

## Classes d'Éléments Conjugués des Groupes Cristallographiques

PAR JEAN SIVARDIÈRE

Département de Recherche Fondamentale, Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble, 85 X, 38041 Grenoble CEDEX, France

(Reçu le 8 novembre 1977, accepté le 4 mai 1978)

Let  $G$  be a finite group,  $H$  an invariant subgroup and  $F$  the corresponding factor group. The classes of conjugated elements of  $G$  are derived from the classes of  $H$  and  $F$ . We consider simple point groups and symmorphic space groups, which are semi-direct products  $H \rtimes F$ , then double point groups and non-symmorphic space groups, which are extensions of  $F$  by  $H$ .

### Introduction

Soit  $G$  un groupe fini, produit direct de deux groupes finis  $H$  et  $F$ :  $G = H \times F$ . Il est bien connu que le nombre des classes d'éléments conjugués de  $G$  est égal au produit des nombres de classes des deux facteurs directs; les éléments d'une classe de  $G$  sont les produits des éléments d'une classe de  $H$  par les éléments d'une classe de  $F$ . On sait aussi que les représentations irréductibles de  $G$  sont les produits de Kronecker des représentations irréductibles de  $H$  par les représentations irréductibles de  $F$  (Jansen & Boon, 1967).

Nous nous proposons d'étudier le cas plus général où  $C$  n'est pas un produit direct. Soit donc  $G$  un groupe fini, possédant un sous-groupe invariant  $H$ , et  $F = G/H$  le groupe facteur. Dans le cas général  $G$  est une extension de  $F$  par  $H$ , qui peut se réduire à un produit semi-direct  $H \rtimes F$  ou direct  $H \times F$  (Ascher & Janner, 1965; Sivardièrre & Bertaut, 1970). Dans le dernier cas seulement les deux groupes  $H$  et  $F$  jouent des rôles symétriques. Si les représentations de  $H$  et  $F$  sont connues, celles de  $G$  s'en déduisent par la méthode de l'induction (Lomont, 1959). Par analogie, nous étudions les classes d'éléments conjugués de  $G$ , en supposant connues les classes de  $H$  et de  $F$ .

Nous considérons successivement les groupes ponctuels simples et les groupes d'espace symmorphiques, qui sont des produits semi-directs, puis les groupes d'espace non symmorphiques et les groupes ponctuels doubles, qui sont des extensions.

### 1. Classes d'éléments conjugués des groupes ponctuels simples

Tout groupe ponctuel admet la structure de produit semi-direct  $G = H \rtimes F$ ; les éléments  $C$  de  $F$  définissent des automorphismes externes de  $H$ , c'est-à-dire des permutations des éléments  $B$  de  $H$ :  $C(B) = CBC^{-1}$  est un élément  $B'$  de  $H$ .  $H$  étant abélien, tout élément de  $G$

peut s'écrire  $(C|B)$ , la loi produit étant (Sivardièrre & Bertaut, 1970):

$$(C|B)(C'|B') = [CC'|B.C(B')]. \quad (1)$$

En particulier,  $\varepsilon$  étant l'identité de  $F$  et  $e$  celle de  $H$ :

$$\begin{aligned} (C|B)^{-1} &= [C^{-1}|C^{-1}(B^{-1})] \\ (C|e)(\varepsilon|B) &= [C|C(B)] \\ (\varepsilon|B)(C|e) &= (C|B). \end{aligned} \quad (2)$$

#### 1A. Groupement des classes de $H$ en orbites

Soit  $B$  un élément de  $H$ , qui est abélien:

$$(C|B')(\varepsilon|B)(C|B')^{-1} = [\varepsilon|C(B)], \quad (3)$$

$B$  et  $C(B)$  forment deux classes distinctes de  $H$  dites conjuguées dans  $G$ , elles appartiennent à une même classe de  $G$ . On peut donc regrouper en 'orbites' les classes de  $H$ , comme on le fait avec les représentations de  $H$ : une orbite de classes de  $H$  forme une classe de  $G$ ;  $H$ , invariant dans  $G$ , contient un nombre entier de classes de  $G$ , donc d'orbites; les éléments de  $H$  qui commutent avec tous les éléments générateurs de  $F$  forment des classes auto-conjuguées.

Il existe autant d'orbites de classes que d'orbites de représentations.  $H$  étant un groupe abélien cyclique ou produit direct de groupes cycliques ( $H = 222 = 2 \times 2$ ), on peut en effet établir un isomorphisme entre ses classes  $B$  et ses représentations  $A_i$  comme cela est illustré dans le Tableau 1: si des classes se groupent en orbites, il en est de même des représentations corre-

Tableau 1. Orbites de classes et de représentations des groupes 422 et 23

$422 = 4_z \wedge 2_x$ $\varepsilon$ — $4^2$ — $4^1$ ↘ $4^3$ ↗	$A$ — $B$ — $E'$ ↘ $E''$ ↗	$23 = 2_x 2_y 2_z \wedge 3_{111}$ $\varepsilon$ — $2_x$ ↘ $2_y$ ↘ $2_z$ ↘	$A$ $B_1$ ↘ $B_2$ ↘ $B_3$ ↘
--	-------------------------------------	---	--------------------------------------

spondantes (les noyaux de deux représentations conjuguées sont identiques).

Si  $H$  n'est pas abélien (ce qui est le cas si on écrit:  $822 = 422 \wedge 2$ , ou  $432 = 23 \wedge 2$ ), ses classes se groupent également en orbites; toutes les classes d'une orbite contiennent le même nombre d'éléments. Cependant, le nombre d'orbites de classes n'est égal au nombre d'orbites de représentations que si  $F$  est d'ordre premier.

Réciproquement quand on passe de  $G$  à  $H$ , abélien ou non, (Gamba, 1968; Murnaghan, 1938), certaines classes deviennent réductibles, car elles comprennent plusieurs classes de  $H$ . On peut énoncer un théorème analogue à celui de Clifford (Lomont, 1959) relatif aux représentations de  $G$ : ou bien une classe de  $G$  est irréductible dans  $H$  et constitue une classe de  $H$  auto-conjuguée dans  $G$ ; ou bien elle est réductible et comprend toutes les classes d'une même orbite.

En particulier si  $H$  est invariant d'indice 2, une classe de  $G$  est auto-conjuguée quand on se limite aux éléments de  $H$ , ou réductible suivant deux classes de  $H$ . De même si  $H$  est invariant d'indice 3, une classe est auto-conjuguée ou réductible suivant trois classes de  $H$ . Plus généralement si  $F$  est cyclique, le nombre de classes d'une orbite divise l'ordre de  $F$ .

Nous étudions maintenant les classes formées par les éléments du sous-ensemble  $G-H$ .

1B. Classes de  $G$  engendrées par les classes de  $F$

Par analogie avec le problème des représentations, nous recherchons tout d'abord des classes de  $G$  'engendrées' par les classes de  $F$ . Rappelons que,  $G$  étant le produit semi-direct  $H \wedge F$ , les éléments  $(C|e)$  forment un sous-groupe de  $G$  isomorphe de  $F$  mais en général non-invariant puisqu'en général  $G$  n'est pas un produit direct.

Dans la classe de  $(C|e)$ , dite classe engendrée, on trouve les éléments suivants: d'une part les éléments  $(C'|e)$ ,  $C'$  appartenant à la classe de  $C$  dans  $F$ . Réciproquement si  $(C|B)$  et  $(C'|B')$  sont conjugués dans  $G$ ,  $C$  et  $C'$  sont nécessairement conjugués dans  $F$ ; d'autre part les éléments:

$$(\varepsilon|B)(C|e)(\varepsilon|B)^{-1} = [C|B.C(B^{-1})]. \quad (4)$$

Si  $(C|e)$  est un élément générateur de  $G$ ,  $[C|B.C(B^{-1})]$  est un élément générateur équivalent: les sous-groupes engendrés par ces éléments sont conjugués dans  $G$ .

Plus généralement, dans la classe de  $(C|B)$  on trouve: les éléments

$$(C'|O)(C|B)(C'|O)^{-1} = [C'CC'^{-1}|C'(B)] \quad (5)$$

et plus particulièrement les éléments  $[C|C(B)]$  et  $[C'|C'(B)]$ ,  $C'$  commutant avec  $C$ ; d'autre part les éléments

$$(\varepsilon|B')(C|B)(\varepsilon|B')^{-1} = [C|B'.B.C(B'^{-1})]. \quad (6)$$

Considérons par exemple le groupe  $32 = 3 \wedge 2_x$ , on trouve dans le même classe des générateurs équivalents  $(2_x|e)$ ,  $(2_y|e)$ ,  $(2_z|e)$  car:  $(\varepsilon|3)(2_x|e)(\varepsilon|3^2) = [2_x|3.2_x(3^2)] = (2_x|3^2) = (2_y|e)$ . Dans le groupe  $432 = 222 \wedge (3_{111} \wedge 2_{1\bar{1}0})$ , on trouve dans une même classe les générateurs  $3_{111}$ ,  $3_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}$ ,  $3_{1\bar{1}\bar{1}}$ ,  $3_{\bar{1}\bar{1}1}$  équivalents dans le groupe  $222$  et les éléments  $3^2_{111}$ , car  $3$  et  $3^2$  appartiennent à la même classe du groupe facteur  $32$ ; une autre classe contient le générateur  $2_{1\bar{1}0}$ , le générateur équivalent  $2_{110}$  par rapport à  $H$ , et les quatre autres axes binaires diagonaux puisque par exemple:  $3.2_{1\bar{1}0}.3^2 = 2_{101}$ .

1C. Classes nouvelles de  $G$

La considération des orbites et des classes engendrées épuise les éléments des groupes  $32 = 3 \wedge 2$  et  $23 = 222 \wedge 3$ . Mais en général l'ensemble des orbites et des classes engendrées ne recouvre pas le groupe  $G$ . En effet deux éléments  $(C|B')$  et  $(C|B'')$  ne sont dans la même classe, d'après la relation (6), que si  $B'$  et  $B''$  diffèrent d'un élément de la forme  $B.C(B^{-1})$ , ou s'il existe un élément  $C'$  commutant avec  $C$  et tel que:  $B'' = C'(B')$ .

Supposons d'abord que  $C = \varepsilon$ . Alors  $C'$  est quelconque, et quand  $C'$  décrit  $F$  et  $B'$  décrit  $H$ , on obtient les classes de  $G$  formées par les orbites de classes de  $H$ .

Supposons maintenant que  $C$  soit différent de  $\varepsilon$  et qu'il n'existe pas d'élément  $C'$  commutant avec  $C$ . Si  $B'$  est un élément de  $H$  qui n'est pas de la forme  $B.C(B^{-1})$ ,  $(C|B')$  n'est pas dans la classe de  $(C|\varepsilon)$ .  $H$  étant abélien, l'ensemble des éléments  $B.C(B^{-1})$ ,  $C$  fixe et  $B$  variable, forme un sous-groupe invariant de  $H$ ; le nombre de classes de  $G$  se déduisant de la classe de  $C$  dans  $F$  est égal à l'indice de ce sous-groupe (cet indice ne dépend pas de l'élément  $C$  lui-même mais seulement de sa classe dans  $F$ ). S'il existe au moins un élément  $C'$  commutant avec  $C$ , la propriété ci-dessus disparaît.

Exemple 1: considérons le groupe  $422 = 4_z \wedge 2_x$ . Les orbites sont données au Tableau 1. Si  $C = 2_{xy}$  et  $B = 4_z$ ,  $B.C(B^{-1}) = 4^2$  donc  $(2_x|e)$  et  $(2_x|4^2)$  sont des générateurs équivalents et forment une classe engendrée.

Une classe nouvelle est formée par les éléments  $(2_x|4) = 2_{xy}$  et  $(2_x|4^3) = 2_{x\bar{y}}$ , car  $4$  et  $4^3$  ne sont pas de la forme  $B.C(B^{-1})$ .

Exemple 2: considérons le groupe  $432 = 222 (3_{111} \wedge 2_{1\bar{1}0})$ . Le sous-groupe de  $H = 222$  des éléments  $B.2_{1\bar{1}0}(B^{-1})$  est  $(e, 2_z)$ , d'indice 2. Donc à la classe  $(2_{1\bar{1}0}, 2_{01\bar{1}}, 2_{101})$  du groupe facteur  $F = 32$  correspondent deux classes de  $432$ : la classe, engendrée, des six axes binaires diagonaux, et la classe nouvelle formée par les six axes 4, en particulier  $4_z = (2_{1\bar{1}0}|2_x)$  et  $4_x^3 = (2_{1\bar{1}0}|2_y)$ .

De même le sous-groupe de  $H = 222$  des éléments  $B.3_{111}(B^{-1})$  est  $H$  lui-même. Par suite les huit éléments

$(3_{111}|e)$ ,  $(3_{111}^2|e)$ ,  $(3_{111}|2_x)$ , ... forment une même classe, qui est une classe engendrée.

En conclusion,  $G$  étant le produit semi-direct  $H \wedge F$  les classes de  $G$  se déduisent simplement de celles de  $F$ . Soit  $C$  un élément de  $F$ : les éléments  $[C|C(B)]$  ( $B$  décrivant  $H$  et  $C$  une classe de  $F$ ) forment une classe; les éléments  $BC(B^{-1})$  forment un sous-groupe invariant de  $H$  d'indice  $i$ ; à  $C$  correspondent  $i$  classes de  $G$ , les éléments  $(C|B_j)$  appartiennent à la même classe quand  $B_j$  décrit le  $j$ ème complexe: la classe obtenue pour  $j = 1$  est une classe engendrée. Si un élément  $C'$  commute avec  $C$ ,  $(C|B)$  et  $[C|C'(B)]$  appartiennent à la même classe, d'où un regroupement éventuel de certaines des classes déterminées ci-dessus.

Ainsi, à chaque classe de  $F$  correspondent une ou plusieurs classes de  $G$ , comme l'illustre le Tableau 2 relatif aux groupes 422 et 432.

Tableau 2. Classes des groupes 422 et 432 associées aux classes du groupe facteur

422	432
$\begin{matrix} & (\varepsilon e) \\ \varepsilon & \swarrow \downarrow \searrow \\ & (\varepsilon 4^2) \\ & (\varepsilon 4^4), (\varepsilon 4^3) \end{matrix}$	$\begin{matrix} & (\varepsilon 0) \\ \varepsilon & \swarrow \downarrow \searrow \\ & (\varepsilon 2_x), (\varepsilon 2_y), (\varepsilon 2_z) \end{matrix}$
$\begin{matrix} & (2_x 0), (2_x 4^2) \\ 2_x & \swarrow \downarrow \searrow \\ & (2_x 4), (2_x 4^3) \end{matrix}$	$\begin{matrix} 3^1, 3^2 \text{---} 8 \text{ axes } 3 \\ \\ 3 \text{ axes } \begin{matrix} \swarrow \downarrow \searrow \\ 6 \text{ axes } 2' \\ 6 \text{ axes } 4 \end{matrix} \end{matrix}$

**2. Classes d'éléments conjugués des groupes d'espace symmorphiques**

Soit  $G_e$  un groupe d'espace symmorphique, c'est le produit semi-direct  $T \wedge G$ :  $T$  est le groupe des translations réticulaires  $(\varepsilon|T_i)$ ,  $G$  le groupe ponctuel formé par les opérations  $\alpha$ . Les éléments  $(\alpha|0)$ , où  $e = 0$  désigne la translation nulle, forment un sous-groupe  $G_0$  non invariant de  $G_e$ , isomorphe de  $G$ ; ils laissent invariant le noeud origine du réseau. Les éléments  $(\alpha|T_i - \alpha T_i)$  forment pour  $T_i$  fixe un sous-groupe  $G_e$ , non invariant, isomorphe de  $G$  et conjugué du sous-groupe  $(\alpha|0)$  car:

$$(\varepsilon|T_i)(\alpha|0)(\varepsilon| - T_i) = (\alpha|T_i - \alpha T_i). \quad (7)$$

Ce sous-groupe laisse invariant le noeud  $T_i$  du réseau.

**2A. Orbites de translations**

Les translations  $\alpha T_i$  se déduisant de  $T_i$  par une opération  $\alpha$  décrivant le groupe ponctuel  $G$  forment une classe dans  $G_e$ . En effet:

$$(\alpha|0)(\varepsilon|T_i)[\alpha^{-1}(0)] = [\varepsilon|\alpha(T_i)].$$

Si  $T_i$  est en position spéciale, le nombre de translations de l'orbite (ou étoile) qui s'en déduit est inférieur à  $g$ , ordre du groupe ponctuel  $G$ .

Il existe autant d'orbites  $\{T_i\}$  que d'orbites  $\{k\}$ ,  $k$  étant un vecteur de la première zone de Brillouin car il y a autant de  $T_i$  que de  $k$ , et les réseaux direct et réciproque ont la même symétrie ponctuelle.

**2B. Classes engendrées et classes nouvelles**

D'après (7), les éléments de rotation  $(\alpha|0)$  et  $(\alpha|T_i - \alpha T_i)$  appartiennent à la même classe, engendrée. Cette classe contient également les éléments  $(\alpha|0)$  et  $(\alpha'|T_i - \alpha' T_i)$ ,  $\alpha'$  appartenant à la classe de  $\alpha$  dans  $G$ . Enfin, si  $\beta$  commute avec  $\alpha$ , elle contient les éléments  $[\alpha|\beta(T_i - \alpha T_i)]$ .

Remarquons que la translation  $T_i - \alpha T_i$  est perpendiculaire à l'axe ou miroir  $\alpha$ , mais que l'ensemble des translations  $T_i - \alpha T_i$  ne recouvre pas l'ensemble des translations réticulaires perpendiculaires à  $\alpha$ . Un élément  $(\alpha|T)$  où  $T$  est perpendiculaire à  $\alpha$ , mais non de la forme  $T_i - \alpha T_i$ , est une rotation de type  $\alpha$  ne passant pas par un noeud du réseau: on sait en effet que la périodicité des axes de rotation et miroirs est supérieure à la périodicité du réseau.

Exemple 1: soit un axe  $2_z$  dans un réseau monoclinique,  $p$  et  $p'$  étant des entiers pairs,  $i$  et  $i'$  des entiers impairs. Les translations  $T_i - 2_z T_i$  sont de la forme  $(p, p', 0)$  et forment un sous-groupe de  $T$  invariant d'indice 4 d'où quatre classes d'axes  $2_z$ :  $(2_z|pp'0)$ ,  $(2_z|pi0)$ ,  $(2_z|lip0)$  et  $(2_z|lii0)$ . Ainsi un axe  $(2_z|lii0)$  passe par les centres des mailles  $ab$ , un axe  $(2_z|pi0)$  par le milieu d'un côté  $b$  d'une maille.

Exemple 2: soit un axe  $4_z$  dans un réseau quadratique. Les translations  $T_i - 4_z T_i$  sont de la forme  $(pp'0)$  ou  $(ii'0)$ . D'où deux classes d'axes  $4_z$ : les axes  $(4_z|pp'0)$  ou  $(4_z|ii'0)$  passent par les noeuds du réseau; les axes  $(4_z|pi0)$  ou  $(4_z|lip0)$  par les centres des faces carrées des mailles.

Soit  $i_\alpha$  l'indice du sous-groupe  $\{T_i - \alpha T_i\}$  dans  $T$ . A la classes de  $\alpha$  dans  $G$ , peuvent correspondre  $i_\alpha$  classes de  $G_e$ . Si une rotation  $\beta$  commute avec  $\alpha$ , des classes se regroupent puisque  $(\alpha|T_i)$  et  $(\alpha\beta T_i)$  appartiennent à la même classe.

Exemple 1: nous considérons le groupe symmorphique  $P4$  et utilisons les conditions cycliques de Born-Van Karman pour le rendre fini (Jansen & Boon, 1967): deux translations  $(\varepsilon|T_i)$  et  $(\varepsilon|T_i + N\mathbf{e}_i)$  sont considérées comme identiques, les trois vecteurs  $\mathbf{e}_1$ ,  $\mathbf{e}_2$  et  $\mathbf{e}_3$  définissant la maille du réseau. Les translations combinaisons linéaires de  $N\mathbf{e}_1$ ,  $N\mathbf{e}_2$ ,  $N\mathbf{e}_3$  forment un sous-groupe invariant  $\zeta$  de  $G_2$ , et nous nous intéressons au groupe facteur fini  $G_e/\zeta$ .

Les  $N^3$  translations se répartissent dans les classes suivantes: la classe de l'identité  $(\varepsilon|000)$  et la classe de la translation  $(\varepsilon|(N/2)(N/2)\alpha)$ ; les  $2(N - 1)$  classes de translations non nulles  $(\varepsilon|00z)$  et  $(\varepsilon|(N/2)(N/2)\alpha)$  invariantes dans la rotation quaternaire; les  $N$  classes de la forme  $(\varepsilon|(N/2)0z)$ ,  $(\varepsilon|0(N/2)z)$  contenant

chacune deux éléments; les  $(N^3 - 4N)/4$  classes de translations  $(\epsilon|xyz)$ ,  $(\epsilon|\bar{y}xz)$ ,  $(\epsilon|\bar{x}\bar{y}z)$ ,  $(\epsilon|y\bar{x}z)$ .

Dans la classe de  $(4|000)$  on trouve  $(4|pp'0)$  et  $(4|i\bar{i}'0)$ , cette classe engendrée contient donc  $N^2/2$  éléments; il en est de même de la classe des axes  $(4|pi0)$ ,  $(4|ip0)$ . Les axes hélicoïdaux  $(4|pp'z)$  ou  $(4|piz)$  appartiennent à des classes différentes. On a donc au total  $2N$  classes d'axes 4 contenant chacune  $N^2/2$  éléments, et de même  $2N$  classes d'axes  $4^3$ .

Les axes binaires  $(2|xyz)$  se répartissent *a priori* en quatre classes de  $N^2/4$  éléments:  $(2|pp'z)$ ,  $(2|i\bar{i}'z)$ ,  $(2|piz)$ ,  $(2|ipz)$ , soit au total  $4N$  classes; mais les axes 4 et 2 commutent donc  $(2|piz)$  et  $(2|ipz)$  sont dans la même classe, soit au total  $3N$  classes d'axes binaires. D'où le nombre total de classes  $(N^3 - 4N)/4 + 10N$ .

On vérifie aisément que, comme dans tout groupe fini, le nombre de classes est égal au nombre de représentations irréductibles. Il existe en effet  $(N^3 - 4N)/4$  étoiles de vecteurs  $\mathbf{k}$  en position générale; à chacune d'elle correspond une représentation de dimension  $d_{kj} = 4$ .

Les vecteurs  $\mathbf{k} = \frac{1}{2}0k_z$  et  $\mathbf{k} = 0\frac{1}{2}k_z$  forment une étoile; le groupe  $G_k$  correspondant est le groupe 2, d'où  $2N$  représentations de dimension 2. Enfin les vecteurs  $\mathbf{k} = 00k_z$  et  $\frac{1}{2}\frac{1}{2}k_z$  sont invariants dans le groupe ponctuel; à chacun d'eux sont associées quatre représentations de dimension 1. D'où le nombre de représentations irréductibles:

$$\frac{N^3 - 4N}{4} + 2N + 4N + 4N = \frac{N^3 - 4N}{4} + 10N.$$

On vérifie au passage que le théorème de Burnside (Jansen & Boon, 1967) est satisfait:

$$\sum_{k,j} d_{kj}^2 = 4N^3$$

qui est bien l'ordre du groupe  $G_e/\zeta$ .

Le groupe 4 possède une paire de représentations complexes conjuguées, donc  $P4$  possède  $2N$  paires de représentations complexes conjuguées, obtenues pour  $\mathbf{k} = 00k_z$  et  $\frac{1}{2}\frac{1}{2}k_z$ . Ce nombre est bien égal au nombre de paires de classes inverses, puisque les  $2N$  classes d'axes  $4^3$  sont inverses des  $2N$  classes d'axes 4. (Deux classes sont dites inverses si l'une est formée par les inverses des éléments de l'autre.)

*Exemple 2:* nous considérons maintenant le groupe symmorphique  $P422$  rendu fini par les conditions de Born-Van Karman.

Les quatre translations  $(\epsilon|000)$ ,  $(\epsilon|00\frac{1}{2})$ ,  $(\epsilon|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$  et  $(\epsilon|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$  sont invariantes et forment le centre du groupe. Les autres classes de translations sont les suivantes:

2 classes  $(\epsilon|\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$ ,  $(\epsilon|0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$  et  $(\epsilon|\frac{1}{2}00)$ ,  $(\epsilon|0\frac{1}{2}0)$ ,

$\frac{N-2}{2}$  classes  $(\epsilon|00z)$ ,  $(\epsilon|00\bar{z})$  de deux éléments,

$\frac{N-2}{2}$  classes  $(\epsilon|\frac{1}{2}\frac{1}{2}z)$ ,  $(\epsilon|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\bar{z})$  de deux éléments,

$\frac{N-2}{2}$  classes  $(\epsilon|0\frac{1}{2}z)$ ,  $(\epsilon|0\frac{1}{2}\bar{z})$ ,  $(\epsilon|\frac{1}{2}0z)$ ,  $(\epsilon|\frac{1}{2}0\bar{z})$  de quatre éléments,

$\frac{N-2}{2}$  classes  $(\epsilon|\pm x00)$ ,  $(\epsilon|0\pm x0)$  de quatre éléments,

$\frac{N-2}{2}$  classes  $(\epsilon|\pm x0\frac{1}{2})$ ,  $(\epsilon|0\pm x\frac{1}{2})$  de quatre éléments,

$\frac{N-2}{2}$  classes  $(\epsilon|\pm x\frac{1}{2}0)$ ,  $(\epsilon|\frac{1}{2}\pm x0)$  de quatre éléments,

$\frac{N-2}{2}$  classes  $(\epsilon|\pm x\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ ,  $(\epsilon|\frac{1}{2}\pm x\frac{1}{2})$  de quatre éléments,

$\frac{N-2}{2}$  classes  $(\epsilon|\pm x\pm x0)$ ,  $(\epsilon|\pm x\pm x0)$  de quatre éléments,

$\frac{N-2}{2}$  classes  $(\epsilon|\pm x\pm x\frac{1}{2})$ ,  $(\epsilon|\pm x\pm x\frac{1}{2})$  de quatre éléments,

enfin  $\frac{N^3 - (16N - 24)}{8}$  classes de huit translations en positions générales.

Les axes binaires  $2_z$  se répartissent en  $3[(N-2)/2 + 2]$  classes:

- $(2|pp'z)$ ,  $(2|pp'\bar{z})$ ;
- $(2|i\bar{i}'z)$ ,  $(2|i\bar{i}'\bar{z})$ ;
- $(2|piz)$ ,  $(2|pi\bar{z})$ ,  $(2|ipz)$ ,  $(2|ip\bar{z})$ ;
- $(2|pp'0)$ ;
- $(2|pp'\frac{1}{2})$ ;
- $(2|i\bar{i}'0)$ ;
- $(2|i\bar{i}'\frac{1}{2})$ ;
- $(2|pi0)$ ,  $(2|ip0)$ ;
- $(2|pi\frac{1}{2})$ ,  $(2|ip\frac{1}{2})$ .

Les axes quaternaires se répartissent en  $2N$  classes:

$$(4|pp'z), (4|i\bar{i}'z), (4^3|pp'\bar{z}), (4^3|i\bar{i}'\bar{z})$$

et

$$(4|piz), (4|ipz), (4^3|pi\bar{z}), (4^3|ip\bar{z}).$$

Les axes binaires  $2_x$  et  $2_y$  se répartissent en  $4[(N-2)/2 + 2]$  classes:

$$\left(2_x \left| \begin{matrix} \pm x, & p, & p' \\ & i, & i' \end{matrix} \right. \right), \left(2_y \left| \begin{matrix} p, & \pm x, & p' \\ & i, & i' \end{matrix} \right. \right)$$

( $p'$  si la cote est entière,  $i'$  si la cote est demi-entière;  $p$  si l'axe contient un noeud du réseau,  $i$  dans le cas contraire);

$$\left(2_x \left| \begin{matrix} 0, & p, & p' \\ & i, & i' \end{matrix} \right. \right), \left(2_y \left| \begin{matrix} p, & 0, & p' \\ & i, & i' \end{matrix} \right. \right);$$

$$\left(2_x \left| \begin{matrix} \frac{1}{2}, & p, & p' \\ & i, & i' \end{matrix} \right. \right), \left(2_y \left| \begin{matrix} p, & \frac{1}{2}, & p' \\ & i, & i' \end{matrix} \right. \right).$$

Tableau 3. Représentations du groupe P422

Type de vecteur $k$	Nombre d'étoiles	Groupe ponctuel du vecteur $k$	Nombre et dimension des représentations $\Gamma_{k,j}$
000; 00 $\frac{1}{2}$ ; $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ ; $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$	1	422	4(d = 1) + 1(d = 2)
$\frac{1}{2}00$ ; $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$	1	222	4(d = 2)
00z; $\frac{1}{2}\frac{1}{2}z$	$\frac{N-2}{2}$	4	4(d = 2)
0 $\frac{1}{2}z$ ; xx0; xx $\frac{1}{2}$	$\frac{N-2}{2}$	2	2(d = 4)
xyz	$\frac{N^3 - 16N + 24}{8}$	1	1(d = 8)

Enfin les axes binaires  $2_{xy}$ ,  $2_{x\bar{y}}$  se répartissent en  $2[(N-2)/2 + 2]$  classes de la forme:

$$\left(2_{xy} \left| \begin{matrix} \pm a, 0, \\ \pm a + x, -x, \end{matrix} \right. \begin{matrix} p \\ i \end{matrix} \right), \left(2_{x\bar{y}} \left| \begin{matrix} \pm a, 0, \\ \pm a + x, -x, \end{matrix} \right. \begin{matrix} p \\ i \end{matrix} \right),$$

$$\left(2_{xy} \left| \begin{matrix} 0, \pm a, \\ -x, \pm a + x, \end{matrix} \right. \begin{matrix} p \\ i \end{matrix} \right), \left(2_{x\bar{y}} \left| \begin{matrix} 0, \pm a, \\ -x, \pm a + x, \end{matrix} \right. \begin{matrix} p \\ i \end{matrix} \right)$$

avec comme cas particuliers  $a = 0, N/2$ . Si  $a$  est pair les axes ne sont pas hélicoïdaux, si  $a$  est impair, ils sont hélicoïdaux.

D'où le nombre total de classes:

$$n_c = \frac{N^3 - 16N + 24}{8} + 11(N - 2) + 28.$$

Ce nombre est bien égal au nombre de représentations (voir Tableau 3). Alors que dans P4 il existe  $2N$  paires de classes auto-inverses, dans P422 = P4 $\wedge$ 2 $\times$  toutes les classes sont auto-inverses, et toutes les représentations sont réelles.

**3. Classes des groupes d'espace non symmorphiques**

Nous considérons maintenant un groupe d'espace  $G_e$  non symmorphique dont l'élément le plus général est  $(\alpha | \tau_\alpha + T_i)$ .

Un tel groupe est une extension du groupe  $T$  des translations réticulaires  $T_i$  par le groupe ponctuel  $G$ , définie par une application  $T_{\alpha,\beta}$  de  $G \times G$  dans  $T$  (Sivardièrre & Bertaut, 1970). La loi produit (1) s'écrit maintenant:

$$(C | B)(C' | B') = [CC' | B.C(B').B_{C,C'}] \quad (8)$$

ou encore,  $\varphi(\alpha)$  étant une rotation éventuellement hélicoïdale:

$$[\varphi(\alpha) | T_i][\varphi(\beta) | T_m] = [(\alpha\beta) | T_i + \alpha T_m + T_{\alpha,\beta}]. \quad (9)$$

L'opération  $[\varphi(\alpha) | T_i]$  est notée ordinairement  $(\alpha | \tau_\alpha)$  où  $\tau_\alpha$  est la translation interne à la maille associée à la rotation  $\alpha$ , avec la loi produit:

$$(\alpha | \tau_\alpha)(\beta | \tau_\beta) = (\alpha\beta | \tau_\alpha + \alpha\tau_\beta) \quad (10)$$

d'où:

$$T_{\alpha,\beta} = \tau_\alpha + \tau_\beta - \tau_{\alpha\beta} \quad (11)$$

Les translations  $(\varepsilon | T_i)$  se groupent en orbites comme si  $G_e$  était symmorphique. Les éléments  $(\alpha | \tau_\alpha)$  et  $(\alpha\tau_\alpha + T_i - \alpha T_i)$  appartiennent à la même classe, la distinction entre classes engendrées et classes nouvelles disparaît. Si  $\beta$  commute avec  $\alpha$ , on trouve dans la même classe les éléments  $(\alpha | \tau_\alpha + \tau_\beta)$  et  $(\alpha\beta | \tau_\alpha + \tau_\beta - \alpha\tau_\beta + \beta T_\alpha)$ .

La différence entre groupes symmorphiques et non symmorphiques de même classe et de même réseau est due aux translations  $T_i$  telles que  $\alpha(T_i) - T_i = T_m$ . Ainsi dans le groupe P422, les axes  $(2_x | x00)$  et  $(2_x | x00)$  appartiennent à la même classe, d'où  $(N-2)/2 + 2 = (N+1)/2$  classes. Dans le groupe P4 $\wedge$ 2 $\times$  d'éléments générateurs  $(4_z | \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$  et  $(2_x | \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ , les axes  $(2_x | x + \frac{1}{2}, 0, 0)$  et  $(2_x | x - \frac{1}{2}, 0, 0)$  appartiennent à la même classe, d'où seulement  $N/2$  classes d'axes binaires. Pour les représentations, la différence entre groupes symmorphique et non symmorphique apparaît uniquement pour certains vecteurs  $k$  situés à la surface de la zone de Brillouin.

Comparons ainsi les classes de P422 et P4 $\wedge$ 2 $\times$ . Dans P422, il y a  $3[(N-2)/2 + 2]$  classes d'axes  $2_x$ ,  $4[(N-2)/2 + 2]$  classes d'axes  $2_y$  et  $2[(N-2)/2 + 2]$  classes d'axes  $2_{xy}$ ,  $2_{x\bar{y}}$ . Dans P4 $\wedge$ 2 $\times$  ces nombres de classes deviennent respectivement  $3N/2$ ,  $4N/2$  et  $2N/2$  d'où neuf classes de moins. Corrélativement pour chacun des vecteurs invariants  $k = 00\frac{1}{2}$  et  $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ , P422 possède quatre représentations de dimension 1 et une de dimension 2; P4 $\wedge$ 2 $\times$  en possède seulement deux de dimension 2. Pour les étoiles  $*k = (\frac{1}{2}00, 0\frac{1}{2}0)$  et  $(\frac{1}{2}0\frac{1}{2}, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ , P422 possède quatre représentations de dimension 2 et P4 $\wedge$ 2 $\times$  une représentation de dimension 4. Pour les autres étoiles, les dimensions de représentations sont les mêmes dans les deux groupes. Au total P4 $\wedge$ 2 $\times$  possède donc neuf représentations de moins que P422.

**4. Classes d'éléments conjugués des groupes doubles**

Nous nous limiterons aux groupes doubles propres. Si  $G$  est le groupe cyclique  $n$ , le groupe double correspondant  $G^+$  est isomorphe de groupe cyclique  $2n$ , donc il est abélien et chaque élément forme une classe. Mais si  $G$  est orthorhombique, diédrique ou cubique, le nombre de classes de  $G^+$  n'est pas égal en général à deux fois le nombre de classes de  $G$ . Les deux classes de  $H = (E, \bar{E})$  sont auto-conjuguées et forment donc deux classes de  $G^+$ . Mais ainsi que l'a montré Opechowski (1940), les opérateurs  $n$  et  $\bar{E}n = \bar{n}$  ( $\bar{E}$  est l'opérateur de Bethe) n'appartiennent à la même classe que si  $n$  est un

axe binaire et s'il existe dans  $G$  un axe binaire perpendiculaire. Autrement dit, le nombre de classes de  $G^+$  est inférieur à deux fois le nombre de classes de  $G$  dès que 222 est un sous-groupe de  $G$ : c'est le cas de tous les groupes diédriques ou cubiques à l'exception du groupe 32.

Nous pouvons réénoncer les résultats précédents en utilisant les propriétés algébriques de  $G^+$  afin de souligner l'analogie avec les groupes d'espace.  $G^+$  est l'extension (Sivardière, 1969) du groupe abélien  $(E, \bar{E})$  par le groupe  $G$ :  $G = G^+ / (E, \bar{E})$ .  $G^+$  ne possède pas de sous-groupe isomorphe de  $G$ . Un élément de  $G^+$  peut s'écrire:  $[\varphi(\alpha)|a]$  avec  $\varphi(\alpha) = \pm D_{\frac{1}{2}}(\alpha)$ ,  $\alpha \in G$  et  $a = E$  ou  $\bar{E}$ : à l'opération  $\alpha$  de  $G$  correspondent deux matrices  $\pm D_{\frac{1}{2}}(\alpha)$  dans la représentation  $D_{\frac{1}{2}}$  du groupe des rotations,  $\varphi(\alpha)$  est l'une d'elle. La loi produit s'écrit:

$$[\varphi(\alpha)|a][\varphi(\beta)|b] = [\varphi(\alpha\beta)|abm_{\alpha\beta}]$$

$m$  étant l'application de  $G \times G$  dans  $(E, \bar{E})$  qui définit l'extension  $G^+$ .

D'après Opechowski,  $[\varphi(\alpha)|E]$  et  $[\varphi(\alpha)|\bar{E}]$  appartiennent en général à deux classes distinctes, qui sont auto-inverses l'une et l'autre si la classe de  $\alpha$  dans  $G$  est auto-inverse.

Cependant, s'il existe un opérateur  $\beta$  tel que:  $\alpha\beta = \beta\alpha$  ( $\alpha$  et  $\beta$  sont alors deux axes binaires perpendiculaires),  $[\varphi(\alpha)|E]$  et  $[\varphi(\alpha)|\bar{E}]$  appartiennent à la même classe, qui est donc auto-inverse. Ainsi dans le groupe 222, les cinq classes sont auto-inverses; au contraire dans le groupe 32, les quatre axes ternaires forment deux classes auto-inverses mais les six axes binaires forment deux classes inverses l'une de l'autre et par suite le groupe 32 possède deux représentations spécifiques complexes conjuguées.

On peut montrer (Sivardière, 1969) que chaque groupe  $G^+$  possède un sous-groupe invariant  $H^+$  qui est un groupe double cyclique  $n^+$  ou le groupe 222<sup>+</sup>;  $G^+$  est une extension de  $H^+$ . Ainsi:

$$\begin{aligned} 222^+ &= (2_z^+, 2_x) \\ 32^+ &= (3_z^+, 2_x) \\ 23^+ &= (2_x 2_y 2_z, 3_{111}). \end{aligned}$$

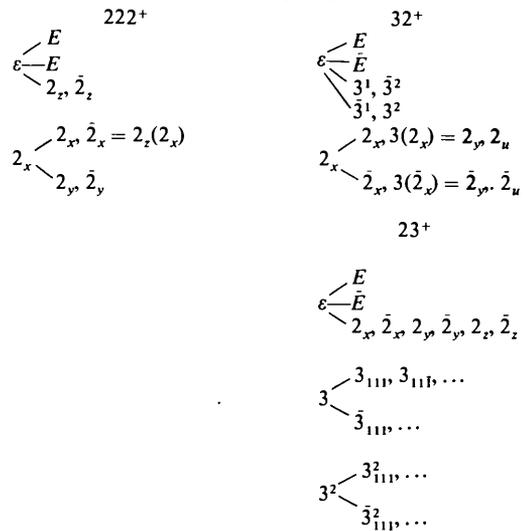
Dans le Tableau 4, nous indiquons les orbites de classes de  $H^+$  dans  $G^+$  pour ces trois groupes ( $n^+$  est isomorphe de  $2n$ , par suite il y a autant d'orbites dans 32<sup>+</sup> que dans 622).

Tableau 4. *Orbites de classes dans les groupes doubles*

222 <sup>+</sup>	32 <sup>+</sup>	23 <sup>+</sup>
$E-$	$E-$	$E-$
$\bar{E}-$	$\bar{E}-$	$\bar{E}-$
$2_x \searrow$	$3^1, \bar{3}^2$	$2_x \searrow \bar{2}_x$
$2_x \swarrow$	$\bar{3}^1, 3^2$	$2_y \searrow \bar{2}_y$
		$2_z \searrow \bar{2}_z$

Considérons 222<sup>+</sup>:  $H^+ = 2^+$  est isomorphe du groupe 4. Alors que 422 = 4<sub>h</sub>2 est un produit semi-direct, 222<sup>+</sup> a une structure d'extension. Cependant ces deux groupes ont des classes auto-inverses et de ce fait, bien qu'ils ne soient pas isomorphes, ils possèdent le même tableau de caractères. Au contraire les groupes 32<sup>+</sup> et 622 ont le même nombre de classes mais des tableaux de caractères différents car les classes de 622 sont toutes auto-inverses, non celles de 32<sup>+</sup>. Le Tableau 5 illustre la formation des classes des groupes 222<sup>+</sup>, 32<sup>+</sup> et 23<sup>+</sup> à partir des classes des groupes facteurs 222<sup>+</sup>/2, 32<sup>+</sup>/2, 23<sup>+</sup>/2.

Tableau 5. *Classes des groupes 222<sup>+</sup> et 32<sup>+</sup>*



**Conclusion**

Nous avons montré sur l'exemple des groupes cristallographiques comment on peut construire les classes d'éléments conjugués d'un groupe  $G$  ayant une structure de produit semi-direct  $H \times F$  ou d'extension. Il serait intéressant de construire ensuite l'algèbre des classes  $G$  à partir des algèbres des classes de  $H$  et des classes de  $F$ , et d'utiliser les résultants pour l'étude des représentations irréductibles de  $G$ .

**Références**

ASCHER, E. & JANNER, A. (1965). *Helv. Phys. Acta*, **38**, 551.  
 GAMBA, A. (1968). *J. Math. Phys.* **9**, 186-190.  
 JANSEN, L. & BOON, M. (1967). *Theory of Finite Groups*. Amsterdam: North Holland.  
 LOMONT, J. S. (1959). *Applications of Finite Groups*. New York: Academic Press.  
 MURNAGHAN, F. D. (1938). *The Theory of Group Representations*. New York: Dover.  
 OPECHOWSKI, W. (1940). *Physica*, **7**, 552-562.  
 SIVARDIÈRE, J. (1969). *C. R. Acad. Sci.* **268**, 1174-1176.  
 SIVARDIÈRE, J. & BERTAUT, E. F. (1970). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **93**, 515-526.