ (état $J_z=0$ pour un axe de quantification parallèle à y) et $(|1\rangle-|-1\rangle)/\sqrt{2}=|0\rangle_x$ sont permutées par l'opération $a_0=2'_{xy}$ donc si $G^+=4'22'$, Γ_2 et Γ_4 forment une co-orbite.

Le Tableau 3 illustre le cas où: $H^+=23^+=222^+_\wedge 3$ et $a_0=\theta.2_{\bar{x}y}$. Quantifions les fonctions $|J,M\rangle$ suivant l'axe [111]: leur classification suivant les représentations de H^+ s'obtient immédiatement en remarquant que Γ_1, Γ_2 et Γ_3, Γ_5, Γ_6 et Γ_7 d'autre part sont engendrées par les représentations du groupe 3, d'où les co-orbites.

IV. Comparaison entre représentations et corepresentations

Nous comparons les orbites et co-orbites formées par les représentations d'un groupe H^+ relativement à deux groupes $G^+=H^+_\wedge v_0$ et $G_m^+=(H^+, a_0)$ admettant H^+ comme sous-groupe invariant d'indice 2.

Les représentations de G^+ peuvent se construire à partir de celles de H^+ par la méthode d'induction (Lomont, 1959). On compare les représentations $\Delta_i(u)$ et:

$$\Delta_j(u)=\Delta_i(v_0^{-1}uv_0) \tag{4}$$

G^+/H^+ étant d'ordre 2, ou bien Δ_j et Δ_i sont équivalentes (Δ_i est alors dite auto-conjuguée), ou bien elles forment une orbite. A chaque orbite (Δ_i) ou (Δ_i, Δ_j) correspondent une ou plusieurs représentations de G^+, qui peuvent être déterminées par identification (Sivardière, 1969).

Comme on l'a vu, les corepresentations de G_m^+ se construisent de manière voisine à partir des co-orbites formées par les représentations de H^+. Cependant, d'après (3) et (4), les orbites et co-orbites ne sont pas identiques: les représentations réelles se groupent en orbites et co-orbites identiques; si $\Delta_j=\Delta_i^*$, Δ_i et Δ_j forment une orbite alors que Δ_i et Δ_j forment deux co-orbites (sauf si v_0 commute avec les éléments de H^+).

D'autre part, à chaque co-orbite correspond une seule corépresentation. Enfin la distinction entre les cas (a) et (b) n'a aucune signification pour les représentations.

Les Tableaux 1, 2 et 3 illustrent cette comparaison. Ainsi les trois représentations vectorielles du groupe 3 sont groupées en orbites et co-orbites relativement aux groupes 32 et 32'. Γ_1, réelle, forme une orbite et une co-orbite; par contre Γ_2 et Γ_3, complexes conjuguées, forment une seule orbite et deux co-orbites. De même les trois représentations spinorielles de 3^+ forment deux orbites et trois co-orbites. Comme celle des co-orbites, la détermination des orbites s'effectue aisément en comparant les fonctions $|J,M\rangle$ et $v_0|J,M\rangle$, $|J,M\rangle$ étant fonction de base d'une représentation de H^+.

En résumé, nous avons montré que les représentations de G^+ et les corepresentations de G_m^+ se construisent de la même manière en considérant la classification des fonctions $|J,M\rangle$ suivant les représentations Δ_i de leur sous-groupe invariant commun H^+, et leurs propriétées de transformation dans l'opération v_0 ou a_0. La distinction entre corepresentations de types (a) et (b) s'effectue par comparaison des matrices $\Delta_i(a_0^2)$ et $\beta\beta^*$.

Références

ALTMANN, S. L. (1963). *Rev. Mod. Phys.* **35**, 641–645.

CRACKNELL, A. P. (1966). *Progr. Theor. Phys.* **35**, 196–213.

CRACKNELL, A. P. & WONG, K. C. (1967). *Aust. J. Phys.* **20**, 173–188.

DIMMOCK, J. O. & WHEELER, R. G. (1962). *J. Phys. Chem. Solids*, **23**, 729–741.

FROBENIUS, G. & SCHUR, I. (1906). *Sitzungber. Dtsch. Akad. Wiss. Berlin, Kl. Phys. Math. Tech.* p. 186.

KOSTER, G. F., DIMMOCK, J. O., WHEELER, R. G. & STATZ, H. (1963). *Properties of the Thirty-two Point Groups.* Cambridge: MIT Press.

LOMONT, J. S. (1959). *Applications of Finite Groups.* New York: Academic Press.

SIVARDIÈRE, J. (1969). *C. R. Acad. Sci. Paris*, **268**, 1174–1177.

SIVARDIÈRE, J. (1976). Résultats non publiés.

WIGNER, E. P. (1959). *Group Theory and its Application to Quantum Mechanics of Atomic Spectra.* New York: Academic Press.