

Table 4. *Estimated ratios of the temperature factor of paired reflections for vanadium metal affected by the anharmonic vibration,  $\delta/\alpha = -1/2$*

$h_1k_1l_1$	$\sin \theta/\lambda$	$(h_2^4 + k_2^4 + l_2^4)$ $-(h_1^4 + k_1^4 + l_1^4)$	$T(Q_1)$ $T(Q_2)$	$1.01T(Q_1)$ $T(Q_2)^2$
330/411	0.701	96	1.000	1.019
442/600	0.992	768	0.997	1.014
615/732	1.301	576	0.998	1.015
660/822	1.402	1536	0.994	1.007
833/910	1.496	2304	0.991	1.001
763/932	1.602	2880	0.988	0.996
666/1022	1.717	6144	0.975	0.970

we assume that  $f(Q_1)/f(Q_2)$  is always equal to 1.01, the variation of the ratio  $F^2(Q_1)/F^2(Q_2)$  is illustrated by the broken line in Fig. 5(a). For the low-angle reflection pairs the effect of anharmonic vibration is negligible as Weiss & DeMarco (1965) estimated. But for high-angle reflection pairs, the effect rapidly increases. In difference synthesis, the peaks of charge asphericity and those caused by the anisotropic vibration can be distinguished by their different  $\sin \theta/\lambda$  dependence. The static difference synthesis of vanadium metal calculated for cut-off value  $(\sin \theta/\lambda)_{\max}$  equal to  $1.50 \text{ \AA}^{-1}$  shows a positive peak in the [111] direction at  $0.26 \text{ \AA}$  from the V nucleus, as shown in Fig. 4(e). On the other hand, the positive peak shown in Fig. 4(d) in the [100] direction disappeared. Accordingly, we can conclude that the aspherical charge distribution in vanadium metal is identical to that in chromium metal.

The calculations were carried out on the FACOM 230-48 and FACOM M-160F computers of The Institute for Solid State Physics. Part of the cost of this research was met by a Scientific Research Grant from

*Acta Cryst.* (1982). **A38**, 108–117

## Le Groupe $P1$ et ses Sous-Groupes.

### IV. Traitement Systématique de la Conservation Réticulaire\*

PAR MONIQUE ROLLEY-LE COZ

Laboratoire MR3 (Algèbre de Von Neumann et Algèbres Commutatives), Université de Bretagne Occidentale, 6, avenue Le Gorgeu, 29283 Brest, France

(Reçu le 14 janvier 1981, accepté le 28 juillet 1981)

#### Abstract

The present paper is the continuation of another devoted to the theoretical aspects of lattice-row and

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

the Ministry of Education to which the authors' (SO and YS) thanks are due.

#### References

- BOLEF, D. I. & DE KLERK, J. (1963). *Phys. Rev.* **129**, 1063–1067.
- COPPENS, P., GURU-ROW, T. N., LEUNG, P., STEVENS, E. D., BECKER, P. J. & YANG, Y. W. (1979). *Acta Cryst.* **A35**, 63–72.
- COPPENS, P. & HAMILTON, W. C. (1970). *Acta Cryst.* **A26**, 71–83.
- DIANA, M. & MAZZONE, G. (1972). *Phys. Rev. B*, **5**, 3832–3836.
- DIANA, M. & MAZZONE, G. (1975). *Philos. Mag.* **32**, 1227–1230.
- DWIGGINS, C. W. JR (1975). *Acta Cryst.* **A31**, 395–396.
- International Tables for X-ray Crystallography* (1974). Vol. IV. Birmingham: Kynoch Press.
- IWATA, M. & SAITO, Y. (1973). *Acta Cryst.* **B29**, 822–832.
- LONSDALE, K. (1948). *Acta Cryst.* **1**, 142–149.
- OHBA, S., SATO, S. & SAITO, Y. (1981). *Acta Cryst.* **A37**, 697–701.
- RATH, J. & CALLAWAY, J. (1973). *Phys. Rev. B*, **8**, 5398–5403.
- SAITO, Y. (1979). *Inorganic Molecular Dissymmetry*, pp. 89–115. Berlin: Springer-Verlag.
- STEVENS, E. D. (1974). *Acta Cryst.* **A30**, 184–189.
- STEVENS, E. D. & COPPENS, P. (1979). *Acta Cryst.* **A35**, 536–539.
- TORIUMI, K. & SAITO, Y. (1978). *Acta Cryst.* **B34**, 3149–3156.
- WAKOH, S. & KUBO, Y. (1980). *J. Phys. F*, **10**, 2707–2715.
- WAKOH, S. & YAMASHITA, J. (1973). *J. Phys. Soc. Jpn*, **35**, 1394–1401.
- WEISS, R. J. & DEMARCO, J. J. (1965). *Phys. Rev.* **140**, A1223–1225.
- WILLIS, B. T. M. (1969). *Acta Cryst.* **A25**, 277–300.

lattice-plane preservation in the isomorphic subgroups of space group  $P1$ . In the present paper the lattice preservation is studied as a function of the values of row indices  $[U, V, W]$  and plane indices  $(H, K, L)$  via the diagonalization of the change matrix defining the subgroup. The diagonalization is carried out by means of the program *MONIC* (Fortran IV, 220 instructions).

Practical results are given for the case of isomorphic subgroups of index 8.

En vue d'applications possibles aux transitions de phase, notre équipe de recherche s'est intéressée depuis quelques années aux sous-groupes isomorphes des groupes d'espace  $p1 \approx \mathbb{Z}^2$ ,  $P1 \approx \mathbb{Z}^3$ , ...,  $\mathbb{Z}^n$  (Billiet, 1979; Billiet & Rolley-Le Coz, 1980) et à l'étude de la conservation réticulaire par de tels sous-groupes (Rolley-Le Coz & Billiet, 1980). Rappelons rapidement les résultats de cette étude. Dans un sous-groupe  $\gamma$  d'indice  $i$  isomorphe du groupe d'espace bidimensionnel  $\Gamma(p1)$ , la rangée réticulaire  $[U, V]$  de  $\Gamma$  passant par l'origine peut être, selon les valeurs de  $U$  et  $V$ , soit totalement conservée soit partiellement conservée, un noeud tous les  $c_1$  noeuds  $y$  étant conservé; les rangées parallèles  $[U, V]$  sont ou bien conservées de la même manière que la rangée passant par l'origine ou bien non conservées, une rangée toutes les  $c_2$  rangées étant conservée comme la rangée de l'origine; on a  $c_1 c_2 = i$ . Ces propriétés restent valables pour tout sous-groupe isomorphe  $\gamma$  d'indice  $i$  du groupe d'espace tridimensionnel  $\Gamma(P1)$  et s'étendent aux familles de plans réticulaires; le plan  $(H, K, L)$  de  $\Gamma$  passant par l'origine est ou bien conservé totalement par  $\gamma$  ou bien conservé partiellement, une rangée toutes les  $c_2$  rangées  $[U, V, W]$  de ce plan étant conservée de la même manière que la rangée  $[U, V, W]$  passant par l'origine (un noeud conservé tous les  $c_1$  noeuds); les autres plans  $(H, K, L)$  sont ou bien conservés comme le plan de l'origine ou bien non conservés, un plan tous les  $c_3$  plans étant conservé ( $c_1 c_2 c_3 = i$ ). Dans le présent mémoire, nous nous efforçons de systématiser l'étude de la conservation réticulaire et d'obtenir des résultats généraux concernant les valeurs des coefficients de conservation  $1/c_1, 1/c_2, 1/c_3$  en fonction des valeurs des indices des rangées et des plans.

### I. Propriétés fondamentales des sous-modules isomorphes

Les groupes d'espace  $p1, P1$  sont des cas particuliers ( $\mathbb{Z}^2, \mathbb{Z}^3$ ) des  $\mathbb{Z}$ -modules libres  $\mathbb{Z}^n$  pour lesquels l'expression 'maille conventionnelle' [vecteurs  $(A, B)$  pour  $p1$ , vecteurs  $(A, B, C)$  pour  $P1$ ] est remplacée par le terme 'base'. Considérons une base  $(A_1, A_2, A_3, \dots, A_n)$  de  $\Gamma(\mathbb{Z}^n)$  et une base  $(a_1, a_2, a_3, \dots, a_n)$  d'un sous-module isomorphe  $\gamma$  d'indice  $i$ . Il existe une relation entre ces bases:\*

\* L'exposé a été restreint à des bases orientées dans le même sens, le sens direct. L'extension à des bases orientées différemment n'offre aucune difficulté.

$$(a_1, \dots, a_n) = (A_1, \dots, A_n) S,$$

$$S = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & \dots & s_{1n} \\ s_{21} & s_{22} & \dots & s_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ s_{n1} & s_{n2} & \dots & s_{nn} \end{pmatrix}.$$

$S$  est une matrice régulière à coefficients entiers et  $\text{Dét } S = i$ . Quel que soit  $\gamma$ , on peut toujours construire (cf. Billiet, 1979) une nouvelle base  $(A_1^0, A_2^0, \dots, A_n^0)$  de  $\Gamma$  et une nouvelle base  $(a_1^0, a_2^0, \dots, a_n^0)$  de  $\gamma$  telles que:

$$(a_1^0, \dots, a_n^0) = (A_1^0, \dots, A_n^0) \Delta,$$

$$\Delta = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & d_n \end{pmatrix}.$$

$\Delta$  est une matrice diagonale, ses éléments diagonaux sont des entiers positifs:  $d_1 d_2 d_3 \dots d_n = i$ . Les bases  $(A_1^0, \dots, A_n^0)$  et  $(a_1^0, \dots, a_n^0)$  peuvent de plus être choisies (Bourbaki, 1952; Hartley & Hawkes, 1970; Harker, 1978) de manière à ce que chacun de ces coefficients diagonaux  $d_j$  divise le suivant  $d_{j+1}$ ;  $d_1$  est égal au plus grand commun diviseur (PGCD) des coefficients de  $S$ ,  $D(s_{11}, s_{12}, \dots, s_{1n})$ ;\* le produit  $d_1 d_2$  est égal au PGCD des mineurs d'ordre 2 de  $S$ ,  $D({}^2S_k)_k$ ; et d'une façon générale le produit  $d_1 d_2 \dots d_j$  est égal au PGCD des mineurs d'ordre  $j$  de  $S$ ,  $D({}^jS_k)_k$ ; notons qu'on peut écrire les éléments diagonaux sous la forme  $d_1 = m_1$ ,  $d_2 = m_1 m_2$ , ...,  $d_n = m_1 m_2 \dots m_n$  avec  $m_j > 0$ ,  $m_1^i m_2^{i-1} \dots m_j = D({}^jS_k)_k$  et  $m_1^i m_2^{i-1} \dots m_n = i$ . La matrice  $\Delta$  est, dans ces conditions, *unique* pour un sous-module donné, bien qu'une infinité de couples de bases  $(A_1^0, \dots, A_n^0)$  et  $(a_1^0, \dots, a_n^0)$  répondent à la question. Les matrices  $\Delta$  et  $S$  sont reliées entre elles par l'expression  $\Delta = QSP$  où  $Q$  et  $P$  sont les matrices des changements de base relatifs à  $\Gamma$  et  $\gamma$ :

$$(A_1, \dots, A_n) = (A_1^0, \dots, A_n^0) Q,$$

$$(a_1^0, \dots, a_n^0) = (a_1, \dots, a_n) P.$$

Les coefficients de  $Q$  et  $P$  sont entiers et leur déterminant est égal à 1.

Dans la pratique il n'existe aucune méthode *simple* permettant de construire la matrice  $\Delta$  à partir de la matrice  $S$ . Une méthode utilisée précédemment (Billiet, 1979), légèrement améliorée, permet d'arriver au résultat; cependant elle demande un nombre considérable d'opérations, non déterminé à l'avance, et est fort longue à exécuter à la main, même en dimension 2 ou 3. C'est pourquoi cette méthode a été automatisée à l'aide du programme *MONIC* (cf. Appendice) permettant de construire, pour toute matrice  $S$ , des matrices  $Q$  et  $P$ , à

\* Notons que  $D(x, 0) = |x|$ , quelque soit  $x \in \mathbb{Z}$ .

coefficients entiers et à déterminant égal à 1, telles que le produit QSP soit une matrice  $\Delta$  répondant aux critères précédemment exposés. *MONIC* permet également de construire les matrices  $Q^{-1}$ ,  $\Delta$  et un certain nombre de résultats auxiliaires dont on a besoin pour déterminer les coefficients de conservation réticulaire pour un sous-groupe déterminé.

Les sous-modules de même indice  $i$  de  $\Gamma$  qui sont associés à une matrice  $\Delta$  déterminée forment une classe vis-à-vis des automorphismes de  $\Gamma$  (Billiet, 1979): il y a donc autant de classes de sous-modules qu'il y a de façons de construire une matrice  $\Delta$  de déterminant  $i$ , c'est-à-dire, de décompositions différentes  $m_1^a m_2^{a-1} \dots m_n$  de l'indice  $i$ . A chaque classe de sous-modules va correspondre un type donné de conservation réticulaire: l'étude de cette conservation va être faite en utilisant la matrice  $\Delta$  correspondante.

## II. Conservation réticulaire en dimension 2

Nous commençons l'étude en dimension 2 où la démarche est plus simple et les résultats faciles à visualiser.

Considérons une maille conventionnelle  $(\mathbf{A}, \mathbf{B})$  de  $\Gamma(p1)$  et un sous-groupe isomorphe  $\gamma$  de  $\Gamma$  donné par une maille conventionnelle  $(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ :

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{A}, \mathbf{B}) S, \quad S = \begin{vmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{vmatrix},$$

$$s_{kl} \in \mathbb{Z}, \quad i = s_{11} s_{22} - s_{21} s_{12}.$$

Une famille de rangées réticulaires  $\rho$  de  $\Gamma$  est définie par les indices  $[U, V]$  ( $U$  et  $V$  sont premiers entre eux et désignent les coordonnées du premier noeud de la rangée  $\rho_0$  passant par l'origine), le vecteur  $\mathbf{A}U + \mathbf{B}V$  donne la direction des rangées. La famille  $\rho$  peut aussi être repérée par les indices de Miller  $(H, K)$  avec  $U = K$  et  $V = -H$ . Les coordonnées  $X, Y$  de tout noeud de  $\rho_0$  vérifient les relations équivalentes  $X/U = Y/V$  et  $HX + KY = 0$ .

Comme nous venons de le voir, on peut trouver une nouvelle maille conventionnelle  $(\mathbf{A}^0, \mathbf{B}^0)$  de  $\Gamma$  et une nouvelle maille conventionnelle  $(\mathbf{a}^0, \mathbf{b}^0)$  de  $\gamma$  telles que:

$$(\mathbf{a}^0, \mathbf{b}^0) = (\mathbf{A}^0, \mathbf{B}^0) \Delta, \quad \Delta = \begin{vmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_1 m_2 \end{vmatrix},$$

avec  $m_1, m_2$  entiers positifs,  $i = m_1^2 m_2$ ,  $m_1 = D(s_{11}, s_{12}, s_{21}, s_{22})$ ,  $\Delta = \text{QSP}$ ,  $(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = (\mathbf{A}^0, \mathbf{B}^0) Q$ ,  $(\mathbf{a}^0, \mathbf{b}^0) = (\mathbf{a}, \mathbf{b}) P$ ,  $Q$  et  $P$  matrices à coefficients entiers de déterminant égal à 1. Par rapport au repère  $(\mathbf{A}^0, \mathbf{B}^0)$ , la famille  $\rho$  a les indices  $[U^0, V^0]$  ou  $(H^0, K^0)$  donnés par les relations:

$$\begin{vmatrix} U^0 \\ V^0 \end{vmatrix} = Q \begin{vmatrix} U \\ V \end{vmatrix}, \quad (H^0, K^0) = (H, K) Q^{-1}.$$

On notera que nécessairement  $U^0 = K^0$ ,  $V^0 = -H^0$  et  $D(U^0, V^0) = D(H^0, K^0) = 1$ .

Le noeud  $A$  de coordonnées  $\lambda U^0, \lambda V^0$  ( $\lambda \in \mathbb{Z}$ ) appartient à  $\Gamma$  si et seulement s'il est possible de trouver deux entiers  $u^0$  et  $v^0$  tels que:

$$\begin{vmatrix} \lambda U^0 \\ \lambda V^0 \end{vmatrix} = \Delta \begin{vmatrix} u^0 \\ v^0 \end{vmatrix},$$

c'est-à-dire, tels que  $\lambda U^0 = m_1 u^0$ ,  $\lambda V^0 = m_1 m_2 v^0$ :  $u^0$  et  $v^0$  sont alors les coordonnées de ce noeud par rapport à  $(\mathbf{a}^0, \mathbf{b}^0)$ . Nous allons démontrer la propriété suivante: *Le noeud  $A$  appartient à  $\gamma$  si et seulement si  $\lambda$  est un multiple de  $m_1 m_2 / D(m_2, V^0) = m_1 m_2 / D(m_2, H^0)$* . Posons  $u_1^0 = U^0 m_2 / D(m_2, V^0)$  et  $v_1^0 = V^0 / D(m_2, V^0)$ .  $u_1^0$  et  $v_1^0$  sont des entiers premiers entre eux. En effet  $V^0$  étant premier avec  $U^0$ ,  $V^0 / D(m_2, V^0)$  est premier avec  $U^0$ ;  $V^0 / D(m_2, V^0)$  est premier avec  $m_2 / D(m_2, V^0)$ ;  $V^0 / D(m_2, V^0)$  est donc premier avec  $U^0 m_2 / D(m_2, V^0)$ . Par ailleurs:

$$\Delta \begin{vmatrix} u_1^0 \\ v_1^0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} U^0 m_1 m_2 / D(m_2, V^0) \\ V^0 m_1 m_2 / D(m_2, V^0) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} U_1^0 \\ V_1^0 \end{vmatrix}.$$

Le noeud  $(U_1^0, V_1^0)$  est bien sur la rangée  $\rho_0$  car  $U_1^0 / U^0 = V_1^0 / V^0$ ; comme  $u_1^0$  et  $v_1^0$  sont des entiers premiers entre eux, ce noeud est le premier à appartenir à  $\gamma$ ;  $\lambda$  est donc multiple de  $m_1 m_2 / D(m_2, V^0) = m_1 m_2 / D(m_2, H^0)$ .

En conséquence le sous-groupe isomorphe  $\gamma$  ne garde de la rangée  $\rho_0$  qu'un noeud tous les  $c_1$  noeuds, avec  $c_1 = m_1 m_2 / D(m_2, V^0)$ . Il ne garde qu'une rangée toutes les  $c_2$  rangées  $\rho$ , d'une manière identique à la rangée  $\rho_0$ , avec  $c_2 = i / c_1 = m_1 D(m_2, V^0)$ . Fait remarquable, *la conservation des rangées est indépendante de  $U^0$* , c'est-à-dire de  $K^0$ ; toutes les familles de rangées caractérisées par la même valeur de  $V^0 = -H^0$  ont le même type de conservation.

Pour qu'il existe des rangées entièrement conservées, il faut et il suffit que  $m_1 = 1$ ; toute rangée d'indices  $[q, q' m_2]$  ( $q, q' \in \mathbb{Z}$  et  $q$  premier avec  $q' m_2$ ) est alors entièrement conservée car  $D(m_2, q' m_2) = m_2$  et  $c_1 = 1$ .

Il existe des rangées  $\rho_0$  partiellement ou totalement conservées pour chacune des valeurs possibles de  $c_1$ . Ces valeurs sont les produits par  $m_1$  des diviseurs de  $m_2$ . Soit  $\varphi$  un diviseur de  $m_2$ . Les rangées d'indices  $[q, m_2 / \varphi]$  (avec  $q$  premier avec  $m_2 / \varphi$ ) conservent un noeud tous les  $m_1 \varphi$  noeuds dans  $\gamma$ .

*Exemple 1.* Soit un sous-groupe  $\gamma$  correspondant à la matrice  $\Delta$  suivante.

$$\Delta = \begin{vmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 18 \end{vmatrix}; \quad m_1 = 3, \quad m_2 = 6, \quad i = 54.$$

Les diviseurs de  $m_2$  sont 1, 2, 3, 6. Les valeurs possibles des coefficients de conservation sont respectivement 1/3, 1/6, 1/9, 1/18 pour  $1/c_1$  et 1/18, 1/9, 1/6, 1/3 pour  $1/c_2$ . Une rangée [5,6] toutes les 18 rangées est conservée au 1/3. Il en est de même pour les rangées

[1,0]. Pour les familles [1,2] et [3,4] une rangée sur 6 est conservée au 1/9. Pour la famille [4,3] une rangée toutes les 9 rangées est conservée au 1/6. Les rangées des familles [0,1] et [3,5] sont une sur 3 conservées au 1/18. Plus généralement les rangées  $[q, 6q' \pm 1]$  sont une sur 3 conservées au 1/18; les rangées  $[q, 6q' \pm 2]$  sont une sur 6 conservées au 1/9; les rangées  $[q, 6q' + 3]$  sont conservées une sur 9 au 1/6; enfin les rangées  $[q, 6q']$  sont, une rangée toutes les 18, conservées au 1/3.\* Aucune rangée n'est totalement conservée (Fig. 1).

La conservation a été étudiée en utilisant les mailles conventionnelles  $(A^0, B^0)$  et  $(a^0, b^0)$ . Les résultats peuvent être transcrits sans difficulté dans les mailles conventionnelles de départ  $(A, B)$  et  $(a, b)$  car :

$$\begin{vmatrix} U \\ V \end{vmatrix} = Q^{-1} \begin{vmatrix} U^0 \\ V^0 \end{vmatrix} \quad \text{et} \quad (H, K) = (H^0, K^0) Q.$$

*Exemple 1 (suite).* Soit S la matrice donnant la maille  $(a, b)$  de  $\gamma$  en fonction de  $(A, B)$  :

$$S = \begin{vmatrix} 30 & 24 \\ 24 & 21 \end{vmatrix}.$$

On a les relations suivantes :

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 30 & 24 \\ 24 & 21 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 18 \end{vmatrix};$$

$$[U, V] = [2U^0 + V^0, U^0 + V^0].$$

\*  $q$  et  $q'$  entiers sont évidemment tels que les indices sont premiers entre eux.

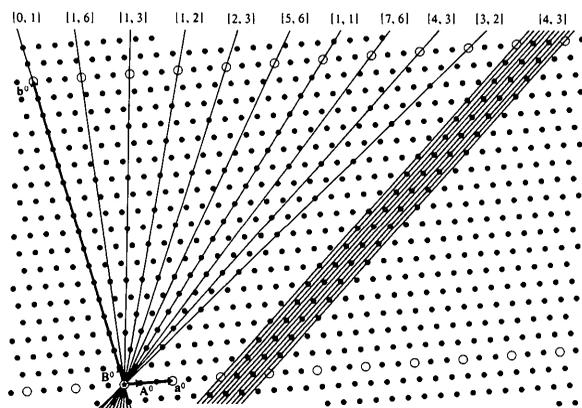


Fig. 1. Conservation réticulaire des rangées dans le sous-groupe isomorphe défini par  $a^0 = 3A^0$  et  $b^0 = 18B^0$  (indice 54). Dans une famille  $[U, V]$  les rangées sont ou bien conservées comme la rangée  $\rho_0$  de l'origine ou bien non conservées; ainsi une rangée [4,3] toutes les neuf rangées est conservée au 1/6. La conservation des rangées est indépendante de la valeur de  $U^0$ ; les rangées  $\rho_0$  [0,1] et [1,1] sont conservées au 1/18; les rangées  $\rho_0$  [1,6], [5,6] et [7,6] sont conservées au 1/3; les rangées  $\rho_0$  [1,3], [2,3] et [4,3] sont conservées au 1/6; les rangées  $\rho_0$  [1,2] et [3,2] sont conservées au 1/9.

En conséquence, en transcrivant dans le repère  $(A, B)$ , les rangées  $[2q + 6q' \pm 1, q + 6q' \pm 1]$  sont une sur 3 conservées au 1/18; les rangées  $[2q + 6q' \pm 2,$

Tableau 1. Conservation réticulaire des rangées par les 15 sous-groupes isomorphes d'indice 8 de  $\Gamma(p_1)$ , la première classe comporte 12 sous-groupes, la seconde trois sous-groupes

Les coefficients  $r$  et  $r'$  sont des entiers positifs, négatifs ou nuls choisis de manière à ce que  $U$  et  $V$  soient premiers entre eux.

a	b	$c_1$	$c_2$	$U$	$V$
A	8B	1	8	$2r + 1$	$8r'$
		2	4	$2r + 1$	$8r' + 4$
		4	2	$2r + 1$	$4r' + 2$
8A	B	8	1	$r$	$2r' + 1$
		1	8	$8r$	$2r' + 1$
		2	4	$8r + 4$	$2r' + 1$
		4	2	$4r + 2$	$2r' + 1$
8A	A + B	8	1	$2r + 1$	$r'$
		1	8	$2r + 1$	$8r' + 2r + 1$
		2	4	$2r + 1$	$8r' + 2r + 5$
		4	2	$2r + 1$	$4r' + 2r + 3$
8A	2A + B	8	1	$r$	$2r' + r + 1$
		1	8	$8r + 4r' + 2$	$2r' + 1$
		2	4	$8r + 4r' + 6$	$2r' + 1$
		4	2	$4r$	$2r' + 1$
8A	3A + B	8	1	$2r + 1$	$r'$
		1	8	$2r + 1$	$8r' + 6r + 3$
		2	4	$2r + 1$	$8r' + 6r + 7$
		4	2	$2r + 1$	$4r' + 2r + 1$
8A	4A + B	8	1	$r$	$2r' + r + 1$
		1	8	$8r + 4$	$2r' + 1$
		2	4	$8r$	$2r' + 1$
		4	2	$4r + 2$	$2r' + 1$
8A	-3A + B	8	1	$2r + 1$	$r'$
		1	8	$2r + 1$	$8r' + 2r + 5$
		2	4	$2r + 1$	$8r' + 2r + 1$
		4	2	$2r + 1$	$4r' + 2r + 3$
8A	-2A + B	8	1	$r$	$2r' + r + 1$
		1	8	$8r + 4r' + 6$	$2r' + 1$
		2	4	$8r + 4r' + 2$	$2r' + 1$
		4	2	$4r$	$2r' + 1$
8A	-A + B	8	1	$2r + 1$	$r'$
		1	8	$2r + 1$	$8r' + 6r + 7$
		2	4	$2r + 1$	$8r' + 6r + 3$
		4	2	$2r + 1$	$4r' + 2r + 1$
2A	A + 4B	8	1	$r$	$2r' + r + 1$
		1	8	$2r + 1$	$8r' + 4$
		2	4	$2r + 1$	$8r'$
		4	2	$2r + 1$	$4r' + 2$
4A	A + 2B	8	1	$r$	$2r' + 1$
		1	8	$2r + 1$	$8r' + 4r + 2$
		2	4	$2r + 1$	$8r' + 4r + 6$
		4	2	$2r + 1$	$4r'$
4A	-A + 2B	8	1	$r$	$2r' + 1$
		1	8	$2r + 1$	$8r' + 4r + 6$
		2	4	$2r + 1$	$8r' + 4r + 2$
		4	2	$2r + 1$	$4r'$
2A	4B	8	1	$r$	$2r' + 1$
		1	8	$2r + 1$	$2r'$
		2	4	$2r + 1$	$2r'$
		4	2	$r$	$2r' + 1$
4A	2B	2	4	$2r$	$2r' + 1$
		4	2	$2r + 1$	$r'$
		4	2	$2r + 1$	$r'$
		4	2	$2r + 1$	$2r' + 1$
4A	2A + 2B	2	4	$2r + 1$	$2r' + 1$
		4	2	$2r + r' + 1$	$r'$
		2	4	$2r + 1$	$r'$
		4	2	$2r + r' + 1$	$r'$

$q + 6q' \pm 2$ ] sont une sur 6 conservées au  $1/9$ ; les rangées  $[2q + 6q' + 3, q + 6q' + 3]$  sont une sur 9 conservées au  $1/6$ ; et les rangées  $[2q + 6q', q + 6q']$  sont conservées, une rangée toutes les 18, au  $1/3$ .

On peut ainsi déterminer tous les types de conservation possibles pour une valeur de l'indice, chaque classe de sous-groupes équivalents vis-à-vis des automorphismes de  $\Gamma$  étant associée à un type de conservation.

*Exemple 2.* On considère tous les sous-groupes d'indice 8 de  $\Gamma$ . Ils se répartissent en deux classes.

*1ère classe:*  $m_1 = 1, m_2 = 8$ . Les coefficients de conservation possibles sont respectivement 1,  $1/2, 1/4, 1/8$  pour  $1/c_1$  et  $1/8, 1/4, 1/2, 1$  pour  $1/c_2$ . Pour chacun des 12 sous-groupes de cette classe, les résultats sont exprimés par rapport au repère  $(\mathbf{A}, \mathbf{B})$  de départ de  $\Gamma$  (Tableau 1).

*2ème classe:*  $m_1 = 2, m_2 = 2$ . Les coefficients de conservation possibles sont respectivement  $1/2, 1/4$  pour  $1/c_1$  et  $1/4, 1/2$  pour  $1/c_2$ . Pour chacun des trois sous-groupes de la seconde classe, les résultats sont exprimés par rapport à  $(\mathbf{A}, \mathbf{B})$  (Tableau 1).

Une telle étude peut être menée sans difficulté pour n'importe quel sous-groupe de n'importe quel indice en s'aidant du programme *MONIC*.

### III. Conservation réticulaire en dimension 3

#### 1. Conservation des rangées

Le processus suivi est similaire à celui suivi en dimension 2 et s'étend à n'importe quelle dimension.

On considère le groupe  $\Gamma(P1)$  de maille conventionnelle  $(\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C})$ , un sous-groupe isomorphe  $\gamma$  de maille conventionnelle  $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}) = (\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}) S$  [ $S(3 \times 3), s_{kl} \in \mathbb{Z}, i = \text{Dét } S$ ], une famille de rangées  $\rho$  [ $U, V, W$ ] de  $\Gamma$  [ $\rho_0$  est la rangée passant par l'origine;  $U, V, W$  sont les coordonnées du premier noeud de  $\rho_0, D(U, V, W) = 1$ ; les coordonnées  $X, Y, Z$  de tout noeud de  $\rho_0$  vérifient la relation  $X/U = Y/V = Z/W$ ]. On peut construire une nouvelle maille conventionnelle  $(\mathbf{A}^0, \mathbf{B}^0, \mathbf{C}^0)$  de  $\Gamma$  et une nouvelle maille conventionnelle  $(\mathbf{a}^0, \mathbf{b}^0, \mathbf{c}^0)$  de  $\gamma$  telles que:

$$(\mathbf{a}^0, \mathbf{b}^0, \mathbf{c}^0) = (\mathbf{A}^0, \mathbf{B}^0, \mathbf{C}^0) \Delta,$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} m_1 & 0 & 0 \\ 0 & m_1 m_2 & 0 \\ 0 & 0 & m_1 m_2 m_3 \end{vmatrix},$$

$i = m_1^3 m_2^2 m_3, m_1 = D(s_{11}, \dots, s_{33}), m_1^2 m_2 = D({}^2S_k)_k, \Delta = \text{QSP}, (\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}) = (\mathbf{A}^0, \mathbf{B}^0, \mathbf{C}^0) \mathbf{Q}, (\mathbf{a}^0, \mathbf{b}^0, \mathbf{c}^0) = (\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}) \mathbf{P}, \mathbf{Q}$  et  $\mathbf{P}$  matrices à coefficients entiers et à déterminant égal à 1. Les indices de la famille  $\rho$  par rapport à  $(\mathbf{A}^0, \mathbf{B}^0, \mathbf{C}^0)$  sont donnés par la relation:

$$\begin{vmatrix} U^0 \\ V^0 \\ W^0 \end{vmatrix} = \mathbf{Q} \begin{vmatrix} U \\ V \\ W \end{vmatrix}.$$

Le noeud  $\lambda$  de coordonnées  $\lambda U^0, \lambda V^0, \lambda W^0$  ( $\lambda \in \mathbb{Z}$ ) appartient à  $\gamma$  si et seulement si ses coordonnées  $u^0, v^0, w^0$  par rapport à  $(\mathbf{a}^0, \mathbf{b}^0, \mathbf{c}^0)$  sont entières.

$$\begin{vmatrix} \lambda U^0 \\ \lambda V^0 \\ \lambda W^0 \end{vmatrix} = \Delta \begin{vmatrix} u^0 \\ v^0 \\ w^0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} m_1 u^0 \\ m_1 m_2 v^0 \\ m_1 m_2 m_3 w^0 \end{vmatrix}.$$

Nous allons démontrer la propriété suivante: *Le noeud  $\lambda$  appartient à  $\gamma$  si et seulement si  $\lambda$  est multiple de  $m_1 m_2 m_3 / D(m_2 m_3, V^0 m_3, W^0)$ .* Posons  $u_1^0 = U^0 m_2 m_3 / D(m_2 m_3, V^0 m_3, W^0), v_1^0 = V^0 m_3 / D(m_2 m_3, V^0 m_3, W^0), w_1^0 = W^0 / D(m_2 m_3, V^0 m_3, W^0)$ , et  $D = D(m_2 m_3, V^0 m_3, W^0)$ . Comme on va le voir  $u_1^0, v_1^0, w_1^0$  sont premiers entre eux.

Supposons qu'un nombre premier  $e$  différent de  $\pm 1$  divise à la fois  $u_1^0, v_1^0$  et  $w_1^0$ .

(1) Si  $e$  divise  $m_2 m_3 / D$ , alors il divise à la fois  $m_2 m_3 / D, V^0 m_3 / D$  et  $W^0 / D$ . Ce qui est impossible puisque ces trois nombres sont par construction premiers entre eux.

(2) Si  $e$  ne divise pas  $m_2 m_3 / D$ , alors il divise  $U^0$ . Deux hypothèses se présentent.

(a)  $e$  divise  $V^0$ . Donc  $e$  divise à la fois  $U^0, V^0$  et  $W^0 / D$ , donc  $e$  divise à la fois  $U^0, V^0$  et  $W^0$ . Ce qui est impossible puisque ces trois nombres sont premiers entre eux.

(b)  $e$  ne divise pas  $V^0$  tout en divisant  $V^0 m_3 / D$ . Donc  $e$  figure à la puissance  $\theta \geq 1$  comme facteur premier de  $m_3$ , à la puissance  $\mu \geq 0$  comme facteur premier de  $D$  et à la puissance  $\sigma \geq 0$  comme facteur premier de  $m_2$ . Alors  $e$ , divisant  $V^0 m_3 / D$  sans diviser  $V^0$ , figure à la puissance  $\theta - \mu \geq 1$  comme facteur de  $V^0 m_3 / D$ . Donc  $e$  figure comme facteur premier de  $m_2 m_3 / D$  à la puissance  $\theta - \mu + \sigma \geq 1$ ; donc  $e$  divise  $m_2 m_3 / D$ . Ce qui est absurde puisque contraire aux hypothèses de (2).

En conclusion  $u_1^0, v_1^0$  et  $w_1^0$  sont premiers entre eux.

Par ailleurs:

$$\Delta \begin{vmatrix} u_1^0 \\ v_1^0 \\ w_1^0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} U^0 m_1 m_2 m_3 / D \\ V^0 m_1 m_2 m_3 / D \\ W^0 m_1 m_2 m_3 / D \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} U_1^0 \\ V_1^0 \\ W_1^0 \end{vmatrix}.$$

Le noeud  $(U_1^0, V_1^0, W_1^0)$  appartient à la rangée  $\rho_0$  car  $U_1^0 / U^0 = V_1^0 / V^0 = W_1^0 / W^0$ . Puisque  $u_1^0, v_1^0$  et  $w_1^0$ , coordonnées de ce noeud par rapport à  $(\mathbf{a}^0, \mathbf{b}^0, \mathbf{c}^0)$ , sont des entiers premiers entre eux, ce noeud est le premier à appartenir à  $\gamma$ ;  $\lambda$  est donc multiple de  $m_1 m_2 m_3 / D$ .

Le sous-groupe  $\gamma$  ne conserve donc de la rangée  $\rho_0$  qu'un noeud tous les  $c_1$  noeuds avec

$$c_1 = m_1 m_2 m_3 / D(m_2 m_3, V^0 m_3, W^0);$$

il ne conserve qu'une rangée toutes les  $i/c_1$  rangées  $\rho$ , d'une manière identique à la rangée  $\rho_0$ , avec  $i/c_1 = m_1^2 m_2 D(m_2 m_3, V^0 m_3, W^0)$ . La conservation des rangées est indépendante de  $U^0$ .

Pour qu'il existe des rangées entièrement conservées, il faut et il suffit que  $m_1 = 1$ : toute rangée  $\rho_0 [q, q' m_2, q'' m_2 m_3]$  est entièrement conservée ( $q, q', q'' \in \mathbb{Z}$  et  $q, q' m_2, q'' m_2 m_3$  premiers entre eux).

Les valeurs possibles pour  $c_1$  sont les produits par  $m_1$  des diviseurs de  $m_2 m_3$ . Soit  $\varphi$  un diviseur de  $m_2 m_3$ ; pour la rangée  $\rho_0 [q, 0, m_2 m_3/\varphi]$  ( $q$  premier avec  $m_2 m_3/\varphi$ ), la valeur de  $c_1$  est  $m_1 m_2 m_3/D(m_2 m_3, 0, m_2 m_3/\varphi) = m_1 \varphi$ . Ainsi les rangées  $\rho_0$  du plan  $(\mathbf{A}^0, \mathbf{C}^0)$  présentent toutes les valeurs possibles de  $c_1$  existant dans  $\gamma$ ; en d'autres termes les valeurs possibles pour  $c_1$  sont directement repérables dans l'unique plan  $(\mathbf{A}^0, \mathbf{C}^0)$ .

*Exemple 3.* Etudions les trois types de conservation des rangées relatifs à  $i = 8$ .

*1er type:*  $m_1 = m_2 = 1, m_3 = 8$ . Les valeurs possibles sont respectivement 1, 2, 4, 8 pour  $c_1$  et 8, 4, 2, 1 pour  $i/c_1$ ; les rangées  $\rho$  ont pour indices respectifs  $[q, q', 8q'']$ ,  $[q, q', 8q'' + 4]$ ,  $[q, q', 4q'' + 2]$ ,  $[q, q', 2q'' + 1]$  par rapport à  $(\mathbf{A}^0, \mathbf{B}^0, \mathbf{C}^0)$ .\*

*2ème type:*  $m_1 = 1, m_2 = m_3 = 2$ . Les valeurs possibles sont respectivement 1, 2, 4 pour  $c_1$  et 8, 4, 2 pour  $i/c_1$ ; les rangées  $\rho$  correspondantes ont pour indices  $[q, 2q', 4q'']$ ,  $[q, q', 4q'' + 2]$ ,  $[q, q', 2q'' + 1]$ .

*3ème type:*  $m_1 = 2, m_2 = m_3 = 1$ . La seule valeur possible de  $c_1$  est 2,  $i/c_1$  vaut 4. Toutes les familles de rangées sont conservées de la même façon.

Il est évidemment possible de traduire ces résultats dans les mailles conventionnelles de départ  $(\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C})$  et  $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$  car:

$$\begin{pmatrix} U \\ V \\ W \end{pmatrix} = Q^{-1} \begin{pmatrix} U^0 \\ V^0 \\ W^0 \end{pmatrix}.$$

*Exemple 3 (suite).* Etude de la conservation des rangées dans trois sous-groupes d'indice 8.

*1er sous-groupe:* Voici la matrice S qui le définit; calculons la matrice  $\Delta$  qui lui est associée.

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

$$S = \begin{pmatrix} -2 & -8 & 2 \\ -2 & -4 & 1 \\ -2 & -12 & 2 \end{pmatrix}; \quad Q = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$P = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \Delta = QSP = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Ce sous-groupe relève du second type de conservation réticulaire de l'exemple 3. On calcule la matrice  $Q^{-1}$  et

\*  $q, q', q''$  entiers sont choisis de telle sorte que  $D(U^0, V^0, W^0) = 1$ .

on en déduit les formules de transformation des indices:

$$\begin{aligned} U &= 2U^0 + V^0 + 2W^0, \\ V &= U^0 + V^0 + W^0, \\ W &= 2U^0 + V^0 + 3W^0. \end{aligned}$$

Pour chacune des valeurs de  $c_1$  on obtient alors les indices des rangées par rapport au repère  $(\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C})$ .

$c_1 = 1, i/c_1 = 8$ :  $[2r, r', 2r + 4r'']$   
avec  $r = q + q' + 4q'', r' = q + 2q' + 4q''$  et  $r'' = q''$ .

$c_1 = 2, i/c_1 = 4$ :  $[r, r', r + 4r'' + 2]$   
avec  $r = 2q + q' + 8q'' + 4, r' = q + q' + 4q'' + 2$  et  $r'' = q''$ .

$c_1 = 4, i/c_1 = 2$ :  $[r, r'', r + 2r'' + 1]$   
avec  $r = 2q + q' + 4q'' + 2, r' = q + q' + 2q'' + 1$  et  $r'' = q''$ .\*

*2ème sous-groupe:*

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 10 \end{pmatrix}; \quad Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix};$$

$$P = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \Delta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}.$$

Ce sous-groupe relève du premier type de conservation réticulaire. Après calcul de  $Q^{-1}$ , on déduit les indices des rangées exprimés en fonction de  $(\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C})$  pour chaque valeur de  $c_1$ .

$$U = U^0, \quad V = U^0 + V^0, \quad W = U^0 + V^0 + W^0.$$

$c_1 = 1, i/c_1 = 8$ :  $[r, r', r' + 8r'']$   
avec  $r = q, r' = q + q'$  et  $r'' = q''$ .

$c_1 = 2, i/c_1 = 4$ :  $[r, r', r' + 8r'' + 4]$   
avec  $r = q, r' = q + q'$  et  $r'' = q''$ .

$c_1 = 4, i/c_1 = 2$ :  $[r, r', r' + 4r'' + 2]$   
avec  $r = q, r' = q + q'$  et  $r'' = q''$ .

$c_1 = 8, i/c_1 = 1$ :  $[r, r', r' + 2r'' + 1]$   
avec  $r = q, r' = q + q'$  et  $r'' = q''$ .

*3ème sous-groupe:*

$$S = \begin{pmatrix} 4 & 4 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \\ 6 & 4 & 2 \end{pmatrix}; \quad \text{Dét } S = 8.$$

Le PGCD des coefficients de S étant égal à 2,  $m_1$  vaut 2. Ce sous-groupe relève du 3ème type de conservation réticulaire. Il est inutile de calculer Q, P,  $\Delta, Q^{-1}$  car toutes les familles de rangées se conservent de la même façon ( $c_1 = 2, i/c_1 = 4$ ).

\*  $r, r'$  et  $r''$  sont des entiers tels que  $D(U, V, W) = 1$ . Les relations entre  $q, q', q''$  et  $r, r', r''$  sont données à titre indicatif.

## 2. Conservation des plans réticulaires

En fait, on peut directement déterminer le coefficient de conservation  $1/c$  du plan  $\bar{\omega}_0$  par le sous-groupe  $\gamma$  en utilisant des résultats d'un mémoire précédent (Rolley-Le Coz & Billiet, 1980).

Si  $H^0 = K^0 = 0$ , alors  $L^0 = 1$ , le plan  $\bar{\omega}_0$  est défini par les vecteurs  $(\mathbf{A}^0, \mathbf{B}^0)$  qui constituent une maille conventionnelle de  $\Gamma_{\bar{\omega}_0}$ ; comme les vecteurs  $\mathbf{a}^0 = m_1 \mathbf{A}^0$  et  $\mathbf{b}^0 = m_1 m_2 \mathbf{B}^0$  définissent une maille conventionnelle de  $\gamma_{\bar{\omega}_0}$ , on a bien sûr  $c_1 = m_1$ ,  $c_2 = m_1 m_2$  et  $c = m_1^2 m_2$ . Si  $H^0 \neq 0$  ou si  $K^0 \neq 0$ , la matrice  $M''$  suivante a des coefficients entiers et son déterminant vaut 1.

$$M'' = \begin{vmatrix} K_1^0 & \alpha L^0 & \gamma \\ -H_1^0 & \beta L_1^0 & \delta \\ 0 & -D(H^0, J^0) & \varepsilon \end{vmatrix}$$

avec  $H_1^0 = H^0/D(H^0, K^0)$ ,  $K_1^0/D(H^0, K^0)$ ,  $L_1^0 = L^0/D(K^0, L^0)$ ,  $\alpha H_1^0 + \beta K_1^0 = 1$ ,  $\gamma H^0 + \delta K^0 + \varepsilon L^0 = 1$ . Cette matrice définit une nouvelle maille conventionnelle  $(\mathbf{A}'', \mathbf{B}'', \mathbf{C}'')$  de  $\Gamma$  telle que  $\mathbf{A}''$  et  $\mathbf{B}''$  appartiennent au plan  $\bar{\omega}_0$ :

$$(\mathbf{A}'', \mathbf{B}'', \mathbf{C}'') = (\mathbf{A}^0, \mathbf{B}^0, \mathbf{C}^0) M'';$$

$$(\mathbf{a}'', \mathbf{b}'', \mathbf{c}'') = (\mathbf{A}'', \mathbf{B}'', \mathbf{C}'') M''^{-1} \Delta.$$

Le coefficient de conservation  $1/c$  de  $\bar{\omega}_0$  est égal à  $D(s''_{31}, s''_{32}, s''_{33})/i$  où  $D(s''_{31}, s''_{32}, s''_{33})$  est le PGCD des termes de la troisième ligne de la matrice  $S'' = M''^{-1} \Delta$  (cf. Rolley-Le Coz & Billiet, 1980). Calculons la matrice inverse de la matrice  $M''$ .

$$M''^{-1} = \begin{vmatrix} \beta L_1^0 + \delta D(H^0, K^0) & -\alpha \varepsilon L^0 - \gamma D(H^0, K^0) & \alpha \delta L^0 - \beta \gamma L_1^0 \\ \varepsilon H_1^0 & \varepsilon K_1^0 & -\delta K_1^0 - \gamma H_1^0 \\ H^0 & K^0 & L^0 \end{vmatrix}$$

Cette matrice contient donc comme termes de sa troisième ligne les indices  $H^0$ ,  $K^0$  et  $L^0$ . On en déduit aisément les valeurs des coefficients de la 3ème ligne de  $S''$ , à savoir:  $s''_{31} = H^0 m_1$ ,  $s''_{32} = K^0 m_1 m_2$ ,  $s''_{33} = L^0 m_1 m_2 m_3$ . Et le coefficient de conservation de  $\bar{\omega}_0$  est donc égal à:

$$\begin{aligned} 1/c &= D(H^0 m_1, K^0 m_1 m_2, L^0 m_1 m_2 m_3) / m_1^2 m_2 m_3 \\ &= D(H^0, K^0 m_2, L^0 m_2 m_3) / m_1^2 m_2 m_3. \end{aligned}$$

Remarquons que cette formule est vérifiée même si  $H^0 = K^0 = 0$  car alors  $L^0 = 1$  et  $D(H^0, K^0 m_2, L^0 m_2 m_3) = D(0, 0, m_2 m_3) = m_2 m_3$  d'où  $1/c = 1/m_1^2 m_2$ .

Les autres plans  $(H^0, K^0, L^0)$  sont ou bien conservés comme le plan  $\bar{\omega}_0$  ou bien non conservés, un plan étant conservé tous les  $c_3$  plans avec  $c_3 = i/c = m_1 D(H^0, K^0 m_2, L^0 m_2 m_3)$ .

Pour qu'il y ait des plans entièrement conservés, il est nécessaire et suffisant que  $m_1 = m_2 = 1$ . En effet, si  $D(H^0, K^0 m_2, L^0 m_2 m_3) = m_1^2 m_2^2 m_3$ , alors il vient  $H^0 = \lambda m_1^2 m_2^2 m_3$ ,  $K^0 = \mu m_1^2 m_2 m_3$ ,  $L^0 = \nu m_1^2 m_2$ ; comme  $H^0$ ,

$K^0, L^0$  doivent être premiers entre eux,  $D(\lambda m_2 m_3, \mu m_3, \nu) m_1^2 m_2 = 1$ , ce qui implique  $m_1 = m_2 = 1$ . Inversement si  $m_1 = m_2 = 1$ , alors les plans  $\bar{\omega}_0$  d'indices  $(\lambda m_3, \mu m_3, \nu)$  [ $D(\lambda m_3, \mu m_3, \nu) = 1$ ] sont entièrement conservés car  $D(H^0, K^0 m_2, L^0 m_2 m_3) = m_3$  et  $1/c = 1$ .

### Remarque

$$\begin{aligned} D(H^0, K^0 m_2, L^0 m_2 m_3) \\ = D[H^0, m_2 K^0 / D(K^0, L^0), m_2 m_3]. \end{aligned}$$

En effet

$$\begin{aligned} D(K^0 m_2, L^0 m_2 m_3) \\ = m_2 D(K^0, L^0) D[K^0 / D(K^0, L^0), m_3 L^0 / D(K^0, L^0)] \\ = m_2 D(K^0 L^0) D[K^0 / D(K^0, L^0), m_3] \end{aligned}$$

car  $K^0 / D(K^0, L^0)$  et  $L^0 / D(K^0, L^0)$  sont premiers entre eux. Comme  $H^0$  est premier avec  $D(K^0, L^0)$ , on a

$$\begin{aligned} D(H^0, K^0 m_2, L^0 m_2 m_3) \\ = D[H^0, m_2 D(K^0, L^0) / D(K^0, L^0), m_3] \\ = D[H^0, m_2 D(K^0 / D(K^0, L^0), m_3)] \\ = D[H^0, m_2 K^0 / D(K^0, L^0), m_2 m_3]. \end{aligned}$$

La conservation des plans réticulaires ne dépend donc pas directement de  $L^0$  mais de  $K^0 / D(K^0, L^0)$ ; en conséquence la conservation est la même pour les familles  $(H^0, K^0, L^0)$  et  $(H^0, K^0, L^0 + nK^0)$ .

Les valeurs possibles pour le coefficient de conservation  $1/c$  sont de la forme  $1/m_1^2 m_2 \varphi$  ou  $\varphi$  désigne un diviseur de  $m_2 m_3$  car  $D[H^0, m_2 K^0 / D(K^0, L^0), m_2 m_3]$  divise  $m_2 m_3$ . En particulier l'ensemble des plans  $\bar{\omega}_0$  d'indices  $(m_2 m_3 / \varphi, 0, 1)$  présente toutes les valeurs de  $1/c$  puisque  $D[H^0, m_2 K^0 / D(K^0, L^0), m_2 m_3]$  vaut alors  $m_2 m_3 / \varphi$ . Et par ailleurs, plus généralement, les plans  $\bar{\omega}_0$ , dont les indices  $(H^0, K^0, L^0)$  vérifient les conditions  $H^0 = \eta m_2 m_3 / \varphi$ ,  $K^0 / D(K^0, L^0) = \theta D(m_3, m_2 m_3 / \varphi)$  et  $D(\eta, \varphi, \theta m_2) = 1$ , admettent le coefficient de conservation  $1/c = 1/m_1^2 m_2 \varphi$ . En effet

$$\begin{aligned} m_2 D(m_3, m_2 m_3 / \varphi) &= D(m_2 m_3, m_2^2 m_3 / \varphi) \\ &= D(\varphi, m_2) m_2 m_3 / \varphi; \end{aligned}$$

alors

$$\begin{aligned} D[H^0, m_2 K^0 / D(K^0, L^0), m_2 m_3] \\ = D[\eta m_2 m_3 / \varphi, \theta D(\varphi, m_2) m_2 m_3 / \varphi, m_2 m_3] \\ = D[\eta, \theta D(\varphi, m_2) \varphi] m_2 m_3 / \varphi \\ = D(\eta, \theta \varphi, \theta m_2, \varphi) m_2 m_3 / \varphi \\ = D(\eta, \theta m_2, \varphi) m_2 m_3 / \varphi \\ = m_2 m_3 / \varphi \\ \text{et } 1/c = 1/m_1^2 m_2 \varphi. \end{aligned}$$

Exemple 4. Quelles sont les trois types de conservation des plans réticulaires pour  $i = 8$ ?

1er type:  $m_1 = m_2 = 1, m_3 = 8$ ; alors  $c = 8/D(H^0, K^0, 8L^0)$ .

Tableau 2. Conservation réticulaire des plans par quelques sous-groupes isomorphes d'indice 8 de  $\Gamma(P1)$ , les dix premiers sous-groupes sont caractéristiques du premier type de conservation, les quatre suivants du second type de conservation et le dernier du 3ème type

Les coefficients  $r, r'$  et  $r''$  sont des entiers positifs, négatifs ou nuls; ils doivent être choisis de manière à ce que  $D(H,K,L) = 1$ .

a	b	c	c	c <sub>3</sub>	H	K	L
A	B	8C	1	8	8r	8r'	2r'' + 1
			2	4	8r + 4	8r'	2r'' + 1
			2	4	8r	8r' + 4	2r'' + 1
			2	4	8r + 4	8r' + 4	2r'' + 1
			4	2	4r + 2	4r'	2r'' + 1
			4	2	4r	4r' + 2	2r'' + 1
			4	2	4r + 2	4r' + 2	2r'' + 1
			8	1	2r + 1	2r'	r''
			8	1	2r	2r' + 1	r''
			8	1	2r + 1	2r' + 1	r''
8A	B	C	1	8	2r + 1	8r''	8r''
			2	4	2r + 1	8r' + 4	8r'' + 4
			2	4	2r + 1	8r''	8r'' + 4
			2	4	2r + 1	8r' + 4	8r''
			4	2	2r + 1	4r' + 2	4r'' + 2
			4	2	2r + 1	4r''	4r'' + 2
			4	2	2r + 1	4r' + 2	4r''
			8	1	r	2r'' + 1	2r'' + 1
			8	1	r	2r''	2r'' + 1
			8	1	r	2r' + 1	2r''
8A	A + B	C	1	8	8r + 6r' + 7	2r' + 1	8r''
			2	4	8r + 6r' + 3	2r' + 1	8r''
			2	4	8r + 6r' + 7	2r' + 1	8r'' + 4
			2	4	8r + 6r' + 3	2r' + 1	8r'' + 4
			4	2	4r + 2r' + 1	2r' + 1	4r''
			4	2	4r + 2r' + 3	2r' + 1	4r'' + 2
			4	2	4r + 2r' + 1	2r' + 1	4r'' + 2
			8	1	2r + r' + 1	r'	2r''
			8	1	2r + r'	r'	2r'' + 1
			8	1	2r + r' + 1	r'	2r'' + 1
8A	3A + B	2A + C	1	8	8r + 2r' + 5	2r' + 1	8r'' + 4r' + 6
			2	4	8r + 2r' + 1	2r' + 1	8r'' + 4r' + 6
			2	4	8r + 2r' + 5	2r' + 1	8r'' + 4r' + 2
			2	4	8r + 2r' + 1	2r' + 1	8r'' + 4r' + 2
			4	2	4r + 2r' + 3	2r' + 1	4r'' + 2
			4	2	4r + 2r' + 1	2r' + 1	4r''
			4	2	4r + 2r' + 3	2r' + 1	4r''
			8	1	2r + r' + 1	r'	2r''
			8	1	2r + r'	r'	2r'' + 1
			8	1	2r + r' + 1	r'	2r'' + 1
8A	-2A + B	3A + C	1	8	8r + 2r' + 5	8r'' + 4r' + 2	2r' + 1
			2	4	8r + 2r' + 1	8r'' + 4r' + 6	2r' + 1
			2	4	8r + 2r' + 1	8r'' + 4r' + 2	2r' + 1
			2	4	8r + 2r' + 1	8r'' + 4r' + 6	2r' + 1
			4	2	4r + 2r' + 1	4r''	2r' + 1
			4	2	4r + 2r' + 3	4r'' + 2	2r' + 1
			4	2	4r + 2r' + 3	4r''	2r' + 1
			8	1	2r + r'	2r'' + 1	r'
			8	1	2r + r' + 1	2r''	r'
			8	1	2r + r' + 1	2r'' + 1	r'

Tableau 2. (suite)

a	b	c	c	c <sub>3</sub>	H	K	L
8A	4A + B	4A + C	1	8	2r + 1	8r'' + 4	8r'' + 4
			2	4	2r + 1	8r'	8r'' + 4
			2	4	2r + 1	8r'' + 4	8r''
			2	4	2r + 1	8r'	8r''
			4	2	2r + 1	4r' + 2	4r''
			4	2	2r + 1	4r'	4r'' + 2
			4	2	2r + 1	4r' + 2	4r'' + 2
			8	1	r	2r'' + 1	2r''
			8	1	r	2r''	2r'' + 1
			8	1	r	2r'' + 1	2r'' + 1
A	8B	C	1	8	8r	2r'' + 1	8r''
			2	4	8r + 4	2r'' + 1	8r''
			2	4	8r	2r'' + 1	8r'' + 4
			2	4	8r + 4	2r'' + 1	8r'' + 4
			4	2	4r + 2	2r'' + 1	4r''
			4	2	4r	2r'' + 1	4r'' + 2
			4	2	4r + 2	2r'' + 1	4r'' + 2
			8	1	2r + 1	r'	2r''
			8	1	2r	r'	2r'' + 1
			8	1	2r + 1	r'	2r'' + 1
A	8B	2B + C	1	8	8r	2r'' + 1	8r'' + 4r' + 6
			2	4	8r + 4	2r'' + 1	8r'' + 4r' + 6
			2	4	8r	2r'' + 1	8r'' + 4r' + 2
			2	4	8r + 4	2r'' + 1	8r'' + 4r' + 2
			4	2	4r + 2	2r'' + 1	4r'' + 2
			4	2	4r	2r'' + 1	4r''
			4	2	4r + 2	2r'' + 1	4r''
			8	1	2r + 1	r'	2r''
			8	1	2r	r'	2r'' + 1
			8	1	2r + 1	r'	2r'' + 1
A	2B	B + 4C	1	8	8r	8r'' + 4	2r'' + 1
			2	4	8r + 4	8r'' + 4	2r'' + 1
			2	4	8r	8r''	2r'' + 1
			2	4	8r + 4	8r''	2r'' + 1
			4	2	4r + 2	4r''	2r'' + 1
			4	2	4r	4r'' + 2	2r'' + 1
			4	2	4r + 2	4r'' + 2	2r'' + 1
			8	1	2r + 1	2r'' + 1	r''
			8	1	2r	2r'' + 1	r''
			8	1	2r + 1	r''	r''
4A	2A + B	-A + 2C	1	8	8r + 4r' + 2	8r'' + 4	2r'' + 1
			2	4	8r + 4r' + 2	8r''	2r'' + 1
			2	4	8r + 4r' + 6	8r'' + 4	2r'' + 1
			2	4	8r + 4r' + 6	8r''	2r'' + 1
			4	2	4r + 2	4r'' + 2	2r'' + 1
			4	2	4r	4r''	2r'' + 1
			4	2	4r + 2	4r'' + 2	2r'' + 1
			8	1	2r + 1	2r'' + 1	r''
			8	1	2r	2r'' + 1	r''
			8	1	2r + 1	r''	r''
A	2B	4C	2	4	4r	2r''	2r'' + 1
			4	2	4r + 2	2r''	2r'' + 1
			4	2	2r	2r'' + 1	r''
			8	1	2r + 1	r''	r''
			2	4	2r + 1	4r''	2r''
			4	2	2r + 1	4r'' + 2	2r''
			4	2	r	2r''	2r'' + 1
			4	2	r	2r'' + 1	2r'' + 1
			8	1	r	2r'' + 1	r''
			8	1	r	2r'' + 1	r''
4A	-A + B	2A + 2C	2	4	4r + 2r' + 1	2r'' + 1	2r'' + 1
			4	2	4r + 2r' + 3	2r'' + 1	2r'' + 1
			4	2	2r + r'	2r'' + 1	2r'' + r' + 1
			8	1	2r + r' + 1	r''	r''
			2	4	4r + 2r'	2r'' + 2r'' + 1	2r'' + 1
			4	2	4r + 2r' + 2	2r'' + 2r'' + 1	2r'' + 1
			4	2	2r + 1	2r'' + r'' + 1	r''
			8	1	2r + r' + 1	r''	r''
			2	4	2r + r' + 1	r''	r''
			4	2	r	r''	r''
2A	4B	A - B + C	2	4	4r + 2r'	2r'' + 2r'' + 1	2r'' + 1
			4	2	4r + 2r' + 2	2r'' + 2r'' + 1	2r'' + 1
			4	2	2r + 1	2r'' + r'' + 1	r''
			8	1	2r + r' + 1	r''	r''
			2	4	2r + r' + 1	r''	r''
			4	2	r	r''	r''
			4	2	r	r''	r''
			8	1	r	r''	r''
			8	1	r	r''	r''
			8	1	r	r''	r''

$c = 1, c_3 = 8$ : les plans réticulaires ont pour indices  $(H^0, K^0, L^0) = (8q, 8q', 2q'' + 1)$ .\*

$c = 2, c_3 = 4$ : les plans réticulaires ont pour indices  $(8q + 4, 8q', 2q'' + 1)$  ou  $(8q, 8q' + 4, 2q'' + 1)$  ou  $(8q + 4, 8q' + 4, 2q'' + 1)$ .

$c = 4, c_3 = 2$ :  $(4q + 2, 4q', 2q'' + 1)$ ,  $(4q, 4q' + 2, 2q'' + 1)$ ,  $(4q + 2, 4q' + 2, 2q'' + 1)$ .

$c = 8, c_3 = 1$ :  $(2q + 1, 2q', q'')$ ,  $(2q, 2q' + 1, q'')$ ,  $(2q + 1, 2q' + 1, q'')$ .

2ème type:  $m_1 = 1, m_2 = m_3 = 2$ ; alors  $c = 8/D(H^0, 2K^0, 4L^0)$ .

$c = 2, c_3 = 4$ :  $(4q, 2q', 2q'' + 1)$ .

$c = 4, c_3 = 2$ :

$(4q + 2, 2q', 2q'' + 1)$ ,  $(2q, 2q' + 1, q'')$ .

$c = 8, c_3 = 1$ :  $(2q + 1, q', q'')$ .

3ème type:  $m_1 = 2, m_2 = m_3 = 1$ ; alors  $c = 4/D(H^0, K^0, L^0) = 4$  car  $D(H^0, K^0, L^0) = 1$ . Toutes les familles de plans réticulaires sont conservées de la même façon:  $c = 4, c_3 = 1/2$ .

La conservation des plans réticulaires a été étudiée en utilisant les mailles conventionnelles  $(A^0, B^0, C^0)$  et  $(a^0, b^0, c^0)$ ; les résultats peuvent être transcrits dans les mailles conventionnelles de départ  $(A, B, C)$  et  $(a, b, c)$  car:

$$(H, K, L) = (H^0, K^0, L^0) Q.$$

*Exemple 4 (suite)*: Il existe 155 sous-groupes d'indice 8 (Billiet & Rolley-Le Coz, 1980) répartis en trois classes.

1ère classe: Les 112 sous-groupes de cette classe sont caractérisés par le 1er type de conservation des plans réticulaires. Pour chacun d'entre eux, il est possible de traduire ce type de conservation par rapport aux indices  $(H, K, L)$  relatifs à la maille conventionnelle de départ  $(A, B, C)$  de  $\Gamma(P1)$ ; les résultats figurent au Tableau 2 pour dix sous-groupes de cette première classe.†

2ème classe: Les 42 sous-groupes de cette classe sont caractérisés par le second type de conservation. Pour 4 d'entre eux, les résultats figurent au Tableau 2.

3ème classe: Un seul sous-groupe est caractérisé par le 3ème type de conservation (Tableau 2).

Une telle étude peut être faite pour n'importe quel sous-groupe de n'importe quel indice en s'aidant du programme de diagonalisation *MONIC*.

Nous adressons nos chaleureux remerciements à Monsieur le Professeur Joseph Péresse pour nous avoir aimablement permis d'utiliser l'ordinateur du Laboratoire de Collisions Electroniques et Atomiques (Université de Bretagne Occidentale) et à Monsieur

Richard Tweed, Attaché de Recherche au CNRS, pour nous avoir amicalement conseillé dans l'utilisation de cet ordinateur.

## APPENDICE Programme *MONIC*\*

La première partie du programme *MONIC* permet de calculer, à partir d'une matrice régulière  $S$  à coefficients entiers de dimension  $(n \times n)$ , les matrices  $Q, P$  et  $\Delta$  telles que  $\Delta = QSP$  soit la matrice diagonale canonique décrite dans I.† La méthode utilisée est une 'méthode de pivots'; elle consiste, pour la  $i$ ème étape du travail, à transformer la matrice  ${}_iS$  obtenue lors des transformations précédentes, en une matrice  ${}_iS$  où tous les termes de la  $i$ ème ligne et de la  $i$ ème colonne sont nuls excepté le terme diagonal  ${}_iS_{ii}$ . La mise en oeuvre nécessite l'utilisation de deux sous-programmes; le premier permet de calculer le PGCD de deux nombres entiers  $x$  et  $y$  ainsi qu'un couple de nombres entiers  $a$  et  $\beta$  tels que  $ax + \beta y = D(x, y)$  (relation de Bezout); un autre sous-programme calcule les matrices  ${}_iP$  et  ${}_iQ$  telles que  ${}_iS = {}_iQS {}_iP$  ainsi que la matrice  $({}_iQ)^{-1}$ . Après avoir obtenu une première matrice  ${}_0\Delta$  diagonale, mais non canonique, nous utilisons une variante de la méthode de diagonalisation pour obtenir la matrice  $\Delta$ : à la  $k$ ème étape, nous construisons une matrice  ${}_kS$  dont la  $k$ ème ligne est la somme de la  $k$ ème ligne de la matrice diagonale  ${}_{k-1}\Delta$  obtenue à l'étape précédente et des lignes d'indice respectif  $k + 1, k + 2, \dots, n$  de  ${}_{k-1}\Delta$ . La diagonalisation de  ${}_kS$  permet d'obtenir le coefficient  $d_k$  de  $\Delta$ , ainsi que les matrices  ${}_kP$  et  ${}_kQ$  telles que  ${}_kQS {}_kP = {}_k\Delta$ .

La deuxième partie du programme *MONIC* permet de calculer en dimension 2 et en dimension 3 les coefficients de conservation possibles des rangées réticulaires et en dimension 3 les coefficients de conservation possibles des plans réticulaires (pour les dimensions supérieures à 3, la mise au point du programme correspondant ne présente aucune difficulté).

Un sous-programme optionnel permet l'étude systématique des conservations pour tous les sous-groupes distincts d'indice  $i$ . Un indice  $i$  étant donné, il construit une maille élémentaire de chacun des sous-groupes (cf. Billiet & Rolley-Le Coz, 1980), le programme *MONIC* en calcule alors les coefficients de conservation.

Le programme *MONIC* est écrit en Fortran IV (ASA); il compte environ 220 instructions; il a été exploité sur ordinateur Philips P851.

\*  $q, q', q''$  entiers sont choisis de telle sorte que  $D(H^0, K^0, L^0) = 1$ .

† C'est essentiellement pour ne pas allonger démesurément le mémoire que la liste complète des 155 sous-groupes d'indice 8 et de leurs conditions de conservation réticulaire n'a pas été reproduite ici. Elle peut être fournie par l'auteur sur demande.

\* Le programme *MONIC* peut être fourni par l'auteur sur simple demande.

† La méthode décrite par Bourbaki (1952) permet d'obtenir  $\Delta$ , mais non les matrices  $P$  et  $Q$ .

## Références

- BILLIET, Y. (1979). *Acta Cryst.* **A35**, 485–496.  
 BILLIET, Y. & ROLLEY-LE COZ, M. (1980). *Acta Cryst.* **A36**, 242–248.  
 BOURBAKI, N. (1952). *Eléments de Mathématique. Algèbre. Groupes et Corps Ordonnés, Modules sur les Anneaux Principaux*, N° 1179. Paris: Hermann et Cie.  
 HARKER, D. (1978). *Proc. Natl Acad. Sci. USA*, **75**, 5264–5267.  
 HARTLEY, B. & HAWKES, T. O. (1970). *Rings, Modules and Linear Algebra*. Londres: Chapman and Hall.  
 ROLLEY-LE COZ, M. & BILLIET, Y. (1980). *Acta Cryst.* **A36**, 785–792.

*Acta Cryst.* (1982). **A38**, 117–122

## Phase Extension and Refinement. II. Application to Metmyoglobin 2·0 Å Data

BY GER J. OLTHOF AND HENK SCHENK

Laboratory for Crystallography, University of Amsterdam, Nieuwe Achtergracht 166, 1018WV Amsterdam, The Netherlands

(Received 23 March 1981; accepted 13 July 1981)

### Abstract

The phase refinement and extension procedure of Olthof, Sint & Schenk [*Acta Cryst.* (1979), **A35**, 941–946] is applied to the protein metmyoglobin. Tests show that the procedure is enantiomorph conserving and can be used to improve the resolution.

### Introduction

Convolutional and related equation systems can be used in order to refine and extend phase sets (see, for a recent review article, Sayre, 1980). The most widely accepted is the system based on the tangent formula:

$$\exp(i\varphi_H) = \sum_K E_3 \exp[i(\varphi_K + \varphi_{H-K})] \times \left\{ \left| \sum_K E_3 \exp[i(\varphi_K + \varphi_{H-K})] \right| \right\}^{-1}, \quad (1)$$

with  $E_3 = N^{-1/2} |E_H E_K E_{H-K}|$ . In noncentrosymmetric polar space groups, however, its repeated use tends to favour centrosymmetric solutions and this may well give rise to both enantiomorphs instead of only one.

Enantiomorph-specific methods have been proposed based on a modified tangent formula

$$\exp(i\varphi_H) = \sum_K E_3 \exp[i(\varphi_K + \varphi_{H-K} - s\Delta_3)] \times \left\{ \left| \sum_K E_3 \exp[i(\varphi_K + \varphi_{H-K} - s\Delta_3)] \right| \right\}^{-1}. \quad (2)$$

$s\Delta_3$  is an estimate of

$$\varphi_3 = -\varphi_H + \varphi_K + \varphi_{H-K}.$$

Such methods have been successfully tested for phase extension and refinement (Sint & Schenk, 1975; Busetta, 1976; Olthof, Sint & Schenk, 1979; Olthof & Schenk, 1981*b*) and for the selection of correct phase sets (Olthof & Schenk, 1981*a*). They are based on the idea, originally proposed by Sint & Schenk (1975), that an estimate  $\Delta_3$  can be obtained for the absolute value of the triplet phase sum  $\varphi_3$  from a plot against  $E_3$  of the values of

$$\delta(E_3) = \langle |\varphi_3| \rangle_{E_3}.$$

Here the averaging is performed over  $E_3$  intervals. Reliable values of  $\Delta_3$  are already obtained from a moderately large set of known phases.

Phase refinement can be achieved in an enantiomorph-specific way by selecting the sign  $s$  in the modified tangent expression (2) so as to minimize the value of

$$|-\varphi_H + \varphi_K + \varphi_{H-K} - s\Delta_3|.$$

Olthof, Sint & Schenk (1979) showed for two artificial structures in monoclinic polar space groups with about 400 atoms per unit cell that such a refinement is successful. The unmodified tangent formula (1) was found to lead to centrosymmetric phases within a few refinement cycles.

Phase extension can be achieved by use of either (1) or

$$\Phi(\varphi_H) = \sum_K E_3 |-\varphi_H + \varphi_K + \varphi_{H-K} - s\Delta_3|. \quad (3)$$