where

$$\frac{1}{\gamma}=\frac{1}{\gamma_0}+\frac{1}{\gamma_i}.$$

For a diffracted beam originated at depth x below the crystal surface, the total path-length, including the distance travelled by the incident beam, is given by x/γ. The average value of x/γ is given by

$$\left\langle\frac{x}{\gamma}\right\rangle=A\frac{dA^*}{d\mu}$$

where $A^*=1/A$.

It can be readily shown that in this case

$$\left\langle\frac{x}{\gamma}\right\rangle=\frac{1}{\mu}-\frac{T}{\gamma}\cdot\frac{\exp(-\mu T/\gamma)}{1-\exp(-\mu T/\gamma)}.$$

Moreover,

$$\left\langle\frac{x}{\gamma}\right\rangle=\frac{\langle x\rangle}{\gamma_o}+\frac{\langle x\rangle}{\gamma_i},$$

$$\text{where } \frac{\langle x\rangle}{\gamma_o}=l_o \text{ and } \frac{\langle x\rangle}{\gamma_i}=l_i.$$

For a highly absorbing crystal (as for instance germanium with Mo $K\alpha$, $\mu=350\ \text{cm}^{-1}$) we have practically:

$$\left\langle\frac{x}{\gamma}\right\rangle=\frac{1}{\mu}.$$

Then,

$$l_o=\frac{\langle x\rangle}{\gamma_o}=\frac{1}{\mu}\cdot\frac{\gamma}{\gamma_o}$$

and

$$l_i=\frac{\langle x\rangle}{\gamma_i}=\frac{1}{\mu}\cdot\frac{\gamma}{\gamma_i}.$$

When the primary reflection is symmetric: $\gamma_o=\gamma_1$, $\gamma/\gamma_o=\gamma/\gamma_1=\frac{1}{2}$ and $l_o=l_1=1/2\mu$.

Then

$$l_i=\frac{\langle x\rangle}{\gamma}-l_o=\frac{1}{\mu}-\frac{1}{2\mu}=\frac{1}{2\mu}$$

for all secondary reflections.

When the secondary beam is transmitted rather than reflected and the crystal is highly absorbing the same reasoning can be followed and one find the same effective path-lengths $1/2\mu$ for all beams.

It is a pleasure to acknowledge a grant from the Fulbright Commision which enabled me to start the present paper at the Physics Department of the Polytechnic Institute of Brooklyn where the experimental work and part of the theory were done.

It is also a pleasure to thank both Professor B. Post and Professor R. A. Young for the facilities they put at my disposal and to acknowledge helpful discussions with Professor B. Post and with Professor A. J. C. Wilson.

References

Azaroff, L. V. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 701.
Moon, R. M. & Shull, C. G. (1964). *Acta Cryst.* **17**, 805.
Renninger, M. (1937). *Z. Phys.* **106**, 141.
Zachariasen, W. H. (1945). *Theory of X-ray Diffraction in Crystals*. New York: John Wiley.
Zachariasen, W. H. (1965). *Acta Cryst.* **18**, 705.

Acta Cryst. (1969). A**25**, 673

Quelques Propriétés des Facteurs de Structure

Par J. Sivardière

Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble, Rue des Martyrs, 38-Grenoble, France

(*Received* 6 *March* 1969)

The structure factor is shown to be a basis for a one-dimensional representation of the point group, and the following property of non-primitive translations of most of the space groups is derived: the sum of non-primitive translations is a primitive one.

Représentation engendrée par le facteur de structure

Rappelons qu'un facteur de structure trigonométrique $\xi(K)=\sum_\alpha \exp[-2\pi i(K\,.\,\alpha r+\tau_\alpha)]$ se transforme dans une opération $(\alpha|\tau_\alpha)$ d'un groupe d'espace G_e suivant la loi (Bertaut, 1955):

$$\xi(K\alpha)=\exp(-2\pi iK\,.\,\tau_\alpha)\xi(K)\,. \quad (1)$$

$\xi(K)$ est donc fonction de base d'une représentation Γ_K du groupe ponctuel G d'ordre g:

$$\Gamma_K(\alpha)=\exp(-2\pi iK\,.\,\tau_\alpha)\,. \quad (2)$$

Deux éléments $(\alpha|\tau_\alpha)$ et $(\beta|\tau_\beta)$ de G_e se multiplient suivant la relation (3), où $T_{\alpha\beta}$ est une translation réticulaire et ε l'identité:

$$(\alpha|\tau_\alpha)\,(\beta|\tau_\beta)=(\alpha\beta|\tau_\alpha+\alpha\tau_\beta)=(\varepsilon|T_{\alpha\beta})\,(\alpha\beta|\tau_{\alpha\beta})\,. \quad (3)$$

Nous en déduisons l'expression de $\Gamma_K(\alpha\beta)$:

$$\begin{aligned}\xi(K\alpha\,.\,\beta) &= \exp(-2\pi iK\alpha\,.\,\tau_\beta)\xi(K\alpha)\\ &= \exp[-2\pi i(K\,.\,\tau_\alpha+\alpha\tau_\beta)]\xi(K)\\ \Gamma_K(\alpha\beta) &= \exp(-2\pi iK\,.\,\tau_{\alpha\beta})\,. \end{aligned} \quad (4)$$

On a souvent $\tau_{\alpha\beta}\neq\tau_{\beta\alpha}$ donc: $\Gamma_K(\alpha\beta)\neq\Gamma_K(\beta\alpha)$ bien que Γ_K soit une représentation de dimension 1.

Effectivement Γ_K est en général une représentation de G avec poids* car:

$$\Gamma_K(\alpha\beta)=\exp[2\pi i(K\,.\,\tau_\beta-\alpha\tau_\beta)]\Gamma_K(\alpha)\Gamma_K(\beta)\,. \quad (5)$$

D'où le résultat suivant: considérons un groupe d'espace G_e non symmorphique, tel que toutes les représentations Γ_K soient sans poids et dont le groupe ponctuel ne soit pas: 2, m, 4, $\bar{4}$, 6, $\bar{6}$, 32 ou $3m$; la somme des translations non entières τ_α est une translation entière; cette propriété ne dépend pas de l'origine de la maille.

La propriété est vérifiée également dans les groupes $P6_2$ ($\Gamma_K=A$ ou E'), et $P4_2$ ($\Gamma_K=A$ ou B), et plus généralement dans les groupes d'espace tels que le produit des caractères de toutes les représentations Γ_K (avec ou sans poids) vaut $+1$. Considérons par exemple le groupe $P4_122$ et le vecteur $K=[001]$:

α	ε	4	4^2	4^3	2_x	2_y	2_{xy}	2_{xy}
τ_α	000	$00\frac{1}{4}$	$00\frac{1}{2}$	$00\frac{3}{4}$	$00\frac{1}{2}$	000	$00\frac{3}{4}$	$00\frac{1}{4}$
$\exp(-2\pi iK\,.\,\tau_\beta)$	1	$-i$	-1	i	-1	1	i	$-i$

Le poids vaut $+1$, quel que soit K, si: $\tau_\beta-\alpha\tau_\beta=T_1$ ou: $\tau_{\alpha\beta}=\tau_{\beta\alpha}$ pour tous les couples α,β (les représentations Γ_K et $\Gamma_{K\alpha}$ sont alors identiques; la condition est réalisée en particulier si G est abélien).

Ainsi le poids des représentations Γ_K vaut $+1$ pour les groupes d'espace symmorphiques et un grand nombre de groupes d'espaces non symmorphiques: ce sont les groupes dont la classe est un groupe abélien (n, $\bar{n}$, $n\times\bar{1}$, 222, $2mm$, mmm), $4mm$, $\bar{4}2m$, $\frac{4}{m}mm$, $6mm$, $\bar{6}2m$, $\frac{6}{m}mm$, ainsi que les groupes $P4_222$, $P4_22_12$, $P6_322$.

Les groupes d'espace ci-dessus possèdent des sous-groupes invariants symmorphiques de même réseau, formés des éléments $(\alpha|T_1)$; les éléments α correspondants forment les noyaux des représentations Γ_K, sous-groupes invariants des groupes ponctuels G.

Propriétés des translations non entières τ_α

K étant quelconque, supposons que Γ_K soit une représentation sans poids du groupe ponctuel G. Si Γ_K est la représentation identité de G:

$$\prod_\alpha \Gamma_K(\alpha)=\prod_\alpha \exp(-2\pi iK\,.\,\tau_\alpha)=+1\ \forall K\,. \quad (6)$$

Cette relation subsiste en général si Γ_K, de dimension 1, n'est pas la représentation identité. Les exceptions sont les représentations suivantes (nous utilisons les notations de Tinkham, 1964): $B(2)$, $B(m)$, $E(4)$, $E(\bar{4})$, $B(6)$, $E'(6)$, $B(\bar{6})$, $E'(\bar{6})$, $A_2(32)$, $A_2(3m)$.

Nous déduisons de la relation (6):

$$\sum_\alpha \tau_\alpha=T_1\,. \quad (7)$$

* On appelle représentation avec poids d'un groupe G une représentation Γ telle que: $\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)=\lambda(\alpha,\beta)\Gamma(\alpha\beta)$; le poids scalaire λ vaut $+1$ pour les représentations ordinaires.

nous vérifions que: $\prod_\alpha \Gamma_K(\alpha)=+1$, et effectivement $\sum_\alpha \tau_\alpha=T_1=003$. (Dans l'exemple ci-dessus, Γ_K est une représentation avec poids, on vérifie que le caractère n'est plus une fonction de classe.)

Finalement la somme des translations non entières τ_α est une translation entière, sauf dans les 14 groupes $P2_1$, Pb, Pc, Bb, Cc, $P4_1$, $P4_3$, $I4_1$, $P3c1$, $P31c$, $R3c$, $P6_1$, $P6_5$, $P6_3$.

Les résultats précédents peuvent se retrouver par une autre méthode. Supposons pour simplifier que la représentation Γ_K est sans poids, et considérons le produit $\prod_\alpha \alpha$ des éléments du groupe ponctuel G (l'ordre des facteurs doit être précisé si G n'est pas abélien): $\prod_\alpha \alpha$ est un élément β de G.

$$\xi(K\prod_\alpha \alpha)=\exp(-2\pi iK\,.\,\tau_\beta)\xi(K)\,. \quad (8)$$

La représentation Γ_K est sans poids; par suite:

$$\xi(K\prod_\alpha \alpha)=\exp(-2\pi iK\,.\,\sum_\alpha \tau_\alpha)\xi(K) \quad (9)$$

d'où

$$\sum_\alpha \tau_\alpha=\tau_\beta\,. \quad (10)$$

Si pour un certain ordre des facteurs au moins $\prod_\alpha \alpha=\varepsilon$, il vient: $\sum_\alpha \tau_\alpha=T_1$; si quel que soit l'ordre des facteurs, $\prod_\alpha \alpha\neq\varepsilon$, $\sum_\alpha \tau_\alpha$ n'est une translation entière que si $\tau_\beta=0$ (β dépend de l'ordre des facteurs dans $\prod_\alpha \alpha$, non τ_β). La deuxième circonstance, à savoir $\prod_\alpha \alpha\neq\varepsilon$, se produit si G est l'un des groupes 2, m, 4, $\bar{4}$, 6, $\bar{6}$, 32, $3m$.

Propriétés analogues des groupes magnétiques

Un facteur de structure magnétique $F(K)$ a pour expression (11) et se transforme dans l'opération $(\alpha|\tau_\alpha)$ suivant (12):

$$F(K) = \sum_\alpha \pm \alpha(\mu) \exp [2\pi i(K \,.\, \alpha r + \tau_\alpha)] \,, \quad (11)$$

$$F(K\alpha) = \exp (2\pi i K \,.\, \tau_\alpha)\alpha[F(K)] \,. \quad (12)$$

μ est le moment magnétique de l'atome situé en r; on choisit le signe $\pm$ suivant que α est un opérateur α^+ ou un antiopérateur α^- du groupe ponctuel magnétique G_j; le facteur de structure F est calculé dans la maille magnétique.

Les scalaires $\pm \exp(-2\pi i K \,.\, \tau_\alpha)$ forment une représentation avec poids $\Gamma'_{\mathbf{K}}$ du groupe ponctuel G (non magnétique): $\Gamma'_{\mathbf{K}}$ est sans poids si Γ_K est sans poids; $\Gamma'_{\mathbf{K}} = \Gamma_j \Gamma_K$; Γ_j est la représentation réelle de dimension 1 de G qui définit le groupe ponctuel magnétique G_j (Indenbom, 1960).

On montre, comme pour les groupes d'espace, que dans la plupart des groupes magnétiques:

$$\left.\begin{array}{l} \sum_\alpha \tau_{\alpha+} + \sum_{\alpha-} \tau_{\alpha-} = T_1 \\ \qquad \sum_{\alpha+} \tau_{\alpha+} = T_m \,;\ \sum_{\alpha-} \tau_{\alpha-} = T_n \,. \end{array}\right\} \quad (13)$$

Linéarisation du produit de deux facteurs de structure

Bertaut a montré (Bertaut, 1957) que le produit de deux facteurs de structure peut se linéariser:

$$\xi(K) \,.\, \xi(K') = \sum_\alpha \exp (2\pi i K \,.\, \tau_\alpha)\xi(K + K'\alpha) \,. \quad (14)$$

Les facteurs de structure magnétiques possèdent une propriété analogue si on peut les considérer comme des scalaires, c'est-à-dire si la structure magnétique est colinéaire:

$$\xi_m(K) \,.\, \xi_m(K') = \sum_\alpha \pm \exp (2\pi i K' \,.\, \tau_\alpha)\xi(K + K'\alpha) \,, \quad (15)$$

ξ étant le facteur de structure dans le groupe magnétique trivial.

La linéarisation ci-dessus n'a rien à voir avec la linéarisation du produit des représentations Γ_K et $\Gamma_{K'}$, éventuellement avec poids (ce produit est une représentation $\Gamma_{K+K'}$ de dimension 1); autrement dit les coefficients $\exp (2\pi i K \,.\, \tau_\alpha)$ ne sont pas des coefficients de Clebsch-Gordan.

Supposons pour simplifier les représentations Γ_K et $\Gamma_{K'}$ de poids unité; la quantité $\xi(K) \,.\, \xi(K')$ est fonction de base de $\Gamma_{K+K'}$, il doit donc en être de même des différentes quantités $\xi(K + K'\alpha)$. Effectivement:

$$\begin{aligned} &\exp [-2\pi i(K + K'\alpha) \,.\, \tau_\beta] = \\ &\exp [-2\pi i K \,.\, \tau_\beta - 2\pi i K' \,.\, \alpha\tau_\beta] = \\ &\exp [-2\pi i K \,.\, \tau_\beta] \exp [-2\pi i K' \,.\, \tau_\beta] \,, \end{aligned}$$

puisque: $\tau_\beta - \alpha\tau_\beta = 0$ ou T_1.

La linéarisation du produit de deux facteurs de structure est donc une propriété mathématique qui n'exprime pas une propriété de la densité électronique autre que son invariance par rotation.

Considérons par exemple le groupe $P2_12_12_1$

$$\begin{aligned} &\xi(110) = 4i \sin 2\pi x \cos 2\pi y \\ &\xi(002) = 4 \cos 4\pi z \\ &\xi(1\bar{1}0) = \xi(110) = -\xi(\bar{1}10) = -\xi(\bar{1}\bar{1}0) \\ &\xi(11 \pm 2) = 4i \sin 2\pi x \cos 2\pi y \cos 4\pi z \\ &\qquad \pm 4 \cos 2\pi x \sin 2\pi y \sin 4\pi z \\ &\xi(110)\xi(002) = 2\xi(112) + 2\xi(11\bar{2}) \,. \end{aligned}$$

Γ_K	ε	$2x$	$2y$	$2z$	Fonction de base
Γ_{110}	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\xi(110)$
Γ_{002}	1	1	1	1	$\xi(002)$
$\Gamma_{112} = \Gamma_{11\bar{2}} = \Gamma_{110} \,.\, \Gamma_{002}$	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\xi(112)$, $\xi(11\bar{2})$

Les fonctions $\xi(112)$ et $\xi(11\bar{2})$ sont indépendantes mais se transforment dans la même représentation.

Je remercie M. le Professeur E. F. Bertaut pour ses nombreux conseils.

Références

Bertaut, E. F. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 823.
Bertaut, E. F. (1957). *Acta Cryst.* **10**, 606.
Indenbom, V. L. (1960). *Sov. Phys. Cryst.* **5**, 493.
Tinkham, M. (1964). *Group Theory and Quantum Mechanics*. New York: McGraw-Hill.