Acta Cryst. (1982). A**38**, 71–74

Groupes Commutateurs des Groupes Cristallographiques

PAR JEAN SIVARDIÈRE

Département de Recherche Fondamentale, Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble, 85*X,* 38041 *Grenoble CEDEX, France*

(*Reçu le* 22 *septembre* 1980, *accepté le* 6 *juillet* 1981)

Abstract

Commutator groups of simple and double point groups and space groups are determined. Unidimensional representations of crystallographic groups are then derived easily and from them the corresponding magnetic groups.

I. Introduction

Pour énumérer les groupes magnétiques G_α isomorphes d'un groupe cristallographique G, on peut rechercher soit ses sous-groupes H_α invariants d'indice 2 (Zamorzaev, 1958), soit ses représentations unidimensionnelles réelles Γ_α (Indenbom, 1959; Niggli & Wondratschek, 1960). Les deux méthodes sont équivalentes, puisque les sous-groupes H_α sont les noyaux des représentations Γ_α; elles ont été appliquées avec succès à l'énumération des groupes d'espace magnétiques (Opechowski & Guccione, 1965; Bertaut, 1968; Sivardière, 1969, 1973).

Nous montrons dans cet article que l'étude des groupes commutateurs des groupes cristallographiques permet de mettre en oeuvre la seconde méthode sans faire appel à la théorie complète des représentations. Nous rappelons auparavant quelques propriétés des groupes commutateurs (Lomont, 1959).

Soient a et b deux éléments d'un groupe G. Leur commutateur c est défini par: $c = [a,b] = b^{-1}a^{-1}ba$.

Si c est un commutateur, c^{-1} aussi car $[a,b]^{-1} = [b,a]$. $xcx^{-1} = [xax^{-1}, xbx^{-1}]$ donc la classe de c est formée de commutateurs.

On en déduit que l'ensemble des commutateurs, qui n'est pas forcément un groupe, forme un ensemble de classes C_i; s'il contient une classe, il contient aussi la classe inverse. Le groupe commutateur H_c de G est le sous-groupe invariant engendré par les commutateurs: il contient les classes C_i, et les classes qui apparaissent dans les produits C_iC_j. Soit F_c le groupe quotient G/H_c. Si G est abélien, $H_c = E$ (identité) et $F_c \equiv G$. Quel que soit G, H_c est son plus petit sous-groupe invariant dont le groupe quotient est abélien: H_c est contenu dans tout sous-groupe invariant de G dont le groupe quotient est abélien.

Cette propriété caractéristique de H_c permet de déterminer les représentations unidimensionnelles Δ_α de G. Les Δ_α sont simplement engendrées par les représentations de F_c. Leurs noyaux H_α sont les sous-groupes invariants de G qui contiennent H_c. Un groupe H_α est d'indice 2 seulement si Δ_α est réelle.

Nous recherchons maintenant les groupes commutateurs des groupes cristallographiques et leurs groupes quotients.

II. Cas des groupes ponctuels simples

Nous envisageons seulement les groupes propres non abéliens.

Considérons tout d'abord le groupe diédrique $G = 32 = \{E,3,3^2,2_x,2_y,2_u\}$, $H_c = \{E,3,3^2\}$: il contient les classes $\{E\}$ et $\{3,3^2\}$, autoinverses. F_c est d'ordre 2 puisque H_c est d'indice 2; on sait par ailleurs que G est le produit semi-direct $3 \wedge 2$ (Sivardière & Bertaut, 1970). Les représentations unidimensionnelles de 32 sont engendrées par les représentations paire et impaire de F_c (Tableau 1).

D'où les groupes magnétiques G_α associés: 32 et 32′.

Si $G = 422$, $H_c = \{E,2_z\}$: H_c contient les classes $\{E\}$ et $\{2_z\}$ autoinverses. G se décompose ainsi en complexes:

$$422 = \{E,2_z\} + \{4,4^3\} + \{2_x,2_y\} + \{2_{xy},2_{x\bar{y}}\}.$$

G est l'extension de H_c par $F_c \sim 222$. D'où ses quatre représentations réelles unidimensionnelles (Tableau 2).

Si $G = 622$, $H_c = \{E,6^2,6^4\}$ et $F_c \sim 222$:

$$622 = \{E,6^2,6^4\} + \{6^1,6^3,6^5\} + \{2_x,2_y,2_u\} + \{2'_x,2'_y,2'_u\}$$

d'où quatre représentations réelles unidimensionnelles.

Tableau 1. *Représentations unidimensionnelles du groupe* 32

$G = 32$	$E, 3, 3^2$	$2_x, 2_y, 2_u$	G_α
Γ_1	1	1	32
Γ_2	1	−1	32′

0567-7394/82/010071-04$01.00

Tableau 2. *Représentations unidimensionnelles du groupe* 422

$G = 422$	$E, 2_z$	$4, 4^3$	$2_x, 2_y$	$2_{xy}, 2_{x\bar{y}}$	G_α
Γ_1	1	1	1	1	422
Γ_2	1	1	-1	-1	42'2'
Γ_3	1	-1	1	-1	4'22'
Γ_4	1	-1	-1	1	4'22

Tableau 3. *Représentations unidimensionnelles du groupe* 23

$G = 23$	$E, 2_x, 2_y, 2_z$	4 axes 3	4 axes 3^2	G_α
Γ_1	1	1	1	23
Γ_2	1	j	j^2	
Γ_3	1	j^2	j	

Tableau 4. *Représentations unidimensionnelles du groupe* 32^+

$G = 32^+$	$E, \bar{E}3, 3^2$	$\bar{E}, 3, \bar{E}3^2$	$2_x, 2_y, 2_u$	$\bar{E}2_x, \bar{E}2_y, \bar{E}2_u$
Γ_1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	-1
Γ_5	1	-1	i	$-i$
Γ_6	1	-1	$-i$	i

Si $G = 23$, $H_c = \{E,2_x,2_y,2_z\}$ et $F_c \sim 3$:

$$23 = \{E,2_x,2_y,2_z\} + \{4 \text{ axes } 3\} + \{4 \text{ axes } 3^2\}$$

d'où trois représentations unidimensionnelles: une réelle, et deux complexes conjuguées auxquelles correspondent deux groupes à trois couleurs (Tableau 3).

Enfin si $G = 432$, $H_c = 23$ et $F_c \sim 2$, d'où deux représentations unidimensionnelles réelles.

On vérifie dans les exemples précédents que les complexes associés au groupe commutateur sont formés de classes entières (au contraire si $G = 432$ et si on considère le sous-groupe invariant 222, les axes 3_{111} et 3^2_{111} appartiennent à la même classe mais non au même complexe).

III. Cas des groupes ponctuels doubles

Les groupes doubles $G^+ = 222^+, 422^+, 622^+, 23^+, 432^+$, ont une propriété commune: leur groupe commutateur n'est autre que le groupe double H_c^+, H_c étant le groupe commutateur du groupe simple G correspondant. Par suite, les groupes G^+ et G ont même quotient F_c par leur groupe commutateur et le même nombre de représentations unidimensionnelles. L'opérateur $\bar{E}$ de Bethe (rotation de 2π) appartenant au groupe commutateur, il a le caractère $+1$ dans ces représentations qui sont vectorielles: les groupes G^+ ci-dessus n'ont donc que des représentations spinorielles de dimension supérieure à 1.

Le groupe $G^+ = 32^+$ a des propriétés particulières. Son groupe commutateur est $\{E,\bar{E}3,3^2\}$ et le groupe quotient est isomorphe du groupe 4. 32^+ possède donc (Tableau 4) quatre représentations unidimensionnelles: deux réelles Γ_1 et Γ_2, et deux complexes Γ_5 et Γ_6 (notations de Koster, Dimmock, Wheeler & Statz 1963). Le groupe commutateur ne contenant pas $\bar{E}$, seules Γ_1 et Γ_2, dans lesquelles $\bar{E}$ a la caractère $+1$, sont des représentations vectorielles. Le groupe 32^+ est donc le seul groupe double non cyclique à posséder des représentations spinorielles unidimensionnelles. Cette propriété est évidemment à rapprocher du fait que le groupe 32 ne possède pas de représentation avec poids, contrairement aux autres groupes diédriques et cubiques.

IV. Cas des groupes d'espace

Soient $(\alpha|\tau_\alpha)$ et $(\beta|\tau_\beta)$ deux éléments d'un groupe d'espace G_e de réseau T et de groupe ponctuel G. Leur commutateur a pour expression:

$$(\beta^{-1}\alpha^{-1}\beta \;|\beta^{-1}\alpha^{-1}\beta\tau_\alpha + \beta^{-1}\alpha^{-1}\tau_\beta - \beta^{-1}\alpha^{-1}\tau_\alpha - \beta^{-1}\tau_\beta)$$

ou encore (Bertaut, 1975):

$$(\beta^{-1}\alpha^{-1}\beta_\alpha|\beta^{-1}\alpha^{-1}[(1-\alpha)\tau_\beta - (1-\beta)\tau_\alpha]).$$

On en déduit que le groupe commutateur H_{ce} de G_e a pour groupe ponctuel le commutateur H_c de G. En particulier si G est abélien, H_{ce} est un sous-groupe de translations. D'autre part si G_e est symmorphique, H_{ce} l'est aussi. Enfin nous vérifions sur des exemples que H_{ce} dépend non seulement de T et G mais explicitement de G_e.

Considérons le groupe symmorphique $G_e = P222$ de réseau primitif (a,b,c) et de groupe ponctuel abélien. H_{ce} est un groupe de translations de maille $2a$, $2b$, $2c$. Pour reconstituer G_e à partir de H_{ce}, il faut réintroduire les translations $(E|100)$, $(E|010)$, $(E|001)$ et les rotations $(2x|000)$ et $(2y|000)$. H_{ce} est donc d'indice $2^5 = 32$, et le groupe F_{ce} est isomorphe du produit direct $2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2$. Plus précisément on peut écrire:

$$F_{ce} = 2_{(E|100)} \times 2_{(E|010)} \times 2_{(E|001)} \times 2_x \times 2_z$$

où 2_x, par exemple, désigne le groupe formé de l'identité et de l'axe binaire orienté suivant x. $P222$ possède donc 32 représentations unidimensionnelles $\Gamma_{\mathbf{k}j}$: les coordonnées k_x, k_y, $k_z = 0$ ou $1/2$ du vecteur $\mathbf{k}$ caractérisent les représentations paires ($k_i = 0$) ou impaires ($k_i = 1/2$) des groupes $2_{(E|100)}$, $2_{(E|010)}$, $2_{(E|001)}$. Les vecteurs $\mathbf{k}$ ainsi définis sont invariants dans le groupe ponctuel, en accord avec la théorie générale de Seitz (Sivardière, 1969). A chacun d'eux correspondent quatre représentations réelle $\Gamma_{\mathbf{k}j}$ obtenues à partir de celles du groupe 222.

Considérons maintenant le groupe non symmorphique $G_e = P222_1$. H_{ce} est le groupe de translations de maille $2a$, $2b$, c, F_{ce} est donc d'ordre 16, il est isomorphe du produit direct

$$2_{(E|100)} \times 2_{(E|010)} \times 2_x \times 2_z.$$

$P222_1$ possède donc seize représentations unidimensionnelles réelles $\Gamma_{\mathbf{k}j}$ telles que $k_z = 0$. Les coordonnées k_x, $k_y = 0$ ou $1/2$ caractérisent les représentations paires ou impaires des groupes $2_{(E|100)}$ et $2_{(E|010)}$ (effectivement les représentations $\Gamma_{\mathbf{k}j}$ telles que $k_x, k_y = 0, 1/2$ et $k_z = 1/2$ sont réelles de dimension 2).

Si $G_e = P2_12_12$, le groupe commutateur est le groupe à maille à face centrée C engendré par les translations $2a$, $2b$, $2c$. F_{ce} est d'ordre 16. $F_{ce} \sim 4 \times 2 \times 2$ puisque pour reconstituer $P2_12_12$ à partir de H_{ce}, il faut réintroduire les opérations: $2_{1x} = (2_x|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$ telle que $2_{1x}^4 = (E|200) \in H_{ce}$, $2_z = (2_z|000)$ et $(E|001)$. $P2_12_12$ possède donc 16 représentations $\Gamma_{\mathbf{k}j}$ unidimensionnelles, huit réelles telles que $\mathbf{k} = [000]$ ou $[00\frac{1}{2}]$, et huit complexes telles que $\mathbf{k} = [\frac{1}{2}\frac{1}{2}0]$ ou $[\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}]$ (Tableau 5).

Enfin si $G_e = P2_12_12_1$, le groupe commutateur H_{ce} est le groupe de translations de maille $2a$, $2b$, $2c$ centrée. $F_{ce} \sim 4 \times 4$ puisque pour reconstituer $P2_12_12_1$ à partir de H_{ce}, il faut réintroduire les opérations $2_{1x} = (2_x|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)$ et $2_{1z} = (2_z|\frac{1}{2}0\frac{1}{2})$ telles que $2_{1x}^4 = (E|200)$ et $2_{1z}^4 = (E|002)$. $P2_12_12_1$ possède donc 16 représentations unidimensionnelles $\Gamma_{\mathbf{k}j}$, quatre réelles telles que $\mathbf{k} = [000]$ et 12 complexes, quatre pour chacun des vecteurs $\mathbf{k} = [\frac{1}{2}\frac{1}{2}0]$, $[\frac{1}{2}0\frac{1}{2}]$, $[0\frac{1}{2}\frac{1}{2}]$ (Tableau 6).

Tableau 5. *Caractères χ des opérations 2_z, 2_{1x} et $(E|001)$ du groupe $P2_12_12$ et vecteurs* **k** *correspondants*

$\chi(2_z)$	$\chi(2_{1x})$	$\chi(E\|001)$	k
± 1	± 1	1	[000]
± 1	$\pm i$	1	$[\frac{1}{2}\frac{1}{2}0]$
± 1	± 1	-1	$[00\frac{1}{2}]$
± 1	$\pm i$	-1	$[\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}]$

Tableau 6. *Caractères χ des opérations 2_{1x} et 2_{1z} du groupe $P2_12_12_1$ et vecteurs* **k** *correspondants*

$\chi(2_{1x})$	$\chi(2_{1z})$	k
± 1	± 1	[000]
± 1	$\pm i$	$[0\frac{1}{2}\frac{1}{2}]$
$\pm i$	± 1	$[\frac{1}{2}\frac{1}{2}0]$
$\pm i$	$\pm i$	$[\frac{1}{2}0\frac{1}{2}]$

La méthode ci-dessus est évidemment équivalente à la détermination des représentations par identification (Olbryschski, 1963) et utilisée par Bertaut dans le cas des groupes orthorhombiques (Bertaut, 1968). La considération explicite du groupe F_{ce} permet d'en interpréter les résultats et de les relier à ceux de la théorie de Seitz: si G_e est symmorphique, F_{ce} est le produit direct d'un groupe de translations T/H_{ce} par le groupe ponctuel; cette propriété correspond au fait que $\Gamma_{\mathbf{k}j}$ est le produit direct d'une représentation $\Gamma_{\mathbf{k}}$ de T par une représentation Γ_j de G quel que soit **k** invariant dans le groupe ponctuel G. Si au contraire G_e n'est pas symmorphique, la factorisation de F_{ce} en deux groupes, l'un de translations, l'autre de rotations, disparaît; de même $\Gamma_{\mathbf{k}j}$ n'est plus le produit direct d'une représentation de T par une représentation de G pour certains vecteurs **k** invariants dans G.

Nous considérons maintenant les groupes d'espace de classe 422 et de réseau primitif. Le Tableau 7 indique pour chacun de ces groupes le groupe commutateur H_{ce}, la structure algébrique du groupe quotient F_{ce}, et le nombre de représentations unidimensionnelles $\Gamma_{\mathbf{k}j}$ réelles (r) et complexes (c). P' et P'' désignent les réseaux de mailles respectives $2a$, $2b$, c et $2a$, $2b$, $2c$, avec la face C centrée. Si le réseau est de type P', on retrouve le réseau P en lui ajoutant la translation $(E|100)$; s'il est de type P'', il faut lui ajouter les translations $(E|100)$ et $(E|001)$. H_{ce} a pour groupe ponctuel 2_z, groupe commutateur du groupe 422. Donc pour reconstituer G_e à partir de H_{ce}, il faut réintroduire d'autres générateurs: un axe binaire suivant x et un axe quaternaire suivant z. Soit $(\alpha|\tau_\alpha)$ un tel générateur et n_α un entier tel que $(\alpha|\tau_\alpha)^{n_\alpha}$ soit un élément de H_{ce}: la valeur des n_α fournit la structure algébrique de F_{ce}.

Considérons les groupes $P23$ et $P2_13$. Pour $G_e = P23$, H_{ce} est un groupe de classe 222 et de réseau cubique faces centrées de maille $2a$. F_{ce} est isomorphe de $3\wedge 2$ puisque les générateurs $(\alpha|\tau_\alpha)$ permettant de construire G_e à partir de H_{ce} sont la rotation $(3_{111}|000)$ et la translation $(E|111)$. $P23$ possède donc six représentations unidimensionnelles: une réelle et deux complexes pour chacun des vecteurs $\mathbf{k} = [000]$ et $[\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}]$. D'où les groupes magnétiques isomorphes de $P23$: $P23_1$ trivial et P_F23. Pour $G_e = P2_13$, H_{ce} est le groupe $P2_12_12_1$, donc $F_{ce} \sim 3$ et $P2_13$ ne possède que trois représentations unidimensionnelles, une réelle et deux complexes, obtenues pour $\mathbf{k} = [000]$. D'où le seul groupe magnétique trivial $P2_13$.

Tableau 7. *Groupes d'espace de classe* 422: *groupe commutateur et représentations unidimensionelles*

G_e	H_{ce}	F_{ce}	Γ_{kj}	k
$P422$	$P''2$	$2\times 2\times 2\times 2$	$16r$	000, $[\frac{1}{2}\frac{1}{2}0]$, $[00\frac{1}{2}]$, $[\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}]$
$P4_222$	$P''2_1$	$2\times 2\times 2\times 2$		
$P42_12$	$P''2$	$4\times 2\times 2$	$8r + 8c$	r: [000], $[00\frac{1}{2}]$ c: $[\frac{1}{2}\frac{1}{2}0]$, $[\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}]$
$P4_22_12$	$P''2_1$	$4\times 2\times 2$		
$P4_122$	$P'2_1$	$2\times 2\times 2$	$8r$	[000], $[\frac{1}{2}\frac{1}{2}0]$
$P4_12_12$	$P'2_1$	4×2	$4r + 4c$	r: [000]; c: $[\frac{1}{2}\frac{1}{2}0]$

En conclusion, on voit que la recherche du groupe commutateur H_{ce} d'un groupe d'espace G_e primitif permet de trouver simplement ses représentations unidimensionnelles Γ_{kj} et les groupes magnétiques isomorphes de G_e. On peut en particulier comparer les résultats pour plusieurs groupes de même classe et de même réseau.

Références

BERTAUT, E. F. (1968). *Acta Cryst.* A**24**, 217–231.
BERTAUT, E. F. (1975). *Ann. Phys. (Paris)*, **9**, 97.
INDENBOM, V. L. (1959). *Sov. Phys. Crystallogr.* **4**, 578–581.
KOSTER, G. F., DIMMOCK, J. O., WHEELER, R. G. & STATZ, H. (1963). *Properties of the Thirty-two Point Groups.* Cambridge: MIT.
LOMONT, J. S. (1959). *Applications of Finite Groups.* New York: Academic Press.
NIGGLI, A. & WONDRATSCHEK, H. (1960). *Z. Kristallogr.* **114**, 215–231.
OLBRYSCHSKI, K. (1963). *Phys. Status Solidi*, **3**, 1868–1872.
OPECHOWSKI, W. & GUCCIONE, R. (1965). In *Magnetism*, Vol. IIA, édité par G. T. RADO & H. SUHL. New York: Academic Press.
SIVARDIÈRE, J. (1969). *Acta Cryst.* A**25**, 658–665.
SIVARDIÈRE, J. (1973). *Acta Cryst.* A**29**, 639–644.
SIVARDIÈRE, J. & BERTAUT, E. F. (1970). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **93**, 515–526.
ZAMORZAEV, A. M. (1958). *Sov. Phys. Crystallogr.* **3**, 401.

Acta Cryst. (1982). A**38**, 74–78

L_3-Edge Anomalous Scattering by Gadolinium and Samarium Measured at High Resolution with Synchrotron Radiation

BY LIESELOTTE K. TEMPLETON AND DAVID H. TEMPLETON

Materials and Molecular Research Division, Lawrence Berkeley Laboratory and Department of Chemistry, University of California, Berkeley, California 94720, *USA*

R. PAUL PHIZACKERLEY

Stanford Synchrotron Radiation Laboratory, Stanford, California 94305, *USA*

AND KEITH O. HODGSON

Department of Chemistry, Stanford University, Stanford, California 94305, *USA*

(*Received* 3 *June* 1981; *accepted* 14 *July* 1981)

Abstract

The anomalous scattering terms f' and f'' for Gd and Sm near their L_3 absorption edges, measured in diffraction experiments with synchrotron radiation more nearly monochromatic than the natural level widths, show even larger effects than earlier measurements with a larger X-ray bandwidth. A test of angular dependence shows f' for Sm to decrease in magnitude with increasing diffraction angle, while f'' is essentially constant.

Introduction

Anomalous X-ray scattering, a name for the effects of electronic energy levels on the phase and amplitude of scattered X-rays, is a powerful tool for solving diffraction problems. This is particularly true when synchrotron radiation is used, since its intense continuous spectrum permits the wavelength for a diffraction experiment to be chosen arbitrarily to high precision. The exceptionally large anomalous scattering effects which occur very near to the absorption edges can then be exploited. We have measured these effects in diffraction experiments with known crystals to provide a foundation for such applications, in particular to help solve the phase problem in macromolecular crystallography.

The largest effects we have measured occur near L_3 absorption edges of rare-earth elements in the trivalent state. These edges span a range (2·26 Å for lanthanum to 1·34 Å for lutetium) which includes wavelengths often used for diffraction experiments. An earlier communication (Templeton, Templeton & Phizackerley, 1980) reported a study of praseodymium and samarium near their L_3 edges (2·08 and 1·85 Å) with values of f' as negative as −27·0 and −21·3 electrons atom^{-1} and f'' as large as 27·3 and 23·3 electrons atom^{-1}. This work was done at the Stanford Synchro-

0567-7394/82/010074-05$01.00