Exemples et applications de la théorie des représentations

Jérémy Le Borgne et Tristan Vaccon

2012-2014

Table des matières

1 Théorie des nombres et représentations **3**
1.1 Le degré d'une représentation irréductible divise l'ordre du groupe . 3
1.2 Théorème de Burnside 5

2 Géométrie et représentations **7**
2.1 Table des caractères de $\mathfrak{S}_4$ 7
2.1.1 Classes de conjugaison de $\mathfrak{S}_4$ 7
2.1.2 Représentations connues de $\mathfrak{S}_4$ 7
2.1.3 Les deux dernières représentations 8
2.1.4 Application à la décomposition d'une représentation de degré 6 de $\mathfrak{S}_4$ 8
2.2 Table des caractères de A_5 9
2.2.1 Classes de conjugaison de $\mathfrak{S}_4$ 9
2.2.2 Caractère de degré 3 9
2.2.3 Autre représentation de degré 3 10
2.2.4 Représentations de degré 4 11
2.2.5 Représentations de degré 5 et conclusion 11

3 Chimie et représentations **11**
3.1 Le principe 12
3.2 Méthode globale 12
3.3 Exemple de la molécule PCl_5 14
3.3.1 Calcul de G et de sa table de caractères 14
3.3.2 Calcul de χ_0 15
3.3.3 Caractère χ_{dis} 15
3.3.4 Calcul de χ_{vib} 16

3.3.5 Conclusion 18
3.4 Distinguer les invariants cis et trans du 1,2-dichloroéthène 18
3.4.1 Présentation des deux isomères 18
3.4.2 table des caractères de $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ 20
3.4.3 Calcul de χ_0 20
3.4.4 Calcul de χ_{vib} 21
3.4.5 Calcul des nombres de raies d'absorption 21

Références **23**

Lien avec les leçons de l'agrégation

Ce qui suit a un lien profond avec les diverses leçons de représentations.
Il peut aussi être assez intéressant pour les leçons de géométrie.

1 Théorie des nombres et représentations

1.1 Le degré d'une représentation irréductible divise l'ordre du groupe

Soit G un sous-groupe fini, ρ une représentation irréductible de G dans V. Soit d son degré.

On va montrer que $\frac{|G|}{d}$ est un entier algébrique. Comme c'est aussi un rationnel, il sera donc un entier, et on aura le résultat.

On admet tout d'abord les deux lemmes suivants :

Lemme 1.1. *Soit $a \in \mathbb{C}$. Alors on a équivalence entre les propositions suivantes :*
- *a est un entier algébrique ($\mathbb{Z}[a]$ est un $\mathbb{Z}$-module de type fini) ;*
- *a est racine d'un $P \in \mathbb{Z}[X]$ unitaire ;*
- *il existe $A \subset \mathbb{C}$ un sous-anneau de $\mathbb{C}$ tel que A est un $\mathbb{Z}$-module de type fini et $a \in A$.*

Lemme 1.2. *L'ensemble des entiers algébriques est un sous-anneau de $\mathbb{C}$ et son intersection avec $\mathbb{Q}$ est $\mathbb{Z}$.*

Soit K une classe de conjugaison de G.

Lemme 1.3. *$f := \sum_{g \in K} \rho(g) \in GL(V)$ est une homothétie de rapport $r(\rho, K) = \frac{|K|}{d}\chi_\rho(K)$ où $\chi_\rho(K)$ est la valeur de χ_ρ sur K.*

Démonstration. On va appliquer le lemme de Schur : on montre que f est un G-morphisme entre (V, ρ) et (V, ρ).

Si $h \in G$, alors

$$\rho(h) \circ f \circ \rho(h^{-1}) = \sum_{g \in K} \rho(hgh^{-1}) = \sum_{g' \in K} \rho(g) = f.$$

Par le lemme de Schur, (V, ρ) étant par définition irréductible, f est une homothétie de rapport :

$$r(\rho, K) = \frac{\mathrm{tr}(f)}{d} = \frac{1}{d} \sum_{g \in K} \mathrm{tr}(\rho(g)) = |K|\chi_\rho(K).$$

□

Lemme 1.4. *Montrons que* $\frac{|G|}{d} = \sum_K r(\rho, K)\chi_\rho(K)$*, somme sur les classes de conjugaison de* G*.*

Démonstration. Avec ce qui précéde, $\chi(K)\chi(K^{-1}) = \frac{d}{|K|}r(\rho, K)\chi(K^{-1})$.

Comme ρ est irréductible, $\frac{1}{|G|}\sum_{g\in G}\chi(g)\chi(g^{-1}) = 1$ (orthonormalité des caractères, et $\chi(g^{-1}) = \overline{\chi(g)}$, comme somme de racines $|G|$-ème de l'unité).

Donc,

$$|G| = \sum_K \sum_{g\in K} \frac{d}{|K|} r(\rho, K)\chi(K^{-1})$$

et on en déduit :

$$|G| = d\sum_K r(\rho, K)\chi(K^{-1})$$

□

Lemme 1.5. *Soit* K*,* K'*,* K'' *trois classes de conjugaison de* G *et* $x \in K''$*. On définit* $A(K, K', x) := \{(k_1, k_2) \in K \times K' / x = k_1k_2\}$*, et on note* $a(K, K', x) = card(A(K, K', x))$*. Alors* $a(K, K', x)$ *est constante sur* K''*, on notera cette valeur* $a(K, K', K'')$

Démonstration. Si $K'' \cap KK' \neq \emptyset$, alors il existe $x \in K'' \cap KK'$, $x = k_1k_2$, $k_1 \in K$, $k_2 \in K'$, et par conjugaison $K'' = \{yxy^{-1}, y \in G\} = \{yk_1y^{-1}yk_2y^{-1}, y \in G\} \subset KK'$.

Soit $x, y \in K''$. Par définition de K'', il existe $u \in G$ tel que $y = uxu^{-1}$. Alors $A(K, K', x) \to A(K, K', y)$, définie par $(k_1, k_2) \mapsto (uk_1u^{-1}, uk_2u^{-1})$ est clairement une bijection, et on a donc $a(K, K', x) = a(K, K', y)$.

Sinon, on a $K'' \cap KK' = \emptyset$ et $a(K, K', K'') = 0$. □

Lemme 1.6. *On a :*

$$r(\rho, K)r(\rho, K') = \sum_{K''} a(K, K', K'')r(\rho, K''),$$

avec la somme prise sur les classes de conjugaison K'' *de* G*.*

Démonstration. Avec le troisième lemme,

$$\begin{aligned} r(\rho, K)r(\rho, K')Id_V &= \left(\sum_{g\in K}\rho(g)\right)\left(\sum_{g'\in K'}\rho(g')\right) \\ &= \sum_{(g,h)\in K\times K'}\rho(gh) = \sum_{u\in K''} a(K, K', K'')\sum_{u\in K''}\rho(u). \\ &= (\sum_{K''} a(K, K', K'')r(\rho, K''))Id_V \end{aligned}$$

□

On peut maintenant conclure. Tout d'abord, si $A = \sum_K r(\rho, K)\mathbb{Z}$, alors A est stable par multiplication avec le lemme précédent, donc est un sous-anneau de $\mathbb{C}$. Il est de type fini sur $\mathbb{Z}$ car finiment engendré (G est un groupe fini, il n'a qu'un nombre fini de classes de conjugaisons). A est donc un anneau d'entiers algébriques.

Ainsi, on a vu que $\frac{|G|}{d} = \sum_K r(\rho, K)\chi_\rho(K)$. Or les $r(\rho, K)$ sont des entiers algébriques, puisque dans A, et les $\chi_\rho(K)$ en sont aussi, puisque somme de racines $|G|$-ème de l'unité.

On a donc $\frac{|G|}{d}$ entier algébrique et, par définition, rationnel. $\frac{|G|}{d}$ est donc un entier et ainsi, $d|\ |G|$.

1.2 Théorème de Burnside

On rajoute les résultats suivants :

Lemme 1.7. *Soit $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ des racines de l'unité. Si $\frac{\lambda_1+\cdots+\lambda_n}{n}$ est un entier algébrique, alors soit $\lambda_1 + \cdots + \lambda_n = 0$, soit tous les λ_i sont égaux.*

Démonstration. On remarque que les conjugués de λ_i (par $Gal(\mathbb{Q}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)/\mathbb{Q})$) restent des racines de l'unité.

On pose $z = \frac{\lambda_1+\cdots+\lambda_n}{n}$. On alors (avec le module dans $\mathbb{C}$) $|z| \leqslant 1$, de même que pour tout ses conjugués.

On pose Z le produit des conjugués de z. On a alors $|Z| \leqslant 1$.

Or, Z est un rationnel (c'est le terme constant du polynôme minimal de z). C'est aussi un entier algébrique (par hypothèse), et ainsi $Z \in \mathbb{Z}$.

Deux cas sont alors possibles : soit $Z = 0$, soit $|Z| = 1$ et en même temps, tout les conjugués de z ont 1 comme module et (exercice classique sur les sommes de nombres complexes), ils sont tous égaux car leur somme est de module n. □

Proposition 1.8. *Soit χ le caractère d'une représentation irréductible ρ de degré n d'un groupe G. Soit $s \in G$. Si $c(s)$ est le cardinal de la classe de conjugaison de s dans G, et si l'on suppose que $c(s) \wedge n = 1$, alors $\frac{\chi(s)}{n}$ est un entier algébrique.*

De plus, si $\chi(s) \neq 0$, alors $\rho(s)$ est une homothétie.

Démonstration. D'après Bézout, il existe $a, b \in \mathbb{Z}$ tels que $ac(s) + bn = 1$. On a alors :

$$\frac{\chi(s)}{n} = \frac{ac(s)\chi(s)}{n} + b\chi(s).$$

Or, $\chi(s) \in \overline{\mathbb{Z}}$ (somme de racines de l'unité), et $\frac{ac(s)\chi(s)}{n}$ aussi (prop 1.3, et même argument). D'où $\frac{\chi(s)}{n}$ est un entier algébrique.

Pour la suite, si on nomme $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ les valeurs propres de $\rho(s)$, ce sont des racines de l'unité, et $\chi(s) = Tr(\rho(s)) = \sum \lambda_i$.

On conclut donc avec le lemme 1.7.

□

Il reste un lemme avant de passer au théorème de Burnside.

Lemme 1.9. *Soient $s \in G \setminus \{1\}$ et $p \in \mathcal{P}$. Supposons que $c(s)$, le cardinal de la classe de conjuguaison de s soit une puissance de p. Alors il existe un sous-groupe normal N de G, distinct de G, tel que l'image de s dans G/N appartienne au centre de G/N.*

Démonstration. Soit χ_{r_G} le caractère de la représentation régulière. On a $\chi_{r_G}(s) = 0$ car $s \neq e_G$. Par ailleurs, s'écrit en fonction des caractères irréductibles $\chi_{r_G} = \sum n_\chi \chi$, avec $n_\chi = \chi(1)$.

Mais alors $0 = \chi_{r_G}(s) = \sum \chi(1)\chi(s)$, ou encore $1 + \sum_{\chi \neq 1} \chi(1)\chi(s)$.

Ainsi, $-\frac{1}{p} = \sum_{\chi \neq 1} \frac{\chi(1)\chi(s)}{p}$. Comme $-\frac{1}{p}$ n'est pas un entier algébrique, il existe un caractère irréductible χ tel que $\frac{\chi(1)\chi(s)}{p}$ ne soit pas un entier algébrique.

En particulier, $\chi(s) \neq 0$ et p ne divise pas $\chi(1)$ (le degré de la représentation correspondante). Vu que $c(s)$ est une puissance de p, on en déduit que $\chi(1) \wedge c(s) = 1$.

On applique le lemme 1.8, et on obtient alors que la représentation irréductible ρ correspondant à χ vérifie : $\rho(s)$ est une homothétie.

On pose alors $N = ker(\rho)$.

Alors, N est bien un sous-groupe distingué, distinct de G, et non-trivial. De plus, par propriété universelle, $Im(\rho) \simeq G/N$, et comme $s \in G$ s'envoie sur une homothétie dans $Im(\rho)$, s est bien dans le centre de G/N, ce qu'il fallait démontrer.

□

On peut maintenant passer à l'énoncé et la preuve du théorème de Burnside.

Théorème 1.10 (Burnside)**.** *Tout groupe G d'ordre $p^\alpha q^\beta$ (où p et q sont premiers) est résoluble.*

Démonstration. Le cas où $\alpha = 0$ ou $\beta = 0$ est classique : les p-groupes sont nilpotents, ou encore, ils sont résolubles car ils ont un centre non-trivial.

Maintenant, supposons que $\alpha, \beta \geqslant 1$.

Montrons d'abord qu'il existe $s \in G \setminus \{e_G\}$ tel que q ne divise pas $c(s)$ (cardinal de la classe de conjugaison de s).

Pour ça, remarquons que $G = \{e_G\} \cup \{Cl(s)\}$ où les $Cl(s)$ sont les classes de conjugaisons de G autre que $\{e_G\}$.

On peut écrire $|G| = 1 + \sum |Cl(s)| = 1 + \sum c(s)$. Comme q divise $|G|$, il existe s tel que q ne divise pas $c(s)$. Autrement dit, $c(s)$ est une puissance de p.

Avec le lemme 1.9, il existe alors un sous-groupe normal N de G, propre, tel que l'image de s dans G/N soit dans le centre de G/N.

Deux possibilités peuvent arriver.

Soit $N \neq \{e_G\}$, et dans ce cas on peut raisonner par récurrence sur N et G/N : ils sont résoluble, et alors G l'est aussi.

Soit $N = \{e_G\}$, mais alors, le centre C de G est non trivial puisqu'il contient s. On peut donc raisonner de même par récurrence avec C et G/C. $\square$

2 Géométrie et représentations

2.1 Table des caractères de $\mathfrak{S}_4$

2.1.1 Classes de conjugaison de $\mathfrak{S}_4$

- Identité : un élément ;
- les transpositions : $\binom{4}{2} = 6$ éléments ;
- Les trois-cycles : $2 * \binom{4}{3} = 8$ éléments (un choix de 3 éléments définit 2 cycles distincts ;
- Les quatre-cycles : $4 * 3 * 2 * \frac{1}{4} = 6$ éléments (les 4 permutations circulaires sur un $4 - uplets$ définissent le même cycle) ;
- Les doubles transpositions : $\binom{4}{2} * \frac{1}{2} = 3$ éléments (si on choisit deux éléments parmi 4 et qu'on prend ces deux-là pour première transposition et les deux autres pour la seconde, le second choix comme premier donnait la même permutation).

2.1.2 Représentations connues de $\mathfrak{S}_4$

On connaît les représentations triviales et alternées de $\mathfrak{S}_4$, de dimension 1, ainsi que les caractères associés.

	1 Id	6 (12)	8 (123)	6 (1234)	3 (12)(34)
χ_1	1	1	1	1	1
χ_ε	1	-1	1	-1	1

Si l'on considère χ_P pour la représentation par permutation des vecteurs de base de $\mathbb{C}^4$, alors sur la classe de conjugaison K, $\chi_P(K)$ est le nombre de vecteurs de base fixés par $\rho_P(g)$, $g \in K$.

On en déduit le caractère $\chi_P = (4, 2, 1, 0, 0)$.

On a $V_P = V_1 \bigoplus V_S$ où V_1 est la triviale et V_S la standard. Ainsi, $\chi_P = \chi_1 + \chi_S$, et on en déduit le caractère de la standard $\chi_S = (3, 1, 0, -1, -1)$.

On vérifie que cette représentation est irréductible : $(\chi_S, \chi_S) = \frac{1}{24}(3^2 * 1 + 1 * 6 + 0 * 8 + (-1)^2 * 6 + (-1)^2 * 3) = 1$.

On obtient donc :

	1 Id	6 (12)	8 (123)	6 (1234)	3 (12)(34)
χ_1	1	1	1	1	1
χ_ε	1	-1	1	-1	1
χ_S	3	1	0	-1	-1

2.1.3 Les deux dernières représentations

Soient n_4 et n_5 leurs degrés. On a $1+1+3^2+n_4^2+n_5^2=24$ donc $n_4^2+n_5^2=13$, et $n_4, n_5|24$ donc disons, $n_4=3$ et $n_5=2$.

Pour trouver la quatrième représentation, on regarde une représentation de l'Hom : χ_W définie par $W=Hom(V_s,V_\varepsilon)$. On a $\chi_W=(3,-1,0,1,-1)$. On a bien $(\chi_W,\chi_W)=1$ et W est irréductible.

Pour trouver la cinquième, on $\sum_{i=1}^5 n_i\chi_i(s)=0$ si $s\neq 1$. On en déduit $\chi_{W'}=(2,2,0,-1,2)$.

On peut donc conclure sur la table des caractères de $\mathfrak{S}_4$:

	1 Id	6 (12)	8 (123)	6 (1234)	3 (12)(34)
χ_1	1	1	1	1	1
χ_ε	1	-1	1	-1	1
χ_S	3	1	0	-1	-1
χ_W	3	-1	0	1	-1
$\chi_{W'}$	2	0	-1	0	2

2.1.4 Application à la décomposition d'une représentation de degré 6 de $\mathfrak{S}_4$

On considère la représentation $\rho_E : \mathfrak{S}_4 \to GL_6(\mathbb{C})$, donnée par permutation des éléments de la base de $\mathbb{C}^6$ à partir de l'action par permutation de $\mathfrak{S}_4$ sur les faces du cube, donnée par l'action de $\mathfrak{S}_4$ sur les diagonales du cube.

Comme représentation par permutation, $\chi_E(\sigma)$ est le nombre de faces laissées fixes par σ.

- Pour (12), c'est la rotation d'angle π sur un axe reliant les milieux de deux arêtes opposées (on échange deux diagonales). Pas de face fixée.
- Pour (123), c'est la rotation d'angle $\frac{2\pi}{3}$ selon une grande diagonale (on permute circulairement les autres diagonales) : pas de face fixée.
- Pour (1234), c'est une rotation d'angle $\frac{\pi}{2}$ selon un axe de coordonnées : on permute circulairement les grandes diagonales, deux faces sont fixées.
- Une rotation d'angle π selon un axe de coorodnnées : on permute deux par deux les diagonales, deux faces sont fixées.

On en déduit $\chi_E = (6, 0, 0, 2, 2)$. On a $(\chi_E, \chi_E) = 3$ donc cette représentation s'écrit comme somme de trois représentations irréductibles. On calcule les produits scalaires : $(\chi_E, \chi_1) = 1$, $(\chi_E, \chi_\varepsilon) = 0$, $(\chi_E, \chi_S) = 0$, $(\chi_E, \chi_W) = 1$, $(\chi_E, \chi_{W'}) = 1$.

Ainsi, $E = \mathbb{C} \bigoplus W \bigoplus W'$, comme G-module.

2.2 Table des caractères de A_5

Pour proposer ce qui suit en développement, il vaut certainement mieux être proposer plusieurs dessins de dodécaèdres en quatrième page du plan.

On suppose connu le fait que A_5 soit le groupe des rotations du dodécaèdre (régulier).

2.2.1 Classes de conjugaison de $\mathfrak{S}_4$

- *Identité* : C_1 possède un élément ;
- les doubles transpositions : ce sont des rotations d'angle π, autour d'un axe joignant les milieux d'arêtes opposées. Il y a 15 paires d'arêtes opposées, donc on obtient une classe C_2 de 15 *doubles transpositions*.
- Les trois-cycles : ce sont des rotations d'angle $2\pi/3$ autour d'un axe passant par des sommets opposés. Il y a 10 paires de sommets, et pour chaque paire, 2 rotations, donc on obtient une classe C_3 de 20 *trois-cycles*.
- Les cinq-cycles : Ce sont des rotations d'axe passant par les centres de faces opposées. Pour chaque paire de faces, il y a deux rotations d'angle $2\pi/5$ et deux d'angles $4\pi/5$ (on regarde pour s une telle rotation, s, s^2, s^3, s^4. Par ailleurs, il y a 6 paire de faces, ce qui donne 12 *rotations d'angle* $\pi/5$ et 12 *rotations d'angle* $2\pi/5$, qui forment chacune une classe de conjugaison.
  Ainsi, on obtient deux classes de conjugaisons, respectivement C_4 et C_5, de 12 éléments chacune.

2.2.2 Caractère de degré 3

En tant que groupe des rotations du dodécaèdre régulier, on a une représentation de dimension 3 : $\rho_2 \ : \ A_5 \to GL_3(\mathbb{C})$.

Étudions les traces des matrices dans l'image de cette représentation.

- Pour l'identité, $tr(I_3) = 3$.
- Pour les doubles transpositions, en tant que rotations d'angle π, elles ont pour matrice (avec un bon choix de base) : $\begin{bmatrix} 1 & & \\ & -1 & * \\ & * & -1 \end{bmatrix}$, ce qui donne pour trace -1.

– De même pour les trois-cycles : $\begin{bmatrix} 1 & & \\ & -1/2 & * \\ & * & -1/2 \end{bmatrix}$, qui est de trace 0.

– Pour ce qui est des cinq-cycles, on remarque que $\cos\left(\frac{2\pi}{5}\right) = \frac{\sqrt{5}-1}{4}$ et $\cos\left(\frac{4\pi}{5}\right) = \frac{-\sqrt{5}-1}{4}$. Ainsi, de la même manière, on obtient pour traces, respectivement, $\frac{1+\sqrt{5}}{2}$ et $\frac{1-\sqrt{5}}{2}$

Ainsi, on peut déja consigner dans la table des caractères en construction :

A_5	Id	C_2	C_3	C_4	C_5
	1	15	20	12	12
triv	1	1	1	1	1
χ_2	3	-1	0	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$

Remarque. On note que $1 * 3 + (-1)^2 * 15 + 0 + 12 * \left(\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^2 + \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^2\right) = 60$. Ceci montre que cette représentation est bien irréductible.

Remarque. Sur le calcul de $\cos\left(\frac{2\pi}{5}\right)$ et $\cos\left(\frac{4\pi}{5}\right)$, on note que ce sont des racines de $2X^2 + X - \frac{1}{2}$.

Démonstration. En effet,

$$0 = 1+e^{\frac{2i\pi}{5}}+\cdots+e^{\frac{8i\pi}{5}} = 1+(e^{\frac{2i\pi}{5}}+e^{\frac{8i\pi}{5}})+(e^{\frac{4i\pi}{5}}+e^{\frac{6i\pi}{5}}) = 1+2\cos\left(\frac{2\pi}{5}\right)+2\cos\left(\frac{4\pi}{5}\right).$$

Or, $2\cos^2\left(\frac{2\pi}{5}\right) - 1 = \cos\left(\frac{4\pi}{5}\right)$.

On trouve donc bien, en prenant les deux égalités précédentes, que $\cos\left(\frac{2\pi}{5}\right)$ est racine de $2X^2 + X - \frac{1}{2}$.

L'autre racine est $\frac{1}{2} - \cos\left(\frac{2\pi}{5}\right) = \cos\left(\frac{4\pi}{5}\right)$ (par ce qui précède).

Au final, on trouve bien $\cos\left(\frac{2\pi}{5}\right) = \frac{\sqrt{5}-1}{4}$ et $\cos\left(\frac{4\pi}{5}\right) = \frac{-\sqrt{5}-1}{4}$. □

2.2.3 Autre représentation de degré 3

On prend $\tau \in \mathfrak{S}_5 \setminus A_5$, et on pose $\alpha : s \mapsto \tau s \tau^{-1}$. Alors α échange C_4 et C_5, qui ne forment qu'une seule classe de conjugaison dans $\mathfrak{S}_5$.

Par exemple, on écrit $\tau = \mu(1\,2\,3\,4)$ avec $\mu \in A_5$. Mais alors, si $s = (1\,2\,3\,4\,5)$, on a $\tau s \tau^{-1} = \mu(1\,2\,3\,4)s(1\,2\,3\,4)^{-1}\mu^{-1}$ et $(1\,2\,3\,4)s(1\,2\,3\,4)^{-1} = s^2$ donc on a bien $\tau s \tau^{-1} \in C_5$.

Ainsi, si l'on considère $\rho_2 \circ \alpha$, on a une représentation de degré 3, avec permutation des traces pour C_4 et C_5.

Ainsi, on peut déja consigner dans la table des caractères en construction :

A_5	Id	C_2	C_3	C_4	C_5
	1	15	20	12	12
triv	1	1	1	1	1
χ_2	3	-1	0	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$
χ_3	3	-1	0	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$

On remarque que ces caractères forment bien une famille orthonormée.

2.2.4 Représentations de degré 4

On en a une donnée naturellement par la représentation standard : $\rho_s : \mathfrak{S}_5 \to GL_5(\mathbb{C})$ avec $\chi_s = \chi_{perm} - \chi_{triv}$.

Or, χ_{perm} compte le nombre de points fixes. Ceci donne :

χ_s	4	0	1	-1	-1

On remarque que $\chi_1, \ldots, \chi_3, \chi_4 = \chi_s$ forme bien une famille orthonormée.

2.2.5 Représentations de degré 5 et conclusion

On en obtient une comme action par permutation sur les paires de faces opposes. Comme toujours, on prend $\chi_{perm} - \chi_{triv}$.

Ceci donne pour cette représentation :

χ_5	5	1	-1	0	0

On a bien $25 + 1 * 15 + 1 * 20 = 60$.

Au final, on vérifie que ce qui suit est bien la table des caractères de A_5 :

A_5	Id	C_2	C_3	C_4	C_5
	1	15	20	12	12
triv	1	1	1	1	1
χ_2	3	-1	0	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$
χ_3	3	-1	0	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$
χ_s	4	0	1	-1	-1
χ_5	5	1	-1	0	0

3 Chimie et représentations

Quelques mots sur les références

Ce qui suit s'inspire de *Group theory for Maths, Physics and Chemistry students*, document (disponible sur Internet) de Arjeh Cohen, Rosane Ushirobira et

Jan Draisma. On pourra citer aussi *Molecular symmetry and group theory* de Robert Carter [1], et *Molecular Vibrations : The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra* de Wilson, Decius et Cross [5].

3.1 Le principe

Le principe (dans les très grandes lignes...) des spectroscopies IR et Raman est le suivant :

- On dispose d'une cuve remplie d'un liquide ou gaz homogène formé d'une molécule inconnue. On peut imaginer que l'on a plusieurs candidats pour cette molécule (par exemple, différents isomères, et l'on chercherait à déterminer lequel est dans la cuve).
- On envoie un laser sur la molécule, et on regarde ce qu'il reste une fois passé à travers : on obtient un spectre d'absorption.
- Les spectroscopies IR et Raman consistent à regarder la partie du spectre où les longueurs d'ondes absorbées correspondent aux vibrations propres de la molécule.
- On ne se place que dans le cas où les molécules candidates ont un groupe de symétries non trivial. Alors, on peut pour une molécule donnée, par la méthode du paragraphe suivant, déterminer quel est le nombre de bandes correspondant aux absorptions dans les spectres d'absorptions IR et Raman.
- Ainsi, on peut tester à quelles molécules le nombre de bandes observé pour notre cuve correspond. On peut en particulier éliminer toutes les molécules pour lesquelles ce nombre ne correspond pas.

Remarque. Les groupes que l'on considère agissent parfois sur des $\mathbb{R}$-espaces vectoriels, mais cela n'est pas gênant : on sous-entendra l'extension des scalaires à $\mathbb{C}$ chaque fois que cela serait nécessaire (cela serait toujours possible et ne changerait rien aux affirmations).

3.2 Méthode globale

Voici la méthode utilisée pour calculer le nombre de raies d'absorption pour des vibrations propres d'une molécule (avec groupe de symétrie).

La méthode, pour l'étude d'une molécule connue, se décompose en quatre étapes :

1 Déterminer le groupe de symétrie G de l'ensemble P des points de la molécule, vue dans $\mathbb{R}^3$ (nous ne traiterons pas le cas où la molécule est planaire). On a $G \subset O_3$.
Calculer ensuite sa table de caractères. Calculer χ_0, le caractère de la représentation naturelle ρ_0 de G de dimension 3, obtenue avec G groupe de symétrie de P.

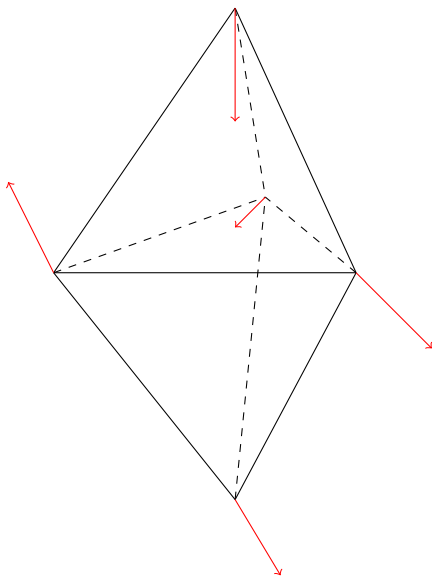


FIGURE 1 – Un exemple de déplacement infinitésimal

2 On définit $\Gamma = \{f \ : \ P \to \mathbb{R}^3\}$ comme l'ensemble des déplacements "infinitésimaux" de la molécule. Ils sont définits par la donnée d'un vecteur vitesse en chacun des points de la molécule.
G agit sur Γ par : si $f \in \Gamma$, $g \in G$, $x \in P \subset \mathbb{R}^3$, on pose $g \cdot f(x) = gf(g^{-1}(x))$.
Si $n := card(P)$, Γ est naturellement un espace vectoriel de dimension $3n$, et cette action induit une représentation de G de dimension $3n$.
Calculer χ_{dis}, le caractère de cette représentation.

3 Γ admet deux sous-représentations : celle des fonctions données par une translation (globale) de la molécule, et celle des fonctions données par une rotation de cette molécule. Ceci sera détaillé plus bas.
Caluler les caractères χ_{trans} et χ_{rot} de ces sous-représentations.
On pose $\chi_{vib} = \chi_{dis} - \chi_{trans} - \chi_{rot}$.

4 On peut maintenant comparer avec la spectroscopie.
Si on écrit $\chi_0 = \sum_{k=1}^{d} \alpha_k \chi_k$ sa décomposition selon une base orthonormée de caractères irréductibles. Alors le nombre de pics lorsqu'on effectue la spectroscopie IR de cette molécule est $\sum_{k/\alpha_k \neq 0} (\chi_k, \chi_{vib})$.
Si on pose $\rho_{0,2} = Sym^2 \rho_0$, et $\chi_{0,2} = \sum_{k=1}^{d} \beta_k \chi_k$ sa décomposition selon une base orthonormée de caractères irréductibles. Alors le nombre de pics lorsqu'on effectue la spectroscopie de Raman de cette molécule est $\sum_{k/\beta_k \neq 0} (\chi_k, \chi_{vib})$.

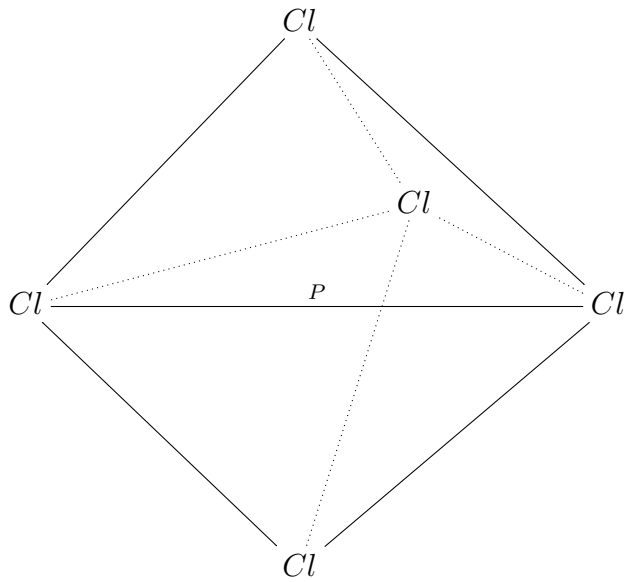
On utilise le lemme suivant pour le calcul de $Sym^2 \rho_0$.

Lemme 3.1. *Soit $g \in G$, alors*

$$\chi_{Sym^2(\rho_0)}(g) = \frac{\chi_{\rho_0}(g)^2 + \chi_{\rho_0}(g^2)}{2}$$

3.3 Exemple de la molécule PCl_5

Voici une représentation de la molécule que nous allons étudier :



On notera D_{3h} son groupe de rotations.

3.3.1 Calcul de G et de sa table de caractères

On étudie d'abord les classes de conjugaisons de G :

- Rot_3 : G contient deux rotations d'ordre 3, d'axe passant par les deux sommets opposés de la molécule ;
- Rot_2 : il s'agit de trois rotations d'ordre deux, d'axe passant par le centre de la molécule et l'un des atomes représenté dans le plan horizontal ;
- Sym : il s'agit de la réflexion de plan le plan horizontal ;
- Sym_3 : il s'agit des composés de la réflexion précédente et d'une rotation d'ordre 3 du plan ;
- Sym_2 : il s'agit des réflexions de plan passant par l'axe vertical et un des sommets du plan horizontal ;

Considérons maintenant la table de caractères de D_{3h} :

D_{3h}	Id	Rot_3	Rot_2	Sym	Sym_3	Sym_2
	1	2	3	1	2	3
triv	1	1	1	1	1	1
A'_2	1	1	-1	1	1	-1
E'	2	-1	0	2	-1	0
A''_1	1	1	1	-1	-1	-1
A''_2	1	1	-1	-1	-1	-1
E''	2	-1	0	-2	1	0

- triv est la représentation triviale ;
- On note $\chi_{st,vert}$ le caractère de la représentation standard obtenue par la représentation par permutation sur les deux sommets de l'axe vertical. Elle a pour caractère

$\chi_{st,vert}$	1	1	1	-1	-1	-1

. Alors, $A'_2 = \chi_{st,vert} \otimes A''_1$.
- E' est le caractère de la représentation standard de la représentation par permutation sur les trois sommets du plan horizontal ;
- A''_1 est la représentation donnée par le déterminant des matrices des élèments de D_{3h} vus dans $GL_3(\mathbb{R})$;
- On note $\chi_{det,hor}$ la représentation donnée par le déterminant des matrices des isométries induites sur le plan horizontal. Elle a pour caractère

$\chi_{det,hor}$	1	1	1	1	1	-1

. On a alors $A''_2 = \chi_{det,hor} \otimes \chi_{st,vert}$.
- $E'' = E' \otimes A''_1$;

3.3.2 Calcul de χ_0

Par ailleurs, χ_0 est le caractère de la représentation naturelle ρ_0 de G de dimension 3, obtenue avec G groupe de symétrie de P (il s'agit donc de calculer des traces de matrices de rotation).

D_{3h}	Id	Rot_3	Rot_2	Sym	Sym_3	Sym_2
	1	2	3	1	2	3
triv	1	1	1	1	1	1
χ_0	3	0	-1	1	-2	1

3.3.3 Caractère χ_{dis}

On calcule χ_E, le caractère de la représentation ρ_E de G par permutation sur les atomes de la molécule. On trouve :

D_{3h}	Id	Rot_3	Rot_2	Sym	Sym_3	Sym_2
	1	2	3	1	2	3
triv	1	1	1	1	1	1
χ_0	3	0	-1	1	-2	1
χ_E	6	3	2	4	1	4

On remarque que Γ est isomorphe, en tant que représentation, à $Hom(\rho_E, \rho_0)$ avec ρ_E la représentation par permutation sur les sommets de la molécule et ρ_0 la représentation donnée naturellement par la définition de G.

Γ correspond en fait naturellement, après le fait que tout élément de Γ s'étend de manière unique en un élément de $Hom(\mathbb{R}^6, \mathbb{R}^3)$ (et réciproquement, c'est le fait qu'il suffit de connaître l'image d'un morphisme sur une base pour qu'il soit totalement déterminé), aux applications linéaires entre E et E_0.

Mais alors, $Hom(E, E_0) = E^* \otimes E_0$. On en déduit que directement :

D_{3h}	Id	Rot_3	Rot_2	Sym	Sym_3	Sym_2
	1	2	3	1	2	3
triv	1	1	1	1	1	1
χ_{dis}	18	0	-2	4	-2	4

En calculant les produits scalaires adéquats, on trouve que :

$$\chi_{dis} = 2\text{triv} + A_2' + 4E' + 3A_2'' + 2E''$$

3.3.4 Calcul de χ_{vib}

Décrivons maintenant χ_{trans} et χ_{rot}.

On définit E_{trans} comme l'espace vectoriel des fonctions constantes dans Γ. Ceci correspond aux éléments de Γ obtenus avec un mouvement de translation (uniforme) de la molécule.

Soit $f \in E_{trans}$, et soit $a \in \mathbb{R}^3$ tel que pour tout $x \in E$, $f(x) = a$. Alors, si $x \in P$, $g \in G$, et $f \in E_{trans}$, on remarque que $g \cdot f(x) = gf(g^{-1}(x)) = g(a)$. Ainsi, $g \cdot f \in E_{trans}$, en prenant pour constante $g(a)$. E_{trans} est donc bien G-stable, et définit donc une sous-représentation.

Il est alors aussi immédiat de voir que $\chi_{trans} = \chi_0$.

On définit E_{rot} comme l'espace vectoriel des éléments de Γ obtenus avec un mouvement de rotation (uniforme) de la molécule, autour de son centre P.

Ses éléments peuvent être décrits par ce qui suit : pour $f \in E_{rot}$, il existe $a \in \mathbb{R}^3$ tel que f soit donné par $p \in P \mapsto \overrightarrow{Op} \wedge a$.

On remarque alors que si $g \in G$, comme $G \subset O_3$, alors pour $p \in P$,

$$g \cdot f(p) = gf(g^{-1}(p)) = g(\overrightarrow{Og^{-1}(p)} \wedge a) = \det(g)\overrightarrow{Op} \wedge g(a).$$

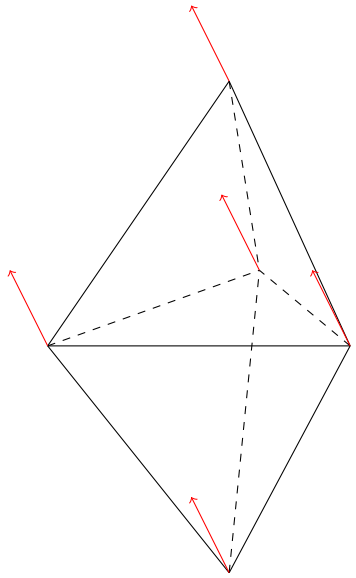


FIGURE 2 – Un exemple de translation "infinitésimale"

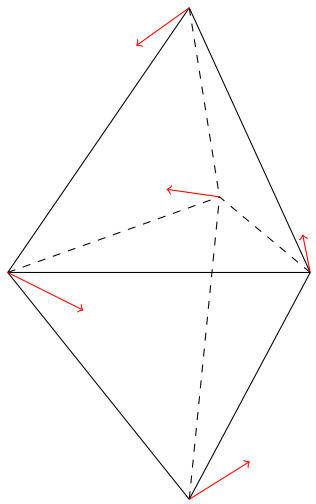


FIGURE 3 – Un exemple de rotation "infinitésimale"

Ceci montre bien que E_{rot} est stable par G et fournit lui aussi une sous-représentation.

Il est alors aisé de calculer son caractère :

D_{3h}	Id	Rot_3	Rot_2	Sym	Sym_3	Sym_2
	1	2	3	1	2	3
χ_0	3	0	-1	1	-2	1
χ_{rot}	3	0	-1	-1	2	-1

.

On montre (en calculant les produits scalaires adéquats) que $\chi_{trans} = E' + A_2''$ et $\chi_{rot} = A_2' + E''$. Ceci permet de voir que E_{trans} et E_{rot} sont orthogonaux dans Γ, et l'on peut définir $E_{trans} \oplus E_{rot}$ comme sous-représentation de Γ.

On a au final, $\chi_{vib} = \chi_{dis} - \chi_{rot} - \chi_{trans}$ qui est donné par :

$$\chi_{vib} = 2\text{triv} + 3E' + 2A_2'' + E''$$

3.3.5 Conclusion

De ce qui précède, $\chi_0 = E' + A_2''$ et $\chi_{vib} = 2\text{triv} + 3E' + 2A_2'' + E''$, donc le nombre de pics visibles dans la spectroscopie IR est : $3 + 2 = 5$.

Par ailleurs, on trouve :

D_{3h}	Id	Rot_3	Rot_2	Sym	Sym_3	Sym_2
	1	2	3	1	2	3
χ_0	3	0	-1	1	-2	1
$\chi_{Sym^2(E_0)}$	6	0	2	2	2	2

.

et donc $Sym^2(E_0) = 2\text{triv} + E' + E''$.

On en déduit que le nombre de pics visibles dans la spectroscopie de Raman est $2 + 3 + 1 = 6$.

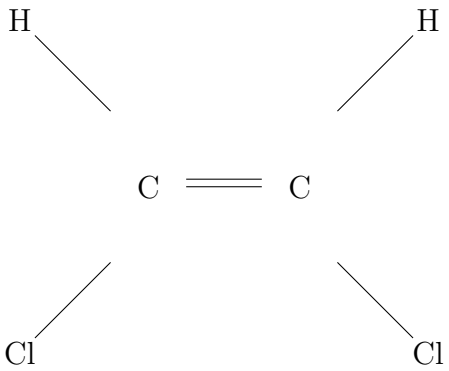
3.4 Distinguer les invariants cis et trans du 1,2-dichloroéthène

Le 1,2-dichloroéthène, $C2H2Cl2$ possède quatre isomères. C'est un puissant solvant très inflammable. Nous allons voir comment les spectroscopies IR et Raman permettent de distinguer deux d'entre eux, les versions "cis" et "trans".

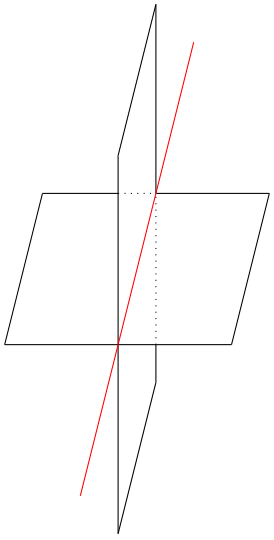
3.4.1 Présentation des deux isomères

D'abord la forme Z, ou cis.

Forme cis (ou Z) du 1,2-dichloroéthène



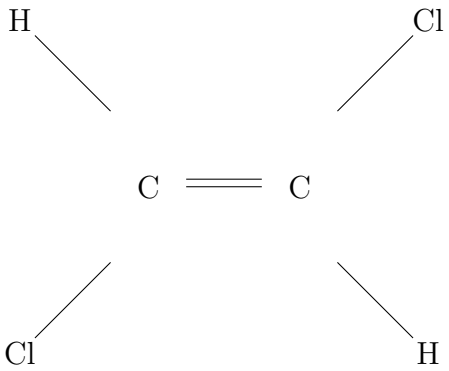
Son groupe des symétries est $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$. Voici comment il agit :



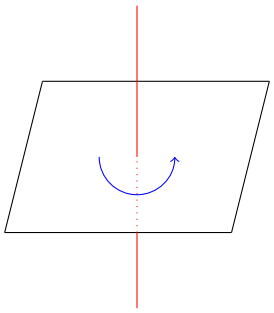
- $(1,1)$ correspond à la rotation d'ax (Oy) et d'angle π.
- $(0,1)$ correspond à la symétrie de plan (Oxy).
- $(1,0)$ correspond à la symétrie de plan (Oyz).

Ensuite la forme E, ou trans.

Forme trans (ou E) du 1,2-dichloroéthène



Son groupe des symétries est aussi $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$. Voici comment il agit :



- $(1,1)$ correspond à $-Id$.
- $(0,1)$ correspond à la rotation d'axe (Oz), et d'angle π.
- $(1,0)$ correspond à la symétrie de plan (Oxy).

3.4.2 table des caractères de $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$

Comme $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ est le groupe des symétries de la molécule, nous allons en dresser la table des caractères. Elle est donnée par :

$\mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$	$(0,0)$	$(1,1)$	$(1,0)$	$(0,1)$
χ_{triv}	1	1	1	1
χ_1	1	-1	-1	1
χ_2	1	-1	1	-1
χ_3	1	1	-1	-1

.

3.4.3 Calcul de χ_0

Vu les natures (symétries, rotations, ...) des transformations considérées, on trouve pour χ_0 :

$\mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$	$(0,0)$	$(1,1)$	$(1,0)$	$(0,1)$
χ_{triv}	1	1	1	1
χ_1	1	-1	-1	1
χ_2	1	-1	1	-1
χ_3	1	1	-1	-1
χ_0^Z	3	-1	1	1
χ_0^E	3	-3	-1	1

.

3.4.4 Calcul de χ_{vib}

On rappelle ρ_E est la représentation par permutation sur les atomes de la molécule. Ensuite, $\chi_{dis} = \chi_E \otimes \chi_0$, $\chi_{trans} = \chi_0$ et $\rho_{rot} = det(\rho_0)\rho_0$.

Enfin, $\chi_{vib} = \chi_{dis} - \chi_{trans} - \chi_{rot}$.

On trouve :

$\mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$	$(0,0)$	$(1,1)$	$(1,0)$	$(0,1)$
χ_{triv}	1	1	1	1
χ_1	1	-1	-1	1
χ_2	1	-1	1	-1
χ_3	1	1	-1	-1
χ_0^Z	3	-1	1	1
χ_0^E	3	-3	-1	1
χ_E^Z	6	0	0	6
χ_E^E	6	0	0	6
χ_{dis}^Z	18	0	0	6
χ_{dis}^E	18	0	0	6
χ_{rot}^Z	3	-1	-1	-1
χ_{rot}^E	3	3	-1	-1
χ_{vib}^Z	12	2	0	6
χ_{vib}^E	12	0	2	6

.

3.4.5 Calcul des nombres de raies d'absorption

En calculant les produits scalaires de χ_0 avec les caractères irréductibles, on trouve : $\chi_0^Z = \chi_{triv} + \chi_1 + \chi_2$ et $\chi_0^E = 2\chi_1 + \chi_2$.

Enfin,

$$n_{IR}^Z = (\chi_{vib}^Z, \chi_{triv}) + (\chi_{vib}^Z, \chi_1) + (\chi_{vib}^Z, \chi_2) = 5 + 4 + 1 = 10.$$

$$n_{IR}^E = (\chi_{vib}^Z, \chi_1) + (\chi_{vib}^Z, \chi_2) = 4 + 2 = 6.$$

Avec la formule du lemme :

$$\chi_{Sym^2(\rho_0)}(g) = \frac{\chi_{\rho_0}(g)^2 + \chi_{\rho_0}(g^2)}{2},$$

on trouve :

$\mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$	$(0,0)$	$(1,1)$	$(1,0)$	$(0,1)$
χ_{triv}	1	1	1	1
χ_1	1	-1	-1	1
χ_2	1	-1	1	-1
χ_3	1	1	-1	-1
χ^Z_{vib}	12	2	0	6
χ^E_{vib}	12	0	2	6
$\chi^Z_{sym^2}$	3	-1	-1	-1
$\chi^E_{sym^2}$	3	3	-1	-1

.

Alors, $\chi^Z_{sym^2} = \chi_1 + \chi_2 + \chi_3$ et $\chi^E_{sym^2} = \chi_{triv} + \chi_3$.
Ainsi,

$$n^Z_{ram} = (\chi^Z_{vib}, \chi_1) + (\chi^Z_{vib}, \chi_2) + (\chi^Z_{vib}, \chi_3) = 4 + 1 + 2 = 7.$$

$$n^E_{ram} = (\chi^Z_{vib}, \chi_{triv}) + (\chi^Z_{vib}, \chi_3) = 5 + 1 = 6.$$

En conclusion, $n^Z_{IR} = 10$, $n^E_{IR} = 6$, $n^Z_{ram} = 7$ et $n^E_{ram} = 6$.

On peut comparer ces résultats avec ceux qui sont obtenus expérimentalement. On rappelle que Z correspond à cis et E à trans.

cis and *trans*-1,2-dichloroethylene. IR and Raman spectra

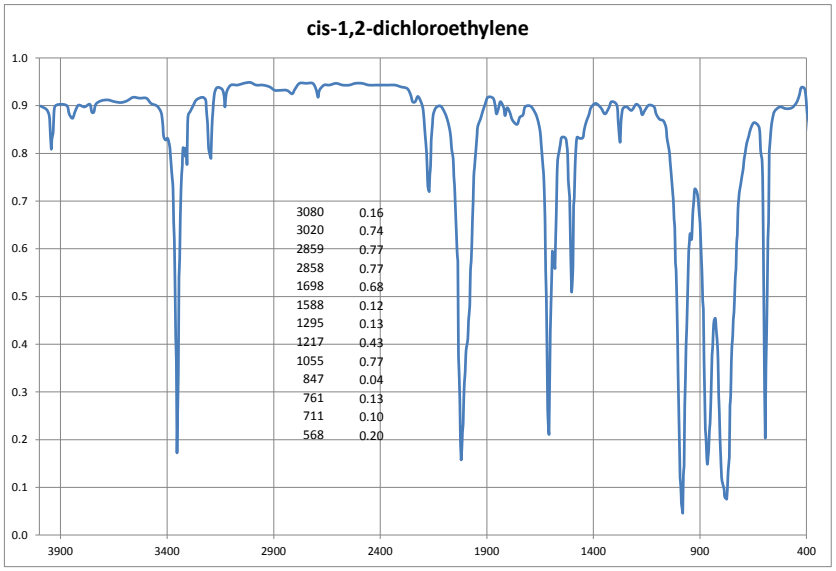


FIGURE 4 – Spectroscopie IR de la forme E (trans)

Références

[1] CARTER, R. Molecular symmetry and group theory

[2] M.P. MALLIAVIN les groupes finis et leurs représentations complexes, p. 40-44

[3] PEYRÉ L'algèbre discrète de la transformée de Fourier, Ellipses (2004) p 221 et 290-291.

[4] JEAN-PIERRE SERRE Représentations linéaires des groupes finis, p. 66-67

[5] WILSON, DECIUS ET CROSS Molecular Vibrations : The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra

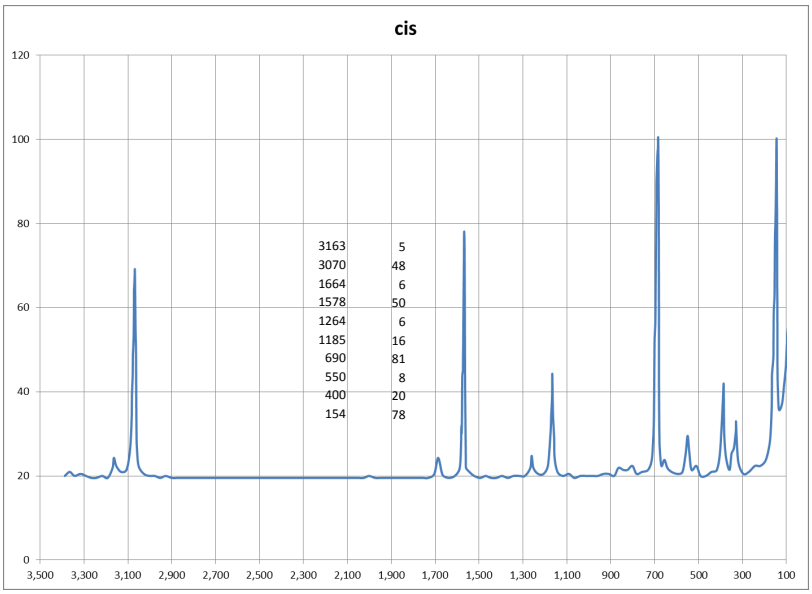


FIGURE 5 – Spectroscopie IR de la forme Z (cis)

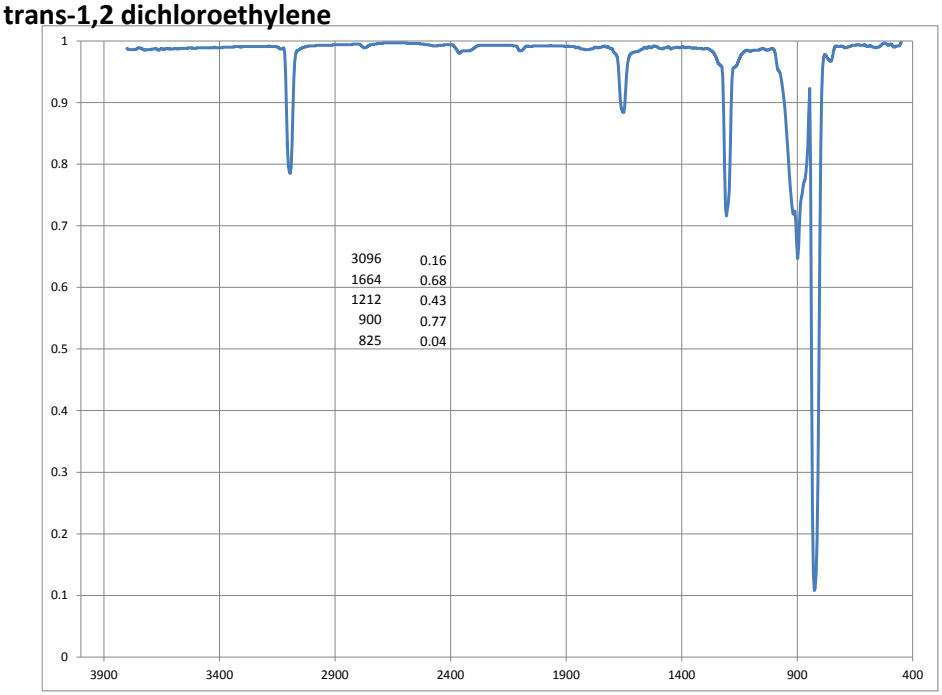


FIGURE 6 – Spectroscopie Raman de la forme E (trans)

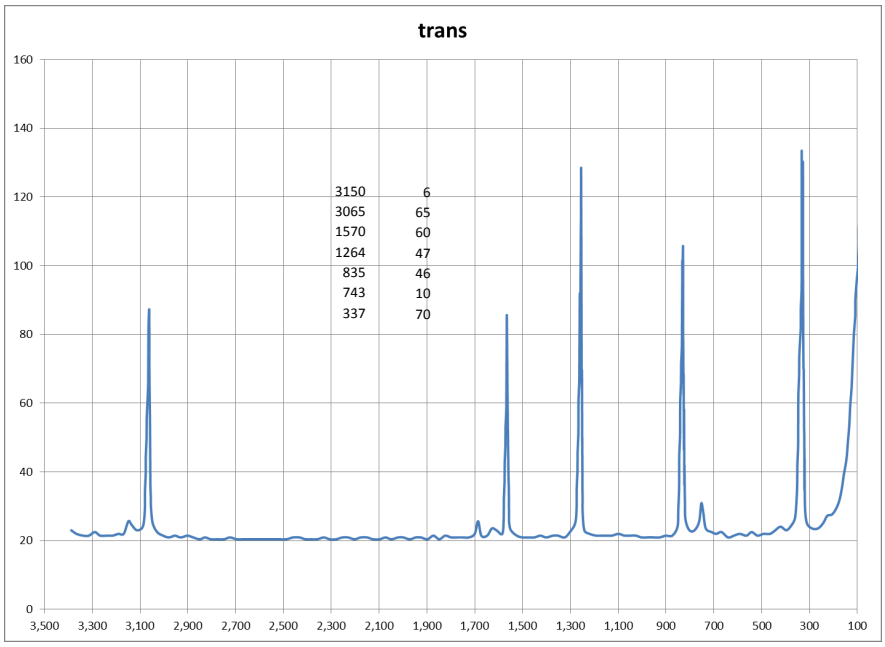


FIGURE 7 – Spectroscopie Raman de la forme Z (cis)