Acta Cryst. (1984). **A40**, 572–573

Sous-groupes des Groupes Doubles et des Groupes d'Espace

PAR JEAN SIVARDIÈRE

Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble, DRF/Laboratoire Interactions Hyperfines, 85 *X,* 38041 *Grenoble CEDEX, France*

(*Reçu le* 4 *juin* 1982, *accepté le* 19 *avril* 1984)

Abstract

Double groups G^+ and non-symmorphic space groups G_e have similar algebraic structures. Consequently, their subgroups can be classified along the same criteria and enumerated using the same methods.

Introduction

Les groupes doubles G^+ et les groupes d'espace G_e non symmorphiques ont des structures algébriques très analogues. Un groupe G^+ est l'extension non triviale d'un groupe pontuel G par le groupe $(E, \bar{E})$ formé de l'identité E et de l'opérateur de Bethe $\bar{E}$ ou rotation d'angle 2π (Sivardière, 1968). De même un groupe G_e est l'extension d'un groupe ponctuel G par un groupe abélien de translations T: si l'extension est non triviale, G_e est un groupe non symmorphique; si elle se réduit au produit semi-direct $T\wedge G$, G_e est symmorphique (Sivardière & Bertaut, 1970). Un élément α de G^+ distinct de l'inversion $\bar{1}$ est analogue à une rotation hélicoïdale ou une réflexion avec glissement d'un groupe d'espace G_e non symmorphique: si un élément ponctuel α est d'ordre n dans G, il lui correspond dans G^+ et G_e respectivement des éléments α ou $(\alpha|\tau_\alpha)$ tels que: $\alpha^n = \bar{E}$ ou $(\alpha|\tau_\alpha)^n = (\varepsilon|T)$. On a ainsi une analogie entre les groupes doubles 2^+, 3^+, 4^+, 6^+, 222^+ et les groupes d'espace $P2_1$, $P3_1$, $P4_1$, $P6_1$, $P2_12_12_1$.

On sait (Hermann, 1929) que les sous-groupes des groupes G_e se répartissent en trois catégories:

(*a*) les sous-groupes H_e ayant le même sous-groupe de translations que G_e (*translationengleich*); leur groupe ponctuel H est un sous-groupe de G: s'il est maximal, H_e est un sous-groupe maximal de G_e;

(*b*) les sous-groupes H_e ayant le même groupe ponctuel que G_e (*klassengleich*), leur sous-groupe de translations est un sous-groupe de T: s'il est maximal, H_e est un sous-groupe maximal de G_e;

(*c*) les sous-groupes généraux, qui ne sont jamais maximaux (*allgemein*). Les sous-groupes H_e maximaux d'indice 2 et 4 de la catégorie (*b*) ont été énumérés par Bertaut (1976).

Considérons maintenant les sous-groupes des groupes G^+, énumérés récemment (Gorzkowski & Suffczynski, 1978; Gorzkowski, 1982). Par analogie avec la classification d'Hermann, nous pouvons les classer en trois catégories.

(*a*) Les sous-groupes évidents H^+. Ce sont des groupes doubles: ils contiennent le sous-groupe $(E, \bar{E})$ de G^+; le groupe simple H associé à H^+ est un sous-groupe du groupe simple G associé G^+. Si H est un sous-groupe maximal de G, H^+ est un sous-groupe maximal de G^+; si H est invariant dans G, H^+ est invariant dans G^+.

(*b*) Les sous-groupes 'non évidents' G' ne contenant pas l'opérateur de Bethe $\bar{E}$ (ce ne sont donc pas des groupes doubles) mais contenant soit l'opération α de G^+ soit l'opération $\bar{\alpha} = \alpha\bar{E}$. Ces sous-groupes de G^+ sont des sous-groupes maximaux, invariants d'indice 2: $G^+ = G' + \bar{E}G'$. G' est isomorphe de G.

(*c*) Les sous-groupes 'non évidents' généraux, qui ne contiennent pas $\bar{E}$ et ne sont pas maximaux.

Enumération directe des sous-groupes G'

Un groupe G_e ne peut se décomposer suivant: $G_e = H_e + (\varepsilon|T)H_e$, où $(\varepsilon|T)$ est une translation réticulaire, si un élément $(\alpha|\tau_\alpha)$ de H_e est tel que $(\alpha|\tau_\alpha)^n = (\varepsilon|T)$ (Bertaut, 1976). Cette condition montre que la décomposition est possible si α est une rotation 3_2, 4_2, 6_2, 6_4 parallèle à T ou une rotation non hélicoïdale, et impossible si α est une rotation 2_1, 3_1, 4_1, 4_3, 6_1, 6_3, 6_5; une rotation 3_2 de G_e devient une rotation 3_1 dans H_e; une rotation ${3_1}^4$ de G_e peut se trouver dans H_e, elle devient alors une rotation 3_2 dans H_e.

De même si $G^+ = G' + \bar{E}G'$, un élément α de G' ne peut avoir une de ses puissances égale à $\bar{E}$: si $\alpha^n = \bar{E}$, la décomposition de G^+ ci-dessus est impossible. Cette condition, donnée par Gorzkowski & Suffczynski (1978), est analogue à celle de Bertaut (1976). Elle élimine les axes $n = 2$, 4, 6; si $n = 3$, la rotation d'angle 120° (analogue d'une rotation 3_1 dans un groupe G_e) est éliminée; par contre les rotations d'angle 240 et 480° (analogues des rotations 3_2 et ${3_1}^4$) sont autorisées.

Considérons maintenant le cas d'un groupe G^+ contenant des éléments impropres: seules l'inversion $\bar{1}$ et les rotations inversions de 240 et 480° peuvent appartenir à un sous-groupe non évident G' de G^+. De même l'inversion $\bar{1}$ de G_e peut appartenir à un

0108-7673/84/050572-02$01.50

sous-groupe *klassengleich* de G_e (les rotations $\bar{3}$ ne sont jamais hélicoïdales dans G_e).

Enumération des sous-groupes G' par la méthode des représentations alternantes

Nous avons vu que les sous-groupes G' sont invariants d'indice 2 dans G^+. Par suite ce sont les noyaux des représentations alternantes de G^+ dans lesquelles l'opérateur $\bar{E}$ a le caractère -1. Ces représentations étant connues, on en déduit immédiatement les sous-groupes non évidents G'. De la même manière les sous-groupes invariants d'indice 2 *klassengleich* des groupes d'espace G_e se déduisent des représentations alternantes de G_e associées aux vecteurs **k** invariants dans le groupe ponctuel et dont une coordonnée au moins k_i vaut 1/2.

On obtient ainsi, supposant connues les représentations des groupes doubles (Koster, Dimmock, Wheeler & Statz, 1963), les sous-groupes G' maximaux donnés dans le Tableau 1 en accord avec Gorzkowski & Suffczynski (1978). Les autres groupes G^+ ne possèdent pas de représentation spécifique alternante et donc de sous-groupe non-évident d'indice 2.

Tableau 1. *Les sous-groupes G' maximaux*

G^+	Γ_α	G'
1^+	Γ_2	1
$\bar{1}^+$	Γ_2^+	$1, \bar{1}$
	Γ_2^-	$1, (\bar{\bar{1}})$
3^+	Γ_6	$1, R_{240}, R_{480}$
$\bar{3}^+$	Γ_6^+	$1, R_{240}, R_{480}, \bar{1}, \bar{R}_{240}, \bar{R}_{480}$
	Γ_6^-	$1, R_{240}, R_{480}, \bar{\bar{1}}, \bar{R}_{-240}, \bar{R}_{-480}$

Les propriétés des classes des groupes G_e et G^+, comme celles de leurs sous-groupes sont également très analogues (Sivardière, 1978).

Références

BERTAUT, E. F. (1976). *Acta Cryst.* **A32**, 976–983.
GORZKOWSKI, W. (1982). *Acta Cryst.* **A38**, 221–223.
GORZKOWSKI, W. & SUFFCZYNSKI, M. (1978). *Bull. Acad. Pol. Sci.* **26**, 563–566.
HERMANN, C. (1929). *Z. Kristallogr.* **69**, 533–555.
KOSTER, G. F., DIMMOCK, J. D., WHEELER, R. G. & STATZ, H. (1963). *Properties of the Thirty-two Point Groups.* Cambridge: MIT Press.
SIVARDIÈRE, J. (1968). *C.R. Acad. Sci.* **266**, 453–455.
SIVARDIÈRE, J. (1978). *Acta Cryst.* **A34**, 895–900.
SIVARDIÈRE, J. & BERTAUT, E. F. (1970). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **93**, 515–526.

Acta Cryst. (1984). **A40**, 573–580

Sous-Groupes des Groupes d'Espace et Groupes à Trois Couleurs

PAR JEAN SIVARDIÈRE

Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble, DRF/Laboratoire Interactions Hyperfines, 85 *X,* 38041 *Grenoble CEDEX, France*

(*Reçu le* 6 *Septembre* 1982, *accepté le* 19 *avril* 1984)

Abstract

Various means of enumerating the three-dimensional three-colored space groups are discussed: a direct algebraic method equivalent to the Zachariasen method, an induction method, and a technique using the third-order cyclic representations of the ordinary space groups.

Notations

- G Groupe ponctuel ordinaire
- H Sous-groupe invariant de G
- H' Sous-groupe non invariant de G
- G_3 Groupe ponctuel à trois couleurs
- G_e Groupe d'espace ordinaire, de classe G
- T Réseau de G_e
- H_e Sous-groupe invariant de G_e
- H'_e Sous-groupe non invariant de G_e
- T_3 Réseau à trois couleurs isomorphes de T
- T_k Réseau des translations monocolores de T_3
- G_{e3} Groupe d'espace à trois couleurs, isomorphe de G_e

Introduction

Les groupes d'espace à deux couleurs, ou groupes de Shubnikov, permettent de décrire de nombreux phénomènes d'ordre dans les cristaux: surstructures *AB*, ordre magnétique, macles (Curien & Le Corre, 1958). De la même manière, les groupes d'espace à trois couleurs, ou groupes de Belov, permettent de décrire les surstructures *ABC* dans les alliages et solutions solides (Harker, 1981), les phénomènes d'ordre dans les cristaux moléculaires où des molécules peuvent avoir trois orientations privilégiées, les transitions de phases au cours

0108-7673/84/050573-08$01.50