

Chapitre 5

Représentations des groupes

Nous avons vu au chapitre 2 l'action du groupe $O(3)$ sur les vecteurs de l'espace à trois dimensions \mathbb{R}^3 et sur les tenseurs de cet espace. Le concept de représentation va généraliser cette situation à l'action d'un groupe G quelconque dans un espace vectoriel quelconque. Dans ce cours on se restreindra à des espaces de dimension finie n , qu'on peut donc toujours voir comme \mathbb{R}^n ou \mathbb{C}^n ¹.

Rappelons que l'ensemble des applications linéaires inversibles de \mathbb{R}^n dans lui-même forme un groupe, appelé groupe linéaire et noté $GL(n)$. Sous forme matricielle, c'est le groupe des matrices $n \times n$ inversibles. On écrit à l'occasion $GL(n, \mathbb{R})$ ou $GL(n, \mathbb{C})$ pour préciser si on travaille sur les nombres réels ou les complexes. Le groupe orthogonal $O(n)$ est un sous-groupe de $GL(n, \mathbb{R})$, le groupe unitaire $U(n)$ un sous-groupe de $GL(n, \mathbb{C})$.

Ce chapitre va présenter quelques éléments de base de la théorie mathématique des représentations des groupes. Pour simplifier la discussion et les notations, l'analyse du paragraphe 5.2 se concentrera sur les groupes finis, mais les résultats obtenus s'étendent aux groupes de Lie "compacts" tels $U(1)$ et $SO(3)$ d'usage très courant pour le physicien.

5.1 Définition et propriétés générales des représentations

5.1.1 Définitions de base

On dit qu'un groupe G admet une représentation (réelle, resp. complexe) de dimension n si à tout élément g de G on peut associer un élément $D(g)$ de $GL(n)$ de telle façon qu'aux opérations de groupe dans G correspondent les opérations de groupe dans $GL(n)$ ². Autrement dit

$$\begin{aligned} \forall g \in G \quad g &\mapsto D(g) \in GL(n) \\ \forall g, g' \in G \quad D(g.g') &= D(g).D(g') \end{aligned} \tag{5.1}$$

d'où découle immédiatement, en prenant $g' = e$ puis $g' = g^{-1}$, que

$$\begin{aligned} D(e) &= I \\ \forall g \in G \quad D(g^{-1}) &= (D(g))^{-1} \end{aligned}$$

1. Noter cependant que la physique peut nécessiter la considération d'espaces de dimension infinie, comme les espaces de fonctions de carré intégrable $L^2(\mathbb{R}^d)$ rencontrés comme espaces de Hilbert des états en mécanique quantique.

2. En langage mathématique, on dit qu'il y a un *homomorphisme* de G dans $GL(n)$

où e est l'élément neutre dans G et I désigne l'opérateur identité dans $\text{GL}(n)$. La représentation qui à tout $g \in G$ associe 1 (considéré comme $\in \text{GL}(1, \mathbb{R})$) est appelée *triviale* ou *représentation identité*; elle est de dimension 1.

Dans l'espace \mathbb{R}^n (ou \mathbb{C}^n), on peut choisir une base e_i , $i = 1, \dots, n$, et associer à tout $g \in G$ la matrice représentative de $D(g)$:

$$D(g)e_j = e_i \mathcal{D}_{ij}(g) \quad (5.2)$$

Comme (presque) partout dans la suite de ces notes, on a adopté ici la "convention de sommation sur les indices répétés" : la sommation sur $1 \leq i \leq n$ est implicite dans (5.2). La disposition des indices (i : indice de ligne, j indice de colonne) est dictée par la loi (5.1). En effet, on a bien

$$\begin{aligned} D(g.g')e_k &= e_i \mathcal{D}_{ik}(g.g') \\ &= D(g)(D(g')e_k) = D(g)e_j \mathcal{D}_{jk}(g') \\ &= e_i \mathcal{D}_{ij}(g) \mathcal{D}_{jk}(g') \\ \text{donc} \quad \mathcal{D}_{ik}(g.g') &= \mathcal{D}_{ij}(g) \mathcal{D}_{jk}(g') . \end{aligned}$$

Comme on sait bien, si on change de base $e'_i = e_j V_{ji}$ avec une matrice inversible, donc $e_i = \sum_j e'_j V_{ji}^{-1}$, la matrice du même opérateur D dans la nouvelle base est $\mathcal{D}' = V^{-1} \mathcal{D} V$, puisque $D e'_i = D e_j V_{ji} = e_{j'} \mathcal{D}_{j'i} V_{ji} = e'_j V_{jj'}^{-1} \mathcal{D}_{j'i} V_{ji} = e'_j (V^{-1} \mathcal{D} V)_{ji}$.

Exemples : Le groupe $\text{SO}(2)$ des rotations dans le plan admet une représentation de dimension deux, avec des matrices

$$\mathcal{D}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (5.3)$$

qui décrivent les rotations d'angle θ autour de l'origine. Vérifier que la condition (5.1) est bien satisfaite, grâce à des identités trigonométriques simples.

On verra au chapitre 7 que les représentations ("irréductibles", voir ci-dessous) du groupe $\text{SO}(3)$ et du groupe $\text{SU}(2)$ qui lui est apparenté sont caractérisées par le *spin* j entier ou demi-entier...

5.1.2 Représentations équivalentes. Caractères

Soient D et D' deux représentations de dimension n d'un groupe G . Ces représentations sont dites *équivalentes* s'il existe un opérateur linéaire V inversible

$$\forall g \in G \quad D'(g) = V^{-1} D(g) V \quad (5.4)$$

On voit que les représentations D et D' sont nécessairement de même dimension : les matrices représentatives de D et D' sont des matrices carrées, reliées par une transformation d'équivalence et peuvent être considérées comme différant par un changement de base. Il n'y a donc pas lieu de distinguer fondamentalement deux représentations équivalentes.

On appelle *caractère* d'une représentation de dimension finie la trace de l'opérateur $D(g)$:

$$\chi(g) = \text{tr } D(g) . \quad (5.5)$$

C'est une fonction de G dans \mathbb{R} ou \mathbb{C} . Le caractère est indépendant du choix de base dans E et deux représentations équivalentes ont le même caractère puisque $\text{tr } D'(g) = \text{tr } V^{-1} D(g) V = \text{tr } D(g)$. Le caractère prend aussi la même valeur pour les différents éléments d'une même

classe de conjugaison, c'est-à-dire tous les éléments de la forme $g' = hgh^{-1}$ pour un g donné et h quelconque dans G . En effet

$$\chi(hgh^{-1}) = \text{tr } D(hgh^{-1}) = \text{tr } (D(h)D(g)D(h)^{-1}) = \text{tr } D(g) = \chi(g)$$

où on a utilisé la propriété (5.1). On dit que le caractère est une *fonction de classe*.

Noter que tout élément du groupe appartient à une classe et une seule : on dit que les classes forment une *partition* du groupe. Dans un groupe fini, le nombre de classes est nécessairement fini, on les notera dans la suite C_i .

Exemples :

- dans un groupe abélien, les classes sont constituées d'un seul élément, pourquoi ?
- dans le groupe \mathcal{S}_n des permutations de n objets, on démontre que les classes rassemblent toutes les permutations ayant la même décomposition en cycles ; ainsi le groupe \mathcal{S}_3 des permutations de 3 objets a trois classes, celle de l'identité, notée $[1^3]$, la classe $[12]$ des 3 transpositions (un cycle de longueur 2, un de longueur 1) et la classe $[3]$ des 2 permutations cycliques (un cycle de longueur 3) ;
- dans le groupe de rotation du cube (cf chap. 1), qui a 24 éléments, il existe 5 classes distinctes constituées des 8 rotations d'angle $\pm 2\pi/3$ autour des 4 diagonales, des 6 rotations de π autour des 6 axes passant par les milieux des côtés, des 6 rotations de $\pm\pi/2$, et des 3 de π autour des 3 axes passant par les centres des faces, et de l'identité (voir chap. 1, § 1.3.3 et TD 5) ;
- la classe d'une rotation R de $\text{SO}(3)$ rassemble toutes les rotations d'axe \vec{u} quelconque mais de même angle de rotation θ que R , comme on le verra au chapitre 7 et au TD5. Dans la représentation de dimension 3 (celle sur les vecteurs étudiée au Chapitre 2), le caractère de la

représentation, c'est-à-dire la trace de la matrice $R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, est

$$\chi(R(\theta)) = 1 + 2 \cos \theta, \quad (5.6)$$

qui ne dépend effectivement que de θ et pas de l'axe de rotation \vec{u} . Dans le même ordre d'idées, la rotation-réflexion $S(\phi)$ introduite au chap. 1, composition d'une rotation $R(\phi)$ par une réflexion-miroir dans un plan orthogonal à l'axe Δ de rotation, a pour matrice $S(\phi) =$

$\begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$ dans un repère où Δ est le 3ème axe de coordonnées. Elle a donc pour caractère

$$\chi(S(\phi)) = -1 + 2 \cos \phi. \quad (5.7)$$

Deux cas particuliers sont celui d'une pure réflexion σ , qui correspond à $\phi = 0$, donc $\chi(\sigma) = 1$, et celui de l'inversion I , $\phi = \pi$, donc $\chi(I) = -3$.

Comme on l'a déjà mentionné, les représentations "irréductibles" de $\text{SO}(3)$ sont caractérisées par le spin j . On se rappelle des cours de Mécanique Quantique (et on reverra au chap. 7) que la rotation d'angle θ autour de l'axe z est représentée par la matrice $R_z(\theta) = \exp -i\theta J_z = \text{diag } (e^{-i\theta m})_{-j \leq m \leq j}$, dans la base où $J_z = \text{diag } (j, j-1, \dots, -j)$. On calcule alors le caractère de la représentation de spin j

$$\chi_j(\theta) = \sum_{m=-j}^j e^{-im\theta} = \frac{\sin(j + \frac{1}{2})\theta}{\sin \frac{1}{2}\theta}. \quad (5.8)$$

On retrouve bien sûr (5.6) pour $j = 1$.

Nous ferons un usage fréquent des expressions de ces caractères.

On notera encore que le caractère, évalué pour l'élément identité du groupe, fournit la dimension de la représentation (= n dans nos notations)

$$\chi(e) = \dim D = n . \quad (5.9)$$

5.1.3 Représentations réductibles et irréductibles

Considérons une certaine représentation D d'un groupe G . Supposons qu'on a trouvé une base dans laquelle son expression matricielle $\mathcal{D}(g)$ se décompose en matrices-blocs de taille $n_1 \times n_1$, $n_1 \times n_2$, $n_2 \times n_1$ et $n_2 \times n_2$, ($n_1 + n_2 = n$, dimension de la représentation), selon

$$\forall g \in G \quad \mathcal{D}(g) = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_1(g) & \mathcal{D}'(g) \\ 0 & \mathcal{D}_2(g) \end{pmatrix} . \quad (5.10)$$

Cela signifie que les vecteurs n'ayant que les n_1 premières composantes non nulles se transforment "entre eux", sans se mélanger avec ceux n'ayant que les n_2 dernières composantes non nulles : en effet si x_1 est un vecteur colonne de dimension n_1

$$\mathcal{D}(g) \begin{pmatrix} x_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{D}_1(g)x_1 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Autrement dit l'espace E_1 engendré par les n_1 premiers vecteurs de base est *invariant* (sous l'action des opérateurs $D(g)$). Noter qu'en général pour un vecteur colonne x_2 n'ayant que les dernières n_2 composantes non nulles, $\mathcal{D}(g) \begin{pmatrix} 0 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{D}'(g)x_2 \\ \mathcal{D}_2(g)x_2 \end{pmatrix}$, qui mélange les deux types de composantes. Autrement dit le sous-espace supplémentaire E_2 de E_1 n'est en général pas invariant.

Inversement si E_1 est un sous-espace invariant "non-trivial"³ de la représentation D , on peut trouver une base telle que (5.10) y soit vraie. On dit qu'une représentation ayant cette propriété est *réductible*. Si en outre $\mathcal{D}'(g) = 0$ pour tout g , le sous-espace supplémentaire E_2 est lui aussi invariant, on dit que la représentation est *complètement réductible* et qu'elle est la "somme directe" des deux représentations D_1 et D_2 . Enfin si aucun sous-espace invariant n'existe (et donc qu'il est impossible de trouver une base où (5.10) tient), on dit que la représentation est *irréductible*.

On va voir que dans les cas les plus intéressants en pratique, toute représentation réductible est complètement réductible et peut donc se décomposer en somme directe de représentations irréductibles. Il est donc naturel, et profitable comme on verra, de se restreindre alors à l'étude des représentations irréductibles.

Il faut encore souligner l'importance du corps de base dans la discussion de l'irréductibilité. C'est ainsi que la représentation (5.3) qui est irréductible sur un espace vectoriel sur \mathbb{R} ne l'est pas sur \mathbb{C} : au prix d'un changement de base on peut la récrire comme $\begin{pmatrix} e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix}$. Exercice : écrire le changement de base (complexe!) qui fait passer de la forme (5.3) à cette forme diagonale.

3. c'est-à-dire différent de 0 et de E tout entier

Exemple : tenseurs de rang 2 de SO(3)

Au chapitre 2, § 1.2, on a étudié les tenseurs de rang 2 de l'espace \mathbb{R}^3 , décrits par leurs $3^2 = 9$ composantes X^{ij} , $i, j = 1, 2, 3$, et se transformant selon $X^{i_1 i_2} \mapsto X'^{i_1 i_2} = O_{i_1 j_1} O_{i_2 j_2} X^{j_1 j_2}$, (sommation sur les indices répétés!), ce qu'on peut noter de façon abrégée $X' = (O \otimes O)X$. Vérifions tout d'abord que ces tenseurs forment une représentation de SO(3) au sens précédent. Si deux rotations de matrices O_1 et O_2 sont appliquées successivement, le tenseur X se transforme selon $X \mapsto X' = O_1 \otimes O_1 X \mapsto O_2 \otimes O_2 X' = (O_2 \otimes O_2)(O_1 \otimes O_1)X = (O_2 \cdot O_1 \otimes O_2 \cdot O_1)X$ qui est bien la propriété (5.1) de composition d'une représentation. Exercice : vérifier cette assertion en détaillant les composantes.

On remarque que l'action de la représentation est très simple sur les trois objets suivants

- (i) le tenseur identité I de composantes δ_{ij} est invariant : $\delta_{i_1 i_2} \mapsto O_{i_1 j_1} O_{i_2 j_2} \delta_{j_1 j_2} = \delta_{i_1 i_2}$ par l'orthogonalité des matrices O : c'est la représentation identité, de dimension 1 ;
- (ii) un tenseur antisymétrique $X_{i_1 i_2} = -X_{i_2 i_1}$ se transforme en un tenseur X' antisymétrique (le vérifier) ;
- (iii) de même un tenseur symétrique $X_{i_1 i_2} = X_{i_2 i_1}$ se transforme en un tenseur X' symétrique ;
- (iv) compte tenu du point (i), un tenseur symétrique de trace nulle $X_{i_1 i_2} = X_{i_2 i_1}$, $\text{tr } X = \sum X_{ii} = 0$ se transforme en un tenseur X' symétrique de trace nulle.

Autrement dit, les tenseurs symétriques de trace nulle, les tenseurs antisymétriques et les tenseurs proportionnels au tenseur identité se transforment indépendamment, et forment donc chacun une représentation du groupe SO(3) (dont on peut démontrer qu'elle est irréductible).

Écrivons maintenant l'identité suivante, vraie pour tout tenseur de rang 2

$$X = \frac{1}{2}(X + X^T) + \frac{1}{2}(X - X^T) = \frac{1}{3}(\text{tr } X)I + \frac{1}{2} \left(X + X^T - \frac{2}{3}(\text{tr } X)I \right) + \frac{1}{2}(X - X^T)$$

où $X^T = \{X_{ji}\}$ est le tenseur transposé. On a décomposé le tenseur X en la somme d'un tenseur multiple de l'identité, d'un tenseur (de rang 2) symétrique de trace nulle, et d'un tenseur (de rang 2) antisymétrique. Selon les observations précédentes, chaque terme se transforme indépendamment des autres. La représentation portée par les tenseurs de rang 2 est donc complètement réductible.

Autre façon de dire cela : le produit tensoriel $\vec{x} \otimes \vec{y}$ de deux vecteurs \vec{x} et \vec{y} se décompose en trois termes se transformant de façon indépendante sous l'action des rotations de SO(3), le produit scalaire invariant $\vec{x} \cdot \vec{y}$, le produit vectoriel $\vec{x} \wedge \vec{y}$, et le produit tensoriel symétrique de trace nulle, $\vec{x} \otimes \vec{y} + \vec{y} \otimes \vec{x} - \frac{2}{3}\vec{x} \cdot \vec{y} I$.

Les lecteurs les plus perspicaces auront reconnu dans ce qui précède un avatar d'un calcul fait en mécanique quantique : la "composition" de deux spins 1 (produit tensoriel de deux vecteurs à 3 composantes) peut se décomposer en somme d'un spin 0 (invariant), d'un spin 1 (objet vectoriel "dual" du tenseur de rang 2 antisymétrique) et d'un spin 2, le tenseur symétrique de rang de trace nulle, à 5 composantes. La somme des dimensions est bien $3 \times 3 = 1 + 3 + 5$.

5.1.4 Représentations unitaires

On considère un espace E de dimension n ($= \mathbb{R}^n$ ou \mathbb{C}^n), dont les vecteurs seront écrits avec les notations de la physique quantique $|x\rangle$. Cet espace est supposé muni d'un produit scalaire $\langle x|y\rangle$ "défini positif"⁴. Une représentation d'un groupe G dans l'espace E est dite *unitaire* si pour tout $g \in G$, l'opérateur $D(g)$ est unitaire, c'est-à-dire si pour tout g l'adjoint $D^\dagger(g)$ est l'inverse de $D(g)$. La condition s'écrit donc $D(g) \cdot D^\dagger(g) = I$, ou encore $D^\dagger(g) \cdot D(g) = I$.

4. petit abus de langage : on veut dire que la forme quadratique associée $\langle x|x\rangle$ est définie positive : $\langle x|x\rangle \geq 0$ et $\langle x|x\rangle = 0$ sissi $x = 0$.

Rappelons que l'opérateur $D(g)$ préserve alors le produit scalaire des vecteurs. En effet pour tout élément $g \in G$ et pour toute paire de vecteurs $|x\rangle, |y\rangle$ de E , et en notant $|D(g)x\rangle = D(g)|x\rangle, |D(g)y\rangle = D(g)|y\rangle$ leurs transformés par l'action de $D(g)$, on a

$$\langle D(g)x|D(g)y\rangle = \langle x|D(g)^\dagger D(g)|y\rangle = \langle x|y\rangle \quad (5.11)$$

$$\text{puisque } D(g)^\dagger D(g) = I. \quad (5.12)$$

En utilisant les propriétés de définition d'une représentation on a aussi

$$D(g^{-1}) = D^{-1}(g) = D^\dagger(g). \quad (5.13)$$

Comme on le verra au chapitre suivant, ces représentations unitaires sont très utiles au physicien, en particulier dans le cadre de la mécanique quantique.

Bornons nous pour le moment à une description mathématique. On a les deux propriétés importantes suivantes :

(i) *Toute représentation d'un groupe fini sur un espace doté d'un produit scalaire défini positif est "unitarisable", c'est-à-dire équivalente à une représentation unitaire.*

La preuve en est assez simple. Considérons une représentation D d'un groupe fini G et formons

$$Q = \sum_{g' \in G} D^\dagger(g')D(g') \quad (5.14)$$

qui satisfait

$$D^\dagger(g)QD(g) = \sum_{g' \in G} D^\dagger(g'.g)D(g'.g) = \sum_{g'.g \in G} D^\dagger(g'.g)D(g'.g) = \sum_{g'' \in G} D^\dagger(g'')D(g'') = Q \quad (5.15)$$

où on a remplacé $\sum_{g'}$ par $\sum_{g'.g}$ puisque dans l'un et l'autre cas, la somme court sur tous les éléments du groupe ("lemme de réarrangement"). L'opérateur Q est auto-adjoint $Q = Q^\dagger$, il est défini positif, ce qui signifie que $\langle x|Q|x\rangle = \sum_g \|D(g)|x\rangle\|^2 > 0$ pour $|x\rangle \neq 0$. On peut alors écrire Q sous la forme

$$Q = V^\dagger V \quad (5.16)$$

avec V inversible. Par exemple, on effectue la diagonalisation de l'opérateur auto-adjoint Q par une matrice unitaire, $Q = U\Lambda^2 U^\dagger$, avec Λ diagonale réelle, ce qui permet d'en extraire la "racine carrée" $V = U\Lambda U^\dagger$. L'opérateur V permet alors de définir une représentation D' équivalente à D et unitaire :

$$D'(g) = VD(g)V^{-1} \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} D'^\dagger(g)D'(g) &= V^{\dagger-1}D^\dagger(g)V^\dagger VD(g)V^{-1} \\ &= V^{\dagger-1}D^\dagger(g)QD(g)V^{-1} = V^{\dagger-1}QV^{-1} = I. \end{aligned} \quad (5.18)$$

ce qui établit la propriété.

On démontre que cette propriété s'étend aux groupes continus "compacts" (comme les groupes orthogonaux $O(n)$ et $SO(n)$ ou unitaires $U(n)$ et $SU(n)$, au contraire du groupe des translations \mathbb{R}^d).

(ii) *Toute représentation unitaire est soit irréductible, soit complètement réductible.*

Autrement dit, la situation mentionnée au § 5.1.3 d'une représentation réductible sans être complètement réductible, ne peut se produire.

En effet soit E_1 un sous-espace invariant, le sous-espace E_2 orthogonal à E_1 est lui-même invariant puisque pour tout $g \in G, x \in E_1$ et $y \in E_2$ on a

$$\langle x|D(g)y\rangle = \langle D(g^{-1})x|y\rangle = 0 \quad (5.19)$$

ce qui prouve que $D(g)y \in E_2$.

Comme corollaire des deux propriétés précédentes, toute représentation réductible d'un groupe fini ou d'un groupe compact est (équivalente à) une représentation unitaire et complètement réductible. Il suffit donc pour nous de construire et de classifier les représentations unitaires irréductibles.

5.1.5 Lemme de Schur

Si D et D' sont deux représentations irréductibles d'un groupe G dans l'espace \mathbb{C}^n , on a l'important

Lemme de Schur. *S'il existe un opérateur V tel que $\forall g \in G, VD(g) = D'(g)V$, alors ou bien $V = 0$, ou bien V est inversible et les représentations D et D' sont équivalentes.*

Nous admettrons ce lemme, dont nous ferons un grand usage dans la suite.

Sa preuve consiste à étudier le *noyau* de V , c'est-à-dire le sous-espace des x tels que $Vx = 0$, et l'*image* de V , sous-espace des $y = Vx$, et de montrer que ce sont des sous-espaces invariants de D et de D' respectivement. L'hypothèse d'irréductibilité conduit alors au résultat.

Ce lemme a deux conséquences importantes

Corollaire 1. *Si D est une représentation irréductible d'un groupe G dans l'espace \mathbb{C}^n , tout opérateur V commutant avec tous les représentants du groupe, $\forall g \in G, VD(g) = D(g)V$, est un multiple de l'identité, $V = \lambda I$.*

En effet, sur \mathbb{C} , V a au moins une valeur propre λ (qui est non nulle puisque V est inversible par le lemme de Schur). L'opérateur $V - \lambda I$ commute aussi avec D , mais il a une valeur propre nulle, il n'est donc pas inversible donc est nul.

Ce corollaire va nous être extrêmement utile en mécanique quantique, comme on verra.

On en a en fait déjà rencontré une application dans l'étude du groupe des rotations $SO(3)$ dans le cours de Mécanique Quantique. On a montré là que si J_x, J_y, J_z sont les générateurs infinitésimaux (non commutants) du groupe, $\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ commute, lui, avec tous les générateurs, donc aussi avec les matrices de rotations finies. Le corollaire nous dit que dans toute représentation irréductible du groupe $SO(3)$, \vec{J}^2 est un multiple de l'identité, autrement dit que toute représentation irréductible de $SO(3)$ peut être repérée par le nombre j tel que $\vec{J}^2 = j(j+1)I$, cf le Chap. 7 où on montrera que ce j doit être entier.

Corollaire 2. *Une représentation irréductible complexe d'un groupe abélien est nécessairement de dimension 1.*

En effet, soit $g' \in G$, $D(g')$ commute avec tous les $D(g)$. Donc (corollaire 1) $D(g') = \lambda(g')I$. La représentation se décompose en $\dim D$ copies de la représentation de dimension 1 : $g \mapsto \lambda(g)$, et l'irréductibilité impose que $\dim D = 1$.

Insistons sur l'importance de considérer des représentations complexes dans ces deux corollaires. C'est le caractère "algébriquement clos" de \mathbb{C} , c'est-à-dire la propriété de toute équation algébrique d'y avoir au moins une racine, par opposition à \mathbb{R} , qui est déterminant. La représentation sur \mathbb{R}^2 du groupe $SO(2)$ par les matrices $\mathcal{D}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$ vient fournir des contrexemples aux deux propositions précédentes : toute matrice $\mathcal{D}(\alpha)$ commute avec $\mathcal{D}(\theta)$ mais n'a pas de valeur propre réelle (si $\alpha \neq 0, \pi$) et la représentation est irréductible, quoique de dimension deux.

5.2 Représentations des groupes finis

Dans cette section, nous allons nous intéresser aux représentations des groupes finis sur le corps des complexes \mathbb{C} . La plupart des résultats qu'on va obtenir sont basés sur le fait qu'on peut effectuer la sommation sur les éléments du groupe. Ces résultats pourront se généraliser par la suite à des groupes infinis, pourvu qu'on puisse y donner un sens à cette sommation.

5.2.1 Orthogonalité et complétude des représentations

Un petit rappel sera peut-être utile pour la suite : considérons un ensemble de m vecteurs $(X^{(1)}, \dots, X^{(m)})$ de \mathbb{C}^n . Dans une base orthonormée, leurs composantes sont $X_i^{(a)}$, $i = 1, \dots, n$,

$a = 1, \dots, m$. Supposons qu'ils satisfont les deux familles de relations

$$\sum_{i=1}^n X_i^{(a)} X_i^{(a')*} = \delta_{aa'} \quad (5.20)$$

$$\sum_{a=1}^m X_i^{(a)} X_{i'}^{(a)*} = \delta_{ii'}. \quad (5.21)$$

La première relation exprime que les m vecteurs sont orthogonaux, donc indépendants. Dans un espace de dimension n , cela n'est possible que si $m \leq n$. La deuxième relation exprime une propriété de complétude : les $X^{(a)}$ forment un système de générateurs. En effet, tout vecteur Y de l'espace, de composantes Y_i peut s'écrire $Y_i = \sum_{i'=1}^n Y_{i'} \delta_{ii'} = \sum_{i'} Y_{i'} \sum_{a=1}^m X_i^{(a)} X_{i'}^{(a)*} = \sum_{a=1}^m X_i^{(a)} (X^{(a)}, Y)$ et donc $Y = \sum_{a=1}^m X^{(a)} (X^{(a)}, Y)$, Y se décompose bien sur les X , cqfd. Cela n'est possible que si $m \geq n$, et en définitive, les deux relations (5.20, 5.21) qui s'interprètent donc comme des propriétés d'orthogonalité et de complétude des X ne sont possibles que si $n = m$, et les $X^{(a)}$ forment une *base* de \mathbb{C}^n .

Soit G un groupe fini d'ordre (= nombre d'éléments) $|G|$, désignons ses représentations irréductibles inéquivalentes par un indice supérieur : $D^{(\rho)}$, et leur dimension par n_ρ ; leurs matrices $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^{(\rho)}$ peuvent être supposées unitaires d'après le résultat du paragraphe 5.1.4. On va aussi s'intéresser aux caractères $\chi^{(\rho)} = \text{tr } D^{(\rho)}$. Ces caractères sont des fonctions de classe (cf. § 5.1.2) ; notons C_i les classes, $|C_i|$ leur nombre d'éléments et $\chi_i^{(\rho)} = \chi^{(\rho)}(g)|_{g \in C_i}$ la valeur que prend le caractère de la représentation ρ dans la classe C_i . On a bien sûr $\sum_i |C_i| = |G|$ puisque les classes forment une partition du groupe G .

On démontre alors le

Théorème 1. : Les matrices $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^{(\rho)}$ satisfont les propriétés d'orthogonalité et de complétude suivantes

$$\frac{1}{|G|} \sum_g \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{(\rho)}(g) \mathcal{D}_{\alpha'\beta'}^{(\rho')*}(g) = \frac{1}{n_\rho} \delta_{\rho\rho'} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} \quad (5.22)$$

$$\sum_{\rho, \alpha, \beta} \frac{n_\rho}{|G|} \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{(\rho)}(g) \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{(\rho)*}(g') = \delta_{g, g'}. \quad (5.23)$$

et les caractères satisfont les relations d'orthogonalité et de complétude

$$\frac{1}{|G|} \sum_g \chi^{(\rho)}(g) \chi^{(\rho')*}(g) = \delta_{\rho\rho'} \quad \text{ou encore} \quad \frac{1}{|G|} \sum_i |C_i| \chi_i^{(\rho)} \chi_i^{(\rho')*} = \delta_{\rho\rho'} \quad (5.24)$$

$$\frac{|C_i|}{|G|} \sum_\rho \chi_i^{(\rho)} \chi_j^{(\rho)*} = \delta_{ij}. \quad (5.25)$$

La propriété d'orthogonalité (5.22) découle assez simplement du lemme de Schur. Nous l'admettrons (voir Exercice 1). Celle des caractères (5.24) s'obtient alors en prenant la trace $\sum_{\alpha=\beta, \alpha'=\beta'}$ de (5.22). Les formules de complétude (5.23, 5.25) sont plus délicates à obtenir.

Exercice : vérifier que le membre de gauche de (5.23) peut s'écrire aussi $\sum_\rho \frac{n_\rho}{|G|} \chi^{(\rho)}(g.g'^{-1})$.

La formule de complétude (5.23) est importante car elle nous apprend que toute fonction $f(g)$ d'un élément du groupe peut s'exprimer comme une somme (finie) de contributions des différentes représentations irréductibles

$$f(g) = \sum_{g'} f(g') \delta_{g, g'} = \sum_{\rho, \alpha, \beta} \frac{n_\rho}{|G|} \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{(\rho)}(g) \sum_{g'} \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{(\rho)*}(g') f(g') = \sum_{\rho, \alpha, \beta} \frac{n_\rho}{|G|} \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{(\rho)}(g) f_{\alpha\beta}^{(\rho)}, \quad (5.26)$$

où $f_{\alpha\beta}^{(\rho)} = \sum_{g'} \mathcal{D}_{\alpha\beta}^{(\rho)*}(g')f(g')$. De même, la formule de complétude (5.25) nous apprend que toute fonction de classe $F(C_i)$ (cf. §5.1.2) peut se développer comme une somme sur les caractères

$$F(C_i) = \sum_j F(C_j)\delta_{ij} = \frac{|C_i|}{|G|} \sum_{\rho} \chi_i^{(\rho)} \sum_j \chi_j^{(\rho)*} F(C_j) = \frac{|C_i|}{|G|} \sum_{\rho} \chi_i^{(\rho)} F^{(\rho)}. \quad (5.27)$$

Exercice. Montrer que si deux éléments g et g' de G ont même caractère $\chi^{(\rho)}$ pour tout ρ , alors ces deux éléments sont conjugués $g \sim g'$.

Remarques et conséquences

(i) Le cas le plus simple où la propriété d'orthogonalité est déjà familière est celui du groupe cyclique \mathbb{Z}_p , un groupe fini abélien. Dans ce cas, les représentations irréductibles (complexes) sont de dimension 1 (corollaire 2 du lemme de Schur), elles sont indexées par un entier $l = 0, 1, \dots$ et s'écrivent (en notation multiplicative où le groupe est représenté par des racines p -ièmes de l'unité $z_k = \exp 2\pi i \frac{k}{p}$)

$$D^{(l)} : \quad z_k \mapsto z_k^l \quad l = 0, 1, \dots, p-1. \quad (5.28)$$

(Que $z \mapsto z^l$ soit une représentation est clair : $(zz')^l = z^l z'^l$, que cela épuise toutes les représentations du groupe ne l'est pas mais va découler du théorème 2 plus bas.) La propriété d'orthogonalité s'écrit alors

$$\begin{aligned} \frac{1}{p} \sum_k z_k^l z_k^{l'*} &= \frac{1}{p} \sum_{k=0}^{p-1} e^{i \frac{2\pi}{p} k(l-l')} \\ &= \delta_{ll'}. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Les classes se réduisent à un seul élément, et la propriété de complétude s'écrit donc

$$\frac{1}{p} \sum_{l=0}^{p-1} z_k^l z_{k'}^{l*} = \frac{1}{p} \sum_{l=0}^{p-1} e^{i \frac{2\pi}{p} l(k-k')} = \delta_{kk'}, \quad (5.30)$$

c'est-à-dire une identité de même forme que la précédente, mais exprimant ici une propriété différente.

(ii) La proposition (5.22) est importante parce qu'elle suffit souvent à construire ou à compléter une table des caractères des représentations irréductibles d'un groupe fini donné. Considérons par exemple le cas du groupe Z_2 , constitué des éléments 1 et -1 . On connaît la représentation triviale qui associe à tout élément la valeur 1. Une deuxième représentation, elle aussi nécessairement de dimension 1 par le lemme de Schur, doit associer la valeur $\mathcal{D}(1) = \chi(1) = \dim D = 1$ à l'élément identité et une valeur x à -1 . Par (5.22) x est fixé sans ambiguïté à -1 . Comme il y a au plus deux représentations irréductibles non équivalentes (comme on va le démontrer dans un instant), on a la Table

↓ repr. \ éléments →	1	-1
id	1	1
ε	1	-1

Cette discussion peut être répétée dans des cas moins triviaux (cf ci-dessous et TD).

(iii) Au vu de (5.24) et (5.25), on peut appliquer l'argument du début de ce paragraphe aux $\left(\frac{|C_i|}{|G|}\right)^{\frac{1}{2}} \chi_i^{(\rho)}$. Donc

Corollaire 1. *Le nombre m de représentations irréductibles (le nombre de valeurs de ρ) est égal au nombre de classes (le nombre de valeurs de i).*

(iv) On peut appliquer aussi ce même argument à l'ensemble des éléments de matrice $\mathcal{D}_{\alpha\beta}^{(\rho)}(g) \sqrt{\frac{n_\rho}{|G|}}$ quand g "parcourt" le groupe G . Ils peuvent être considérés comme les composantes (indexées par ρ et $\alpha, \beta = 1, \dots, n_\rho$) de $|G|$ vecteurs. Les relations (5.22) et (5.23) expriment l'orthogonalité et la complétude de ces vecteurs, on a donc $|G| = \sum_\rho \sum_{\alpha, \beta=1}^{n_\rho} 1 = \sum_\rho n_\rho^2$ d'où le

Théorème 2 : *Les dimensions n_ρ satisfont l'égalité*

$$\sum_\rho n_\rho^2 = |G|. \quad (5.31)$$

Exemples : 1. Dans un groupe abélien, le nombre de représentations irréductibles sur \mathbb{C} est égal à l'ordre. Ceci est une conséquence triviale du fait que ces représentations sont de dimension 1 (Corollaire 2 du lemme de Schur). Ainsi dans le groupe \mathbb{Z}_p étudié plus haut, le nombre de représentations irréductibles est bien p .

2. Considérons à nouveau le groupe (de rotations) du cube. On a vu plus haut que ses 24 éléments se répartissent en 5 classes. Par le Corollaire 1, il a donc 5 représentations irréductibles distinctes. Par le Théorème 2, leurs dimensions doivent satisfaire $\sum n_\rho^2 = 24$ ce qui se trouve être très contraignant et n'admet qu'une seule solution : les n_ρ prennent les valeurs 1,1,2,3,3.

5.2.2 Conséquences

(i) Toute représentation D étant complètement réductible, on peut la décomposer en représentations irréductibles selon

$$D = \oplus_\rho m_\rho D^{(\rho)} \quad (5.32)$$

ce qui signifie qu'il existe une base où on peut écrire

$$\mathcal{D}(g) = \begin{pmatrix} \mathcal{D}^{(\rho_1)} & 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{D}^{(\rho_2)} & 0 \\ 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

avec peut-être une multiplicité (entière) m_ρ d'apparition de la représentation ρ , et (en prenant la trace) son caractère s'écrit

$$\chi = \sum_\rho m_\rho \chi^{(\rho)}. \quad (5.33)$$

Grâce aux formules d'orthogonalité des caractères, les multiplicités peuvent se calculer par la formule

$$\boxed{m_\rho = \frac{1}{|G|} \sum_i |C_i| \chi_i \chi_i^{(\rho)*} = \frac{1}{|G|} \sum_g \chi(g) \chi^{(\rho)*}(g)}. \quad (5.34)$$

(ii) Utilisons la relation (5.33) pour calculer la "norme carrée" d'un caractère quelconque, définie par

$$\|\chi\|^2 = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} |\chi(g)|^2 = \frac{1}{|G|} \sum_i |C_i| \chi_i \chi_i^* = \sum_\rho m_\rho^2. \quad (5.35)$$

C'est donc un entier supérieur ou égal à un, l'égalité à 1 étant satisfaite si et seulement si la représentation considérée est irréductible. Cela fournit donc un critère simple pour décider si une représentation dont on connaît les caractères est ou non irréductible. Voir comme illustration l'exercice 2 sur les groupes diédraux.

(iii) Dans tous ces calculs, il est extrêmement utile de disposer de la table des valeurs que prennent les différents caractères irréductibles pour les différentes classes. Dans la construction de ces *tables de caractères*, les relations (5.24-5.25) sont très importantes. A titre illustratif, étudions le cas du groupe \mathcal{S}_3 . On sait qu'il a trois classes (cf. § 5.1.2), correspondant aux produits de cycles [3], [1 2] et [1³]. Il a donc trois représentations irréductibles inéquivalentes, dont nous connaissons déjà deux, de dimension 1, qui existent dans tous les \mathcal{S}_n : la représentation identité d'une part, et la représentation ϵ qui associe à toute permutation sa *signature*⁵. Il doit donc exister une troisième représentation, de dimension 2 en vertu de (5.31). Son caractère prend donc la valeur 2 pour la classe [1³] (classe de l'identité). Les relations (5.24-5.25) permettent de déterminer sans difficulté les éléments manquants de la troisième ligne de la Table

↓ Repr. $\rho \setminus$ Classes $C_i \rightarrow$	[1 ³]	[1 2]	[3]
identité = {3}	1	1	1
$\epsilon = \{1^3\}$	1	-1	1
{2, 1}	2	0	-1
$ C_i $	1	3	2

Les notations {3} etc se réfèrent à la théorie générale des représentations des groupes symétriques ; elles ne seront pas expliquées dans ce cours. Noter qu'on lit dans la première colonne de cette table la dimension n_ρ de la représentation (égale à la valeur du caractère pour l'identité), tandis que la dernière ligne donne le nombre d'éléments $|C_i|$ de chaque classe.

On verra en exercice et en TD d'autres exemples de construction de tables de caractères de groupes finis.

5.2.3 Un groupe continu : $U(1)$

Comme on l'a mentionné à plusieurs reprises, les considérations précédentes sur les groupes finis s'étendent à une large classe de groupes continus. Comme prototype de groupe continu particulièrement simple, considérons le groupe $U(1)$, groupe multiplicatif des nombres complexes de module 1

$$\begin{aligned} U(1) &= \{z, |z| = 1\} \\ &= \{e^{i\alpha}, (2k-1)\pi < \alpha \leq (2k+1)\pi\} \end{aligned} \quad (5.36)$$

où le choix de la détermination de l'angle α modulo 2π ne doit pas importer pour la paramétrisation du cercle. C'est un groupe abélien et ses représentations irréductibles sont donc de dimension 1. Elles sont faciles à trouver (exercice 5)

$$D^{(k)}(e^{i\alpha}) = \chi^{(k)}(e^{i\alpha}) = e^{ik\alpha} \quad (5.37)$$

et on requiert que $k \in \mathbb{Z}$ pour assurer que la représentation est univaluée quand α change de détermination $\alpha \rightarrow \alpha + 2\pi n$. Plus généralement, les fonctions sur le groupe (ici les fonctions de classe) sont les fonctions définies (univaluées) sur le cercle, c'est-à-dire les fonctions périodiques

5. Rappelons qu'à toute permutation $\sigma \in \mathcal{S}_n$ on associe le signe $\epsilon_\sigma = (-1)^\#$ où $\#$ désigne le nombre de transpositions qui font passer de la permutation de départ à σ . Ce signe ϵ_σ , appelé *signature* de la permutation σ , est ce qui apparaît dans la formule du déterminant d'une matrice A de taille $n \times n$: $\det A = \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_n} \epsilon_\sigma \prod_i A_{i\sigma(i)}$. On démontre que $\epsilon_{\sigma\tau} = \epsilon_{\sigma}\epsilon_\tau$ ce qui prouve bien que la signature est une représentation de dimension 1 du groupe \mathcal{S}_n .

de α . Sous des hypothèses adéquates de régularité, elles admettent un développement convergent en série de Fourier

$$f(z = e^{i\alpha}) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} f_n e^{in\alpha} = \sum_n f_n z^n \quad (5.38)$$

qui n'est autre que le développement de f sur les caractères (5.37).

On notera que le groupe $U(1)$ se distingue du groupe abélien (“non compact”) \mathbb{R} qui décrit l'addition des phases α si α est autorisé à varier sur tout \mathbb{R} . La représentation de l'élément $e^{i\alpha}$ y est toujours donnée par l'exponentielle e^{ix} , mais x est maintenant arbitraire (réel si la représentation est unitaire).

Les caractères (5.37) du groupe $U(1)$ satisfont des relations d'orthogonalité et de complétude parallèles à celles démontrées plus haut pour les groupes finis. Ce qui remplace la sommation finie $\frac{1}{n} \sum_{g \in G}$ sur les éléments du groupe est l'intégrale sur le cercle

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\alpha}{2\pi}.$$

Les caractères satisfont alors

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\alpha}{2\pi} \chi^{(k)}(e^{i\alpha}) \chi^{(k')*}(e^{i\alpha}) &= \delta_{kk'} \\ \sum_{k \in \mathbb{Z}} \chi^{(k)}(e^{i\alpha}) \chi^{(k)*}(e^{i\beta}) &= 2\pi \delta_P(\alpha - \beta). \end{aligned} \quad (5.39)$$

La deuxième relation est une identité familière dans la transformation de Fourier. La “fonction” δ_P (en fait une distribution, appelée parfois “peigne de Dirac”) qui apparaît ici est 2π -périodique et identifie α et β modulo 2π

$$\delta_P(\alpha - \beta) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta(\alpha - \beta + 2\pi n). \quad (5.40)$$

Le groupe des rotations dans le plan $SO(2)$ est isomorphe au groupe $U(1)$. Noter que si on s'intéresse à des représentations irréductibles réelles, la dimension n'est plus égale à 1 (sauf pour la représentation identité!) mais à 2

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{(k)}(\alpha) &= \begin{pmatrix} \cos k\alpha & -\sin k\alpha \\ \sin k\alpha & \cos k\alpha \end{pmatrix} & k \in \mathbb{N}^* \\ \chi^{(k)}(\alpha) &= 2 \cos k\alpha \end{aligned} \quad (5.41)$$

Noter aussi que ce groupe $SO(2)$ est isomorphe au groupe des rotations autour d'un axe de \mathbb{R}^3 , appelé C_∞ en cristallographie, cf chap. 1 et 2. C'est le groupe de symétrie de rotation d'une molécule diatomique de type A-B.

Ce qu'on vient de dire pour le groupe $U(1)$ peut s'étendre à tout groupe compact (cf. chap. 4, §4.1.5) : on peut y définir une intégration et donner un sens à des formules d'orthogonalité comme (5.22) où une intégrale remplace la somme sur les éléments du groupe, comme on vient de le faire pour le groupe $U(1)$. On verra au chapitre 7 comment cela se réalise dans les groupes $SU(2)$ et $SO(3)$.

5.3 Produits directs de groupes ou de représentations ; décomposition de Clebsch-Gordan

L'expression “produit direct” s'applique à deux situations bien distinctes à ne pas confondre, celle du produit $G = G_1 \times G_2$ de deux groupes, et celle du produit (direct ou tensoriel) de deux espaces de représentations d'un même groupe G . Ces deux situations sont rencontrées en physique.

5.3.1 Produits directs de groupes et leurs représentations

On a rencontré au paragraphe 1.3.3 la notion de groupe produit de deux groupes : on a vu que le groupe complet O_h (rotations et réflexions) du cube est le produit (direct) du groupe O des rotations par le groupe \mathbb{Z}_2 engendré par l'inversion σ par rapport au centre du cube. Plus généralement, on dit que le groupe G est le produit direct de deux groupes G_1 et G_2 , et on écrit $G = G_1 \times G_2$ si on peut écrire tout élément g de G sous la forme $g = (g_1, g_2)$, avec $g_1 \in G_1$, $g_2 \in G_2$, et si la loi de composition de G s'exprime par $g.g' = (g_1, g_2).(g'_1, g'_2) = (g_1.g'_1, g_2.g'_2)$. En particulier $g = (g_1, e_2).(e_1, g_2)$ mais aussi $g = (e_1, g_2).(g_1, e_2)$.

Si G_1 et G_2 sont d'ordre fini, il en est de même de G et on a $|G| = |G_1||G_2|$. Montrons que les représentations irréductibles de G s'obtiennent simplement à partir de celles de G_1 et G_2 . Soient D_1, D_2 deux représentations irréductibles de G_1 et G_2 , respectivement, n_1, n_2 leurs dimensions. On construit alors la représentation *produit tensoriel* de D_1 et D_2

$$D = D_1 \otimes D_2 \quad D(g = (g_1, g_2)) = D_1(g_1) \otimes D_2(g_2) . \quad (5.42)$$

De façon plus explicite, si des bases $(e_1)_i, i = 1, \dots, n_1$ et $(e_2)_j, j = 1, \dots, n_2$ ont été choisies dans les espaces des représentations D_1 et D_2 , les éléments de matrice de D sont

$$\mathcal{D}_{ij;i'j'}(g) = (\mathcal{D}_1)_{ii'}(g_1)(\mathcal{D}_2)_{jj'}(g_2) .$$

Sous cette forme, la vérification que la condition (5.1) est bien satisfaite par D est élémentaire. On démontre en utilisant le lemme de Schur que la représentation $D = D_1 \otimes D_2$ est irréductible si les représentations D_1 et D_2 le sont. Le caractère de la représentation D est simplement le produit des caractères

$$\chi(g) = \text{tr } D(g) = \chi_1(g_1)\chi_2(g_2) .$$

Montrons maintenant que l'on obtient bien ainsi toutes les représentations irréductibles de G . Supposons qu'on ait la liste des représentations irréductibles $D_1^{(\rho)}$ de G_1 et celle $D_2^{(\sigma)}$ de G_2 . Il suffit alors d'utiliser la relation (5.31) pour se convaincre que l'ensemble des représentations produits tensoriels $D_1^{(\rho)} \otimes D_2^{(\sigma)}$, de dimensions $n_{\rho\sigma} = n_\rho^{(1)}n_\sigma^{(2)}$, fournit bien toutes les représentations irréductibles de $G = G_1 \times G_2$. En effet

$$\sum_{\rho} (n_\rho^{(1)})^2 = |G_1|, \quad \sum_{\sigma} (n_\sigma^{(2)})^2 = |G_2| \implies \sum_{\rho, \sigma} (n_{\rho\sigma})^2 = |G_1||G_2| = |G| , \quad (5.43)$$

ce qui montre qu'aucune autre représentation irréductible n'est possible pour G .

Revenant à l'exemple de départ $O_h = O \times \mathbb{Z}_2$, nous voyons qu'il suffit d'avoir construit la table des caractères de O pour obtenir celle de O_h . Chaque représentation irréductible D_ρ de O donne lieu à deux représentations irréductibles de O_h que nous pouvons indexer par $(\rho, +)$ ou $(\rho, -)$. Chaque classe \mathcal{C}_i de O donne lieu à deux classes de O_h , notées $+\mathcal{C}_i$ et $-\mathcal{C}_i$, et les caractères de O_h se lisent

$$\chi_{(\rho, \pm)}(+\mathcal{C}_i) = \chi_\rho(\mathcal{C}_i) \quad \chi_{(\rho, \pm)}(-\mathcal{C}_i) = \pm\chi_\rho(\mathcal{C}_i) . \quad (5.44)$$

Application : voir la discussion des molécules diatomiques au chapitre suivant.

5.3.2 Produit tensoriel de représentations

On a examiné au § 5.1.3 comment les tenseurs de rang 2 de $SO(3)$ se décomposent en représentations irréductibles. C'est aussi la situation qu'on rencontre en Mécanique Quantique, quand on connaît la transformation des composantes d'un système et qu'on étudie comment le

système composé se transforme (système de deux particules de spin j_1 et j_2 par exemple).

En général soient E_1 et E_2 deux espaces vectoriels portant des représentations D_1 et D_2 d'un groupe G . L'espace produit tensoriel $E = E_1 \otimes E_2$ est l'espace engendré par les combinaisons linéaires de "produits" (tensoriels) d'un élément de E_1 et d'un élément de E_2 : $z = \sum_a x^{(a)} \otimes y^{(a)}$. L'espace E porte lui même une représentation, notée $D = D_1 \otimes D_2$, *produit tensoriel* (ou *produit direct*) des représentations D_1 et D_2 . Sur l'élément z ci-dessus

$$D(g)z = \sum_a D_1(g)x^{(a)} \otimes D_2(g)y^{(a)} . \quad (5.45)$$

On vérifie immédiatement que le caractère de la représentation D est le produit des caractères χ_1 et χ_2 de D_1 et D_2

$$\chi(g) = \chi_1(g)\chi_2(g) . \quad (5.46)$$

En particulier en évaluant cette relation pour $g = e$, on a pour des représentations de dimension finie

$$\dim D = \dim(E_1 \otimes E_2) = \dim E_1 \cdot \dim E_2 = \dim D_1 \cdot \dim D_2 \quad (5.47)$$

comme il est bien connu pour un produit tensoriel.

Décomposition de Clebsch-Gordan

La représentation produit direct de deux représentations irréductibles D et D' n'est en général pas irréductible. Si elle est complètement réductible (comme c'est le cas pour les représentations unitaires qui vont nous intéresser au premier chef), on effectue la *décomposition de Clebsch-Gordan* en représentations irréductibles

$$D \otimes D' = \oplus_j D_j \quad (5.48)$$

où au second membre on somme sur un nombre fini de représentations. On peut préférer à (5.48) une autre écriture qui indique lesquelles des représentations inéquivalentes $D^{(\rho)}$ apparaissent, et avec quelle multiplicité

$$D \otimes D' = \oplus_{\rho} m_{\rho} D^{(\rho)} . \quad (5.49)$$

Les entiers $m_{\rho} = \frac{1}{|G|} \sum_g \chi_D \chi_{D'} \chi^{(\rho)*}$ sont non négatifs. Les équations (5.48) et (5.49) impliquent des règles simples sur les caractères et les dimensions

$$\chi_D \cdot \chi_{D'} = \sum_j \chi_j = \sum_{\rho} m_{\rho} \chi^{(\rho)} \quad (5.50)$$

$$\dim D \cdot \dim D' = \sum_j \dim D_j = \sum_{\rho} m_{\rho} \dim D^{(\rho)} . \quad (5.51)$$

Exemple : le produit tensoriel de deux copies de l'espace euclidien de dimension 3 ne forme pas une représentation irréductible du groupe des rotations. C'est l'exemple considéré plus haut au §5.1.3.

5.4 Décomposition des représentations d'un groupe sur celles d'un sous-groupe

Une situation rencontrée fréquemment en géométrie ou en physique est celle où un groupe de symétrie G est réduit à (on dit aussi "brisé en") un de ses sous-groupes H . C'est par exemple le cas où dans un problème initial invariant par rotation, on introduit un champ électrique vertical à symétrie cylindrique qui brise le groupe

$G = O(3)$ en son sous-groupe $H = C_{\infty v}$. C'est le cas aussi de la symétrie de rotation d'un atome réduite à un sous-groupe fini si l'atome est inséré dans un cristal, voir la discussion du "champ cristallin" à la fin du chap. 7. Si D est une représentation de G , c'en est aussi une de H , puisque la propriété (5.1) s'applique à tous $g, g' \in H \subset G$. Mais si D est une représentation irréductible de G , rien n'assure qu'elle l'est encore pour H . Se pose donc le problème de calculer la décomposition de D en représentations irréductibles de H . Là encore, les techniques de caractères sont utiles. Si on dispose des tables de caractères de G et de H , la simple application des formules (5.33, 5.34) fournit la multiplicité de la représentation irréductible de H indexée par ρ dans la représentation de caractère χ de G .

Exemple : pour discuter comment un niveau de moment orbital l d'un atome se scinde dans un champ cristallin de groupe G , il suffit de disposer de la table de caractères de G , du caractère (5.8) de la représentation de spin $j = l$ et de le projeter sur les caractères irréductibles de G , voir exercice 6.

5.5 Applications physiques

5.5.1 Modes de vibration des molécules

Nous revenons au problème présenté au chapitre 2, §2.5, qui est de déterminer les $N = 3n - 6$ ou $3n - 5$ modes normaux (ou propres) de vibration des noyaux d'une molécule, cf (2.18)

$$H = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq N} (\dot{Q}_i^2 + \omega_i^2 Q_i^2). \quad (2.18)$$

Si la molécule possède un groupe de symétrie G (un des groupes ponctuels étudiés au chapitre 1), ce groupe agit linéairement sur les coordonnées q_i des noyaux. Il agit donc aussi linéairement sur les coordonnées Q_i qui sont fonctions linéaires des q_j , autrement dit, les modes normaux Q_i forment une représentation D (de dimension N) du groupe G . Cette représentation est en général réductible. Inversement des modes normaux se transformant selon une représentation irréductible correspondent à une fréquence propre donnée ω . La dimension de la représentation irréductible $D^{(\rho)}$ fournit donc la multiplicité de la fréquence ω_ρ . En général, et sauf "dégénérescence accidentelle", deux représentations irréductibles distinctes correspondent à des fréquences propres différentes⁶. Si une représentation irréductible $D^{(\rho)}$ apparaît avec une multiplicité m_ρ , on aura m_ρ fréquences $\omega_{\rho,i}$ distinctes, ($i = 1, \dots, m_\rho$), chacune de multiplicité $\dim D^{(\rho)}$. La théorie des groupes va donc nous permettre d'accéder assez facilement à la multiplicité des niveaux d'énergie de vibration des molécules, sans avoir à déterminer effectivement ce que sont les modes normaux.

Il nous faut donc décomposer la représentation totale D portée par les N modes de la molécule en représentations irréductibles de G . Pour cela on va calculer la caractère de D pour les différents éléments du groupe G et le projeter selon les formules (5.33, 5.34). Les éléments du groupe G sont soit des rotations R d'angle θ , soit des réflexions-miroirs σ , soit des "rotations-réflexions" S d'angle ϕ (cf Chap 1), soit l'inversion I par rapport à un centre de symétrie éventuel de la molécule, soit l'identité e . Comme le caractère de chacune de ces transformations est indépendant de la base où on l'évalue, on peut revenir à son action sur les noyaux de la molécule, en prenant bien soin d'éliminer à nouveau les contributions des modes zéros (cf Chap 2). Seuls les noyaux invariants par la transformation contribuent aux éléments *diagonaux* de l'opérateur D , donc à son caractère. En se rappelant les expressions (5.6, 5.7), on

6. Exception : les représentations complexes conjuguées. Si une représentation complexe apparaît dans un problème physique, par essence réel, la représentation complexe conjuguée apparaît aussi avec la même multiplicité et la même fréquence propre.

trouve ([9], §100)

$$\begin{aligned}
 \chi(R(\theta)) &= (N_C - 2)(1 + 2 \cos \theta) && \text{s'il y a } N_C \text{ noyaux sur l'axe de rotation} \\
 \chi(S(\phi)) &= N_S(-1 + 2 \cos \phi) && \text{s'il y a } N_S \text{ noyaux sur l'axe de rotation-réflexion} \\
 \chi(\sigma) &= N_\sigma && \text{s'il y a } N_\sigma \text{ noyaux dans le plan de la réflexion-miroir } \sigma \\
 \chi(I) &= -3N_I && \text{si } N_I (=0 \text{ ou } 1) \text{ noyau est invariant par l'inversion } I \\
 \chi(e) &= N = 3n - 6 && \text{(pour une molécule non linéaire)}
 \end{aligned}
 \tag{5.52}$$

où le -2 dans $N_C - 2$ prend en compte les mouvements de translation et de rotation globales à retrancher comme modes zéros.

Exemple : molécule NH_3 . Le groupe de symétrie est le groupe C_{3v} , d'ordre 6, fait de 3 classes : l'identité e , C_3 : 2 rotations d'angle $\pm 2\pi/3$ et σ_v : 3 réflexions dans les plans bissecteurs des liaisons H-H ; la table de caractères de C_{3v} est la suivante (les notations pour les représentations irréductibles sont traditionnelles...)

↓ Repr. \ Classes →	e	C_3	σ_v
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0
$ C_i $	1	2	3

(Noter que cette table reproduit, aux notations près, celle donnée plus haut pour le groupe \mathcal{S}_3 de permutations de trois objets. S'agit-il d'une coïncidence?). On calcule alors selon les formules précédentes $\chi(E) = N = 6$, $\chi(C_3) = 0$ puisque $\theta = 2\pi/3$ et $\chi(\sigma_v) = N_\sigma = 2$, d'où en utilisant (5.34) les multiplicités $m_{A_1} = \frac{1}{6}(6+0+3 \times 2) = 2$, $m_{A_2} = 0$ et $m_E = 2$. On a donc deux fréquences simples (de multiplicité 1) a priori distinctes correspondant au mode normal A_1 ; ces modes normaux attachés à la représentation identité conservent la symétrie de la molécule : ils décrivent d'une part les vibrations radiales de même amplitude des trois H, de l'autre la vibration selon l'axe vertical du N. On a par ailleurs deux autres fréquences correspondant aux modes normaux de type E , chacun venant avec une multiplicité deux.

Cette analyse peut être répétée pour de nombreuses molécules dotées de symétries variées, voir les références [12], [9].

5.5.2 Vibration des cristaux

Des techniques similaires s'appliquent à l'étude des modes normaux de vibration dans les cristaux, ou phonons. Une complication non triviale par rapport au cas des molécules vient du fait que le groupe d'invariance du cristal, ou groupe d'espace, est infini. Sa réduction à un "groupe quotient" fini, appartenant à la liste des 32 groupes ponctuels mentionnés au chapitre 1, est une des techniques courantes. Nous renvoyons à la littérature, en particulier à [5], chap VI, § V, pour une introduction, et à D. L. Rousseau, R. P. Bauman, S. P. S. Porto, *Normal mode determination in crystals Journal of Raman Spectroscopy*, Volume 10, (1981), 253-290, pour une discussion approfondie.

5.6 Exercices

1. ★ Démonstration des formules d'orthogonalité des \mathcal{D} .

Avec les notations du § 5.2.1, construire la matrice

$$V = \frac{1}{|G|} \sum_{g'} \mathcal{D}^{(\rho)}(g') M \mathcal{D}^{(\rho')\dagger}(g') \quad (5.53)$$

où M une matrice quelconque de dimension $n_\rho \times n_{\rho'}$. Montrer qu'elle satisfait

$$V \mathcal{D}^{(\rho')}(g) = \mathcal{D}^{(\rho)}(g) V \quad (5.54)$$

Lui appliquer alors le lemme de Schur dans les deux cas $\rho \neq \rho'$ et $\rho = \rho'$ et identifier la contribution de $M_{\beta\beta'}$ dans l'élément de matrice $V_{\alpha\alpha'}$ pour obtenir (5.22).

2. Groupes diédraux

On étudie les groupes diédraux D_p , d'ordre $2p$, définis au chapitre 1.

a) Groupe D_2 . Montrer que D_2 est un groupe abélien. Combien de représentations irréductibles (a priori complexes) a-t-il? Les construire comme application de la propriété (5.35).

b) Groupes diédraux D_p . On considère les matrices

$$A = \begin{pmatrix} \epsilon_j & 0 \\ 0 & \epsilon_j^* \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

où $\epsilon_j = \exp 2i\pi \frac{j}{p}$, et on représente les rotations autour de l'axe d'ordre p par I, A, \dots, A^{p-1} , et ces rotations composées avec la rotation autour de l'axe orthogonal par B, BA, \dots, BA^{p-1} . En calculant la norme du caractère de cette représentation, montrer qu'elle est irréductible pour $1 \leq j \leq p-1$, et $j \neq p/2$ si p est pair. Que peut-on dire de celle pour $j = p/2$ (p pair)? Montrer qu'en se restreignant à $1 \leq j < p/2$, on a des représentations irréductibles inéquivalentes. En déduire que D_p admet pour p impair $(p-1)/2$ représentations irréductibles de dimension 2 et deux de dimension 1, et pour p pair $p/2 - 1$ représentations irréductibles de dimension 2 et quatre de dimension 1.

3. Montrer que les relations d'orthogonalité de la section 5.2.1 impliquent les formules suivantes pour un groupe fini :

$$\frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi^{(\rho)}(g \cdot g_1 \cdot g^{-1} \cdot g_2) = \frac{1}{n_\rho} \chi^{(\rho)}(g_1) \chi^{(\rho)}(g_2) ,$$

et

$$\frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi^{(\rho)}(g \cdot g_1) \chi^{(\sigma)}(g^{-1} \cdot g_2) = \frac{\delta_{\rho,\sigma}}{n_\rho} \chi^{(\rho)}(g_1 \cdot g_2) .$$

4. On considère le groupe constitué des éléments $\pm e, \pm i, \pm j$ et $\pm k$ satisfaisant les relations $i^2 = j^2 = k^2 = -e, i \cdot j = k$, etc par permutation cyclique. C'est le *groupe des quaternions* Q . Montrer qu'on peut trouver une représentation de dimension 2 de Q en termes des matrices de Pauli $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ et $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. En déduire que Q a cinq représentations irréductibles et cinq classes. Que sont ces classes? Quelles sont les valeurs possibles des caractères pour les classes de i, j ou k ? Dresser la table de caractères de Q .

On considère ensuite le groupe T engendré par les matrices 2×2 : $u = i\sigma_2$ et $v = \sigma_1$. Quel est son ordre, que sont ses classes? Montrer que T et Q ne sont pas isomorphes. Dresser la table de caractères de T . Qu'en conclut-on?

5. Représentations du groupe $U(1)$.

On cherche toutes les fonctions f dérivables satisfaisant

$$f(x)f(y) = f(x+y) . \quad (5.55)$$

– Montrer que f satisfait $f'(x) = kf(x)$ où k est une constante arbitraire et en déduire que $f(x) = \exp kx$.

– Appliquer ce résultat à la détermination des représentations complexes irréductibles du groupe $U(1)$.

6. Décomposition d'une représentation de $SO(3)$ en représentations irréductibles de son sous-groupe O .

On étudie la décomposition de la représentation de dimension 5 de $SO(3)$ en représentations irréductibles du groupe du cube O . On rappelle que $\chi_{j=2}(\theta) = \sin(5\theta/2)/\sin \theta/2$.

a) Calculer la valeur que prend $\chi_{j=2}$ dans les différentes classes du groupe O .

b) En utilisant la table des caractères de O construite en TD, déterminer combien de représentations irréductibles de O apparaissent dans cette décomposition.

c) Déterminer quelles sont ces représentations.