JOURNAL DE LA SOCIETE CHIMIQUE DE TUNISIE. 1979 N°1 p 29-42.

EXEMPLE D'APPLICATION DE LA THEORIE DES GROUPES A L'ETUDE D'UN GROUPE PONCTUEL PLAN

Hédi ZARROUK, Abdelhamid SAYARI et Yves BILLIET *
Département de Chimie - Faculté des Sciences de Tunis
Campus Universitaire El Menzah.

I. INTRODUCTION

En physique comme en chimie, il est souvent question de la théorie des groupes. Cette branche des Mathématiques est fort utile : elle permet de comprendre de nombreux phénomènes rencontrés par exemple en diffraction, en spectroscopie, en cristallochimie, en état solide, etc... Malheuresement cette théorie, dans sa formulation mathématique habituelle, est très abstraite. Elle paraît rebutante aux physiciens et aux chimistes ; ceux-ci ont généralement besoin d'un support concrêt pour saisir le sens des démonstrations de la théorie des groupes. Le but de cet article est justement de répondre à ce besoin par le biais de la symétrie.

Dans un premier article, nous nous interesserons aux groupes finis en considérant la symétrie ponctuelle d'un objet plan ; dans un autre article, nous illustrerons les groupes infinis par la symétrie cristalline bidimensionnelle.

II. GENERALITES SUR LA SYMETRIE PONCTUELLE

Considérons un objet fini tel que celui constitué par les huit petits triangles de la figure 1. Nous voyons bien que cet objet est symétrique par rapport aux directions $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{a} + \vec{b}$ et $\vec{a} - \vec{b}$.

---

* Adresse actuelle : chimie et symetrie, Laboratoire de Chimie Inorganique Moléculaire, Université de Bretagne Occidentale 6 Avenue Le Gorgeu, 29283 Brest, France.

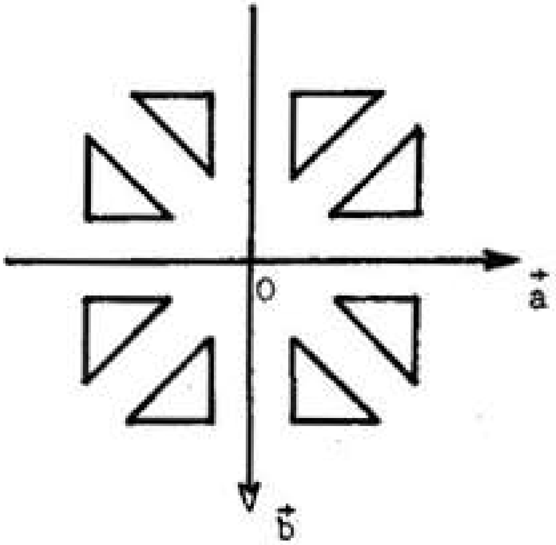


Fig. 1

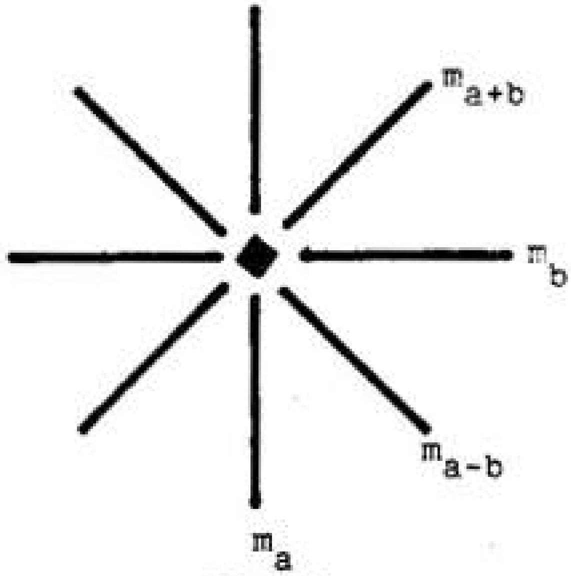


Fig. 2

Nous voyons aussi que cet objet se superpose à lui-même par les rotations d'angle $\pi/2$, π, $3\pi/2$, 2π autour de o. L'ensemble de ces huit opérations de symétrie constitue le groupe ponctuel de l'objet ; on dit groupe *ponctuel* car le *point* o, centre de l'objet, est invariant par chacune des opérations de symétrie considérées.

III. CONVENTIONS

Nous allons représenter les opérations de symétrie par des symboles et des graphes couramment employés en Cristallographie (1).

SYMBOLES

N^k designe une rotation d'angle $2\pi/N$ effectuée k fois successivement autour d'un même point du plan, dit axe N. Ainsi la rotation d'angle $\pi/2 = 2\pi/4$ est représentée par 4^1 ; celle d'angle $= 2\ (2\pi/4) = 2\pi/2$ est représentée par $4^2 = 2^1$; de même la rotation d'angle $3\pi/2=3(2\pi/4)$ est représentée par 4^3 ; enfin la rotation d'angle $2\pi = 4(2\pi/4) = 2(2\pi/2) = 2\pi/1$ a pour symbole $4^4 = 2^2 = 1^1$; on l'appelle identité car chaque point de l'espace demeure invariant par cette opération. Ces 4 rotations se font autour de l'axe 4 dont le support est le point o.

m_i^k désigne la symétrie par rapport à une ligne du plan perpendiculaire à la direction $\vec{i}$; cette symétrie, appelée miroir, est effectuée k fois successivement. Ainsi m_{a-b}^3 désigne le miroir dont le support est la direction $\vec{a} + \vec{b}$, perpendiculaire à $(\vec{a} - \vec{b})$; ce miroir est effectué 3 fois successivement.

GRAPHES

Le support de l'axe 4 sera représenté par un "carreau" tandis que les supports des miroirs seront représentés par des trais épais.
Le symbole cristallographique du groupe ponctuel de l'objet représenté par la figure 1 est 4 mm : le premier symbole désigne l'axe quaternaire, le premier m symbolise les miroirs m_a et m_b, le second m les miroirs m_{a+b} et m_{a-b} (nous verrons par la suite que ces miroirs sont deux à deux conjugués). Le graphe du groupe 4 m m est celui de la figure 2.

IV. ETUDE DU GROUPE H = 4 m m

IV. 1.TABLE ET SOUS-GROUPES DU GROUPE 4 m m

Le groupe H est écrit en extension de la manière suivante :

$4\ m\ m = \{4^1, 2^1, 4^3, m_a^1, m_b^1, m_{a+b}^1, m_{a-b}^1, 1^1\}$. Ce groupe comporte huit éléments, nous disons alors qu'il est d'ordre huit et nous écrivons Card H = 8. Il n'est pas cyclique : celà veut dire que nous ne pouvons pas l'engendrer à partir d'un seul de ses éléments. Il faudra prendre au moins deux éléments 4^1 et m_a^1 ou bien m_a^1 et 4^3 ou bien m_a^1 et m_{a+b}^1, etc... Pour des raisons qui proviennent du calcul matriciel,le produit de deux opérations de symétrie s'écrit de la droite vers la gauche : ainsi $m_a^1\ 4^1$ veut dire 4^1 suivi de m_a^1. Dans la table du groupe 4 m m sont indiqués tous les produits : l'entrée supérieure désigne la première opération, l'entrée de gauche la seconde.

TABLEAU DU GROUPE H = 4 m m

Γ	4^1	2^1	4^3	m_a^1	m_b^1	m_{a+b}^1	m_{a-b}^1	1^1
4^1	2^1	4^3	1^1	m_{a+b}^1	m_{a-b}^1	m_b^1	m_a^1	4^1
2^1	4^3	1^1	4^1	m_b^1	m_a^1	m_{a-b}^1	m_{a+b}^1	2^1
4^3	1^1	4^1	2^1	m_{a-b}^1	m_{a+b}^1	m_a^1	m_b^1	4^3
m_a^1	m_{a-b}^1	m_b^1	m_{a+b}^1	1^1	2^1	4^3	4^1	m_a^1
m_b^1	m_{a+b}^1	m_a^1	m_{a-b}^1	2^1	1^1	4^1	4^3	m_b^1
m_{a+b}^1	m_a^1	m_{a-b}^1	m_b^1	4^1	4^3	1^1	2^1	m_{a+b}^1
m_{a-b}^1	m_b^1	m_{a+b}^1	m_a^1	4^3	4^1	2^1	1^1	m_{a-b}^1
1^1	4^1	2^1	4^3	m_a^1	m_b^1	m_{a+b}^1	m_{a-b}^1	1^1

L'absence de symétrie totale par rapport à la grande diagonale de la table montre que 4 m m n'est pas un groupe commutatif.

EXEMPLE : $4^1 m_a^1 \neq m_a^1 4^1$

Le groupe 4 m m admet les sous-groupes suivants (voir fig. 3).

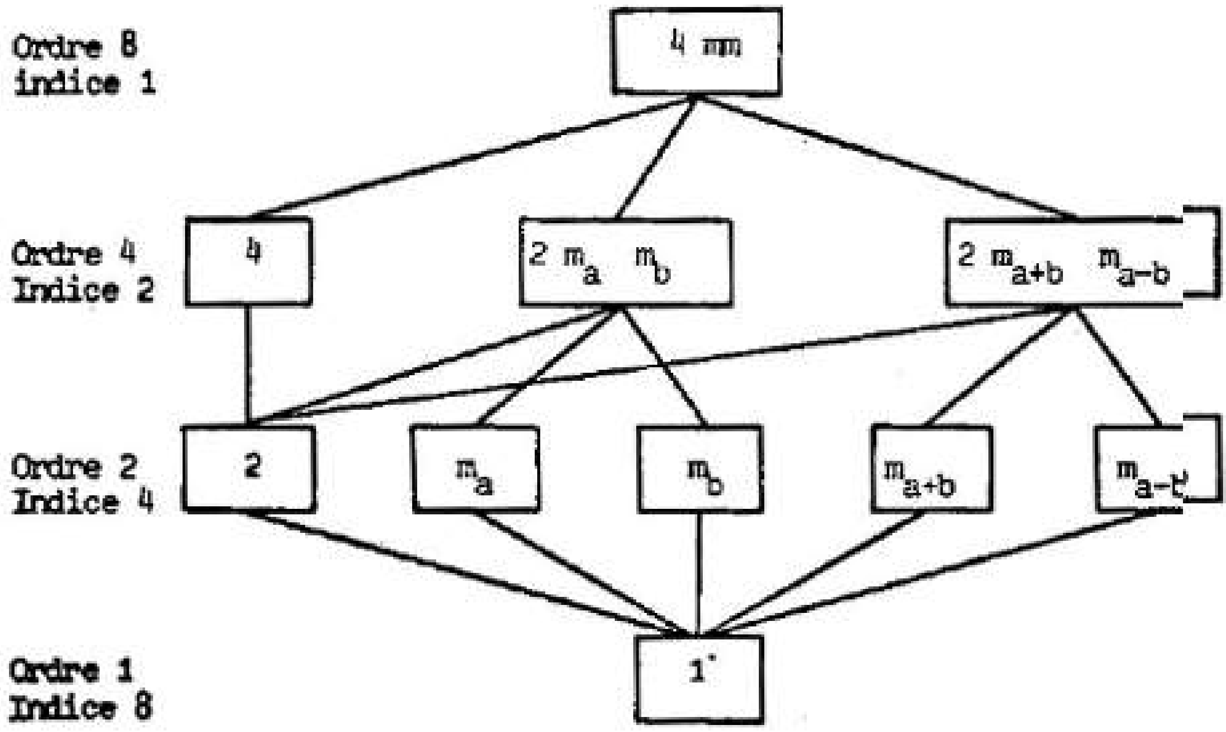


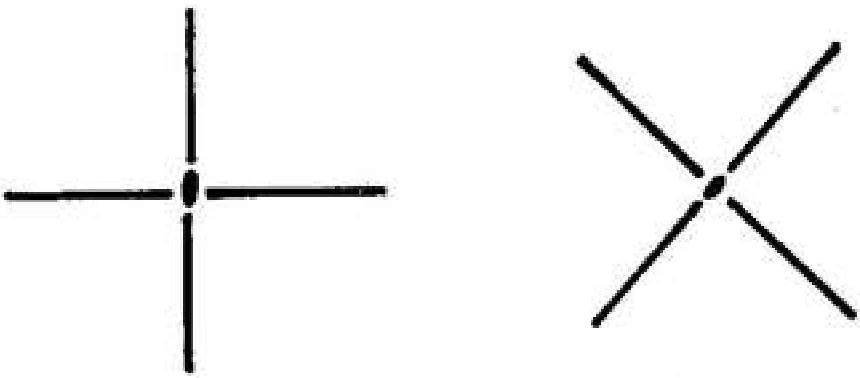
Fig. 3 - Diagramme des sous-groupes de 4 mm

En dehors du sous-groupe trivial 4 mm, tous les autres sous-groupes sont commutatifs. On dit aussi abéliens. A l'exception des deux sous-groupes de la forme 2 mm, tous les autres sont cycliques ; chacun de ces derniers peut être engendré à partir d'un seul élément appelé générateur. L'ordre de cet élément générateur est égal à l'ordre du groupe.

EXEMPLE : $4 = \{ 4^1, 2^1, 4^3, 1^1 \}$ est un sous-groupe cyclique qui peut être engendré par 4^1 ou par 4^3 : l'ordre est quatre dans chaque cas.

IV-2. ISOMORPHISME DES GROUPES

Les deux sous-groupes $\{ 2^1, m^1_a, m^1_b, 1^1 \}$ et $\{ 2^1, m^1_{a+b}, m^1_{a-b}, 1^1 \}$ sont isomorphes : ils peuvent entrer en correspondance entre eux. Ils ont le même ordre et leurs éléments jouent des rôles similaires dans les deux sous-groupes (voir fig. 4).



$2m_am_b$ $\qquad$ $2m_{a+b}m_{a-b}$

Fig. 4 - Les deux sous-groupes 2 mm

D'une façon générale, deux groupes H et H', respectivement munis des lois de composition internes T et $\perp$, sont dits isomorphes s'il existe une application f bijective qui à tout élément x de H fait correspondre un élément x' de H' : cette application doit, de plus, être régulière vis-à-vis des lois des deux groupes.

Soit : $f(x) = x'$, $f(y) = y'$ et $f(xTy) = (xTy)'$.

La régularité et la bijection s'expriment par :

$$(xTy)' = f(xTy) = f(x) \perp f(y) = x' \perp y'$$

Si les lois de composition internes sont les mêmes et si nous les notons multiplicativement, nous aurons :

$$(xy)' = f(xy) = f(x)\, f(y) = x'y'$$

Nous allons maintenant rassembler, dans le groupe 4 mm, les éléments de plusieurs façons différentes appelées partitions.

IV-3. PARTITION EN CLASSE D'EQUIVALENCE, NOTION DE CONJUGAISON

Un élément a d'un groupe H est dit conjugué (ou transformé canonique) par x d'un élément b de H si $a = x\,b\,x^{-1}$, x étant un élément de H. On dit aussi que a et b sont homologues ou semblables.

Si le groupe H est abélien, tout élément est son unique conjugué

$$x\,a\,x^{-1} = x\,x^{-1}a = a\,x^{-1}x = a$$

La conjugaison des éléments d'un groupe est une relation d'équivalence. Elle possède les trois propriétés suivantes :

- Reflexivité : tout élément est son propre conjugué par lui-même ou par l'élément neutre : $a = a\,a\,a^{-1}$ et $a = e\,a\,e^{-1}$.

- Symétrie : si a est conjugué de b par x, b est alors conjugué de a par x^{-1} : $a = x\,b\,x^{-1} \Rightarrow b = x^{-1}\,a\,(x^{-1})^{-1}$.

- Transitivité : si a est conjugué de b par x et b est conjugué de c par y, a est alors conjugué de c par x y. En effet :

$$a = x\,b\,x^{-1} \text{ et } b = y\,c\,y^{-1} \Rightarrow a = x\,(y\,c\,y^{-1})x^{-1}$$

d'après l'associativité dans H et les propriétés des produits, nous pouvons écrire :

$$a = (x\,y)\,c\,(y^{-1}\,x^{-1}) = (x\,y)\,c\,(x\,y)^{-1}$$

Dans H = 4 mm, il est aisé de vérifier, à l'aide de la table du groupe, que :

$$4^1 = m_a^1\,4^3\,m_a^1 \quad , \quad 4^1 = m_b^1\,4^3\,m_b^1 \quad , \quad m_a^1 = m_{a-b}^1\,m_b^1\,m_{a-b}^1$$

$$4^1 = m^1_{a+b}\ 4^3\ m^1_{a+b} \quad , \quad 4^1 = m^1_{a-b}\ 4^3\ m^1_{a-b} \quad , \quad m^1_{a+b} = 4^1\ m^1_{a-b}\ 4^3$$

$$m^1_a = 4^1\ m^1_b\ 4^3 \quad , \quad m^1_a = m^1_{a+b}\ m^1_b\ m^1_{a+b} \quad , \quad m^1_{a+b} = m^1_b\ m^1_{a-b}\ m^1_b$$

On constate sans difficulté que l'élément 2^1 est son unique conjugué par tous les éléments x de H :

$$2^1 = x^1\ 2^1\ x^{-1} \qquad \text{ou} \qquad 2^1\ x^1 = x^1\ 2^1$$

Donc 2^1 commute avec tous les éléments de H.

Cette notion de conjugaison définit dans le groupe H une partition en classesd'équivalence (ou classes de conjugaison). La classe de conjugaison d'un élément a de H est l'ensemble des éléments de H qui sont conjugués de a.

Dans 4 mm, nous venons d'établir une partition en cinq classes d'équivalence distinctes :

$$\{\ 4^1,\ 4^3\ \}\ ;\ \{\ m^1_a\ ,\ m^1_b\ \}\ ;\ \{\ m^1_{a+b},\ m^1_{a-b}\ \}\ ;\{\ 2^1\}\ ;\{\ 1^1\}$$

Les classes d'équivalence possèdent les propriétés suivantes :

- Les éléments d'une même classe d'équivalence ont le même ordre.

- Toutes les classes sont disjointes ; c'est à dire que l'intersection est l'ensemble vide.

- Dans une classe d'équivalence donnée il y a soit uniquement des opérations directes ou propres, (rotations, par exemple), soit uniquement des opérations indirectes ou impropres (miroirs, par exemple).

- Dans un groupe abélien chaque élément est à lui seul une classe d'équivalence.

- L'identité constitue à elle seule sa propre classe, même si le groupe n'est pas abélien.

La notion de conjugaison peut être étendue aux sous-groupes du groupe H. Soit, en effet, h et h' deux sous-groupes de H, nous disons qu'ils sont conjugués l'un de l'autre par un élément a de H, si : $h = a\,h'\,a^{-1}$. Autrement dit, les éléments de h sont les conjugués par a des éléments de h'.

EXEMPLE: Les deux sous-groupes $\{m_a^1, 1^1\}$ et $\{m_b^1, 1^1\}$ sont conjugués par les opérations 4^1 et 4^3.

IV-4. PARTITION EN COMPLEXES ASSOCIES A UN SOUS-GROUPE

Définition et propriétés : L'ensemble des produits d'un élément donné a d'un groupe H par tous les éléments d'un sous-groupe h de H forme ce que l'on appelle le complexe associé à h par a.

Selon que le produit envisagé est un produit à gauche ou un produit à droite, le complexe est dit complexe associé à gauche ou complexe associé à droite. Ceci est noté a h ou h a selon le cas. Le complexe associé à gauche et le complexe associé à droite, relatifs à un même élément a, sont généralement différents.

Dans le cas particulier où, pour tout a, nous avons h a = a h, le sous-groupe h est dit invariant dans H : ses complexes à gauche sont les mêmes que ses complexes à droite. Il en résulte qu'un sous-groupe invariant est le seul à être conjugué de lui-même. Un sous-groupe non invariant admet comme sous-groupe conjugué au moins un autre sous-groupe.

Un complexe associé à un sous-groupe a autant d'éléments que ce sous-groupe.

Deux complexes de même nature (associés à gauche ou associés à droite) sont identiques ou disjoints.

La décomposition d'un groupe H en complexes associés à un sous-groupe est unique.

EXEMPLE: Décomposition de 4 mm en complexes à droite associés au sous-groupe $\{4^1, 2^1, 4^3, 1^1\}$ (voir table du groupe) :

$$4mm=\{4^1,2^1,4^3,1^1\}\,1^1+\{4^1,2^1,4^3,1^1\}m_a^1=\underbrace{\{4^1,2^1,4^3,1^1\}}_{I}+\underbrace{\{m_{a-b}^1,m_b^1,m_{a+b}^1,m_a^1\}}_{J}=I+J$$

Décomposition de 4 mm en complexes à gauche associés au sous-groupe : $\{4^1, 2^1, 4^3, 1^1\}$

$$4\ mm = 1^1\{4^1, 2^1, 4^3, 1^1\} + m_a^1\{4^1, 2^1, 4^3, 1^1\} =$$
$$\{4^1, 2^1, 4^3, 1^1\} + \{m_{a+b}^1, m_b^1, m_{a-b}^1, m_a^1\} = I + J$$

Nous remarquons, dans ce cas, que les complexes à gauche et les complexes à droite associés à 4 sont identiques. Par conséquent nous pouvons conclure que le sous-groupe 4 est invariant dans 4 mm et y est conjugué de lui-même uniquement. Ce résultat est d'ailleurs général pour tous les sous-groupes d'indice deux.

Décomposition en complexes à droite associés au sous-groupe $\{2^1, 1^1\}$:

$$4\ mm = \{2^1, 1^1\}\,1^1 + \{2^1, 1^1\}\,m_a^1 + \{2^1, 1^1\}\,4^1 + \{2^1, 1^1\}m_{a+b}^1 =$$
$$\{2^1, 1^1\} + \{m_b^1, m_a^1\} + \{4^3, 4^1\} + \{m_{a-b}^1, m_{a+b}^1\} = I' + J' + K' + L'$$

Nous pouvons vérifier que la décomposition en complexes à gauche est identique et que le sous-groupe $\{2^1, 1^1\}$ est également invariant dans 4 mm.

Décomposition en complexes à droite associés au sous-groupe $\{m_a^1, 1^1\}$

$$\{4\ mm\} = \{m_a^1, 1^1\}\,1^1 + \{m_a^1, 1^1\}\,2^1 + \{m_a^1, 1^1\}\,m_{a+b}^1 +$$
$$\{m_a^1, 1^1\}m_{a-b}^1 = \{m_a^1, 1^1\} + \{m_b^1, 2^1\} + \{4^1, m_{a+b}^1\} + \{4^3, m_{a-b}^1\}$$

Nous remarquons, ici, que les complexes associés à gauche et ceux associés à droite, relatifs à un même élément de 4 mm ne sont pas tous identiques :

$$m_{a+b}^1\{m_a^1, 1^1\} \neq \{m_a^1, 1^1\}\,m_{a+b}^1$$
$$m_{a-b}^1\{m_a^1, 1^1\} \neq \{m_a^1, 1^1\}\,m_{a-b}^1$$

Nous en concluons que le sous-groupe $\{m_a^1, 1^1\}$ n'est pas invariant dans 4 mm. Il admet un conjugué différent de lui-même, c'est le groupe $\{m_b^1, 1^1\}$.

IV-5. GROUPE QUOTIENT

Si on considère chaque complexe non comme un ensemble d'éléments mais comme un élément de l'ensemble des complexes, le théorème suivant peut être énoncé :

Les complexes associés à un sous-groupe invariant h de H forment un groupe appelé groupe quotient dont l'ordre est égal à l'indice de h dans H ; ce groupe est noté H/h ; l'élément neutre de H/h est le groupe h lui-même considéré comme un élément de l'ensemble des complexes (2).

On dit que le complexe c h est le produit des complexes a h et b h (c h = a h . b h) si c = a b ; on montre d'ailleurs que tout produit d'un élément du complexe a h par un élément du complexe b h appartient au complexe c h.

Dans le cas des sous-groupes 4 et 2 de 4 mm nous pouvons considérer les groupes quotients :

$$4\ mm/4 = \{I, J\} \quad \text{et} \quad 4\ mm/2 = \{I', J', K', L'\} ;$$

à ces groupes quotients correspondent les tables suivantes :

$Q_1 = 4\ mm/4$

	I	J
I	I	J
J	J	I

$Q_2 = 4\ mm/2$

	I'	J'	K'	L'
I'	I'	J'	K'	L'
J'	J'	I'	L'	K'
K'	K'	L'	I'	J'
L'	L'	K'	J'	I'

Le quotient Q_1 est isomorphe d'un groupe d'ordre 2 tel que 2.
Le quotient Q_2 est isomorphe du groupe 2 mm.

IV-6. CONSTRUCTION DU GROUPE 4mm : PRODUIT DIRECT ET PRODUIT SEMI-DIRECT

Définition : On dit qu'un groupe H est le produit direct de deux de ses sous-groupes h et h' si :

- L'intersection de h et h' est réduite à l'élément neutre e de H : $h \cap h' = e$.
- h et h' sont invariants dans H.
- H/h est isomorphe de h' et H/h' est isomorphe de h.

Ce produit est noté : $H = h \otimes h'$.

Définition : On dit qu'un groupe H est le produit semi-direct de ses sous-groupes h et h' si :

- $h \cap h' = e$
- L'un des deux sous-groupes est invariant dans H, par exemple h.
- Le quotient H/h est isomorphe de h'.

Ce produit est noté $H = h \times_s h'$.

Aussi bien pour le produit direct que pour le produit semi-direct, l'ordre de H est égal au produit des ordres de h et h', et H peut être engendré par les générateurs de h et h'.

Dans l'exemple du groupe 4 mm, nous avons :

$$\{4^1, 2^1, 4^3, 1^1\} \cap \{m_a^1, 1^1\} = 1^1$$

$\{4^1, 2^1, 4^3, 1^1\}$ est invariant dans 4 mm

4 mm/4 = {I,J} isomorphe de $\{1^1, m_a^1\}$ par exemple.

Par conséquent le groupe 4 mm est le produit semi-direct des sous-groupes 4 et m, m étant l'un quelconque des quatre miroirs de 4 mm.

Il existe donc quatre possibilités de construction du type $4 \times m$, soit : $4\ mm = 4 \times m_a = 4 \times m_b = 4 \times m_{a+b} = 4 \times m_{a-b}$.

Le sous-groupe 4 est engendré par 4^1 ou par 4^3 et le sous-groupe m uniquement par m^1. Nous pouvons dire que les systèmes de générateurs de 4 mm sont pour le produit $4 \times m$: $\{4^1,m\}$ ou $\{4^3,m\}$. Ce qui fait en tout huit possibilités pour les constructions du type $4 \times m$:

$$\{4^1,m_a^1\} \quad , \quad \{4^1,m_b^1\} \quad , \quad \{4^1,m_{a+b}^1\} \ , \ \{4^1,m_{a-b}^1\}$$

$$\{4^3,m_a^1\} \quad , \quad \{4^3,m_b^1\} \quad , \quad \{4^3,m_{a+b}^1\} \ , \ \{4^3,m_{a-b}^1\}$$

Par contre les groupes 2 mm sont des produits directs de 2 et m, soit : $2\ mm = 2 \otimes m$, car 2 et m sont invariants dans 2 mm. Ainsi $2m_a\ m_b = 2 \otimes m_a = 2 \otimes m_b$ et $2m_{a+b}\ m_{a-b} = 2 \otimes m_{a+b} = 2 \otimes m_{a-b}$.

Les groupes 2 mm sont également des produits directs du type $m \otimes m$:

$$2\ m_a\ m_b = m_a \otimes m_b \qquad \text{et} \qquad 2\ m_{a+b}\ m_{a-b} = m_{a+b} \otimes m_{a-b}$$

IV-7. CENTRE D'UN GROUPE

Définition : On appelle centre d'un groupe H l'ensemble Z des éléments de H qui commutent avec tous les éléments de H.

EXEMPLE : Le sous-groupe $\{2^1,1^1\}$ est le centre Z de H = 4mm En effet, les éléments de $\{2^1,1^1\}$ commutent avec tous les éléments de 4 mm. On peut encore écrire :

$$\{2^1,1^1\} = \{a \in 4\ mm |\ b \in 4\ mm : a\ b = b\ a\}$$

Soit plus généralement :

$$Z = \{a \in H \mid \forall\ b \in H : a\,b = b\,a\} \qquad (2)$$

V- CONCLUSION

L'utilisation de la théorie des groupes rend plus facile et plus rigoureuse la connaissance des relations entre les éléments d'un groupe de symétrie ponctuelle. Dans l'exemple que nous avons traité nous avons essentiellement dégagé la notion de conjugaison. Celle-ci est en effet très importante puisqu'elle permet de rendre objectif le concept d'équivalence d'une part entre les éléments d'un même groupe, d'autre part entre les sous-groupes d'un même groupe.

L'exemple étudié est relativement simple et l'emploi de la théorie des groupes peut paraître superflu dans un tel cas. Mais notre choix nous a été dicté par un souci pédagogique. Cependant, il existe des groupes de symétrie nettement plus compliqués, notamment les groupes ponctuels et cristallins tridimensionnels, dont l'étude est très facilitée par l'emploi de la théorie des groupes.

BIBLIOGRAPHIE

(1) International Table For X-Rays Cristallography. Vol. 1-Kynoch Press. Birmingham 1952.

(2) PAPY G. Groupes. Presses Universitaires Bruxelles. 1967 p. 31: