Acta Cryst. (1978). A**34**, 414–421

La Détermination Systématique des Sous-groupes Spatiaux et des Changements de Repère Conventionnel des Groupes Spatiaux*

PAR YVES BILLIET†

Faculté des Sciences et Techniques, Boîte Postale W, Sfax, Tunisie

ET ABDELHAMID SAYARI ET HÉDI ZARROUK

Faculté des Sciences Mathématiques Physiques et Naturelles, Campus Universitaire, Tunis, Tunisie

(*Reçu le* 3 *janvier* 1977, *accepté le* 22 *novembre* 1977)

After usual properties of space subgroups have been described, the sufficient condition is given for a space group g to be any subgroup of a space group G: the translation vectors **a**, **b**, **c** of the conventional unit cell of g(**o**,**a**,**b**,**c**) must belong to the lattice of G and the 'generators' of equivalent general positions of g must be enclosed in the set of general positions of G. In order to verify this criterion, it is necessary to obtain the coordinates of general positions of g in the reference standard setting of G(**O**,**A**,**B**,**C**); it is necessary to know the coordinates of origin **o** and the components of vectors **a**, **b**, **c** in terms of the reference setting (**O**,**A**,**B**,**C**). Then, all the possibilities of a space group of standard symbol $\mathscr{s}$ being any subgroup of a space group of standard symbol $\mathscr{S}$ can be characterized. Classification of the standard settings of subgroups is established: different settings of the same subgroup and settings of conjugated subgroups.

L'étude des relations existant entre un groupe spatial et ses sous-groupes spatiaux présente plusieurs intérêts. D'un point de vue théorique, une telle étude permet d'approfondir nos connaissances sur la symétrie cristallographique et de préciser d'une manière relativement simple les conditions pour qu'un groupe spatial g soit sous-groupe d'un autre groupe spatial G. Sur le plan pratique, cette étude est importante dans la mesure où elle conduit à proposer des modèles pour les structures dérivées d'une structure donnée (surstructures d'ordre, surstructures de déformation locale ou globale due à des effets physiques divers, *etc.*).

Parmi les publications consacrées à l'étude des sous-groupes spatiaux et des surstructures, citons plus spécialement les remarquables travaux de Buerger, Neubüser & Wondratschek, Boyle & Lawrenson et Bertaut. Buerger (1947) analyse d'une façon très précise le concept géométrique de surstructure et établit la liste complète des sous-éléments de symétrie de tous les éléments de symétrie; cependant, les méthodes utilisées par Buerger ne permettent pas de construire de manière aisée et systématique les sous-groupes spatiaux des groupes spatiaux. Neubüser & Wondratschek (1966*a*,*b*) construisent des tables de sous-groupes maximaux de tous les groupes spatiaux et obtiennent ainsi, par itération, des chaînes de sous-groupes spatiaux d'un groupe spatial quelconque; il convient de remarquer que la dérivation de Neubüser & Wondratschek est incomplète car elle ne porte pas sur les sous-groupes maximaux isosymboliques; de plus ces auteurs indiquent rarement quelles relations existent entre les repères conventionnels standards d'un groupe et de ses sous-groupes. Boyle & Lawrenson (1972*a*) construisent des tables de sous-groupes et de super-groupes 'translationengleich'. Boyle & Lawrenson (1972*b*) établissent aussi des tables de sous-groupes 'klassengleich' 'ayant un sens physique' (*sic*): leur dérivation est incomplète car elle porte sur des sous-groupes d'indice relativement petit. Bertaut (1976*a*) étudie les principaux sous-groupes des groupes spatiaux de la classe *mmm*; il est le premier à donner des relations entre les familles de Wyckoff générales des sous-groupes et des groupes de départ. Bertaut (1976*b*) montre aussi qu'on peut facilement dériver des sous-groupes spatiaux d'indice 2 et 4 à partir des groupes spatiaux magnétiques à antitranslations.

Les méthodes de travail que nous présentons dans ce mémoire sont différentes de celles des précédents auteurs. Elles sont universelles car elles rendent systématique la dérivation de *tous* les sous-groupes spatiaux d'un groupe d'espace quelconque – y compris celle des sous-groupes isosymboliques (Billiet, 1973). Elles donnent les relations existant entre les repères conventionnels d'un groupe spatial et de ses sous-groupes. Et enfin elles permettent de traiter l'association des familles de Wyckoff dans les passages groupe–sous-groupe (Billiet, 1969; Sayari & Billiet, 1975; Sayari, 1976) et les changements de repère conventionnel (Zarrouk & Billiet, 1975; Zarrouk, 1976).

* English translations, not 'warranted', may be obtained from Y. Billiet, Chimie et Symétrie, Laboratoire de Chimie Inorganique Moléculaire, 6 avenue Le Gorgeu, 29283 Brest, France.

† Nouvelle adresse: Chimie et Symétrie, Laboratoire de Chimie Inorganique Moléculaire, 6 avenue Le Gorgeu, 29283 Brest, France.

I. Généralités sur les sous-groupes spatiaux

Par G, on désigne un groupe spatial de maille conventionnelle ou 'standard setting' (**O**,**A**,**B**,**C**), **O** étant l'origine et **A**, **B** et **C** les vecteurs-arêtes, tels qu'ils sont definis dans les *International Tables for X-ray Crystallography* (1952); M désigne la multiplicité de la maille conventionnelle, Γ le groupe des translations de G et H le groupe de symétrie d'orientation isomorphe du groupe quotient G/Γ. On entend par g un autre groupe spatial et par (**o**,**a**,**b**,**c**), m, γ et h, respectivement, un repère conventionnel de g, la multiplicité de celui-ci, le groupe des translations de g et le groupe de symétrie d'orientation de g ($h \simeq g/\gamma$).

Si g est sous-groupe de G, les relations suivantes sont bien entendu vérifiées:

$$g \subseteq G, \quad \gamma \subseteq \Gamma \quad \text{et} \quad h \subseteq H;$$

$i_{g/G}$, $i_{\gamma/\Gamma}$ et $i_{h/H}$ sont les indices respectifs de g, γ et h par rapport à G, Γ et H. Ces indices sont des entiers strictement positifs liés par la relation $i_{g/G} = i_{\gamma/\Gamma} \cdot i_{h/H}$. En désignant par R et r les ordres de H et h, l'indice $i_{h/H}$ est égal au rapport R/r (R et r sont des entiers positifs). Voyons maintenant quelques cas particuliers:

(1) $i_{\gamma/\Gamma} = 1$, $i_{g/G} = i_{h/H} > 1$; dans ces conditions, g a le même groupe de translations que G; g est dit sous-groupe 'translationengleich', convention adoptée par le 10ème Congrès de l'Union Internationale de Cristallographie. Les sous-groupes 'translationengleich' de G sont en nombre fini car ils correspondent, un à un, aux sous-groupes de H; cette propriété découle de l'isomorphisme $H \simeq G/\Gamma$.

(2) $i_{h/H} = 1$, $i_{g/G} = i_{\gamma/\Gamma} > 1$; g admet alors le même groupe de symétrie d'orientation que G, g est appelé sous-groupe 'klassengleich'. En particulier si g a le même symbole cristallographique ('standard symbol') que G, il est dit sous-groupe isosymbolique. Pour un groupe donné, les sous-groupes 'klassengleich' non isosymboliques sont en nombre infini tout comme les sous-groupes isosymboliques.

(3) Les sous-groupes maximaux sont forcément 'translationengleich' ou 'klassengleich' (Hermann, 1929). Parmi les sous-groupes maximaux d'un groupe donné, les 'translationengleich' sont toujours en nombre fini, les 'klassengleich' non isosymboliques sont dans la plupart des cas en nombre fini (Neubüser & Wondratschek, 1966*b*) mais par contre les isosymboliques paraissent être en nombre infini dans tous les cas (Billiet, 1973).

(4) $i_{h/H} > 1$ et $i_{\gamma/\Gamma} > 1$ caractérisent donc un sous-groupe non maximal.

(5) $i_{h/H} = 1$ et $i_{\gamma/\Gamma} = 1$ entraînent $i_{g/G} = 1$, c'est-à-dire, $g = G$. Le repère (**o**,**a**,**b**,**c**) n'est pas le repère conventionnel d'un sous groupe propre de G mais un repère conventionnel différent de (**O**,**A**,**B**,**C**) dans le même groupe spatial G. Ces repères conventionnels d'un même groupe spatial sont en nombre infini et sont associés aux automorphismes du groupe spatial considéré.

II. Caractérisation d'un sous-groupe spatial et d'un changement de repère conventionnel

Une condition suffisante pour que g soit sous-groupe de G consiste à vérifier que les translations de vecteurs **a**, **b**, **c** appartiennent au réseau de G et qu'une famille de positions de Wyckoff générale W_g du groupe g est une partie, modulo Γ, d'une famille générale W_G du groupe G. En effet, les opérations de symétrie de g qui lient entre elles les positions de W_g appartiendront alors à G et g sera bien sous-groupe de G.

La vérification est immédiate quand les repères conventionnels (**O**,**A**,**B**,**C**) et (**o**,**a**,**b**,**c**) sont confondus.

Exemple 1. Ainsi nous pouvons aisément constater que le groupe $P4_2/n$ est sous-groupe du groupe $I4/m$ si leurs mailles conventionnelles sont superposées.

$G(I4/m)$; origine **O** au centre $4/m$; maille (**O**,**A**,**B**,**C**);
$W_G = (0,0,0;\ \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}) + (X,Y,Z;\ \bar{X},\bar{Y},Z;\ X,Y,\bar{Z};\ \bar{X},\bar{Y},\bar{Z};\ \bar{Y},X,Z;\ Y,\bar{X},Z;\ \bar{Y},X,\bar{Z};\ Y,\bar{X},\bar{Z})$
(*International Tables for X-ray Crystallography*, 1952).
$g(P4_2/n)$; origine **o** en 4 à $\bar{\tfrac{1}{4}},\bar{\tfrac{1}{4}},\bar{\tfrac{1}{4}}$ de $\bar{1}$; maille (**o**,**a**,**b**,**c**);
$W_g = (x,y,z;\ \bar{x},\bar{y},z;\ \tfrac{1}{2}+x,\ \tfrac{1}{2}+y;\ \tfrac{1}{2}-z;\ \tfrac{1}{2}-x,\ \tfrac{1}{2}-y,\ \tfrac{1}{2}-z;\ \bar{y},x,\bar{z};\ y,\bar{x},\bar{z};\ \tfrac{1}{2}-y,\ \tfrac{1}{2}+x,\ \tfrac{1}{2}+z;\ \tfrac{1}{2}+y,\ \tfrac{1}{2}-x,\ \tfrac{1}{2}+z)$.

La repère de g étant identique à celui de G, les vecteurs de translations **a**, **b**, **c** appartiennent bien à G et on remarque que W_g peut être plongé dans W_G avec $X = x$, $Y = y$ et $Z = z$. Le groupe $P4_2/n$ est donc sous-groupe 'klassengleich' maximal de $I4/m$ car son indice vaut 2.

Exemple 2. Par contre, $P222$ ne paraît pas être sous-groupe de $P2/c2/c2/m$ tout au moins quand leurs repères conventionnels sont superposés.

$G(P2/c2/c2/m)$; origine **O** au centre $2/m$, maille (**O**,**A**,**B**,**C**);
$W_G = (X,Y,Z;\ \bar{X},\bar{Y},Z;\ \bar{X},\ Y,\ \tfrac{1}{2}+Z;\ X,\ \bar{Y},\ \tfrac{1}{2}+Z;\ \bar{X},\bar{Y},\bar{Z};\ X,Y,\bar{Z};\ X,\ Y,\ \tfrac{1}{2}-Z;\ \bar{X},\ Y,\ \tfrac{1}{2}-Z)$.
$g(P222)$; origine **o** en 222; maille (**o**,**a**,**b**,**c**);
$W_g = (x,y,z;\ \bar{x},\bar{y},z;\ x,\bar{y},\bar{z};\ \bar{x},y,\bar{z})$.

Puisque les mailles conventionnelles sont prises confondues, les translations **a**, **b**, **c** appartiennent bien à $P2/c2/c2/m$ mais il n'est pas possible de plonger *entièrement* W_g dans W_G avec $X = x$, $Y = y$ et $Z = z$. Or nous savons bien que $P222$ est sous-groupe de $P2/c2/c2/m$, ne fût-ce qu'à comparer les symboles cristallographiques: le fait de ne pas pouvoir plonger W_g dans W_G provient uniquement de ce que les repères conventionnels des deux groupes ne sont pas confondus.

Quand les repères conventionnels de G et g diffèrent en origine, en orientation ou en grandeur, vérifier que g est ou n'est pas sous-groupe de G est un peu plus délicat à mettre en oeuvre car il faut au préalable traduire les coordonnées des positions de W_g dans le repère de G. Soit donc un point P de l'espace; on désigne respectivement par X_P,Y_P,Z_P et x_P,y_P,z_P ses coordonnées par rapport à $(\mathbf{O},\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})$ et $(\mathbf{o},\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c})$. Désignons par S la matrice de passage du repère $(\mathbf{O},\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})$ au repère $(\mathbf{o},\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c})$:

$$(\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c}) = (\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})\mathsf{S} \qquad (1)$$

$$\mathsf{S} = \begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & s_{33} \end{vmatrix}. \qquad (2)$$

Les coefficients de S sont des nombres rationnels; son déterminant, $\det \mathsf{S}$, est un nombre rationnel strictement positif car les repères de G et g sont directs ('standard setting'); et l'on a $i_{\gamma/\Gamma} = \det \mathsf{S}\,.M/m$ quand g est sous-groupe de G. X_o,Y_o,Z_o désignant les coordonnées de l'origine $\mathbf{o}$ de g par rapport à la maille $(\mathbf{O},\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})$, les relations suivantes se démontrent sans difficulté:

$$\begin{vmatrix} X_P \\ Y_P \\ Z_P \end{vmatrix} = \mathsf{S} \begin{vmatrix} x_P \\ y_P \\ z_P \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} X_o \\ Y_o \\ Z_o \end{vmatrix}; \qquad (3)$$

$$\begin{vmatrix} x_P \\ y_P \\ z_P \end{vmatrix} = \mathsf{S}^{-1} \begin{vmatrix} X_P - X_o \\ Y_P - Y_o \\ Z_P - Z_o \end{vmatrix}. \qquad (4)$$

Nous sommes alors en mesure de constater si g est sous-groupe ou non de G.

Suite de l'exemple 2. Nous allons vérifier que $P222$ est bien sous-groupe de $P2/c2/c2/m$, l'origine étant placée différemment: $\mathbf{a} = \mathbf{A}$; $\mathbf{b} = \mathbf{B}$; $\mathbf{c} = \mathbf{C}$; $X_o = Y_o = 0$; $Z_o = \frac{1}{4}$.

A partir des relations (1), (2) et (3), cherchons les coordonnées des positions de W_g dans le repère $(\mathbf{O},\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})$:

$$\begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix} \to \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{4} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x \\ y \\ z+\frac{1}{4} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} X \\ Y \\ Z \end{vmatrix};$$

$$\begin{vmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z \end{vmatrix} \to \begin{vmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ z+\frac{1}{4} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \bar{X} \\ \bar{Y} \\ Z \end{vmatrix};$$

$$\begin{vmatrix} x \\ \bar{y} \\ \bar{z} \end{vmatrix} \to \begin{vmatrix} x \\ \bar{y} \\ \bar{z}+\frac{1}{4} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x \\ \bar{y} \\ \frac{1}{2}-(z+\frac{1}{4}) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} X \\ \bar{Y} \\ \frac{1}{2}-Z \end{vmatrix};$$

$$\begin{vmatrix} \bar{x} \\ y \\ \bar{z} \end{vmatrix} \to \begin{vmatrix} \bar{x} \\ y \\ \bar{z}+\frac{1}{4} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \bar{X} \\ Y \\ \frac{1}{2}-Z \end{vmatrix}.$$

On constate que les coordonnées, relatives à la maille $(\mathbf{O},\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})$, de chacune des positions de la famille W_g sont égales aux coordonnées d'une des positions de la famille W_G. Comme, de plus, $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ sont bien des vecteurs de translations de G, $P222$ est sous-groupe de $P2/c2/c2/m$; il est 'translationengleich' et son indice est égal à 2.

Les deux exemples que nous venons d'étudier sont très simples et peuvent être directement déduits des diagrammes de symétrie figurant dans les *International Tables for X-ray Crystallography* (1952). Il n'en est pas de même des deux exemples suivants qui ont été choisis à cause de leur complexité élevée et parce qu'ils illustrent pratiquement toutes les propriétés des passages groupe–sous-groupe et des changements de repère conventionnel.

Exemple 3. Le groupe $R3m$ admet-il comme sous-groupe le groupe Bb dans les conditions précisées ci-après?

$G(R3m)$; axes hexagonaux; origine $\mathbf{O}$ en $3m$; maille $(\mathbf{O},\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})$;
$W_G = (0,0,0;\ \frac{1}{3},\frac{2}{3},\frac{2}{3};\ \frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3}) + (X,Y,Z;\ \bar{Y},\ X-Y,\ Z;\ Y-X,\ \bar{X},\ Z;\ \bar{Y},\bar{X},Z;\ X,\ X-Y,\ Z;\ Y-X,\ Y,\ Z)$.
$g(Bb)$; '1st setting'; origine $\mathbf{o}$ sur le plan de glissement $\mathbf{b}$; maille $(\mathbf{o},\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c})$;
$W_g = (0,0,0;\ \frac{1}{2},0,\frac{1}{2}) + (x,y,z;\ x,\ \frac{1}{2}+y,\ \bar{z})$.

Conditions: $\mathbf{a} = -2\mathbf{A}/3 - 4\mathbf{B}/3 + 2\mathbf{C}/3$; $\mathbf{b} = 2\mathbf{A}/3 + 4\mathbf{B}/3 + 4\mathbf{C}/3$; $\mathbf{c} = -2\mathbf{A}$; $X_o = \frac{5}{6}$; $Y_o = \frac{2}{3}$; $Z_o = \frac{1}{2}$.

Nous constatons tout d'abord que $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ sont des vecteurs de translations de G car $\mathbf{a}$ est le double d'un des vecteurs de base $\mathbf{A}'$ de la maille élémentaire rhomboédrique de G ($\mathbf{A}' = -\mathbf{A}/3 - 2\mathbf{B}/3 + \mathbf{C}/3$; *cf.* 'standard obverse orientation'), $\mathbf{b}$ est égal à $2(\mathbf{C} - \mathbf{A}')$ et appartient donc au réseau de G tout comme $\mathbf{c}$. Cherchons dans le repère $(\mathbf{O},\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})$ les coordonnées des positions de la famille W_g, en exploitant les relations matricielles (1) à (3).

$$\begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix} \to \begin{vmatrix} \bar{\frac{2}{3}} & \frac{2}{3} & \bar{2} \\ \bar{\frac{4}{3}} & \frac{4}{3} & 0 \\ \frac{2}{3} & \frac{4}{3} & 0 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \frac{5}{6} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{1}{2} \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} -2x/3 + 2y/3 - 2z + \frac{5}{6} \\ -4x/3 + 4y/3 + \frac{2}{3} \\ 2x/3 + 4y/3 + \frac{1}{2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} X \\ Y \\ Z \end{vmatrix};$$

$$\begin{vmatrix} x \\ \frac{1}{2}+y \\ \bar{z} \end{vmatrix} \to \begin{vmatrix} \bar{\frac{2}{3}} & \frac{2}{3} & \bar{2} \\ \frac{4}{3} & \frac{4}{3} & 0 \\ \frac{2}{3} & \frac{4}{3} & 0 \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} x \\ \frac{1}{2}+y \\ \bar{z} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \frac{5}{6} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{1}{2} \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} -2x/3 + \frac{1}{3} + 2y/3 + 2z + \frac{5}{6} \\ -4x/3 + \frac{2}{3} + 4y/3 + \frac{2}{3} \\ 2x/3 + \frac{2}{3} + 4y/3 + \frac{1}{2} \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} (-4x/3 + 4y/3 + \frac{2}{3}) - (-2x/3 + 2y/3 - 2z + \frac{5}{6}) \\ + \frac{1}{3} + 1 \\ (-4x/3 + 4y/3 + \frac{2}{3}) + \frac{2}{3} \\ (2x/3 + 4y/3 + \frac{1}{2}) + \frac{2}{3} \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} Y - X \\ Y \\ Z \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \frac{1}{3} + 1 \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{vmatrix}; \quad \begin{vmatrix} \frac{1}{2}+x \\ y \\ \frac{1}{2}+z \end{vmatrix} \to \begin{vmatrix} X \\ Y \\ Z \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \frac{2}{3} - 2 \\ \frac{1}{3} - 1 \\ \frac{1}{3} \end{vmatrix};$$

$$\begin{vmatrix} \frac{1}{2}+x \\ \frac{1}{2}+y \\ \frac{1}{2}-z \end{vmatrix} \to \begin{vmatrix} Y - X \\ Y \\ Z \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{vmatrix}.$$

On constate que les coordonnées, relatives à $(\mathbf{O},\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})$, de toute position de W_g sont égales aux coordonnées d'une position de W_G, à une translation près du réseau de G. Il en résulte que $g(Bb)$ est sous-groupe de $G(R3m)$. Il est aisé de vérifier ce qui suit.

(1) Les coefficients de S ne sont pas forcément entiers mais sont tous rationnels.

(2) det S $= \frac{16}{3}$, $M = 3$, $m = 2$, $i_{v/\Gamma} = \frac{16}{3}.\frac{3}{2} = 8$.

(3) $H(3m)$, $R = 6$, $h(m)$, $r = 2$, $i_{h/H} = \frac{6}{2} = 3$.

(4) $i_{g/G} = 8.3 = 24$.

(5) Bb n'est donc ni 'translationengleich', ni 'klassengleich' et ne peut pas être un sous-groupe maximal de $R3m$.

(6) Pour établir que Bb est sous-groupe de $R3m$, il n'est pas du tout nécessaire de vérifier que les positions $(\frac{1}{2} + x, y, \frac{1}{2} + z)$ et $(\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z)$ de W_g appartiennent à W_G. En effet nous avons vu que $\mathbf{a}$ est égal à $2\mathbf{A}'$ et $\mathbf{c}$ est égal à $-2\mathbf{A}$; la translation de vecteur $(\mathbf{a} + \mathbf{c})/2 = (\mathbf{A}' - \mathbf{A})$ appartient bien au réseau de G. Il est donc suffisant de vérifier que la position $(x, \frac{1}{2} + y, \bar{z})$, associée au glissement b^1, appartient à W_G en même temps que la position (x,y,z), car les quatre translations de vecteurs $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$ et $(\mathbf{a} + \mathbf{c})/2$ et le glissement b^1 constituent un système de générateurs de Bb.* Des remarques analogues peuvent être faites pour tout autre couple de groupes g et G: g est sous-groupe de G dès qu'un système de générateurs de g appartient à G; g n'est pas sous-groupe si l'un au moins de ces générateurs n'appartient pas à G. Ces remarques capitales simplifient beaucoup la caractérisation d'un sous-groupe et surtout la dérivation systématique des sous-groupes d'un groupe.

Exemple 4. Le groupe $g(B2/m)$ est sous-groupe du groupe $G(B2/m)$ dans les conditions imposées ci-dessous.

$G(B2/m)$; origine $\mathbf{O}$ au centre $2/m$; maille $(\mathbf{O},\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})$;
$W_G = (0,0,0;\ \frac{1}{2},0,\frac{1}{2}) + (X,Y,Z;\ X,Y,Z;\ \bar{X},\bar{Y},Z;\ \bar{X},\bar{Y},\bar{Z})$.
$g(B2/m)$: origine $\mathbf{o}$ au centre $2/m$; maille $(\mathbf{o},\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c})$
$W_g = (0,0,0; \frac{1}{2},0,\frac{1}{2}) + (x,y,z; x,y,\bar{z}; \bar{x},\bar{y},z; \bar{x},\bar{y},\bar{z})$.

Conditions: $\mathbf{a} = s_{11}\mathbf{A} + 2n_{21}\mathbf{B}$; $\mathbf{b} = s_{12}\mathbf{A} + s_{22}\mathbf{B}$; $\mathbf{c} = s_{33}\,\mathbf{C}$ (s_{11}, s_{33} entiers de même parité; s_{12}, s_{22}, n_{21} entiers quelconques; det S ≥ 1); $X_o = k_1/2$; $Y_o = k_2/2$; $Z_o = k_3/2$ (k_i entier).

Nous laissons au lecteur le soin de vérifier que W_g est inclus dans W_G en lui indiquant cependant les générateurs de g. Il s'agit – en plus des trois translations de vecteurs $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ et $\mathbf{c}$ – de la translation de vecteur $(\mathbf{a} + \mathbf{c})/2$, de l'inversion $\bar{1}^1$ faite autour de l'origine $\mathbf{o}$ et du miroir horizontal m^1 passant par l'origine $\mathbf{o}$. Le lecteur pourra trouver dans un autre de nos mémoires (Billiet, 1973) des exemples tout à fait semblables. Ce quatrième exemple appelle un certain nombre de commentaires. Remarquons d'abord qu'il y a une infinité de matrices S, répondant aux conditions imposées et de déterminant supérieur à 1, et une infinité d'origines $\mathbf{o}$ possibles. Il existe donc une infinité de mailles conventionnelles $(\mathbf{o},\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c})$ conduisant à une infinité de sous-groupes $g(B2/m)$ isosymboliques. Si det S est un nombre premier, g est maximal. Si det S prend la valeur 1 ($s_{11}s_{22} - 2n_{21}s_{12} = s_{33} = \pm 1$), le repère $(\mathbf{o},\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c})$ est une autre maille conventionnelle du groupe $G(B2/m)$. C'est le cas du repère $\mathbf{a} = 3\mathbf{A} - 2\mathbf{B}$; $\mathbf{b} = 7\mathbf{A} - 5\mathbf{B}$; $\mathbf{c} = -\mathbf{C}$; $X_o = \frac{3}{2}$; $Y_o = -\frac{1}{2}$; $Z_o = 1$. Il existe bien sûr une infinité de repères conventionnels de G.

Les conditions que nous avons imposées à g, dans les exemples précédents, pour être sous-groupe de G, découlent-elles d'observations, en quelque sorte, 'expérimentales'? Ou bien peuvent-elles être prévues théoriquement? C'est à ces questions que nous allons nous intéresser maintenant.

III. La dérivation systématique des sous-groupes spatiaux et des repères conventionnels

Etant donné un groupe spatial de symbole cristallographique $\mathscr{S}$, est-il possible d'y plonger comme sous-groupe un autre groupe spatial de symbole $\mathscr{s}$, identique ou différente de $\mathscr{S}$? Si cela est possible, quelles sont toutes les façons d'y arriver, c'est-à-dire, quelles sont toutes les dispositions relatives des repères conventionnels des sous-groupes de symbole $\mathscr{s}$ par rapport au repère conventionnel du groupe de symbole $\mathscr{S}$? Nous allons voir successivement quelles sont les conditions imposées par la symétrie d'orientation, par le réseau et par les générateurs spécifiques des sous-groupes.

III.1. *Conditions imposées par la symétrie d'orientation*

Exemple 5. Dans quelles conditions des groupes spatiaux des classes 2, m, $2/m$ peuvent-ils être sous-groupes d'un groupe spatial de la classe $4/m2/m2/m$ ('1st setting' pour les groupes monocliniques)?

Le groupe de symétrie d'orientation de g, h (2, m ou $2/m$), doit être sous-groupe de celui de G, H ($4/m2/m2/m$). Ce qui impose à $\mathbf{c}$ – nécessairement parallèle à l'axe binaire ou perpendiculaire au miroir de h – d'être parallèle à l'un des cinq axes binaires de H ($2_{\mathbf{C}}$, $2_{\mathbf{A}}$, $2_{\mathbf{B}}$, $2_{\mathbf{A}+\mathbf{B}}$, $2_{\mathbf{A}-\mathbf{B}}$). Les vecteurs $\mathbf{a}$ et $\mathbf{b}$, perpendiculaires à $\mathbf{c}$, doivent donc être situés dans un des plans respectivement perpendiculaires à l'une de ces cinq directions.

1er cas. $\mathbf{c}$ est parallèle à $\mathbf{C}$, le plan $\{\mathbf{a},\mathbf{b}\}$ est parallèle au plan $\{\mathbf{A},\mathbf{B}\}$. La matrice de passage est de la forme M_1.

2ème cas. $\mathbf{c}$ est parallèle à $\mathbf{A}$ et $\{\mathbf{a},\mathbf{b}\}$ est parallèle à $\{\mathbf{B},\mathbf{C}\}$. La matrice est de la forme M_2.

---

* Ce système est réductible. Au sens strict, un système de générateurs irréductible est nécessaire et suffisant: c'est le cas du système constitué des deux translations $\mathbf{a}$ et $(\mathbf{a} + \mathbf{c})/2$ et du glissement b^1, par exemple.

3ème cas. (Équivalent par symétrie au 2ème cas). **c** parallèle à **B**, {**a**,**b**} parallèle à {**A**,**C**}, matrice M_3.

4ème cas. **c** parallèle à (**A** + **B**), {**a**,**b**} parallèle à {(**A** − **B**), **C**}, matrice M_4 (prendre le signe supérieur dans $\mathsf{M}_{4,5}$).

5ème cas. (Équivalent par symétrie au 4ème cas). **c** parallèle à (**A** − **B**), {**a**,**b**} parallèle à {(**A** + **B**), **C**}, matrice M_5 (signe inférieur dans $\mathsf{M}_{4,5}$).

$$\mathsf{M}_1 = \begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & 0 \\ s_{21} & s_{22} & 0 \\ 0 & 0 & s_{33} \end{vmatrix}; \quad \mathsf{M}_2 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & s_{13} \\ s_{21} & s_{22} & 0 \\ s_{31} & s_{32} & 0 \end{vmatrix};$$

$$\mathsf{M}_3 = \begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & 0 \\ 0 & 0 & s_{23} \\ s_{31} & s_{32} & 0 \end{vmatrix}; \quad \mathsf{M}_{4,5} = \begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} \\ \mp s_{11} & \mp s_{12} & \pm s_{13} \\ s_{31} & s_{32} & 0 \end{vmatrix}.$$

Remarques. A ce stade de la dérivation les coefficients s_{ij} non nuls sont des nombres réels quelconques. Les matrices M_1 à M_5 sont spécifiques à l'inclusion des groupes de symétrie d'orientation 2, m et $2/m$ dans le groupe de symétrie d'orientation $4/m2/m2/m$. L'inclusion de 2 dans $\bar{4}2m$ n'est possible que selon les changements de repère M_1, M_2 et M_3. Celle de 2 dans $\bar{4}m2$ ne l'est que pour M_1, M_4 et M_5. Celle de 2 dans 4, $\bar{4}$ et $4/m$ ne l'est que pour M_1. Mais l'inclusion de m dans 4 ou $\bar{4}$ est évidemment impossible quel que soit le changement de repère *etc.*

III.2. *Conditions imposées par le réseau*

Exemple 6. Dans quelles conditions des groupes spatiaux monocliniques à base centrée B peuvent-ils être sous-groupes d'un groupe spatial quadratique centré I (étude limitée aux changements de repère M_1 à M_5 de l'exemple 5)?

1er cas. Matrice M_1. Les coefficients s_{ij} sont des entiers car **C** est un vecteur de base de sa direction et [**A**,**B**] est un couple de vecteurs de base du plan {**A**,**B**}. De plus, le centre de la base B de g doit être un noeud du réseau de G. Deux possibilités se présentent:

(i) $(\mathbf{a} + \mathbf{c})/2 = (s_{11}\mathbf{A} + s_{21}\mathbf{B} + s_{33}\mathbf{C})/2 = n_{11}\mathbf{A} + n_{21}\mathbf{B} + n_{33}\mathbf{C}$, avec n_{11}, n_{21}, n_{33} entiers quelconques; on en déduit $s_{11} = 2n_{11}$, $s_{21} = 2n_{21}$, $s_{33} = 2n_{33}$.

(ii) $(\mathbf{a} + \mathbf{c})/2 = (s_{11}\mathbf{A} + s_{21}\mathbf{B} + s_{33}\mathbf{C})/2 = (\frac{1}{2} + n_{11})\mathbf{A} + (\frac{1}{2} + n_{21})\mathbf{B} + (\frac{1}{2} + n_{33})\mathbf{C}$, avec n_{11}, n_{21}, n_{33} entiers quelconques; on en déduit $s_{11} = 2n_{11} + 1$, $s_{21} = 2n_{21} + 1$, $s_{33} = 2n_{33} + 1$.

En résumé, l'inclusion du réseau de g dans celui de G impose aux coefficients de la matrice M_1 d'être entiers; de plus les coefficients s_{11}, s_{21} et s_{33} doivent avoir la même parité.

2eme cas. Matrice M_2. Une étude analogue montre que tous les coefficients sont entiers et que s_{13}, s_{21} et s_{31} sont de même parité.

3ème cas. Matrice M_3. Les coefficients sont entiers et s_{11}, s_{23}, s_{31} sont de même parité.

4ème, 5ème cas. Matrice $\mathsf{M}_{4,5}$. (**A** + **B**) est un vecteur de base de sa direction; [(**A**/2 ∓ **B**/2 + **C**/2), **C**] est un couple de vecteurs de base du plan {(**A** ∓ **B**), **C**}. La matrice est donc ainsi modifiée:

$$\mathsf{M}_{4,5} = \begin{vmatrix} n_{11}/2 & n_{12}/2 & n_{13} \\ \mp n_{11}/2 & \mp n_{12}/2 & \pm n_{13} \\ n_{11}/2 + n_{31} & n_{12}/2 + n_{32} & 0 \end{vmatrix}; n_{ij} \text{ entier.}$$

Comme le centre de la base B de g doit être un noeud du réseau de G, on aboutit pour la matrice $\mathsf{M}_{4,5}$ aux conditions supplémentaires: n_{11} doit être pair, n_{13} et n_{31} doivent être de même parité.

Remarques. Le déterminant des matrices M_1 à M_5 est un nombre entier supérieur ou égal à 1. D'une façon plus générale, c'est l'inclusion du réseau de g dans celui de G qui impose aux coefficients de la matrice de passage S d'être des nombres rationnels; le déterminant est un nombre rationnel positif. Si la maille conventionnelle de G est élémentaire ('primitive' P), les coefficients de S sont entiers.

III.3. *Conditions restantes imposées par les générateurs*

Les conditions déterminées précédemment sont communes à l'immersion comme sous-groupes de tous les groupes spatiaux monocliniques à base centrée B des classes 2, m et $2/m$, dans tous les groupes quadratiques centrés I de la classe $4/m2/m2/m$. Les conditions restantes sont propres à chaque sous-groupe.

Exemple 7. Dans quelles conditions $g(B2/m)$ peut-il être sous-groupe de $G(I4/m2/c2/m)$?

Nous savons maintenant à quelles conditions les translations de vecteurs **a**, **b**, **c** et (**a** + **c**)/2 sont incluses dans $G(I4/m2/c2/m)$. Pour que $g(B2/m)$ soit sous-groupe de G, il reste à trouver de quelle manière le miroir m^1, de support $(x,y,0)$, et l'inversion $\bar{1}^1$, de support $(0,0,0)$, peuvent appartenir à G (*cf.* § II, exemple 4). Il s'agit donc de déterminer les conditions pour que les positions $(x,y,\bar{z};\ \bar{x},\bar{y},\bar{z})$ fassent partie de W_G en même temps que la position (x,y,z).

$G(I4/mcm$; origine **O** au centre $4/m$; maille (**O**,**A**,**B**,**C**);

$$\begin{aligned} W_G = (0,0,0;\ \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}) + (&X,Y,Z;\ \bar{X}\bar{Y},Z;\\ &X,\bar{Y},\tfrac{1}{2}+Z;\ \bar{X},Y,\tfrac{1}{2}+Z;\ \bar{X},\bar{Y},\bar{Z};\ X,Y,\bar{Z};\\ &X,\bar{Y},\tfrac{1}{2}-Z;\ \bar{X},Y,\tfrac{1}{2}-Z;\ \bar{Y},X,Z;\ Y,\bar{X},Z;\\ &Y,X,\tfrac{1}{2}+Z;\ \bar{Y},\bar{X},\tfrac{1}{2}+Z;\ \bar{Y},X,\bar{Z};\ Y,\bar{X},\bar{Z};\\ &Y,X,\tfrac{1}{2}-Z;\ \bar{Y},\bar{X},\tfrac{1}{2}-Z). \end{aligned}$$

1er cas. Matrice M_1; par application de la relation (3), on aboutit à:

$$\begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix} \to \mathsf{M}_1 \begin{vmatrix} x \\ y \\ z \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} X_o \\ Y_o \\ Z_o \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} X \\ Y \\ Z \end{vmatrix};$$

$$\begin{vmatrix} x \\ y \\ \bar{z} \end{vmatrix} \to \mathsf{M}_1 \begin{vmatrix} x \\ y \\ \bar{z} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} X_o \\ Y_o \\ Z_o \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} X \\ Y \\ \bar{Z} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 2Z_o \end{vmatrix};$$

$$\left|\begin{matrix}\bar{x}\\\bar{y}\\\bar{z}\end{matrix}\right| \rightarrow \left|\begin{matrix}\bar{X}\\\bar{Y}\\\bar{Z}\end{matrix}\right| + \left|\begin{matrix}2X_o\\2Y_o\\2Z_o\end{matrix}\right|.$$

La position $(x,y,\bar{z})$ n'appartient à W_G que si $Z_o = h_3/2$ (h_3 entier). En conséquence, la position $(\bar{x},\bar{y},\bar{z})$ ne peut faire partie de la famille W_G que si $X_o = h_1/2$ et $Y_o = h_2/2$ (h_i entier). A ces conditions, le groupe $B2/m$ peut être plongé comme sous-groupe dans le groupe $I4/mcm$ selon l'orientation définie par la matrice M_1 étudiée précédemment (*cf.* §§ III.1 et III.2).

2ème et 3ème cas. Matrices M_2 et M_3. Il est impossible de plonger $B2/m$ dans $I4/mcm$ selon ces orientations: dans les plans perpendiculaires aux vecteurs **A** et **B**, on ne trouve que des glissements a, b et c qui n'admettent pas de miroirs comme sous-éléments de symétrie (Buerger, 1947). Vérifions-le dans le cas de la matrice M_2:

$$\left|\begin{matrix}x\\y\\z\end{matrix}\right| \rightarrow \mathsf{M}_2\left|\begin{matrix}x\\y\\z\end{matrix}\right| + \left|\begin{matrix}X_o\\Y_o\\Z_o\end{matrix}\right| = \left|\begin{matrix}X\\Y\\Z\end{matrix}\right|; \quad \left|\begin{matrix}x\\y\\\bar{z}\end{matrix}\right| \rightarrow \left|\begin{matrix}\bar{X}\\Y\\Z\end{matrix}\right| + \left|\begin{matrix}2X_o\\0\\0\end{matrix}\right|.$$

Quel que soit la valeur de X_o, il est en effet impossible à la position $(x,y,\bar{z})$ de faire partie de la famille W_G.

4ème et 5ème cas. Etudions le cas de la matrice M_4.

$$\left|\begin{matrix}x\\y\\z\end{matrix}\right| \rightarrow \mathsf{M}_4\left|\begin{matrix}x\\y\\z\end{matrix}\right| + \left|\begin{matrix}X_o\\Y_o\\Z_o\end{matrix}\right| = \left|\begin{matrix}X\\Y\\Z\end{matrix}\right|;$$

$$\left|\begin{matrix}x\\y\\\bar{z}\end{matrix}\right| \rightarrow \left|\begin{matrix}\bar{Y}\\\bar{X}\\Z\end{matrix}\right| + \left|\begin{matrix}X_o+Y_o\\X_o+Y_o\\0\end{matrix}\right|; \quad \left|\begin{matrix}\bar{x}\\\bar{y}\\\bar{z}\end{matrix}\right| \rightarrow \left|\begin{matrix}\bar{X}\\\bar{Y}\\\bar{Z}\end{matrix}\right| + \left|\begin{matrix}2X_o\\2Y_o\\2Z_o\end{matrix}\right|.$$

La position $(x,y,\bar{z})$ n'appartiendra à W_G que si l'on a: $X_o + Y_o = \frac{1}{2} + h_4$ (h_4 entier). Pour que la position $(\bar{x},\bar{y},\bar{z})$ fasse aussi partie de W_G, il faut (h_i entier):

(1) soit $X_o = h_1/2$; $Y_o = h_2/2$; $Z_o = h_3/2$ avec la condition $X_o + Y_o = \frac{1}{2} + h_4$,

(2) soit $X_o = \frac{1}{4} + h_1/2$; $Y_o = \frac{1}{4} + h_2/2$; $Z_o = \frac{1}{4} + h_3/2$ avec $X_o + Y_o = \frac{1}{2} + h_4$.

Ces diverses conditions étant respectées, $B2/m$ est sous-groupe de $I4/mcm$ avec comme matrice de passage la matrice M_4. Dans le cas de la matrice M_5, voici quelles sont ces conditions:

(1) soit $X_o = h_1/2$; $Y_o = h_2/2$; $Z_o = h_3/2$ et $X_o - Y_o = \frac{1}{2} + h_4$,

(2) soit $X_o = \frac{1}{4} + h_1/2$; $Y_o = \frac{1}{4} + h_2/2$; $Z_o = \frac{1}{4} + h_3/2$ et $X_o - Y_o = \frac{1}{2} + h_4$.

III.4. *Conclusions*

Les exemples 5, 6 et 7 illustrent la démarche à suivre pour trouver tous les sous-groupes de symbole $\mathscr{s}$ d'un groupe de symbole $\mathscr{S}$. L'inclusion de la classe de symétrie d'orientation limite tout d'abord les formes possibles de la matrice de passage; l'inclusion de réseau restreint les valeurs possibles des coefficients de la matrice; enfin les opérations de symétrie qui forment avec les diverses translations de la maille conventionnelle un ensemble de générateurs, donnent les coordonnées possibles de l'origine et précisent, éventuellement, certaines valeurs des coefficients de la matrice de passage.* Une telle étude peut être menée pour tous les couples $(\mathscr{s}, \mathscr{S})$ et permet donc de déterminer *tous les sous-groupes* – 'translationengleich', 'klassengleich' ou quelconques – *de n'importe quel groupe spatial*, y compris ses sous-groupes isosymboliques et ses changements de repère conventionnel $(\mathscr{s} = \mathscr{S})$. Remarquons qu'un groupe spatial d'un symbole donné $\mathscr{S}$ n'admet pas forcément de sous-groupe d'un symbole quelconque $\mathscr{s}$ différent. Ainsi les groupes cubiques ne sont jamais – et réciproquement – sous-groupes des groupes hexagonaux; les groupes quadratiques des classes de symétrie d'orientation $4,\bar{4},4/m$ ne présentent aucune relation de groupe à sous-groupe avec les groupes orthorhombiques; etc. Seul le groupe $P1$ peut être plongé dans n'importe quel autre groupe spatial. Même si la symêtrie d'orientation et le réseau le permettent, il n'est pas toujours possible de plonger un groupe de symbole $\mathscr{s}$ dans un autre de symbole $\mathscr{S}$: nous avons vu, dans l'exemple 7, que $B2/m$ ne peut pas être plongé dans $I4/mcm$ selon les orientations M_2 et M_3 car les glissements n'admettent jamais de miroirs comme sous-éléments de symétrie. C'est pour la même raison que $B2/m$ ne peut pas être sous-groupe de $I4_1/acd$, quelle que soit l'orientation envisagée. A l'opposé, $B2/b$ est sous-groupe de $I4_1/acd$ pour n'importe laquelle des orientations M_1, M_2, M_3, M_4 et M_5, sous réserve de valeurs appropriées des coefficients de ces matrices et des coordonnées de l'origine **o**; ainsi pour l'orientation M_4, l'origine **O** de $I4_1/acd$ étant en $\bar{4}$, les conditions sont les suivantes – en plus de celles imposées par le réseau (*cf.* § III.2): (k_i entier)

(i) $X_o = k_1/2$, $Y_o = \frac{1}{4} + k_2/2$, $Z_o = \frac{1}{8} + k_3/2$,

ou bien

$X_o = \frac{1}{4} + k_1/2$, $Y_o = k_2/2$, $Z_o = \frac{3}{8} + k_3/2$,

et

(ii) n_{12} impair, $n_{12}/4 + X_o + Y_o = k_4$,

$n_{12}/4 + n_{32}/2 = \frac{3}{4} + k_5$,

ou bien

n_{12} impair, $n_{12}/4 + X_o + Y_o = \frac{1}{2} + k_4$,

$n_{12}/4 + n_{32}/2 = \frac{1}{4} + k_5$.

Cette méthode nous a permis de dresser la liste complète des sous-groupes isosymboliques de tous les

---

* Très souvent, les trois étapes de la dérivation systématique font intervenir successivement des générateurs qui constituent en fait un système réductible. Le calcul direct des coefficients de S et des coordonnées X_o,Y_o,Z_o est évidemment possible sur un système irréductible contenant moins de générateurs; mais ce calcul direct contrairement à ce qu'il pourrait paraître à première vue est beaucoup plus délicat à mener. L'on a, en réalité, toujours intérêt à adopter les trois étapes proposées, même si le nombre de générateurs est plus élevé. Dans un mémoire plus spécialisé (Bertaut & Billiet, 1978) seront développées les propriétés algébriques qui lient les changements de repères (S; X_o,Y_o,Z_o) aux opérateurs matriciels $\{\alpha|\tau\}$ des générateurs de g.

groupes spatiaux tridimensionnels (Billiet, 1973), la liste de tous les sous-groupes et de tous les changements de repère conventionnel de tous les groupes spatiaux monocliniques et tricliniques (Sayari, 1976; Zarrouk, 1976; Sayari & Billiet, 1977) et la liste complète des sous-groupes et changements de repère conventionnel de tous les groupes spatiaux bidimensionnels (Sayari, Billiet & Zarrouk, 1978). D'autres applications sont à l'étude, notamment la détermination des sous-groupes des groupes spatiaux tridimensionnels bicolores (Belguith & Billiet, 1977).

IV. Classement des sous-groupes et de leurs repères conventionnels

Parmi les repères conventionnels qui conduisent à tous les sous-groupes de même symbole $\mathscr{J}$ d'un groupe de symbole $\mathscr{S}$, quels sont ceux qui caractérisent le même sous-groupe g? Autrement dit, étant donné deux de ces repères (**o**,**a**,**b**,**c**) et ($\boldsymbol{\omega}$,$\boldsymbol{\alpha}$,$\boldsymbol{\beta}$,$\boldsymbol{\gamma}$), peut-on savoir s'il s'agit ou non de deux repères conventionnels du même sous-groupe? S'il en est bien ainsi, le passage de (**o**,**a**,**b**,**c**) à ($\boldsymbol{\omega}$,$\boldsymbol{\alpha}$,$\boldsymbol{\beta}$,$\boldsymbol{\gamma}$) doit être un changement de repère conventionnel à l'intérieur de g. Pour le savoir, il suffit de connaître la matrice de passage de (**o**,**a**,**b**,**c**) à ($\boldsymbol{\omega}$,$\boldsymbol{\alpha}$,$\boldsymbol{\beta}$,$\boldsymbol{\gamma}$) et les coordonnées relatives à (**o**,**a**,**b**,**c**) de l'origine ω. S et σ étant les matrices de passage de (**O**,**A**,**B**,**C**) à (**o**,**a**,**b**,**c**) et ($\boldsymbol{\omega}$,$\boldsymbol{\alpha}$,$\boldsymbol{\beta}$,$\boldsymbol{\gamma}$), on a:

$(\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c}) = (\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})\mathsf{S}$; $\quad(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma}) = (\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})\sigma$;

$(\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C}) = (\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c})\mathsf{S}^{-1}$; $\quad(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\gamma}) = (\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c})\mathsf{S}^{-1}\sigma$

et $\mathsf{R} = \mathsf{S}^{-1}\sigma$.

$(X_\omega,Y_\omega,Z_\omega)$ désignant les coordonnées de $\boldsymbol{\omega}$, relatives à (**O**,**A**,**B**,**C**), les coordonnées $(x_\omega,y_\omega,z_\omega)$ relatives a (**o**,**a**,**b**,**c**) sont données par la relation (4) (*cf.* § II):

$$\begin{vmatrix} x_\omega \\ y_\omega \\ z_\omega \end{vmatrix} = \mathsf{S}^{-1} \begin{vmatrix} X_\omega - X_o \\ Y_\omega - Y_o \\ Z_\omega - Z_o \end{vmatrix}.$$

Si R et $(x_\omega,y_\omega,z_\omega)$ sont caractéristiques d'un changement de repère conventionnel à l'intérieur de g, les repères (**o**,**a**,**b**,**c**) et ($\boldsymbol{\omega}$,$\boldsymbol{\alpha}$,$\boldsymbol{\beta}$,$\boldsymbol{\gamma}$) conduisent au même sous-groupe. Dans le case contraire, ils conduisent à deux sous-groupes différents de même symbole $\mathscr{J}$.

Exemple 8. Les deux repères suivants conduisent-ils au même sous-groupe de symbole $B2/m$ du groupe $I4/mcm$?

$\mathbf{a} = 2\mathbf{A} - 2\mathbf{B} + 5\mathbf{C}$; $\quad\mathbf{b} = 3\mathbf{A}/2 - 3\mathbf{B}/2 + 5\mathbf{C}/2$;

$\mathbf{c} = 5\mathbf{A} + 5\mathbf{B}$; $X_o = \frac{5}{2}$; $\quad Y_o = 2$; $\quad Z_o = -\frac{3}{2}$.

$\boldsymbol{\alpha} = 3\mathbf{A} - 3\mathbf{B} + 10\mathbf{C}$; $\quad\boldsymbol{\beta} = 13\mathbf{A}/2 - 13\mathbf{B}/2 + 45\mathbf{C}/2$;

$\boldsymbol{\gamma} = -5\mathbf{A} - 5\mathbf{B}$; $X_\omega = \frac{39}{4}$; $\quad Y_\omega = \frac{19}{4}$; $Z_\omega = \frac{19}{4}$.

On vérifie d'abord sans difficulté que chacun des deux repères permet de passer du groupe $I4/mcm$ à un sous-groupe de symbole $B2/m$ (*cf.* § III, exemple 7, 4ème cas). Formons les matrices S, S^{-1}, σ et R et calculons les coordonnées $(x_\omega,y_\omega,z_\omega)$.

$$\mathsf{S} = \begin{vmatrix} 2 & \frac{3}{2} & 5 \\ \bar{2} & \bar{\frac{3}{2}} & 5 \\ 5 & \frac{5}{2} & 0 \end{vmatrix}; \quad \mathsf{S}^{-1} = \begin{vmatrix} \bar{\frac{1}{2}} & \frac{1}{2} & \frac{3}{5} \\ \bar{1} & \bar{1} & \bar{\frac{4}{5}} \\ \frac{1}{10} & \frac{1}{10} & 0 \end{vmatrix};$$

$$\sigma = \begin{vmatrix} 3 & \frac{13}{2} & 5 \\ \bar{3} & \bar{\frac{13}{2}} & \bar{5} \\ 10 & \frac{45}{2} & 0 \end{vmatrix}; \quad \mathsf{R} = \mathsf{S}^{-1}\sigma = \begin{vmatrix} 3 & 7 & 0 \\ \bar{2} & \bar{5} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{1} \end{vmatrix};$$

$$\begin{vmatrix} x_\omega \\ y_\omega \\ z_\omega \end{vmatrix} = \mathsf{S}^{-1} \begin{vmatrix} \frac{39}{4} - \frac{5}{2} \\ \frac{19}{4} - 2 \\ \frac{19}{4} + \frac{3}{2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{3}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 1 \end{vmatrix}.$$

On constate que R et $(x_\omega,y_\omega,z_\omega)$ sont caractéristiques d'un changement de repère conventionnel à l'intérieur de $B2/m$. Les deux repères (**o**,**a**,**b**,**c**) et ($\boldsymbol{\omega}$,$\boldsymbol{\alpha}$,$\boldsymbol{\beta}$,$\boldsymbol{\gamma}$) conduisent donc au même sous-groupe $B2/m$ (*cf.* § II, exemple 4). Si l'on avait pris, pour le second repère, une origine différente définie par les coordonnées $X_\omega = \frac{43}{4}$, $Y_\omega = \frac{19}{4}$, $Z_\omega = \frac{19}{4}$, relatives à (**O**,**A**,**B**,**C**), on aurait trouvé pour coordonnées relatives à (**o**,**a**,**b**,**c**) $x_\omega = 1$, $y_\omega = \frac{1}{2}$ et $z_\omega = \frac{11}{10}$; les deux repères (**o**,**a**,**b**,**c**) et ($\boldsymbol{\omega}$,$\boldsymbol{\alpha}$,$\boldsymbol{\beta}$,$\boldsymbol{\gamma}$) auraient alors conduit à deux sous-groupes différents de même symbole $B2/m$.

On peut répondre à cette autre question: quelles relations existe-t-il entre les repères conventionnels de deux sous-groupes conjugués du groupe G? θ désignant une opération de symétrie *propre* appartenant à G et (**o**,**a**,**b**,**c**) étant un repère conventionnel d'un sous-groupe g, l'opération θ transforme (**o**,**a**,**b**,**c**) en un repère conventionnel (**o**′,**a**′,**b**′,**c**′) d'un sous-groupe g' conjugué de g par l'opération θ.

Exemple 9. Soit $g(B2/m)$ le sous-groupe de $G(I4/mcm)$ défini par: $\mathbf{a} = \mathbf{A} - \mathbf{B}$; $\mathbf{b} = \mathbf{B}$; $\mathbf{c} = 3\mathbf{C}$; $X_o = 0$, $Y_o = 1$; $Z_o = 0$. Quel est le sous-groupe g' conjugué de g par l'opération 4^1_2 de G de support $(\frac{1}{2},0,z)$? Pour cela, remarquons que les vecteurs **A**, **B**, **C** sont transformés en les vecteurs **B**, $-$**A**, **C** par l'opération 4^1_2; on en déduit les vecteurs de la maille conventionnelle de g': $\mathbf{a}' = \mathbf{A} + \mathbf{B}$: $\mathbf{b}' = -\mathbf{A}$; $\mathbf{c}' = 3\mathbf{C}$. La rotation hélicoïdale 4^1_2 transforme l'origine **o** en l'origine **o**′ de coordonnées $X_{o'} = -\frac{1}{2}$, $Y_{o'} = -\frac{1}{2}$ et $Z_{o'} = \frac{1}{2}$.

Remarques. Il est nécessaire que l'opération θ soit propre car tous les repères conventionnels sont directs. L'opération θ peut être précédée d'un changement de repère conventionnel à l'intérieur de g; elle peut être suivie d'un changement de repère conventionnel à l'intérieur de g'. Si l'opération θ est précédée ou suivie d'un changement de repère conventionnel à l'intérieur de G, on obtient deux sous-groupes de même indice mais ils ne sont pas forcément conjugués. Si l'opération θ de G appartient aussi au sous-groupe g, les repères (**o**,**a**,**b**,**c**) et (**o**′,**a**′,**b**′,**c**′) sont deux repères conventionnels différents du même sous-groupe g.

Pour passer aux applications pratiques de la dérivation des sous-groupes spatiaux, il est nécessaire de traiter l'association des familles de Wyckoff générales et spéciales dans les passages groupe–sous-groupe. Cette question fera l'objet d'un autre mémoire (Billiet, Sayari & Zarrouk, 1978).

Références

BELGUITH, J. & BILLIET, Y. (1977). Fourth European Crystallographic Meeting, Oxford, Abstract PI.5; pp. 105–106.
BERTAUT, E. F. (1976*a*). *Acta Cryst.* A**32**, 380–387.
BERTAUT, E. F. (1976*b*). *Acta Cryst.* A**32**, 976–983.
BERTAUT, E. F. & BILLIET, Y. (1978). En préparation.
BILLIET, Y. (1969). Thèse d'Etat, Orsay, France.
BILLIET, Y. (1973). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **96**, 327–334.
BILLIET, Y., SAYARI, A. & ZARROUK, H. (1978). *Acta Cryst.* A paraître.
BOYLE, L. L. & LAWRENSON, J. E. (1972*a*). *Acta Cryst.* A**28**, 485–489.
BOYLE, L. L. & LAWRENSON, J. E. (1972*b*). *Acta Cryst.* A**28**, 489–493.
BUERGER, M. J. (1947). *J. Chem. Phys.* **15**, 1–16.
HERMANN, C. (1929). *Z. Kristallogr.* **69**, 533–541.
International Tables for X-ray Crystallography (1952). Vol. I. Birmingham: Kynoch Press.
NEUBÜSER, J. & WONDRATSCHEK, H. (1966*a*). *Krist. Tech.* **1**, 529–544.
NEUBÜSER, J. & WONDRATSCHEK, H. (1966*b*). *Liste de sous-groupes maximaux des groupes spatiaux.* Communication privée.
SAYARI, A. (1976). Thèse de Spécialité, Tunis, Tunisie.
SAYARI, A. & BILLIET, Y. (1975). *Acta Cryst.* A**31**, S4.
SAYARI, A. & BILLIET, Y. (1977). *Acta Cryst.* A**33**, 985–986.
SAYARI, A., BILLIET, Y. & ZARROUK, H. (1978). *Acta Cryst.* A. Sous presse.
ZARROUK, H. (1976). Thèse de Spécialité, Tunis, Tunisie.
ZARROUK, H. & BILLIET, Y. (1975). *Acta Cryst.* A**31**, S4.

Acta Cryst. (1978). A**34**, 421–427

Physical Significance of Triplets in Direct Methods

BY PHILIP H. STOTHART

National Institute for Research in Dairying, Shinfield, Reading RG2 9AT, England

(*Received* 20 *May* 1976; *accepted* 16 *December* 1977)

Direct methods of phase determination frequently make use of the triplet formula, $\varphi(\mathbf{h}) \simeq \langle \varphi(\mathbf{h}-\mathbf{k}) + \varphi(\mathbf{k})\rangle$. This expression is derived by a probability approach which has no easily visualized connection with an actual crystal structure. In this paper the positions of electron-dense planes are related to the positions of peaks in the two-term E map of $E(\mathbf{k})$ and $E(\mathbf{h}-\mathbf{k})$. The connection between $\varphi(\mathbf{h})$ and $[\varphi(\mathbf{k}) + \varphi(\mathbf{h}-\mathbf{k})]$ is then easily visualized. A consideration of spurious peaks in the two-term E map suggests that the probability that $\varphi(-\mathbf{h}) + \varphi(\mathbf{k}) + \varphi(\mathbf{h}-\mathbf{k})$ sums to zero is increased by a small value of $|E(2\mathbf{k}-\mathbf{h})/E(\mathbf{h})|$ and may be decreased by a large value of this ratio. The relation between symmetry and aberrancy is briefly considered.

I. Introduction

The major phase-determining equation of direct methods is

$$\varphi(\mathbf{h}) \simeq \langle \varphi(\mathbf{h}-\mathbf{k}) + \varphi(\mathbf{k})\rangle_{Kr} \quad (1)$$

(Karle & Karle, 1966) where Kr denotes that the average is restricted to the quasi-normalized structure factors $E(\mathbf{k})$, $E(\mathbf{h}-\mathbf{k})$ (Karle & Hauptman, 1959) with large magnitudes. (1), the triplet formula, is valid for both centrosymmetric and non-centrosymmetric structures. It can be obtained from Sayre's (1952) equation.

The mathematical derivation of (1) offers little insight into its physical significance. In this paper an intuitive approach is developed by considering the relation between the positions of atoms and the positions of peaks in the two-term Fourier synthesis of $E(\mathbf{k})$ and $E(\mathbf{h}-\mathbf{k})$. This two-term E map shows maximum amplitude of oscillation on the $\mathbf{h}$ and $(2\mathbf{k}-\mathbf{h})$ planes; high atom density on at least one of these planes is inferred.

With some simple structures as examples, it is argued that the value of $|E(2\mathbf{k}-\mathbf{h})/E(\mathbf{h})|$ is an aid to deciding if the triple

$$\varphi(-\mathbf{h}) + \varphi(\mathbf{k}) + \varphi(\mathbf{h}-\mathbf{k}) \quad (2)$$

is normal (*i.e.* sums to near zero) or aberrant (*i.e.* sums to near π). This approach is used to identify the systematically aberrant triples of the benzene ring (Thiessen & Busing, 1974).

The relation between aberrancy and symmetry is briefly considered.