Physique Mathématique I

Théorie de la représentation des groupes discrets et ses applications en physique du solide et des molécules.

Vincenzo Savona

Institut de Théorie des Phénomènes Physiques
Faculté de Sciences de Base
Ecole Polytéchnique Fédérale de Lausanne
CH-1015 Lausanne EPFL, Suisse

Hiver 2004-2005

Chapitre 1

Introduction au cours

Des considérations basées sur la symétrie d'un système physique ont toujours été utilisées dans la formulation de principes généraux ainsi que dans la solution de problèmes physiques. Le lecteur a certainement déjà rencontré plusieurs exemples d'utilisation d'un principe de symétrie. Par exemple, la quantité de mouvement est conservée pour un système invariant par translation spatiale, et le moment cinétique est conservé pour un système invariant par rotation. Plus en général, les propriétés de symétrie d'un système nous donnent deux avantages. Premièrement, elles permettent d'établir des *lois de conservation*. Deuxièmement, elles introduisent des *regles de sélection*, qui facilitent considérablement le calcul des quantités physiques qui nous intéressent. Toutefois, la façon de tirer avantage des propriétés de symétrie n'est pas toujours intuitive. Il est donc nécessaire d'introduire un formalisme qui permette systématiquement de construire le lien entre propriétés de symétrie et lois physiques.

La plupart des opération de symétrie d'un système physique sont des transformation géométriques comme, par exemple, des rotations autour d'un axe fixe, des translation, ou des inversions par rapport à un centre de symétrie (c'est-à-dire la transformation de chaque point $\mathbf{x}$ en un point $-\mathbf{x}$, le point $\mathbf{x} = 0$ étant le centre de symétrie). Si l'application d'une transformation géometrique a comme résultat que l'objet transformé ne peut pas être distingué de l'objet dans son état initial (même position, même forme, même orientation), alors nous disons que le système est *invariant* par la transformation considérée.

L'ensemble des opérations pour lesquelles un système est invariant, constitue un groupe au sens mathématique du terme. La théorie mathématique des

groupes intervient donc naturellement dans un traitement formel des propriétés de symétrie en physique. L'application de la théorie des groupes à la physique n'était développé systématiquement que au début du 20ème siècle. Parmi les travaux les plus importants à ce sujet, nous soulignons ici la contribution de Eugene Paul Wigner qui a formalisé l'application de la théorie des groupes à la mécanique quantique dans son livre « Gruppentheorie und Ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren » en 1931.

La branche de la théorie des groupes qui s'applique à la physique est dite *théorie des représentations des groupes*. Une distinction importante, dans le cadre de cette théorie, est celle entre les groupes finis et les groupes infinis. En effet, certaines propriétés di symétrie impliquent un nombre fini d'opérations de symétrie. C'est le cas, par exemple, des symétries de rotation des molécules. Nous introduisons à titre d'exemple la molécule d'ammoniac dans le paragraphe suivant. Cette molécule est caractérisée par six opérations de symétrie de rotation qui sont la transformation identique [1], deux rotations de 120 degrés et trois miroirs. D'autres systèmes, par contre, sont caractérisés par un nombre infini d'opérations de symétrie. Par exemple, une sphère est invariante par une rotation d'un angle arbitraire, ayant pour point fixe le centre de la sphère. Les théories des représentations des groupes finis et des groupes infinis présentent des différences importantes qui imposent un traitement séparé des deux domaines.

Le but de ce cours est principalement celui d'introduire la théorie des représentations des groupes finis et son application au propriétés de symétrie dans la physique moléculaire et du solide. Dans la première partie, nous introduirons les concepts mathématiques nécessaires. Dans la deuxième partie nous verrons quels sont les groupes finis les plus importants dans la physique moléculaire et du solide et nous montrerons des exemples d'application de la théorie. Nous traiterons brièvement le groupe des rotations-inversions $O(3)$, qui est un groupe infini, et ses applications.

1.1 Un exemple: modes de vibration d'une molécule

Dans cette section, nous allons traiter un problème physique à l'aide de critères de symétrie. Le but est de montrer que les propriétés de symétrie

1. une non-transformation est toujours une transformation de symétrie!

peuvent rendre la recherche de la solution d'un problème considérablement plus aisée. En même temps, à l'état actuel de nos connaissances, nous utiliserons les arguments de symétrie « à la main » , c'est à dire à l'aide de l'intuition, sans avoir à notre disposition une méthode systématique pourvue d'un ensemble de règles. Le but final de ce cours est de jeter les bases d'une telle méthode et d'en donner des exemples d'application.

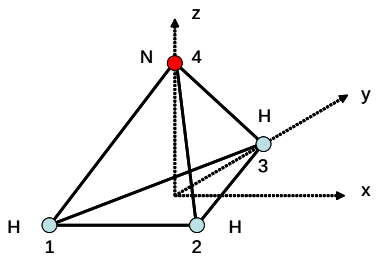

FIG. 1.1 – *Schéma de la molécule de NH_3. Dans la figure on peut voir également la numérotation des quatres atomes et le choix du référentiel.*

Considérons le problème des vibrations de la molécule d'ammoniac NH_3. Cette molécule est composée de trois atomes d'hydrogène disposés en triangle et d'un atome d'azote placé sur l'axe vertical passant par le centre du triangle (voir figure 1.1). On sait de la physique moléculaire que, pour des petits déplacements à partir des positions d'équilibre, les forces de rappel sur les quatre atomes sont proportionnelles aux déplacements. La molécule se comporte donc comme un ensemble d'oscillateurs harmoniques couplés avec 12 dégrés de liberté (les trois coordonnées spatiales pour chaque atome). Appelons respectivement $\mathbf{R}_1$, $\mathbf{R}_2$, $\mathbf{R}_3$ et $\mathbf{R}_4$ les coordonnées des trois atomes d'hydrogène et de l'atome d'azote. Si les positions d'équilibre des quatre atomes sont $\mathbf{R}_j^{(0)}$, avec $j = 1,\ldots,4$, alors les vecteurs des déplacements seront donnés par $\mathbf{u}_j = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_j^{(0)}$. Appelons respectivement m_H et m_N les masses des atomes d'hydrogène et d'azote.

Pour décrire de manière réaliste les modes harmoniques des molécules, une paramétrisation précise des constantes élastiques serait nécessaire. Une telle paramétrisation doit tenir compte du fait que la force entre deux atomes sera caractérisée par des différentes constantes élastiques selon que la direction du déplacement soit le long de la ligne qui les unit ou perpendiculaire a cette ligne. Plus en général, nous ne pouvons pas en principe exprimer la force harmonique sur un atome comme étant la somme des forces harmo-

niques exercées par les autres atomes, puisque la constante harmonique de la force entre deux atomes va être influencée par la présence des autres atomes. Cépendant, pour le but du présent exercice, nous pouvons introduire sans crainte un modèle très simplifié qui nous permette de se familiariser avec les propriétés de symétrie. Nous allons donc supposer que le système est caractérisé simplemkent par deux constantes harmoniques : k_{HH}, pour la force de rappel entre deux atomes d'hydrogène, et k_{NH}, pour celle entre un atome d'hydrogène et l'atome d'azote. Nous avons donc fait une approximation très forte en supposant que la force harmonique entre deux atomes est isotrope. Nous verrons que cette approximation donnera lieu à des dégénéréscences accidentelles, qui ne sont pas strictement imposées par la symétrie du problème. Ce dégénéraiscences ne seraient pas présentes dans un modèle plus réaliste des forces harmoniques. Dans la suite de ces notes nous discuterons plus en détail le problème des dégénérescences accidentelles et nous verrons que leur existence est très rare: leur occurrence est presque toujours signe d'une mauvaise prise en compte des propriétés de symétrie du système.

Une fois données les masses et les constanted élastiques, nous pouvons écrire l'énergie potentielle de la façon suivante

$$\begin{aligned} V(\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_2,\mathbf{u}_3,\mathbf{u}_4) &= \frac{1}{2}k_{HH}\left[(\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_2)^2+(\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_3)^2+(\mathbf{u}_2-\mathbf{u}_3)^2\right] \\ &+ \frac{1}{2}k_{NH}\left[(\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_4)^2+(\mathbf{u}_2-\mathbf{u}_4)^2+(\mathbf{u}_3-\mathbf{u}_4)^2\right] . \end{aligned} \tag{1.1}$$

La force agissant sur une particule donnée s'obtient à partir du gradient de ce potentiel par rapport à la variable de déplacement correspondante

$$\mathbf{F}_j = m_j\frac{\partial^2\mathbf{u}_j}{\partial t^2} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{u}_j}\,, \tag{1.2}$$

ce qui nous permet finalement d'écrire les équations du mouvement du système:

$$\begin{aligned} m_H\frac{\partial^2\mathbf{u}_1}{\partial t^2} &= -k_{HH}(\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_2)-k_{HH}(\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_3)-k_{NH}(\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_4)\,, \\ m_H\frac{\partial^2\mathbf{u}_2}{\partial t^2} &= -k_{HH}(\mathbf{u}_2-\mathbf{u}_1)-k_{HH}(\mathbf{u}_2-\mathbf{u}_3)-k_{NH}(\mathbf{u}_2-\mathbf{u}_4)\,, \\ m_H\frac{\partial^2\mathbf{u}_3}{\partial t^2} &= -k_{HH}(\mathbf{u}_3-\mathbf{u}_1)-k_{HH}(\mathbf{u}_3-\mathbf{u}_2)-k_{NH}(\mathbf{u}_3-\mathbf{u}_4)\,, \\ m_N\frac{\partial^2\mathbf{u}_4}{\partial t^2} &= -k_{NH}(\mathbf{u}_4-\mathbf{u}_1)-k_{NH}(\mathbf{u}_4-\mathbf{u}_2)-k_{NH}(\mathbf{u}_4-\mathbf{u}_3)\,. \end{aligned} \tag{1.3}$$

Dans cette notation simplifiée, il est sousentendu que les variables $\mathbf{u}_j(t)$ sont dépendantes du temps. Un tel système d'oscillateurs couplés est caractérisé par des *modes normaux*. Un mode normal est une solution particulière des équations (1.3) où les 12 dégrés de liberté dépendent du temps selon la même loi harmonique

$$\mathbf{u}_j(t) = \mathbf{u}_j^{(0)} \sin(\omega t)\,. \tag{1.4}$$

Ici, $\mathbf{u}_j^{(0)}$ est un vecteur constant. En remplaçant la solution (1.4) dans l'ensemble d'équations (1.3) nour avons

$$\begin{aligned}
\omega^2\mathbf{u}_1^{(0)} &= \frac{1}{m_H}\left[k_{HH}(\mathbf{u}_1^{(0)}-\mathbf{u}_2^{(0)}) + k_{HH}(\mathbf{u}_1^{(0)}-\mathbf{u}_3^{(0)}) + k_{NH}(\mathbf{u}_1^{(0)}-\mathbf{u}_4^{(0)})\right]\,,\\
\omega^2\mathbf{u}_2^{(0)} &= \frac{1}{m_H}\left[k_{HH}(\mathbf{u}_2^{(0)}-\mathbf{u}_1^{(0)}) + k_{HH}(\mathbf{u}_2^{(0)}-\mathbf{u}_3^{(0)}) + k_{NH}(\mathbf{u}_2^{(0)}-\mathbf{u}_4^{(0)})\right]\,,\\
\omega^2\mathbf{u}_3^{(0)} &= \frac{1}{m_H}\left[k_{HH}(\mathbf{u}_3^{(0)}-\mathbf{u}_1^{(0)}) + k_{HH}(\mathbf{u}_3^{(0)}-\mathbf{u}_2^{(0)}) + k_{NH}(\mathbf{u}_3^{(0)}-\mathbf{u}_4^{(0)})\right]\,,\\
\omega^2\mathbf{u}_4^{(0)} &= \frac{1}{m_N}\left[k_{NH}(\mathbf{u}_4^{(0)}-\mathbf{u}_1^{(0)}) + k_{NH}(\mathbf{u}_4^{(0)}-\mathbf{u}_2^{(0)}) + k_{NH}(\mathbf{u}_4^{(0)}-\mathbf{u}_3^{(0)})\right]\,,
\end{aligned} \tag{1.5}$$

Par la suite, afin d'alléger la notation, nous indiquerons les $\mathbf{u}_j^{(0)}$ simplement par $\mathbf{u}_j$. Nous pouvons définir le vecteur dans l'espace à 12 dimensions

$$\mathbf{u} = (\mathbf{u}_1;\, \mathbf{u}_2;\, \mathbf{u}_3;\, \mathbf{u}_4)\,. \tag{1.6}$$

Le système d'équations (1.5) s'écrit dans la forme compacte

$$A\mathbf{u} = \omega^2\mathbf{u}\,, \tag{1.7}$$

où A est la matrice dynamique du système, obtenue simplement à partir de la forme (1.5) de l'équation du mouvement.

Exercice: Ecrire la matrice A.

L'équation (1.7) représente un problème aux valeurs propres. Les solutions s'obtiennent par la diagonalisation de la matrice A. Les valeurs propres ω^2 de A et les vecteurs propres correspondants décrivent les modes normaux de vibration de la molécule. Ces solutions constituent un ensemble complet. Toute autre solution du problème (1.3) avec des conditions initiales données s'écrit comme une combinaison linéaire des modes normaux ainsi trouvés.

Nous remarquerons que la matrice A n'est pas symétrique. Cela est dû à la différence entre la masse de l'hydrogène m_H et la masse de l'azote m_N. Pour avoir une matrice symétrique, il faudrait réécrire le problème avec des vecteurs de déplacement normalisés par les masses $\mathbf{q}_j = \sqrt{m_j}\mathbf{u}_j$, avec $j = 1,\ldots,4$, $m_j = m_H$ pour les trois hydrogènes et $m_j = m_N$ pour l'azote. Nous n'adopterons pas ce changement de variables puisque les vecteurs non normalisés $\mathbf{u}_j$ nous permettent une meilleure intuition de la dynamique de la molécule. Il va sans dire que la matrice A décrit la dynamique d'un système d'oscillateurs harmoniques couplés et donc toutes ses valeurs propres seront réelles pour des raisons physiques, indépendamment du fait qu'elle n'est pas symétrique.

Le problème de la diagonalisation d'une matrice 12×12 ne peut pas être résolu analytiquement dans le cas général. Nous pourrions nous dire : « Peu importe! Nous pouvons toujours le résoudre par une méthode numérique à l'ordinateur » . Cela est vrai, mais une telle approche pose parfois des limitations à la compréhension des résultats. De plus, il faut remarquer que nous avons choisi un exemple en mécanique classique, où le nombre de degrés de liberté est fini. Cependant, la plupart du temps nous aurons affaire à la mécanique quantique, où l'espace des solutions est l'espace d'Hilbert de la fonction d'onde, un espace à nombre infini de dimensions. Dans ce cas, souvent l'ordinateur ne nous aide pas et il faut pouvoir introduire des simplifications.

Nous allons montrer ci de suite, comment des arguments de symétrie nous permettent de résoudre ce problème analytiquement. La mécanique analytique nous permet une première considération. Un corps rigide dans le vide a six degrés de liberté, trois de translation du centre de masse et trois de rotation autour des axes d'inertie. La molécule peut donc se déplacer dans l'espace à vitesse constante dans une direction arbitraire et tourner autour d'un axe à une vitesse angulaire constante. Nous pouvons toujours imaginer la molécule comme étant un corps rigide et nous placer dans le référentiel où elle est au repos. Ces six degrés de liberté sont donc caractérisés par une fréquence nulle $\omega = 0$. Par exemple, la translation libre le long de l'axe x (voir Fig. 1.2(a)) est caractérisée par le vecteur de déplacement (normalisé)

$$\mathbf{u} = \frac{1}{2}\,(1,0,0\,;\,1,0,0\,;\,1,0,0\,;\,1,0,0)\ . \tag{1.8}$$

Exercice: Vérifier que le vecteur (1.8) est un vecteur propre de la matrice

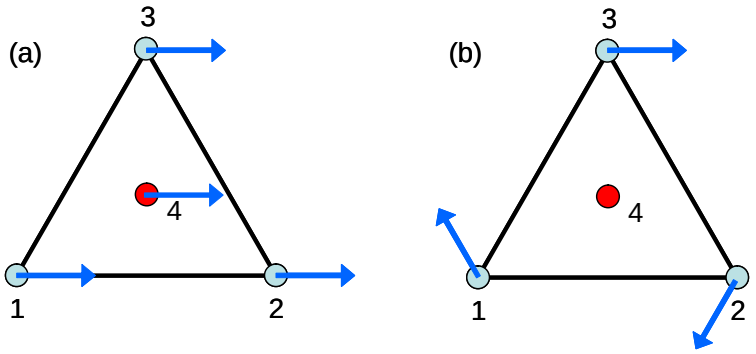

FIG. 1.2 – *(a) Exemple de mode propre de translation du centre de masse. Les vecteurs bleus sont les vecteurs de déplacement* $\mathbf{u}_j$*. (b) Exemple de mode propre de rotation libre autour de l'axe* z*.*

A à valeur propre nulle.

La rotation libre autour de l'axe z (voir Fig. 1.2(b)) est caractérisée par le vecteur de déplacement

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\,; -\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, 0\,;\, 1,0,0\,;\, 0,0,0 \right) . \tag{1.9}$$

En réalité, un déplacement de longueur finie du type illustré dans la figure 1.2(b) comporte une déformation de la molécule et par conséquent une énergie potentielle due aux forces élastiques. Un tel déplacement ne peut donc pas être vecteur propre à valeur propre nulle de A. Dans notre formulation du problème, les modes de rotation sont des solutions de l'équation aux valeurs propres toujours sous forme de combinaison d'une rotation rigide et d'une déformation de la molécule. De cette façon, les modes propres associés à ces solutions ont des valeurs propres finies qui correspondent aux valeurs propres de la déformation associée. Par exemple, nous pouvons vérifier que le déplacement illustré par la figure 1.2(b) est composé d'une rotation autour de l'axe z et d'une déformation selon le mode propre radial (1.17) que nous décrirons par la suite. La valeur propre correspondante est la même que pour ce mode radial.

Nous pouvons en principe nous placer dans l'espace orthogonal à celui généré par ces six vecteurs – trois de translation et trois de rotation – à l'aide

du processus d'orthogonalisation de Gram-Schmidt. Le problème serait donc réduit à la diagonalisation d'une matrice 6×6, qui représente toujours un défi pour une approche analytique.

Supposons d'effectuer une transformation orthogonale des positions $\mathbf{R}_j$ des quatre atomes qui composent la molécule. Indiquons le vecteur transformé par $\mathbf{R}'_j = S\mathbf{R}_j$. La matrice S est une matrice orthogonale à trois dimensions. La condition d'orthogonalité implique que $S^{-1}S = I$ et que les éléments de S sont réels. A cette transformation correspond une transformation orthogonale O du vecteur des déplacements $\mathbf{u}$ dans l'espace à 12 dimensions, telle que $\mathbf{u}' = O\mathbf{u}$ et $O^{-1}O = I$. Par exemple, une rotation de $2\pi/3$ en sens anti-horaire autour de l'axe z est donnée par

$$O\mathbf{u} = (S\mathbf{u}_3\,;\, S\mathbf{u}_1\,;\, S\mathbf{u}_2\,;\, S\mathbf{u}_4) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & S & 0 \\ S & 0 & 0 & 0 \\ 0 & S & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{u}_3 \\ \mathbf{u}_4 \end{pmatrix} , \qquad (1.10)$$

où

$$S = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} . \qquad (1.11)$$

La transformation inverse est $\mathbf{u} = O^{-1}\mathbf{u}'$. En la remplaçant dans l'équation du mouvement (1.7), nous obtenons

$$AO^{-1}\mathbf{u}' = \omega^2 O^{-1}\mathbf{u}' . \qquad (1.12)$$

Multiplions par O à gauche. Nous avons

$$A'\mathbf{u}' = OAO^{-1}\mathbf{u}' = \omega^2\mathbf{u}' , \qquad (1.13)$$

où nous avons défini $A' = OAO^{-1}$.

Le point crucial de cette approche consiste à remarquer qu'il existe un ensemble de transformations orthogonales O qui laissent la matrice A invariée, c. à d. $A' = A$. Par exemple, la rotation (1.10) fait superposer la molécule à elle–même. La matrice ne change pas suite à cette transformation, puisque elle ne dépend que de la forme spatiale de la molécule ayant les atomes dans leurs positions d'équilibre. En d'autres mots, la rotation n'implique qu'une permutation des atomes d'hydrogène, qui sont identiques. Elle ne peut donc pas influencer la dynamique des oscillations.

Exercice: Vérifier que, sous la transformation (1.10), on a $OAO^{-1} = A$.

Nous pouvons chercher toutes les transformations qui ont une telle propriété d'invariance. Ces transformations forment un ensemble $\{O_j\}$ où $j = 1, \ldots, N$, et N est la cardinalité de cet ensemble. Nous les appellerons transformations de symétrie du système. Une analyse de la forme de la molécule nous permet de trouver toutes les transformations de symétrie par inspection. Elles sont résumées dans le schéma suivant. Nous verrons dans la suite

E	Identité
C_3	Rotation en sens anti-horaire de $2\pi/3$ autour de l'axe z
C_3^{-1}	Rotation en sens horaire de $2\pi/3$ autour de l'axe z
σ_1	Miroir par rapport au plan $x = 0$
σ_2	Miroir par rapport au plan $x = \sqrt{3}y$
σ_3	Miroir par rapport au plan $x = -\sqrt{3}y$

du cours que cet ensemble de transformations forme un groupe.

Exercice: Ecrire les matrices 12×12 correspondantes aux transormations de symétrie dans l'espace des déplacements. Cet ensemble de matrices est appelé une *représentation* du groupe de symétrie.

Supposons maintenant d'avoir trouvé un vecteur propre $\mathbf{u}_p$ non dégénéré de la matrice A, donc tel que $A\mathbf{u}_p = \omega_p^2 \mathbf{u}_p$. Pour chaque opération de symétrie O_j nous avons

$$O_j A O_j^{-1} \mathbf{u}_p = A\mathbf{u}_p = \omega_p^2 \mathbf{u}_p \,. \tag{1.14}$$

Multiplions par O_j^{-1} à gauche.

$$A(O_j^{-1}\mathbf{u}_p) = \omega_p^2 (O_j^{-1}\mathbf{u}_p) \,. \tag{1.15}$$

Donc le vecteur transformé $\mathbf{u}_p^j = O_j^{-1}\mathbf{u}_p$ est aussi un vecteur propre de la matrice A ayant la même valeur propre ω_p^2. Puisque nous avons supposé que $\mathbf{u}_p$ est un vecteur propre non dégénéré, il s'ensuit nécessairement que

$$\mathbf{u}_p^j = \alpha_j \mathbf{u}_p \,, \tag{1.16}$$

où $\alpha_j = \pm 1$. Ceci doit être vrai pour toutes transformations de symétrie O_j du groupe de symétrie de la molécule. En effet, s'il existait un O_l pour lequel

cette propriété n'est pas satisfaite, nous aurions un vecteur $\mathbf{u}_p^l = O_l^{-1}\mathbf{u}_p$ qui serait linéairement indépendant de $\mathbf{u}_p$ et qui serait en même temps un vecteur propre de A à la même valeur propre, ce qui contredirait notre hypothèse.

La relation (1.16) est une propriété très importante des vecteurs propres non dégénérés. Nous pouvons la résumer de la façon suivante: si $\mathbf{u}_p$ est un vecteur propre non dégénéré de A, alors pour toute transformation de symétrie O_j nous avons $O_j^{-1}\mathbf{u}_p = \pm\mathbf{u}_p$. Malheureusement, l'inverse n'est pas valable en général. En effet, supposons d'avoir deux vecteurs propres non dégénérés $\mathbf{u}_1$ et $\mathbf{u}_2$ ayant comme valeurs propres $\omega_1^2 \neq \omega_2^2$. Supposons également que ces deux vecteurs se comportent de façon identique sous les transformations de symétrie du groupe, c. à d. $O_j^{-1}\mathbf{u}_1 = \alpha_j\mathbf{u}_1$ et $O_j^{-1}\mathbf{u}_2 = \beta_j\mathbf{u}_2$, où $\alpha_j = \pm 1$, $\beta_j = \pm 1$ et $\alpha_j = \beta_j$ pour chaque j. Dans ce cas, une combinaison linéaire quelconque des vecteurs $\mathbf{u}_1$ et $\mathbf{u}_2$ satisferait aussi la propriété (1.16) pour chaque j mais, par construction, elle ne donnerait pas lieu à un vecteur propre de A. Nous pouvons donc utiliser cette propriété pour trouver plus facilement les modes normaux de vibration de la molécule, mais nous devrons toujours vérifier qu'un vecteur ainsi trouvé soit un vecteur propre de A.

Pour commencer, considérons le vecteur correspondant à un déplacement des trois atomes d'hydrogène dans la direction radiale, tandis que l'atome d'azote reste dans sa position d'équilibre, comme il est illustré dans la figure 1.3(a). Ce vecteur est donné par

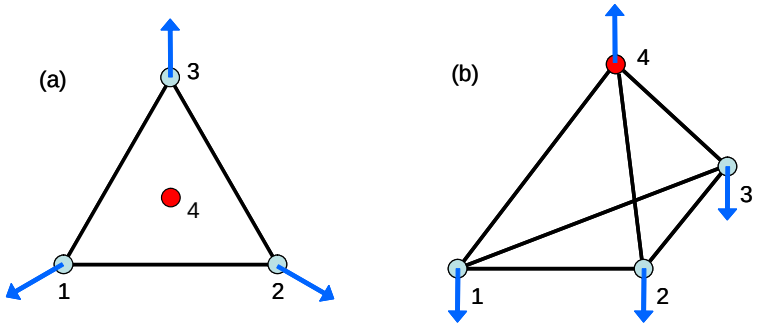

FIG. 1.3 – *(a) Mode de vibration non dégénéré dans le plan $z = 0$. (b) Mode de vibration non dégénéré avec oscillation dans l'axe vertical.*

$$\mathbf{u}_p = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0\,;\, \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}, 0\,;\, 0, 1, 0\,;\, 0, 0, 0\right) . \qquad (1.17)$$

Exercice: Vérifier que, pour un tel déplacement, le centre de masse de la molécule reste fixe. Ceci nous assure qu'il s'agit d'un mode de vibration « pure » sans une composante de translation.

On peut demontrer que $\mathbf{u}_p$ est invariant sous les transformations de symétrie de la molecule, c'est à dire σ_1, σ_2, σ_3, C_3, C_3^{-1}, E. Donc $\mathbf{u}_p$ est un bon candidat pour devenir un mode propre du système. Pour en être sûr nous devons le vérifier à la main.

Exercice: Vérifier que le vecteur (1.17) est invariant sous toutes les transformations de symétrie de la molécule. En particulier, vérifier que dans la relation (1.16) on a $\alpha_j = 1$ pour chaque j. Vérifier que ce vecteur est un vecteur propre de la matrice A et dériver la valeur propre correspondante.

Considérons maintenant le déplacement sur l'axe vertical où l'azote est déplace dans la direction opposée à celle du plan des trois hydrogènes, illustré dans la figure 1.3(b). Ce déplacement est defini par le vecteur

$$\mathbf{u}_p = \frac{1}{\sqrt{3+\mu^2}} \left(0,0,1\,;\,0,0,1\,;\,0,0,1\,;\,0,0,\mu\right) , \tag{1.18}$$

avec μ=$3m_H/m_N$ (avec cette condition le centre de masse reste fixe).

Exercice: Comme pour le vecteur (1.17), vérifier la propriété d'invariance de (1.18), que aussi $\alpha_j = 1$ pour chaque j, qu'il est un vecteur propre de la matrice A et dériver la valeur propre correspondante.

Ce vecteur est donc vecteur propre du système avec valeur propre différente de celle du vecteur (1.17) mais ayant exactement la même symétrie (mêmes α_j) de ce dernier. Comme remarqué avant, une combinaison linéaire de ces deux vecteurs serait toujours invariante sous toutes les opérations de symétrie de la molécule mais ne serait pas vecteur propre du système. Nous comprenons donc pourquoi nous sommes obligés à vérifier que les vecteurs trouvés sont des vecteurs propres. Pour un autre système il aurait pu être plus difficile de « deviner » leur forme, ou les bons vecteurs propres auraient pu être des combinaisons linéaires de ces deux vecteurs. Nos considérations de symétrie nous ont quand-même permis de nous restraindre à un sous-espace de dimension 2 qui est facilement diagonalisable analytiquement. D'ici la puissance de la méthode.

Supposons maintenant qu'un vecteur $\mathbf{u}_{p1}$ qui est vecteur propre de A ne satisfait pas à la propriété $O_j\mathbf{u}_{p1} = \pm\mathbf{u}_{p1}$ pour toutes les opérations de symétrie de la molécule. Nous avons donc au moins une transformation O_l telle que $O_l\mathbf{u}_{p1} = \mathbf{u}_{p2}$ est un vecteur linéairement indépendant de $\mathbf{u}_{p1}$. Nous avons pourtant vu que $\mathbf{u}_{p2}$ doit être vecteur propre de A avec la même valeur propre ω_p^2 que le vecteur $\mathbf{u}_{p1}$. Nous avons donc trouvé un autre vecteur propre dégénéré avec le premier. Nous pouvons répéter cette procédure en appliquant toutes les opérations de symétrie aux deux vecteurs ainsi trouvés. Nous avons deux possibilités.

(i) Pour toutes les opérations de symétrie les vecteurs $O_j\mathbf{u}_{p1}$ et $O_j\mathbf{u}_{p2}$ sont compris dans le sous-espace généré par $\mathbf{u}_{p1}$ et $\mathbf{u}_{p2}$. Dans ce cas nous avons délimité un « sous-espace invariant » de dimension 2, c. à d. toutes les opérations de symétrie appliquées sur un vecteur de ce sous-espace donnent un vecteur qui appartient au même sous-espace. Pour chercher des vecteurs propres à partir des propriétés de symétrie, nous pouvons procéder par analogie avec le cas d'un vecteur propre non dégénéré. Si nous arrivons à trouver deux vecteurs linéairement indépendants qui engendrent un sous-espace invariant par rapport aux opérations de symétrie de la molécule, ces deux vecteurs son des bons candidats pour être vecteurs propres dégénérés de la matrice A. Il ne nous reste qu'à vérifier qu'ils le sont.

(ii) Il existe au moins une opération de symétrie de la molécule O_l telle que $O_l\mathbf{u}_{p1}$ ou $O_l\mathbf{u}_{p2}$ donnent un vecteur $\mathbf{u}_{p3}$ qui est linéairement indépendant de $\mathbf{u}_{p1}$ et $\mathbf{u}_{p2}$. Ce vecteur est vecteur propre de la matrice A dégénéré avec les vecteurs propres $\mathbf{u}_{p1}$ et $\mathbf{u}_{p2}$. Nous pouvons répéter le raisonnement et distinguer encore deux cas, selon que le sous-espace à 3 dimensions ainsi trouvé est invariant ou non. La procédure inverse nous dit que, une fois repéré un sous-espace invariant de dimension 3, trois vecteurs propres linéairement indépendants quelconques dans ce sous-espace sont des bons candidats pour être des vecteurs propres dégénérés du système.

Avec cette procédure nous pouvons décomposer l'espace vectoriel de dimension 12 du problème en plusieurs sous-espaces invariants sous les opérations de symétrie de la molécule. Cette procédure nous simplifie la tâche de trouver les vecteurs propres du système. Dans la suite du cours nous verrons que cette démarche s'appele *décomposition en représentations irreductibles du groupe de symétrie du système*. Nous apprendrons des techniques pour effectuer cette décomposition de manière systématique et ainsi trouver les vecteurs propres du système à l'étude.

Revénons à notre molécule d'ammoniac. Considérons le vecteur de déplacement

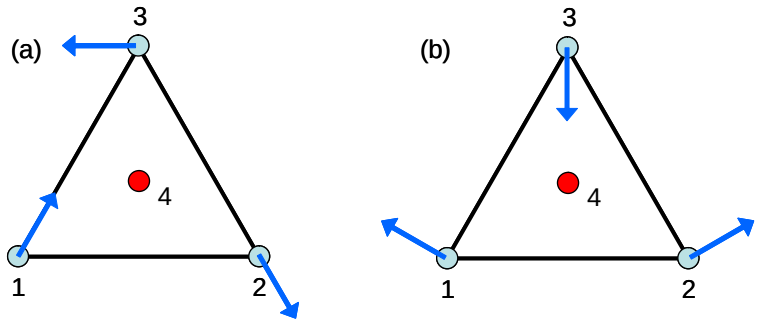

FIG. 1.4 – *Modes propres de vibration dégénéré dans le plan $z = 0$. Les déplacements en (a) et (b) se transforment sous les opérations de symétrie de la molécule comme les composantes x et y d'un vecteur dans le plan.*

illustré dans la figure 1.4(a)

$$\mathbf{u}_{p1} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\,;\, \frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, 0\,;\, -1, 0, 0\,;\, 0, 0, 0 \right) , \tag{1.19}$$

Exercice: Vérifier que le vecteur (1.19) est un vecteur propre de la matrice A. Vérifier qu'il n'est pas invariant sous les opérations de symétrie de la molécule.

Puisque ce vecteur n'est pas invariant, nous pouvons obtenir d'autres vecteurs propres dégénérés avec le premier en appliquant les opérations de symétrie de la molécule. Remarquons que le déplacement (1.19) est uniquement dans le plan $z = 0$ et que toutes le opérations de symétrie laissent ce plan invarié. Le sous-espace invariant ne peut donc pas avoir plus que deux dimensions. Sans faire l'effort de générer le deuxième vecteur par application d'une opération de symétrie, nous pouvons choisir un deuxième vecteur linéairement indépendant qualconque dans le plan des trois hydrogènes. Choisissons le vecteur orthogonal au premier, obtenu par rotation de $\pi/2$ des vecteurs $\mathbf{u}_1$, $\mathbf{u}_2$, $\mathbf{u}_3$, illustré en figure 1.4(b).

$$\mathbf{u}_{p2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0\,;\, \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}, 0\,;\, 0, -1, 0\,;\, 0, 0, 0 \right) , \tag{1.20}$$

Ce vecteur est aussi vecteur propre de la matrice a. Ce choix des deux vecteurs n'est pas faite au hazard. On pourrait en effet montrer que les deux vecteurs

(1.19) et (1.20) sous les opérations de symétrie de la molécule se comportent comme les composantes x et y d'un vecteur dans le plan $z = 0$. Cela veut dire par exemple que pour chaque j, si $O_j \mathbf{u}_{p1} = a_j \mathbf{u}_{p1} + b_j \mathbf{u}_{p2}$, alors les coefficients a_j et b_j son les mêmes que pour la rotation $S_j \hat{\mathbf{x}} = a_j \hat{\mathbf{x}} + b_j \hat{\mathbf{y}}$ dans l'espace à trois dimensions. Par la suite nous verrons que, pour les molécules et pour les solides, les sous-espaces invariants peuvent être regroupés dans un très petit nombre de catégories – les représentations irréductibles – par rapport aux propriétés de transformation des vecteurs sous les opérations de symétrie. Nous apprendrons à reconnaitre ces catégories et à dériver les vecteurs de base par des méthodes systématiques.

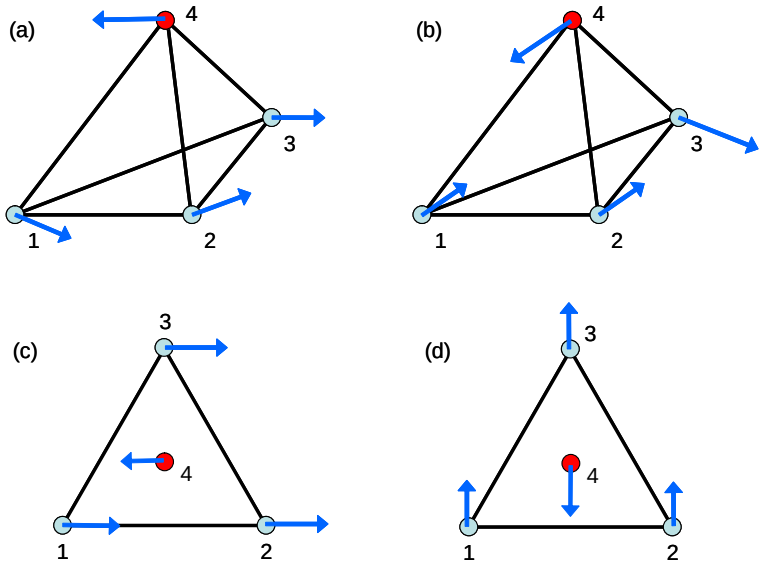

FIG. 1.5 – *Modes propres de vibration dégénéré. Puisque ces deux modes entrainent une déformation dans les trois dimensions, nous avons dessiné pour chaque composante la vue en perspective (haut: (a) et (b) pour les deux composantes) et la vue projectée sur le plan horizontal (bas: (c) et (d)).*

Notre chemin est pratiquement arrivé au but. Nous avons trouvé les trois modes de translation, les trois de rotation et quatre modes propres de vibration. Nous pourrions, par une procédure d'orthogonalisation de Gram–Schmidt, trouver les deux vecteurs propres restants et diagonaliser le problème dans le sous-espace correspondant. La méthode utilisée ci dessus nous sim-

plifie encore la tâche. Considérons le mode illustré en figure 1.5(a) et (c)

$$\mathbf{u}_{p1} = \frac{1}{\sqrt{3+2b^2+\mu^2}}\,(1,0,b\,;1,0,\,-b\,;\,1,0,0\,;\,-\mu,0,0)\ , \tag{1.21}$$

avec $b = 3H/L$, H et L hauteur et côté du triangle formé par les trois hydrogènes. Il est vecteur propre de A et nous pouvons vérifier qu'il n'est pas invariant sous toutes les opérations de symétrie. Puisque il ne nous restent que deux dimensions à disposition, il est évident que le sous-espace invariant de ce vecteur est de dimensions deux. Un deuxième vecteur est illustré en figure 1.5(b) et (d)

$$\mathbf{u}_{p2} = \frac{1}{\sqrt{3+6a^2+\mu^2}}\,(0,1,a\,;0,1,a\,;\,0,1,\,-2a\,;\,0,\,-\mu,0)\ , \tag{1.22}$$

avec $a = b/\sqrt{3}$. Les constantes a et b sont choisies pour que les deux modes ne contiennes pas une rotation rigide de la molécule.

Chapitre 2

Introduction mathématique

Le but de ce Chapitre est de résumer les notions d'algèbre nécessaires à la formulation de la théorie des représentations des groupes.

2.1 Applications et opérations binaires

Considérons deux ensembles X et Y. Une *application* (ou *fonction*) f de X dans Y est définie si, pour chaque élément x appartenant à X (« x appartient à X» est abrégé par la notation $x \in X$), il existe un élément unique y en Y associé à x. Nous représentons cet élément par $y = f(x)$ et l'appelons image de x sous l'application f. Nous écrivons

$$f : \quad X \to Y \quad , \quad x \mapsto y = f(x) \, . \tag{2.1}$$

L'ensemble X est appelé le *domaine* de f et Y son *image*. L'ensemble des éléments de Y, qui sont des images sous f d'un élément de X, est appelé l'image de X sous f et il noté par $f(X)$.

En général $f(X)$ est un sous-ensemble de Y (nous écrirons $f(X) \subset Y$) et n'est pas forcément identique à Y.

L'application f est *injective* si

$$f(x) = f(x') \;\; \Rightarrow \;\; x = x' \, . \tag{2.2}$$

Pour une application injective, deux éléments de X ne peuvent pas avoir la même image en Y. Une application est *surjective* si $f(X) = Y$. Pour une application surjective donc, chaque élément de Y est l'image d'au moins un

élément de X. Une application qui est en même temps injective et surjective est dite *bijective*. Soit f une application de X en Y et g une application de Y en Z. La *composition* ou *produit* de ces deux applications $h : X \to Z$ est alors définie par

$$h(x) = g\left(f(x)\right) . \tag{2.3}$$

L'application h agit de X en Z et est notée par

$$h = g \cdot f \tag{2.4}$$

ou simplement gf lorsqu'il n'y a pas de possibilité de confusion avec d'autres opérations. On remarque que $f \cdot g$ n'est pas nécéssairement bien définie et que, quand elle existe, elle n'est pas nécéssairement égale à $g \cdot f$. Considérons par exemple les fonctions de variable réelle $f(x) = x^2$ et $g(y) = \mathrm{e}^y$. Nous avons

$$(g \cdot f)(x) = g\left(x^2\right) = \mathrm{e}^{x^2} \tag{2.5}$$

et

$$(f \cdot g)(x) = f\left(\mathrm{e}^x\right) = \mathrm{e}^{2x} . \tag{2.6}$$

La composition d'applications est associative, c.à.d. si u, v, et w sont des applications de $X \to Y$, $Y \to Z$, et $Z \to W$ respectivement, alors

$$(w \cdot (v \cdot u))(x) = ((w \cdot v) \cdot u)(x) . \tag{2.7}$$

En effet, pour chaque $x \in X$ les deux cotés de cette égalité correspondent à l'élément

$$w(v(u(x))) \tag{2.8}$$

en W. Nous pouvons donc écrire

$$(w \cdot (v \cdot u))(x) = ((w \cdot v) \cdot u)(x) = w \cdot v \cdot u . \tag{2.9}$$

Si $f : X \to Y$ est une application bijective, alors pour chaque élément y en Y il y a un élément unique x en X tel que $f(x) = y$ et, naturellement, chaque élément x a une image en Y. Nous pouvons donc définir une application bijective $Y \to X$, $y \mapsto x$ telle que $y = f(x)$. Cette application est appelée l'*inverse* de f et est indiquée par f^{-1}.

Souvent nous considérons des applications d'un ensemble X en lui-même. Un exemple est constitué par les fonctions à valeur réelle (complexe) d'une variable réelle (complexe). Définissons l'application identité comme

$$e : \ X \to X \quad , \quad x \mapsto e(x) = x . \tag{2.10}$$

Cette application est clairement bijective. Si $f : X \to Y$ est une application bijective, f^{-1} existe et nous avons

$$(f^{-1} \cdot f)(x) = x \tag{2.11}$$

pour chaque x. Nous écrivons donc

$$f^{-1} \cdot f = e_X \,, \tag{2.12}$$

où nous avons indiqué par e_X l'application identité de X en X. Remarquez que nous avons aussi

$$f \cdot f^{-1} = e_Y \,. \tag{2.13}$$

Théorème. Soient X et Y deux ensembles contenant le même nombre n fini d'éléments[1]. Les trois affirmations suivantes sont équivalentes:

(i) $f : X \to Y$ est surjective,

(ii) $f : X \to Y$ est injective,

(iii) $f : X \to Y$ est bijective.

Preuve:

(i) $\Rightarrow f(X) = Y$. Donc $f(X)$ est composé de n éléments, ce qui implique (ii).

(ii) $\Rightarrow f(X)$ est composé de n éléments. Il s'ensuit que $f(X) = Y$, ce qui peut être ramené à la propriété (i).

Puisque (i) et (ii) sont l'une la conséquence de l'autre, (iii) est vraie aussi et le théorème est ainsi démontré.

Le *produit cartésien* $X \times Y$ de deux ensembles X et Y est l'ensemble de toutes les paires ordonnées (x,y) où $x \in X$ et $y \in Y$. Si $Y = X$, alors $X \times Y$ est indiqué par X^2. Par exemple, si l'ensemble des nombres réels est indiqué par R, R^2 est l'ensemble des points dans un espace à deux dimensions (un plan). De la même façon nous pouvons définir X^3, X^4, etc. On appelle le graphe d'une fonction $f : X \to Y$ le sous-ensemble de $X \times Y$ qui contient les paires ordonnées $(x,f(x))$.

Une *relation* $\mathcal{R}$ entre des éléments des ensembles X et Y est définie comme un sous-ensemble de $X \times Y$. Nous disons que $x \in X$ est en relation $\mathcal{R}$ avec $y \in Y$ si $(x,y) \in \mathcal{R}$. Dans ce cas nous écrivons $x\mathcal{R}y$.

1. Remarquez que ce théorème n'est pas valable pour deux ensembles qui n'ont pas le même nombre d'éléments.

Une *relation d'équivalence* – indiquée par $x \sim y$ – est une relation entre des éléments d'un ensemble X qui satisfait aux trois conditions suivantes:

(i) $x \sim x$ pour chaque $x \in X$ (réflectivité).

(ii) $x \sim y \Rightarrow y \sim x$ (symétrie).

(iii) $x \sim y$ et $y \sim z \Rightarrow x \sim z$ (transitivité).

Si dans un ensemble S nous avons défini une relation d'équivalence, alors l'ensemble des $y \in S$ qui sont équivalents à x est appelé la *classe d'équivalence* de x. Nous indiquons cet ensemble par

$$C_x = \{y;\, y \sim x\}\,. \tag{2.14}$$

Naturellement, C_x contient l'élément x.

Théorème. Une relation d'équivalence entre les éléments d'un ensemble S divise l'ensemble en classes d'équivalence disjointes. Ceci veut dire que

(i) $x \in C_x$,

(ii) $x \sim y \Leftrightarrow C_x = C_y \Leftrightarrow C_x \cap C_y \neq \emptyset$

Preuve: (i) est évidente. Nous démontrons (ii) en trois étapes.

a. $x \sim y \Rightarrow C_x = C_y$. En effet, si $z \in C_y$, $y \sim z$, par transitivité $z \sim x$ et donc $z \in C_x$. Donc, chaque élément de C_y est également un élément de C_x. De la même façon nous pouvons démontrer que chaque élément de C_x est en même temps un élément de C_y. Par conséquent $C_x = C_y$.

b. $C_x = C_y \Rightarrow C_x \cap C_y \neq \emptyset$ puisque $x \in C_x$ et $x \in C_y$, ce qui implique $C_x \cap C_y \neq \emptyset$.

c. $C_x \cap C_y \neq \emptyset \Rightarrow x \sim y$. Puisque $C_x \cap C_y \neq \emptyset$, il contient au moins un élément, disons z. Donc $z \in C_x$ et $z \in C_y$, ce qui comporte $z \sim x$ et $z \sim y$, d'où $x \sim y$.

Ces trois implications complètent la preuve du théorème.

Considérons un ensemble S. Une opération binaire interne à S est une application

$$f : S \times S \to S\,. \tag{2.15}$$

Cela veut dire que pour chaque paire ordonnée (x,y) d'éléments de $S \times S$ nous attribuons un élément unique $z \in S : z = f(x,y)$. Cette opération est indiquée typiquement par xy et est appelée le *produit* de x et y (dans cet ordre). Voici des exemples d'opérations binaires internes.

(i) Multiplication de nombres réels ($x,y \in R$)

$$(x,y) \mapsto xy \in R\,. \tag{2.16}$$

(ii) Addition de nombres réels

$$(x,y) \mapsto x + y\,. \tag{2.17}$$

Une opération binaire interne est dite *commutative* si

$$xy = yx \tag{2.18}$$

pour tout $x,y \in S$. Elle est dite *associative* si, pour tout $x,y,z \in S$,

$$x(yz) = (xy)z\,. \tag{2.19}$$

Dans ce cas les parenthèses sont superflues et nous pouvons indiquer le résultat de l'opération par xyz. Nous définissons aussi $x^2 = xx$, $x^3 = xxx$, etc.

Soit S un ensemble et $\mathcal{R}$ une relation d'équivalence. Les classes d'équivalence forment un ensemble dit le *quotient* $S/\mathcal{R}$ de S par $\mathcal{R}$. L'application

$$S \to S/\mathcal{R} \tag{2.20}$$

définie par

$$x \mapsto C_x \tag{2.21}$$

est surjective, puisque chaque élément de $S/\mathcal{R}$ est une classe d'équivalence.

Soit S un ensemble avec une opération binaire interne. Si des éléments e_R et e_L existent en S tels que $xe_R = x$ et $e_L x = x$ pour chaque $x \in S$, alors nous appelons ces éléments respectivement *identité droite* et *identité gauche*. Si e_L et e_R existent en même temps, alors ils coïncident et nous appelons cet élément unique e. Nous avons dans ce cas $xe = ex = x$ pour chaque $x \in S$. En effet, de la définition de e_L et e_R nous avons $e_L e_R = e_L = e_R$. S'il y avait deux éléments identité distincts e et e' tels que $ex = xe = x$ et $e'x = xe' = x$ pour chaque x, alors $e = e'e = e'$. Si pour un élément x en S un élément $x'_R \in S$ existe tel que $xx'_R = e$, nous disons que x'_R est un *inverse droit* de x. Egalement, un *inverse gauche* est défini comme un élément x'_L tel que $x'_L e = e$. Si x'_R et x'_L existent en même temps et si l'opération est associative, alors $x'_L = x'_L$. En effet

$$x'_R = ex'_R = (x'_L x)x'_R = x'_L(xx'_R) = x'_L e = x'_L\,. \tag{2.22}$$

Donc, pour une opération binaire associative, x' est un inverse de x si

$$xx' = x'x = e\,. \tag{2.23}$$

L'inverse de x est unique. En effet, si x'' était un autre inverse de x, nous aurions

$$x'' = x''e = x''(xx') = (x''x)x' = ex' = x' \,. \tag{2.24}$$

Nous indiquons l'inverse de x par x^{-1}. Par exemple, dans l'ensemble des nombres réels R, 0 et 1 sont respectivement les identités (dites aussi éléments neutres) pour l'addition et la multiplication. L'inverse de x pour l'addition est $-x$. L'inverse pour la multiplication est $1/x$ si $x \neq 0$.

Théorème. Considérons un ensemble S avec une opération binaire interne associative et un élément identité e. Si x et y ont des inverses x^{-1} et y^{-1}, alors xy a un inverse et

$$(xy)^{-1} = y^{-1}x^{-1} \,. \tag{2.25}$$

Preuve:

$$(xy)(y^{-1}x^{-1}) = x(yy^{-1})x^{-1} = xex^{-1} = xx^{-1} = e \tag{2.26}$$

et

$$(y^{-1}x^{-1})(xy) = y^{-1}(x^{-1}x)y = y^{-1}ey = y^{-1}y = e \tag{2.27}$$

2.2 Théorie des groupes abstraits

Un ensemble G, muni d'une opération binaire interne associative, est dit un *groupe* s'il contient un élément identité (aussi dit élément neutre) et l'inverse de chacun de ses éléments.

Pour que G soit un groupe donc, il faut vérifier que:

(i) l'opération binaire est interne, c. à d. G est fermé sous cette opération,

(ii) l'opération est associative,

(iii) Il existe un élément neutre $e \in G$, c. à d. tel que $xe = ex = x$ pour chaque $x \in G$,

(iv) $x \in G \Rightarrow x^{-1} \in G$.

Si l'opération binaire est commutative (c. à d. $xy = yx$ pour chaque x,$y \in G$), alors le groupe est dit *Abélien*. Si un groupe contient n éléments, on dit que n est l'*ordre* du groupe. Un tel groupe est dit *fini*. Un groupe qui n'est pas fini est dit *infini*.

Exemples de groupe:

(i) L'ensemble R des nombres réels muni de l'addition est un groupe abélien. L'élément neutre est le 0 et l'inverse de x est $-x$.

(ii) L'ensemble R des nombres réels muni de la multiplication n'est pas un groupe. En effet, l'élément 0 n'a pas d'inverse. Par contre $R-\{0\}$ muni de la multiplication est un groupe abélien. L'élément neutre est le 1 et l'inverse de x est $1/x$. Si C est l'ensemble des nombres complexes et Q l'ensemble des nombres rationnels, $C-\{0\}$ et $Q-\{0\}$ munis de la multiplication sont des groupes abéliens.

(iii) L'ensemble Z des nombres entiers muni de l'addition est un groupe. Il ne l'est pas si muni de la multiplication.

(iv) L'ensemble $\{1, -1\}$ muni de la multiplication est un groupe.

(v) Si n est un entier positif et $\omega = e^{2\pi i/n}$, l'ensemble

$$\{1, \omega, \omega^2, \ldots, \omega^{n-1}\}$$

muni de la multiplication est un groupe. L'élément neutre est 1 et l'inverse de ω^k $(0 \leq k \leq n-1)$ est ω^{n-k}. La multiplication par $e^{i\phi}$ transforme le nombre complexe

$$z = re^{i\theta}$$

en

$$z' = e^{i\phi}z = re^{i(\theta+\phi)}\,.$$

Cette opération est une rotation de tous les points sur le plan complexe par un angle ϕ autour de l'origine. Les nombres $1, \omega, \omega^2, \ldots, \omega^{n-1}$ représentent des rotations par $0, 2\pi/n, 2(2\pi/n), \ldots, (n-1)(2\pi/n)$ autour de l'origine. Les rotations par ces angles autour d'un axe fixe forment donc un groupe abélien.

Soit G un groupe avec élément neutre e et H un sous-ensemble de G On dit que H est un sous-groupe de G (muni de la même opération binaire que G) si

(i) x,$y \in H \;\Rightarrow\; xy \in H$,

(ii) $x \in H \;\Rightarrow\; x^{-1} \in H$.

Clairement, les propriétés (i) et (ii) impliquent que $e \in H$. Exemples des sous-groupes sont

(i) G est un sous-groupe de G,

(ii) $\{e\}$ est un sous-groupe de G,

(iii) Si $G = R$ muni de l'addition, alors Z est un sous-groupe de G.

(iv) Si $G = R - \{0\}$ muni de la multiplication, alors $\{1, -1\}$ est un sous-groupe de G.

Théorème du réarrangement. Soit G un groupe et m un de ses éléments. Les applications

$$G \to G : \begin{array}{l} x \mapsto mx\,, \\ x \mapsto xm \end{array}$$

sont bijective.

Preuve:

(i) $x \mapsto mx$ est surjective, puisque pour chaque $y \in G$, $m^{-1}y \in G$ et $m(m^{-1}y) = y$. Donc y est l'image de $m^{-1}y$ sous cette application.

(ii) $x \mapsto mx$ est injective puisque $mx = mx' \Rightarrow m^{-1}mx = m^{-1}mx' \Rightarrow x = x'$.

La preuve est similaire pour la deuxième application. Ceci montre que les ensembles mG et Gm sont des réarrangements des éléments de G. Ce théorème nous permet d'écrire des tables de multiplication pour les groupes finis de petit ordre. Les tables de multiplication s'écrivent de la façon suivante

	a	b	c	$\ldots$
a	a^2	ab	ac	$\ldots$
b	ba	b^2	bc	$\ldots$
c	ca	cb	c^2	$\ldots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	

Le théorème du réarrangement dit que chaque ligne et chaque colomne de la table contient tous les éléments du groupe. Sur une ligne ou sur une colomne aucun élément est répété. Donc chaque ligne ou colomne est un réarrangement des éléments du groupe. Comme exemple nous pouvons écrire les seules tables de multiplication possibles pour les groupes d'ordre deux et trois.

	e	a
e	e	a
a	a	e

	e	a	b
e	e	a	b
a	a	b	e
b	b	e	a

Le théorème du réarrangement montre qu'un groupe d'ordre n est un sous-groupe du groupe des permutations de n objets (théorème de Cayley). Ce théorème est très important puisque il réduit considérablement le nombre

de possibilités d'écrire la table de multiplication d'un groupe. Grace à ce théorème nous avons vu qu'un groupe d'ordre 3 est unique et nous avons pu écrire sa table de multiplication sans spécifier la nature de ses éléments ou de l'opération interne. Plus en général, nous pouvons construir les tables de multiplications en utilisant deux critères fondamentaux. Premièrement, la table doit satisfaire au théorème du réarrangement. Deuxièmement, la table ainsi obtenue doit aussi satisfaire à la propriété associative, càd $a(bc) = (ab)c$, pour tous les éléments. Nous verrons dans l'exercice de la Série 2 comment, à partir de ces deux critères, nous pouvons obtenir les deux seuls groupes non équivalents d'ordre 6.

Considérons un élément a d'un groupe fini G. L'ensemble $\{e, a, a^2, \ldots\}$ est un sous-ensemble de G et il est par conséquent fini. Ils existent donc des nombres entiers m et k, avec $m > k$ tels que $a^m = a^k$ ou $a^{m-k} = a^n = e$, où $n = m - k$. Il est donc toujours possible de trouver une puissance de a égale à l'élément neutre e. Soit n l'entier positif plus petit pour lequel cette propriété est vérifiée. Nous avons que

$$H = \{e, a, a^2, \ldots, a^{n-1}\} \tag{2.28}$$

est un sous-groupe de G. Nous disons que H est *généré* par a. Un groupe de la forme de H est dit *cyclique*. Il est clairement abélien.

On appelle un sous-groupe *propre* de G un sous-groupe autre que $\{e\}$ et G.

Soit G un groupe et H un des ses sous-groupes propres. Nous définons une relation d'équivalence entre les éléments de G comme suit: si x,$y \in G$ et $x^{-1}y \in H$, alors x et y sont équivalents et nous écrivons $x \sim y$. Démontrons qu'il s'agit effectivement d'une relation d'équivalence

(i) $x \sim x$ puisque $x^{-1}x = e \in H$.

(ii) $x \sim y \Rightarrow y \sim x$, puisque $x^{-1}y \in H \Rightarrow (x^{-1}y)^{-1} = y^{-1}x \in H$.

(iii) $x \sim y$ et $y \sim z \Rightarrow x \sim z$, puisque $x^{-1}y \in H$ et $y^{-1}z \in H \Rightarrow x^{-1}yy^{-1}z = x^{-1}z \in H$.

Cette relation d'équivalence permet donc de diviser les éléments de G en classes disjointes. Si $x^{-1}y \in H$, alors y est égal à un élément de H multiplié à gauche par x. Nous indiquons l'ensemble ainsi construit par le symbole

$$C_x = xH \tag{2.29}$$

et l'appelons *co-ensemble à gauche*. L'application $H \to xH$ est bijective. En effet, chaque élément $z \in xH$ est l'image de $x^{-1}z \in H$, ce qui implique que

l'application est surjective. Elle est aussi injective puisque pour y,$y' \in H$ nous avons que $xy = xy' \Rightarrow y = y'$.

Nous pouvons également définir une deuxième relation d'équivalence $x \sim y$ si $yx^{-1} \in H$. Nous pouvons ainsi introduire le concept de *co-ensemble à droite* (Hx) de la même manière qu'avant.

Théorème. Si G est un groupe fini et H un sous-groupe propre de G, alors l'ordre de H est un diviseur de l'ordre de G.

Preuve: Considérons les co-ensembles à gauche de H. Ils sont tous disjoints ou identiques (puisque ils sont des classes d'équivalence). Si il y a n co-ensembles à gauche distincts, leur union est G. Donc, si nous indiquons par g et h les ordres respectivement de G et H, alors g=nh et le théorème est démontré. Un corollaire simple est qu'un groupe d'ordre prime n'a pas de sous-groupes propres.

Nous allons maintenant introduire le concept d'*homomorphisme*. Un groupe G est dit *homomorphe* à un groupe H s'il existe une application $h : H \to G$ telle que

(i) h est surjective, c. à d. $h(H) = G$.

(ii) $h(xy) = h(x)h(y)$ pour chaque paire d'éléments x, y en H.

Remarquez que si $H = \{e, x, y, \ldots\}$, les éléments $h(e)$, $h(x)$, $h(y)$ de G ne sont pas nécessairement distinct. La seule chose nécessaire est que chaque élément de G soit l'image d'au moins un élément de H. L'application h est appelée un *homomorphisme* et indiquée par $G = \text{hom } H$. Par exemple, si G consiste d'un seul élément e', alors $h(x) = e'$ pour tous $x \in H$ est un homomorphisme. Le groupe $G = \{1, -1\}$ muni de la multiplication est homomorphe à $Z = \{\ldots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, \ldots\}$ muni de l'addition, avec

$$h(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \text{ est paire} \\ -1 & \text{si } x \text{ est impaire}\,. \end{cases} \tag{2.30}$$

Théorème. Si le groupe $G = \{e', a', b', \ldots\}$ est homomorphe à $H = \{e, a, b, \ldots\}$ par l'homomorphisme h, alors

$$h(e) = e' \tag{2.31}$$

et

$$h(x^{-1}) = h^{-1}(x)\,, \tag{2.32}$$

pour chaque $x \in H$. **Preuve:**

$$\begin{aligned} h(x) &= h(xe) = h(x)h(e) \\ h(x) &= h(ex) = h(e)h(x) \end{aligned}$$

ou

$$h(e)h(x) = h(x)h(e) = h(x) \tag{2.33}$$

ce qui implique que $h(e)$ est l'élément neutre de G et il est forcement égal à e'.

$$\begin{aligned} h(xx^{-1}) &= h(x)h(x^{-1}) = h(e) = e' \\ h(x^{-1}x) &= h(x^{-1})h(x) = h(e) = e' \end{aligned}$$

ce qui comporte

$$h(x)h(x^{-1}) = h(x^{-1})h(x) = e' \tag{2.34}$$

et donc $h(x^{-1})$ est l'inverse de $h(x)$ en G.

Nous introduisons également le concept d'*isomorphisme*. Deux groupes H et G sont isomorphe s'il existe une application bijective $h : H \to G$ telle que $h(xy) = h(x)h(y)$ pout tous x,$y \in H$. Clairement, si G est homomorphe à H et H et homomorphe à G, alors H et G sont isomorphes.

Théorème. Soit $G = \hom H$. L'ensemble de tous les $x \in H$ tels que $h(x) = e'$ est un sous-groupe de H qu'on appelle le noyau de h. Nous l'indiquons par $\ker h$.

Preuve:

(i) $e \in \ker h$ puisque $h(e) = e'$.

(ii) $x \in \ker h \Rightarrow h(x) = e' \Rightarrow h(x^{-1}) = h^{-1}(x) = e'$.

(iii) x,$y \in \ker h \Rightarrow h(xy) = h(x)h(y) = e' \Rightarrow xy \in \ker h$.

Introduisons maintenant le concept de *classe conjuguée*. Soit G un groupe. Si x,$y \in G$, nous disons que y est un élément conjugué de x s'il existe un élément $u \in G$ tel que

$$y = u^{-1}xu\,. \tag{2.35}$$

Celle que nous venons de définir est une relation d'équivalence. En effet:

(i) $x = e^{-1}xe$, c. à d., $x \sim x$,

(ii) $y = u^{-1}xu \Rightarrow x = uyu^{-1} = (u^{-1})^{-1}yu^{-1} \Rightarrow x \sim y$, si $y \sim x$,

(iii) $x \sim y$ et $y \sim z \Rightarrow$ ils existent u et $v \in G$ tels que $x = u^{-1}yu$ et $y = v^{-1}zv$. Il s'ensuit que $x = u^{-1}v^{-1}zvu = (vu)^{-1}z(vu) \Rightarrow x \sim z$.

Par ce théorème, la relation de conjugaison divise les éléments du groupe G en classes distinctes qu'on appelle *classes conjuguées* ou simplement *classes*. Par la suite, lorsque nous utiliserons le mot « classe » sans autre qualification, nous entenderons parler d'une classe conjuguée. Nous indiquons la classe composée par les éléments conjugués à x par le symbole C_x. **Remarquez qu'en**

général C_x n'est pas un groupe. Remarquez aussi que la classe C_e ne consiste que de l'élément e: $C_e = \{e\}$. L'application f_u définie par

$$f_u : C_a \to C_a \, ; \, x \mapsto f_u(x) = u^{-1}xu \tag{2.36}$$

avec $x \in C_a$ et $u \in G$, est bijective. En effet, f_u est surjective puisque, si $x \sim a$, alors x est l'image par f_u de $uxu^{-1} \sim a$. Elle est aussi injective puisque $f_u(x) = f_u(x') \Rightarrow u^{-1}xu = u^{-1}x'u \Rightarrow x = x'$. Donc, l'ensemble $u^{-1}C_au$ est simplement un réarrangement de C_a. Nous pouvons donc écrire

$$u^{-1}C_au = C_a \, . \tag{2.37}$$

Un sous-groupe N d'un groupe G est dit un *sous-groupe invariant* ou un *diviseur normal* de G s'il est composé uniquement de classes conjuguées entières. Cela veut dire que la conjugaison de tous les éléments d'un sous-groupe invariant par un élément u de G induit simplement un réarrangement de ses éléments, c. à d.

$$u^{-1}Nu = N \, . \tag{2.38}$$

Nous pouvons également écrire

$$Nu = uN \, . \tag{2.39}$$

Donc les co-ensembles droit et gauche d'un sous-groupe invariant sont égaux. Considérons maintenant un ensemble $\mathcal{F}$ composé des co-ensembles droits de N

$$C_u = Nu \, . \tag{2.40}$$

Nous définissons maintenant une loi de composition des éléments C_u. Considérons C_u et C_v et construisons l'ensemble contenant tous les produits d'un élément de C_u par un élément de C_v. Nous avons ainsi construi l'ensemble C_uC_v qui contient des éléments de G. Remarquez que nous ne tenons pas en compte les répétitions des éléments: dans C_uC_v chaque élément est contenu une seule fois. Si x et y sont éléments de N, alors un élément typique de C_u est xu et un élément typique de C_uC_v est $xuyv$. Cette opération de composition satisfait à la propriété

$$C_uC_v = C_{uv} \, . \tag{2.41}$$

En effet

$$\begin{aligned} C_uC_v &= (Nu)(Nv) = (Nu)(Nu^{-1}uv) = (N)(uNu^{-1})uv \\ &= (N)(Nuv) = (NN)(uv) = Nuv = C_{uv} \, , \end{aligned} \tag{2.42}$$

où nous avons pu utiliser $NN = N$ grace au théorème du réarrangement. Muni de cette opération interne, l'ensemble $\mathcal{F}$ est un groupe. En plus, $\mathcal{F}$ est homomorphe à G. Nous appelons $\mathcal{F}$ le *quotient* de G par N et écrivons

$$\mathcal{F} = G/N\,. \tag{2.43}$$

Le groupe $\mathcal{F}$ est appelé également le *groupe facteur* de G par rapport au sous-groupe invariant N.

Nous introduisons maintenant un nouveau type de multiplication entre deux ensembles. D'abord établissons la notation $[S]$ pour indiquer que, si dans l'ensemble S il y a des éléments répétés, nous les gardons. Par exemple, si $[S] = \{a, a, b, c, c, c\}$, alors $S = \{a, b, c\}$.

Nous avons vu que, si C est une classe conjuguée d'un groupe G et $x \in G$, alors $x^{-1}Cx = C$. Soit $[\mathcal{R}]$ un ensemble d'éléments de G composé uniquement de classes entières. Par cela nous voulons dire que, si un élément $x \in G$ est contenu en $[\mathcal{R}]$ n fois, alors chacune de ses éléments conjugués sera aussi contenu en $[\mathcal{R}]$ un nombre égal de fois.Alors, pour chaque $u \in G$ nous avons

$$u^{-1}[\mathcal{R}]u = [\mathcal{R}]\,. \tag{2.44}$$

Au contraire, si $[\mathcal{R}]$ satisfait à cette relation pour chaque $u \in G$, alors $[\mathcal{R}]$ est composé de classes entières. Cette dernière implication se démontre comme suit. Supposons que $[\mathcal{R}]$ ne soit pas composé de classes entières. Soit $[\mathcal{R}']$ le plus grand sous-ensemble de $[\mathcal{R}]$ composé de classes entières. Puisque

$$u^{-1}[\mathcal{R}']u = [\mathcal{R}']\,. \tag{2.45}$$

pour chaque $u \in G$, alors il s'ensuit que l'ensemble résidu

$$[\mathcal{R}''] = [\mathcal{R}] - [\mathcal{R}'] \tag{2.46}$$

satisfait à

$$u^{-1}[\mathcal{R}'']u = [\mathcal{R}'']\,. \tag{2.47}$$

Nous devons donc montrer que l'ensemble $[\mathcal{R}'']$ est vide. $[\mathcal{R}'']$ ne peut pas contenir e puisque e constitue tous seul une classe entière.Supposons que $[\mathcal{R}'']$ ne soit pas vide et soit x un element de $[\mathcal{R}'']$. Puisque $[\mathcal{R}'']$ ne contient pas de classes entières, alors il doit y avoir un élément y de G, conjugué à x et qui n'est pas contenu en $[\mathcal{R}'']$. Mais $y = u^{-1}xu$ pour un $u \in G$ et, puisque

$u^{-1}[\mathcal{R}'']u = [\mathcal{R}'']$, alors $y \in [\mathcal{R}'']$. Nous avons atteint une contradiction. Donc nous avons nécessairement

$$[\mathcal{R}''] = \emptyset\,. \tag{2.48}$$

Nous pouvons ainsi formuler le théorème suivant.

Théorème. Une condition nécessaire et suffisante pour que $[\mathcal{R}]$ soit composé uniquement de classes entières d'un groupe G est que, pour chaque $u \in G$

$$u^{-1}[\mathcal{R}]u = [\mathcal{R}]\,. \tag{2.49}$$

Soit H un groupe fini d'ordre h et $C_1 = \{e\}$, $C_2, \ldots, C_\mu, \ldots, C_{N_C}$ ses classes. Nous indiquons par n_μ le nombre d'éléments dans la classe C_μ et par N_C le nombre total de classes. Nous avons donc

$$\sum_{\mu=1}^{N_C} n_\mu = h\,. \tag{2.50}$$

Soient X et Y deux sous-ensembles de H. Construisons les produits xy des éléments x de X et y de Y, en gardant les éléments répétés. Nous définissons l'ensemble

$$X \cdot Y = [xy] \tag{2.51}$$

qui contient tous ces éléments. Soient C_μ et C_ν deux classes de H. Prenons le produit

$$C_\mu \cdot C_\nu = [uv]\,, \tag{2.52}$$

où u et v sont respectivement éléments de C_μ et C_ν. Pour chaque $x \in H$ nous avons

$$x^{-1}C_\mu \cdot C_\nu x = [x^{-1}uvx] = [x^{-1}uxx^{-1}vx] = C_\mu \cdot C_\nu\,. \tag{2.53}$$

Il s'ensuit que $C_\mu \cdot C_\nu$ est composé uniquement de classes entières et nous pouvons écrire symboliquement

$$C_\mu \cdot C_\nu = \sum_{\lambda=1}^{N_C} n_{\mu\nu\lambda} C_\lambda\,, \tag{2.54}$$

où $n_{\mu\nu\lambda}$ sont des nombres entiers non négatifs. La somme indique la collection de classes où chaque élément C_λ est répété $n_{\mu\nu\lambda}$ fois. Les coéfficients $n_{\mu\nu\lambda}$ satisfont la propriété de symétrie suivante

$$n_{\mu\nu\lambda} = n_{\nu\mu\lambda}\,. \tag{2.55}$$

Cela suit de

$$C_\mu \cdot C_\nu = C_\nu \cdot C_\mu \,. \tag{2.56}$$

En effet

$$C_\mu \cdot C_\nu = [uv] = [uvu^{-1}u] = C_\nu \cdot C_\mu \,, \tag{2.57}$$

puisque uvu^{-1} est un élément typique de C_ν et, lorsque v parcourt les éléments de C_ν, uvu^{-1} parcourt les mêmes éléments dans un ordre différent. Puisque $C_1 = \{e\}$, alors

$$C_1 \cdot C_\nu = C_\nu \tag{2.58}$$

ce qui implique

$$n_{1\nu\lambda} = n_{\nu 1\lambda} = \delta_{\nu\lambda} \,. \tag{2.59}$$

Chapitre 3

Théorie des représentations

Le but de ce Chapitre est de formuler la théorie des représentations des groupes discrets.

3.1 Représentations

Considérons un groupe H. Supposons maintenant d'avoir un ensemble G de transformations linéaires dans un espace vectoriel et que cet ensemble forme un groupe muni de la loi de composition entre transformations. Supposons aussi que le groupe G est homomorphe au groupe H. Le groupe G de transformations linéaires est alors appelé une *représentation* du groupe H.

Nous pouvons toujours exprimer des transformations linéaires sous forme de matrices carrées définies à partir d'une base pour l'espace vectoriel en question. Dans ce cas, l'opération interne pour le groupe G est simplement le produit entre matrices. Soient $H = \{e, x, y, \ldots\}$ et $G = \{\Gamma(e), \Gamma(x), \Gamma(y), \ldots\}$. Puisque l'application Γ est un homomorphisme, nous avons

$$\Gamma(xy) = \Gamma(x)\Gamma(y)\,. \tag{3.1}$$

Nous appelons la *dimension* d'une représentation la dimension de l'espace vectoriel dans lequel cette représentation est définie.

Donnons ici quelques exemples de représentations:

(i) $\Gamma(x) = \mathbf{1}$, la transformation identité, pour tout $x \in H$. Cette représentation est dite la représentation identité ou totalement symétrique.

(ii) Considérez le groupe $O(3)$ des transformations orthogonales dans l'espace à trois dimensions. Ce groupe est composé de toutes les rotations

et de l'invérsion (il est donc un groupe infini). Ces transformations sont représentées par les matrices orthogonales 3×3. Ces matrices forment une représentation du groupe $O(3)$. Une autre possible représentation du groupe $O(3)$ est définie dans l'espace à une dimension. Elle associe à chaque élément x du groupe $O(3)$ la transformation linéaire qui revient à multiplier un vecteur dans l'espace à une dimension par $\det(R_x)$, où R_x est la matrice 3×3 relative à la représentation à trois dimensions définie ci dessus. Cette représentation à une dimension est souvent appelée *représentation déterminantale*.

(iii) Considérez les matrices 12×12, définies par (1.10) et (1.11) ainsi que dans le point (iii) de la Série 1 d'exercices. Lorsqu'une molécule d'ammoniac subit une rotation dans l'espace, ces matrices représentent l'effet d'une telle rotation dans l'espace à 12 dimensions des vecteurs de déplacement des atomes qui composent la molécule. Nous avons vérifié dans la Serie 1 que ces matrices forment un groupe qui est homomorphe au groupe C_{3v}. Ces matrices sont donc une représentation du groupe C_{3v} dans un espace de dimension 12. Nous verrons qu'en général la première étape de l'application de la théorie des groupes à la physique consiste à trouver la représentation du groupe de symétrie dans l'espace vectoriel des configurations du système. Pour des modes de vibration d'une molécule, c'est l'espace généré par les vecteurs de déplacement. Pour un système quantique, par contre, il s'agira de l'espace de Hilbert des états quantiques du système.

Théorème. Soit $H = \{e, x, y, \ldots\}$ un groupe et $\Gamma(x)$ une représentation de H. L'ensemble des éléments de H tels que $\Gamma(x) = \Gamma(e)$, où $\Gamma(e)$ est l'identité pour la représentation Γ, est un sous-groupe invariant de H.

Preuve: Dans le rappel de théorie des groupes du chapitre précédant nous avons vu que, pour un homomorphisme Γ, $\Gamma(e)$ est l'identité et $\Gamma(x^{-1}) = \Gamma^{-1}(x)$. L'ensemble d'éléments tels que $\Gamma(x) = \Gamma(e)$ est un sous-groupe invariant puisque:

(i) il est un groupe. $\Gamma(x) = \Gamma(e)$ et $\Gamma(y) = \Gamma(e) \Rightarrow \Gamma(xy) = \Gamma(e)$; il y a un élément neutre $\Gamma(e)$ et, si $\Gamma(x) = \Gamma(e)$, alors $\Gamma(x^{-1} = \Gamma^{-1}(x) = \Gamma(e)$.

(ii) le groupe est invariant puisque si $\Gamma(x) = \Gamma(e)$, alors pour chaque $u \in H$ nous avons $\Gamma(u^{-1}xu) = \Gamma(u^{-1})\Gamma(e)\Gamma(u) = \Gamma(u^{-1}u) = \Gamma(e)$.

Définition. Les représentations $\Gamma(x)$ et $\Gamma'(x)$ d'un groupe $H = \{e, x, y, \ldots\}$ sont dites *équivalentes* si une transformation non-singulière S existe, telle que

$$\Gamma'(x) = S^{-1}\Gamma(x)S\,, \tag{3.2}$$

pour chaque $x \in H$.

Théorème. Chaque représentation Γ d'un groupe H d'ordre fini h est équivalente à une représentation unitaire.

Preuve: Soient ψ et ϕ deux vecteurs quelconques dans l'espace vectoriel des transformations $\Gamma(x)$ définies par la représentation de H. Définissons

$$\{\psi|\phi\} = \frac{1}{h}\sum_{x\in H}\langle\Gamma(x)\psi|\Gamma(x)\phi\rangle\,, \tag{3.3}$$

où $\langle\xi|\eta\rangle$ est le produit scalaire ordinaire entre les vecteurs ξ et η. On peut vérifier que l'opération $\{\psi|\phi\}$ est un produit scalaire. Nous rappelons qu'un produit scalaire doit satisfaire les trois propriétés

(i) $\langle\xi|\eta\rangle = \langle\eta|\xi\rangle^*$ pour chaque ξ, η,

(ii) $\langle\xi|a\eta + b\nu\rangle = a\langle\xi|\eta\rangle + b\langle\xi|\nu\rangle$ pour chaque ξ, η, ν, avec a, b complexes,

(iii) $\langle\xi|\xi\rangle > 0$ pour chaque $\xi \neq 0$.

Nous pouvons donc, à partir d'une base orthonormée $\{\epsilon_i\}$ selon le produit scalaire $\langle\xi|\eta\rangle$, construire une base orthonormée selon le produit scalaire $\{\psi|\phi\}$ (par exemple en utilisant la procédure d'orthogonalisation de Gram-Schmidt). Nous avons que pour chaque $y \in H$

$$\begin{aligned}\{\Gamma(y)\psi|\Gamma(y)\phi\} &= \frac{1}{h}\sum_{x\in H}\langle\Gamma(x)\Gamma(y)\psi|\Gamma(x)\Gamma(y)\phi\rangle \\ &= \frac{1}{h}\sum_{x\in H}\langle\Gamma(xy)\psi|\Gamma(xy)\phi\rangle \\ &= \{\psi|\phi\}\,,\end{aligned} \tag{3.4}$$

où la dernière égalité suit du théorème du réarrangement. Cela veut dire que $\Gamma(y)$ ($y \in H$) est un opérateur unitaire selon le produit scalaire $\{\psi|\phi\}$. Nous pouvons construire explicitement la transformation unitaire S qui relie la représentation Γ à une représentation unitaire selon le produit scalaire ordinaire. Considérons la base initiale $\{\epsilon_i\}$ et la base d'arrivée définie par $\phi_i = S\epsilon_i$. Si

$$\xi = \sum_i \alpha_i\epsilon_i \tag{3.5}$$

et

$$\eta = \sum_i \beta_i\epsilon_i\,, \tag{3.6}$$

alors

$$\begin{aligned}\{S\xi|S\eta\} &= \sum_{ij}\alpha_i^*\beta_j\{S\epsilon_i|S\epsilon_j\}\\ &= \sum_{ij}\alpha_i^*\beta_j\{\phi_i|\phi_j\}\\ &= \sum_{i}\alpha_i^*\beta_i\\ &= \langle\xi|\eta\rangle\,. \end{aligned} \tag{3.7}$$

Il s'ensuit que

$$\begin{aligned}\langle S^{-1}\Gamma(x)S\psi|S^{-1}\Gamma(x)S\phi\rangle &= \{\Gamma(x)S\psi|\Gamma(x)S\phi\}\\ &= \{S\psi|S\phi\} = \langle\psi|\phi\rangle\,. \end{aligned} \tag{3.8}$$

Cela preuve que la représentation

$$\Gamma'(x) = S^{-1}\Gamma(x)S \tag{3.9}$$

est unitaire.

Une représentation Γ de dimension l peut être considérée comme un ensemble de transformations linéaires dans l'espace vectoriel $\mathbb{C}^l$ formé par les vecteurs à l composantes complexes. Si $\{\phi_i\}$ est une base orthonormée en $\mathbb{C}^l$, nous pouvons exprimer un vecteur ξ comme

$$\xi = \sum_{i=1}^{l}\alpha_i\phi_i\,. \tag{3.10}$$

Les opérateurs $\Gamma(x)$ appliqués aux vecteurs de base donnent

$$\Gamma(x)\phi_i = \sum_{j=1}^{l}\phi_j\Gamma_{ji}(x)\,, \tag{3.11}$$

où $\Gamma_{ji}(x)$ sont les composantes d'une matrice $l\times l$. Nous pouvons ainsi écrire le vecteur transformé comme

$$\xi' = \Gamma(x)\xi = \sum_{i=1}^{l}\alpha_i\Gamma(x)\phi_i = \sum_{j=1}^{l}\phi_j\sum_{i=1}^{l}\alpha_i\Gamma_{ji}(x)\,. \tag{3.12}$$

Les composantes de $\xi' = \sum_i \alpha'_i \phi_i$ sont

$$\alpha'_i = \sum_{j=1}^{l} \Gamma_{ij}(x)\alpha_j \,. \tag{3.13}$$

Soient $\Gamma^{(1)}, \Gamma^{(2)}, \ldots, \Gamma^{(n)}$ des représentations d'un groupe. Nous pouvons trouver une nouvelle représentation en construisant des matrices ayant la forme

$$\Gamma(x) = \begin{pmatrix} \Gamma^{(1)}(x) & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \Gamma^{(2)}(x) & 0 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & \Gamma^{(n)}(x) \end{pmatrix} . \tag{3.14}$$

Si les représentations $\Gamma^{(i)}$ ont respectivement dimensions l_i, alors la représentation Γ a dimension

$$l = \sum_{i=1}^{n} l_i \tag{3.15}$$

Nous indiquons symboliquement la représentation Γ par

$$\Gamma = \Gamma^{(1)} \oplus \Gamma^{(2)} \oplus \ldots \oplus \Gamma^{(n)} \,. \tag{3.16}$$

Certaines représentations parmi les $\Gamma^{(i)}$ peuvent être identiques. Si par exemple la représentation $\Gamma^{(i)}$ apparaît deux fois nous l'indiquons par $2\Gamma^{(i)}$. Il est donc clair qu'il n'y a pas de limite au nombre de représentations qui peuvent être construites. La structure de la représentation (3.14) est une structure par blocs, le i-ème bloc étant donné par la matrice relative à la représentation $\Gamma^{(i)}$. Il est très important de remarquer que pour la représentation Γ, l'homomorphisme avec le groupe H n'existe que si une telle structure en blocs est valable pour chaque élément x du groupe. Si maintenant nous effectuons une transformation unitaire

$$\Gamma'(x) = S^{-1}\Gamma(x)S \,, \tag{3.17}$$

où S est une matrice unitaire $l \times l$, les matrices $\Gamma'(x)$ n'auront plus en général un structure en blocs, tandis que la représentation Γ' est équivalente à la représentation Γ.

Si au contraire, donnée une représentation Γ, nous arrivons a trouver une transformation unitaire S telle que les matrices de la nouvelle représentation $\Gamma'(x) = S^{-1}\Gamma(x)S$ ont toutes la même structure en blocs, on dira que

nous avons réduit la représentation Γ en une somme de représentations. La possibilité d'effectuer une réduction d'une représentation est à la base de la théorie des représentations et de ses applications en physique. Nous allons donc discuter ce concept de manière un peu plus rigoureuse.

Soit $\{\phi_i\}$ une base orthonormée dans l'espace vectoriel relatif à une représentation Γ. Considérons le vecteur $\xi = \sum_{i=1}^{l} \alpha_i \phi_i$ et étudions l'effet de $\Gamma(x)$ sur ξ. Supposons de constater que, si $\alpha_i = 0$ pour $i \geq l_1 + 1$, alors l'application de $\Gamma(x)$ à ξ produit des vecteurs pour lequels une telle propriété reste valable, et cela pour tout x. Nous disons alors que le sous-espace généré par les vecteurs $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_{l_1}$ est invariant sous les transformations $\Gamma(x)$.

Imaginons maintenant d'avoir un groupe H et une représentation $\Gamma(x)$ dans un espace V_n à n dimensions. Supposons qu'il existe dans V_n un sous-espace propre M, de dimension $l < n$, invariant sous toutes les transformations $\Gamma(x)$. Soit $\{\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_l\}$ une base de M. L'invariance de M implique que

$$\Gamma(x)\phi_i = \sum_{j=1}^{l} \Gamma_{ji}(x)\phi_j \ , \ i = 1, 2, \ldots, l \, . \tag{3.18}$$

Nous pouvons construire une base pour l'espace vectoriel V_n, qui contient les vecteurs $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_l$ comme sous-ensemble. Une telle base contient les vecteurs $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_l$ et les $n-l$ vecteurs de base restants $\phi_{l+1}, \phi_{l+2}, \ldots, \phi_n$. Nous avons

$$\Gamma(x)\phi_i = \sum_{j=1}^{l} \Gamma_{ji}(x)\phi_j + \sum_{j=l+1}^{n} \Gamma_{ji}(x)\phi_j \ , \ i = l+1, l+2, \ldots, n \, . \tag{3.19}$$

Cela montre que, dans une telle base, les matrices de la représentation ont la forme

$$\Gamma(x) = \begin{pmatrix} P & Q \\ 0 & T \end{pmatrix} , \tag{3.20}$$

où P et T sont des matrices carrées de dimensions respectivement $l \times l$ et $(n-l) \times (n-l)$. Si un tel sous-espace invariant M peut être trouvée, nous disons que la représentation Γ est *réductible*. En d'autres mots, une représentation Γ définie dans un espace vectoriel V_n de dimension n est réductible s'il existe un sous-espace propre non vide de V_n qui est invariant sous toutes les transformations du groupe. Si un tel sous-espace n'existe pas, la représentation Γ est dite *irréductible*. Une représentation est dite *complètement réductible* si, pour chaque sous-espace propre non vide M invariant sous les

transformations du groupe, le complément orthogonal N de M est aussi invariant. Clairement, une représentation **unitaire** d'un groupe qui est réductible est automatiquement aussi complètement réductible. En effet, les transformations unitaires $\Gamma(x)$ conservent par définition l'orthogonalité. Puisque les sous-espaces ayants comme base $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_l$ et $\phi_{l+1}, \phi_{l+2}, \ldots, \phi_n$ sont orthogonaux, ils le seront aussi après application des transformations $\Gamma(x)$. Dans l'expression (3.20) donc le bloc Q est identiquement nul. Nous avons vu que pour les groupes finis, chaque représentation est équivalente à une représentation unitaire. Pour les groupes finis il ne faut donc pas distinguer entre les concepts de réductibilité et réductibilite complète. Par réductible nous indiquerons donc par la suite une représentation complètement réductible.

Nous développons maintenant des critères pour établir l'irréductibilité d'une représentation. Ces critères prennent la forme des deux *lemmes de Schur*.

Lemme de Schur 1. Une transformation qui commute avec toutes les transformation d'une représentation irréductible d'un groupe est une transformation constante, c'est à dire un multiple de l'identité.

Preuve: Soit H le groupe et x un de ses éléments. Soit $\Gamma(x)$ la transformation associée à x dans la représentation irréductible Γ. Soit M une transformation dans l'espace de définition de Γ. Nous devons montrer que, si

$$M\Gamma(x) = \Gamma(x)M \tag{3.21}$$

pour tout $x \in H$, alors M est un multiple de l'opérateur identité. Si $M = 0$ le lemme est démontré. Supposons que $M \neq 0$. Soit S l'espace vectoriel de définition de Γ. Si $\xi \in S$, l'ensemble $\{M\xi\}$ constitue un espace vectoriel que nous indiquons par $M(S)$. En général $M(S)$ est un sous-espace de S. De l'équation (3.21) nous déduisons que

$$M\Gamma(x)\xi = \Gamma(x)M\xi \tag{3.22}$$

pour chaque x. Donc $\Gamma(x)$ appliquée à $M\xi$ donne un élément de $M(S)$. Cela revient à dire que $M(S)$ est invariant sous Γ. Puisque Γ est irréductible, $M(S)$ ne peut pas être un sous-espace propre de S. D'ailleur, puisque $M \neq 0$, $M(S)$ ne peut pas non plus être l'ensemble $\{0\}$ contenant seulement le vecteur zéro. Il s'ensuit que $M(S) = S$. Ce résultat montre que l'espace des vecteurs ξ tels que $M\xi = 0$ ne contient que le vecteur zéro. Donc M n'est pas singulier. Soit λ_m une valeur propre de M et ϕ_m son vecteur propre correspondant. Définissons $M' = M - \lambda_m \mathbf{1}$. l'opérateur M' satisfait à la condition (3.21)

pour chaque x et, si $M' \neq 0$, alors $M'(S)$ est un sous-espace invariant de S sous Γ. Mais $M'(S)$ ne contient pas les vecteurs générés par ϕ_m. Cela impliquerait que Γ est réductible, ce qui contredit l'hypothèse initiale. Donc $M' = 0$, impliquant

$$M = \lambda_m \mathbf{1}\,, \tag{3.23}$$

ce qui prouve le lemme.

Lemme de Schur 2. Considérer un groupe H et deux représentations irréductibles non équivalentes $\Gamma^{(1)}$ et $\Gamma^{(2)}$, définies respectivement dans les espaces vectoriels S_1 et S_2 de dimension l_1 et l_2. Soit M une application linéaire de S_1 en S_2 qui satisfait à la propriété

$$M\Gamma^{(1)}(x) = \Gamma^{(2)}(x)M \tag{3.24}$$

pour chaque $x \in H$. Alors $M = 0$.

Preuve: Supposons que $M \neq 0$. En général l'image de M appliquée à S_1 est un sous-espace $M(S_1)$ de S_2. Si $\xi \in S_1$, alors

$$M\Gamma^{(1)}(x)\xi = \Gamma^{(2)}(x)M\xi \tag{3.25}$$

ce qui implique que $M(S_1)$ est un sous-espace invariant de S_2 sous $\Gamma^{(2)}$. Puisque $\Gamma^{(2)}$ est irréductible et $M \neq 0$, nous avons

$$M(S_1) = S_2\,. \tag{3.26}$$

Puisque la dimension de $M(S_1)$ est $\leq l_1$, nous déduisons que $l_2 \leq l_1$. Supposons pour l'instant que $\Gamma^{(1)}$ et $\Gamma^{(2)}$ soient unitaires. Prenons l'Hermitien conjugué des deux côtés de l'équation (3.24). Nous obtenons

$$\Gamma^{(1)}(x)M^\dagger = M^\dagger\Gamma^{(2)}(x)\,. \tag{3.27}$$

Par le même argument qu'avant, nous avons $M^\dagger(S_2) = S_1$ et $l_1 \leq l_2$. Mais alors $l_1 = l_2$ et M est non-singulier. Ceci impliquerait que $\Gamma^{(1)}$ et $\Gamma^{(2)}$ sont équivalentes, une contradiction par rapport à notre hypothèse initiale. Nous pouvons éliminer la contrainte sur l'unitarité de $\Gamma^{(1)}$ et $\Gamma^{(2)}$. Si ces représentations ne sont pas unitaires nous pouvons montrer que $\Gamma^{(1)\dagger}(x^{-1})$ $\Gamma^{(2)\dagger}(x^{-1})$ sont des représentations irréductibles. En effet, pour chaque $\Gamma(x)$ nous pouvons définir

$$D(x) = \Gamma^\dagger(x^{-1})\,. \tag{3.28}$$

La transformation ainsi définie est irréductible. $D^{(1)}(x)$ et $D^{(2)}(x)$ sont définies dans les espaces duals de $\Gamma^{(1)}$ et $\Gamma^{(2)}$. Elles sont des représentations puisque

$$\begin{aligned} D(x)D(y) &= \Gamma^\dagger(x^{-1})\Gamma^\dagger(y^{-1}) \\ &= (\Gamma(x^{-1})\Gamma(y^{-1}))^\dagger \\ &= (\Gamma(y^{-1}x^{-1}))^\dagger \\ &= \Gamma^\dagger((xy)^{-1}) \\ &= D(xy)\,. \end{aligned} \tag{3.29}$$

L'équation (3.24) nous donne

$$D^{(1)}(x)M^\dagger = M^\dagger D^{(2)}(x) \tag{3.30}$$

pour chaque $x \in H$ et la démonstration suit comme avant.

Corollaire. Condition nécessaire et suffisante pour que une représentation unitaire Γ d'un groupe H soit irréductible est que la toutes les transformations M telles que, pour chaque $x \in H$,

$$M\Gamma(x) = \Gamma(x)M\,, \tag{3.31}$$

soient des multiples de l'identité.

Preuve: Comme conséquence du premier lemme de Schur, la condition est nécessaire. Pour prouver qu'elle est aussi suffisante nous supposons, par absurde, que toutes les transformations linéaires M satisfaisant la condition (3.31) sont des multiples de l'identité mais que Γ est réductible. Soit S l'espace vectoriel de définition de Γ et S_1 un sous-espace propre, non vide, invariant sous $\Gamma(x)$ pour tout x. Puisque Γ est réductible, nous sommes surs qu'un tel sous-espace existe. En plus, puisque Γ est unitaire, le complément orthogonal de S_1, que nous indiquons par S_2, est aussi invariant. Considérons maintenant un opérateur linéaire M tel que

$$M\xi_1 = m_1\xi_1 \tag{3.32}$$

et

$$M\xi_2 = m_2\xi_2\,, \tag{3.33}$$

où $\xi_1 \in S_1$, $\xi_2 \in S_2$, et $m_1 \neq m_2$. Clairement, M commute avec toutes les $\Gamma(x)$ mais il n'est pas un multiple de l'identité. Ceci entraine une contradiction à l'hypothèse de départ. Il s'ensuit que Γ doit être irréductible.

Grand théorème d'orthogonalité. Soient $\Gamma^{(1)}$ et $\Gamma^{(2)}$ deux représentations unitaires irréductibles non équivalentes d'un groupe fini H d'ordre h. Nous avons

$$\text{(i)} \qquad \sum_{x\in H} \Gamma^{(1)*}_{ij}(x)\Gamma^{(2)}_{kl}(x) = 0\,, \tag{3.34}$$

$$\text{(ii)} \qquad \sum_{x\in H} \Gamma^{(1)*}_{ij}(x)\Gamma^{(1)}_{kl}(x) = \frac{h}{l_1}\delta_{ik}\delta_{jl}\,, \tag{3.35}$$

où l_1 et l_2 sont respectivement les dimensions des représentations $\Gamma^{(1)}$ et $\Gamma^{(2)}$.

Preuve: (i) Considérez une matrice arbitraire X ayant l_1 lignes et l_2 colomnes. Construisez

$$M = \sum_{x\in H} \Gamma^{(1)}(x^{-1})X\Gamma^{(2)}(x)\,. \tag{3.36}$$

Pour chaque élément y de H nous avons

$$\begin{aligned} M\Gamma^{(2)}(y) &= \sum_{x\in H} \Gamma^{(1)}(y)\Gamma^{(1)}(y^{-1})\Gamma^{(1)}(x^{-1})X\Gamma^{(2)}(x)\Gamma^{(2)}(y) \\ &= \Gamma^{(1)}(y)\sum_{x\in H} \Gamma^{(1)}((xy)^{-1})X\Gamma^{(2)}(xy) \\ &= \Gamma^{(1)}(y)M\,, \end{aligned} \tag{3.37}$$

où dans la dernière égalité nous avons utilisé le théorème du réarrangement. Selon le deuxième lemme de Schur, $M = 0$ et ceci est valable pour une matrice X arbitraire. En explicitant les indices, nous pouvons reécrire $M = 0$ comme

$$\sum_{x\in H}\sum_{i,k} \Gamma^{(1)*}_{ij}(x)X_{ik}\Gamma^{(2)}_{kl}(x) = 0\,. \tag{3.38}$$

En posant $X_{ik} = 0$ pour tout i et k sauf pour une paire i,k donnée, pour laquelle il faut poser $X_{ik} = 1$, nous obtenons (3.34).

(ii) Si la représentation $\Gamma^{(2)}$ est identique à $\Gamma^{(1)}$, par la même procédure qu'avant nous pouvons conclure que l'opération linéaire

$$M = \sum_{x\in H} \Gamma^{(1)}(x^{-1})X\Gamma^{(1)}(x) \tag{3.39}$$

commute avec tout $\Gamma^{(1)}(y)$ ($y \in H$). Selon le premier lemme de Schur, la matrice M est un multiple de l'identité

$$M = c(X)\mathbf{1}\,, \tag{3.40}$$

où $c(X)$ est un nombre qui dépend du choix de X. Nous allons maintenant dériver $c(X)$. Pour cela, nous écrivons M en explicitant ses indices. Nous avons

$$\sum_{x\in H}\sum_{i,k}\Gamma^{(1)}_{ji}(x^{-1})X_{ik}\Gamma^{(1)}_{kl}(x) = c(X)\delta_{jl}\,. \tag{3.41}$$

Nous posons maintenant $l = j$ et sommons sur j

$$\sum_{x\in H}\sum_{i,k}X_{ik}\sum_{j}\Gamma^{(1)}_{kj}(x)\Gamma^{(1)}_{ji}(x^{-1}) = l_1 c(X)\,. \tag{3.42}$$

Puisque $\Gamma^{(1)}(x)\Gamma^{(1)}(x^{-1})$ est la matrice identité, nous obtenons

$$c(X) = \frac{h}{l_1}\mathrm{Tr}(X)\,. \tag{3.43}$$

Choisissons X comme avant, tel que $X_{ik} = 1$ pour une paire donnée i,k et $X_{ik} = 0$ pour les autres. Nous obtenons exactement la relation (3.35). Nous pouvons combiner (i) et (ii) de la façon suivante

$$\sum_{x\in H}\left(\frac{l_i}{h}\right)^{\frac{1}{2}}\Gamma^{(i)*}_{kl}(x)\left(\frac{l_j}{h}\right)^{\frac{1}{2}}\Gamma^{(j)*}_{mn}(x) = \delta_{ij}\delta_{km}\delta_{ln}\,, \tag{3.44}$$

ou

$$\sum_{x\in H}\Gamma^{(i)*}_{kl}(x)\Gamma^{(j)*}_{mn}(x) = \frac{h}{l_i}\delta_{ij}\delta_{km}\delta_{ln}\,, \tag{3.45}$$

où $\Gamma^{(i)}$ et $\Gamma^{(j)}$ sont deux représentations irréductibles unitaires quelconques de H; $\delta_{ij} = 0$ si $\Gamma^{(i)}$ et $\Gamma^{(j)}$ ne sont pas équivalentes tandis que $\delta_{ij} = 1$ si $\Gamma^{(i)} \equiv \Gamma^{(j)}$

Nous pouvons voir l'équation (3.44) comme l'expression de l'orthogonalité d'un ensemble de vecteurs orthonormé dont les composantes sont

$$\left(\frac{l_i}{h}\right)^{\frac{1}{2}}\Gamma^{(i)}_{kl}(x)\,. \tag{3.46}$$

Remarquez que l'indice des composantes de ce vecteur est le x qui parcourt les éléments du groupe H. Ces vecteurs sont donc définis dans un espace vectoriel de dimension h que nous indiquons par $\mathbb{C}^h$. Puisque il ne peut pas y avoir plus que h vecteurs mutuellement orthogonaux en $\mathbb{C}^h$, le nombre de représentations irréductibles non-équivalentes est fini et ne peut pas excéder h. Soit N_Γ le nombre de représentations irréductibles non-équivalentes. Si la i-ème représentation irréductible a dimension l_i, alors le nombre de tous ces vecteurs orthonormés est

$$l_1^2 + l_2^2 + \ldots + l_{N_\Gamma}^2 \leq h\,. \tag{3.47}$$

Par la suite nous allons demontrer que dans tous les cas nous avons $l_1^2 + l_2^2 + \ldots + l_{N_\Gamma}^2 = h$ (Théorème de Burnside).

3.2 Caractères

Définition. Considérer une représentation Γ d'un groupe H. La trace des matrices $\Gamma(x)$ est indiquée par

$$\chi(x) = \sum_i \Gamma_{ii}(x)\,. \tag{3.48}$$

Dans une représentation Γ, tous les éléments qui sont dans la même classe ont la même trace. En effet, soit y un élément du groupe H équivalent à l'élément x, c'est à dire qu'il existe un élément $u \in H$ tel que

$$y = u^{-1}xu\,. \tag{3.49}$$

Alors

$$\Gamma(y) = \Gamma(u^{-1}xu) = \Gamma(u^{-1})\Gamma(x)\Gamma(u)\,, \tag{3.50}$$

et

$$\begin{aligned} \chi(y) &= \mathrm{Tr}[\Gamma(u^{-1})\Gamma(x)\Gamma(u)] \\ &= \mathrm{Tr}[\Gamma(x)\Gamma(u)\Gamma(u^{-1})] \\ &= \mathrm{Tr}[\Gamma(x)] = \chi(x)\,, \end{aligned} \tag{3.51}$$

où nous avons exploité la propriété que la trace d'un produit de matrices est invariante sous une permutation cyclique des matrices dans le produit. L'ensemble $\{\chi(x)\}$ des traces pour tous les x est appelé le *caractère* de la représentation Γ. Il est évident que deux représentations équivalentes Γ et Γ' ont le même caractère, puisque si

$$\Gamma'(x) = S^{-1}\Gamma(x)S\,, \tag{3.52}$$

alors

$$\begin{aligned} \chi'(x) &= \mathrm{Tr}[\Gamma'(x)] \\ &= \mathrm{Tr}[S^{-1}\Gamma(x)S] \\ &= \mathrm{Tr}[\Gamma(x)SS^{-1}] = \chi(x)\,. \end{aligned} \tag{3.53}$$

De l'équation (3.45), si on pose $l = k$ et $n = m$ et on somme sur k et m $(k = 1, 2, \ldots, l_i)$, $(m = 1, 2, \ldots, l_j)$, nous avons

$$\sum_{x\in H} \chi^{(i)*}(x)\chi^{(j)}(x) = h\delta_{ij}\,. \tag{3.54}$$

Si nous indiquons les classes de H par C_μ ($\mu = 1, 2, \ldots, N_C$) et le nombre d'éléments dans C_μ par n_μ, l'équation (3.54) peu être reécrite dans la forme

$$\sum_{\mu=1}^{N_C} n_\mu \chi^{(i)*}(C_\mu)\chi^{(j)}(C_\mu) = h\delta_{ij}\,. \tag{3.55}$$

Dans cette équation nous avons indiqué par $\chi^{(i)}(c_\mu)$ la trace d'un élément de la classe C_μ dans la représentation irréductible $\Gamma^{(i)}$.

L'équation (3.55) représente le **petit théorème d'orthogonalité**. Elle peut être interprétée comme une relation d'orthogonalité entre les N_Γ vecteurs ayant pour composantes

$$(n_\mu/h)^{1/2}\chi^{(i)}(C_\mu) \tag{3.56}$$

dans un espace vectoriel de dimension N_C. Puisque il ne peut pas y avoir plus que N_C vecteurs linéairement indépendants dans un tel éspace, nous pouvons établir l'inégalité suivante

$$N_\Gamma \leq N_C\,. \tag{3.57}$$

Nous allons voire par la suite que c'est toujours l'égalité qui est vérifiée.

Théorème. Une condition nécessaire et suffisante pour que deux représentations irréductibles d'un groupe fini soient équivalentes est que leurs caractères soient identiques.

Preuve:

(i) Nous avons déjà prouvé que la condition est nécessaire.

(ii) La condition est suffisante puisque, si $\chi^{(1)}(x) = \chi^{(2)}(x)$ pour tout x, mais $\Gamma^{(1)}$ n'est pas équivalente à $\Gamma^{(2)}$, alors par le grand théorème d'orthogonalité (3.45) nous avons

$$\sum_{x\in H} |\chi^{(1)}(x)|^2 = 0$$

qui représente une contradiction, puisque au moins la classe contenant l'identité a un caractère qui est différent de zéro.

Grace aux caractères, nous avons maintenant un outil pour réduire une représentation arbitraire d'un groupe fini H. Considérer une représentation Γ. Nous pouvons écrire formellement sa réduction en représentations irréductibles comme suit

$$\Gamma = b_1\Gamma^{(1)} \oplus b_2\Gamma^{(2)} \oplus \ldots \oplus b_{N_\Gamma}\Gamma^{(N_\Gamma)}\,, \quad b_i = 0, 1, 2, \ldots\,. \tag{3.58}$$

Il est clair que, pour tout $x \in H$,

$$\chi(x) = \sum_{i=1}^{N_\Gamma} b_i \chi^{(i)}(x)\,, \tag{3.59}$$

ou

$$\chi(C_\mu) = \sum_{i=1}^{N_\Gamma} b_i \chi^{(i)}(C_\mu)\,. \tag{3.60}$$

Multiplions les deux côtés de l'équation (3.60) par $n_\mu \chi^{(j)*}(C_\mu)$ et sommons sur μ. Grace au petit théorème d'orthogonalité (3.55) nous obtenons

$$b_i = \frac{1}{h} \sum_{\mu=1}^{N_C} n_\mu \chi^{(i)^*}(C_\mu)\chi(C_\mu)\,. \tag{3.61}$$

L'équation (3.61) es la formule de base pour réduire une représentation arbitraire en représentations irréductibles.

De l'équation (3.61) nous obtenons

$$\sum_{\mu=1}^{N_C} n_\mu |\chi(C_\mu)|^2 = \sum_{i,j} b_i b_j \sum_{\mu=1}^{N_C} n_\mu \chi^{(i)*}(C_\mu)\chi^{(j)}(C_\mu) = h \sum_{i=1}^{N_\Gamma} b_i^2\,. \tag{3.62}$$

Cette équation permet de prouver le théorème suivant.

Théorème. Une condition nécessaire et suffisante pour qu'une représentation Γ, ayant pour caractère $\chi(C_\mu)$, soit irréductible est que

$$\sum_{\mu=1}^{N_C} n_\mu |\chi(C_\mu)|^2 = h\,. \tag{3.63}$$

Preuve: En effet, si la représentation Γ est irréductible, alors seulement un des b_i dans l'équation (3.62) est égal à 1, tous les autres étant nuls. La condition est donc nécessaire. D'autre part, si l'équation (3.63) est valable, alors nous pouvons déduire de l'équation (3.62) que

$$\sum_{i=1}^{N_\Gamma} b_i^2 = 1 \quad b_i = 0, 1, 2, \ldots\,. \tag{3.64}$$

cette relation ne peut être satisfaite que dans le cas où un des b_i est égal à 1, tous les autres étant nuls.

Dans le rappel de théorie des groupes nous avons vu comment écrire une table de multiplication d'un groupe fini. En particulier, nous avons écrit la table de multiplication en mettant le produit xy dans la case qui correspond à l'intersection entre la ligne indiquée par x et la colomne indiquée par y. Les éléments du groupe apparaissent dans le même ordre dans l'indication des lignes et des colomnes. Nous pouvons utiliser une prescription différente qui consiste à indiquer les lignes par $x_1 = e$, $x_2, \ldots, x_h$ et les colomnes par $x_1^{-1} = e$, $x_2^{-1}, \ldots, x_h^{-1}$. Il est clair que la sequence des inverses $\{x_i^{-1}\}$ contient tous les éléments du groupe dans un ordre différent. La table de multiplication que nous obtenons en utilisant cette prescription est

H	$x_1^{-1} = e$	x_2^{-1}	x_3^{-1}	$\ldots$	x_h^{-1}
$x_1 = e$	e	$x_1 x_2^{-1}$	$x_1 x_3^{-1}$	$\ldots$	$x_1 x_h^{-1}$
x_2	x_2	$x_2 x_2^{-1} = e$	$x_2 x_3^{-1}$	$\ldots$	$x_2 x_h^{-1}$
x_3	x_3	$x_3 x_2^{-1}$	$x_3 x_3^{-1} = e$	$\ldots$	$x_3 x_h^{-1}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
x_h	x_h	$x_h x_2^{-1}$	$x_h x_3^{-1}$	$\ldots$	$x_h x_h^{-1} = e$

Nous construisons maintenant un ensemble de matrices $\{\Gamma(x_i)\}$, une pour chaque élément x_i du groupe, de la façon suivante: la matrice $\Gamma(x_i)$ est de dimensions $h \times h$ et consiste de zéros partout sauf aux positions où, dans la table de multiplication que nous venons d'écrire, se trouve l'élément x_i. L'ensemble des matrices obtenues de cette façon est une représentation du groupe H comme nous le verrons par la suite. Elle est appelée la *représentation régulière* du groupe et est indiquée par $\Gamma^{(R)}$. Nous pouvons résumer la définition de cette représentation comme suit:

$$\Gamma^{(R)}_{ij}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x_i x_j^{-1} = x \\ 0 & \text{autrement.} \end{cases} \tag{3.65}$$

Nous voyons tout de suite que $\Gamma^{(R)}(e)$ est la matrice identité en dimension h. Montrons maintenant que $\Gamma^{(R)}$ est une représentation. En effet,

$$[\Gamma^{(R)}(x)\Gamma^{(R)}(y)]_{ij} = \sum_k \Gamma^{(R)}_{ik}(x)\Gamma^{(R)}_{kj}(y)\,. \tag{3.66}$$

Pour un i et j donné, le terme en k dans cette somme est différent de zéro si et seulement si

$$x_i x_k^{-1} = x \tag{3.67}$$

et

$$x_k x_j^{-1} = y\,. \tag{3.68}$$

Chacune de ces deux conditions détermine x_k de manière unique. Pour que les deux conditions soient satisfaites en même temps, il faut nécessairement avoir $x^{-1}x_i = yx_j$, c'est à dire,

$$x_i x_j^{-1} = xy\,. \tag{3.69}$$

Dans ce cas, la somme à droite de l'équation (3.66) contient un terme pour lequel $\Gamma^{(R)}_{ik}(x)\Gamma^{(R)}_{kj}(y) = 1$, les autres termes de la somme étant nuls. Si par contre la condition (3.69) n'est pas vérifiée, alors les termes $\Gamma^{(R)}_{ik}(x)\Gamma^{(R)}_{kj}(y)$ dans la somme (3.66) sont identiquement nuls. En résumant,

$$[\Gamma^{(R)}(x)\Gamma^{(R)}(y)]_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } x_i x_j^{-1} = xy \\ 0 & \text{autrement.} \end{cases} \tag{3.70}$$

Mais cela est exactement la définition de la matrice $\Gamma^{(R)}(xy)$. Nous avons donc

$$[\Gamma^{(R)}(x)\Gamma^{(R)}(y)]_{ij} = \Gamma^{(R)}_{ij}(xy)\,, \tag{3.71}$$

ce qui preuve que $\Gamma^{(R)}$ est une représentation du groupe H.

Théorème. La représentation régulière d'un groupe fini H contient chaque représentation irréductible du groupe autant de fois que sa dimension, c'est à dire:

$$\Gamma^{(R)} = l_1\Gamma^{(1)} \oplus l_2\Gamma^{(2)} \oplus \ldots \oplus l_{N_\Gamma}\Gamma^{(N_\Gamma)}\,. \tag{3.72}$$

Preuve: Soit

$$\Gamma^{(R)} = b_1\Gamma^{(1)} \oplus b_2\Gamma^{(2)} \oplus \ldots \oplus b_{N_\Gamma}\Gamma^{(N_\Gamma)}\,. \tag{3.73}$$

L'équation (3.61) pour la réduction d'une représentation à l'aide de ses caractères nous donne

$$\begin{aligned} b_i &= \frac{1}{h}\sum_{\mu=1}^{N_C} n_\mu \chi^{(i)^*}(C_\mu)\chi^{(R)}(C_\mu) \\ &= \frac{1}{h}\chi^{(i)}(e)h = l_i\,, \end{aligned} \tag{3.74}$$

où nous avons utilisé la propriété évidente que tous les $\chi^{(R)}(C_\mu)$ sont nuls sauf $\chi^{(R)}(e) = h$. En utilisant (3.60), nous avons

$$\chi^{(R)}(C_\mu) = \sum_{i=1}^{N_\Gamma} l_i \chi^{(i)}(C_\mu)\,. \tag{3.75}$$

Cette relation nous est très utile dans le cas particulier où $C_\mu = \{e\}$. Dans ce cas, en effet, nous avons $\chi^{(i)}(e) = l_i$ et

$$\sum_{i=1}^{N_\Gamma} l_i^2 = h\,. \tag{3.76}$$

Cela preuve que, dans la relation (3.47), l'égalité est toujours satisfaite.

Théorème. Soit Γ une représentation irréductible. La somme des matrices $\Gamma(x)$ pour tous les x appartenant à une classe d'équivalence est un multiple de la matrice unité.

Preuve: Soient $\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ les éléments d'une classe d'un groupe H. Considérons la matrice

$$M = \sum_{i=1}^{n} \Gamma(x_i)\,. \tag{3.77}$$

Nous avons, par définition de classe de conjugaison,

$$\Gamma(y^{-1}) M \Gamma(y) = \sum_{i=1}^{n} \Gamma(y^{-1} x_i y) = M\,, \tag{3.78}$$

où nous avons utilisé le théorème de réarrangement d'une classe. Nous avons donc

$$M\Gamma(y) = \Gamma(y) M \tag{3.79}$$

pour chaque $y \in H$. Par le premier lemme de Schur, M est un multiple de l'identité. Nous remarquons que ce résultat est valable aussi bien pour des groupes infinis, pourvu que n reste fini.

Pour chaque représentation irréductible $\Gamma^{(i)}$ et pour chaque classe C_μ d'un groupe fini H, nous pouvons construire la matrice

$$M_\mu^{(i)} = \sum_{k=1}^{n_\mu} \Gamma^{(i)}(x_k^{(\mu)}) = m_\mu^{(i)} \mathbf{1}^{(i)}\,, \tag{3.80}$$

où $x_k^{(\mu)}$ est un élément de la classe C_μ ($k = 1, 2, \ldots, n_\mu$), $m_\mu^{(i)}$ est un nombre et $\mathbf{1}^{(i)}$ est la matrice unité qui agit sur l'espace à l_i dimensions de la représentation $\Gamma^{(i)}$. Parfois, les matrices $M_\mu^{(i)}$ sont appelées *caractères de Dirac*. Prenons la trace des deux côtés de l'équation (3.80). Nous obtenons

$$n_\mu \chi^{(i)}(C_\mu) = l_i m_\mu^{(i)} \,. \tag{3.81}$$

Le produit entre deux matrices $M_\mu^{(i)}$ et $M_\nu^{(i)}$, de la même représentation mais de classes différentes C_μ et C_ν, donne

$$M_\mu^{(i)} M_\nu^{(i)} = \sum_{k=1}^{n_\mu} \sum_{l=1}^{n_\nu} \Gamma^{(i)}(x_k^{(\mu)} x_l^{(\nu)}) \,. \tag{3.82}$$

La collection $[x_k^{(\mu)} x_l^{(\nu)}]$ (voir rappel de théorie des groupes, Chapitre 2) contient tous les produits d'un élément de la classe C_μ avec un élément de la classe C_ν (avec les éléments répétés). Dans le Chapitre 2 ous avons indiqué cette collection par $C_\mu \cdot C_\nu$. Grace à la formule (2.54) dérivée dans le chapitre précédant, nous pouvons déduire

$$M_\mu^{(i)} M_\nu^{(i)} = \sum_{\lambda=1}^{N_C} n_{\mu\nu\lambda} M_\lambda^{(i)} \,, \tag{3.83}$$

où les nombres entiers non négatifs $n_{\mu\nu\lambda}$ indiquent le nombre de fois que la classe C_λ apparait dans la colléction $C_\mu \cdot C_\nu$. Nous pouvons maintenant utiliser l'équation (3.80) pour obtenir

$$m_\mu^{(i)} m_\nu^{(i)} \mathbf{1}^{(i)} = \sum_{\lambda=1}^{N_C} n_{\mu\nu\lambda} m_\lambda^{(i)} \mathbf{1}^{(i)} \,. \tag{3.84}$$

L'équation (3.81) nous permet alors d'écrire

$$n_\mu n_\nu \chi^{(i)}(C_\mu) \chi^{(i)}(C_\nu) = l_i \sum_{\lambda=1}^{N_C} n_{\mu\nu\lambda} n_\lambda \chi^{(i)}(C_\lambda) \,, \tag{3.85}$$

où les coéfficients $n_{\mu\nu\lambda}$ sont les mêmes qui définissent le développement du produit entre classes (2.54). Cette relation est le résultat le plus important de ce chapitre, puisque elle va nous permettre de dériver les caractères de toutes les représentations irréductibles d'un groupe fini.

Nous pouvons aussi définir le caractère de Dirac d'une représentation Γ quelconque

$$M_\mu = \sum_{k=1}^{n_\mu} \Gamma(x_k^{(\mu)}) \,, \tag{3.86}$$

où $x_k^{(\mu)}$ est un élément de la classe C_μ ($k = 1, 2, \ldots, n_\mu$). Considérons maintenant la transformation S qui réduit la représentation Γ en représentations irréductibles. Les matrices $\Gamma'(x) = S^{-1}\Gamma(x)S$ auront donc une structure en blocs (3.14), chaque bloc étant la matrice d'une représentation irréductible $\Gamma^{(i)}$ du groupe. Ecrivons la réduction de Γ comme suit

$$\Gamma = \Gamma^{(i_1)} \oplus \Gamma^{(i_2)} \oplus \ldots \oplus \Gamma^{(i_n)} \tag{3.87}$$

où n est le nombre total de représentations irréductibles qui interviennent dans la réduction de Γ. Remarquez que les indices i_j peuvent être égaux. Par exemple, si $i_1 = i_2 = i_3 = 1$, cela veut dire que la représentation $\Gamma^{(1)}$ est contenue trois fois dans la réduction de Γ. Puisque les matrices M_μ sont des sommes de matrices $\Gamma(x)$, dans la base qui réduit la représentation Γ les nouvelle matrices $M'_\mu = S^{-1}M_\mu S$ auront aussi une structure en blocs. De plus, nous venons de montrer que dans chaque sous-espace relatif à une représentation irréductible, le bloc correspondant de la matrice M'_μ doit être un multiple de l'identité. Nous obtenons ainsi une matrice de la forme

$$M'_\mu = \begin{pmatrix} m_\mu^{(i_1)}\mathbf{1}^{(i_1)} & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & m_\mu^{(i_2)}\mathbf{1}^{(i_2)} & 0 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & m_\mu^{(i_n)}\mathbf{1}^{(i_n)} \end{pmatrix} , \tag{3.88}$$

où $m_\mu^{(i_j)}$ sont des nombres complexes, $\mathbf{1}^{(i_j)}$ des matrices identité dans chaque sous-espace correspondant à une représentation irréductible du groupe. Il est clair donc que la transformation $M'_\mu = S^{-1}M_\mu S$ diagonalise simultanément les matrices M_μ.

Ce résultat sera très important pour les applications de la théorie des représentations à la physique. En effet, puisque pour deux classes $C_\mu \cdot C_\nu = C_\nu \cdot C_\mu$, nous avons que les matrices M_μ sont des opérateurs qui commutent entre eux. Si nous étudions le groupe des symétries d'un système en mécanique quantique, par exemple, alors les caractères de Dirac dans l'espace d'Hilbert

des fonctions d'onde du système sont des observables qui peuvent être diagonalisé simultanément à l'Hamiltonien. Des tels opérateurs représentent des quantités physiques conservées à l'intérieur de chaque sous-espace invariant sous les opérations du groupe de symétrie. La théorie des représentations nous donne donc un outils pour trouver ces observables à partir des opérations de symétrie.

Nous allons maintenant démontrer un autre théorème d'orthogonalité fondamentale concernant les caractères.

Théorème d'orthogonalité par colonnes. Les vecteurs de dimension N_Γ (le nombre de représentations irréductibles d'un groupe H) donnés par

$$(n_\mu/h)^{1/2}\chi^{(i)}(C_\mu) \;\; ; \;\; i = 1, 2, \ldots, N_\Gamma \;\; , \;\; \mu = 1, 2, \ldots, N_C \,, \tag{3.89}$$

sont orthonormés, c'est à dire,

$$\sum_{i=1}^{N_\Gamma} \chi^{(i)*}(C_\mu)\chi^{(i)}(C_\nu) = \frac{h}{n_\mu}\delta_{\mu\nu} \tag{3.90}$$

où $\delta_{\mu\nu}$ est la delta de Kroeneker qui vaut 1 si les classes C_μ et C_ν coïncident, et zéro autrement.

Avant de démontrer le théorème, considérons la collection $C_\mu \cdot C_\nu$. Cet ensemble contient l'élément neutre e si et seulement si $x \in C_\mu$ existe tel que $x^{-1} \in C_\nu$. Si cela est vérifié, alors pour tous les autres éléments y de la classe C_μ l'élément inverse y^{-1} est contenu dans la classe C_ν. En effet, pour $y \in C_\mu$ il existe un élément $u \in H$ tel que $y = u^{-1}xu$. Mais alors $y^{-1} = u^{-1}x^{-1}u \in C_\nu$. Il s'ensuit que la collection $C_\mu \cdot C_\nu$ contient l'élément neutre e du groupe H si et seulement si les classes C_μ et C_ν sont composées d'éléments réciproquement inverses. Dans ce cas, le nombre de fois que l'élément e - et donc la classe $C_1 = \{e\}$ - est contenu dans $C_\mu \cdot C_\nu$ est $n_{\mu\nu 1} = n_\mu$, le nombre d'éléments dans la classe C_μ. Nous indiquons la classe qui contient les éléments inverses des éléments de la classe C_μ par $C_{\mu'}$. Nous pouvons résumer la propriété qui vient d'être prouvée par la notation

$$n_{\mu\nu 1} = n_\mu \delta_{\mu'\nu} \,. \tag{3.91}$$

Remarquez que les classes C_μ et $C_{\mu'}$ contiennent le même nombre d'éléments, c'est à dire $n_{\mu'} = n_\mu$. Dans certains cas nous avons que les classes C_μ et $C_{\mu'}$ sont en fait la même classe. Nous verrons par la suite, par exemple, que c'est le cas pour la classe indiquée par $8C_3$ du groupe du tétraèdrique T_d. Par

contre, les mêmes rotations occupent deux classes différentes, $4C_3$ et $4C_3^2$, dans le cas du groupe T qui, par rapport à T_d, ne contient pas l'inversion spatiale.

Il est utile à ce point de souligner encore une propriété importante des caractères. Puisque une représentation d'un groupe fini est toujours équivalente à une représentation unitaire, et puisque les caractères de deux représentations équivalentes sont les mêmes, nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} \chi^{(i)}(C_{\mu'}) &= \mathrm{Tr}(\Gamma^{(i)}(x^{-1})) \\ &= \mathrm{Tr}(\Gamma^{(i)\dagger}(x)) \\ &= \chi^{(i)*}(C_\mu)\,. \end{aligned} \tag{3.92}$$

Nous pouvons aussi déduire que, si $C_{\mu'} \equiv C_\mu$, alors le caractère pour cette classe doit être réel, puisque on a $\chi^{(i)}(C_\mu) = \chi^{(i)*}(C_\mu)$.

Preuve du théorème d'orthogonalité par colonnes. Nous sommes maintenant en mesure de prouver le théorème d'orthogonalité par colonnes. Considérons l'équation (3.85) et effectuons une somme sur toutes les représentations irréductibles du groupe H. Nous avons

$$\sum_{i=1}^{N_\Gamma} n_{\mu'} n_\nu \chi^{(i)}(C_{\mu'})\chi^{(i)}(C_\nu) = \sum_{\lambda=1}^{N_C} n_{\mu'\nu\lambda} n_\lambda \sum_{i=1}^{N_\Gamma} l_i \chi^{(i)}(C_\lambda)\,. \tag{3.93}$$

Nous avons vu que

$$\sum_{i=1}^{N_\Gamma} l_i \chi^{(i)}(C_\lambda) \tag{3.94}$$

n'est rien d'autre que la trace de la représentation régulière d'un élément de la classe C_λ. Il s'ensuit que cette quantité est nulle pour tout C_λ sauf pour $C_1 = \{e\}$, pour laquelle elle vaut

$$\sum_{i=1}^{N_\Gamma} l_i \chi^{(i)}(C_1) = \sum_{i=1}^{N_\Gamma} l_i^2 = h\,. \tag{3.95}$$

Donc

$$\sum_{i=1}^{N_\Gamma} n_{\mu'} n_\nu \chi^{(i)}(C_{\mu'})\chi^{(i)}(C_\nu) = n_{\mu'\nu 1} h\,. \tag{3.96}$$

En utilisant les relations (3.91) et (3.92), et la propriété $n_{\mu'} = n_\mu$, nous obtenons l'équation (3.90) et le théorème est ainsi prouvé.

Puisque l'ensemble des vecteurs à N_Γ composantes $(n_\mu/h)^{1/2}\chi^{(i)}(C_\mu)$ $(i = 1, 2, \ldots, N_\Gamma)$ est orthonormé, il faut nécessairement que

$$N_\Gamma \leq N_C \,. \tag{3.97}$$

Mais le petit théorème d'orthogonalité (qui essentiellement dit que les caractères des représentations irréductibles sont orthonormé par lignes) nous avait permis d'établir l'inégalité dans le sens invers (3.57). Nous avons donc démontré que

$$N_\Gamma = N_C \,. \tag{3.98}$$

Les propriétés des caractères que nous avons démontrées, nous permettent de construir, pour chaque groupe fini H, la table des caractères de la façon suivante.

H	$C_1 = \{e\}$	C_2	C_3	$\ldots$	C_{N_Γ}
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1	$\ldots$	1
$\Gamma^{(2)}$	l_2	$\chi^{(2)}(C_2)$	$\chi^{(2)}(C_3)$	$\ldots$	$\chi^{(2)}(C_{N_\Gamma})$
$\Gamma^{(3)}$	l_3	$\chi^{(3)}(C_2)$	$\chi^{(3)}(C_3)$	$\ldots$	$\chi^{(3)}(C_{N_\Gamma})$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
$\Gamma^{(N_\Gamma)}$	l_{N_Γ}	$\chi^{(N_\Gamma)}(C_2)$	$\chi^{(N_\Gamma)}(C_3)$	$\ldots$	$\chi^{(N_\Gamma)}(C_{N_\Gamma})$

Dans cette table des caractères, chaque ligne contient les caractères d'une représentation irréductible et chaque colonne une classe de conjugaison du groupe. La première ligne contient le caractère de la représentation irréductible idéntité, pour laquelle $\Gamma^{(1)}(x) = 1$ et donc $\chi^{(1)}(x) = 1$ pour chaque élément x de H. La première colonne contient le caractère pour la classe $C_1 = \{e\}$ de chaque représentation irréductible. Nous avons vu que la représentation $\Gamma(e)$ de l'élément neutre du groupe est toujours l'identité dans l'espace de définition de la représentation. Le caractère est par conséquent égal à la dimension de l'espace. Pour les représentations irréductibles $\Gamma^{(i)}$ nous avons indiqué les dimensions des espaces de définition par l_i. Puisque $N_C = N_\Gamma$, la table des caractères est carrée.

La table des caractères peut être en général déduite à partir de l'équation (3.85). Cette équation défini un algèbre des caractères à partir de l'algèbre des classes. Pou déterminer les caractères il faut donc procéder comme suit

(i) A partir de la table de multiplication du groupe H déduire les classes de conjugaison C_μ $(\mu = 1, 2, \ldots, N_C)$.

(ii) Construir toutes les possibles multiplications $C_\mu \cdot C_\nu$ de deux classes (en gardant les éléments répétés) et déterminer ainsi les nombres $n_{\mu\nu\lambda}$ qui apparaissent dans le développement (2.54)

$$C_\mu \cdot C_\nu = \sum_{\lambda=1}^{N_C} n_{\mu\nu\lambda} C_\lambda \, .$$

(iii) Une fois déterminés les $n_{\mu\nu\lambda}$, à l'aide de l'équation (3.85), déterminer pour chaque valeur possible de l_i des relations algébriques entre les caractères $\chi^{(i)}(C_\mu)$. Par exemple, en posant $l_i = 1$ dans (3.85), et en choisissant toutes le paires μ, ν possibles, nous allons obtenir un système d'équations algébriques pour les caractères des possibles représentations irréductibles de dimension 1.

(iv) Nous savons que une telle procédure peut être répétée au maximum N_C fois, après quoi toutes les lignes de la table des caractères auront été remplies.

(v) En général, il n'est pas indispensable de répéter la procédure (iii) pour toutes les représentations irréductibles. A un certain point de la dérivation, nous pouvons souvent déduire les caractères restants à l'aide des théorèmes d'orthogonalité (3.55) et (3.90), et des relations (3.63), (3.92) et du théorème de Burnside (3.76).

Une fois obtenue la table des caractères, nous avons les outils pour réduire en somme directe de représentations irréductibles une représentation quelconque Γ d'un groupe fini. Supposons d'avoir une représentation Γ exprimé sous la forme des matrices $\Gamma(x)$ pour chaque élément x du groupe. A partir des matrices $\Gamma(x)$ nous pouvons immédiatement calculer leur trace et donc les caractères $\chi(C_\mu)$ de la représentation Γ. Ensuite, à l'aide de l'équation (3.61) et à la connaissance de la table des caractères du groupe, nous pouvons calculer les coéfficients b_i dans la réduction

$$\Gamma = b_1 \Gamma^{(1)} \oplus b_2 \Gamma^{(2)} \oplus \ldots \oplus b_{N_\Gamma} \Gamma^{(N_\Gamma)} \, . \tag{3.99}$$

La dernière étape du problème consiste à trouver la transformation S qui réduit la représentation Γ en une structure en blocs. Nous décrirons une méthode systématique pour trouver cette transformation dans le chapitre concernant les applications à la physique.

Chapitre 4

Applications à la physique

Le but de ce chapitre est de montrer comment la théorie des représentations s'applique à un problème en physique.

Nous pouvons souvent formuler un problème physique sous la forme mathématique d'un problème aux valeurs propres dans un espace vectoriel approprié. Nous avons vu dans le premier chapitre, par exemple, que le problème de mécanique classique des modes vibrationnels d'une molécule se réduit à un problème aux valeurs propres dans l'espace vectoriel des déplacements des atomes composants la molécule. L'exemple le plus important est la solution d'un problème en mécanique quantique. Dans ce cas nous cherchons les vecteurs et les valeurs propres de l'opérateur Hamiltonien dans un espace d'Hilbert de fonctions. Dans tous ces cas, la solution exacte du problème est souvent très difficile à trouver. Il est donc utile d'avoir à disposition une méthode rigoureuse qui nous permette de simplifier le problème. La méthode qui découle des propriétés de symétrie du système et des représentations des groupes est une méthode très puissante dans ce sens. Nous verrons par la suite qu'elle nous permet de prévoir la dégénérescence d'une valeur propre de l'énergie et de nous restreindre à des sous-espaces de dimension limitée pour la recherche des états propres.

Dans la suite de ce chapitre nous allons développer cette méthode. Pour cela, nous allons considérer l'exemple d'un problème en mécanique quantique. L'extension à d'autres classes problèmes, par exemple en mécanique classique, sera traitée dans des exemples. Nous allons également nous restreindre aux opérations de symétrie de rotation ou de rotation-inversion, qui forment le groupe des rotations-inversions $O(3)$. Ce groupe sera décrit en détail dans les chapitres qui suivent. Il ne faut pas oublier que d'autres opérations de

symétrie en physique sont possibles. Notamment (i) les opérations de translation, (ii) de permutation dans le cas de systèmes à plusieurs particules identiques, (iii) d'inversion du temps et (iv) d'inversion de la charge.

4.1 Symétries en mécanique quantique

Un système à N particules (sans spin) en mécanique quantique est caractérisé par sa fonction d'onde $\psi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\ldots,\mathbf{x}_N)$, où les $\mathbf{x}_i$ sont des vecteurs dans l'espace $\mathbb{R}^3$. Considérons une transformation R du groupe des rotations-inversions en trois dimensions $O(3)$. L'opérateur R est une matrice orthogonale en trois dimensions. Si le système est transformé par une opération R, alors chaque vecteur de position $\mathbf{x}_i$ est tranformé dans un nouveau vecteurs selon

$$\mathbf{x}_i \to \mathbf{x}'_i = R\mathbf{x}_i \,. \tag{4.1}$$

Nous définissons une nouvelle fontion $P_R\psi(\mathbf{x}'_1,\mathbf{x}'_2,\ldots,\mathbf{x}'_N)$ telle que sa valeur dans la position $\{\mathbf{x}'_i\}$ est égale à la valeur de l'ancienne fonction à la position $\{\mathbf{x}_i\}$, c'est à dire,

$$\begin{aligned} P_R\psi(\mathbf{x}'_1,\mathbf{x}'_2,\ldots,\mathbf{x}'_N) &= \psi(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\ldots,\mathbf{x}_N) \\ &= \psi(R^{-1}\mathbf{x}'_1,R^{-1}\mathbf{x}'_2,\ldots,R^{-1}\mathbf{x}'_N)\,. \end{aligned} \tag{4.2}$$

Une telle définition a un sens physique puisque elle correspond à effectuer une rotation du système dans l'espace. Puisque nous ne considérons pas les opérations de permutation des particules, les opérations R agissent indépendamment sur chaque position $\mathbf{x}_i$. Sans perte de généralité, nous pouvons donc considérer un système à une seule particule. Dans ce cas, la définition (4.2) devient simplement

$$P_R\psi(\mathbf{x}) = \psi(R^{-1}\mathbf{x})\,. \tag{4.3}$$

Par la suite, pour simplifier la notation, nous oublierons le « prime » dans l'expression $\mathbf{x}'$ lorsqu'il n'est pas indispensable, et nous indiquerons par $\mathbf{x}$ la position *après* la transformation.

Considérons maintenant un groupe fini $G = \{R_i\}$ de tranformations orthogonales. Associé à ce groupe il y a un groupe d'opérations $\{P_{R_i}\}$. Pour prouver qu'il s'agit d'un groupe nous allons appliquer successivement deux tranformations R et S du groupe. La première opération tranforme $\mathbf{x}$ en

$\mathbf{x}' = R\mathbf{x}$ et la deuxième transforme $\mathbf{x}'$ en $\mathbf{x}'' = S\mathbf{x}' = (SR)\mathbf{x}$. Nous avons

$$\begin{aligned} P_S P_R \psi(\mathbf{x}'') &= P_R \psi(\mathbf{x}') \\ &= \psi(\mathbf{x}) \\ &= \psi((SR)^{-1}\mathbf{x}'') \\ &= P_{SR}\psi(\mathbf{x}''), \end{aligned} \tag{4.4}$$

d'où

$$P_S P_R = P_{SR}. \tag{4.5}$$

Considérons le produit scalaire dans l'espace des fonctions $\psi(\mathbf{x})$ défini par

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int d\mathbf{x} \psi^*(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \tag{4.6}$$

pour chaque paire de fonctions complèxes $\psi(\mathbf{x})$ et $\phi(\mathbf{x})$. Nous déduisons que P_R est un opérateur unitaire. En effet

$$\begin{aligned} \langle P_R\psi | P_R\phi \rangle &= \int d\mathbf{x} (P_R\psi(\mathbf{x}'))^* (P_R\phi(\mathbf{x}')) \\ &= \int d\mathbf{x} \left| \frac{\partial(x_1',x_2',x_3')}{\partial(x_1,x_2,x_3)} \right| \psi^*(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}) \\ &= \langle \psi | \phi \rangle, \end{aligned} \tag{4.7}$$

puisque le Jacobien

$$\left| \frac{\partial(x_1',x_2',x_3')}{\partial(x_1,x_2,x_3)} \right| \tag{4.8}$$

de la transformation est égal à 1 pour une transformation orthogonale.

Comme exemple, considérons une opération P_R qui correspond à une rotation d'un angle θ autour de l'axe x_3. La transformation des coordonnées est

$$\begin{aligned} x_1' &= x_1 \cos(\theta) - x_2 \sin(\theta) \\ x_2' &= x_1 \sin(\theta) + x_2 \cos(\theta) \\ x_3' &= x_3 . \end{aligned} \tag{4.9}$$

Nous avons

$$P_R\psi(x_1,x_2,x_3) = \psi(x_1\cos(\theta) + x_2\sin(\theta), -x_1\sin(\theta) + x_2\cos(\theta), x_3). \tag{4.10}$$

N'oublions pas que dans cette expression les coordonnées x_1, x_2, x_3 sont les coordonnées du point après la transformation et devraient être notées par x'_1, x'_2, x'_3. Nous avons toutefois décidé d'indiquer par $\mathbf{x}$ uns position arbitraire après la transformation. Par exemple, si $\psi(x_1,x_2,x_3) = x_1^2 - x_2^2$, alors

$$P_R\psi(x_1,x_2,x_3) = \psi(x_1,x_2,x_3)\cos(2\theta) + \phi(x_1,x_2,x_3)\sin(2\theta)\,, \tag{4.11}$$

où

$$\phi(x_1,x_2,x_3) = 2x_1x_2\,. \tag{4.12}$$

Si, par contre, $\psi(x_1,x_2,x_3) = x_1^2 + x_2^2$, alors nous obtenons

$$P_R\psi(x_1,x_2,x_3) = \psi(x_1,x_2,x_3)\,. \tag{4.13}$$

Considérons maintenant l'opérateur Hamiltonien $H(\mathbf{x})$. Cet opérateur, pour une particule sans spin, dépend en général de la position $\mathbf{x}$ et du moment qui, dans la représentation de la position, est donné par $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{x}}$. Il est évident que les composantes de $\mathbf{p}$ suivent la même loi de transformation de $\mathbf{x}$, sujets à une transformation R. Selon la définition, l'opérateur P_R agit sur la fonction $H(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})$ comme

$$P_R(H(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})) = H(R^{-1}\mathbf{x})\psi(R^{-1}\mathbf{x})\,. \tag{4.14}$$

Nous disons que le système est invariant par une transformation R si l'Hamiltonien du système transformé est idéntiquement le même que pour le système avant la transformation. Cela implique que $H(R^{-1}\mathbf{x}) = H(\mathbf{x})$. L'expression (4.14) nous donne

$$\begin{aligned} P_R(H(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})) &= H(\mathbf{x})\psi(R^{-1}\mathbf{x}) \\ &= H(\mathbf{x})P_R\psi(\mathbf{x})\,, \end{aligned} \tag{4.15}$$

qui, en notation compacte, s'écrit

$$[H,P_R] = HP_R - P_RH = 0\,. \tag{4.16}$$

Nous avons ainsi prouvé que, si un système physique est invariant sous une transformation R, cela équivaut à dire que le commutateur de son Hamiltonien avec l'opérateur de la transformation P_R est nul. Nous disons que R est une symétrie du système. D'après cette définition, il est évident que l'ensemble $\{R\}$ de toutes les transformations de symétrie du système, est

un groupe. Dans ce cas on parle de groupe de symétrie du système. Comme nous l'avons vu, l'ensemble des opérations P_R forme aussi un groupe qui est isomorphe au groupe $\{R\}$.

Considérons un système caractérisé par un Hamiltonien H et par un groupe di symétrie $G = \{R\}$. Supposez que ϕ est un état propre de H avec valeur propre E. Alors $P_R\phi$ est aussi un état propre de H avec la même valeur propre. En effet

$$HP_R\phi = P_RH\phi = EP_R\phi\,. \tag{4.17}$$

Si la valeur propre E est non-dégénérée, cela implique que $P_R\phi$ est égal à ϕ, à un facteur numérique complexe (de valeur absolue unitaire) près. Si par contre E est l fois dégénéré, alors nous pouvons définir un ensemble de vecteurs orthonormés $\{\phi_k\}$ $(k = 1, 2, \ldots, l)$ qui sont vecteurs propres de H avec valeur propre E. Ces vecteurs génèrent un sous-espace S. Dans ce cas, le vecteur $P_R\phi_k$ est encore un état propre avec valeur propre E et doit donc être une combinaison linéaire des vecteurs $\{\phi_k\}$, c'est à dire

$$P_R\phi_k = \sum_{n=1}^{l} \phi_n\Gamma_{nk}(R)\,. \tag{4.18}$$

Les nombres complexes $\Gamma_{nk}(R) = \langle\phi_n|P_R|\phi_k\rangle$ sont les éléments d'une matrice unitaire (puisque l'opérateur P_R est unitaire) $\Gamma(R)$. L'ensemble des matrices $\{\Gamma(R)\}$ pour chaque R forme une représentation unitaire du groupe G. Si nous choisissons une autre base orthonormée $\{\psi_k\}$ du sous-espace S des états propres de H avec valeur propre E, cette base est liée à l'ancienne par une transformation unitaire et la représentation qu'elle génère est équivalente à $\Gamma(R)$. Considérons maintenant le sous-espace S des états propres de H avec valeur propre E. Supposons qu'il n'existe pas des sous-espaces propres de S qui sont invariants par les opérations $\{P_R\}$. Dans ce cas, la représentation $\Gamma(R)$ relative à S est par définition irréductible. La dégénérescence du niveau d'énergie E est alors dite *nécessaire*. Si par contre il existe un sous-espace propre de S invariant par les $\{P_R\}$, alors la représentation $\Gamma(R)$ est réductible et la dégénérescence est dite *accidentale*. Une telle dénomination est clairement justifiée par les considérations que nous avons faites. Si un sous-espace est invariant par le groupe des opérations de symétrie $\{P_R\}$, alors tous les vecteurs de ce sous-espace doivent nécessairement avoir la même valeur propre. En effet, étant donné un vecteur $\phi \in S$, les vecteurs $\{P_R\phi\}$

pour tout R génèrent le sous-espace S et sont tous dégénérés par (4.17). Le groupe de symétrie G, par contre, n'impose aucune dégénérescence entre deux états propres de H appartenant à deux sous-espaces invariants différents. Dans ce cas, une dégénérescence serait de nature accidentale.

En général dans la nature nous n'avons jamais de dégénérescences accidentales. Si une dégénérescence accidentale apparait pour le système qu'on analyse, la plupart des fois cela est dû à une mauvaise identification du groupe de symétrie du système. Dans des telles situations, souvent on trouve des symétries additionnelles qui étaient passé inaperçues et permettent d'expliquer les dégénérescences observées. Un exemple très bien connu est celui des états s et p d'un électron dans l'atome d'hydrogène. Les états $2p$ ont la forme $-(1/\sqrt{2})(x+iy)f(r)$, $zf(r)$, $(1/\sqrt{2})(x-iy)f(r)$, où $f(r)$ est une fonction de $r=|\mathbf{r}|$. Ils génèrent un éspace de fonctions à trois dimensions qui définit une représentation irréductible du groupe sphérique $O(3)$ (c'est un groupe infini, donc nous ne pouvons pas appliquer toutes les propriétés vues jusqu'à ici). De même, l'état $2s$ a la forme $f(r)$ et génère la représentation identité du groupe $O(3)$. Ces deux représentations sont donc irréductibles et distinctes. Néanmoins, nous savons que les niveaux $2s$ et $2p$ (en général les niveaux ns, np, etc.) sont dégénérés. La dégénérescence est dans ce cas de type accidentale, étant donné le groupe de symétrie des rotations-inversions $O(3)$. En réalité, il est possible de montrer que l'atome d'hydrogène est caractérisé par une symétrie additionnelle et que le groupe de symétrie est $SO(4)$ à la place de $O(3)$. Cette symétrie cachée de l'atome d'hydrogène est un des aspects les plus intéressants des symétries en physique et met en évidence l'utilité du formalisme que nous traitons ici.

Théorème. Considérons deux sous-espaces S_i et S_j, pas nécessairement distincts où orthogonaux, qui définissent deux représentations irréductibles unitaires $\Gamma^{(i)}$ et $\Gamma^{(j)}$, de dimension respectivement l_i et l_j, d'un groupe fini G. Considérons les deux ensembles des vecteurs orthonormés $\{\phi_k^{(i)}\}$ $(k=1,2,\ldots,l_i)$ et $\{\psi_k^{(j)}\}$ $(k=1,2,\ldots,l_j)$ qui sont des bases respectivement de S_i et S_j. On dit que le vecteur $\phi_k^{(i)}$ *transforme* comme la k-ème fonction de base de la i-ème représentation irréductible. La relation d'orthogonalité suivante est satisfaite

$$\langle \phi_k^{(i)} | \psi_m^{(j)} \rangle = \alpha^{(i)} \delta_{ij} \delta_{km} \,, \tag{4.19}$$

où $\alpha^{(i)}$ est un nombre complexe.

Preuve: Considérons la matrice de dimension $l_i \times l_j$ définie par $M_{km} = \langle \phi_k^{(i)} | \psi_m^{(j)} \rangle$. Pour chaque élément R du groupe de symétrie, nous pouvons

établir les relations suivantes

$$\begin{aligned}\langle\phi_k^{(i)}|\psi_m^{(j)}\rangle &= \langle P_R\phi_k^{(i)}|P_R\psi_m^{(j)}\rangle \\ &= \langle\phi_k^{(i)}\Gamma^{(i)}(R)|\psi_m^{(j)}\Gamma^{(j)}(R)\rangle \\ &= \Gamma^{(i)\dagger}(R)\langle\phi_k^{(i)}|\psi_m^{(j)}\rangle\Gamma^{(j)}(R) \\ &= (\Gamma^{(i)}(R))^{-1}\langle\phi_k^{(i)}|\psi_m^{(j)}\rangle\Gamma^{(j)}(R)\,, \end{aligned} \tag{4.20}$$

où la premiere égalité s'ensuit de l'unitarité des P_R, la deuxième de la définition de la représentation, la troisième de la définition de produit scalaire et la quatrième de l'unitarité de la représentation. Pour chaque élément R du groupe nous avons donc $\Gamma^{(i)}(R)M = M\Gamma^{(j)}(R)$. Par les deux lemmes de Schur nous avons que, si $i \neq j$ alors M est identiquement nulle, tandis que, si $i = j$ alors M est un multiple de la matrice identité.

Ce théorème nous dit que, après avoir classé les états d'un système quantique selon les représentations irréductibles du groupe de symétrie, deux états ne peuvent avoir un produit scalaire non nul que s'ils transforment comme la même fonction de base de la même représentation irréductible. Cela est très important pour établir des *règles de sélection* en mécanique quantique, par exemple.

Un autre théorème qui découle de la théorie des représentations est le théorème de Unsöld qui nous permet de construir des quantité invariantes sous les opérations de symétrie du système.

Théorème (de Unsöld). Si $\{\phi_n^{(i)}\}$ et $\{\psi_n^{(i)}\}$ $(n = 1, 2, \ldots, l_i)$ sond deux bases orthonormées de la même représentation irréductible unitaire $\Gamma^{(i)}$ d'un groupe G, alors pour chaque opération P_R du groupe et pour une paire arbitraire de vecteurs ξ et η nous avons

$$\sum_{n=1}^{l_i}\langle\xi|\psi_n^{(i)}\rangle\langle\phi_n^{(i)}|\eta\rangle = \sum_{n=1}^{l_i}\langle\xi|P_R\psi_n^{(i)}\rangle\langle P_R\phi_n^{(i)}|\eta\rangle\,. \tag{4.21}$$

Nous pouvons interpréter ce résultat de la façon suivante. Considérons l'opérateur

$$\sum_{n=1}^{l_i}|\psi_n^{(i)}\rangle\langle\phi_n^{(i)}|\,. \tag{4.22}$$

Par cette notation nous indiquons l'opérateur qui, appliqué à un vecteur ξ, nous donne le vecteur

$$\xi' = \sum_{n=1}^{l_i}\psi_n^{(i)}\langle\phi_n^{(i)}|\xi\rangle\,. \tag{4.23}$$

Le théorème de Unsöld dit qu'un opérateur ainsi construit est invariant sous toutes les transformations P_R, c'est à dire

$$P_R^{-1}\left(\sum_{n=1}^{l_i}|\psi_n^{(i)}\rangle\langle\phi_n^{(i)}|\right)P_R=\sum_{n=1}^{l_i}|\psi_n^{(i)}\rangle\langle\phi_n^{(i)}|\,, \tag{4.24}$$

où nous avons utilisé la propriété d'unitarité $P_R^{-1}=P_R^\dagger$.

Preuve: Nous avons

$$P_R\phi_n^{(i)}=\sum_{m=1}^{l_i}\phi_m^{(i)}\Gamma_{mn}^{(i)}(R)\,, \tag{4.25}$$

et la même relation est aussi valable pour les $\{\psi_n^{(i)}\}$. Alors

$$\begin{aligned}\sum_{n=1}^{l_i}\langle\xi|P_R\psi_n^{(i)}\rangle\langle P_R\phi_n^{(i)}|\eta\rangle &= \sum_{pqn}\langle\xi|\psi_p^{(i)}\rangle\langle\phi_q^{(i)}|\eta\rangle\Gamma_{pn}^{(i)*}(R)\Gamma_{qn}^{(i)}(R)\\ &= \sum_{pq}\langle\xi|\psi_p^{(i)}\rangle\langle\phi_q^{(i)}|\eta\rangle\sum_n\Gamma_{qn}^{(i)}(R)\Gamma_{np}^{(i)}(R^{-1})\\ &= \sum_p\langle\xi|\psi_p^{(i)}\rangle\langle\phi_q^{(i)}|\eta\rangle\,,\end{aligned} \tag{4.26}$$

où nous avons utilisé la propriété $\Gamma^{(i)}(R)\Gamma^{(i)}(R^{-1})=\Gamma^{(i)}(RR^{-1})=I$.

Remarquez que pour la preuve nous n'avons pas utilisé le théorème d'orthogonalité. Le théorème de Unsöld est donc valable aussi pour des groupes infinis. Ce théorème joue un rôle fondamental en mécanique quantique où il permet, à partir des états quantiques d'un système, de construir des opérateurs qui sont invariants par les opérations de symétrie du système qu'on considère.

Considérons maintenant un vecteur ϕ dans un espace vectoriel. En appliquant l'opérateur P_R associé aux transformations du groupe G, nous obtenons un ensemble de vecteurs $\{P_R\phi\}$. En général, ces vecteurs ne sont pas linéairement indépendants entre eux. Ils génèrent un sous-espace S de l'espace vectoriel, dans lequel nous pouvons définir une base orthonormée $\{\phi_k\}$. A partir de cette base, nous avons vu comment construir la représentation Γ du grouep G relative à ce sous-espace. Si le sous-espace S est le plus petit sous-espace invariant par les transformations P_R, alors la représentation Γ est irréductible et les vecteurs $\{\phi_k\}$, par définition, transforment comme les fonctions de base de cette représentation. Si le sous-espace S peut être

réduit en plus petits sous-espaces invariants, par contre, nous pouvons effectuer le changement de base qui réalise un telle réduction. Nous avons, pour la représentation Γ la relation générale

$$\Gamma = b_1\Gamma^{(1)} \oplus b_1\Gamma^{(1)} \oplus \ldots \oplus b_{N_\Gamma}\Gamma^{(N_\Gamma)} \,. \tag{4.27}$$

Nous indiquons la base qui réduit Γ par $\{\phi_k^{(i,j)}\}$ avec $i = 1, \ldots, N_\Gamma$, $j = 1, \ldots, b_i$ et $k = 1, \ldots, l_i$, pour souligner que le vecteur $\phi_k^{(i,j)}$ transforme comme la k-ème fonction de base de la i-ème représentation irréductible. Nous pouvons ainsi énoncer le théorème suivant:

Théorème. Un vecteur ϕ d'un espace vectoriel fermé sous les transformations P_R peut s'écrire comme combinaison linéaire de vecteurs $\{\psi_k^{(i)}\}$.

$$\phi = \sum_{i=1}^{N_\Gamma} \sum_{k=1}^{l_i} \psi_k^{(i)} \,. \tag{4.28}$$

Ici, par $\psi_k^{(i)}$ nous indiquons un vecteur qui transforme comme la k-ème fonction de base de la i-ème représentation irréductible du groupe G.

Preuve: Nous avons déjà vu que le sous-espace, dont $\{\phi_k^{(i,j)}\}$ est une base, est généré par le vecteur ϕ. Donc ϕ est une combinaison linéaire de ces vecteurs de base.

$$\phi = \sum_{i=1}^{N_\Gamma} \sum_{k=1}^{l_i} \sum_{j=1}^{b_i} c_k^{(i,j)} \phi_k^{(i,j)} \,. \tag{4.29}$$

Puisque la base est orthonormé, les coefficients $c_k^{(i,j)}$ s'obtiennent comme suit

$$\begin{aligned} \langle \phi_k^{(i,j)} | \phi \rangle &= \sum_{p=1}^{N_\Gamma} \sum_{m=1}^{l_p} \sum_{n=1}^{b_p} \langle \phi_k^{(i,j)} | \phi_m^{(p,n)} \rangle c_m^{(p,n)} \\ &= \sum_{p=1}^{N_\Gamma} \sum_{m=1}^{l_p} \sum_{n=1}^{b_p} \delta_{ip}\delta_{jn}\delta_{km} c_m^{(p,n)} \\ &= c_k^{(i,j)} \end{aligned} \tag{4.30}$$

Définissons

$$\psi_k^{(i)} = \sum_{j=1}^{b_i} c_k^{(i,j)} \phi_k^{(i,j)} \,, \tag{4.31}$$

et nous obtenons finalement l'expression (4.28).

Nous savons donc décomposer un vecteur ϕ quelconque en vecteurs de base des représentations irréductibles, pourvu que nous connaissons ces vecteurs de base pour le sous-espace généré par le vecteur ϕ. Nous allons maintenant apprendre à déterminer ces vecteurs de base. Supposons d'en avoir trouvé un, que nous indiquons par $\psi_k^{(i)}$. En appliquant les opérations P_R nous générons la représentation irréductible $\Gamma^{(i)}$, c'est à dire

$$P_R \psi_k^{(i)} = \sum_{n=1}^{l_i} \psi_n^{(i)} \Gamma_{nk}^{(i)}(R) \,. \tag{4.32}$$

Multiplions les deux côtés de cette expression par $\Gamma_{n'k'}^{(j)}(R)$ et sommons sur les éléments R du groupe. Par le grand théorème d'orthogonalité, nous avons

$$\begin{aligned} \sum_R \Gamma_{n'k'}^{(j)}(R) P_R \psi_k^{(i)} &= \sum_{n=1}^{l_i} \psi_n^{(i)} \sum_R \Gamma_{n'k'}^{(j)}(R) \Gamma_{nk}^{(i)}(R) \\ &= \frac{h}{l_i} \delta_{ij} \delta_{k'k} \psi_{n'}^{(j)} \,. \end{aligned} \tag{4.33}$$

Donc, l'opérateur

$$\Pi_{nk}^{(j)} = \frac{l_j}{h} \sum_R \Gamma_{nk}^{(j)}(R) P_R \tag{4.34}$$

appliqué à $\psi_m^{(j)}$ donne $\delta_{ij}\delta_{km}\psi_n^{(j)}$. Il s'ensuit que, si nous connaissons les matrices des représentations irréductibles, alors à partir d'un seul de ces vecteurs de base, disons $\psi_k^{(j)}$, nous pouvons générer les autres à l'aide de la formule

$$\psi_n^{(j)} = \Pi_{nk}^{(j)} \psi_k^{(j)} \,. \tag{4.35}$$

Les opérateurs $\Pi_{nn}^{(j)}$ en particulier agissent comme des projecteurs sur les états qui transforment comme la n-ème fonction de base de la j-ème représentation irréductible.

Nous savons maintenant accomplir les deux tâches principales impliquant les vecteurs de base des représentations irréductibles. Prémièrement, supposons de devoir trouver la décomposition (4.28) d'un vecteur ϕ quelconque. Cette décomposition s'obtient tout simplement à l'aide de projecteurs $\Pi_{nn}^{(j)}$

comme suit

$$\begin{aligned} \phi &= \sum_{i=1}^{N_\Gamma} \sum_{k=1}^{l_i} \psi_k^{(i)} , \\ \psi_k^{(i)} &= \Pi_{kk}^{(i)} \phi . \end{aligned} \tag{4.36}$$

Plus en général, supposons d'avoir décomposé une représentation Γ définie dans un espace vectoriel S en représentations irréductibles $\Gamma = \sum_{i=1}^{N_\Gamma} b_i \Gamma^{(i)}$. Nous voulons trouver les vecteurs de base $\{\phi_k^{(i,j)}\}$ de cette décomposition. Pour trouver, par exemple, les vecteurs $\phi_k^{(i,j)}$ pour un k et un i donnés et pour $j = 1, \ldots, b_i$, il suffira de choisir arbitrairement un vecteur $\phi \in S$ (par exemple parmi les vecteurs d'une base quelconque de S) et appliquer à ce vecteur le projecteur $\Pi_{kk}^{(i)}$. Il faudra répéter cette procédure jusqu'à obtenir un ensemble de b_i vecteurs linéairement indépendants. En appliquant ensuite une procédure d'orthonormalisation, nous aurons obtenu les vecteurs $\phi_k^{(i,j)}$ pour $j = 1, \ldots, b_i$. Les vecteurs $\phi_n^{(i,j)}$ transformant comme les autres fonctions de base de $\Gamma^{(i)}$ peuvent s'obtenir à l'aide des opérateurs $\Pi_{nk}^{(i)}$ appliqués aux vecteurs déjà trouvés. Nous savons enfin trouver de façon systématique les vecteurs de base d'une décomposition en représentations irréductibles d'une représentation donnée.

Pour comprendre l'utilité de ces derniers passages, nous rappelons que, pour un système quantique caractérisé par un Hamiltonien H, la base de l'espace d'Hilbert qui diagonalise l'Hamiltonien est une base dont les éléments transforment comme les fonctions de base des représentations irréductibles du groupe de symétrie du système. Supposons que l'espace vectoriel dans lequel nous souhaitons resoudre le problème Hamiltonien soit de dimension finie. En mécanique quantique cela n'est jamais vrai en général, puisque l'espace d'Hilbert des fonctions d'onde à carré sommable est de dimension infinie. Toutefois, très souvent pour chercher les états propres du système nous nous restreignons à des sous-espaces de dimension finie. Appelons V un tel espace de dimension finie. Pour que le formalisme de la théorie des représentations des groupes puisse être appliqué, l'hypothèse de base est que toutes les opérations de symétrie du système P_R soient internes à l'espace V, c'est à dire si $\phi \in V$ alors $P_R \phi \in V$ pour chaque P_R du groupe de symétrie. Un exemple d'un tel espace de dimension fini est donné par les polynômes d'ordre n des variables x, y, et z et les opérations de rotation. Une rotation est une transformation linéaire des trois variables x, y, et z, donc la transformation appliquée à une

fonction $\psi(x,y,z) = x^\alpha y^\beta z^\gamma$, avec $\alpha + \beta + \gamma = n$, donne toujours une combinaison linéaire de monômes du même ordre n. Un espace de fonctions ainsi défini est évidemment de dimension finie. En général, l'espace V génère une représentation Γ du groupe de symétrie. Cette représentation se décompose en représentations irréductibles selon $\Gamma = b_1\Gamma^{(1)} \oplus b_2\Gamma^{(2)} \oplus \ldots \oplus b_{N_\Gamma}\Gamma^{(N_\Gamma)}$. Nous avons déjà vu comment calculer les coefficients b_i à l'aide des caractères. Indiquons la base (inconnue pour l'instant), dans laquelle l'Hamiltonien est diagonal, par $\phi_k^{(i,j)}$, où $i = 1, \ldots, N_\Gamma$, $j = 1, \ldots, b_i$, et $k = 1, \ldots, l_i$. Nous cherchons cette base et, sans l'aide des symétries, il faudrait diagonaliser un problème aux états propres de dimension $\sum_i b_i l_i$, la dimension de l'espace V. L'avantage de savoir classer des états par rapport à leurs propriétés de symétries, et donc de dire qu'un tel état transforme comme la k-ème fonction de base de la i-ème représentation irréductible, nous permet de simplifier considérablement le problème. Supposons d'avoir un état $\psi_n^{(m)}$ qui transforme comme la n-ème fonction de base de la m-ème représentation irréductible. En toute généralité nous pouvons exprimer cet état dans la base que nous avons choisie. Nous avons

$$\psi_n^{(m)} = \sum_{i,j,k} c_k^{(i,j)} \phi_k^{(i,j)} \,, \tag{4.37}$$

où les coefficients $c_k^{(i,j)}$ sont obtenus par les produits scalaires

$$c_k^{(i,j)} = \langle \phi_k^{(i,j)} | \psi_n^{(m)} \rangle \,. \tag{4.38}$$

Mais nous savons par le théorème sur l'orthogonalité des fonctions de base des des représentations irréductibles, équation (4.19), que dans cette expression seulement les termes avec $k = n$ et $i = m$ survivent, tous les autres étant nuls. Donc, le développement précedant se réduit à

$$\psi_n^{(m)} = \sum_{j=1}^{b_m} c_n^{(m,j)} \phi_n^{(m,j)} \,, \tag{4.39}$$

En d'autres mots, un vecteur quelconque qui transforme comme un fonction de base donnée d'une représentation irréductible est combinaison linéaire exclusivement des vecteurs de base de l'espace ayant la même symétrie. Cela entraine une propriété très importante. Si nous avons deux vecteurs quelconques $\psi_n^{(m)}$ et $\psi_k^{(j)}$, transformant comme des fonctions de base des représentations irréductibles du groupe de symétrie du système. Supposons $k \neq n$

ou $j \neq m$. Le développement (4.39) et le fait que l'Hamiltonien est diagonal dans la base $\phi_k^{(i,j)}$ nous assurent que

$$\langle \psi_k^{(j)} | H | \psi_n^{(m)} \rangle = 0 \,. \tag{4.40}$$

Cette *regle de sélection* des éléments de matrice de l'Hamiltonien est à tout effet une diagonalisation partielle du problème. Elle nous dit que le problème Hamiltonien est restreint à chaque sous-espace de tous les états qui transforment comme la même fonction de base de la même représentation irréductible. Considérons par exemple la k-ème fonction de base de la i-ème représentation irréductible. Nous pouvons trouver un ensemble de vecteurs linéairement indépendants qui génèrent ce sous-espace, que nous indiquons par $S_k^{(i)}$, en appliquant le projecteur $(l_i/h) \sum_R \Gamma_{kk}^{(i)}(R) P_R$ à tous les éléments de l'espace de départ V (par exemple, aux vecteurs d'une base quelconque de cet espace). L'opérateur Hamiltonien n'a pas d'éléments de matrice non nuls entre les vecteur de $S_k^{(i)}$ et ceux dans son complément orthogonal en V. Nous pouvons diagonaliser l'Hamiltonien H dans ce sous-espace qui est de dimension b_i. Nous avons donc réduit la dimension du problème de $\sum_i b_i l_i$ à b_i sans perte de généralité. En plus, puisque la dégénérescence imposée par la symétrie est nécessaire, les valeurs propres trouvées dans ce sous-espace seront les mêmes que celles des autres sous-espaces $S_m^{(i)}$ appartenant à la même représentation irréductible $\Gamma^{(i)}$.

La réduction de l'éspace vectoriel d'un problème Hamiltonien est la premiere des simplifications introduites par la théorie des représentations des groupes. Une autre simplification importante est dans le calcul des amplitudes de probabilité, où nous pouvons profiter de manière systématique des regles de sélection imposées par la symétrie. Nous verrons cela en détail dans le paragraphe qui suit.

4.2 Produit direct de représentations

Nous allons introduire maintenant le concept de produit direct de représentations, un outil essentiel pour la construction des représentations d'un groupe et pour les applications en physique. Considérer deux espaces vectoriels S_1 et S_2 avec éléments respectivement $\{\xi_1, \eta_1, \zeta_1, \ldots\}$ et $\{\xi_2, \eta_2, \zeta_2, \ldots\}$. Le produit direct $S_1 \times S_2$ consiste en l'ensemble de toutes les paires composées d'un vecteur de S_1 et d'un vecteur de S_2. Des telles paires ont donc

la forme $\{\xi_1, \eta_2\}$, que nous indiquons simplement par $\xi_1\eta_2$. Cet ensemble est un espace vectoriel, pourvu que nous définissions la somme et le produit par un scalaire de manière à avoir

$$(a_1\xi_1 + b_1\eta_1)(a_2\xi_2 + b_2\eta_2) = a_1a_2\xi_1\xi_2 + a_1b_2\xi_1\eta_2 + a_2b_1\eta_1\xi_2 + b_1b_2\eta_1\eta_2\,, \quad (4.41)$$

pour des nombres complexes quelconques a_1, a_2, b_1, b_2. Supposons que deux applications linéaires A et B transforment respectivement S_1 et S_2 en S_1' et S_2':

$$\begin{aligned} A:&\ \ \xi_1 \to \xi_1' = A\xi_1 \\ B:&\ \ \xi_2 \to \xi_2' = B\xi_2\,. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Nous pouvons définir le produit direct $A \times B$ des deux applications comme une application de $S_1 \times S_2$ en $S_1' \times S_2'$ qui agit comme suit

$$A \times B:\ \ \xi_1\xi_2 \to \xi_1'\xi_2' = (A \times B)(\xi_1\xi_2) = (A\xi_1)(B\xi_2)\,. \quad (4.43)$$

Dans la plupart des cas nous sommes intéressés aux transformations linéaires d'un espace S en l'espace S même. Nous allons donc considérer des applications A de S_1 et S_1 et des applications B de S_2 en S_2. Soient $\{\phi_i\}$ et $\{\psi_j\}$ deux bases orthonormées respectivement des espaces vectoriels S_1 et S_2. Nous pouvons écrire les transformations A et B dans ces bases. Nous avons

$$\begin{aligned} A\phi_i &= \sum_m \phi_m A_{mi} \\ B\psi_j &= \sum_n \psi_n B_{nj}\,. \end{aligned}$$

Le produit direct $A \times B$ dans la base $\{\phi_i\psi_j\}$ de $S_1 \times S_2$ prend la forme

$$(A \times B)\phi_i\psi_j = (A\phi_i)(B\psi_j) = \sum_{mn} \phi_m\psi_j A_{mi}B_{nj}\,. \quad (4.44)$$

Il s'ensuit que l'application $A \times B$ est caractérisée par un représentation matricielle

$$(A \times B)_{mn;ij} = A_{mi}B_{nj}\,. \quad (4.45)$$

Dans cette expression, $A \times B$ est une matrice $l_1l_2 \times l_1l_2$, où l_1 et l_2 sont les dimensions respectivement de S_1 et S_2. Remarquez que les lignes et le

colonnes de cette matrice sont maintenant indiquées par deux indices à la place d'un seul: dans la notation $(A \times B)_{mn;ij}$ les termes mn et ij indiquent des paires d'indices, pas des produits.

La trace de la matrice $A \times B$ est

$$\chi(A \times B) = \sum_{ij} (A \times B)_{ij;ij} = \sum_i A_{ii} \sum_j B_{jj} = \chi(A)\chi(B)\,. \tag{4.46}$$

Donc la trace d'un produit direct de transformations linéaires est égale au produit des traces. Si nous avons deux transformations A et A', de S_1 en S_1, et deux autres transformations B et B', de S_2 en S_2, alors le produit direct entre les transformations AA' et BB' s'écrit simplement comme

$$(AA')(BB') = (A \times B)(A' \times B')\,. \tag{4.47}$$

La preuve est très immédiate

$$\begin{aligned} [(AA')(BB')]_{mn;ij} &= (AA')_{mi}(BB')_{nj} \\ &= \sum_{p=1}^{l_1} A_{mp}A'_{pi} \sum_{q=1}^{l_2} B_{nq}B'_{qj} \\ &= \sum_{pq} (A \times B)_{mn;pq}(A' \times B')_{pq;ij} \end{aligned} \tag{4.48}$$

Les produits directs nous permettent de construir des nouvelles représentations d'un groupe à partir de représentations connues. Considérons un groupe $H = \{e, x, y, \ldots\}$ et deux représentations de ce groupe, Γ et Γ', définies repspectivement dans les sous-espaces S et S', avec pour base respectivement $\{\phi_i\}$ et $\{\phi'_i\}$. Les dimensions des sous-espaces sont respectivement l et l'. Nous avons

$$\begin{aligned} \Gamma(x)\phi_i &= \sum_{m=1}^{l} \phi_m \Gamma_{mi}(x) \\ \Gamma'(x)\phi'_j &= \sum_{n=1}^{l'} \phi'_n \Gamma'_{nj}(x)\,. \end{aligned}$$

Cela nous permet de définir la représentation produit direct $\Gamma \times \Gamma'$ comme suit

$$(\Gamma(x) \times \Gamma'(x))(\phi_i\phi'_j) = \sum_{m=1}^{l} \sum_{n=1}^{l'} \phi_m\phi'_n \Gamma_{mi}(x)\Gamma'_{nj}(x)$$

$$= \sum_{m,n} \phi_m \phi'_n (\Gamma(x) \times \Gamma'(x))_{mn;ij} \,. \qquad (4.49)$$

Le produit direct des transformations $\Gamma(x) \times \Gamma'(x)$ forme une représentation du groupe H de dimension $l \times l'$. En effet la loi de composition du groupe est satisfaite par les matrices de la représentation produit, comme on peut le vérifier:

$$\begin{aligned} (\Gamma(x) \times \Gamma'(x))(\Gamma(y) \times \Gamma'(y)) &= (\Gamma(x)\Gamma(y)) \times (\Gamma'(x)\Gamma'(y)) \\ &= \Gamma(xy) \times \Gamma'(xy) \,. \end{aligned} \qquad (4.50)$$

Le caractère de cette représentation est donné par le produit des caractères, selon (4.46)

$$\chi^{\Gamma \times \Gamma'}(x) = \chi^{\Gamma}(x) \chi^{\Gamma'}(x) \,. \qquad (4.51)$$

En général, la représentation obtenue par le produit direct de deux représentations irréductibles est réductible. Prenons par exemple la représentation $\Gamma_3 \times \Gamma_3$ de C_{3v}. Son caractère est

$$\begin{aligned} \chi^{\Gamma_3 \times \Gamma_3}(E) &= 4 \\ \chi^{\Gamma_3 \times \Gamma_3}(2C_3) &= 1 \\ \chi^{\Gamma_3 \times \Gamma_3}(3\sigma) &= 0 \end{aligned}$$

En utilisant l'équation (3.61), nous avons

$$\Gamma_3 \times \Gamma_3 = \Gamma_1 \oplus \Gamma_2 \oplus \Gamma_3 \,. \qquad (4.52)$$

4.3 Règles de sélection

Nous allons maintenant étudier les contraintes imposées par la symétrie aux amplitudes de probabilité en mécanique quantique.

De la théorie des perturbations dépendante du temps en mécanique quantique, nous savons que pour un système qui se trouve dans un état $|\psi\rangle$ à l'instant t_0 du temps, la probabilité qu'à l'instant $t > t_0$ il se trouve dans un état $|\phi\rangle$ est liée à une quantité appelée *amplitude de probabilité*. Cette quantité est exprimée par l'*élément de matrice*

$$\langle \phi | V(t) | \psi \rangle \,, \qquad (4.53)$$

où $V(t)$ est l'opérateur Hamiltonien de la perturbation physique qui induit la transition entre les deux états. Par exemple, pous une transition induite par le champ électromagnetique $E(t) = E_0 \exp(-i\omega t)$ de grande longueur d'onde, cet opérateur est le dipôle électrique $V(t) = \sum_i E_0 q_i \mathbf{r}_i \exp(-i\omega t)$, où la somme est sur toutes les particules chargées du système, les $\mathbf{r}_i$ sont leurs positions, et les q_i leurs charges. En général, pour un système complexe, il faut calculer ces éléments de matrice pour plusieurs paires d'états et il s'avere que, pour raisons de symétrie, la plupart de ces quantités sont nulles. Il est alors très utile de pouvoir établir les règles de sélection, qui nous disent quand une amplitude de probabilité est nulle, sans devoir la calculer explicitement.

Considérons l'opérateur V qui décrit, par exemple, une perturbation sur un système quantique. Cet opérateur, en général, peut s'écrire comme somme d'opérateurs $V_m^{(i)}$ qui transforment comme la m-ème fonction de base de la i-ème représentation irréductible du groupe de symétrie du système. Par exemple, l'opérateur de dipôle que nous avons indiqué ci-dessus a la symétrie d'un vecteur de position. Pour un système ayant symétrie C_{3v}, nous savons que la composante z de ce vecteur transforme comme la représentation identité, tandis que les deux composantes x et y transforment comme les deux fonctions de base de la représentations irréductible Γ_3. Supposons de vouloir calculer les éléments de matrice de ces composantes $V_m^{(i)}$ entre états $\phi_n^{(j)}$ $(n = 1, 2, \ldots, l_j)$ et $\psi_p^{(k)}$ $(p = 1, 2, \ldots, l_k)$ qui sont également classé selon les représentations irréductibles du groupe de symétrie. Nous voulons donc calculer les éléments de matrice

$$\langle \phi_n^{(j)} | V_m^{(i)} | \psi_p^{(k)} \rangle \,. \tag{4.54}$$

Nous avons vu que les vecteurs $V_m^{(i)}|\psi_p^{(k)}\rangle$ génèrent la représentation à $l_i \times l_k$ dimensions $\Gamma^{(i)} \times \Gamma^{(k)}$ du groupe de symétrie. Nous pouvons décomposer cette représentation en représentations irréductibles

$$\Gamma^{(i)} \times \Gamma^{(k)} = \sum_{p=1}^{N_\Gamma} b_p \Gamma^{(p)} \,, \tag{4.55}$$

où b_p est le nombre de fois que la représentation $\Gamma^{(p)}$ apparaît dans la réduction. Le théorème (4.28) nous dit que le vecteur $V_m^{(i)}|\psi_p^{(k)}\rangle$ peut s'écrire comme

$$V_m^{(i)} |\psi_p^{(k)}\rangle = \sum_{p=1}^{N_\Gamma} \sum_{q=1}^{l_p} |\xi_q^{(p)}\rangle \,, \tag{4.56}$$

où les vecteurs $|\xi_q^{(p)}\rangle$ sont des combinaisons linéaires d'états propres de l'Hamiltonian, comme nous l'avons vu avec l'équation (4.39)

$$|\xi_q^{(p)}\rangle = \sum_{r=1}^{b_p} c_q^{(p,r)} |\xi_q^{(p,r)}\rangle \,. \tag{4.57}$$

En remplaçant cette décomposition dans l'expression de l'élément de matrice nous obtenons

$$\langle \phi_n^{(j)} | V_m^{(i)} | \psi_p^{(k)} \rangle = \sum_{p=1}^{N_\Gamma} \sum_{q=1}^{l_p} \sum_{r=1}^{b_p} c_q^{(p,r)} \langle \phi_n^{(j)} | \xi_q^{(p,r)} \rangle \,. \tag{4.58}$$

Nous pouvons maintenant appliquer le théorème (4.19) qui nous assure que la plupart des produits scalaires dans cette expression sont nuls. Seuls les produits scalaires entre vecteurs qui transforment comme la même fonction de base de la même représentation irréductible sont différants de zéro. Nous obtenons donc

$$\langle \phi_n^{(j)} | V_m^{(i)} | \psi_p^{(k)} \rangle = \sum_{r=1}^{b_j} c_n^{(j,r)} \langle \phi_n^{(j)} | \xi_n^{(j,r)} \rangle \,. \tag{4.59}$$

En plus, le même théorème nous dit que le nombre de constantes indépendantes de la forme $\langle \phi_n^{(j)} | \xi_n^{(j,r)} \rangle$ est égal à b_j. Il s'ensuit que pour calculer les $l_i \times l_j \times l_k$ éléments de matrice de la forme $\langle \phi_n^{(j)} | V_m^{(i)} | \psi_p^{(k)} \rangle$ il suffit de calculer les quantités $\langle \phi_n^{(j)} | \xi_n^{(j,r)} \rangle$ dont le nombre est seulement b_j. Cela constitue une grande simplification du problème.

Par exemple, considérons l'état électronique fondamental $\psi^{(1)}$ de la molécule d'ammoniac. Nous savons que cet état est totalement symétrique et donc appartient à la représentation Γ_1 du groupe de symétrie C_{3v}. Considérons maintenant une transition induite par le champ éléctromagnetique à l'ordre de dipôle, vers un état à plus haute énergie $\psi^{(2)}$ qui transforme comme la représentation Γ_2. L'opérateur de dipôle $\mathbf{d} = (d_x, d_y, d_z)$ est un vecteur à trois dimensions dont les composantes sont des opérateurs qui transforment comme les composantes d'un vecteur dans l'espace cartésien. Pour un système ayant symétrie C_{3v}, nous savons qu'un tel vecteur se décompose en la composante d_z, qui appartient à la représentation Γ_1, et les deux composantes (d_x, d_y), qui transforment comme les fonctions de base de Γ_3. L'élément de matrice $\langle \psi^{(2)} | \mathbf{d} | \psi^{(1)} \rangle$ est donc donné par une constante $\langle \psi^{(2)} | \xi^{(2)} \rangle$, où $|\xi^{(2)}\rangle$ est un vecteur qui transforme comme Γ_2 qui apparait dans la décomposition de $\mathbf{d}|\psi^{(1)}\rangle$.

Mais nous savons que $\mathbf{d}|\psi^{(1)}\rangle$ appartient à la représentation $(\Gamma_1 \oplus \Gamma_3) \times \Gamma_1 = \Gamma_1 \oplus \Gamma_3$. Aucune composante de ce vecteur aura donc symétrie Γ_2 et l'élément de matrice qu'on cherche est nul. On dit qu'une telle transition est interdite à l'ordre de dipôle. Cette règle de sélection a été dérivée exclusivement par l'application de la théorie des groupes et montre la portée de cette méthode.

Chapitre 5

Le groupe orthogonal et les groupes ponctuels

Dans ce chapitre nous allons décrire les propriétés du groupe des rotations et des rotations-inversions en trois dimensions. Nous allons ensuite dériver les sous-groupes finis dit *groupes ponctuels cristallographiques* qui représentent les symétries de rotation des cristaux et des molécules.

5.1 Le groupe orthogonal en trois dimensions

Le groupe orthogonal est composé par toutes les transformations linéaires d'un vecteur en 3 dimensions qui conservent la norme du vecteur. Avant de discuter en détail ce groupe, nous allons établir la nomenclature qui sera utilisée par la suite. Considérons les transformations linéaires des vecteurs de la forme $\xi = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \mathbb{C}^n$, où x_1, $x_2, \ldots, x_n$ sont des nombres complexes. Une transformation linéaire A prend la forme

$$\xi \to \xi' = A\xi \,, \tag{5.1}$$

où les composantes de ξ' sont

$$x'_i = \sum_j A_{ij} x_j \,. \tag{5.2}$$

Donc A est représentée par une matrice $n \times n$ $A = (A_{ij})$. L'ensemble de toutes les matrices $n \times n$ non-singulières (c'est à dire que les inverses sont définies)

forme évidemment un groupe qui est appelé le *groupe général linéaire* en n dimensions. Il est noté par $GL(n)$. Le *groupe spécial linéaire* $SL(n)$ est le sous-groupe de $GL(n)$ qui contient les matrices ayant déterminant égal à 1.

Le groupe unitaire en n dimensions, indiqué par $U(n)$, est composé de toutes les matrices U telles que

$$\langle U\xi|U\xi\rangle = \langle\xi|\xi\rangle \tag{5.3}$$

pour chaque $\xi \in \mathbb{C}^n$. En appliquant cette définition aux vecteurs $\xi + \eta$ et $\xi + i\eta$, nous pouvons déduire que, pour ξ et η arbitraires, nous avons

$$\langle U\xi|U\eta\rangle = \langle\xi|\eta\rangle \tag{5.4}$$

et, donc, que $U^\dagger U = I$, la matrice identité. Il s'ensuit que le déterminant de U est un nombre complexe ayant module unitaire et

$$U^\dagger = U^{-1}\,. \tag{5.5}$$

Le *groupe spécial unitaire* $SU(n)$ est le sous-groupe de $U(n)$ qui contient toutes les matrices ayant déterminant égal à 1.

Le groupe orthogonal en n dimensions $O(n)$ est défini comme $U(n)$, mais il contient les transformations linéaires des vecteurs réels à n dimensions dans l'espace $\mathbb{R}^n$. Donc $O(n)$ contient des matrices non-singulières à composantes réelles. Si R est un élément de $O(n)$, alors les composantes de $\xi' = R\xi$ sont

$$x'_i = \sum_j R_{ij}x_j\,. \tag{5.6}$$

Dans ce cas, l'invariance de la norme du vecteur implique

$$\sum_i (x'_i)^2 = \sum_{jk}\sum_i R_{ij}R_{ik}x_j x_k = \sum_j x_j^2\,, \tag{5.7}$$

pour chaque vecteur $\xi = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$. Il est donc nécessaire que

$$R_{ij}R_{ik} = \delta_{jk} \tag{5.8}$$

ou

$$R^t R = I\,. \tag{5.9}$$

Il s'ensuit que le déterminant de R ne peut prendre que le valeurs ± 1 et

$$R^{-1} = R^t\,. \tag{5.10}$$

Une matrice qui satisfait à une telle condition est dite une matrice orthogonale. Le *groupe spécial orthogonal* $SO(n)$ est le sous-groupe de $O(n)$ composé par les matrices ayant déterminant égal à 1.

Nous pouvons maintenant discuter plus en détail le groupe orthogonal en trois dimensions $O(3)$. Considérons trois vecteurs orthonormés $\hat{\mathbf{e}}_1$, $\hat{\mathbf{e}}_2$ et $\hat{\mathbf{e}}_3$ dans l'espace à trois dimensions. L'orthogonalité implique que

$$\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j = \delta_{ij} \,. \tag{5.11}$$

Les vecteurs sont orientés selon la règle de la main droite, c'est à dire

$$\hat{\mathbf{e}}_1 \cdot (\hat{\mathbf{e}}_2 \times \hat{\mathbf{e}}_3) = 1 \,. \tag{5.12}$$

Une transformation orthogonale $R \in O(3)$ conserve la norme de tous les vecteurs et, par conséquent, les angles entre vecteurs. En effet, considérons le vecteur $\mathbf{x} + \mathbf{y}$. Puisque sa norme est conservée, nous avons

$$|R(\mathbf{x} + \mathbf{y})|^2 = |R\mathbf{x} + R\mathbf{y}|^2 = |\mathbf{x} + \mathbf{y}|^2 \,. \tag{5.13}$$

Cela est vrai pour $\mathbf{x}$ et $\mathbf{y}$ arbitraires, ce qui implique nécessairement

$$(R\mathbf{x}) \cdot (R\mathbf{y}) = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} \,, \tag{5.14}$$

d'où la conservation de l'angle entre les deux vecteurs. Donc, en définissant

$$\hat{\mathbf{e}}'_i = R\hat{\mathbf{e}}_i \,, \tag{5.15}$$

nous avons que les trois vecteurs $\hat{\mathbf{e}}'_1$, $\hat{\mathbf{e}}'_2$ et $\hat{\mathbf{e}}'_3$, comme les anciens $\hat{\mathbf{e}}_1$, $\hat{\mathbf{e}}_2$ et $\hat{\mathbf{e}}_3$, sont orthonormés. Nous pouvons exprimer un vecteur arbitraire dans la base formée par les trois vecteurs $\hat{\mathbf{e}}_1$, $\hat{\mathbf{e}}_2$ et $\hat{\mathbf{e}}_3$

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{3} x_i \hat{\mathbf{e}}_i \,. \tag{5.16}$$

Le vecteur transformé devient

$$\mathbf{x}' = R\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{3} x_i \hat{\mathbf{e}}'_i \,. \tag{5.17}$$

Les composantes de $\mathbf{x}'$ dans la nouvelle base $\hat{\mathbf{e}}'_1$, $\hat{\mathbf{e}}'_2$ et $\hat{\mathbf{e}}'_3$ sont donc les mêmes que celles de $\mathbf{x}$ dans l'ancienne base. Nous cherchons les composantes du

vecteur transformé $\mathbf{x}'$ par rapport à l'ancienne base. Elles sont données par les produits scalaires du vecteur avec les trois vecteurs de la base

$$x'_i = \mathbf{x}' \cdot \hat{\mathbf{e}}_i = \sum_{j=1}^{3} x_j \hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}'_j = \sum_{j=1}^{3} R_{ij} x_j \,, \tag{5.18}$$

ce qui établit la loi de transformation des composantes. Pour la dernière égalité nous avons utilisé la relation

$$R_{ij} = \hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}'_j \,, \tag{5.19}$$

qui suit facilement de la définition (5.15). La loi de transformation des vecteurs de base est aussi dérivée immédiatement de (5.15)

$$\hat{\mathbf{e}}'_i = \sum_{j=1}^{3} \hat{\mathbf{e}}_j R_{ji} \,. \tag{5.20}$$

Calculons maintenant le produit $\hat{\mathbf{e}}'_1 \cdot (\hat{\mathbf{e}}'_2 \times \hat{\mathbf{e}}'_3)$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{e}}'_1 \cdot (\hat{\mathbf{e}}'_2 \times \hat{\mathbf{e}}'_3) &= \sum_{ijk} R_{i1} R_{j2} R_{k3} \hat{\mathbf{e}}_i \cdot (\hat{\mathbf{e}}_j \times \hat{\mathbf{e}}_k) \\ &= \sum_{ijk} \epsilon_{ijk} R_{i1} R_{j2} R_{k3} \\ &= \det(R) \,, \end{aligned} \tag{5.21}$$

où nous avons introduit le tenseur de Ritchie ϵ_{ijk} qui est égal à 1 si (i,j,k) sont une permutation paire de (1,2,3), à -1 si la permutation est impaire, et zéro autrement. Nous avons donc montré que les vecteurs $\hat{\mathbf{e}}'_1$, $\hat{\mathbf{e}}'_2$ et $\hat{\mathbf{e}}'_3$ sont ordonné selon la règle de la main droite ou gauche, si le déterminant de R est respectivement 1 ou -1. En particulier, l'opérateur d'inversion

$$i : \quad \mathbf{x} \to \mathbf{x}' = -\mathbf{x} \,, \tag{5.22}$$

représenté par la matrice

$$R_i = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \,, \tag{5.23}$$

ayant déterminant égal à -1, transforme une base orientée selon la main droite en une autre orientée selon la main gauche. Etant donné une transformation $R \in O(3)$ donc, deux cas sont possibles. (i) $\det(R) = +1$ et donc R est aussi un élément de $SO(3)$. (ii) $\det(R) = -1$ et donc R est donnée par un élément de $SO(3)$ multiplié par R_i.

Considérons maintenant les rotations autour d'un point fixe. Ces rotations forment un groupe. Ce groupe est isomorphe à $SO(3)$. Pour le démontrer nous devons montrer que chaque rotation est représentée par un élément de $SO(3)$ et que à chaque matrice orthogonale de $SO(3)$ correspond une rotation. Une rotation d'un angle ϕ autour d'un axe parallel au vecteur unitaire $\hat{\mathbf{e}}$ qui passe par le point d'origine O, transforme le vecteur $\mathbf{x}$ en le vecteur $\mathbf{x}'$ donné par

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x}\cos\phi + \hat{\mathbf{e}}(\mathbf{x}\cdot\hat{\mathbf{e}})(1-\cos\phi) + (\hat{\mathbf{e}}\times\mathbf{x})\sin\phi\,. \tag{5.24}$$

Cette expression peut être déduite facilement à partir d'une représentation graphique comme celle montrée en figure 5.1. Cette transformation est clai-

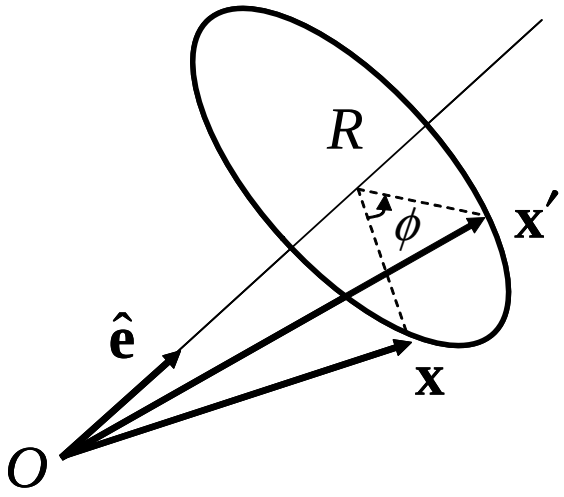

FIG. 5.1 – *Schéma d'une rotation d'un angle ϕ d'un vecteur* $\mathbf{x}$.

rement linéaire et de la forme (5.18) avec composantes

$$R_{ij}(\phi) = \delta_{ij}\cos\phi + e_i e_j(1-\cos\phi) - \sum_k \epsilon_{ijk}e_k\sin\phi\,. \tag{5.25}$$

Les éléments $R_{ij}(\phi)$ forment une matrice orthogonale, puisque $R_{ij}(\phi) = R_{ji}(-\phi)$ et donc la matrice inverse est égale à la matrice transposée. Son

déterminant est égal à 1. Nous pouvons le démontrer comme suit. Pour $\phi = 0$ on a clairement $\det(R(0)) = 1$. Or, $\det(R(\phi))$ est une fonction continue de la variable ϕ. S'il existe un angle pour lequel $\det(R(\phi)) = -1$, alors la fonction $\det(R(\phi))$, par continuité, doit prendre toutes les valeurs entre 1 et -1. Cela est impossible puisque le déterminant d'une matrice orthogonale ne peut que prendre les deux valeurs ± 1.

Il nous reste à prouver que tous les éléments de $SO(3)$ représentent des rotations. Soit $R \in SO(3)$. Nous montrons d'abord qu'il existe au moins une direction $\hat{\mathbf{e}}_3$ invariante sous R, c'est à dire

$$R\hat{\mathbf{e}}_3 = \hat{\mathbf{e}}_3 \,. \tag{5.26}$$

Pour le prouver, considérons le problème aux valeurs propres

$$R\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x} \,. \tag{5.27}$$

Les valeurs propres λ sont les solutions de l'équation séculaire

$$\det(R - \lambda I) = 0 \,. \tag{5.28}$$

Puisqu'il s'agit d'une équation de troisième degré à coefficients réels en λ, elle a au moins une solution réelle. Soit λ_3 cette solution et $\hat{\mathbf{e}}_3$ le vecteur propre correspondant. Puisque R est une matrice orthogonale, nous avons que

$$(R\hat{\mathbf{e}}_3) \cdot (R\hat{\mathbf{e}}_3) = \lambda_3^2 \hat{\mathbf{e}}_3 \cdot \hat{\mathbf{e}}_3 = 1 \,, \tag{5.29}$$

ce qui implique $\lambda_3 = \pm 1$. Le produit des trois solutions $\lambda_1\lambda_2\lambda_3$ est le déterminant de la matrice et doit donc être égal à 1. Si λ_1 et λ_2 sont réels, alors ils doivent valoir 1 ou -1. Deux cas sont possibles: (i) $\lambda_1 = \lambda_2 = \pm 1$ et $\lambda_3 = 1$; (ii) $\lambda_1 = -\lambda_2 = \pm 1$ et $\lambda_3 = -1$. Dans les deux cas nous avons trouvé une valeur propre égale à $+1$. Si par contre λ_1 et λ_2 sont complexes, alors nous devons avoir $\lambda_2 = \lambda_1^*$ pour que le déterminant soit réel. Dans ce dernier cas, la condition sur le déterminant nous donne $|\lambda_1|^2\lambda_3 = 1$, ce qui implique $\lambda_3 = +1$. L'existence de la direction invariante $\hat{\mathbf{e}}_3$ est donc prouvée. Nous choisissons maintenant deux vecteurs unitaires $\hat{\mathbf{e}}_1$ et $\hat{\mathbf{e}}_2$, orthogonaux l'un par rapport à l'autre et les deux par rapport à $\hat{\mathbf{e}}_3$, orientés selon la règle de la main droite. Les trois vecteurs $R\hat{\mathbf{e}}_1$, $R\hat{\mathbf{e}}_2$, et $R\hat{\mathbf{e}}_3 = \hat{\mathbf{e}}_3$ sont aussi orientés selon la main droite et les premiers deux se trouvent dans le plan défini par $\hat{\mathbf{e}}_1$ et $\hat{\mathbf{e}}_2$. Soit ϕ l'angle entre $\hat{\mathbf{e}}_1$ et $R\hat{\mathbf{e}}_1$ (il est aussi l'angle entre $\hat{\mathbf{e}}_2$ et $R\hat{\mathbf{e}}_2$, suite à l'orthogonalité de la matrice). Les angles formés par $\hat{\mathbf{e}}_1$ et $R\hat{\mathbf{e}}_2$, et par $\hat{\mathbf{e}}_2$ et $R\hat{\mathbf{e}}_1$ sont

respectivement $\phi \pm \pi/2$. Il s'ensuit que

$$\begin{aligned} R\hat{\mathbf{e}}_1 &= \hat{\mathbf{e}}_1 \cos\phi + \hat{\mathbf{e}}_2 \sin\phi \\ R\hat{\mathbf{e}}_2 &= -\hat{\mathbf{e}}_1 \sin\phi + \hat{\mathbf{e}}_2 \cos\phi \,. \end{aligned} \tag{5.30}$$

La matrice R représente donc une rotation d'un angle ϕ autour de $\hat{\mathbf{e}}_3$. Cela preuve l'isomorphisme entre $SO(3)$ et le groupe des rotations propres en trois dimensions.

Les éléments de la matrice $R_{lm}(\phi)$ [Eq. (5.25] peuvent être exprimés en termes de trois matrices Hermitiques

$$\begin{aligned} J_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} , \\ J_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} , \\ J_3 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} . \end{aligned} \tag{5.31}$$

Ces matrices obéissent aux lois de commutation

$$\begin{aligned} [J_l,J_m] &= J_l J_m - J_m J_l \\ &= i \sum_k \epsilon_{lmk} I_k \,. \end{aligned} \tag{5.32}$$

L'élément lm de la matrice

$$\vec{J} \cdot \hat{e} = \sum_{k=1}^{3} J_k e_k \tag{5.33}$$

est donné par

$$(\vec{J} \cdot \hat{e})_{lm} = -i \sum_k \epsilon_{lmk} \,. \tag{5.34}$$

Ici nous avons formellement défini un « vecteur » $\vec{J} = \{J_1,J_2,J_3\}$ dont les composantes sont les trois matrices définies en (5.31). Cette définition nous

permet d'écrire sous forme compacte les combinaisons linéaires de ces matrices comme par exemple l'expression (5.33). D'après (5.34) nous déduisons que

$$\begin{aligned}(\vec{J}\cdot\hat{e})^2_{lm} &= -\sum_{n,k,p}\epsilon_{lnk}e_k\epsilon_{nmp}e_p \\ &= -\sum_{n,k,p}\epsilon_{kln}e_k\epsilon_{mpn}e_p \\ &= \sum_{k,p}(\delta_{kp}\delta_{lm}-\delta_{km}\delta_{lp})e_ke_p \\ &= \delta_{lm}-e_le_m\,, \end{aligned} \tag{5.35}$$

où nous avons utilisé les propriétés du tenseur de Ritchie ϵ_{ijk}, et

$$(\vec{J}\cdot\hat{e})^3 = \vec{J}\cdot\hat{e}\,. \tag{5.36}$$

Ces deux derniers résultats nous permettent d'écrire la matrice, dont les éléments sont donnés par (5.25), dans la forme suivante

$$\begin{aligned}R_{\hat{e}}(\phi) &= I - i\vec{I}\cdot\hat{e}\sin(\phi) - (\vec{I}\cdot\hat{e})^2(1-\cos(\phi)) \\ &= \exp(-i\phi\vec{J}\cdot\hat{e})\,, \end{aligned} \tag{5.37}$$

où nous avons utilisé le développement en série de Taylor de l'exponentiel. Cette expression en termes d'une fonction exponentielle permet d'appeler les matrices J_1, J_2, J_3 les « générateurs » des rotations en trois dimensions.

5.2 Les sous-groupes de $O(3)$

Les transformations du groupe orthogonal sont souvent indiquées par des symboles spéciaux. Les deux notations couramment utilisées sont la notation de Schönflies et la notation internationale.

Dans la notation de Schönflies les symboles suivants sont utilisés:

(i) C_n indique une rotation d'un angle $2\pi/n$. Si l'axe de rotation n'est pas clair du contexte, alors il faut le spécifier. S'il n'est pas spécifié, normalement il s'agit de l'axe $\mathbf{z}$.

(ii) i indique l'inversion par rapport à l'origine: $\mathbf{x} \to \mathbf{x}' = -\mathbf{x}$.

(iii) σ indique un miroir par rapport à un plan. Souvent on distingue plusieurs types de miroirs, selon leur relation avec les autres éléments de symétrie de l'objet qui nous intéresse. Un miroir dont le plan contient l'axe de plus haute symétrie est appelé un miroir *vertical* et il est indiqué par σ_v. Un miroir dont le plan est orthogonal à l'axe de plus haute symétrie est appelé un miroir *horizontal* et indiqué par σ_h. Finalement, un miroir dont le plan contient l'axe de plus haute symétrie et en même temps la bissectrice entre deux axes C_2 orthogonaux à l'axe de haute symétrie, s'appelle un miroir *diédral* et il est indiqué par σ_d.

(iv) S_n indique une rotation impropre d'un angle $2\pi/n$. Il s'agit d'une rotation de $2\pi/n$ autour d'un axe $\hat{\mathbf{e}}$, suivie par un miroir dont le plan est orthogonal à $\hat{\mathbf{e}}$. Donc

$$S_n = \sigma_h C_n = C_n \sigma_h \,, \tag{5.38}$$

puisque ces deux opérations commutent. Nous remarquons que $i = S_2$.

Dans la notation internationale (que nous n'utiliserons pas mais qui est souvent utilisé dans la littérature), l'opération C_n est indiquée simplement par le symbole n et un miroir par m. Une opération de rotation-inversion, du type iC_n selon la notation de Schönflies, est indiquée par $\bar{n}$. Donc $i = \bar{1}$. Un système qui a un axe de symétrie principal $\hat{\mathbf{e}}$ avec symétrie C_n et des axes de symétrie C_2 orthogonaux à $\hat{\mathbf{e}}$ est indiqué par $n2$. Les combinaisons (C_n,σ_h) et (C_n,σ_v) sont indiquées respectivement par $\frac{n}{m}$ et nm.

Nous allons énoncer par la suite les règles de commutation entre transformations appartenant à $O(3)$, ainsi que de théorèmes d'appartenance aux classes de conjugaison. Ces propriétés seront utiles pour l'étude des représentations irréductibles des groupes de rotations et peuvent être facilement déduites de (5.37).

Théorème. Les seules paires R_1, R_2 d'opérations appartenant à $O(3)$, telles que $R_1 R_2 = R_2 R_1$, sont:

- Deux rotations autour du même axe.
- Deux miroirs σ par rapport à des plans orthogonaux.
- Deux rotations de π (180 degrés) autour d'axes orthogonaux.
- Une rotation et un miroir σ par rapport au plan othogonal à l'axe de la rotation.
- L'inversion i et un élément quelconque de $O(3)$.

Il faut quand même remarquer que ces règles ne sont valable que pour des rotations appliquées à des fonctions de la position $\mathbf{x}$ ainsi que à des champs

vecteurs ou tenseurs. Nous verrons par la suite qu'elles ne s'appliquent pas par contre aux « spineurs » , c'est à dire les vecteurs de l'espace de Hilbert qui décrit le degré de liberté de spin d'un système quantique.

Théorème. Soit G un groupe de rotations. Deux rotations $R(\phi,\hat{e})$ et $R(\phi',\hat{e}')$ sont dans la même classe de conjugaison si $\phi = \phi'$ et il existe une rotation $R(\theta,\hat{n}) \in G$ telle que $\hat{e}' = R(-\theta,\hat{n})\hat{e}$.

corollaire. Soit G un groupe de rotations. Deux rotations $R(\phi,\hat{e})$ et $R(-\phi,\hat{e})$ sont dans la même classe de conjugaison s'il existe une rotation $R(\theta,\hat{n}) \in G$ telle que $-\hat{e} = R(-\theta,\hat{n})\hat{e}$.

corollaire. Soit $G = SO(3)$. Toutes les rotations $R(\phi,\hat{e})$, pour ϕ donné et $\hat{e}$ arbitraire, sont dans la même classe de conjugaison. Egalement, les rotations $R(-\phi,\hat{e}) = R(\phi, -\hat{e})$ sont dans la même classe. Nous pouvons donc résumer cette propriété en disant que toutes les rotations ayant le même $|\phi|$ appartiennent à la même classe.

Nous pouvons maintenant décrire les principaux groupes finis qui interviennent dans la physique du solide et moléculaire.

Groupes C_n. Il s'agit des groupes cycliques, générés par une rotation de $2\pi/n$ autour d'un axe donné. Ils ont donc la forme

$$\{E, C_n, C_n^2, \ldots, C_n^{n-1}\}$$

où, évidemment, $E = C_n^n$ est l'opérateur identité. Ils sont indiqués par C_n, c'est à dire le même symbole utilisé pour indiquer une opération de rotation de $2\pi/n$. Il faut donc faire attention, mais la plupart des fois la distinction peut être déduite du contexte. Dans la notation de Schoenflies ces groupes sont simplement indiqués par n (ce qui crée encore plus de confusion!).

Groupes C_{nv}. Il s'agit des groupes contenant les opérations C_n et n miroirs σ_v par rapport à des plans verticaux, qui contiennent donc l'axe de rotation. Ils ont la forme

$$\{E, C_n, C_n^2, \ldots, C_n^{n-1}, \sigma_{v1}, \ldots, \sigma_{vn}\}$$

Il est clair que la composition d'un miroir σ_{vj} avec une rotation C_n^l donne encore un miroirs σ_{vk}. Le groupe C_{3v} toujours utilisé dans ces notes en tant qu'exemple, appartient à cette catégorie.

Groupes C_{nh}. Il s'agit des groupes générés par une rotation C_n et un miroir σ_h par rapport donc à un plan othogonale à l'axe C_n. Remarquez que ces groupes ne contiennent pas que des opérations C_n^l et σ_h, puisque la composition de ces deux types d'opérations donne lieu à des rotations impropres S_m. Par exemple, $S_2 = \sigma_h C_2 = C_2\sigma_h = i$. Ceci implique que pour n pair l'inversion i est contenue dans C_{nh}.

Groupes S_n. Il s'agit des groupes générés par une rotation impropre S_n. Encore une fois il faut distinguer entre le groupe et l'opérations, les deux malheureusement indiqués avec le même symbole. Puisque $S_n = \sigma_h C_n = C_n\sigma_h$, alors $S_n^2 = C_n^2$, $S_n^n = E$ pour n pair, et $S_n^n = \sigma_h$ pour n impair. Il faut donc faire attention puisque, pour n impair, les groupes S_n coïncident avec les groupes C_{nh}, puisque ils contiennent $\sigma_h = S_n^n$ et $C_n = \sigma_h S_n$. Par contre, pour n pair, S_n n'est pas le même groupe que C_{nh}, mais contient le groupe cyclique $C_{(n/2)}$ en tant que sous-groupe.

Groupes D_n. Il s'agit des groupes générés par une rotation principale C_n par rapport à un axe donné, et n rotations C_2 par rapport à des axes orthogonaux à l'axe principale de la rotation C_n. Nous pouvons mieux comprendre la nature de ces groupes en remarquant qu'ils représentent les groupes des symétries propres (rotations propres) des polygones réguliers à n cotés en trois dimensions.

Groupes D_{nd}. Il s'agit des groupes composés par les éléments de D_n plus n miroir dihédraux σ_d. Nous rappelons qu'un miroir et dit dihédral lorsque le plan du miroir bissecte l'angle entre deux opérations C_2 adjacentes. Les groupes D_{nd} sont les groupes de symétrie (incluant aussi les rotations impropres) des polygones réguliers à n cotés en trois dimensions.

Groupes D_{nh}. Il s'agit des groupes composés par les éléments de D_n plus un miroir σ_h.

Groupes cubiques. Il y a cinq groupes dit cubiques. Ces groupes ont une importance fondamentale en physique du solide puisque beaucoup de solides cristallins ont un des ces groupes comme groupe de symétrie ponctuelle de rotations. Commençons par le groupe T. Il s'agit du groupe des rotations propres de symétrie d'un tétraèdre par rapport à son centre géométrique. Le tétraèdre est représenté en Figure 5.2. Nous voyons qu'il est inscrit dans un

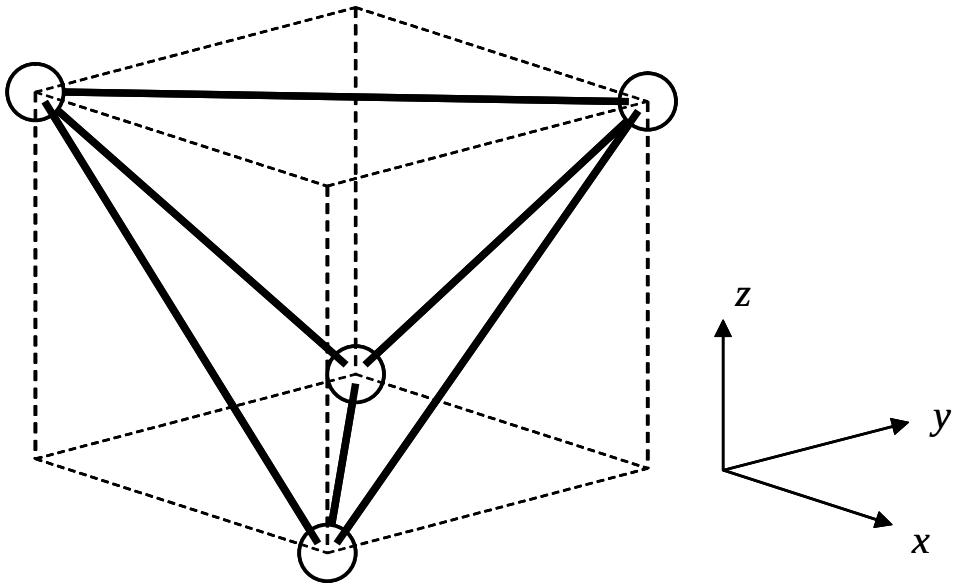

FIG. 5.2 – *Schéma d'un tétraèdre.*

cube, ce qui explique le nom de cette catégorie de groupes. Nous pouvons imaginer que les vertex du tétraèdre sont quatres atomes qui constituent la cellule fondamentale d'un cristal (le diamant par exemple). Les six arêtes du tétraèdre sont les diagonales des faces du cube. Les rotations qui laissent le tétraèdre invariant sont l'identité E; quatre rotations de $2\pi/3$ autour des axes $\hat{e}_1 = 3^{-1/2}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$, $\hat{e}_2 = 3^{-1/2}(\hat{x} - \hat{y} - \hat{z})$, $\hat{e}_3 = 3^{-1/2}(-\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$, et $\hat{e}_4 = 3^{-1/2}(-\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$; les inverses de ces quatres rotations, qui correspondent aussi à des rotations de $4\pi/3$; et trois rotations de π autour des axes $\hat{x}$, $\hat{y}$, et $\hat{z}$. Typiquement, on indique la composition de ce groupe par

$$T = \{E,\, 4C_3,\, 4C_3^2,\, 3C^2\}\,,$$

où nous avons souligné la structure en classes. Le deuxième groupe cubique est T_h. Il est généré par les éléments de T plus l'inversion i. Sa structure est

$$T_h = \{E,\, 4C_3,\, 4C_3^2,\, 3C_2,\, i,\, 4S_6^{-1},\, 4S^6,\, 3\sigma_h\}\,,$$

où $S_6^{-1} = iC_3$, $S_6 = iC_3^2$, et $\sigma_h = iC_2$. Remarquez que le tétraèdre n'est pas invariant par toutes les opérations de T_h. Le groupe T_d, par contre, est le groupe des symétries, propres et impropres, du tétraèdre, et il décrit la symétrie de beaucoup de solides cristallins. Il contient les éléments de T plus six plans

miroir dihédraux qui bissectent les plans $(\hat{y},\hat{z})$, $(\hat{z},\hat{x})$, $(\hat{x},\hat{y})$, respectivement; plus six rotations impropres S_4, autour des axes $\hat{x}$, $\hat{y}$, et $\hat{z}$. Ces nouvelles opérations forment les classes $6\sigma_d$ et $6S_4$. Puisque ces nouvelles opérations peuvent faire changer de signe aux axes $\hat{e}_j$, $(j = 1,\ldots,4)$, les opérations C_3 et C_3^2 appartiennent maintenant à la même classe, contrairement au groupe T. La structure en classes du groupe T_d est donc

$$T_d = \{E,\, 8C_3,\, 3C_2,\, 6\sigma_d,\, 6S_4\}\,.$$

Le groupe O es le groupe de rotations propres qui laissent un cube invariant. Ces opérations sont l'identité E; des rotations C_3 autour des axes $\hat{e}_j$, $(j = 1,\ldots,4)$; des rotations C_2 autour des axes $\hat{x}$, $\hat{y}$, et $\hat{z}$; des rotations C_2 autour des axes $(\hat{x}+\hat{y})/\sqrt{2}$, $(\hat{x}-\hat{y})/\sqrt{2}$, $(\hat{y}+\hat{z})/\sqrt{2}$, $(\hat{y}-\hat{z})/\sqrt{2}$, $(\hat{z}+\hat{x})/\sqrt{2}$, et $(\hat{z}-\hat{x})/\sqrt{2}$; des rotations C_4 autour des axes $\hat{x}$, $\hat{y}$, et $\hat{z}$. Ces dernières génèrent évidemment aussi les $C_2 = C_4^2$, mais ne sont pas dans la même classe. La structure en classes est donc

$$O = \{E,\, 8C_3,\, 3C_2,\, 6C_2',\, 6C_4\}\,.$$

Nous concluons cette liste par le groupe O_h généré par les éléments du groupe O plus l'inversion i. C'est le groupe complèt (rotations propres et impropres) des symétries d'un cube. Puisque i commute avec toutes les autres opérations, la structure en classes est dedoublé par rapport à la structure en classes de O:

$$O_h = \{E,\, 8C_3,\, 3C_2,\, 6C_2',\, 6C_4, i,\, 8S_6,\, 3\sigma_h,\, 6\sigma_d,\, 6S_4\}\,.$$

Les représentations irréductibles et les tables des caractères de tous ces groupes se trouvent dans la plupart des ouvrages sur les applications à la physique de la théorie des groupes.

Nous concluons ce chapitre par l'énonciation d'un théorème fondamental en physique du solide. C'est la *restriction cristallographique*. **Théorème (restriction cristallographique)**. Dans un solide cristallin périodique en trois dimensions, les seules rotations propres de symétrie ponctuelle possibles sont des C_n avec $n = 2,3,4$, et 6.

Ce théorème est très important puisque il limite les opérations de symétrie ponctuelle possibles à ces rotations, les miroirs, et les rotations impropres générées par ces deux. Nous ne donnons pas ici la preuve de ce théorème, qui

C_n	$n = 1,2,3,4,6$
C_{nh}	$n = 1,2,3,4,6$
C_{nv}	$n = 2,3,4,6$
S_n	$n = 2,4,6$
D_n	$n = 2,3,4,6$
D_{nh}	$n = 2,3,4,6$
D_{nd}	$n = 2,3$
T	
T_d	
T_h	
O	
O_h	

TAB. 5.1 – *Les 32 groupes ponctuels de symétrie des cristaux périodiques.*

découle de la périodicité du cristal dans les trois dimensions. Nous remarquons toutefois qu'une conséquence importante de ce théorème est que pour un solide cristallin, seul 32 groupes de symétrie ponctuelle sont possibles. C'est les 32 groupes ponctuels. Nous les indiquons dans la table qui suit.