

CLASSIFICATION DES ESPÈCES MOLÉCULAIRES DE DEGRÉ 6 ET 7

Yves Chiricota

RÉSUMÉ. Le but premier de ce travail est de trouver une interprétation combinatoire (géométrique) aux espèces moléculaires de degré 6 et 7. En ce sens, nous poursuivons la tâche entreprise par J. Labelle (voir [La2]). Un des principaux résultats donne une condition nécessaire et suffisante pour qu'une espèce moléculaire soit un quotient non-trivial d'une autre espèce moléculaire. Nous introduisons aussi la notion de « regroupement » qui généralise le quotient d'une espèce.

ABSTRACT. The first goal of this paper is to find a combinatorial (geometrical) interpretation of the molecular species of degree 6 and 7. This is a continuation of J. Labelle's work (see [La2]). One of the main results is a theorem that give a necessary and sufficient condition for a molecular species to be the non-trivial quotient of another molecular species. We also introduce the notion of "regrouping" which is a generalization of the quotient of a species.

1. Introduction. Il est bien connu dans la théorie des espèces de structures que les espèces moléculaires de degré n sont indexées par les classes de conjugaison de sous-groupes du groupe symétrique S_n . À partir d'un représentant K d'une classe de conjugaison il est possible de construire une espèce moléculaire M_K telle que si H est dans la même classe que K , alors les espèces M_K et M_H sont isomorphes, et réciproquement (voir [Ye]). D'un autre côté, si s est une structure combinatoire (par exemple un graphe) fixée par K , on dit que M_K est l'espèce des structures du même type que s . Par exemple, le sous-groupe C_n engendré par la permutation $(1, 2, \dots, n)$ fixe le graphe orienté $\{(1, 2), (2, 3), \dots, (n, 1)\}$. On dit alors que l'espèce M_K est l'espèces des *cycles* sur n points. On peut ainsi « visualiser » les espèces moléculaires. Ceci donne entre-autre un moyen de calculer la dérivée de ces dernières. Notons qu'il est bien évident qu'étant donnée une structure combinatoire s , il est possible de trouver une autre structure non-isomorphe à celle-ci mais qui possède le même stabilisateur K . Dans ce cas, un choix s'offre à nous pour donner une interprétation combinatoire à l'espèce M_K .

Nous développerons ici des outils pour trouver, à partir d'une table de représentants K des classes de conjugaison de sous-groupes de S_n (voir [We]), des structures donnant une interprétation aux espèces M_K . Autant que possible, lorsqu'une espèce moléculaire M sans interprétation est obtenue d'espèces connue par les opérations usuelles sur les espèces (en l'occurrence la somme, le produit, etc.), nous utiliserons cette façon de voir M .

Nous aurons à plusieurs reprises à utiliser le quotient d'espèces (voir [La2]), aussi développons nous cette théorie dans la section 2. Entre autre, nous y voyons une condition nécessaire et suffisante pour qu'une espèce M_K soit le quotient d'une autre espèce. La section 3 introduit la notion de *regroupement* qui généralise le quotient et permet de donner une interprétation à certaines espèces moléculaires lorsque le quotient et les autres opérations ne suffisent pas.

Reçu le 3 septembre 1991 et, sous forme définitive, le 25 août 1993.

©Association mathématique du Québec

Dans les deux sections suivantes, on trouvera une classification des espèces moléculaires sur 6 et 7 points. Nous utilisons les résultats sur les quotients et les regroupements des sections précédentes pour établir cette classification. Finalement, nous utilisons les interprétations trouvées pour calculer combinatoirement la dérivée de quelques espèces moléculaires.

Notons que nous avons mis au point une librairie de procédures Maple pour effectuer notre travail. On trouvera une description de ces programmes dans [Ch1].

2. Quotients et automorphismes d'espèces. Quotienter une espèce est une méthode pour *construire* de nouvelles espèces à partir d'une espèce ayant déjà une interprétation combinatoire. Ce procédé, décrit dans [La2], consiste à prendre comme structures d'une espèce M les orbites de l'action naturelle d'un groupe sur une autre espèce N .

Soit T une espèce moléculaire, nous noterons $\text{aut}(T)$ le groupe des transformations naturelles inversibles du foncteur T dans lui-même. Si $G \times X \xrightarrow{\rho} X$ est une action d'un groupe G sur un ensemble X , nous utiliserons la notation $g.x$ pour désigner $\rho(g, x)$. L'ensemble $\{1, 2, \dots, n\}$ sera dénoté \mathbf{n} . La notation $H \approx K$ sera utilisée pour dire que les groupes H et K sont conjugués dans S_n .

Nous utiliserons la définition suivante de produit semi-direct de groupes.

Définition 2.1. Un groupe G est le *produit semi-direct* de K par H si K et H sont deux sous-groupes de G tels que $K \triangleleft G$, $KH = G$ et $K \cap H = \langle 1 \rangle$. On notera $G = K \rtimes H$.

Si $G = K \rtimes H$ et si \bar{K} et \bar{H} sont deux groupes (pas nécessairement des sous-groupes de G) tels que $\bar{K} \cong K$ et $\bar{H} \cong H$, alors nous dirons par abus de langage que $G = \bar{K} \rtimes \bar{H}$.

Remarquons que si $G = K \rtimes H$ alors $G/K \cong H$.

Proposition 2.2. Soit T une espèce et G un groupe quelconque. S'il existe un homomorphisme

$$\Theta: G \rightarrow \text{aut}(T),$$

on définit une nouvelle espèce, dénotée T/G en posant

$$T/G[U] \stackrel{\text{déf}}{=} T[U]/G = \{G.s : s \in T[U]\},$$

où $G.s = \{\Theta_U(g)(s) : g \in G\}$ (par commodité, on note $\Theta_U(g)(s)$ au lieu de $(\Theta(g))_U(s)$). Si $\beta: U \rightarrow V$ est une bijection, le transport est défini par

$$T/G[\beta](G.s) = G.(T[\beta](s)).$$

Remarque 2.3. Un homomorphisme $\Theta: G \rightarrow \text{aut}(T)$ induit une action

$$G \times T[U] \xrightarrow{\rho_U} T[U]$$

en posant $\rho_U(g, s) \mapsto \Theta_U(g)(s)$. De plus, cette action est telle que si U et V sont des ensembles finis, alors, pour toute bijection $\beta: U \rightarrow V$, le diagramme suivant est commutatif:

$$\begin{array}{ccc} G \times T[U] & \xrightarrow{\rho_U} & T[U] \\ \downarrow \text{id}_{G \times T[\beta]} & & \downarrow T[\beta] \\ G \times T[V] & \xrightarrow{\rho_V} & T[V] \end{array}$$

Réciproquement, si l'action d'un groupe G est telle que le diagramme ci-dessus commute, alors on en déduit un homomorphisme $\Theta: G \rightarrow \text{aut}(T)$.

Définition 2.4. L'espèce définie dans la proposition (2.2) est appelée *quotient de T par G* .

La proposition suivante nous permet de trouver tous les quotients d'une espèce moléculaire quelconque $T = X^n/K$. En effet, elle donne une description de $\text{aut}(T)$ en fonction du normalisateur de K dans le groupe symétrique S_n .

Théorème 2.5. Soit $T = X^n/K$ une espèce moléculaire. On a un isomorphisme de groupes

$$\text{aut}(T) \cong (N_{S_n}(K) / K)^{\text{opp}}.$$

Démonstration. Soit $\sigma \in S_n$, $a \in \text{Bij}(n, U)$ et $aK \in (X^n/K)[U]$. On définit une application $\Theta_{\sigma, U}: (X^n/K)[U] \rightarrow (X^n/K)[U]$ par $\Theta_{\sigma, U}(aK) \stackrel{\text{def}}{=} a\sigma K$. On a que $\Theta_{\sigma, U}$ est bien définie si et seulement si $\sigma \in N_{S_n}(K)$. En effet, pour que $\Theta_{\sigma, U}$ soit bien définie, il faut et il suffit que

$$(\forall a \in \text{Bij}(n, n))(aK = K \Rightarrow a\sigma K = \sigma K).$$

En particulier, quel que soit $k \in K$ on a $kK = K$, donc

$$(\forall k \in K)(k\sigma K = \sigma K),$$

d'où, quel que soit $k \in K$, $\sigma^{-1}k\sigma K = K$. Donc $(\forall k \in K)(\sigma^{-1}k\sigma \in K)$, ce qui entraîne que $\sigma^{-1}K\sigma \subset K$, ainsi $\sigma \in N_{S_n}(K)$. La réciproque est évidente.

Nous noterons $\Theta_{\sigma, U}$ par Θ_σ lorsqu'aucune confusion ne sera possible.

On a que $\sigma \in N_{S_n}(K) \Rightarrow \Theta_\sigma$ est une bijection de $T[U]$ sur $T[U]$. En effet, sous cette condition, $a\sigma K = b\sigma K \Leftrightarrow aK\sigma = bK\sigma \Leftrightarrow aK = bK$. Donc c'est une injection. Puisque $T[U]$ est un ensemble fini, il en découle que Θ_σ est aussi une surjection.

Par suite, on a que Θ_σ est une transformation naturelle. En effet, soit $\beta: U \rightarrow V$.

$$\begin{aligned} (\Theta_\sigma \circ T[\beta])(aK) &= \Theta_\sigma(\beta aK) \\ &= \beta a\sigma K \\ &= T[\beta](a\sigma K) \\ &= (T[\beta] \circ \Theta_\sigma)(aK). \end{aligned}$$

Voyons maintenant que tout élément de $\text{aut}(T)$ est de la forme Θ_σ pour un certain $\sigma \in S_n$. Soient $\Phi \in \text{aut}(T)$ et $\sigma \in S_n$ tel que $\Phi_n(K) = \sigma K$. Alors si $aK \in T[U]$ (en particulier, $a \in \text{Bij}(n, U)$), la naturalité de Φ entraîne que

$$\begin{aligned} \Phi_U(aK) &= \Phi_U(T[a](K)) \quad (\text{où } T[a]: T[n] \rightarrow T[U]) \\ &= T[a](\Phi_n(K)) \\ &= T[a](\sigma K) \\ &= a\sigma K. \end{aligned}$$

Donc quel que soit $\Phi \in \text{aut}(T)$, Φ est de la forme Θ_σ .

Nous allons montrer que l'application $\Lambda: N_{S_n}(K)/K \rightarrow \text{aut}(T)$ définie par $\Lambda(\sigma K) = \Theta_\sigma$ est un anti-isomorphisme de groupes. Tout d'abord, on montre facilement que

$$\Theta_\sigma = \Theta_{\sigma'} \Leftrightarrow \sigma \equiv \sigma' \pmod{K},$$

donc Λ est injective et bien définie. On a montré que tout élément de $\text{aut}(T)$ est de la forme Θ_σ , donc Λ est aussi surjective. Enfin,

$$(\Theta_\sigma \circ \Theta_{\sigma'})(aK) = \Theta_\sigma(a\sigma' K) = a\sigma'\sigma K = \Theta_{\sigma'\sigma}(aK),$$

d'où $\Theta_\sigma \circ \Theta_{\sigma'} = \Theta_{\sigma'\sigma}$, c'est-à-dire

$$\Lambda(\sigma K)\Lambda(\sigma' K) = \Lambda(\sigma'\sigma K) = \Lambda(\sigma' K\sigma K)$$

et Λ est un anti-isomorphisme. \square

Cette proposition a des corollaires utiles.

Corollaire 2.6. Soit $T = X^n/K$ une espèce moléculaire. Si $N_{S_n}(K)/K \cong \langle 1 \rangle$ alors on ne peut faire de quotient non trivial de T .

En fait, la connaissance de tous les sous-groupes dans $N_{S_n}(K)/K$ nous donne tous les quotients possibles de l'espèce X^n/K .

Corollaire 2.7. *On a $\text{aut}(X^n) \cong S_n^{\text{opp}}$; tout automorphisme naturel de $X^n = \text{Bij}(n, -)$ est de la forme $a \mapsto a\sigma$ pour $\sigma \in S_n$.*

Si une espèce X^n/Q est un quotient de X^n/K , alors Q contient un sous-groupe normal (dans Q) conjugué (dans S_n) à K . C'est ce que l'on montre avec la proposition qui suit.

Proposition 2.8. *Si*

$$X^n/Q \cong (X^n/K)/G,$$

alors Q contient un sous-groupe normal \bar{K} conjugué (dans S_n) à K .

Démonstration. Soit $s = K \in (X^n/K)[n]$. Montrons tout d'abord que $K \triangleleft \text{stab}(G.s)$. On a une action naturelle de G sur (X^n/K) , donc

$$(\forall g \in G)(\forall \sigma \in S_n)(g.(X^n/K)[\sigma](s)) = (X^n/K)[\sigma](g.s).$$

Si $k \in K$ et $G.K = G.s \in (X^n/Q)[n]$, on a

$$\begin{aligned} (X^n/Q)[k](G.s) &= ((X^n/K)/G)[k](G.s) \\ &= G.(X^n/K)[k](s) \\ &= G.s, \end{aligned}$$

ainsi $K \leq \bar{Q} \stackrel{\text{déf}}{=} \text{stab}(G.s)$. Par suite, supposons $k \in K$ et $h \in \bar{Q}$. Puisque $h \in \bar{Q}$, il existe $g \in G$ tel que $(X^n/Q)[h](s) = g.s$. Par naturalité de l'action de G , on a aussi $(X^n/Q)[h^{-1}] = g^{-1}.s$. Ainsi, en posant $T = X^n/\bar{Q}$,

$$\begin{aligned} T[hkh^{-1}](s) &= T[hk](T[h^{-1}](s)) \\ &= T[hk](g^{-1}.s) \\ &= T[h](T[k](g^{-1}.s)) \\ &= T[h](g^{-1}.(T[k](s))) \\ &= T[h](g^{-1}.s) \\ &= (gg^{-1}).s = s, \end{aligned}$$

par conséquent, $hkh^{-1} \in \text{stab}(s) = K$. Il s'en suit que $hKh^{-1} \subset K$ car le choix de k est arbitraire, donc $K \triangleleft \bar{Q}$, le choix de h étant lui aussi arbitraire. Or, $\bar{Q} \approx Q$, donc il existe $\sigma \in S_n$ tel que $\bar{Q} = \sigma^{-1}Q\sigma$. Ainsi $\bar{K} = \sigma K \sigma^{-1} \triangleleft Q$. \square

Le corollaire suivant nous donne une condition sous laquelle une espèce n'est pas un quotient.

Corollaire 2.9. *Si $Q \leq S_n$ est simple, alors l'espèce X^n/Q n'est pas un quotient non trivial.*

Exemple 2.10. Le sous-groupe $Q = \langle (1, 2, 3, 4, 5), (1, 4, 2)(3, 5, 6) \rangle \leq S_6$ est isomorphe à A_5 (mais dans une classe de conjugaison différente), c'est donc un groupe simple. Ainsi l'espèce X^n/Q ne peut être obtenue par quotient d'une autre espèce. Nous verrons dans la section 3 une autre construction qui nous permet de trouver une interprétation combinatoire pour cette espèce moléculaire.

Réciproquement, si Q, K sont des sous-groupes de S_n tels que $K \triangleleft Q$, alors l'espèce X^n/Q est un quotient de l'espèce X^n/K comme le montre la proposition suivante. Ce résultat trouve une application dans la recherche d'une interprétation combinatoire pour une espèce atomique X^n/Q lorsque l'on connaît Q . Il suffit de trouver un sous-groupe $K \triangleleft Q$ et alors on sait que l'espèce est

un quotient. De plus, en effectuant le quotient Q/K , on a une description de l'action du groupe par lequel on effectue le quotient.

Proposition 2.11. *Soient $K, Q \leq S_n$ tels que $K \triangleleft Q$, alors il existe un groupe G par lequel on peut effectuer un quotient de X^n/K de telle sorte que*

$$(X^n/K)/G \cong X^n/Q.$$

Démonstration. Posons $N = N_{S_n}(K)$ et $G = Q/K$. D'une part, $K \triangleleft Q \rightarrow Q \leq N_{S_n}(K)$ et alors

$$Q/K \leq N_{S_n}(K)/K.$$

D'autre part, la proposition 2.5 nous donne un (anti-)isomorphisme

$$N/K \xrightarrow{\Lambda} \text{aut}(X^n/K).$$

On a donc

$$Q/K \xrightarrow{\iota} N/K \xrightarrow{\Lambda} \text{aut}(X^n/K).$$

L'action de Q/K sur X^n/K est obtenue en composant le long de $\Lambda \circ \iota$ de sorte que l'image de $qK \in Q/K$ est Θ_q défini par $\Theta_q(aK) = aqK$ ($aK \in (X^n/K)[U]$) (voir la démonstration de la proposition 2.5). On termine la preuve en montrant que Θ_q est bien défini et qu'avec cette action, on a effectivement

$$(X^n/K)/G \cong X^n/Q.$$

En fait, si U est un ensemble fini, on définit un isomorphisme naturel

$$\Omega: (X^n/K)/G \rightarrow X^n/Q$$

en posant

$$\Omega_U(G.aK) = aQ \in (X^n/Q)[U],$$

où $aK \in (X^n/K)[U]$. \square

Le groupe Z_2 agit sur l'espèce \mathcal{C}_n en changeant l'orientation des cycles. On constate alors que $X^n/D_n \cong (X^n/C_n)/Z_2$ (où D_n est le groupe diédral). Or il se trouve que $D_n \cong C_n \rtimes Z_2$ (où D_n est le groupe diédral). Il est donc naturel de se demander si l'assertion suivante est vraie: $X^n/Q \cong (X^n/K)/G \implies Q \cong K \rtimes G$. Il s'avère que cet énoncé est faux. En effet, soit $H_5 = \langle (1, 2, 3, 4, 5), (2, 3, 5, 4) \rangle$ et $\mathcal{P}_5 = X^5/D_5$ l'espèce des polygones à cinq côtés. On a que $X^5/H_5 \cong \mathcal{P}_5/Z_2$ où l'action de Z_2 se fait par complétion des arêtes d'un polygone à 5 côtés $p \in \mathcal{P}_5[U]$. En particulier, on a que $N_{S_5}(D_5) = H_5$ et que $H_5/D_5 \cong Z_2$. Par contre, H n'est pas le produit semi-direct de D_5 par Z_2 . En effet, par inspection, on trouve que $H_5 - D_5$ ne contient que des permutations de la forme (a_1, a_2, a_3, a_4) . Ces permutations sont d'ordre 4. Il est donc impossible de trouver un sous-groupe G de H_5 qui soit d'ordre 2 et tel que $G \cap D_5 = \langle 1 \rangle$.

Par ailleurs, si Q, K et G sont des sous-groupes de S_n tels que $Q = K \rtimes G$, alors en particulier on a que $K \triangleleft Q$ et que $G \cong Q/K$, d'où le corollaire suivant.

Corollaire 2.12. *Soient $G, H, Q \leq S_n$ tels que $Q = K \rtimes G$, alors on peut effectuer un quotient $(X^n/K)/G$ de telle sorte que*

$$(X^n/K)/G \cong X^n/Q.$$

Exemple 2.13. On a $S_n \cong A_n \rtimes Z_2$, donc $X^n/S_n \cong (X^n/A_n)/Z_2$, l'action de Z_2 consiste évidemment à changer l'orientation de la (X^n/A_n) -structure.

Le lemme suivant est utile pour déterminer si un groupe engendré par des permutations est produit semi-direct de deux de ses sous-groupes engendrés par des sous ensembles de permutations données.

Lemme 2.14. Soient $X = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_r\}$ et $Y = \{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_s\}$ deux sous-ensembles de S_n tels que $i \neq j \Rightarrow \tau_i \neq \tau_j$, ($i, j = 1, 2, \dots, r$), $i \neq j \Rightarrow \gamma_i \neq \gamma_j$, ($i, j = 1, 2, \dots, s$) et $X \cap Y = \emptyset$. Posons $Q = \langle X, Y \rangle$, $K = \langle X \rangle$ et $G = \langle Y \rangle$. Supposons que $K \cap G = \langle 1 \rangle$ et que

$$(\forall \tau \in X)(\forall \gamma \in Y)(\gamma \tau \gamma^{-1} \in K)$$

alors

$$Q = K \rtimes G.$$

Démonstration. Montrons que G , K et Q satisfont la définition 2.1. Primo, on a par hypothèse $K \cap G = \langle 1 \rangle$. Secundo, montrons que $K \triangleleft Q$. Tout d'abord, par récurrence sur la longueur de $q \in Q$, on a que $q\tau_i q^{-1} \in K$ (pour $i = 1, 2, \dots, r$). Par suite, si $k = \tau_{i_1}^{\epsilon_1} \tau_{i_2}^{\epsilon_2} \dots \tau_{i_n}^{\epsilon_n} \in K$ (où $\epsilon_i = \pm 1$) et $q \in Q$, on a

$$\begin{aligned} qkq^{-1} &= q\tau_{i_1}^{\epsilon_1} \tau_{i_2}^{\epsilon_2} \dots \tau_{i_n}^{\epsilon_n} q^{-1} \\ &= (q\tau_{i_1}^{\epsilon_1} q^{-1})(q\tau_{i_2}^{\epsilon_2} q^{-1}) \dots (q\tau_{i_n}^{\epsilon_n} q^{-1}) \in K. \end{aligned}$$

Tertio, puisque les générateurs respectifs de K et G forment une partition de ceux de Q et que $K \triangleleft Q$, on a $Q = KG$. \square

Exemple 2.15. Soit $\tau_1 = (1, 2, 3)(4, 5, 6)$, $\tau_2 = (1, 6)(2, 5)(3, 4)$ et $\gamma = (2, 3)(4, 5)$. On calcule que $\langle \tau_1, \tau_2 \rangle \cap \langle \gamma \rangle = \langle 1 \rangle$. De plus, on a $\gamma \tau_1 \gamma^{-1}, \gamma \tau_2 \gamma^{-1} \in K$. Donc le lemme 2.14 entraîne que $\langle \tau_1, \tau_2, \gamma \rangle = \langle \tau_1, \tau_2 \rangle \rtimes \langle \gamma \rangle$.

Or il se trouve que $X^6 / \langle \tau_1, \tau_2 \rangle \cong \mathcal{P}_6^{\text{bic}}$ et que $\langle \tau_1, \tau_2, \gamma \rangle \simeq D_6$. On a donc une action de $\langle \gamma \rangle \cong Z_2$ sur l'espèce $\mathcal{P}_6^{\text{bic}}$. Le quotient par cette action est équivalente à oublier la coloration des $\mathcal{P}_6^{\text{bic}}$ -structures.

Par la suite, nous utiliserons la notation de [We] pour le nom des groupes représentant les classes de conjugaisons de sous-groupes de S_6 et S_7 . Par exemple, le groupe Kd ci-dessous est un groupe isomorphe au groupe de Klein, mais dans une autre classe de conjugaison (voir les tables de l'appendice A au besoin).

Exemple 2.16. L'espèce X^6 est de toute évidence isomorphe à $X^3 \circ X^2$. Une X^6 -structure peut être considérée comme une liste de trois ordres linéaires sur deux points. Soit $Kd = \langle (1, 4)(2, 5), (1, 4)(3, 6) \rangle$, il est clair que

$$X^6 / Kd \cong (X^3 \circ X^2) / Kd.$$

Une (X^6 / Kd) -structure peut être représentée comme l'ensemble obtenu en inversant simultanément de toutes les façons possibles deux des X^2 -structures formant une $(X^3 \circ X^2)$ -structure donnée (voir la figure 1). Remarquons qu'on a $\langle 1 \rangle \triangleleft Kd$, donc la proposition 2.11 s'applique à $X^6 \cong X^6 / \langle 1 \rangle$.

Le modèle ci-dessus nous servira à la section 7 pour calculer la dérivée de l'espèce X^6 / Kd . Cette dernière possède toutefois une interprétation comme quotient de l'espèce $X^2 E_2(X^2)$ par Z_2 tel que décrit à la figure 2. Dans cette figure, nous avons indiqué par des flèches a, b, c la correspondance entre les deux interprétations (la flèche c est la même dans les deux cas). Il est facile de voir que le stabilisateur de la structure de la figure 2 est conjugué à Kd . Pour s'en

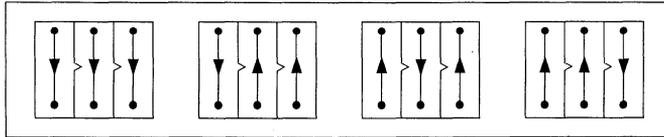


FIGURE 1. Une (X^6 / Kd) -structure.

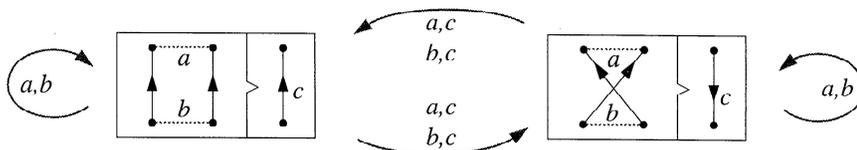


FIGURE 2. Autre interprétation de X^6/Kd .

convaincre, le lecteur constatera que les automorphismes de cette structure consistent à inverser exactement deux des flèches a, b, c à la fois. Enfin, notons que $Z_2 \cong \langle (1, 4)(2, 5) \rangle \triangleleft Kb$ en accord avec la proposition 2.11.

Exemple 2.17. Le groupe

$$A_4b = \langle (1, 2, 3)(4, 5, 6), (1, 4)(2, 5) \rangle$$

est isomorphe à

$$A_4 = \langle (1, 2, 3), (1, 2)(3, 4) \rangle$$

mais dans une classe de conjugaison différente. Avec le lemme 2.14, on montre que $A_4b = Kd \rtimes C_3b$, où $C_3b = \langle (1, 2, 3)(4, 5, 6) \rangle$ est isomorphe à Z_3 . On a donc une action naturelle de Z_3 sur l'espèce X^6/Kd . Cette action consiste à permuter cycliquement les 3 ordres linéaires sur 2 points dans les $(X^3 \circ X^2)$ -structures formant les (X^6/Kd) -structures. On a donc $X^6/A_4b \cong (X^6/Kd)/Z_3$ sous cette action.

Considérons maintenant le groupe

$$S_4c = \langle (1, 2, 3)(4, 5, 6), (1, 4)(2, 5), (1, 4)(2, 3)(5, 6) \rangle$$

isomorphe à S_4 . On a $S_4c \cong A_4b \rtimes G_1$ où $G_1 = \langle (1, 4), (2, 3), (5, 6) \rangle \cong Z_2$. Il y a donc une action naturelle du groupe Z_2 sur l'espèce X^6/A_4b . A la lumière du théorème 2.5 et de la proposition 2.11, une façon de déterminer comment Z_2 agit est de calculer le transport par $(X^6/A_4b)[(1, 4)(2, 3)(5, 6)]$ de $\ell = ((1, 4), (2, 5), (3, 6)) \in (X^3 \circ X^2)[n]$; on trouve $((4, 1), (3, 6), (2, 5))$. L'action se fait donc en inversant l'ordre du couple ayant $\{1, 4\}$ comme ensemble sous-jacent et en échangeant le couple sur $\{2, 5\}$ avec celui sur $\{3, 6\}$ dans toutes les $(X^3 \circ X^2)$ -structures formant la classe contenant ℓ dans $(X^6/A_4b)[\{1, 2, \dots, 6\}]$. Il suffit d'utiliser le transport de structures pour un ensemble quelconque U .

Il y a un autre groupe isomorphe à S_4 dans S_6 . C'est le groupe

$$S_4d = \langle (1, 2, 3)(4, 5, 6), (1, 4)(2, 5), (2, 3)(5, 6) \rangle.$$

On montre avec le lemme 2.14 que $S_4d = A_4b \rtimes G_2$, où $G_2 = \langle (2, 3)(5, 6) \rangle \cong Z_2$. Ici aussi Z_2 agit sur l'espèce X^6/A_4b . L'action dans ce cas se fait en échangeant le couple sur $\{2, 5\}$ avec celui sur $\{3, 6\}$ dans toutes les (X^6/Kd) -structures formant la classe contenant ℓ (on ne modifie pas le couple sur $\{1, 4\}$).

Exemple 2.18. Considérons le groupe

$$S_3^2b = \langle (1, 2, 3)(4, 5, 6), (1, 6, 3, 4, 2, 5), (2, 3)(5, 6) \rangle,$$

qui est isomorphe au produit cartésien $S_3 \times S_3$.

Ce groupe contient 6 copies isomorphes à D_6 qui sont les stabilisateurs des hexagones de la figure 3. Seules les copies correspondant aux trois hexagones du bas sont telles que le produit semi-direct de C_3b avec le stabilisateur de celles-ci donne S_3^2b (C_3b fixe les trois premiers hexagones). Nommons respectivement G_1, G_2 et G_3 ces copies de D_6 .

Il y a donc un quotient de $X^6/C_3b \cong C_3 \circ X^2$ par D_6 . Utilisons la présentation suivante de D_6 : $\langle \rho, \tau ; \rho^6 = 1, \tau^2 = 1, \rho\tau\rho\tau = 1 \rangle$.

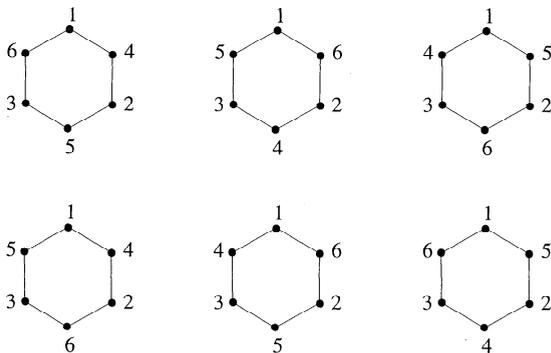


FIGURE 3. Six structures fixées par les copies de D_6 dans S_3^2b .

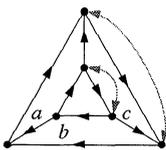


FIGURE 4. Effet de τ sur une $C_3 \circ X^2$ -structure.

L'action de τ sur une $C_3 \circ X^2$ -structure est décrite par la figure 4. Elle consiste à choisir une des faces étiquetées a, b, c dans la figure et à échanger les points opposés comme indiqué par les flèches pâles. On constatera facilement que cette action ne dépend pas du choix de la face. En fait, on a inversé les orientations des deux triangles orientés dans le graphe (figure 4). Les trois façons de faire agir τ correspondent à G_1, G_2 et G_3 .

L'effet de ρ est décrit par la figure 5. Comme dans le cas de τ , il y a trois façons de faire agir ρ correspondant aux trois sous-groupes G_1, G_2 et G_3 . On se convaincra, en observant la figure 6, que cette action ne dépend pas du choix de la façon de faire agir ρ . Dans les trois cas, on échange les triangles intérieurs et extérieurs de la $C_3 \circ X^2$ -structure et on effectue une rotation d'un tiers de tour dans le sens anti-horaire du triangle intérieur.

Analysons cette action de D_6 sur l'espèce $C_3 \circ X^2$. Pour ce faire, posons $\xi_1 = (1, 2, 3)(4, 5, 6)$, $\xi_2 = (2, 3)(4, 5)$, $\xi_3 = (1, 3, 2)(4, 5, 6)$, $\xi_4 = (1, 6)(2, 5)(3, 4)$. Un calcul montre que $G_1 = \langle \xi_2, \xi_3, \xi_4 \rangle (\cong D_6)$. Par ailleurs, $\langle (1, 5, 3, 6, 2, 4) \rangle = \langle \xi_3 \rangle \rtimes \langle \xi_4 \rangle$ (il est bien connu que $Z_6 = Z_3 \rtimes Z_2$). On a donc $G_1 = (\langle \xi_3 \rangle \rtimes \langle \xi_4 \rangle) \rtimes \langle \xi_2 \rangle$. On en déduit les quotients successifs suivants. Dans un premier temps, on peut faire le quotient de $C_3 \circ X^2$ par Z_3 qui consiste à effectuer un tiers de tour dans le sens anti-horaire du triangle intérieur. Il est facile de voir que l'espèce quotient est C_3^2 . Ensuite, on quotiente l'espèce obtenue par Z_2 en échangeant les deux triangles (cycles) entre eux. On obtient l'espèce $E_2(C_3)$. Finalement, le troisième quotient consiste à changer l'orientation des

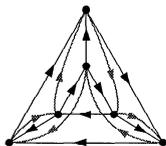


FIGURE 5. Effet de ρ sur une $C_3 \circ X^2$ -structure.

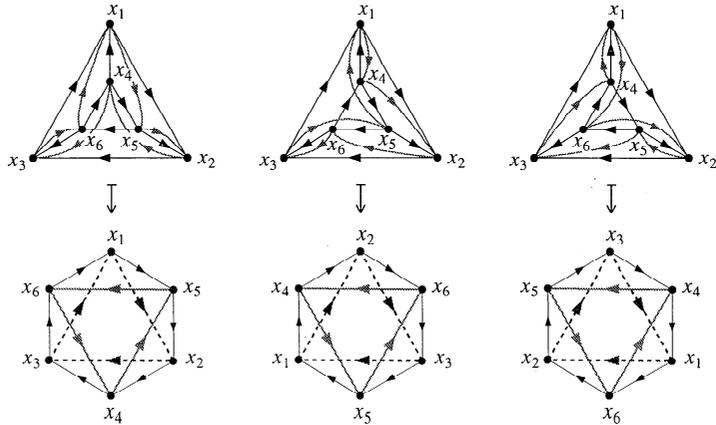


FIGURE 6. L'effet de ρ sur une $C_3 \circ X^2$ -structure ne dépend pas du choix du « trajet » à faire parcourir aux points.

deux cycles en même temps. On obtient un quotient de $E_2(C_3)$. De façon schématique, on pourrait résumer ainsi

$$C_3 \circ X^2 \xrightarrow{Z_3} C_3^2 \xrightarrow{Z_2} E_2(C_3) \xrightarrow{Z_2} E_2(C_3)/Z_2.$$

L'existence de ces quotients découle de la proposition 2.11 et du fait que l'on a

$$\langle \xi_1 \rangle \triangleleft \langle \xi_1, \xi_3 \rangle \triangleleft \langle \xi_1, \xi_3, \xi_4 \rangle \triangleleft \langle \xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4 \rangle.$$

Notons que l'on peut faire agir les groupes $\langle \xi_2 \rangle$, $\langle \xi_3 \rangle$ et $\langle \xi_4 \rangle$ indépendamment sur l'espace $C_3 \circ X^2$. L'action induite par ξ_2 consiste à changer en même temps les deux orientations des triangles. Quant à ξ_3 , l'action induite est de faire tourner le triangle intérieur d'un tiers de tour dans le sens anti-horaire (c'est l'action de ρ^2 ci-dessus). Enfin ξ_4 induit l'action qui se fait en échangeant les deux triangles entre eux et en changeant leur orientation simultanément (c'est le même effet que ρ^3 ci-dessus). D'autres quotients sont possibles. Par exemple, on a

$$\langle \xi_1 \rangle \triangleleft \langle \xi_1, \xi_4 \rangle \triangleleft \langle \xi_1, \xi_3, \xi_4 \rangle \triangleleft \langle \xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4 \rangle.$$

Par contre, ces actions ne commutent pas. Si on effectue d'abord les quotients par Z_2 , nous ne pourrions quotienter par Z_3 ensuite. En effet, il est facile de voir que si on effectue le quotient de $C_3 \circ X^2$ induit par ξ_2 , on obtient l'espace $E_3 \circ X^2$. Par suite, si on utilise l'action induite par ξ_4 , on obtient l'espace \mathcal{P}_6 (entre autre parce que $\langle \xi_1, \xi_2, \xi_4 \rangle \approx D_6 b$). Or on a $N_{S_6}(D_6) - D_6$ et donc $N_{S_6}(D_6)/D_6 \cong \langle 1 \rangle$. Il s'en suit, d'après le théorème 2.5, que le seul automorphisme de l'espace des polygones à 6 côtés est l'identité. Il est donc impossible d'effectuer un quotient par Z_3 . Ceci se traduit aussi par le fait que $\langle \xi_1, \xi_2, \xi_4 \rangle \not\approx \langle \xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4 \rangle$. Dans le cas contraire, la proposition 2.11 nous donnerait un quotient.

3. Regroupements. Le corollaire 2.9 entraîne que certaines espèces atomiques (telle $X^6/A_5 b$) ne sont pas un quotient d'une autre espèce par un groupe non-trivial. Nous verrons ici une opération plus générale que le quotient qui nous permet de décrire certaines de ces espèces.

Étant donnée une espèce moléculaire T , le groupe symétrique S_n agit sur les structures de $T[n]$ par transport. L'action de $\sigma \in S_n$ sur $s \in T[n]$ est définie par $\sigma.s = T[\sigma](s)$. Si $H \leq S_n$, on peut faire agir toutes les permutations de H sur une structure s donnée. Nous verrons ci-dessous qu'on peut définir une nouvelle espèce à partir de T et H . Cette nouvelle espèce est appelée *regroupement* et généralise le quotient.

Cette construction est apparue dans un contexte informatique où l'on fait agir des sous-groupes de S_n sur des structures appartenant à des espèces moléculaires (voir [Ch1]). De cette façon nous obtenons de nouvelles structures donnant une interprétation combinatoire à certaines espèces moléculaires. Le corollaire 2.9 et l'existence de sous-groupes simples de S_n (par exemple X^6/A_5b) n'ayant pas d'interprétation directe (faisant appel à des espèces plus simples) dans le cadre de la théorie des espèces sont une autre justification la notion de regroupement.

Dans ce qui suit, si T est une espèce moléculaire, nous identifierons T à l'espèce X^n/K où K est le stabilisateur d'une $T[n]$ -structure.

Définition 3.1. Soit $T = X^n/K$ une espèce moléculaire et $H \leq S_n$ tel que $HK = KH$. On appelle *regroupement de T relatif à H* l'espèce notée $T//H$ et définie par

$$(T//H)[U] = \{\{fhK : h \in H\} : f \in \text{Bij}(n, U)\}.$$

Si $\beta \in \text{Bij}(U, V)$, le transport par β est défini par

$$(T//H)[\beta](\{fhK : h \in H\}) = \{\beta fhK : h \in H\}.$$

Remarque 3.2. La condition $HK = KH$ n'est pas nécessaire pour que le regroupement de X^n/K relativement à H soit bien défini. Mais nous allons voir dans ce qui suit que si cette condition est vérifiée, alors le regroupement jouit de propriétés intéressantes.

Remarque 3.3. On montre facilement que le transport ci-dessus est lui aussi bien défini.

Lorsque le contexte sera clair, nous dénoterons l'ensemble $\{fhK : h \in H\}$ par $[f]_H$. Si aucune confusion n'est possible, nous écrirons aussi $[f]$ au lieu de $[f]_H$.

Proposition 3.4. Si T est une espèce moléculaire alors $T//H$ est aussi une espèce moléculaire.

Notons que l'on pourrait aussi définir le regroupement à partir d'un ensemble quelconque de permutations au lieu d'un sous-groupe H . Dans ce cas, il se peut que les « classes » $[f]_H$ ne soient pas disjointes.

Proposition 3.5. Avec les notations utilisées plus haut, soit $H \leq S_n$. Si $HK = KH$ alors pour tout ensemble U , $(T//H)[U]$ est une partition de $T[U]$. De plus, si cette condition est vérifiée, alors

$$|[f]_H| = |H|/|H \cap K|.$$

Démonstration. Soit U un ensemble fini. Montrons d'abord que les classes sont disjointes. Soient $f, g \in \text{Bij}(n, U)$, supposons que $[f] \cap [g] \neq \emptyset$. Il existe alors fh_1K et gh_2K tels que $h_1, h_2 \in H$ et $fh_1K = gh_2K$. En particulier il existe $k \in K$ tel que $fh_1 = gh_2k$. Ainsi $f = gh_2kh_1^{-1}$, mais $HK = KH$ donc il existe $h_3 \in H$ et $k_1 \in K$ tels que $kh_1^{-1} = h_3k_1$. D'où $f = gh_2h_3k_1$. Par suite, si $fhK \in [f]$, on peut écrire

$$\begin{aligned} fhK &= (gh_2h_3k_1)hK \\ &= g(h_2h_3h_4)k_2K && \text{(car } HK = KH) \\ &= gh_5K && \text{(car } H \text{ est un groupe)} \end{aligned}$$

Donc $fhK \in [g]$, ainsi $[f] \subset [g]$. L'inclusion inverse se montre de façon similaire.

Par ailleurs, il est clair que

$$\bigcup_{f \in \text{Bij}(n, U)} [f]_H = T[U].$$

La première assertion est démontrée. Montrons maintenant la seconde. Il est facile de montrer que l'application

$$\begin{aligned} \rho: H &\longrightarrow [f]_H \\ h &\longmapsto fhK \end{aligned}$$

est bien définie et surjective. Par ailleurs, soient $h_1 \in H$, $h_2 \in H$ et $f \in \text{Bij}(n, U)$. On a $h_1 h_2^{-1} \in H \cap K \Leftrightarrow f h_1 K = f h_2 K$. En effet, d'une part, la condition entraîne qu'il existe $k \in H \cap K$ tel que $h_1 = h_2 k$. Ainsi $f h_1 K = f h_2 k K = f h_2 K$. D'autre part, si $f h_1 K = f h_2 K$ alors il existe $k \in K$ tel que $f h_1 = f h_2 k$. Donc $h_1 = h_2 k$, c.-à-d. $k = h_1 h_2^{-1} \in K$. Finalement $k = h_1 h_2^{-1} \in H$ (car H est un groupe), donc $k = h_1 h_2^{-1} \in H \cap K$. Il s'en suit que $|\rho^{-1}(f h K)| = |H \cap K|$ et la seconde assertion est démontrée. \square

Remarque 3.6. On vient de voir que la condition $HK = KH$ entraîne que le regroupement de $T = X^n/K$ relatif à H donne une partition de $T[U]$. Les éléments de $T[U]$ sont alors regroupés suivant leur image par l'application r_U suivante:

$$\begin{aligned} r_U : T[U] &\longrightarrow (T//H)[U] \\ fK &\longmapsto \{fhK : h \in H\}. \end{aligned}$$

La partition est en fait $\{r_U^{-1}(x) : x \in (T//H)[U]\}$.

Remarquons que $HK = KH$ si et seulement si HK est un groupe. Il s'avère que le stabilisateur d'une $T//H$ -structure sur $\{1, 2, \dots, n\}$ est (conjugué à) HK comme le montre la proposition suivante.

Proposition 3.7. *Soient H tel que $HK = KH$ et $[f]_H \in (T//H)[n]$, alors $\text{stab}([f]_H)$ est conjugué à HK .*

Démonstration. Soit $[1]_H \in (T//H)[n]$. Tout d'abord, montrons que $KH \leq \text{stab}([1]_H)$. Soit $k^* h^* \in KH$. Par définition $[1]_H = \{hK : h \in H\}$, on a donc $k^* h^* hK = h_1 k_1 K = h_1 K$ car $HK = KH$ et $h_1 K \in \{hK : h \in H\}$. Ainsi $[1]_H \cap [h^* k^* 1]_H \neq \emptyset$ d'où $[h^* k^* 1]_H = [1]_H$ (voir la proposition 3.5). Ainsi $(h^* k^*).[1]_H = [h^* k^* 1]_H = [1]_H$. Donc $KH \leq \text{stab}([1]_H)$.

D'autre part, on a $\text{stab}([1]_H) \leq KH$. Soit $\sigma \in \text{stab}([1]_H)$, alors quel que soit $h_1 \in H$, il existe $h_2 \in H$ tels que $\sigma h_1 K = h_2 K$. Il existe donc $k \in K$ tel que $\sigma h_1 = h_2 k$, d'où $\sigma = h_2 k h_1^{-1} = k_1 h_3 h_1^{-1} \in KH$. Il s'en suit que $\text{stab}([1]_H) \leq KH$ et on conclut. \square

Corollaire 3.8. *Soit $T = X^n/K$ et $H \leq S_n$ tel que $HK = KH$, alors*

$$T//H \cong X^n/HK.$$

De plus, sous ces conditions, on a $|(X^n/HK)[n]| = \frac{n!|H \cap K|}{|H||K|}$.

La proposition suivante montre que tout quotient est un regroupement.

Proposition 3.9. *Soit $T = X^n/K$ une espèce moléculaire. Tout quotient de T par un groupe G est isomorphe à un regroupement par un groupe $H \leq S_n$.*

Démonstration. Soit $\varphi : G \rightarrow \text{aut}(T)$ un homomorphisme. Nous supposons sans perte de généralité que φ est injectif. L'espèce T est moléculaire, donc pour tout $g \in G$ on peut définir $X_g = \{\sigma \in S_n : \sigma K = g.K\}$, où $g.K$ désigne $\varphi(g)_n(K)$. Posons

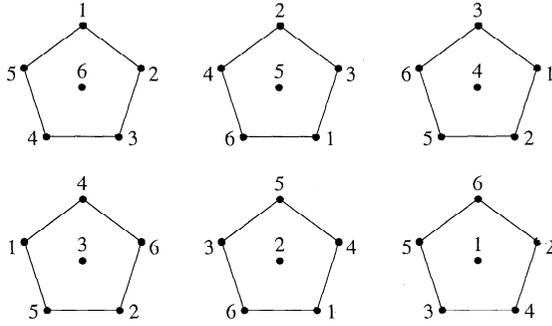
$$H = \bigcup_{g \in G} X_g.$$

On a que H est un sous-groupe de S_n . En effet, en utilisant le fait que $\varphi(g)$ est une transformation naturelle, on calcule que $\sigma \tau K = \sigma(g_2.K) = g_2.(\sigma K) = g_2.(g_1 K) = g_2 g_1 K$. De plus on a $\sigma(g^{-1}.K) = g^{-1}.(\sigma K) = g^{-1}.(g.K) = K$, d'où $\sigma^{-1} K = g^{-1}.K$.

On montre aussi que $X_1 = K \triangleleft H$ et que

$$G \cong (H / K)^{\text{opp}}.$$

Montrons maintenant que les espèces T/G et $T//H$ sont isomorphes. Pour ce faire, il faut exhiber une bijection naturelle entre T/G et $T//H$. Soit U un ensemble fini et $\Phi : T/G \rightarrow T//H$

FIGURE 7. Une (X^6/A_5b) -structure.

définie par $\Phi_U(G.aK) = [a]_H$, pour tout $G.aK \in (T/G)[U]$. Cette application est bien définie. En effet, si $G.aK = G.bK$ alors $1.aK = aK = g.bK$ pour un $g \in G$. Or $g.bK = b(g.K)$ par naturalité. De plus, il existe $h \in H$ tel que $g.K = hK$, d'où $aK = bhK$. Il s'en suit que $[a]_H \cap [b]_H \neq \emptyset$, d'où $[a]_H = [b]_H$, grâce à la proposition 3.5.

Par suite, si $[a]_H \in (T//H)[U]$ alors $[a]_H$ est l'image de $G.aK$, donc Φ est surjective.

Montrons maintenant que Φ est injective. Si $[a]_H = [b]_H$ alors il existe $k \in K$ et $h \in H$ tels que $a = bhk$. Soit $g (= gh)$ tel que $hK = g.K$, donné par définition de H . On a

$$\begin{aligned} G.aK &= G.(b(g.K)) \\ &= G.(g.bK) \quad (\text{l'action de } G \text{ étant naturelle}) \\ &= G.bK. \end{aligned}$$

Finalement, il faut montrer que, quels que soient les ensembles finis U et V et la bijection $\beta: U \rightarrow V$, le diagramme suivant commute:

$$\begin{array}{ccc} T/G[U] & \xrightarrow{\Phi_U} & T//H[U] \\ T/G[\beta] \downarrow & & \downarrow T//H[\beta] \\ T/G[V] & \xrightarrow{\Phi_V} & T//H[V] \end{array}$$

Or, si $G.aK \in (T/G)[U]$ alors

$$\begin{aligned} (\Phi_V \circ T/G[\beta])(G.aK) &= \Phi_V(G.(T[\beta](aK))) \\ &= \Phi_V(G.\beta aK) \\ &= [\beta a]_H \\ &= T//H[\beta]([a]_H) \\ &= (T//H[\beta] \circ \Phi_U)(G.aK). \end{aligned}$$

Ceci termine la démonstration. \square

Exemple 3.10. Soit A_5b le groupe $\langle (1, 2, 3, 4, 5), (1, 2, 5)(3, 6, 4) \rangle$. On a vu dans l'exemple 2.10 que l'espèce X^6/A_5b n'est pas un quotient car A_5b est simple. Par contre, on peut exprimer X^6/A_5b comme un regroupement. Soit $H = \langle (1, 2, 5)(3, 6, 4), (1, 4)(2, 3) \rangle$ et $K = \langle (1, 2, 3, 4, 5), (2, 5)(3, 4) \rangle$. On a que $H \approx A_4b$, où A_4b est défini dans l'exemple 2.17 et que $X^6/K \cong XP_5$. De plus, $H, K \leq A_5b$ et $HK = KH = A_5b$. On peut donc faire un regroupement de l'espèce XP_5 de telle sorte que $X^6/A_5b \cong XP_5//H$. La figure 7 représente une X^6/A_5b -structure sur l'ensemble $\{1, 2, \dots, 6\}$.

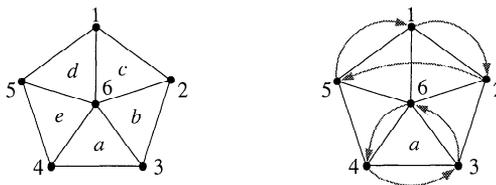


FIGURE 8. Une façon d'obtenir une classe de $XP_5//H$.

Par ailleurs, on calcule que $|H \cap K| = 2$, $|H| = 12$ et $|[1]_H| = 6$. Donc, on a bien $|[1]_H| = |H|/|H \cap K| = 2$, en accord avec la proposition 3.5.

Il y a une autre façon de trouver les XP_5 -structures faisant partie d'une classe de $XP_5//H$. Avec $s = K$, on obtient les 5 autres structures de $H.s$ en effectuant les deux rotations indiquées par la figure 8 et ce pour toutes les faces (a, b, c, d et e). On représente s par un graphe dans cette figure. Toutefois, cette action n'est pas naturelle car il n'y a pas de façon de distinguer les 5 faces du graphe sans en étiqueter les sommets.

4. Espèces moléculaires sur 6 points. On utilise ici les techniques et résultats des sections précédentes pour donner une interprétation combinatoire aux espèces moléculaires de degré 6. Il est bien connu que toute espèce moléculaire est isomorphe à une espèce de la forme X^n/K où $K \leq S_n$. De plus, deux espèces X^n/K_1 et X^n/K_2 sont isomorphes si et seulement si $K_1 \approx K_2$. Il y a donc autant d'espèces moléculaires (à isomorphisme près) sur n points qu'il y a de classes de conjugaison de sous-groupes dans S_n . On trouvera dans [We] une liste de représentants de ces classes pour $n = 6$. C'est à partir de cette liste que nous avons travaillé. Nous y avons aussi emprunté les noms des représentants des classes de conjugaison.

Nous allons donner une interprétation aux espèces qui n'ont pas été décrites dans les sections 2 et 3. Rappelons que nous avons écrit un ensemble de procédures en MAPLE qui nous ont facilité la tâche. Certaines des méthodes employées en MAPLE sont illustrées dans [Ch1]. On trouvera à l'appendice A des tables donnant la liste complète des espèces ainsi qu'un renvoi à l'exemple où l'on en donne une interprétation, si l'espèce est atomique.

Parmi les espèces sur 6 points, certaines sont obtenues de celles sur 2 et 3 points par substitution (en effet, $6 = 2 \times 3$). Ces espèces ont été identifiées en calculant le stabilisateur d'une structure et en trouvant le représentant de sa classe de conjugaison. Par exemple, le stabilisateur de $\{(1, 3, 4), (2, 5, 6)\}$, une $(E_2 \circ X^3)$ -structure sur $\{1, 2, \dots, 6\}$ est $K = \langle (1, 2)(3, 5)(4, 6) \rangle$. En trouvant le représentant de la classe de conjugaison de K , on identifie cette espèce. Les autres espèces identifiables de cette façon sont

$$E_2(XE_2), C_3(X^2), E_3(X^2), C_3(E_2), E_3(E_2), E_2(C_3), E_2(E_3).$$

Certaines espèces sur 6 points sont obtenues par produit d'espèces sur des cardinalités plus petites, on retrouve

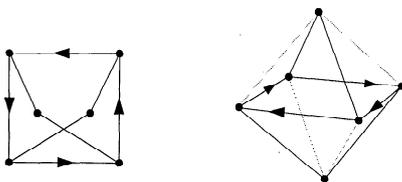
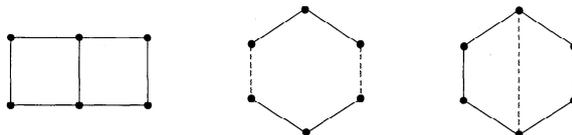
$$E_2E_2(X^2), E_2^3, C_4E_2, P_4^{\text{bic}}E_2, P_4E_2, E_4^\pm E_2, E_4E_2, C_3^2, E_3C_3, E_3^2.$$

De plus, d'autres espèces ont la forme $X^r M_s$ où M_s est de degré $s \geq 1$, $r \geq 1$ et $r + s = 6$.

Par inspection, on trouvera que les espèces ci-dessus sont les seules qui sont non atomiques ou non primitives. Remarquons aussi que certaines espèces sont obtenues à la fois des deux façons mentionnées ci-dessus: Par exemple, $E_3^2 = X^2 \circ E_3$.

Notons aussi que certaines espèces vivent sur toutes les cardinalités ou sur les cardinalités paires. On retrouve ainsi

$$C_6, P_6^{\text{bic}}, P_6, E_6^\pm, E_6.$$

FIGURE 9. Une (X^6/C_4b) -structure.FIGURE 10. Une (X^6/Ke) -structure.

Nous allons maintenant entreprendre la description des espèces qui n'ont pas encore été mentionnées.

Exemple 4.1. Parmi celles-ci, on retrouve l'espèce X^6/C_4b , où

$$C_4b = \langle (1, 2, 3, 4)(5, 6) \rangle.$$

C'est l'espèce des graphes (orientés) isomorphes à celui qu'on voit dans la figure 9. On peut plonger ce graphe dans un octaèdre comme l'illustre la figure.

Exemple 4.2. Soit $Ke = \langle (1, 2)(3, 4)(5, 6), (1, 5)(2, 6) \rangle$. Les trois graphes de la figure 10 représentent tous des X^6/Ke -structures. Le premier est un graphe simple. En ce qui concerne le deuxième, on a affaire à un hexagone dont deux arêtes opposées sont d'une autre couleur. Le troisième est un hexagone muni d'un diamètre. Il est facile de voir que le stabilisateur de chacun de ces graphes est conjugué à Ke , les espèces correspondantes sont donc isomorphes.

Comme l'illustre la figure 11, cette espèce est aussi isomorphe au quotient de $X^2E_2(X^2)$ par Z_2 qui consiste à inverser tous les 2-ordres linéaires simultanément. Il est facile de voir que l'espèce obtenue de cette façon est bien isomorphe à celle obtenue avec le graphe ci-dessus.

Exemple 4.3. Le groupe $D_4d = \langle (1, 3, 2, 4)(5, 6), (1, 2)(5, 6) \rangle$ est le produit semi-direct de C_4b avec $\langle (1, 2)(5, 6) \rangle \cong Z_2$. L'espèce X^6/D_4d est le quotient de X^6/C_4b par Z_2 . L'action de Z_2 est représentée par la figure 12.

Exemple 4.4. Il y a deux façons de représenter l'espèce X^6/D_4b . D'une part, on calcule que $D_4b = \langle (1, 3, 2, 4) \rangle \times \langle (1, 2)(5, 6) \rangle$, il y a donc une action de Z_2 sur l'espèce X^2C_4 telle que $X^6/D_4b = X^2C_4/Z_2$. Cette action consiste à inverser simultanément l'ordre linéaire (sur 2 points) et le cycle d'une X^2C_4 -structure. D'autre part, il est facile de voir que D_4b est le groupe des automorphismes de l'octaèdre.

FIGURE 11. Autre interprétation pour (X^6/Ke) .

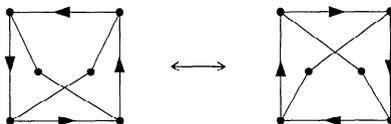


FIGURE 12. Action de Z_2 sur X^6/C_4b .

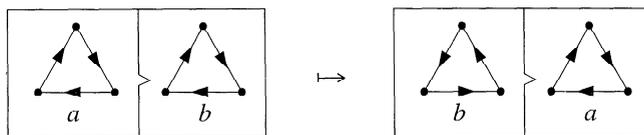


FIGURE 13. Quotient de C_3^2 par Z_4 .

Exemple 4.5. Le groupe $S_4b = \langle (1, 2, 3), (1, 2)(3, 4), (1, 2), (5, 6) \rangle$ est le produit semi-direct de $\langle (1, 2, 3), (1, 2)(3, 4) \rangle \approx A_4a$ par le groupe $\langle (1, 2), (5, 6) \rangle \cong Z_2$. On en déduit l'action de Z_2 sur l'espèce $F_2^\pm F_4^\pm \cong X^2 E_4^\pm$ qui consiste à changer les deux orientations simultanément. Sous cette action on a $X^6/S_4b \cong (X^2 E_4^\pm)/Z_2$.

Exemple 4.6. Soit $S_3^2a^+$ le groupe $\langle (1, 2, 3), (4, 5, 6), (1, 2)(4, 5) \rangle$ isomorphe à l'intersection de $S_3 \times S_3$ avec A_6 . On calcule $S_3^2a^+ = \langle (1, 2, 3), (4, 5, 6) \rangle \rtimes \langle (1, 2)(4, 5) \rangle$, d'où l'action de Z_2 sur l'espèce C_3^2 qui consiste à changer l'orientation des deux cycles d'une C_3^2 -structure. On a alors $X^6/S_3^2a^+ \cong C_3^2/Z_2$.

Exemple 4.7. Le groupe $C_2[S_3]a^+ = \langle (1, 2, 3), (4, 5, 6), (1, 4)(2, 6, 3, 5) \rangle$ est le produit semi-direct de $\langle (1, 2, 3), (4, 5, 6) \rangle$ par $\langle (1, 4)(2, 6, 3, 5) \rangle \approx C_4b \cong Z_4$. On a donc une action de Z_4 sur l'espèce C_3^2 . L'action est illustrée par la figure 13, où on voit l'effet du générateur de Z_4 sur une C_3^2 -structure.

Exemple 4.8. Finalement, l'espèce X^6/S_5b , où

$$S_5b = \langle (1, 2, 3, 4, 5), (2, 3, 5, 4), (1, 2, 5)(3, 6, 4) \rangle$$

est le quotient de X^6/A_5b par Z_2 dont l'action est induite par la complémentation du polygone à 5 côtés comme l'illustre la figure 14.

5. Espèces moléculaires sur 7 points. Nous allons étudier ici quelques-unes des espèces moléculaires vivant sur 7 points obtenues par quotient. Pour une interprétation des autres espèces sur 7 points, on pourra consulter l'appendice A.

Exemple 5.1. Parmi les espèces sur 7 points, quelques-unes sont obtenues par un quotient de l'espèce $X^7/\langle (1, 2, 3) \rangle = X^2 X^2 C_3$ par certains groupes. Par exemple, on a $S_3e = \langle (1, 2, 3) \rangle \rtimes \langle (1, 2)(4, 5)(6, 7) \rangle$. L'espèce X^7/S_3e est donc un quotient de $X^2 X^2 C_3$ par Z_2 où l'action consiste à changer l'orientation des deux ordres linéaires et du cycle simultanément (voir la figure 15).

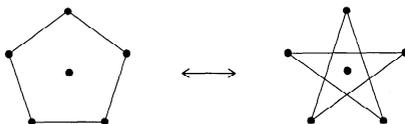
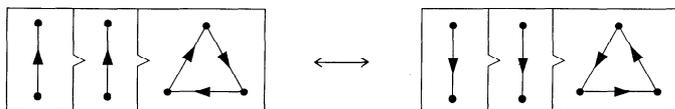
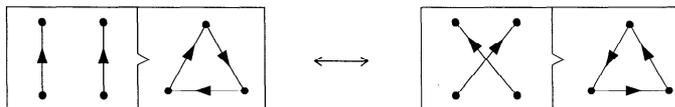


FIGURE 14. Action induite sur les X^6/S_5b -structures.

FIGURE 15. X^6/S_3e .FIGURE 16. X^6/D_6e .

L'espèce $E_2(X^2)C_3$ est le quotient de $X^2X^2C_3$ obtenu en échangeant les deux ordres linéaires. On peut par la suite quotienter $E_2(X^2)C_3$ par Z_2 en changeant l'orientation du cycle. On a alors $E_2(X^2)E_3 \cong X^7/D_6c$, où $D_6c = \langle (1, 2, 3)(4, 5)(6, 7) \rangle \rtimes \langle (1, 2) \rangle$.

Exemple 5.2. Considérons le groupe $D_6e = \langle (1, 2, 3)(4, 5)(6, 7) \rangle \rtimes \langle (1, 2)(4, 5) \rangle$. On a ici une action de Z_2 sur l'espèce $E_2(X^2)C_3$ décrite par la figure 16.

Exemple 5.3. Le groupe Z_3 agit sur l'espèce $\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$ comme illustré par la figure 17. L'action consiste à choisir une couleur d'arête et à effectuer une rotation des trois points comme indiqué après avoir placé les arêtes de la couleur choisie verticalement et celles de l'autre couleur horizontalement. On vérifiera qu'il y a quatre façons de représenter un polygone bicoloré de la sorte et dans tous les cas, l'effet de la rotation est le même (en d'autres mots, cette action sur la $\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$ -structure est naturelle en ce sens que peu importe la façon d'effectuer la rotation (il y en a 4), le résultat est le même).

La figure 18 donne une autre façon de voir cette action. On fait subir à la structure une rotation r de $\pi/2$ et ensuite on effectue une transposition t des deux points reliés par une arête en trait plein. Remarquons entre autre que $(t \circ r)^3 = 1$. Soit le groupe $A_4c = \langle (4, 5)(6, 7), (4, 6)(5, 7) \rangle \rtimes \langle (1, 2, 3)(4, 5, 6) \rangle$. L'espèce X^7/A_4c est donc le quotient de $X^3\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$ par Z_3 où l'action sur une structure consiste à permuter cycliquement les trois points de l'ordre linéaire et à effectuer la rotation indiquée ci-dessus sur la $\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$ -structure.

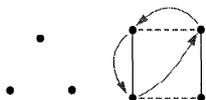
Exemple 5.4. Le groupe Z_2 agit sur l'espèce $E_2(X^2)$ en effectuant la transformation illustrée par la figure 19. On vérifiera que cette action est naturelle. Soit $Q_6a = \langle (1, 2, 3), (4, 5)(6, 7), (1, 2)(4, 6, 5, 7) \rangle$. Un calcul montre que

$$\langle (1, 2, 3), (4, 5)(6, 7) \rangle \triangleleft Q_6a.$$

On a donc une action de $Q_6a/\langle (1, 2, 3), (4, 5)(6, 7) \rangle \cong Z_2$ sur l'espèce $C_3E_2(X^2)$. Cette action est obtenue en appliquant l'action de Z_2 sur $E_2(X^2)$ décrite ci-dessus et en changeant l'orientation du cycle.

Exemple 5.5. Considérons le groupe

$$G = \langle (1, 2, 3), (4, 5)(6, 7), (4, 6)(5, 7) \rangle \rtimes \langle (1, 2)(4, 6) \rangle \cong D_4S_3 \cap A_7.$$

FIGURE 17. X^7/A_4c .

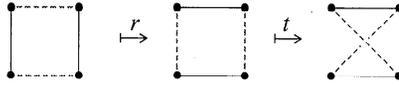


FIGURE 18. X^7/A_4c .

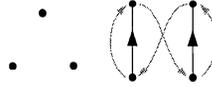


FIGURE 19. X^7/Q_6a .

L'espèce X^7/G est le quotient de $C_3\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$ par Z_2 obtenu en changeant l'orientation du cycle et en effectuant la transformation indiquée par la figure 20 sur $\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$.

Exemple 5.6. Soit

$$H_7a = \langle (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7), (2, 7)(3, 6)(4, 5), (2, 3, 5)(4, 7, 6) \rangle \rtimes \langle (2, 3, 5)(4, 7, 6) \rangle.$$

On a ici un quotient de \mathcal{P}_7 par Z_3 , l'action étant illustrée par la figure 21.

Exemple 5.7. En utilisant l'action de Z_2 sur l'espèce \mathcal{P}_5 décrite dans la figure 14, on peut faire un quotient de l'espèce $X^2\mathcal{P}_5$ par Z_2 en changeant l'orientation de l'ordre linéaire et en complétant le polygone en même temps. Sur les stabilisateurs, ceci se traduit par le fait que

$$D_5a = \langle (1, 2, 3, 4, 5), (2, 5)(3, 4) \rangle \triangleleft \langle (1, 2, 3, 4, 5), (2, 5)(3, 4), (2, 3, 5, 4)(6, 7) \rangle = H_5b.$$

On a que $X^2\mathcal{P}_5 \cong X^7/D_5a$, donc $X^7/H_5b \cong (X^2\mathcal{P}_5)/Z_2$, le quotient est celui décrit ci-dessus. Remarquons qu'ici, H_5b n'est pas le produit semi-direct de D_5a par Z_2 car $\langle (1, 2, 3, 4, 5), (2, 5)(3, 4) \rangle \cap \langle (2, 3, 5, 4)(6, 7) \rangle = \langle (2, 5)(3, 4) \rangle \neq \langle 1 \rangle$. Par contre, $H_5b/D_5a \cong Z_2$ (voir la proposition 2.5).

Exemple 5.8. Le groupe

$$S_4e = \langle (1, 3, 2)(4, 5, 6), (4, 5)(6, 7), (4, 6)(5, 7), (1, 2)(4, 6) \rangle$$

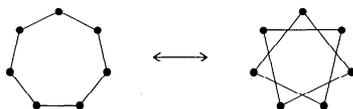
est le produit semi-direct de $A_4c \cong \langle (1, 3, 2)(4, 5, 6), (4, 5)(6, 7), (4, 6)(5, 7) \rangle$ par $\langle (1, 2)(4, 6) \rangle \cong Z_2$. De plus, on a vu que $X^7/A_4c \cong (X^3\mathcal{P}_4^{\text{bic}})/Z_3$. L'action de Z_2 sur une $(X^3\mathcal{P}_4^{\text{bic}})/Z_3$ -structure se fait en appliquant la tranformation décrite dans la figure 20.

6. Critère d'atomicité. Nous donnons ici une condition nécessaire et suffisante pour déterminer si une espèce X^n/H est atomique. Cette condition est une adaptation du critère de Yeh (voir [Ye], chap. I § 2) à notre contexte, c.-à-d. au cas où H est donné sous la forme $\langle g_1, g_2, \dots, g_r \rangle$, g_i étant un élément de S_n pour $i = 1, 2, \dots, r$.

On trouvera dans [Ch1] le code Maple implémentant notre méthode. Ces programmes peuvent servir à déterminer si l'espèce moléculaire à laquelle appartient une structure s est atomique ou non après avoir calculé le groupe des automorphismes de s (voir l'exemple 6.6).



FIGURE 20. $X^7/(D_4S_3 \cap A_7)$.

FIGURE 21. X^7/H_7a .

Établissons quelques notations. Soit G un groupe. Nous dénoterons par (G, E) le G -ensemble E . Soit $H \leq S_n$ et $U \subset \mathfrak{n}$. Supposons que (H, U) soit un H -ensemble. Soit $V \subset U$ tel que $HV \subset V$. Si $h \in H$, on définit la restriction de h à V , noté h_V , par $h_V(u) = h(u)$, $\forall u \in V$. De même, si $U \subset W$ on définit l'extension de h à W , notée h^W , par

$$h^W(w) = \begin{cases} h(w) & \text{si } w \in U, \\ w & \text{sinon.} \end{cases}$$

Nous désignerons par H_V l'ensemble $\{h_V : h \in H\}$ et par H^W l'ensemble $\{h^W : h \in H\}$.

Définition 6.1. Soit H, U et V comme ci-dessus. On dira que (H_V, V) est un facteur de (H, U) si $(H_V)^U \subset H$.

Le lemme suivant est dû à Yeh (voir [Ye]).

Lemme 6.2. Si X^n/H est une espèce moléculaire et s'il existe $U \subset \mathfrak{n}$ tel que $U \neq \emptyset$, $U \neq \mathfrak{n}$ et que (H_U, U) est un facteur de (H, \mathfrak{n}) , alors on a un isomorphisme d'espèce s

$$\frac{X^n}{H} \cong \frac{X^{|U|}}{H_U} \cdot \frac{X^{|\mathfrak{n} \setminus U|}}{H_{\mathfrak{n} \setminus U}}.$$

Ainsi pour déterminer que $H \leq S_n$ est le stabilisateur d'une espèce non-atomique, il suffit de trouver un sous-ensemble propre U de \mathfrak{n} tel que $HU \subset U$ et (H_U, U) soit un facteur de (H, \mathfrak{n}) . Le lemme suivant facilitera la recherche d'un tel U et nous permettra d'énoncer un algorithme d'atomicité. Nous dénoterons par $\mathcal{O}(H)$ l'ensemble des orbites de (H, \mathfrak{n}) .

Lemme 6.3. Si (H_U, U) est un facteur de (H, \mathfrak{n}) , alors il existe un sous-ensemble Θ de $\mathcal{O}(H)$ tel que

$$U = \bigcup_{Q \in \Theta} Q.$$

Démonstration. Il suffit de montrer que si $Q \in \mathcal{O}(H)$ alors $U \cap Q \neq \emptyset \Rightarrow Q \subset U$. Ceci est clair car si $q \in Q$ et $q \in U$, alors $Q = Hq \subset HU \subset U$. \square

Le choix d'un facteur est donc limité par le choix de l'ensemble U qui doit être précisément la réunion de certaines orbites de H . Par ailleurs, si on connaît des générateurs de H (ce qui est notre cas dans le contexte de la classification des espèces moléculaires), la condition $(H_V)^U \subset H$ de facteur est facilement vérifiée à partir des générateurs. Il est en effet évident que si $V \subset U \subset \mathfrak{n}$, alors

$$\forall h, k \in H, h_V k_V = (hk)_V \quad \text{et} \quad h^U k^U = (hk)^U.$$

Il s'en suit le résultat suivant

Lemme 6.4. Si $H = \langle h_1, h_2, \dots, h_r \rangle$ alors

$$(H_V)^U \subset H \iff \forall h \in \{h_1, h_2, \dots, h_r\}, (h_V)^U \in H.$$

Nous avons tous les outils en main pour énoncer l'algorithme. Nous utilisons la notation $\mathcal{P}_k(\Theta)$ pour désigner l'ensemble des parties à k éléments de Θ .

Algorithme 6.5 (Critère d'atomicité).

Soit $H = \langle h_1, h_2, \dots, h_r \rangle \leq S_n$;

Soit $m := |\mathcal{O}(H)|$;

Pour $k = 1$ à $m - 1$ faire

Pour chaque $\{O_1, O_2, \dots, O_k\} \in \mathcal{P}_k(\mathcal{O}(H))$ faire

$U := \bigcup_{1 \leq i \leq k} O_i$;

Si $\forall h \in \{h_1, h_2, \dots, h_r\}$, on a $hU \subset U$ et $(hU)^n \in H$

alors retourner (H_U, U) ;

fin;

Retourner \emptyset ;

Exemple 6.6. Il est facile de voir que le stabilisateur de toute $\mathcal{C}_n(X^2)$ -structure est conjugué au groupe engendré par la permutation

$$h = (1, 2, \dots, n)(n+1, n+2, \dots, 2n).$$

Par ailleurs il est clair que

$$\mathcal{O}(\langle h \rangle) = \{\{1, 2, \dots, n\}, \{n+1, n+2, \dots, 2n\}\}.$$

Les seuls choix pour l'ensemble U d'un éventuel facteur sont donc $\{1, 2, \dots, n\}$ ou $\{n+1, n+2, \dots, 2n\}$. Dans un cas comme dans l'autre, la condition sur $(h_U)^{\{1, 2, \dots, 2n\}}$ n'est pas vérifiée. Par conséquent, $\mathcal{C}_n(X^2)$ est atomique.

L'algorithme précédent a été utilisé pour classer les espèces de l'appendice A comme atomiques ou non.

7. Calcul de dérivées. La dérivée d'une espèce M est la nouvelle espèce M' définie par

$$M'[U] \stackrel{\text{déf}}{=} M[U + \{*\}],$$

où $* \notin U$. Nous nommerons M -structure dérivée un élément de $M'[U]$; notons que bien qu'une telle structure dérivée soit une construction sur $U + \{*\}$, son ensemble sous-jacent est U .

La dérivée d'une espèce moléculaire peut être calculée à partir des interprétations combinatoires telles que trouvées aux sections 4 et 5. Une première approche consiste, grosso modo, à d'exhiber un isomorphisme naturel à partir de l'objet qui décrit l'espèce moléculaire (voir entre autre [La2]).

On peut aussi utiliser la formule suivante, due à Yeh ([Ye, LY]),

$$(X^n/K)' = \sum_{x \in \mathcal{O}_K} \frac{X^{n-1}}{K \cap S_{\{1, 2, \dots, n\} - \{x\}}},$$

où \mathcal{O}_K est un système de représentants des orbites de K . On trouvera dans [Ch1] le code Maple pour effectuer ce calcul de façon automatique.

Nous utiliserons une méthode combinant les deux précédentes. Cette façon de procéder nous permet d'une certaine façon de « voir » la dérivée sur la structure comme c'est le cas lorsque l'on cherche un isomorphisme naturel. Il s'agit de trouver les types d'isomorphisme d'une structure sur l'ensemble $U + \{*\}$ et ensuite de calculer le stabilisateur de chaque type d'isomorphisme. Notons qu'ici la notion d'isomorphisme doit tenir compte du point $*$. Par exemple, les structures de la figure 22 ne sont pas isomorphes, le point $*$ n'occupant pas la même position dans l'ordre linéaire. Par contre, la figure 23 illustre deux structures dérivées isomorphes.

Notons que si la structure dérivée s est obtenue du quotient d'une espèce, le point $*$ doit se retrouver dans chaque structure formant s .

Nous utiliserons ici cette méthode pour calculer la dérivée de quelques unes des espèces sur 6 et 7 points trouvées dans les sections précédentes.



FIGURE 22. Structures dérivées non-isomorphes.



FIGURE 23. Structures dérivées isomorphes.

Exemple 7.1. Tout d’abord, considérons l’espèce C_3^2/Z_2 . Il est facile de voir que $(C_3^2/Z_2)' = 2(X^2C_3/Z_2)$. En effet, l’ajout du point peut se faire dans le premier ou le deuxième cycle. La figure 24 montre une structure dérivée du premier type.

Exemple 7.2. Considérons maintenant l’espèce X^6/Kd . Une structure dérivée est obtenue en choisissant un des couples (une des X^2 -structures) d’une (X^6/Kd) -structure s et en y plaçant le point $*$ comme l’illustre la figure 25. Le choix du couple n’est a priori pas suffisant car chacun des trois couples est aussi muni d’un ordre linéaire. Une fois le couple choisi, il faut choisir où se place le point $*$ dans celui-ci. Cette fois, le choix est arbitraire car l’action de Kd « symétrise » s . En d’autres mots, il est équivalent de mettre $*$ sur une position ou l’autre dans le couple choisi, puisque l’action de Kd échange ces deux positions. Une fois le choix du couple fait et le point $*$ placé dans le couple, on constate que le seul automorphisme (de structure) possible pour s est d’inverser simultanément les deux couples de s qui ne contiennent pas $*$ (on pourrait penser qu’un autre automorphisme consiste à échanger ces deux couples entre eux, mais ce n’est pas le cas car les trois couples sont ordonnés linéairement).

Remarquons que l’automorphisme doit agir simultanément sur toutes les $X^3 \circ X^2$ formant s . Cet automorphisme échange les $X^3 \circ X^2$ structures composant s entre elles. On conclut que le stabilisateur de s est conjugué à C_2b , d’où $(X^6/Kb)' \cong 3XE_2(X^2)$.

Exemple 7.3. L’espèce X^6/A_4b est isomorphe au quotient de X^6/Kd par Z_3 tel que décrit à l’exemple 2.17. L’action de Z_3 consiste à permuter cycliquement les trois couples simultanément dans chacune des quatre structures qui forment la structure quotient. Cette action rend indifférent le choix du couple dans lequel ira le point $*$. De plus, on voit que le seul automorphisme de la structure dérivée obtenue consiste à inverser chacun des deux couples ne comportant pas le point $*$, d’où $(X^6/A_4b)' = XE_2(X^2)$.

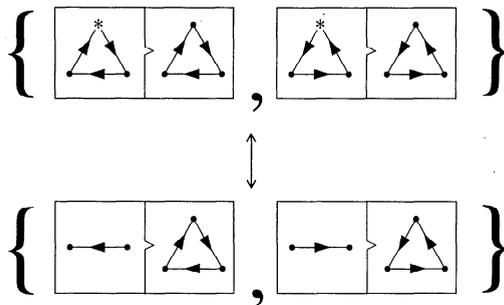


FIGURE 24. Dérivée de C_3^2/Z_2 .

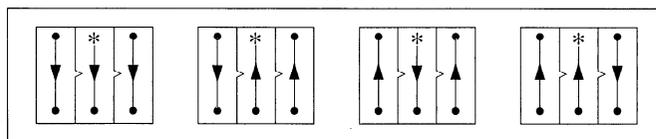


FIGURE 25. Dérivée de (X^6/Kd) .

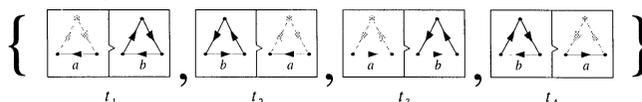


FIGURE 26. Dérivée de C_3^2/Z_4 .

Exemple 7.4. Considérons l'espèce C_3^2/Z_4 (ce quotient est décrit à l'exemple 4.7). Une structure dérivée est donnée dans la figure 26. On voit, en calculant le stabilisateur, qu'une telle structure est en fait une $(X^2C_3)/Z_2$ -structure. On se convaincra en effet que $\text{stab}(\{t_1, t_3\}) = \text{stab}(\{t_2, t_4\}) = \text{stab}(\{t_1, t_2, t_3, t_4\})$.

Exemple 7.5. La dérivée de l'espèce X^6/C_4b est $X^5 + XE_2(X^2)$ (l'espèce X^6/C_4b est décrite à l'exemple 4.1). La figure 27 illustre ce fait. On voit qu'il y a deux choix pour l'emplacement du point *. Le premier donnant lieu à une X^5 -structure et le second à une $XE_2(X^2)$ -structure.

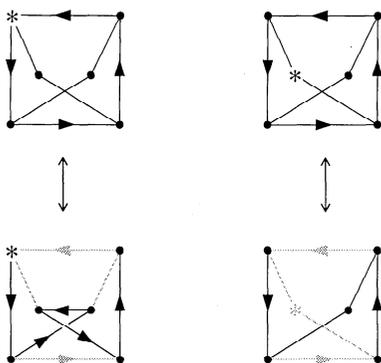
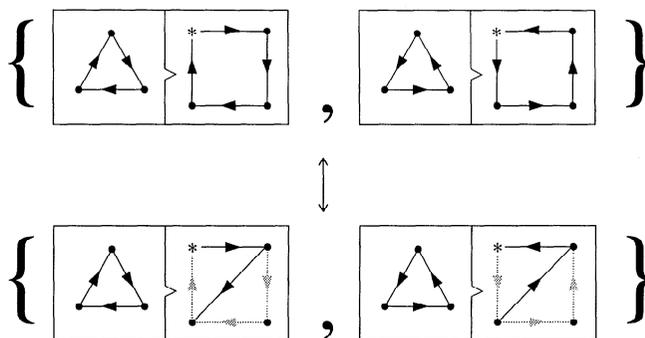
Exemple 7.6. Une $(C_3C_4)/Z_2$ -structure dérivée est obtenue en plaçant le point * dans l'un des deux cycles. Si on le place dans le 3-cycle, il est facile de voir que l'on obtient une $(X^2C_4)/Z_2$ -structure. Dans l'autre cas, la figure 28 illustre le fait que l'on obtient une $X((X^2C_3)/Z_2)$ -structure. D'où

$$((C_3C_4)/Z_2)' = (X^2C_4)/Z_2 + X((X^2C_3)/Z_2).$$

Exemple 7.7. Une D_6e -structure dérivée (section 5) est obtenue en plaçant le point * dans l'un des deux ordres linéaires (au début ou à la fin, d'où deux cas) ou dans le 3-cycle. La première éventualité est illustrée par la figure 29. On obtient dans ce cas une structure appartenant à l'espèce $X((X^2C_3)/Z_2)$. Si le point * est dans le cycle, la structure correspond à une X^6/Kd -structure comme l'illustre la figure 30. En effet, on constate que les automorphismes de cette structure consistent à échanger deux des paires de points a, b, c simultanément. On conclut que $(X^7/D_6e)' = 2X((X^2C_3)/Z_2) + X^6/Kd$.

English extended abstract. It is a well known fact in the theory of species of structures that molecular species of degree n can be indexed by conjugacy classes of subgroups of the symmetric group S_n . More explicitly, given a representative K of these conjugacy classes, it is possible to define a corresponding molecular species M_K . Moreover, if K and H are conjugate, then M_K and M_H are isomorphic. A table due to Wensley (see [We]) gives representatives of the conjugacy classes of subgroups of S_7 . We used this table to find a combinatorial interpretation for molecular species of degree 6 and 7. A molecular species is said to have a combinatorial interpretation if 1) it is "constructible" from species that already have combinatorial interpretations by means of usual operations on species (+, ·, quotient, etc.), or 2) the objects belonging to the species are easily describable combinatorial structures (like cycles, polygons, etc.).

To achieve our goal, we first study the concept of the quotient of a species. The quotient of a species T by a group G is possible if there is a homomorphism from G to $\text{aut}((T))$ (the group of automorphisms of T). The structures belonging to the quotient species on a set U have the form $G.s$, where s is an element of $G[U]$. Theorem 2.5 gives a representation of the group of

FIGURE 27. Dérivée de X^7/C_4b .FIGURE 28. Dérivée de $(C_3C_4)/Z_2$.

automorphisms of a molecular species T . Propositions 2.8 and 2.11 give necessary and sufficient conditions on a subgroup $Q \leq S_n$ for the species M_Q associated to Q to be a non-trivial quotient.

We introduce the notion of regrouping that is a generalization of the quotient. This is a construction that can be used when it is impossible to represent a species by means of a (non-trivial) quotient. The regrouping of a species $T = MK$ by a subgroup H of S_n is possible if $HK = KH$. The structures of the new species on a set U are the elements of

$$\{ \{ fhK \mid h \in H \} \mid f \in \text{Bij}((n), U) \}$$

where $\text{Bij}((n), U)$ denotes the set of bijections from $\{1, 2, \dots, n\}$ to U .

Propositions 3.4, 3.5, 3.7 and 3.9 give properties of regrouping. In particular, we give a proof that the subgroup associated to a regrouping of M_K by H is HK .

Sections 4 and 5 give a classification of all the molecular species of degree 6 and 7. We describe in these sections many group actions on combinatorial structures that represent molecular species. We also give an algorithm implementing the Yeh criterion to determine whether a species is atomic or not. In the last section of the paper, we have used the combinatorial interpretations of the preceding sections to compute the derivative of some molecular species. The paper concludes with tables that describe the new species.

We made an extensive use of the Maple symbolic computation software to do many computations. A Maple package was born from this work and will be available via ftp.

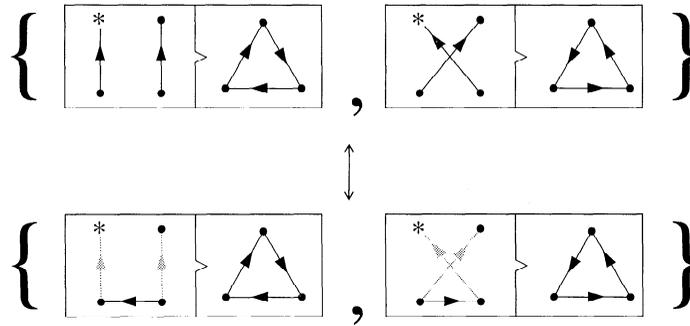


FIGURE 29. Dérivée de X^7/D_6e (1).

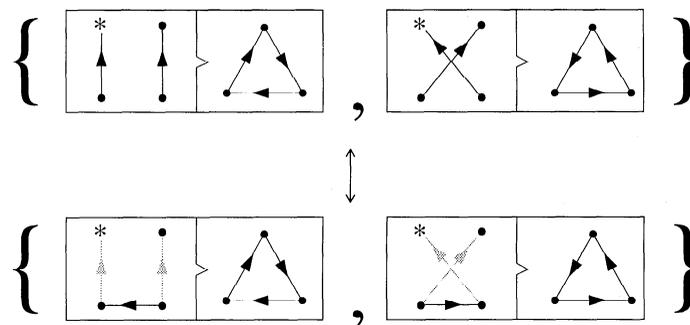


FIGURE 30. Dérivée de X^7/D_6e (2).

REFERENCES

[Ch1] Y. Chiricota, *Structures combinatoires et calcul symbolique*, Thèse de doctorat, Université du Québec à Montréal, Montréal, 1992.

[Ch2] —, *Représentation des structures en Maple*, rapport de recherche no. 138, Département de math. et inform., UQAM, 1990.

[CG] B. W. Char, K. O. Geddes, G. H. Gonnet, M. B. Monagan et S. M. Watt, *Maple reference manual*, 5^e éd., Watcom Publ. ltd, Waterloo, Canada, 1988.

[Ja1] A. Joyal, *Une théorie combinatoire des séries formelles*, Adv. in Math. **42** (1981), 1–82.

[La1] J. Labelle, *Applications diverses de la théorie des espèces de structures*, Ann. Sci. Math. Québec **7** (1983), 59–94.

[La2] —, *Quelques espèces sur les ensembles de petite cardinalité*, Ann. Sci. Math. Québec **9** (1985), 31–58.

[LY] J. Labelle et Y. N. Yeh, *The relation between Burnside rings and combinatorial species*, J. Combin. Theory A **50** (1989) 269–284.

[Ro] J. J. Rotman, *An introduction to the theory of groups*, 3^e éd., Allyn and Bacon, Boston, 1984.

[We] C. D. Wensley, *The supercharacter table of the symmetric group S_7* , U. C. N. W. Pure Maths Preprint, Bangor (U. K.), 1983. (version préliminaire)

[Ye] Y. N. Yeh, *On the combinatorial species of Joyal*, Thèse de doctorat, State Univ. of New York at Buffalo, Buffalo, 1985.

A. Espèces moléculaires de degrés 6 et 7. On trouvera ici deux tables qui regroupent les espèces moléculaires rencontrées dans les sections 2, 3, 4 et 5.

Notations.

- K^\dagger signifie $K \cap A_6$ ou $K \cap A_7$, selon le cas.
- $K[H]$ signifie le produit en couronne de K par H .

Remarques.

- Le tableau 1 ne contient pas les espèces moléculaires de degré 6 de la forme $X^i M_k$ où $1 \leq i \leq 5$. Ces dernières se retrouvent en consultant une table des espèces moléculaires de degré < 6 .
- Le tableau 2 ne contient pas les espèces moléculaires de degré 7 de la forme $X^i M_k$ où $1 \leq i \leq 6$. Ces dernières se retrouvent en consultant une table des espèces moléculaires de degré < 7 .
- Le nom du stabilisateur est déterminé par la classe d'isomorphisme de celui-ci. Par exemple, $A_4 C_2 a$ et $A_4 C_2 b$ sont des groupes isomorphes au produit cartésien $A_4 \times C_2$, mais dans des classes de conjugaison différentes. Il en va de même pour les 3 sous-groupes de S_6 isomorphes à S_4 qui sont $S_4 b$, $S_4 c$ et $S_4 d$. Cette dénomination est empruntée à [We].
- Dans la table des espèces sur 7 points, lorsqu'un quotient par Z_2 n'a pas de référence, c'est que l'action consiste à changer l'orientation des structures.

Y. CHIRICOTA
 DÉPARTEMENT DE MATHÉMATIQUES ET D'INFORMATIQUE
 UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À MONTRÉAL
 MONTRÉAL, CANADA

TABLE 1. Espèces moléculaires de degré 6.

Stab	Générateurs	Card.	Espèce	At.	Réf.
I_6	(1)	720	X^6		
C_2c	$\langle(12)(34)(56)\rangle$	360	$E_2(X^3)$	×	
Kc	$\langle(12),(34)(56)\rangle$	180	$E_2E_2(X^2)$		
Kd	$\langle(14)(25),(14)(36)\rangle$	180	$(X^2E_2(X^2))/Z_2$	×	ex. 2.16
C_3^3a	$\langle(12),(34),(56)\rangle$	90	E_2^3		
C_4b	$\langle(1234)(56)\rangle$	180	X^6/C_4b	×	ex. 4.1
C_4C_2a	$\langle(1234),(56)\rangle$	90	C_4E_2		
Ke	$\langle(12)(34),(13)(24)(56)\rangle$	180	$(X^2E_2(X^2))/Z_2$	×	ex. 4.2
C_3^3b	$\langle(12)(34),(13)(24),(56)\rangle$	90	$\mathcal{P}_4^{\text{bic}}E_2$		
D_4b	$\langle(1324),(12)(56)\rangle$	90	$(X^2C_4)/Z_2$	×	ex. 4.4
D_4c	$\langle(1324)(56),(12)\rangle$	90	$E_2(XE_2)$	×	
D_4d	$\langle(1324)(56),(12)(56)\rangle$	90	$(X^6/C_4b)/Z_2$	×	ex. 4.3
D_4C_2a	$\langle(1324),(12),(56)\rangle$	45	\mathcal{P}_4E_2		
A_4C_2a	$\langle(123),(12)(34),(56)\rangle$	30	$E_4^\pm E_2$		
S_4b	$\langle(1234)(56),(123)\rangle$	30	$(E_2^\pm E_4^\pm)/Z_2$	×	ex. 4.5
S_4C_2a	$\langle(1234),(123),(56)\rangle$	15	E_4E_2		
C_3^3b	$\langle(123)(456)\rangle$	240	$C_3(X^2)$	×	
C_3^3a	$\langle(123),(456)\rangle$	80	C_3^2		
S_3C_3a	$\langle(12),(13),(456)\rangle$	40	E_3C_3		
S_3c	$\langle(12)(45),(13)(46)\rangle$	120	$E_3(X^2)$	×	
$S_3^2a^+$	$\langle(123),(456),(12)(45)\rangle$	40	$(E_3^\pm E_3^\pm)/Z_2$	×	ex. 4.6
S_3^2a	$\langle(12),(13),(45),(46)\rangle$	20	E_3E_3		
C_6b	$\langle(123456)\rangle$	120	C_6	×	
S_3d	$\langle(14)(26)(35),(15)(24)(36)\rangle$	120	$\mathcal{P}_6^{\text{bic}}$	×	
D_6b	$\langle(123456),(26)(35)\rangle$	60	\mathcal{P}_6	×	
A_4b	$\langle(123)(456),(14)(25)\rangle$	60	$(X^6/Kd)/Z_3$	×	ex. 2.17
A_4C_2b	$\langle(123)(456),(14)(25),(14)(25)(36)\rangle$	30	$C_3(E_2)$	×	
S_4c	$\langle(123)(456),(14)(25),(14)(23)(56)\rangle$	30	$(X^6/A_4b)/Z_2$	×	ex. 2.17
S_4d	$\langle(123)(456),(14)(25),(23)(56)\rangle$	30	$(X^6/A_4b)/Z_2$	×	ex. 2.17
S_4C_2b	$\langle(1542),(123)(456),(14)(25)(36)\rangle$	15	$E_3(E_2)$	×	
S_3C_3b	$\langle(163425),(123)\rangle$	40	$E_2(C_3)$	×	ex. 2.18
S_3^2b	$\langle(163425),(123),(23)(56)\rangle$	20	$E_2(E_3^\pm)/Z_2$	×	ex. 2.18
$C_2[S_3]a^+$	$\langle(123),(456),(14)(2635)\rangle$	20	C_3^2/Z_4	×	ex. 4.7
$C_2[S_3]a$	$\langle(12),(13),(14)(25)(36)\rangle$	10	$E_2(E_3)$	×	
A_5b	$\langle(12345),(125)(364)\rangle$	12	$X\mathcal{P}_5//A_4$	×	ex. 3.10
S_5b	$\langle(12345),(125)(364),(2354)\rangle$	6	$(X^6/A_5b)/Z_2$	×	ex. 4.8
A_6a	$\langle(12345),(1234)(56)\rangle$	2	E_6^\pm	×	
S_6a	$\langle(123456),(16)\rangle$	1	E_6	×	

TABLE 2. Espèces moléculaires de degré 7.

Stab	Générateurs	Card.	Espèce	At.	Réf.
I_7	(1)	5040	X^7		
C_6c	$\langle(123)(45)(67)\rangle$	840	$C_3E_2(X^2)$		
C_6C_2a	$\langle(123)(45),(67)\rangle$	420	$C_3E_2E_2$		
S_3e	$\langle(123),(12)(45)(67)\rangle$	840	$(C_3X^2X^2)/Z_2$	×	ex. 5.1
D_6c	$\langle(123),(12),(45)(67)\rangle$	420	$E_3E_2(X^2)$		
D_6d	$\langle(123)(67),(12)(45)\rangle$	420	$((X^2C_3)/Z_2)E_2$		
D_6e	$\langle(123)(45)(67),(12)(45)\rangle$	420	$(C_3E_2(X^2))/Z_2$	×	ex. 5.2
S_3Ka	$\langle(12),(13),(45),(67)\rangle$	210	$E_3E_2E_2$		
C_{10a}	$\langle(12345)(67)\rangle$	504	C_5E_2		
D_5b	$\langle(12345),(25)(34)(67)\rangle$	504	$(X^2C_5)/Z_2$	×	
D_{10a}	$\langle(12345),(25)(34),(67)\rangle$	252	$X^2\mathcal{P}_5$		
H_5b	$\langle(12345),(2354)(67)\rangle$	252	$(X^2\mathcal{P}_5)/Z_2$	×	ex. 5.7
H_5C_2a	$\langle(12345),(2354),(67)\rangle$	126	$E_2(\mathcal{P}_5/Z_2)$		
A_5C_2a	$\langle(12345),(123),(67)\rangle$	42	$E_2E_5^\pm$		
S_5c	$\langle(12345),(1234)(67)\rangle$	42	$(E_2^\pm E_5^\pm)/Z_2$	×	
S_5C_2a	$\langle(12345),(1234),(67)\rangle$	21	E_5E_2		
C_{12a}	$\langle(123)(4567)\rangle$	420	C_3C_4		
C_6C_2b	$\langle(123)(45)(67),(46)(57)\rangle$	420	$\mathcal{P}_4^{\text{bic}}C_3$		
D_4C_3a	$\langle(123)(4567),(46)\rangle$	210	\mathcal{P}_4C_3		
A_4c	$\langle(123)(456),(45)(67)\rangle$	420	$(X^3\mathcal{P}_4^{\text{bic}})/Z_3$	×	ex. 5.3
Λ_4C_3a	$\langle(123),(456),(45)(67)\rangle$	140	$C_3E_4^\pm$		
S_4C_3a	$\langle(123)(4567),(456)\rangle$	70	C_3E_4		
Q_6a	$\langle(123),(45)(67),(12)(4657)\rangle$	420	$(C_3E_2(X^2))/Z_2$	×	ex. 5.4
C_4S_3a	$\langle(123)(4567),(12)\rangle$	210	E_3C_4		
D_6f	$\langle(123),(45)(67)\rangle$	420	$(X^2X^2C_3)/Z_2$	×	
S_3Kb	$\langle(123),(12),(45)(67),(46)(57)\rangle$	420	$E_3\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$		
D_{12a}	$\langle(123)(4567),(12)(46)\rangle$	210	$(C_3C_4)/Z_2$	×	
$D_4S_3a^+$	$\langle(123),(45)(67),(46)(57),(12)(46)\rangle$	210	$(C_3\mathcal{P}_4^{\text{bic}})/Z_2$	×	ex. 5.5
$D_4S_3b^+$	$\langle(123),(45),(67),(12)(46)(57)\rangle$	210	$(C_3E_2^2)/Z_2$	×	
D_4S_3a	$\langle(123),(12),(4567),(46)\rangle$	105	$E_3E_2(E_2)$		
A_4S_3a	$\langle(123)(45)(67),(12)(456)\rangle$	70	$E_3E_4^\pm$		
S_4e	$\langle(132)(456),(45)(67),(46)(57),(12)(46)\rangle$	210	$(X^3\mathcal{P}_4^{\text{bic}})/Z_3$	×	ex. 5.8
$S_4S_3a^+$	$\langle(123),(45)(67),(456),(12)(45)\rangle$	70	$(E_3^+E_4^+)/Z_2$	×	
S_4S_3a	$\langle(123),(12),(4567),(45)\rangle$	35	E_3E_4		
C_7a	$\langle(1234567)\rangle$	720	C_7	×	
D_7a	$\langle(1234567),(27)(36)(45)\rangle$	360	\mathcal{P}_7	×	
H_7a^+	$\langle(1234567),(235)(476)\rangle$	240	C_7/Z_3	×	
H_7a	$\langle(1234567),(27)(36)(45),(235)(476)\rangle$	120	\mathcal{P}_7/Z_3	×	ex. 5.6
$PSL(27)a$	$\langle(1234567),(1237645)\rangle$	30	Pl. proj.	×	
A_7a	$\langle(1234567),(12)(34)\rangle$	2	E_7^\pm	×	
S_7a	$\langle(1234567),(17)\rangle$	1	E_7	×	

TABLE 3. Dérivées des espèces atomiques de degré 6.

Espèce	Dérivée
X^6/Kd	$3XE_2(X^2)$
X^6/C_4b	$X^5 + XE_2(X^2)$
X^6/Ke	$X^5 + XE_2(X^2)$
$(X^2C_4)/Z_2$	$XC_4 + XE_2(X^2)$
$(X^6/C_4b)/Z_2$	$X\mathcal{P}_4^{\text{bic}} + XE_2(X^2)$
$(E_2^\pm E_4^\pm)/Z_2$	$XE_4^\pm + (E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2$
$(E_3^\pm E_3^\pm)/Z_2$	$2(E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2$
C_6	X^5
$\mathcal{P}_6^{\text{bic}}$	X^5
\mathcal{P}_6	$XE_2(X^2)$
$(X^6/Kd)/Z_3$	$XE_2(X^2)$
$(X^6/A_4b)/Z_2 \cong X^6/S_4c$	XC_4
$(X^6/A_4b)/Z_2 \cong X^6/S_4d$	$X\mathcal{P}_4^{\text{bic}}$
$E_2(E_3^\pm)/Z_2$	$(E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2$
C_3^2/Z_4	$(E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2$
$X\mathcal{P}_5/A_4$	\mathcal{P}_5
$(X^6/A_5b)/Z_2$	\mathcal{P}_5/Z_2
E_6^\pm	E_5^\pm
E_6	E_5

TABLE 4. Dérivées des espèces atomiques de degré 7.

Espèce	Dérivée
$(C_3X^2X^2)/Z_2$	$E_2(X^3) + 2X^3C_3$
$(C_3E_2(X^2))/Z_2$	$X^6/Kd + 2X((E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2)$
$(X^2C_5)/Z_2$	$E_2(X^3) + XC_5$
$(X^2\mathcal{P}_5)/Z_2$	$X^6/C_4b + X\mathcal{P}_5$
$(E_2^\pm E_5^\pm)/Z_2$	$(E_2^\pm E_4^\pm)/Z_2 + XE_5^\pm$
$(X^3\mathcal{P}_4^{\text{bic}})/Z_3$	$X^2\mathcal{P}_4^{\text{bic}} + C_3(X^2)$
$(C_3E_2(X^2))/Z_2$	$X^6/C_4b + X^3C_3$
$(X^2X^2C_3)/Z_2$	$X^6/Kc + X^3C_3$
$(C_3C_4)/Z_2$	$X^2C_4/Z_2 + X((E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2)$
$(C_3\mathcal{P}_4^{\text{bic}})/Z_2$	$(X^6/C_4b)/Z_2 + X((E_2^\pm E_3^\pm)/Z_2)$
$(C_3E_2^2)/Z_2$	$E_2(XE_2) + C_6$
$((X^3\mathcal{P}_4^{\text{bic}})/Z_3)/Z_2$	$(X^6/C_4b)/Z_2 + E_3(X^2)$
$(E_3^\pm E_4^\pm)/Z_2$	$(E_2^\pm E_4^\pm)/Z_2 + (E_3^\pm E_3^\pm)/Z_2$
C_7	X^6
\mathcal{P}_7	$E_2(X^3)$
C_7/Z_3	$C_3(X^2)$
\mathcal{P}_7/Z_3	C_6
$X^7/PSL(2, 7)a$	$(X^6/A_4b)/Z_2 \cong X^6/S_4d$
E_7^\pm	E_6^\pm
E_7	E_6