Acta Cryst. (1980). A**36**, 242–248

Le Groupe *P*1 et ses Sous-Groupes. II. Tables de Sous-Groupes*

PAR YVES BILLIET†

*Chimie et Symétrie, Laboratoire CR*5 (*Chimie Inorganique Moléculaire*), *Université de Bretagne Occidentale,* 6 *avenue Le Gorgeu,* 29283 *Brest, France*

ET MONIQUE ROLLEY LE COZ

*Laboratoire MR*3 (*Algèbre de Von Neumann et Algèbres Commutatives*), *Université de Bretagne Occidentale,* 6 *avenue Le Gorgeu,* 29283 *Brest, France*

(*Reçu le* 30 *novembre* 1978, *accepté le* 21 *septembre* 1979)

Abstract

This paper is the continuation of another paper devoted to the theoretical aspects and properties of isomorphic subgroups of *P*1 and *p*1 [Billiet (1979). *Acta Cryst.* A**35**, 485–496]. In the present paper the determination of the number of these subgroups is investigated with practical results for all indices up to 30. The theoretical construction of typical conventional unit cells is also studied: these typical unit cells are obtained by means of suitable triangular matrices. The isomorphic subgroups of *P*1 and their conventional unit cells are tabulated for all indices up to 7 (234 subgroups, 597 unit cells). Analogous data are tabulated for isomorphic subgroups of *p*1 (40 subgroups, 65 unit cells).

Dans un premier mémoire (Billiet, 1979), l'un de nous a développé l'outillage mathématique nécessaire à l'étude des sous-groupes spatiaux isomorphes des groupes spatiaux *p*1, *P*1, *etc.*, et, d'une façon plus générale, à l'étude des sous-modules isomorphes des modules $\mathbb{Z}^n$ ($n \geq 2$).

Ce second mémoire est consacré au dénombrement, à l'énumération et au classement des sous-groupes bidimensionnels de *p*1, des sous-groupes tridimensionnels de *P*1 et plus généralement des réseaux dérivés de dimension *n* d'un réseau de translations de dimension *n*. Les méthodes utilisées seront exposées dans le cas de *P*1 mais elles s'appliquent sans difficulté à *p*1 et aux modules $\mathbb{Z}^n$.

Le lecteur est prié de se référer à notre premier mémoire pour l'essentiel de la bibliographie et pour les notions suivantes: changement de maille, automorphisme, algorithme d'Euclide, théorème de Bezout, diagonalisation et réduction matricielles, association à gauche, équivalence $\mathscr{R}$, conventions diverses.... Les abréviations sont néanmoins rappelées dans le Tableau 1.

Tableau 1. *Abréviations utilisées*

MAOG: matrice d'affinité orthogonale généralisée; c'est une matrice diagonale à coefficients entiers supérieurs à zéro.
MRBE: matrice de réorientation de base élémentaire; on échange deux vecteurs de la base ou on remplace un vecteur de la base par son opposé; le déterminant vaut −1.
MRCE: matrice régulière à coefficients entiers; son déterminant est un entier non nul.
MUCE: matrice unimodulaire à coefficients entiers; son déterminant vaut ±1.
p.g.c.d.: plus grand commun diviseur.

1. Triangulation des matrices de passage aux sous-groupes

Dans toute la suite de l'exposé, nous désignerons par (**A**,**B**,**C**) une maille élémentaire bien fixée du groupe spatial $\Gamma(P1)$. Toute matrice MRCE non unimodulaire **S** définit le passage de (**A**,**B**,**C**) à une maille élémentaire (**a**,**b**,**c**) d'un sous-groupe propre isomorphe $\gamma(P1)$ d'indice *i*:

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

$$\mathbf{S} = \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \end{vmatrix}; \quad |\mathrm{Det}\,\mathbf{S}| = i.$$

Nous avons adopté pour les éléments de **S** un symbolisme différent de celui de notre premier mémoire; ce nouveau symbolisme apparaît plus adapté à l'exposé de la triangulation des MRCE. Nous allons

* English translations, not 'refereed', may be obtained from the authors upon request.

† A qui doit être adressée toute correspondance.

0567-7394/80/020242-07$01.00

démontrer que **S** peut toujours être associée à gauche à une MRCE triangulaire $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$ et à une seule:

$$\mathbf{T}^{\mathrm{I}} = \mathbf{SM}; \quad \mathbf{T}^{\mathrm{I}} = \begin{vmatrix} p_1^{\mathrm{I}} & q_1^{\mathrm{I}} & r_1^{\mathrm{I}} \\ 0 & p_2^{\mathrm{I}} & q_2^{\mathrm{I}} \\ 0 & 0 & p_3^{\mathrm{I}} \end{vmatrix}; \quad \mathbf{M} = \mathrm{MUCE};$$

avec $i = p_1^{\mathrm{I}}\, p_2^{\mathrm{I}}\, p_3^{\mathrm{I}}$; $p_1^{\mathrm{I}} > 0$; $p_2^{\mathrm{I}} > 0$; $p_3^{\mathrm{I}} > 0$; $-p_1^{\mathrm{I}}/2 < q_1^{\mathrm{I}} \le p_1^{\mathrm{I}}/2$; $-p_2^{\mathrm{I}}/2 < q_2^{\mathrm{I}} \le p_2^{\mathrm{I}}/2$ et $-p_1^{\mathrm{I}}/2 < r_1^{\mathrm{I}} \le p_1^{\mathrm{I}}/2$.

Ce qui revient à dire qu'il existe une maille élémentaire $(\mathbf{a}^{\mathrm{I}},\mathbf{b}^{\mathrm{I}},\mathbf{c}^{\mathrm{I}})$ de γ et une seule telle que la matrice de passage soit la matrice triangulaire $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$:

$$(\mathbf{a}^{\mathrm{I}},\mathbf{b}^{\mathrm{I}},\mathbf{c}^{\mathrm{I}}) = (\mathbf{a},\mathbf{b},\mathbf{c})\mathbf{M} = (\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})\mathbf{T}^{\mathrm{I}}.$$

Démonstration

lère partie. La matrice **S** va être triangulée par la 'méthode des pivots' en la multipliant à droite par des MUCE particulières, c'est-à-dire, par des matrices dont le déterminant est égal à ± 1.*

1ère étape. Désignons par $D(x_3,z_3)$ le p.g.c.d. de x_3 et z_3;† nous avons donc $x_3 = x_3' D(x_3,z_3)$ et $z_3 = z_3' D(x_3,z_3)$, x_3' et z_3' étant premiers entre eux. Le théorème de Bezout affirme l'existence de deux entiers e_1 et f_1 tels que $x_3' e_1 + z_3' f_1 = 1$ [e_1 et f_1 peuvent être trouvés en réalisant l'algorithme d'Euclide de x_3' et z_3' (Billiet, 1979)]. Réalisons la multiplication matricielle $\mathbf{S}_1 = \mathbf{SM}_1$, c'est-à-dire:

$$\mathbf{S}_1 = \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} z_3' & 0 & e_1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -x_3' & 0 & f_1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_{11} & y_{11} & z_{11} \\ x_{21} & y_{21} & z_{21} \\ 0 & y_{31} & z_{31} \end{vmatrix}.$$

Remarquons que $\mathbf{M}_1$ est une MUCE (Det $\mathbf{M}_1 = 1$), que la seconde colonne de $\mathbf{S}_1$ est égale à la seconde colonne de **S** et que $z_{31} = D(x_3,z_3) > 0$.

2ème étape. Le p.g.c.d. de y_{31} et z_{31} est en fait le p.g.c.d. des trois nombres x_3, y_3 et z_3 et nous pouvons écrire $y_{31} = y_{31}' D(x_3,y_3,z_3)$, $z_{31} = z_{31}' D(x_3,y_3,z_3)$ et $y_{31}' e_2 + z_{31}' f_2 = 1$, e_2 et f_2 étant deux entiers adéquats. Il s'en suit la multiplication matricielle $\mathbf{S}_2 = \mathbf{S}_1\mathbf{M}_2$:

$$\mathbf{S}_2 = \begin{vmatrix} x_{11} & y_{11} & z_{11} \\ x_{21} & y_{21} & z_{21} \\ 0 & y_{31} & z_{31} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & z_{31}' & e_2 \\ 0 & -y_{31}' & f_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_{12} & y_{12} & z_{12} \\ x_{22} & y_{22} & z_{22} \\ 0 & 0 & z_{32} \end{vmatrix}.$$

Nous constatons que $\mathbf{M}_2$ est une MUCE (Det $\mathbf{M}_2 = 1$), que la première colonne de $\mathbf{S}_2$ est égale à la première colonne de $\mathbf{S}_1$ et $z_{32} = D(x_3,y_3,z_3) > 0$.

3ème étape. Formons le p.g.c.d. de x_{22} et y_{22}: $x_{22} = x_{22}' D(x_{22},y_{22})$, $y_{22} = y_{22}' D(x_{22},y_{22})$ et $x_{22}' e_3 + y_{22}' f_3 = 1$. On aboutit au produit matriciel $\mathbf{S}_3 = \mathbf{S}_2\mathbf{M}_3$:

$$\mathbf{S}_3 = \begin{vmatrix} x_{12} & y_{12} & z_{12} \\ x_{22} & y_{22} & z_{22} \\ 0 & 0 & z_{32} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} y_{22}' & e_3 & 0 \\ -x_{22}' & f_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_{13} & y_{13} & z_{13} \\ 0 & y_{23} & z_{23} \\ 0 & 0 & z_{33} \end{vmatrix}.$$

La matrice $\mathbf{M}_3$ est une MUCE (Det $\mathbf{M}_3 = 1$), la troisième colonne de $\mathbf{S}_3$ est égale à la troisième colonne de $\mathbf{S}_2$ et $z_{33} = D(x_3,y_3,z_3)$. A l'issue de cette troisième étape, nous avons donc $\mathbf{S}_3 = \mathbf{SM}_1\mathbf{M}_2\mathbf{M}_3$, le produit $\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2\mathbf{M}_3$ étant bien une MUCE de déterminant égal à $+1$. Il en résulte que Det $\mathbf{S}$ = Det $\mathbf{S}_3 = x_{13}y_{23}z_{33} = \pm i$. Or y_{23} et z_{33} sont positifs par construction, donc x_{13} est positif si Det $\mathbf{S} = +i$ et x_{13} est négatif si Det $\mathbf{S} = -i$. Dans ce dernier cas, on multiplie à droite $\mathbf{S}_3$ par la MRBE **N** en remarquant que le produit $\mathbf{M}_1\mathbf{M}_2\mathbf{M}_3\mathbf{N}$ est une MUCE de déterminant égal à -1. On aboutit donc finalement à la matrice $|\mathbf{S}_3|$ qui est bien associée à gauche à la matrice **S**.

$$\mathbf{N} = \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}; \quad |\mathbf{S}_3| = \begin{vmatrix} |x_{13}| & y_{13} & z_{13} \\ 0 & y_{23} & z_{23} \\ 0 & 0 & z_{33} \end{vmatrix}.$$

Il existe donc bien au moins une maille élémentaire de γ définie par une matrice triangulaire du type $|\mathbf{S}_3|$. Pour faciliter la suite de l'exposé, nous remplacerons les symboles des coefficients de la matrice $|\mathbf{S}_3|$ par ceux plus simples de la matrice **T** (voir ci-après), $|\mathbf{S}_3|$ et **T** ayant la même signification.

Remarque. Nous avons supposé, lors de la triangulation, que les coefficients x_3,y_3,z_3 n'étaient pas nuls. Ce n'est pas toujours le cas mais au plus deux de ces coefficients sont nuls car la matrice **S** est régulière; si un ou deux de ces coefficients sont nuls, l'une au moins de deux premières étapes peut être éventuellement supprimée. De même l'un au plus des coefficients x_{22},y_{22} est nul et dans ce cas la troisième étape peut être éventuellement supprimée.

2ème partie. Supposons l'existence de deux mailles élémentaires du même sous-groupe γ définies par les MRCE triangulaires de passage **T** et $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$:

$$\mathbf{T} = \begin{vmatrix} p_1 & q_1 & r_1 \\ 0 & p_2 & q_2 \\ 0 & 0 & p_3 \end{vmatrix}, (p_j > 0);$$

* La 'méthode des pivots', encore connue sous le nom d'algorithme de Gauss ou de méthode d'élimination de Gauss, est classique en théorie des espaces vectoriels (Gantmacher, 1966). Elle a été ici adaptée aux modules.

† Rappelons que $D(x,0) = x$.

$$\mathbf{T}^{\mathrm{I}} = \begin{vmatrix} p_1^{\mathrm{I}} & q_1^{\mathrm{I}} & r_1^{\mathrm{I}} \\ 0 & p_2^{\mathrm{I}} & q_2^{\mathrm{I}} \\ 0 & 0 & p_3^{\mathrm{I}} \end{vmatrix}, (p_j^{\mathrm{I}} > 0).$$

Nous allons voir qu'il existe entre $\mathbf{T}$ et $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$ les relations suivantes: $p_j^{\mathrm{I}} = p_j$; $q_j^{\mathrm{I}} = q_j + \lambda_j p_j$; $r_j^{\mathrm{I}} = r_j + \mu_j p_j + \nu_j q_j$. Puisque $\mathbf{T}$ et $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$ définissent deux mailles élémentaires du même sous-groupe, ces deux matrices sont associées à gauche et l'on a $\mathbf{T}^{\mathrm{I}} = \mathbf{T}\Phi$, Φ étant une MUCE (Det $\Phi = 1$), soit

$$\begin{vmatrix} p_1^{\mathrm{I}} & q_1^{\mathrm{I}} & r_1^{\mathrm{I}} \\ 0 & p_2^{\mathrm{I}} & q_2^{\mathrm{I}} \\ 0 & 0 & p_3^{\mathrm{I}} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} p_1 & q_1 & r_1 \\ 0 & p_2 & q_2 \\ 0 & 0 & p_3 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{vmatrix}.$$

On en déduit: $0 = p_2\beta_1 + q_2\gamma_1$, $0 = p_3\gamma_1$ et $0 = p_3\gamma_2$ d'où $\beta_1 = \gamma_1 = \gamma_2 = 0$. Il s'en suit donc $p_1^{\mathrm{I}} = p_1\alpha_1$, $p_2^{\mathrm{I}} = p_2\beta_2$ et $p_3^{\mathrm{I}} = p_3\gamma_3$. Comme Det $\Phi = 1$ l'on a nécessairement $\alpha_1 = \pm 1$, $\beta_2 = \pm 1$, $\gamma_3 = \pm 1$, $\alpha_1\beta_2\gamma_3 = 1$. Or $p_j^{\mathrm{I}} > 0$, donc $\alpha_1 = \beta_2 = \gamma_3 = 1$, $p_j^{\mathrm{I}} = p_j$ et finalement $q_1^{\mathrm{I}} = q_1 + \alpha_2 p_1$, $q_2^{\mathrm{I}} = q_2 + \beta_3 p_2$ et $r_1^{\mathrm{I}} = r_1 + \alpha_3 p_1 + \beta_3 q_1$. Il existe donc une infinité de MRCE triangulaires conduisant à des mailles élémentaires du même sous-groupe γ; ces MRCE ne diffèrent de $\mathbf{T}$ que par le choix des coefficients entiers α_2, α_3, β_3 intervenant dans la multiplication de $\mathbf{T}$ par Φ. En particulier, on peut choisir indépendamment α_2 et β_3 de manière à avoir: $-p_1^{\mathrm{I}}/2 < q_1^{\mathrm{I}} \le p_1^{\mathrm{I}}/2$ et $-p_2^{\mathrm{I}}/2 < q_2^{\mathrm{I}} \le p_2^{\mathrm{I}}/2$ puis α_3, en fonction de β_3, de manière à avoir: $-p_1^{\mathrm{I}}/2 < r_1^{\mathrm{I}} \le p_1^{\mathrm{I}}/2$; ce choix est unique.

En conclusion, *le sous-groupe Γ admet une maille élémentaire* ($\mathbf{a}^{\mathrm{I}},\mathbf{b}^{\mathrm{I}},\mathbf{c}^{\mathrm{I}}$) *et une seule construite par la matrice de passage triangulaire* $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$ remplissant les conditions précédentes.

$$(\mathbf{a}^{\mathrm{I}},\mathbf{b}^{\mathrm{I}},\mathbf{c}^{\mathrm{I}}) = (\mathbf{A},\mathbf{B},\mathbf{C})\mathbf{T}^{\mathrm{I}}.$$

D'une façon plus générale, la 'méthode des pivots' permet d'obtenir six types de matrices de passage 'triangulaires' $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$ à $\mathbf{T}^{\mathrm{VI}}$ remplissant des conditions analogues. De ce point de vue, chaque sous-groupe γ possède six mailles élémentaires, chacune d'elles étant construite à partir de la maille (**A**,**B**,**C**) respectivement par une des matrices $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$, $\mathbf{T}^{\mathrm{II}}$, $\mathbf{T}^{\mathrm{III}}$, $\mathbf{T}^{\mathrm{IV}}$, $\mathbf{T}^{\mathrm{V}}$, $\mathbf{T}^{\mathrm{VI}}$.

$$\mathbf{T}^{\mathrm{I}} = \begin{vmatrix} p_1^{\mathrm{I}} & q_1^{\mathrm{I}} & r_1^{\mathrm{I}} \\ 0 & p_2^{\mathrm{I}} & q_2^{\mathrm{I}} \\ 0 & 0 & p_3^{\mathrm{I}} \end{vmatrix}; \quad \mathbf{T}^{\mathrm{II}} = \begin{vmatrix} p_3^{\mathrm{II}} & 0 & 0 \\ r_1^{\mathrm{II}} & p_1^{\mathrm{II}} & q_1^{\mathrm{II}} \\ q_2^{\mathrm{II}} & 0 & p_2^{\mathrm{II}} \end{vmatrix};$$

$$\mathbf{T}^{\mathrm{III}} = \begin{vmatrix} p_2^{\mathrm{III}} & q_2^{\mathrm{III}} & 0 \\ 0 & p_3^{\mathrm{III}} & 0 \\ q_1^{\mathrm{III}} & r_1^{\mathrm{III}} & p_1^{\mathrm{III}} \end{vmatrix}; \quad \mathbf{T}^{\mathrm{IV}} = \begin{vmatrix} p_1^{\mathrm{IV}} & r_1^{\mathrm{IV}} & q_1^{\mathrm{IV}} \\ 0 & p_3^{\mathrm{IV}} & 0 \\ 0 & q_2^{\mathrm{IV}} & p_2^{\mathrm{IV}} \end{vmatrix};$$

$$\mathbf{T}^{\mathrm{V}} = \begin{vmatrix} p_2^{\mathrm{V}} & 0 & q_2^{\mathrm{V}} \\ q_1^{\mathrm{V}} & p_1^{\mathrm{V}} & r_1^{\mathrm{V}} \\ 0 & 0 & p_3^{\mathrm{V}} \end{vmatrix}; \quad \mathbf{T}^{\mathrm{VI}} = \begin{vmatrix} p_3^{\mathrm{VI}} & 0 & 0 \\ q_2^{\mathrm{VI}} & p_2^{\mathrm{VI}} & 0 \\ r_1^{\mathrm{VI}} & q_1^{\mathrm{VI}} & p_1^{\mathrm{VI}} \end{vmatrix};$$

$$\left.\begin{aligned} &-p_1^t/2 < q_1^t \le p_1^t/2 \\ &-p_2^t/2 < q_2^t \le p_2^t/2 \\ &-p_1^t/2 < r_1^t \le p_1^t/2 \\ &(t = \mathrm{I, II, III, IV, V, VI}). \end{aligned}\right. \qquad (\mathrm{I})$$

On remarquera que pour chacune de ces six mailles élémentaires de γ, un vecteur est homothétique d'un des vecteurs de la maille (**A**,**B**,**C**) de Γ, un second vecteur est dans le plan défini par le premier et par un autre vecteur de la maille (**A**,**B**,**C**).*

Exemple. $\mathbf{a}^{\mathrm{V}} = p_2^{\mathrm{V}}\mathbf{A} + q_1^{\mathrm{V}}\mathbf{B}$, $\mathbf{b}^{\mathrm{V}} = p_1^{\mathrm{V}}\mathbf{B}$, $\mathbf{c}^{\mathrm{V}} = q_2^{\mathrm{V}}\mathbf{A} + r_1^{\mathrm{V}}\mathbf{B} + p_3^{\mathrm{V}}\mathbf{C}$.

Les six matrices qui relèvent d'un sous-groupe donné sont évidemment associées à gauche et les produits du type $(\mathbf{T}^t)^{-1}\mathbf{T}^{t'}$ sont des MUCE (t, t' = I, II, III, IV, V, VI): on peut passer d'une des six matrices à une autre par la 'méthode des pivots'.

Exemple. Les six mailles élémentaires suivantes appartiennent au même sous-groupe: I(60**A**, −24**A** + 21**B**, −8**A** − 7**B** + **C**); II(4**A** + 35**B** + **C**, 105**B**, −42**B** + 3**C**); III(12**A** + 3**C**, −4**A** + 7**B** − 4**C**, 15**C**); IV(60**A**, 8**A** + 7**B** − **C**, 12**A** + 3**C**); V(12**A** + 42**B**, 105**B**, 4**A** + 35**B** + **C**); VI(4**A** − 7**B** + 4**C**, 21**B** + 6**C**, 15**C**).

Pour certains sous-groupes, tel celui de l'exemple précédent, les six matrices sont toutes différentes. Mais pour d'autres sous-groupes, les matrices relevant de plusieurs types différents peuvent être confondues.†

Exemples. Les trois mailles élémentaires suivantes qui définissent le même sous-groupe relèvent chacune de deux types matriciels à la fois: I,IV(2**A**, **A** + **B**, **A** + **C**); II,V(**A** + **B**, 2**B**, **B** + **C**); III,VI(**A** + **C**, **B** + **C**, 2**C**). La maille élémentaire (3**A**,**B**,**C**) qui définit un autre sous-groupe relève des six types matriciels à la fois.

II. Dénombrement des sous-groupes

Puisque chaque sous-groupe admet une matrice de passage et une seule du type $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$, il suffit de dénombrer les différentes matrices de ce type.

* Quel que soit le sous-groupe considéré, p_1^{I}, p_1^{II}, p_1^{III} divisent chacun l'indice i. Il en résulte que les translations $i\mathbf{A}$, $i\mathbf{B}$, $i\mathbf{C}$ appartiennent à tout sous-groupe d'indice i. Il en résulte aussi que la translation de vecteur $i\mathbf{D}$ appartient à tout sous-groupe d'indice i dès que la translation **D** appartient à $\Gamma(P1)$.

† Dans le cas où l'indice i est premier, le nombre maximum de formes matricielles non confondues est trois. Quand l'indice est le carré d'un nombre premier ou le produit de deux nombres premiers ce nombre est de quatre, au maximum.

(1) *L'indice i est un nombre premier $\delta \neq 1$**

Nous avons la possibilité de distribuer le nombre i de trois façons le long de la diagonale de $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$.

(i) $p_1^{\mathrm{I}} = 1, p_2^{\mathrm{I}} = 1, p_3^{\mathrm{I}} = \delta$. Les nombres $q_1^{\mathrm{I}}, q_2^{\mathrm{I}}, r_1^{\mathrm{I}}$ ne peuvent prendre que la seule valeur 0 (*cf.* conditions I): il existe donc un seul sous-groupe pour cette distribution.

(ii) $p_1^{\mathrm{I}} = 1,\ p_2^{\mathrm{I}} = \delta,\ p_3^{\mathrm{I}} = 1$. Les nombres $q_1^{\mathrm{I}}, r_1^{\mathrm{I}}$ ne peuvent qu'être nuls; le nombre q_2^{I} prend δ valeurs (*cf.* conditions I): cela fait donc δ sous-groupes différents pour cette distribution.

(iii) $p_1^{\mathrm{I}} = \delta, p_2^{\mathrm{I}} = 1, p_3^{\mathrm{I}} = 1$. Le nombre q_2^{I} est nul et chacun des nombres $q_1^{\mathrm{I}}, r_1^{\mathrm{I}}$ peut prendre δ valeurs: ce qui fait donc δ^2 sous-groupes distincts.

Il existe donc $\delta^2 + \delta + 1 = (\delta^3 - 1)/(\delta - 1)$ sous-groupes d'indice premier δ. Il faut remarquer que ces sous-groupes sont maximums, qu'il en existe pour chaque nombre premier δ et que ce sont les seuls sous-groupes maximums. En effet toute MRCE est diagonalisable, c'est-à-dire, est équivalente modulo $\mathscr{R}$, à une MAOG de même déterminant; toute MAOG de déterminant non premier est décomposable en un produit fini de MAOG de déterminant premier et correspond donc à une chaîne de sous-groupes maximums.†

(2) *L'indice i est une puissance d'un nombre premier*

L'indice valant δ^l ($\delta \neq 1$, $l \neq 0$), il existe plusieurs façons de distribuer les puissances de δ le long de la diagonale de $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$. Supposons l'une d'elles où $p_1^{\mathrm{I}} = \delta^j$, $p_2^{\mathrm{I}} = \delta^{k-j}$, $p_3^{\mathrm{I}} = \delta^{l-k}$ avec $0 \le j \le k$ et $0 \le k \le l$. Comme q_1^{I} et r_1^{I} peuvent prendre chacun δ^j valeurs et comme q_2^{I} peut prendre δ^{k-j} valeurs, le nombre de sous-groupes afférant à cette distribution est égal à $\delta^{2j}\,\delta^{k-j} = \delta^{j+k}$. Pour toutes les distributions où p_3^{I} est égal à δ^{l-k}, le nombre de sous-groupes différents est:

$$\sum_{j=0}^{k} \delta^{j+k} = \delta^k \sum_{j=0}^{k} \delta^j = \delta^k(\delta^{k+1} - 1)/(\delta - 1).$$

Et enfin pour toutes les distributions différentes, le nombre de sous-groupes différents est:

$$\sum_{k=0}^{l} \delta^k(\delta^{k+1} - 1)/(\delta - 1) = \frac{1}{\delta - 1}\left[\sum_{k=0}^{l} \delta^{2k+1} - \sum_{k=0}^{l} \delta^k\right]$$

$$= \frac{1}{\delta - 1}\left[\delta \sum_{k=0}^{l} \delta^{2k} - \sum_{k=0}^{l} \delta^k\right]$$

$$= \frac{1}{\delta - 1}\left[\delta \frac{\delta^{2l+2} - 1}{\delta^2 - 1} - \frac{\delta^{l+1} - 1}{\delta - 1}\right]$$

$$= \frac{1}{(\delta - 1)^2}\left[1 - \delta^{l+1} + \frac{\delta}{\delta + 1}(\delta^{2l+2} - 1)\right].$$

(3) *L'indice i est le produit de puissances de deux nombres premiers différents*

Soit $i = \delta_1^{l_1}\delta_2^{l_2}$ cet indice. Parmi les différentes façons de distribuer les facteurs premiers le long de la diagonale de $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$, considérons l'une d'elles où $p_1^{\mathrm{I}} = \delta_1^{j_1}\delta_2^{j_2}$, $p_2^{\mathrm{I}} = \delta_1^{k_1-j_1}\,\delta_2^{k_2-j_2}$, $p_3^{\mathrm{I}} = \delta_1^{l_1-k_1}\,\delta_2^{l_2-k_2}$. Le nombre de sous-groupes qui relèvent de cette distribution est égal à:

$$(\delta_1^{2j_1}\,\delta_2^{2j_2})(\delta_1^{k_1-j_1}\,\delta_2^{k_2-j_2}) = \delta_1^{j_1+k_1}\,\delta_2^{j_2+k_2}.$$

Considérons maintenant toutes les distributions où p_3^{I} garde la valeur précédente, p_1^{I} et p_2^{I} peuvent prendre diverses valeurs dépendant de j_1 et j_2: lorsque j_1 conserve une valeur donnée, j_2 peut prendre toutes les valeurs comprises entre 0 et k_2 et le nombre de sous-groupes correspondants est donc:

$$\sum_{j_2=0}^{k_2} \delta_1^{j_1+k_1}\,\delta_2^{j_2+k_2} = \delta_1^{j_1+k_1} \sum_{j_2=0}^{k_2} \delta_2^{j_2+k_2}$$

$$= \delta_1^{j_1+k_1}\,\delta_2^{k_2}\,\frac{\delta_2^{k_2+1} - 1}{\delta_2 - 1}.$$

Tableau 2. *Nombre de sous-groupes* (N) *de* $\Gamma(P1)$ *en fonction de l'indice* (i)

i	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
N	7	13	35	31	91	57	155	130	217	133

i	12	13	14	15	16	17	18	19	20
N	455	183	399	403	651	307	910	381	1085

i	21	22	23	24	25	26	27	28
N	741	931	553	2015	806	1281	1210	1995

i	29	30
N	871	2821

Tableau 3. *Nombre de sous-groupes* (N) *de* $\Gamma(p1)$ *en fonction de l'indice* (i)

i	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
N	3	4	7	6	12	8	15	26	18	12	28	14

i	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
N	24	24	31	18	78	20	42	32	36	24	60

i	25	26	27	28	29	30
N	124	42	80	56	30	72

* Comme on l'a vu dans une note précédente, les translations de vecteurs $\mathbf{a}' = i\mathbf{A}$, $\mathbf{b}' = i\mathbf{B}$, $\mathbf{c}' = i\mathbf{C}$ appartiennent à tout sous-groupe γ d'indice i de Γ. Il en résulte que Γ et γ admettent tous deux comme sous-groupe d'indice respectif i^3 et i^2 le groupe γ' de maille élémentaire ($\mathbf{a}',\mathbf{b}',\mathbf{c}'$). Comme γ' est évidemment invariant dans Γ il est dès lors possible de remplacer Γ et γ par leurs quotients Γ/γ' et γ/γ' d'ordre respectif i^3 et i^2 tout en conservant par homomorphisme le nombre des sous-groupes d'indice i. Lorsque i est un nombre premier δ, un théorème de dénombrement des sous-groupes de Sylow donne directement le nombre de sous-groupes d'indice δ, à savoir, $(\delta^3 - 1)/(\delta - 1)$, ce qui est tout à fait conforme à notre dénombrement (Carmichael, 1956).

† D'une façon plus générale, ces propriétés s'étendent aux sous-modules isomorphes du module $\mathbb{Z}^n$ (on peut dire, en langage cristallographique, aux réseaux dérivés de même dimension d'un réseau de translations de dimension n): le nombre de sous-modules isomorphes d'indice premier δ est $(\delta^n - 1)/(\delta - 1)$, les sous-modules d'indice premier sont maximums, ce sont les seuls.

Or j_1 peut prendre toutes les valeurs comprises entre 0 et k_1. Le nombre de sous-groupes pour une valeur déterminée de p_3^1 est donc donné par l'expression:

$$\sum_{j_1=0}^{k_1}\sum_{j_2=0}^{k_2}\delta_1^{j_1+k_1}\delta_2^{j_2+k_2}=\sum_{j_1=0}^{k_1}\delta_1^{j_1+k_1}\delta_2^{k_2}\frac{\delta_2^{k_2+1}-1}{\delta_2-1}$$

$$=\delta_1^{k_1}\frac{\delta_1^{k_1+1}-1}{\delta_1-1}\delta_2^{k_2}\frac{\delta_2^{k_2+1}-1}{\delta_2-1}.$$

Donner à p_3^1 toutes les valeurs possibles, c'est faire varier k_1 et k_2. Pour toutes les valeurs de p_3^1 le nombre de sous-groupes est donc:

$$\sum_{k_1=0}^{l_1}\sum_{k_2=0}^{l_2}\delta_1^{k_1}\frac{\delta_1^{k_1+1}-1}{\delta_1-1}\delta_2^{k_2}\frac{\delta_2^{k_2+1}-1}{\delta_2-1}$$

$$=\sum_{k_1=0}^{l_1}\left[\delta_1^{k_1}\frac{\delta_1^{k_1+1}-1}{\delta_1-1}\left(\sum_{k_2=0}^{l_2}\delta_2^{k_2}\frac{\delta_2^{k_2+1}-1}{\delta_2-1}\right)\right]$$

$$=\left[\sum_{k_1=0}^{l_1}\delta_1^{k_1}\frac{\delta_1^{k_1+1}-1}{\delta_1-1}\right]\left[\sum_{k_2=0}^{l_2}\delta_2^{k_2}\frac{\delta_2^{k_2+1}-1}{\delta_2-1}\right]$$

$$=\prod_{p=1}^{2}\sum_{k_p=0}^{l_p}\delta_p^{k_p}\frac{\delta_l^{k_p+1}-1}{\delta_p-1}.$$

(4) *L'indice i est quelconque*

L'indice est donc un produit quelconque de puissances de nombres premiers quelconques: $i=\delta_1^{l_1}\delta_2^{l_2}\ldots.\delta_m^{l_m}$; $\delta_1,\ldots\delta_m$ étant des nombres premiers différents à des puissances $l_1,\ldots l_m$. Par une généralisation immédiate du (3), le nombre de sous-groupes différents est donné par:

$$\prod_{p=1}^{m}\sum_{k_p=0}^{l_p}\delta_p^{k_p}\frac{\delta_p^{k_p+1}-1}{\delta_p-1}\tag{II}$$

ou par [*cf.* (2)]

$$\prod_{p=1}^{m}\frac{1}{(\delta_p-1)^2}\left[1-\delta_p^{l_p+1}+\frac{\delta_p}{\delta_p+1}(\delta_p^{2l_p+2}-1)\right].\tag{III}$$

Remarques. La formule (II) peut être aisément programmée pour un calcul sur ordinateur. La formule (III) est plus adaptée aux calculs manuels. Ces formules peuvent être généralisées aux sous-modules isomorphes de n'importe quel module $\mathbb{Z}^n$. Dans le cas de $\Gamma(p1)$, le nombre de sous-groupes isomorphes est donné par:

$$\prod_{p=1}^{m}(\delta_p^{l_p+1}-1)/(\delta_p-1).$$

Tableau 4. *Sous-groupes isomorphes de $\Gamma(P1)$ pour tous les indices compris entre* 2 *et* 7

Indice 2

[1(2A,B,C); 2(A,2B,C); 3(A,B,2C)]; [4(2A, B + A, C)(A + B, 2B, C); 5(2A, B, C + A)(A + C, B, 2C); 6(A, 2B, C + B)(A, B + C, 2C)]; [7(2A, B + A, C + A)(A + B, 2B, C + B)(A + C, B + C, 2C)].

Indice 3

[1(3A,B,C); 2(A,3B,C); 3(A,B,3C)]; [4(3A, B + A, C)(A + B, 3B,C); 5(3A, B, C + A)(A + C, B, 3C); 6(A, 3B, C + B)(A, B + C, 3C)]; [7(3A, B − A, C)(A − B, 3B, C); 8(3A, B, C − A)(A − C, B, 3C); 9(A, 3B, C − B)(A, B − C, 3C)]; [10(3A, B + A, C + A)(A + B, 3B, C − B)(A + C, B − C, 3C); 11(3A, B + A, C − A)(A + B, 3B, C + B)(A − C, B + C, 3C); 12(3A, B − A, C + A)(A − B, 3B, C + B)(A + C, B + C, 3C)]; [13(3A, B − A, C − A)(A − B, 3B, C − B)(A − C, B − C, 3C)].

Indice 4

[1(4A,B,C); 2(A,4B,C); 3(A,B,4C)]; [4(4A, B + A, C)(A + B, 4B, C); 5(4A, B, C + A)(A + C, B, 4C); 6(A, 4B, C + B)(A, B + C, 4C)]; [7(4A, B − A, C)(A − B, 4B, C); 8(4A, B, C − A)(A − C, B, 4C); 9(A, 4B, C − B)(A, B − C, 4C)]; [10(4A, B + 2A, C)(2A + B, 2B, C); 11(4A, B, C + 2A)(2A + C, B, 2C); 12(A + 2B, 4B, C)(2A, 2B + A, C); 13(A, 4B, C + 2B)(A, 2B + C, 2C); 14(A + 2C, B, 4C)(2A, B, 2C + A); 15(A, B + 2C, 4C)(A, 2B, 2C + B)]; [16(4A, B + A, C + A)(A + B, 4B, C − B)(A + C, B − C, 4C); 17(4A, B + A, C − A)(A + B, 4B, B + C)(A − C, B + C, 4C); 18(4A, B − A, C + A)(A − B, 4B, C + B)(A + C, B + C, 4C)]; [19(4A, B − A, C − A)(A − B, 4B, C − B)(A − C, B − C, 4C)]; [20(4A, B + A, C + 2A)(A + B, 4B, C + 2B)(2A + C, B + A, 2C) (A + B, 2B + C, 2C); 21(4A, B + 2A, C + A)(A + C, B + 2C, 4C)(2A + B, 2B, C + A)(A + C, 2B, 2C + B); 22(A + 2B, 4B, C + B)(A + 2C, B + C, 4C)(2A, 2B + A, C + B)(2A, B + C, 2C + A)]; [23(4A, B − A, C + 2A)(A − B, 4B, C + 2B)(2A + C, B + A + C, 2C)(A + B + C, 2B + C, 2C); 24(4A, B + 2A, C − A)(A − C, B + 2C, 4C)(2A + B, 2B, C + A + B)(A + B + C, 2B, 2C + B); 25(A + 2B, 4B, C − B)(A + 2C, B − C, 4C)(2A, 2B, + A, C + A + B)(2A, B + A + C, 2C + A)]; [26(4A, B + 2A, C + 2A)(2A + B, 2B, C + B)(2A + C, B + C, 2C); 27(A + 2B, 4B,C + 2B)(2A, 2B + A, C + A)(A + C, 2B + C, 2C); 28(A + 2C, B + 2C, 4C)(2A, B + A, 2C + A)(A + B, 2B, 2C + B)]; [29(2A, 2B, C); 30(2A, B, 2C); 31(A, 2B, 2C)]; [32(2A, 2B, C + A)(A + C, 2B, 2C); 33(2A, 2B, C + B)(2A, B + C, 2C); 34(2A, B + A, 2C)(A + B, 2B, 2C)]; [35(2A, 2B, C + A + B)(2A, B + A + C, 2C)(A + B + C, 2B, 2C)].

Indice 5

[1(5A,B,C); 2(A,5B,C); 3(A,B,5C)]; [4(5A, B + A, C)(A + B, 5B, C); 5(5A, B, C + A)(A + C, B, 5C); 6(A, 5B, C + B)(A, B + C, 5C)]; [7(5A, B − A, C)(A − B, 5B, C); 8(5A, B, C − A)(A − C, B, 5C); 9(A, 5B, C − B)(A, B − C, 5C)]; [10(5A, B + 2A, C)(A − 2B, 5B, C); 11(5A, B, C − 2A)(A + 2C, B, 5C); 12(A, 5B, C + 2B)(A, B − 2C, 5C); 13(5A, B − 2A, C)(A + 2B, 5B, C); 14(5A, B, C + 2A)(A − 2C, B, 5C); 15(A, 5B, C − 2B)(A, B + 2C, 5C)]; [16(5A, B + A, C + A)(A + B, 5B, C − B)(A + C, B − C, 5C); 17(5A, B + A, C − A)(A + B, 5B, C + B)(A − C, B + C, 5C); 18(5A, B − A, C + A)(A − B, 5B, C + B)(A + C, B + C, 5C)]; [19(5A, B − A, C − A)(A − B, 5B, C − B)(A − C, B − C, 5C)]; [20(5A, B + A, C + 2A)(A + B, 5B, C − 2B)(A − 2C, B + 2C, 5C); 21(5A, B + A, C − 2A)(A + B, 5B, C + 2B)(A + 2C, B − 2C, 5C); 22(5A, B + 2A, C + A)(A − 2B, 5B, C + 2B)(A + C, B − 2C, 5C); 23(5A, B − 2A, C + A)(A + 2B, 5B, C − 2B)(A + C, B + 2C, 5C); 24(5A, B + 2A, C − 2A)(A − 2B, 5B, C + B)(A + 2C, B + C, 5C); 25(5A, B − 2A, C + 2A)(A + 2B, 5B, C + B)(A − 2C, B + C, 5C)]; [26(5A, B + 2A, C + 2A)(A + 2B, 5B, C − B)(A − 2C, B − C, 5C); 27(5A, B − 2A, C − A)(A + 2B, 5B, C + 2B)(A − C, B − 2C, 5C); 28(5A, B − A, C − 2A)(A − B, 5B, C − 2B)(A + 2C, B + 2C, 5C)]; [29(5A, B − 2A, C − 2A)(A + 2B, 5B, C − B)(A + 2C, B − C, 5C); 30(5A, B + 2A, C − A)(A − 2B, 5B, C − 2B)(A − C, B + 2C, 5C); 31(5A, B − A, C + 2A)(A − B, 5B, C + 2B)(A − 2C, B − 2C, 5C)]

Tableau 4 (*suite*)

Indice 6
[1(6A,B,C); 2(A.6B,C); 3(A,B,6C)]; [4(6A, B + A, C)(A + B, 6B, C); 5(6A, B, C + A)(A + C, B, 6C); 6(A, 6B, C + B)(A, B + C, 6C)]; [7(6A, B − A, C)(A − B, 6B, C); 8(6A, B, C − A)(A − C, B, 6C); 9(A, 6B, C − B)(A, B − C, 6C)]; [10(6A, B + 2A, C)(2A + B, 3B, C); 11(6A, B, C + 2A)(2A + C, B, 3C); 12(A, 6B, C + 2B)(A, 2B + C, 3C); 13(A + 2B, 6B, C)(3A, 2B + A, C); 14(A, B + 2C, 6C)(A, 3B, 2C + B); 15(A + 2C, B, 6C)(3A, B, 2C + A)]; [16(6A, B − 2A, C)(2A − B, 3B, C); 17(6A, B, C − 2A)(2A − C, B, 3C); 18(A, 6B, C − 2B)(A, 2B − C, 3C); 19(A − 2B, 6B, C)(3A, 2B − A, C); 20(A, B − 2C, 6C)(A, 3B, 2C − B); 21(A − 2C, B, 6C)(3A, B, 2C − A)]; [22(6A, B + 3A, C)(3A + B, 2B, C); 23(6A, B, C + 3A)(3A + C, B, 2C); 24(A, 6B, C + 3B)(A, 3B + C, 2C); 25(A + 3B, 6B, C)(2A, 3B + A, C); 26(A, B + 3C, 6C)(A, 2B, 3C + B); 27(A + 3C, B, 6C)(2A, B, 3C + A)]; [28(6A, B + A, C + A)(A + B, 6B, C − B)(A + C, B − C, 6C); 29(6A, B + A, C − A)(A + B, 6B, C + B)(A − C, B + C, 6C); 30(6A, B − A, C + A)(A − B, 6B, C + B)(A + C, B + C, 6C)]; [31(6A, B − A, C − A)(A − B, 6B, C − B)(A − C, B − C, 6C)]; [32(6A, B + A, C + 2A)(A + B, 6B, C − 2B)(2A + C, B + A, 3C)(A + B, 2B − C, 3C); 33(6A, B + A, C − 2A)(A + B, 6B, C + 2B)(2A − C, B + A, 3C)(A + B, 2B + C, 3C); 34(A + 2B, 6B, C + B)(A − 2C, B + C, 6C)(3A, 2B + A, C + B)(3A, B + C, 2C − A); 35(A − 2B, 6B, C + B)(A + 2C, B + C, 6C)(3A, 2B − A, C + B)(3A, B + C, 2C + A); 36(6A, B + 2A, C + A)(A + C, B − 2C, 6C)(2A + B, 3B, C + A)(A + C, 3B, 2C − B); 37(6A, B − 2A, C + A)(A + C, B + 2C, 6C)(2A − B, 3B, C + A)(A + C, 3B, 2C + B)]; [38(6A, B − A, C + 2A)(A − B, 6B, C + 2B)(2A + C, B + A + C, 3C)(A + B + C, 2B + C, 3C); 39(6A, B + 2A, C − A)(A − C, B + 2C, 6C)(2A + B, 3B, C + A + B)(A + B + C, 3B, 2C + B); 40(A + 2B, 6B, C − B)(A + 2C, B − C, 6C)(3A, 2B + A, C + A + B)(3A, B + A + C, 2C + A)]; [41(6A, B − A, C − 2A)(A − B, 6B, C − 2B)(2A − C, B + A − C, 3C)(A + B − C, 2B − C, 3C); 42(6A, B − 2A, C − A)(A − C, B − 2C, 6C)(2A − B, 3B, C + A − B)(A − B + C, 3B, 2C − B); 43(A − 2B, 6B, C − B)(A − 2C, B − C, 6C)(3A, 2B − A, C − A + B)(3A, B − A + C, 2C − A)]; [44(6A, B + A, C + 3A)(A + B, 6B, C + 3B)(3A + C, B + A, 2C)(A + B, 3B + C, 2C); 45(6A, B + 3A, C + A)(A + C, B + 3C, 6C)(3A + B, 2B, C + A)(A + C, 2B, 3C + B); 46(A + 3B, 6B, C + B)(A + 3C, B + C, 6C)(2A, 3B + A, C + B)(2A, B + C, 3C + A)]; [47(6A, B − A, C + 3A)(A − B, 6B, C + 3B)(3A + C, B − A, 2C)(A − B, 3B + C, 2C); 48(6A, B + 3A, C − A)(A − C, B + 3C, 6C)(3A + B, 2B, C − A)(A − C, 2B, 3C + B); 49(A + 3B, 6B, C − B)(A + 3C, B − C, 6C)(2A, 3B + A, C − B)(2A, B − C, 3C + A)]; [50(6A, B + 2A, C + 2A)(2A + B, 3B, C − B)(2A + C, B − C, 3C); 51(A + 2B, 6B, C + 2B)(3A, 2B + A, C − A)(A − C, 2B + C, 3C); 52(A + 2C, B + 2C, 6C)(3A, B − A, 2C + A)(A − B, 3B, 2C + B)]; [53(6A, B − 2A, C − 2A)(2A − B, 3B, C − B)(2A − C, B − C, 3C); 54(A − 2B, 6B, C − 2B)(3A, 2B − A, C − A)(A − C, 2B − C, 3C); 55(A − 2C, B − 2C, 6C)(3A, B − A, 2C − A)(A − B, 3B, 2C − B)]; [56(6A, B + 2A, C − 2A)(2A + B, 3B, C + B)(2A − C, B + C, 3C); 57(A − 2B, 6B, C + 2B)(3A, 2B − A, C + A)(A + C, 2B + C, 3C); 58(A + 2C, B − 2C, 6C)(3A, B + A, 2C + A)(A + B, 3B, 2C − B); 59(6A, B − 2A, C + 2A)(2A − B, 3B, C + B)(2A + C, B + C, 3C); 60(A + 2B, 6B, C − 2B)(3A, 2B + A, C + A)(A + C, 2B − C, 3C); 61(A − 2C, B + 2C, 6C)(3A, B + A, 2C − A)(A + B, 3B, 2C + B)]; [62(6A, B + 2A, C + 3A)(3A + C, B − A + C, 2C)(2A + B, 3B, C + A − B)(A − B + C, 3B, 2C); 63(A + 3B, 6B, C + 2B)(2A, 3B + A, C + A − B)(2A, B + A − C, 3C)(A + B − C, 2B + C, 3C); 64(A + 2C, B + 3C, 6C)(3A, 2B, C − A + B)(3A, B − A + C, 2C + A)(A + B − C, 2B, 3C + B); 65(6A, B + 3A, C + 2A)(3A + B, 2B, C − A + B)(2A + C, B + A − C, 3C)(A + B − C, 2B, 3C); 66(A + 2B, 6B, C + 3B)(3A, 2B + A, C − A + B)(3A, B − A + C, 2C)(A − B + C, 3B + C, 2C); 67(A + 3C, B + 2C, 6C)(2A, 3B, C + A − B)(2A, B + A − C, 3C + A)(A − B + C, 3B, 2C + B)]; [68(6A, B − 2A, C + 3A)(3A + C, B + A + C, 2C)(2A − B, 3B, C + A + B)(A + B + C, 3B, 2C); 69(A + 3B, 6B, C − 2B)(2A, 3B + A, C + B + A)(2A, B + A + C, 3C)(A + B + C, 2B − C, 3C); 70(A − 2C, B + 3C, 6C)(3A, 2B, C + A + B)(3A, B + A + C, 2C − A)(A + B + C, 2B, 3C + B); 71(6A, B + 3A, C − 2A)(3A + B, 2B, C + A + B)(2A − C, B + A + C, 3C)(A + B + C, 2B, 3C); 72(A − 2B, 6B, C + 3B)(3A, 2B − A, C + A + B)(3A, B + A + C, 2C)(A + B + C, 3B + C, 2C); 73(A + 3C, B − 2C, 6C)(2A, 3B, C + A + B)(2A, B + A + C, 3C + A)(A + B + C, 3B, 2C − B)]; [74(6A, B + 3A, C + 3A)(3A + B, 2B, C + B)(3A + C, B + C, 2C); 75(A + 3B, 6B, C + 3B)(2A, 3B + A, C + A)(A + C, 3B + C, 2C); 76(A + 3C, B + 3C, 6C)(2A, B + A, 3C + A)(A + B, 2B, 3C + B)]; [77(3A, 2B, C); 78(3A, B, 2C); 79(2A, 3B, C); 80(2A, B, 3C); 81(A, 3B, 2C); 82(A, 2B, 3C); 83(3A, 2B, C + A)(A + C, 2B, 3C); 84(3A, B + A, 2C)(A + B, 3B, 2C); 85(2A, 3B, C + B)(2A, B + C, 3C)]; [86(3A, 2B, C − A)(A − C, 2B, 3C); 87(3A, B − A, 2C)(A − B, 3B, 2C): 88(2A, 3B, C − B)(2A, B − C, 3C)]; [89(3A, 2B, C + B)(3A, B + C, 2C); 90(2A, 3B, C + A)-(A + C, 3B, 2C); 91(2A, B + A, 3C)(A + B, 2B, 3C)].

Indice 7
[1(7A,B,C); 2(A,7B,C); 3(A,B,7C)]; [4(7A, B + A, C)(A + B, 7B, C); 5(7A, B, C + A)(A + C, B, 7C); 6(A, 7B, C + B)(A, B + C, 7C)]; [7(7A, B − A, C)(A − B, 7B, C); 8(7A, B, C − A)(A − C, B, 7C); 9(A, 7B, C − B)(A, B − C, 7C)]; [10(7A, B + 2A, C)(A − 3B, 7B, C); 11(7A, B, C − 3A)(A + 2C, B, 7C); 12(A, 7B, C + 2B)(A, B − 3C, 7C); 13(7A, B − 3A, C)(A + 2B, 7B, C); 14(7A, B, C + 2A)(A, B − 3C, 7C); 15(A, 7B, C − 3B)(A, B + 2C, 7C)]; [16(7A, B − 2A, C)(A + 3B, 7B, C); 17(7A, B, C + 3A)(A − 2C, B, 7C); 18(A, 7B, C − 2B)(A, B + 3C, 7C); 19(7A, B + 3A, C)(A − 2B, 7B, C); 20(7A, B, C − 2A)(A + 3C, B, 7C); 21(A, 7B, C + 3B)(A, B − 2C, 7C)]; [22(7A, B + A, C + A)(A + B, 7B, C − B)(A + C, B − C, 7C); 23(7A, B + A, C − A)(A + B, 7B, C + B)(A − C, B + C, 7C); 24(7A, B − A, C + A)(A − B, 7B, C + B) (A + C, B + C, 7C)]; [25(7A, B − A, C − A)(A − B, 7B, C − B) (A − C, B − C, 7C)]; [26(7A, B + A, C + 2A) (A + B, 7B, C − 2B)(A − 3C, B + 3C, 7C); 27(7A, B + A, C − 2A)(A + B, 7B, C + 2B)(A + 3C, B − 3C, 7C); 28(7A, B + 2A, C + A)(A − 3B, 7B, C + 3B)(A + C, B − 2C, 7C); 29(7A, B − 2A, C + A)(A + 3B, 7B, C − 3B)(A + C, B + 2C, 7C); 30(7A, B + 3A, C − 3A)(A − 2B, 7B, C + B)(A + 2C, B + C, 7C); 31(7A, B − 3A, C + 3A)(A + 2B, 7B, C + B)(A − 2C, B + C, 7C)]; [32(7A, B + A, C + 3A)(A + B, 7B, C − 3B)(A − 2C, B + 2C, 7C); 33(7A, B + A, C − 3A)(A + B, 7B, C + 3B)(A + 2C, B − 2C, 7C); 34(7A, B + 3A, C + A)(A − 2B, 7B, C + 2B)(A + C, B − 3C, 7C); 35(7A, B − 3A, C + A)(A + 2B, 7B, C − 2B)(A + C, B + 3C, 7C); 36(7A, B + 2A, C − 2A)(A − 3B, 7B, C + B)(A + 3C, B + C, 7C); 37(7A, B − 2A, C + 2A)(A + 3B, 7B, C + B)(A − 3C, B + C, 7C)]; [38(7A, B + 2A, C + 2A)(A − 3B, 7B, C − B) (A − 3C, B − C, 7C); 39(7A, B − 3A, C − A)(A + 2B, 7B, C + 2B)(A − C, B − 3C, 7C); 40(7A, B − A, C − 3A)(A − B, 7B, C − 3B)(A + 2C, B + 2C, 7C)]; [41(7A, B − 2A, C − 2A)(A + 3B, 7B, C − B) (A + 3C, B − C, 7C); 42(7A, B + 3A, C − A)(A − 2B, 7B, C − 2B)(A − C, B + 3C, 7C); 43(7A, B − A, C + 3A)(A − B, 7B, C + 3B)(A − 2C, B − 2C, 7C)]; [44(7A, B + 2A, C + 3A)(A − 3B, 7B, C + 2B)(A − 2C, B − 3C, 7C); 45(7A, B + 3A, C + 2A)(A − 2B, 7B, C − 3B)(A − 3C, B + 2C, 7C); 46(7A, B − 2A, C − 3A) (A + 3B, 7B, C + 2B) (A + 2C, B − 3C, 7C); 47(7A, B − 3A, C + 2A)(A + 2B, 7B, C + 3B)(A − 3C, B − 2C, 7C); 48(7A, B + 2A, C − 3A)(A − 3B, 7B, C − 2B)(A + 2C, B + 3C, 7C); 49(7A, B − 3A, C − 2A)(A + 2B, 7B, C − 3B) (A + 3C, B + 2C, 7C)]; [50(7A, B − 2A, C + 3A)(A + 3B, 7B, C − 2B)(A − 2C, B + 3C, 7C); 51(7A, B + 3A, C − 2A)(A − 2B, 7B, C + 3B)(A + 3C, B − 2C, 7C)]; [52(7A, B + 3A, C + 3A) (A − 2B, 7B, C − B)(A − 2C, B − C, 7C); 53(7A, B − 2A, C − A)(A + 3B, 7B, C + 3B)(A − C, B − 2C, 7C); 54(7A, B − A, C − 2A)(A − B, 7B, C − 2B)(A + 3C, B + 3C, 7C)]; [55(7A, B − 3A, C − 3A) (A + 2B, 7B, C − B)(A + 2C, B − C, 7C); 56(7A, B + 2A, C − A)(A − 3B, 7B, C − 3B)(A − C, B + 2C, 7C); 57(7A, B − A, C + 2A) (A − B, 7B, C + 2B)(A − 3C, B − 3C, 7C)].

Ces différentes formules nous ont permis de dénombrer les sous-groupes isomorphes de $\Gamma(P1)$ et $\Gamma(p1)$ pour tous les indices comprise entre 2 et 30 (Tableaux 2 et 3).

III. Liste de sous-groupes

Dans le Tableau 4 figurent les sous-groupes isomorphes de $\Gamma(P1)$ pour tous les indices compris entre 2 et 7. Chaque sous-groupe est identifié par un numéro suivi (entre parenthèses) par les mailles, éventuellement confondues, qui correspondent aux matrices de passage $\mathbf{T}^{\mathrm{I}}$ à $\mathbf{T}^{\mathrm{VI}}$; ces mailles élémentaires sont exprimées en fonction de la maille élémentaire (**A**,**B**,**C**) de $\Gamma(P1)$. Les sous-groupes dont les mailles élémentaires présentent des analogies (échange des rôles des vecteurs **A**, **B**, **C**) ont été regroupés entre crochets. Pour chacun des indices 2, 3, 5, 6, 7, les sous-groupes sont équivalents par les automorphismes de $\Gamma(P1)$ et ne forment donc qu'une seule classe. Pour l'indice 4, les 28 premiers sous-groupes forment une classe d'équivalence, les 7 derniers une autre classe (Billiet. 1979). D'une manière analogue, le Tableau 5 donne les sous-groupes isomorphes de $\Gamma(p1)$ pour tous les indices compris entre 2 et 7. Les sous-groupes ne forment qu'une seule classe par rapport aux automorphismes de $\Gamma(p1)$ pour chacun des indices 2, 3, 5, 6, 7. Pour l'indice 4, les 6 premiers sous-groupes forment une classe, le dernier sous-groupe forme une seconde classe à lui seul.

Tableau 5. *Sous-groupes isomorphes de $\Gamma(p1)$ pour tous les indices compris entre* 2 *et* 7

Indice 2
[1(2**A**,**B**); 2(**A**,2**B**)]; [3(2**A**, **B** + **A**)(**A** + **B**, 2**B**)].

Indice 3
[1(3**A**,**B**); 2(**A**,3**B**)]; [3(3**A**, **B** + **A**)(**A** + **B**, 3**B**)]; [4(3**A**, **B** − **A**)(**A** − **B**, 3**B**)].

Indice 4
[1(4**A**,**B**); 2(**A**,4**B**)]; [3(4**A**, **B** + **A**)(**A** + **B**, 4**B**)]; [4(4**A**, **B** − **A**)(**A** − **B**, 4**B**)]; [5(4**A**, **B** + 2**A**)(2**A** + **B**, 2**B**); 6(**A** + 2**B**, 4**B**)(2**A**, 2**B** + **A**)]; [7(2**A**, 2**B**)].

Indice 5
[1(5**A**,**B**); 2(**A**,5**B**)]; [3(5**A**, **B** + **A**)(**A** + **B**, 5**B**)]; [4(5**A**, **B** − **A**)(**A** − **B**, 5**B**)]; [5(5**A**, **B** + 2**A**)(**A** − 2**B**, 5**B**); 6(5**A**, **B** − 2**A**)(**A** + 2**B**, 5**B**)].

Indice 6
[1(6**A**, **B**); 2(**A**,6**B**)]; 3(6**A**, **B** + **A**)(**A** + **B**, 6**B**)]; [4(6**A**, **B** − **A**)(**A** − **B**, 6**B**)]; [5(6**A**, **B** + 2**A**)(2**A** + **B**, 3**B**); 6(**A** + 2**B**, 6**B**)(3**A**, 2**B** + **A**)]; [7(6**A**, **B** − 2**A**)(2**A** − **B**, 3**B**); 8(**A** − 2**B**, 6**B**)(3**A**, 2**B** − **A**)]; [9(6**A**, **B** + 3**A**)(3**A** + **B**, 2**B**); 10(**A** + 3**B**, 6**B**)(2**A**, 3**B** + **A**)]; [11(3**A**, 2**B**); 12(2**A**, 3**B**)].

Indice 7
[1(7**A**,**B**); 2(**A**,7**B**)]; [3(7**A**, **B** + **A**)(**A** + **B**, 7**B**)]; [4(7**A**, **B** − **A**)(**A** − **B**, 7**B**)]; [5(7**A**, **B** + 2**A**)(**A** − 3**B**, 7**B**); 6(7**A**, **B** − 3**A**)(**A** + 2**B**, 7**B**)]; [7(7**A**, **B** − 2**A**)(**A** + 3**B**, 7**B**); 8(7**A**, **B** + 3**A**)(**A** − 2**B**, 7**B**)].

Il convient de remarquer que les mailles conventionnelles des sous-groupes isomorphes de $\Gamma(P\bar{1})$ sont données par les mêmes matrices que celles des sous-groupes isomorphes de $\Gamma(P1)$, c'est-à-dire par le Tableau 4, l'origine des sous-groupes $\gamma(P\bar{1})$ étant placée en ($k_1/2$, $k_2/2$, $k_3/2$; k_i entier) par rapport au repère conventionnel de $\Gamma(P1)$ (Sayari & Billiet, 1977). D'une façon analogue, les sous-groupes isomorphes de $\Gamma(p2)$ sont données par le Tableau 5, l'origine étant placée en ($k_1/2$, $k_2/2$; k_i entier) (Sayari, Billiet & Zarrouk, 1978).

Références

Billiet, Y. (1979). *Acta Cryst.* A**35**, 485–496.

Carmichael, R. D. (1956). *Introduction to the Theory of Groups of Finite Order*. London: Dover.

Gantmacher, F. R. (1966). *Théorie des Matrices*, traduction française. Paris: Dunod.

Sayari, A. & Billiet, Y. (1977). *Acta Cryst.* A**33**, 985–986.

Sayari, A., Billiet, Y. & Zarrouk, H. (1978). *Acta Cryst.* A**34**, 553–555.

Acta Cryst. (1980). A**36**, 248–252

A Perturbation Stable Cell Comparison Technique*

By Lawrence C. Andrews, Herbert J. Bernstein and Gerard A. Pelletier

Chemistry Department, Brookhaven National Laboratory, Upton, New York 11973, *USA*

(*Received* 3 *January* 1979; *accepted* 26 *September* 1979)

Abstract

A modified method of describing lattices (or, equivalently, unit cells) is described. In the proposed parameterization, there is no discontinuous measure of agreement such as is found in studies of reduced cells. Although the Niggli reduced cell is uniquely defined for every lattice, the angles of the reduced cell may vary wildly with minor lattice distortions. It is proposed that lattices be described by the sets of seven parameters consisting of reduced-cell edge lengths, the lengths of edges of the reduced cell of the reciprocal lattice, and the reduced-cell volume.

* This research was carried out at Brookhaven National Laboratory under contract with the National Institutes of Health, and supported, in part, by the US Department of Energy Office of Basic Energy Sciences.

0567-7394/80/020248-05$01.00