avec $l=OA=OB$ (Fig. 2).

Dans cette expression la fonction

$$J_0(B\sqrt{l^2-x^2}) \quad \left(B=2\pi kC\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}\ \frac{\sqrt{\gamma_0\gamma_h}}{\sin 2\theta}\right)$$

est la fonction de Riemann associée à l'équation (5). Cette fonction est liée aux solutions élémentaires de l'équation (8): en effet, on montre en théorie générale des équations aux dérivées partielles (Hadamard 1964, p. 182) que la fonction de Riemann n'est autre que le coefficient du logarithme dans la solution élémentaire mise sous forme:

$$U(X,Y)\log(\sigma|\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|)+V(X,Y)$$

(voir paragraphe 2·2). Effectivement le développement des fonctions

$$i\pi H_0^1(\sigma|\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|) \quad \text{et} \quad i\pi H_0^2(\sigma|\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|)$$

(pour $\mathbf{R}$ voisin de $\mathbf{R}_0$) donne:

$$i\pi H_0^1[\sigma|\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|]=2J_0(\sigma|\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|)\log\frac{\sigma|\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|}{2}$$

+ une fonction régulière de $|\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|$ et

$$i\pi H_0^2[\sigma|\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|]=2J_0(\sigma|\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|)\log\frac{|\sigma\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|}{2}$$

+ une fonction régulière de $|\mathbf{R}-\mathbf{R}_0|$ (voir Morse & Feshbach, p. 627).

Il faut noter que ce n'est que par hasard que la fonction de Riemann J_0 est proportionelle à la somme des deux solutions élémentaires du problème; il n'en est en général pas ainsi.

Références

AUTHIER, A. (1961). *Bull. Soc. Minér. Franç.* **84**, 51.
AUTHIER, A. & SIMON, D. (1968). *Acta Cryst.* A**24**, 517.
BALIBAR, F. (1968). *Acta Cryst.* A**24**, 667.
BORRMANN, G. (1954). *Z. Kristallogr.* **106**, 109.
EWALD, P. P. (1917). *Ann. Phys. Lpz.* **54**, 519.
EWALD, P. P. (1916). *Ann. Phys. Lpz.* **49**, 1, 117.
HADAMARD, J. (1964). *La Théorie des Équations aux Dérivées Partielles*, Pékin.
KATO, N. (1961). *Acta Cryst.* **14**, 526, 627.
KATO, N. & LANG, A. R. (1959). *Acta Cryst.* **12**, 249.
LAUE, M. VON (1931). *Naturwissenschaften*, **10**, 133.
LAUE, M. VON (1960). *Röntgenstrahl-Interferenzen.* Frankfurt am Main: Akademische Verlagsgesellschaft.
MALGRANGE, C. & AUTHIER, A. (1965). *C. R. Acad. Sci. Paris*, **261**, 3774.
MORSE, P. & FESHBACH, H. (1953). *Methods of Theoretical Physics.* New York.
SCHWARTZ, L. (1966). *Théorie des Distributions*, Paris:
SOMMERFELD, A. (1964). *Partial Differential Equations.* New York.
TAKAGI, S. (1962). *Acta Cryst.* **15**, 1311.

Acta Cryst. (1969). A**25**, 658

Méthode Nouvelle de Construction des Groupes Magnétiques

BY J. SIVARDIÈRE

Laboratoire de Diffraction Neutronique, Centre d'Etudes Nucléaires, Boîte Postale 269, *Grenoble, France*

(*Reçu le* 16 *avril* 1969)

The determination of real one-dimensional representations of a group is equivalent to the determination of its invariant subgroups of index two. This idea is used to construct and classify the magnetic space groups.

Introduction

Soit G un groupe cristallographique; pour rechercher les groupes magnétiques qui s'en déduisent, deux méthodes peuvent être utilisées:

(1) On recherche tous les sous-groupes invariants H_α d'indice 2 de G et on remplace les éléments du deuxième complexe par les antiopérateurs correspondants, d'où des groupes magnétiques G_α isomorphes de G.

(2) On recherche toutes les représentations Γ_α réelles et de dimension 1 de G, et on remplace les éléments ayant pour caractère -1 par les antiopérateurs correspondants.

Les deux méthodes sont équivalentes puisque les représentations Γ_α réelles et de dimension 1 ont pour noyaux les sous-groupes invariants H_α d'indice 2. Si G est un groupe ponctuel (Sivardière, 1969*a*), ces deux méthodes sont aussi simples l'une que l'autre; par contre si G est un groupe d'espace G_e, la deuxième méthode, développée ici, semble plus systématique que la première.

Dans une première partie, on recherche les représentations irréductibles des groupes d'espace réelles et de dimension 1; dans une deuxième partie, on en déduit une classification des groupes d'espace magnétiques; les résultats sont comparés à ceux de Opechowski et Guccione (1961); on envisage enfin, dans une troisième partie, le cas des groupes d'espace colorés.

Principales notations utilisées

G_e Groupe d'espace.
G Groupe ponctuel d'éléments α (identité ε).

T	Groupe des translations réticulaires T_l ou $(\varepsilon\|T_l)$.
$(\alpha\|\tau_\alpha+T_l)$	Elément de G_e.
τ'_α	Projection de τ_α sur α.
$\mathbf{k}$	Vecteur de l'espace réciproque.
$\mathbf{K}$	Vecteur du réseau réciproque.
G_k	Groupe du vecteur $\mathbf{k}$.
Δ_k	Représentation de T.
Γ_{kj}	Représentation de G_e.
Γ_j	Représentation sans poids de G.
$\hat{\Gamma}_j$	Représentation avec poids de G.
$\bar{\Delta}_k$	Représentation connectante.
γ_{kj}	Petite représentation de G_k.
T_k	Noyau de Δ_k.
H_{kj}	Noyau de Γ_{kj}.
H_j	Noyau de Γ_j.
T_{Mk}	Réseau magnétique décrit par le vecteur $\mathbf{k}$.

1
Représentations et sous-groupes invariants

Soit G un groupe fini, Γ_α une représentation irréductible de G. Le noyau de Γ_α, ensemble des éléments de G représentés par la matrice unité, est un sous-groupe invariant H_α de G.

Réciproquement soit H_α un sous-groupe invariant de G, $F_\alpha=G/H_\alpha$ le groupe facteur. G est une extension de F_α par H_α, qui peut se réduire à un produit semi-direct. Soit ζ une représentation de F_α, elle engendre une représentation ζ_e de G de même dimension, dans laquelle les éléments d'un même complexe de H_α ont même représentative.

Soit par ailleurs $\Delta_{\alpha j}$ une représentation de H_α, $G_{\alpha j}$ le petit groupe de deuxième espèce (Lomont, 1959) de $\Delta_{\alpha j}$, $\gamma_{\alpha j}$ une petite représentation de $G_{\alpha j}$ (sa restriction aux éléments de H_α ne contient que $\Delta_{\alpha j}$). Par induction de $\gamma_{\alpha j}$, on obtient une représentation irréductible Γ_β de G: le noyau de Γ_β est un autre sous-groupe invariant H_β de G; toutes les représentations Γ_β de G sont obtenus par cette méthode; si $\gamma_{\alpha j}$ est de dimension $d_{\alpha j}$ et si a est l'indice du petit groupe $G_{\alpha j}$ dans G, Γ_β est de dimension $d_\beta=ad_{\alpha j}$.

Si G est un groupe ponctuel, on a montré (Sivardière, 1969*a*) que toutes les représentations Γ_α de dimension 1 s'obtiennent aisément comme représentations engendrées, les sous-groupes invariants H_α correspondants sont alors maximaux si G n'est pas cyclique.

Par contre si G est un groupe d'espace G_e, le seul sous-groupe invariant T évident (non maximal) est formé par les translations réticulaires. Par suite on envisagera le seul sous-groupe invariant T et ses représentations Δ_k ($\mathbf{k}$ est un vecteur décrivant la première zone de Brillouin): soit G_k le petit groupe associé à une représentation Δ_k, γ_{kj} une petite représentation de G_k; par induction de γ_{kj}, on obtient une représentation Γ_{kj} de G_e irréductible: toutes les représentations irréductibles de G_e peuvent s'obtenir ainsi.

Représentations réelles de dimension 1 des groupes d'espace

Si $\mathbf{k}$ est en position générale, le nombre l de bras distincts de l'étoile $\{\mathbf{k}\}$ (ensemble des vecteurs $\mathbf{k}$ equivalents) est égal à g, ordre du groupe ponctuel $G=G_e/T$. Si $\mathbf{k}$ est en position spéciale, l est inférieur à g, et si d_{kj} est la dimension d'une représentation γ_{kj}, Γ_{kj} est de dimension $l\,.\,d_{kj}$. Enfin si $\mathbf{k}=0$, G_k est identique à G_e, les représentations Γ_{0j} sont induites à partir de la représentation identité de T, autrement dit engendrées par les représentations Γ_j du groupe ponctuel.

On obtiendra donc des représentations de dimension 1 de G dans les conditions suivantes:

(1) $l=1$, soit $G_k=G_e$;

(2) $d_{kj}=1$, il doit donc exister au moins une petite représentation de dimension 1 (en particulier si $\mathbf{k}=0$, les représentations Γ_{0j} de dimension 1 sont engendrées par les représentations de dimension 1 du groupe ponctuel).

Ces deux conditions limitent considérablement le nombre de vecteurs $\mathbf{k}$ tels qu'il existe des représentations Γ_{kj} de dimension 1. Trois méthodes peuvent être utilisées pour étudier les dimensions des représentations $\gamma_{kj}=\Gamma_{kj}$ de $G_k=G_e$: celle d'Olbrychski (Olbrychski, 1963), celle de Kovalev & Liubarski (Kovalev & Liubarski, 1958), enfin celle de Herring (Herring, 1942); elles seront exploitées successivement.

On peut cependant préciser dès maintenant une condition nécessaire pour qu'une représentation Γ_{kj} ($G_k=G_e$) puisse être réelle; il faut que les translations réticulaires aient un caractère réel: $\exp i\mathbf{k}\,.\,T_l=\pm 1$, ce qui implique $\mathbf{k}_i=0,\frac{1}{2}$. D'où un nombre très restreint de vecteurs $\mathbf{k}$ situés à la surface ou au centre de la première zone de Brillouin. (On retrouve ce résultat en remarquant qu'une représentation réelle de dimension 1 satisfait la deuxième condition de Landau: $\mathbf{k}$ et $-\mathbf{k}$ doivent appartenir à la même étoile, soit $2\mathbf{k}=\mathbf{K}$, vecteur du réseau réciproque).

(1) *Méthode d'Olbrychski*

Il s'agit d'une méthode très simple d'identification. Le groupe d'espace $G_k=G_e$ est défini par ses éléments générateurs $(\alpha|\tau_\alpha)$, liés par certaines relations de la forme:

$$(\alpha|\tau_\alpha)^{i_\alpha}\,.\,(\beta|\tau_\beta)^{i_\beta}\ldots=(\varepsilon|T_l)\,.$$

On traduit matriciellement ces relations dans une représentation Γ_{kj}:

$$[\Gamma_{kj}(\alpha|\tau_\alpha)]^{i_\alpha}\,.\,[\Gamma_{kj}(\beta|\tau_\alpha)]^{i_\beta}\ldots=\exp i\mathbf{k}\,.\,T_l 1\,,$$

1 désignant la matrice unité de dimension d_{kj}.

Par identification, on obtient les matrices $\Gamma_{kj}\,(\alpha|\tau_\alpha)$.

Si au moins deux matrices $\Gamma_{kj}(\alpha|\tau_\alpha)$ et $\Gamma_{kj}(\beta|\tau_\beta)$ ne commutent pas, il n'existe pas de représentation Γ_{kj} de dimension 1.

Exemple:

$$G_e = P\frac{2_1}{m}, (\alpha|\tau_\alpha) = (2z|00\tfrac{1}{2}),\ (\beta|\tau_\alpha) = (\bar{1}|000),$$
$$k = (00\tfrac{1}{2})$$
$$(2z|00\tfrac{1}{2})\ (\bar{1}|000) = (\varepsilon|001)\ (\bar{1}|000)\ (2z|00\tfrac{1}{2})$$
$$\Gamma_k(2z|000)\ \Gamma_k(\bar{1}|000) = -\Gamma_k(\bar{1}|000)\ \Gamma_k(2z|00\tfrac{1}{2})\ .$$

Il ne peut exister de Γ_{kj} de dimension 1.

(Plus généralement si le groupe ponctuel est centrosymétrique, il n'existe de Γ_{kj} paires et impaires que si **k** n'a pas de composantes suivant les axes hélicoïdaux; d'autre part si G_e centrosymétrique contient un axe hélicoïdal ou un miroir avec glissement et si **k** a une composante suivant cet élément, il n'existe pas de Γ_{kj} de dimension 1).

Interprétation: les translations du groupe commutateur C de G_e doivent appartenir à T_k, c'est-à-dire avoir le caractère $+1$ dans la représentation Δ_k de T, pour qu'il existe au moins une représentation Γ_{kj} de dimension 1, d'où une sélection rapide des vecteurs **k** à retenir.

Soit n_α l'ordre de l'élément α, τ'_α la composante de τ_α suivant l'axe du le miroir α: $n_\alpha \tau'_\alpha$ est une translation entière t_α. Suivant que t_α appartient à T_k ou $T-T_k$, on a, si Γ_{kj} est de dimension 1:

$$[\Gamma_{kj}(\alpha|\tau_\alpha)]^{n_\alpha} = \Gamma_{kj}(\varepsilon|t_\alpha) = \pm 1\ .$$

On peut alors préciser si Γ_{kj} peut être réelle. Si **k** est perpendiculaire à τ'_α, $\Gamma_{kj}(\alpha|\tau_\alpha) = +1$ et si **k** est perpendiculaire à toutes les translations τ'_α, Γ_{kj} est réelle. Supposons maintenant que **k** ait une composante $\frac{1}{2}$ suivant τ'_α, la réalité de Γ_{kj} dépend alors de l'ordre n_α de α: si $t_\alpha \in T_k$, Γ_{kj} peut être réelle puisqu'alors on peut avoir:

$\Gamma_{kj}(\alpha|\tau\,) = \pm 1.$
$n_\alpha = 2$: axe 2, miroir m: $t_\alpha \in T_k$,
axe 2_1, miroir a ou n: $t_\alpha \in T - T_k$.
$n_\alpha = 3$: axes 3, 3_1, 3_2: $t_\alpha \in T_k$.
$n_\alpha = 4{,}6$: axes 4_2, 6_2, 6_4: $t_\alpha \in T_k$,
axes 4_1, 4_3, 6_1, 6_3, 6_5: $t_\alpha \in T - T_k$.

Par conséquent si **k** n'a pas de composante suivant des axes 2_1, 4_1, 4_3, 6_1, 6_3, 6_5 et suivant les glissements des miroirs avec glissement, ou si le groupe ponctuel est centrosymétrique et si **k** n'a pas de composante suivant des axes 3_1, 3_2, 4_2, 6_2 ou 6_4, il existe au moins une représentation Γ_{kj} réelle, telle que: $\Gamma_{kj}(\alpha|\tau_\alpha) = +1 \forall \alpha$ (il peut évidemment en exister d'autres dans lesquelles certains éléments $(\alpha|\tau_\alpha)$ ont le caractère -1).

(2) *Méthode de Kovalev–Liubarski*

On montre que:

$$\Gamma_{kj}(\alpha|\tau_\alpha) = \bar{\Delta}_k(\alpha|\tau_\alpha) \times \hat{\Gamma}_{kj}(\alpha)\ .$$

$\bar{\Delta}_k$ est une extension de la représentation Δ_k de T aux éléments de G_e, le plus souvent avec poids, dite représentation connectante (ce poids ne varie pas à une jauge près si on remplace τ_α par $\tau_\alpha + T_l$); Γ_{kj} est une représentation du groupe ponctuel G dont le poids est inverse de celui de $\bar{\Delta}_k$ et dépend donc de **k**.

Toute connectante de dimension 1 est p-équivalente à une représentation vectorielle de dimension 1, mais on ne peut effectuer le changement de jauge car on doit toujours avoir par définition:

$$\Delta_k(\varepsilon|T_l) = \exp ik\ .\ T_l\ .$$

Deux cas se présentent alors: si la connectante a un poids différent de 1, les Γ_{kj} s'obtiennent à partir des représentations avec poids de G et par suite il n'existe pas de Γ_{kj} de dimension 1 si G n'est pas cyclique; même si G est abélien, il peut posséder des représentations dont le poids est distinct de l'unité, donc de dimension supérieure à 1; par suite, des matrices d'une telle représentation peuvent ne pas commuter, de même que deux matrices $\Gamma_{kj}(\alpha|\tau_\alpha)$ et $\Gamma_{kj}(\beta|\tau_\beta)$ peuvent ne pas commuter même si α et β commutent dans G; si au contraire on peut trouver une connectante de poids unité, les Γ_{kj} s'obtiennent à partir des représentations vectorielles de G, et il existe au moins une $\Gamma_{kj}(\Gamma_{k1})$ de dimension 1, associée à la représentation identité Γ_1 de G (à chaque Γ_j de G de dimension 1 correspond en fait une Γ_{kj} de dimension 1).

On sait qu'il peut exister plusieurs représentations connectantes. Par suite si la connectante peut être choisie de poids unité et réelle, il existe des Γ_{kj} réelles de dimension 1 qui se déduisent des représentations Γ_j réelles de dimension 1 du groupe ponctuel. C'est précisément le cas (Sivardière, 1969*b*) si **k** est perpendiculaire aux axes hélicoïdaux 2_1, 4_1, 4_3, 6_1, 6_3, 6_5, et aux glissements des miroirs avec glissement, et si G n'est pas centrosymétrique.

On retrouve ainsi les résultats de la méthode d'Olbrychski.

Si la connectante, de poids unité, est complexe, et si une représentation du groupe ponctuel G est complexe, leur produit tensoriel pourrait être réel, mais cette circonstance ne se produit pas; elle implique en effet $G = 3$, 4, 6, 23, $m3$. Si $G_e = P3_1$, $P3_2$, la connectante est réelle; si $G_e = P4_1$, $P4_3$, $P6_1$, $P6_3$, $P6_5$, le produit $\exp(ik\ .\ \tau_\alpha)\ .\ \Gamma_j(\alpha)$ est toujours complexe; si G_e a pour groupe ponctuel 23 ou $m3$, l'axe 3 n'est jamais hélicoïdal, on a seulement des axes 2_1 ou des miroirs avec glissement: $\exp ik\ .\ \tau_\alpha = \pm i$, et $\Gamma_j(\alpha) = 1$, j, j^2 donc $\exp ik\ .\ \tau_\alpha\ .\ \Gamma_j(\alpha)$ est complexe.

Une dernière circonstance peut se produire: la connectante est complexe avec poids, G est cyclique et par suite ses représentations avec poids sont de dimension 1 (p. ex. $P2_1$, $\mathbf{k} = 00\tfrac{1}{2}$). Dans ce cas les Γ_{kj} sont de dimension 1 complexe.

(3) *Méthode de Herring*

Soit T_k le noyau de Δ_k, c'est-à-dire l'ensemble des translations de caractère $+1$. Une représentation Γ_{kj} est engendrée par une représentation de G_e/T_k (en fait toutes les représentations de G_e/T_k ne fournissent pas de petites représentations). On doit alors distinguer plusieurs situations:

(a) Le groupe G_e peut être défini par une application de $G \times G$ dans T_k, et alors: $G_e/T_k = G$. La connectante est réelle et sans poids, $\Gamma_{kj}(\alpha|\tau_\alpha) = \pm \Gamma_j(\alpha)$.

D'après Herring ou Kovalev–Liubarski, les Γ_{kj} sont engendrées par les Γ_j de G, et il existe au moins une Γ_{kj} réelle de dimension 1.

(b) Le groupe G_e ne peut être défini par une application de $G \times G$ dans T_k et on ne peut trouver de connectante sans poids; par suite il n'existe par de Γ_{kj} de dimension 1 (*e.g.* $Pba2$, $\mathbf{k} = \frac{1}{2}00$).

Il arrive que G_e/T_k soit isomorphe du groupe double G^+ (seules les représentations spécifiques de G^+ engendrent alors des petites représentations, car seules elles fournissent des représentations avec poids de G).

(c) Le groupe G_e ne peut être défini par une application de $G \times G$ dans T_k, mais on peut trouver une connectante complexe sans poids. Par suite d'après Kovalev–Liubarski, les Γ_{kj} sont complexes, celles de dimension 1 sont obtenues à partir des Γ_j de dimension 1 de G (p. ex. $Pba2$, $k = \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$); il existe au moins une Γ_{kj} de dimension 1.

La méthode de Herring permet une autre interprétation de cette situation: G_e/T_k est différent de G, c'est un groupe K dont certaines représentations complexes de dimension 1 engendrent les petites représentations, (K est une extension de G par un groupe isomorphe de T/T_k).

(Si G est cyclique et si $K = G^+$, seules les représentations non spécifiques de G^+ sont utiles, la connectante est avec poids).

Le poids de Schur $\lambda(\alpha,\beta) = \exp i\mathbf{k} \, . \, T_{\alpha\beta}$ est distinct de l'unité, mais les représentations avec poids de G déduites des Γ_{kj} sont p-équivalentes aux représentations vectorielles.

La discussion est résumée dans le Tableau 1.

Exemple récapitulatif

Nous choisissons le groupe d'espace $Pba2$. Pour définir l'application de $G \times G$ dans T, nous prenons par exemple: $\varphi(m_{yz}) = (m_{yz}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$, $\varphi(m_{xz}) = (m_{xz}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$ et $\varphi(2z) = (2z|000)$, d'où le Tableau des $T_{\alpha\beta}$:

$\alpha \, \beta$	m_{yz}	m_{xz}	$2z$
m_{yz}	100	100	000
m_{xz}	010	010	000
$2z$	110	110	000

Le groupe A des vecteurs $\mathbf{k}$ invariants dans le groupe ponctuel $mm2$ est engendré par les vecteurs (000), ($\frac{1}{2}00$), ($0\frac{1}{2}0$) et ($00\frac{1}{2}$). Le groupe commutateur C de G est engendré par les translations $(\varepsilon|110)$, $(\varepsilon|1\bar{1}0)$ et $(\varepsilon|002)$; donc le groupe B des vecteurs $\mathbf{k}$ invariants tels que les 4 représentations Γ_{kj} soient de dimension 1 comprend les vecteurs (000), ($\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$), ($00\frac{1}{2}$) et ($\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$), (effectivement le groupe G_e/C est abélien d'ordre 16, ses représentations engendrent les Γ_{kj} de dimension 1).

Pour $\mathbf{k} = (000)$ et ($00\frac{1}{2}$), perpendiculaires aux translations τ'_α, les 4 représentations Γ_{kj} sont réelles de dimension 1 (connectante réelle de poids unité); pour $\mathbf{k} = (\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$ et ($\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$), elles sont complexes de dimension 1 (connectante complexe $\bar{\Delta}_k(\alpha|\tau_\alpha) = \exp i\mathbf{k} \, . \, \tau'_\alpha$ de poids unité); pour les autres vecteurs $\mathbf{k}$ invariants, les représentations Γ_{kj} sont de dimension 2 (connectante complexe avec poids).

On obtient donc à partir du groupe $Pba2$ deux poids pour les représentations avec poids du groupe $mm2$, le poids unité si $\mathbf{k}$ appartient à B (le groupe G_e/T_k est isomorphe de $mm2$ pour $\mathbf{k} = 00\frac{1}{2}$, isomorphe d'un groupe fini abélien distinct de $mm2$ et admettant des représentations complexes pour $\mathbf{k} = \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$); un poids distinct de l'unité si $\mathbf{k}$ appartient à A–B (le groupe G_e/T_k a alors des représentations p-équivalentes à celles du groupe double $mm2^+$).

Les résultats précédents se retrouvent aisément par la méthode d'Olbrychski:

$$(m_{yz}|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}0)\,(m_{xz}|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}0) = (\varepsilon|1\bar{1}0)\,(m_{xz}|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}0)\,(m_{yz}|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}0).$$

Pour qu'il existe des Γ_{kj} de dimension 1, on doit avoir:

$$\Gamma_{kj}(\varepsilon|1\bar{1}0) = +1, \text{ soit: } k \in B\,.$$

Pour $\mathbf{k} = (000)$, ($00\frac{1}{2}$), $Pba2/T_k = mmm$; pour $\mathbf{k} = (\frac{1}{2}00)$ ($0\frac{1}{2}0$), $Pba2/T_k = mmm^+$; pour $\mathbf{k} = (\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$, ($\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$) $Pba2/T_k$ est d'ordre 8 et abélien. Enfin les $T_{\alpha\beta}$ n'appartiennent à T_k que pour $\mathbf{k} = (000)$ et ($00\frac{1}{2}$).

Conclusion

La théorie du petit groupe, complétée par les méthodes d'Olbrychski, Kovalev–Liubarski ou Herring, permettent de déterminer les représentations Γ_{kj} réelles de dimension 1 d'un groupe d'espace G_e.

Tableau 1. *Représéntations Γ_{kj}: résumé de la discussion*

	Position de $\mathbf{k}$	Poids de Schur & Liubarski	Dimension des Γ_{kj}	Connectante	Structure de G_e
a	$\mathbf{k}$ ou $\mathbf{k}$ $\tau_\alpha \forall \alpha$ aux axes 2_1, 4_1, 4_3, 6_1, 6_3, 6_5, et aux miroirs a, n et G n'est pas centrosymétrique	$\exp i\mathbf{k} \, . \, T_{\alpha\beta} = 1$ $\exp i\mathbf{K}_\alpha \, . \, \tau_\beta = 1$	Au moins une Γ_{kj} réelle de dimension 1	Réelle sans poids	$G_e/T_k = G$
b	$\mathbf{k}$ quelconque mais les translations du groupe commutateur sont dans T_k	$\exp i\mathbf{k} \, . \, T_{\alpha\beta} \neq 1$ $\exp i\mathbf{K}_\alpha \, . \, \tau_\beta = 1$	Au moins une Γ_{kj} complexe de dimension 1; pas de Γ_{kj} réelle	Complexe sans poids	$G_e/T_k = K \neq G$ (si G est cyclique $K = G^+$)
b	$\mathbf{k}$ quelconque	$\exp i\mathbf{k} \, . \, T_{\alpha\beta} \neq 1$ $\exp i\mathbf{K}_\alpha \, . \, \tau_\beta \neq 1$	Pas de Γ_{kj} de dimension 1	Réelle ou complexe avec poids	$G_e/T_k \sim G^+$

(1) On recherche les vecteurs $\mathbf{k}$ invariants dans le groupe G_e: $G_k = G_e$, dont les coordonnées sont 0 ou $\frac{1}{2}$.

(2) On retient parmi eux ceux qui ne sont pas parallèles à des axes 2_1, 4_1, 4_3, 6_1, 6_3, 6_5 ou aux glissements de miroirs avec glissement, ou qui n'ont de composante suivant aucun élément hélicoïdal ou avec glissement si G est centrosymétrique.

Pour de tels vecteurs $\mathbf{k}$, il existe au moins une représentation Γ_{kj} de dimension 1 réelle, il peut en exister plusieurs. On peut finalement classer de la manière suivante les représentations Γ_{kj} réelles de dimension 1, en remarquant que:

$$\Gamma_{kj}(\alpha|\tau_\alpha + T_l) = \exp(i\mathbf{k} \,.\, T_l)\Delta_k(\alpha|\tau_\alpha)\Gamma_j(\alpha)\,.$$

(1) Les représentations Γ_{0j} ($\mathbf{k}=0$): elles sont engendrées par les représentations réelles de dimension 1 de G.

(2) Les représentations Γ_{kj} ($\mathbf{k} \neq 0$): puisque G_e peut se définir par une application de $G \times G$ dans T_k, elles sont, comme les précédentes, engendrées par les représentations réelles de dimension 1 de G.

Si G_e est symmorphique ($\tau_\alpha = 0$), on doit distinguer parmi les Γ_{kj} la représentation Γ_{k1}, engendrée par la représentation identité de G, dans laquelle: $\Gamma_{k1}(\alpha|0) = +1$.

Remarque

L'étude précédente permet d'expliciter les cas de dégénérescence des bandes, c'est-à-dire les vecteurs $\mathbf{k}$ tels qu'il n'existe pas de Γ_{kj} réelle de dimension 1.

2. Classification des groupes magnétiques

La recherche des représentations réelles de dimension 1 des 230 groupes d'espace G_e permet d'énumérer les 1421 groupes magnétiques non gris. Aux représentations de types Γ_{0j}, Γ_{k1} et Γ_{kj}, on associe respectivement les groupes magnétiques de type G_{0j}, G_{k1}, G_{kj}.

Groupes G_{0j}

Puisque les translations ont le caractère $+1$ dans les représentations Γ_{0j}, les groupes G_{0j} ont pour réseau l'un des 14 réseaux de Bravais et pour classe la classe magnétique G_j associée à la représentation Γ_j du groupe ponctuel G. Ces groupes décrivent les composés magnétiquement ordonnés où les mailles chimiques et magnétiques sont identiques.

Il existe autant de groupes G_{0j} associés à G_e que de représentations Γ_j réelles de dimension 1 de G (certains d'entre eux peuvent être isomorphes), que G_e soit ou non symmorphique.

Notons que les classes $22'2'$ et $2'2'2$ sont identiques, non les groupes $C2'2'2$ et $C22'2'$.

Groupes G_{k1} et G_{kj}

Ces groupes décrivent les composés magnétiquement ordonnés où la maille magnétique est un multiple de la maille chimique. Leur classe magnétique est grise puisqu'ils possèdent des antitranslations, leur réseau est l'un des 22 réseaux magnétiques T_{Mk}, il est décrit de manière équivalente par la donnée du vecteur $\mathbf{k}$ (si le réseau de G_e n'est pas primitif, il peut être plus simple d'envisager des antitranslations t' intérieures à la maille chimique ou un vecteur $\mathbf{k}$ décrit dans le système de la maille simple) (Tableaux 2 et 3).

Tableau 2. *Réseaux magnétique à 2 dimensions*

Système	Réseau générateur	$\mathbf{k}$ ou antitranslation $\mathbf{t}'$	Réseau magnétique
Oblique	P	$\frac{1}{2}0$	P'_b
Rectangulaire	P	$\frac{1}{2}0$	P'_b
		$\frac{1}{2}\frac{1}{2}$	P'_c
	C	$\mathbf{t}'$	C'
Carré	P	$\frac{1}{2}\frac{1}{2}$	P'_c

Tableau 3. *Réseaux magnétiques à 3 dimensions*

Système	Réseau générateur	$\mathbf{k}$ ou $\mathbf{t}'$	Réseau magnétique
Triclinique	P	$\frac{1}{2}00$	P_S
Monoclinique	P	$\frac{1}{2}00$	P_a
		$00\frac{1}{2}$	P_b
		$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$	C_a
	C	$\frac{1}{2}00$	C_c
		$\mathbf{t}'$	P_C
Orthorhombique	P	$\frac{1}{2}00$	P_c
		$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$	C_a
		$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$	F_S
	C	$00\frac{1}{2}$	C_c
	P_C	$00\frac{1}{2}$	I_c
	I	$\mathbf{t}'$	I'
	F	001	C_A
Quadratique	P	$00\frac{1}{2}$	P_o
		$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$	P_C
		$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$	I_C
	I	$\mathbf{t}'$	I'
Hexagonal	P	$00\frac{1}{2}$	C_c
Rhomboédrique	R	$\mathbf{t}'$	R_I
Cubique	P	$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$	F_s
	I	$\mathbf{t}'$	I'

Tableau 4. *Classification des groupes magnétiques*

	Groupes générateurs	Groupes gris	Groupes mixtes $\mathbf{k}=0$	Groupes mixtes $\mathbf{k}\neq 0$ ou $\mathbf{t}'$	Total des groupes mixtes	Total
Symmorphiques	13	13	17	11	28	54
Non symmorphiques	4	4	9	9	18	26
80 groupes magnétiques à 2 dimensions	17	17	26	20	40	80
Symmorphiques	73	73	148	110	258	404
Non symmorphiques	157	157	526	407	933	1247
1651 groupes magnétiques à 3 dimensions	230	230	674	517	1191	1651

Si G_e est symmorphique, il existe autant de groupes G_{kj} que de groupes G_{0j} (ce résultat est une conséquence immédiate de la méthode de Kovalev–Liubarski); si G_e est non symmorphique, ou bien il en existe autant, ou bien il n'en existe aucun.

Les résultats précédents permettent une énumération rapide des groupes magnétiques, on retrouve aisément les résultats de Belov (Belov, Neronova & Smirnova, 1957) (Tableau 4).

Dans la notation d'Opechowski & Guccione, on se réfère à la maille chimique; dans celle de Belov, à la maille magnétique.

Parmi les $230+674=904$ groupes de réseau classique, 275 sont ferromagnétiques (44 triviaux, 231 mixtes) et 629 antiferromagnétiques.

Comparaison avec la théorie d'Opechowski & Guccione

Pour trouver les groupes magnétiques associés à un groupe d'espace G_e, Opechowski & Guccione recherchent les sous-groupes invariants d'indice 2 de G_e.

D'après la théorie de Hermann, un tel sous-groupe a le même réseau que G_e (le groupe magnétique associé a un réseau classique: $\mathbf{k}=0$), ou le même groupe ponctuel que G (son réseau est alors formé des translations T_k, et le groupe magnétique associé à un réseau magnétique T_{Mk}, décrit de manière équivalente par la donnée de $\mathbf{k}\neq 0$); dans ce dernier cas, les translations T_k doivent former un sous-groupe invariant de G_e, ce qui implique: $G_k=G_e$; ce sous-groupe est d'indice 2 si: $\mathbf{k}_i=0, \frac{1}{2}$.

Supposons d'abord G_e symmorphique: si $\mathbf{k}=0$, le noyau H_{0j} de Γ_{0j} n'est autre qu'un sous-groupe D_T; si $\mathbf{k}\neq 0$, les noyaux de Γ_{k1} et Γ_{kj} sont du type D_{R0} et $D_{R\alpha}$ (Tableau 5).

Tableau 5. *Notations des groupes magnétiques*

Représentation	Noyau	Groupe magnétique
Γ_{0j}	$H_{0j}=D_T$	$G_{0j}=M_T$
Γ_{k1}	$H_{k1}=D_{R0}$	$G_{k1}=M_{R0}$
Γ_{kj}	$H_{kj}=D_{R\alpha}$	$G_{kj}=M_{R\alpha}$

En effet dans un groupe G_{k1} les opérateurs ont des translations non primitives nulles (par rapport à la maille magnétique); ce n'est pas le cas dans les groupes G_{kj} autrement dit, le noyau H_{k1} d'une représentation Γ_{k1} est symmorphique et est isomorphe de G_e alors qu'un noyau H_{kj} n'est pas symmorphique.

En particulier les groupes G_{k1} ont même symbole ponctuel dans les 2 notations:

$$P_{2c}mm2=P_cmm2$$

(au contraire $P_{2c}m'm'2=P_ccc2$).

Il existe autant de Γ_{kj} réelles de dimension 1 que de Γ_{0j} du même type (engendrées par les Γ_j du groupe ponctuel puisque $\Gamma_{kj}(\alpha|0)=\Gamma_j(\alpha)$. En effet: $\Gamma_{kj}\,.\,\Gamma_{k'j'}=\Gamma_{k+k',\varphi}$ et en particulier: $\Gamma_{0j}\,.\,\Gamma_{k1}=\Gamma_{kj}$.

Ainsi, connaissant deux groupes magnétiques associés à G_e, on en connait immédiatement un troisième (les groupes G_{kj} forment donc un groupe abélien, isomorphe du groupe des Γ_{kj} réelles de dimension 1 de G_e). Les éléments de G_e ayant le caractère $+1$ dans Γ_{0j}, Γ_{k1} et Γ_{kj} forment un sous-groupe invariant d'indice 4 Q_j de G_e, le groupe facteur G_e/Q_j est isomorphe de 222 (non cyclique), et comme l'ont montré Opechowski & Guccione, la recherche des groupes magnétiques associés à G_e est équivalente à celle des sous-groupes Q_j.

Ce qui précède suppose évidemment qu'on puisse avoir: $j\neq 1$, autrement dit que le groupe ponctuel G possède au moins un sous-groupe invariant d'indice 2; si ce n'est pas le cas ($G=1$, 3, 23), seul le groupe G_{k1} existe.

Exemple: $Pmm2$, $\mathbf{k}=00\frac{1}{2}$

Γ_{kj}	$(m_{yz}\|000)$	$(m_{xz}\|000)$	$(2z\|000)$	G_{kj}
Γ_{k1}	1	1	1	$P_{2c}mm2\ =P_cmm2$
Γ_{k2}	1	-1	-1	$P_{2c}mm'2'=P_cmc2_1$
Γ_{k3}	-1	1	-1	$P_{2c}m'm2'=P_ccm2_1$
Γ_{k4}	-1	-1	1	$P_{2c}m'm'2=P_ccc2$

On peut comparer la recherche des groupes magnétiques associés à G_e symmorphique à la recherche des classes magnétiques. En effet un groupe ponctuel a la structure d'un produit semi-direct: $G=H\wedge K$, de même que $G_e=T\wedge G$; H, comme T est un groupe cyclique, ou produit direct de groupes cycliques, K un groupe ponctuel. Ainsi: $422=4\wedge 2$. Supposons que K admette un sous-groupe invariant d'indice 2 au moins; dans une classe magnétique associée à G, ou bien les éléments de H sont des opérateurs (analogie avec G_{0j}), ou bien ce n'est pas le cas (analogie avec G_{k1} ou G_{kj}).

Exemple:	
$422\ =4\wedge 2$	$P422\ =P\wedge 422$
$42'2'=4\wedge 2'$	$P4'22\ =P\wedge 4'22'$
$4'22'=4'\wedge 2$	$P_{2c}422\ =P_{2c}\wedge 422$
$4'2'2=4'\wedge 2'$	$P_{2c}4'22'=P_{2c}\wedge 4'22'$

Supposons maintenant que G_e ne soit pas symmorphique. La méthode met encore en évidence des sous-groupes invariants Q d'indice 4 dont les éléments ont le caractère $+1$ dans deux représentations Γ_{ki} et Γ_{kj}, et dans la représentation produit qui est du type Γ_{0l}.

Exemple: Groupes magnétiques associés à $Pba2$.

Les seules représentations réelles de dimension 1 de $Pba2$ sont obtenues pour $\mathbf{k}=(000)$ et $\mathbf{k}=(00\frac{1}{2})$.

$\mathbf{k}=(000)$: les groupes magnétiques associés sont du type M_T de réseau classique ($Pba2$, $Pb'a'2$, $Pba'2'$).

$\mathbf{k}=(00\frac{1}{2})$: les groupes magnétiques associés ont pour réseau P_{2c}.

Remarque Si G_e n'est pas symmorphique, les noyaux H_{0j} peuvent être symmorphiques ou non. Que $\mathbf{k}$ soit ou non perpendiculaire à toutes les translations τ_α, H_{kj} n'est jamais symmorphique.

Γ_{kj}	$(m_{yz}\|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$(m_{xz}\|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$	$(2_z\|000)$	G_{kj}
Γ_{k1}	1	1	1	$P_{2c}ba2 \;= P_cba2$
Γ_{k2}	1	-1	-1	$P_{2c}ba'2' = P_cna2_1$
Γ_{k3}	-1	1	-1	$P_{2c}b'a2' = P_cbn2_1$
Γ_{k4}	-1	-1	1	$P_{2c}b'a'2 = P_cnn2$

Les 3 sous-groupes Q sont engendrés par les translations T_k et respectivement les éléments $(m_{yz}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$, $(m_{xz}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$ et $(2_z|000)$.

Cependant, si G_e n'est pas symmorphique, aucun choix logique des translations τ_α ne s'impose.

On peut par exemple les choisir de coordonnées positives, et intérieures à la maille chimique origine [comme dans les *International Tables for X-ray Crystallography* (1952)]. Par conséquent, on ne peut distinguer les groupes magnétiques associés G_{k1} et G_{kj}; en effet, si $(\alpha|\tau_\alpha)$ a le caractère $+1$ dans Γ_{k1}, $(\alpha|\tau_\alpha+T)$ (T appartenant à $T-T_k$) a le caractère -1, or on peut indifféremment associer à α les éléments $(\alpha|\tau_\alpha)$ ou $(\alpha|\tau_\alpha+T)$; (au contraire, si G_e est symmorphique, le choix $\varphi(\alpha)=(\alpha|0)$ s'impose).

On notera par convention Γ_{k1} la représentation dans laquelle les éléments $(\alpha|\tau_\alpha)$ ($\tau_{\alpha i}>0$), associés aux générateurs habituels de la classe ont le caractère $+1$. Il ne lui correspond pas un groupe magnétique du type M_{R0}. (D'après cette convention le symbole d'Opechowski & Guccione de G_{k1} ne contient pas d'anti-opérateurs).

Exemple: $P4_z22$. Générateurs: 4_z et 2_x.

On suppose maintenant avec Opechowski & Guccione que les translations τ_α sont intérieures à la maille origine. Soit alors Q_j l'ensemble des éléments $(\alpha|\tau_\alpha)$ de caractère $+1$ dans Γ_{kj}, complété par les translations de T_k.

Si G_e est symmorphique, Q_j est un sous-groupe invariant d'indice 4 de G_e comme on l'a vu. Si G_e n'est pas symmorphique deux peuvent se produire:

(1) Q_j est un groupe (G_{kj} est du type $M_{R\alpha 1}$).
(2) Q_j n'est pas un groupe (G_{kj} est du type $M_{R\alpha 2}$).

On retrouve aisément cette distinction.

Si $\mathbf{k}$ n'est pas perpendiculaire aux τ'_α, G_{kj} est du type $M_{R\alpha 2}$.

Exemple: $P4_222$, $\mathbf{k}=00\frac{1}{2}$
$\Gamma_{k1}(4_z|\frac{1}{2})=+1$
$\Gamma_{k1}(4_z^2|1)=+1$ donc $\Gamma_{k1}(2_z|0)=-1$.

Au contraire si $\mathbf{k}$ est perpendiculaire aux τ'_α, puisque: $\Gamma_{kj}=\Gamma_{k1}\,.\,\Gamma_{0j}$, les éléments de Q_j forment un groupe, sous-groupe invariant d'indice 4 de G_e. Alors G_{k1} est du type M_{R0} et G_{kj} du type $M_{R\alpha 1}$ (en effet puisque $\mathbf{k}$ est perpendiculaire aux τ'_α, tout se passe comme si G_e était symmorphique).

$\mathbf{k}=00\frac{1}{2}$	$(\varepsilon\|0)$	$(4_z\|\frac{1}{2})$	$(2_z\|0)$	$(4_z^3\|\frac{1}{2})$	$(2_x\|0)$	$(2_y\|0)$	$(2_{xy}\|\frac{1}{2})$	$(2_{xy}\|\frac{1}{2})$	G_{kj}
Γ_{k1}	1	1	-1	-1	$+1$	-1	-1	1	$P_{2c}4_222$
$k2$	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	$P_{2c}4'_222'$

Si G_e n'est pas symmorphique et si $\mathbf{k}$ est perpendiculaire aux translations τ'_α (τ_α intérieures à la maille origine), ce qui ne se produit jamais si G est cubique, $(\alpha|\tau_\alpha)$ et $(\alpha|\tau_\alpha+T)$ ont le même caractère si: $\mathbf{k}\,.\,T=0$ ou si T appartient à T_k. On peut dans ce cas choisir logiquement les τ_α perpendiculaires à $\mathbf{k}$ et distinguer encore les groupes G_{kj} du groupe G_{k1}.

C'est la seule situation dans laquelle on a quel que soit α: $\Gamma_{k1}(\alpha|\tau_\alpha)=+1$, les τ_α étant intérieures à la maille origine, le groupe G_{k1} étant par suite du type M_{R0}. Le sous-groupe invariant H_{k1} est alors identique à G_e, seule la maille est différente.

Exemple: à $Pba2$, $\mathbf{k}=00\frac{1}{2}$ correspond le groupe $P_{2c}ba2$. Au contraire à $P4_222$, correspondent les groupes $P_{2c}4_122$ et $P_{2c}4_322$, mais le groupe $P_{2c}4_222$ n'existe pas.

Donc, si G_e est symmorphique, les groupes $M_{R\alpha}$ sont du type $M_{R\alpha 1}$.

D'autre part, si tous les éléments α de la classe sont binaires, pour pouvoir définir un groupe magnétique associé à G_e, il faut que $\mathbf{k}$ soit perpendiculaire aux τ'_α donc les groupes $M_{R\alpha}$ sont du type $M_{R\alpha 1}$.

3. Groupes d'espaces colorés

Pour former un groupe d'espace à i_α couleurs, il faut trouver un sous-groupe invariant H_α de G_e tel que le groupe facteur G_e/H_α soit cyclique d'ordre i_α dans le groupe coloré, les éléments de H_α n'affectent pas la couleur. Ainsi si G_α possède 4 couleurs, H_α est d'indice 4, G_e/H_α cyclique, isomorphe du groupe 4 et non du groupe 222.

Soit ξ_α une représentation complexe du groupe G_e/H_α: ses caractères sont les racines $a_\alpha$ièmes de l'unité:

$$\exp 2\pi i \frac{p}{a_\alpha} (p=0, 1, \ldots, a_\alpha - 1) .$$

ξ_α engendre une représentation $\xi_{\alpha e}$ de G_e, dans laquelle les éléments d'un même complexe associé à H_α ont le même caractère. Réciproquement si on connaît une représentation complexe de dimension 1 de G_e, donc les caractères sont les racines $a_\alpha$ièmes de l'unité on en déduit un groupe d'espace à a_α couleurs isomorphe de G_e.

Représentations complexes de dimension 1 des groupes d'espace

Pour trouver les groupes d'espaces colorés, on doit donc rechercher les représentations complexes de dimension 1 des 230 groupes d'espace. D'après l'étude de la première partie, on sélectionne d'abord les vecteurs **k** invariants dans G_e, puis on exploite par exemple la méthode d'Olbrychski (si le groupe ponctuel est cyclique, il peut exister des vecteurs **k** invariants de coordonnées 0, 0, $k_z \neq \frac{1}{2}$; si $k_z = 1/n$, on obtiendra des groupes à n couleurs, et si k_z est irrationnel, des groupes à une infinité de couleurs).

Si $G_e/T_k = G$, les Γ_{kj} complexes de dimension 1 sont engendrées par les Γ_j complexes de dimension 1 de G si elles existent.

Si G_e/T_k est différent de G, et alors G_e ne peut être défini par une application de $G \times G$ dans T_k, et si on peut trouver une connectante (complexe) sans poids, les Γ_{kj} sont complexes et celles de dimension 1 se déduisent des représentations de dimension 1 de G.

Classification des groupes colorés

On peut, d'après ce qui précède, distinguer plusieurs types de groupes d'espaces colorés G_{kj}:

(1) Les groupes du type G_{0j}, de classe colorée associée à la représentation Γ_j de G et de réseau classique. H_{0j} a le même réseau que G_e, son groupe ponctuel est un sous-groupe invariant de G.

(2) Les groupes du type G^a_{kj} analogues aux groupes magnétiques G_{kj}, tels que: $G_e/T_k = G$. Le réseau est à 2 couleurs. Si G_e est symmorphique, on remarque que les rotations $(\alpha|0)$ et les translations $(\varepsilon|T_l)$ transforment indépendamment les couleurs. Si la classe G_j est à a_j couleurs, le groupe est à $2a_j$ couleurs (d'où le nombre maximum de couleurs: 12).

(3) Les groupes du type G^b_{kj}, tels que $G_e/T_k = K \neq G$ le réseau est à 2 couleurs. Le nombre de couleurs est supérieur au nombre de couleurs des classes colorées G_α (exemple: *Pba*2, $\mathbf{k} = (\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$; 4 couleurs alors qu'il n'existe pas de classe colorée associée à *mmm*]. Ici les translations et les rotations ne transforment pas indépendamment les couleurs. En effet G_e/T_k est différent de G, c'est un groupe K d'ordre double de celui de G (ici encore le nombre maximum de couleurs est 12).

(4) Les groupes G_{kj} de classe cyclique, $\mathbf{k}_l \neq 0, \frac{1}{2}$. Ainsi, si $\mathbf{k} = (00\frac{1}{4})$ et G cyclique, **k** est invariant. Le réseau est à 4 couleurs, le nombre de couleurs peut être supérieur à 12.

Références

BELOV, N. V., NERONOVA, N. N. & SMIRNOVA, T. S. (1957). *Kristallografiya*, **2**, 315.

HERRING, C. (1942). *J. Franklin. Inst.* **233**, 525.

International Tables for X-ray Crystallography (1952). Vol. 1. Birmingham: Kynoch Press.

LIUBARSKI, G. Y. (1960). *The Application of Group Theory in Physics*. New York: Pergamon Press.

LIUBARSKI, G. Y. & KOVALEV, O. V. (1958). *Soviet Phys. Tech. Phys.* **3**, 1071.

LOMONT, J. S. (1959). *Application of Finite Groups*. New York: Academic Press.

OLBRYCHSKI, K. (1963). *Phys. Stat. Sol.* **3**, 1868.

OPECHOWSKI, W. & GUCCIONE, R. (1961). *Magnetism* II. Ed. RADO et SUHL. New York: Academic Press.

SIVARDIÈRE, J. (1969*a*) *Bull. Soc. Fr. Min. Crist.* **92,** 3.

SIVARDIÈRE, J. (1969*b*). *C. R. Acad. Sci. Paris,* **268,** 272.