

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.

Acta Cryst. (1984). **A40**, 573–580

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; ($\bar{1}$)
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} , $\bar{1}$, \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.
 SIVARDIERE, J. (1968). *C.R. Acad. Sci.* **266**, 453–455.
 SIVARDIERE, J. (1978). *Acta Cryst.* **A34**, 895–900.
 SIVARDIERE, J. & BERTAUT, E. F. (1970). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **93**, 515–526.

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

PAR JEAN SIVARDIERE

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.

T_3 Réseau à trois couleurs isomorphes de T
 T_k Réseau des translations monocolors de T_3
 G_{e3} Groupe d'espace à trois couleurs, isomorphe de G_e

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

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

desquelles apparaissent trois domaines ou macles (Sivardière, 1981), la symétrie des interactions hyperfines (Kolpakov, Ovchinnikova & Kuzmin, 1977).

L'énumération exhaustive des groupes de Belov a été déjà réalisée (Harker, 1976, 1981). Dans le présent article, nous examinons tout d'abord quelques propriétés des groupes ponctuels et d'espace à trois couleurs, puis nous discutons diverses méthodes d'énumération des groupes de Belov.

Groupes ponctuels à trois couleurs

1. Supposons tout d'abord qu'à une opération géométrique ne puisse être associée qu'une permutation cyclique des trois couleurs. Un groupe G_3 à trois couleurs, isomorphe d'un groupe ponctuel G monocouleur, est associé à un sous-groupe invariant H d'indice 3 de G , et par suite à une décomposition de G en trois complexes:

$$G = H + C_1 + C_2.$$

Dans G_3 , les opérations de H ne modifient pas les couleurs; aux opérations de C_1 est associée la permutation cyclique $P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$ des couleurs, et aux opérations de C_2 , la permutation cyclique $P_2 = P_1^2 = P_1^{-1}$. Le rôle des permutations P_1 et P_2 pouvant être inversé, on peut associer en fait au couple (G, H) deux groupes conjugués G_3 et G_3^* isomorphes de G (paire de Koptsik).

Pour énumérer les groupes G_3 , on doit donc rechercher les sous-groupes invariants H_j d'indice 3 des 32 groupes ponctuels G (Harker, 1976). De manière équivalente (Indenbom, Belov & Neronova, 1960; Niggli & Wondratschek, 1960), on peut rechercher les représentations unidimensionnelles Γ_j cycliques d'ordre trois des groupes G . Le noyau d'une représentation Γ_j de ce type est en effet un sous-groupe H_j invariant d'indice 3; deux groupes G_3 et G_3^* conjugués sont associés à deux représentations Γ_j et Γ_j^* complexes conjuguées.

Remarquons que les groupes ponctuels G_3 peuvent également être construits par induction à partir des groupes cycliques $3^{(3)}$, $6^{(3)}$, et $\bar{6}^{(3)}$, en leur adjoignant un nouveau générateur a conservant leurs éléments (Sivardière & Bertaut, 1970). Si a est l'inversion $\bar{1}$, on obtient ainsi les produits directs $\bar{3}^{(3)} = 3^{(3)} \times \bar{1}$ et $6^{(3)}/m = 6^{(3)} \times \bar{1}$. Si a est un miroir contenant l'axe d'ordre 3 ou 6, ou un axe binaire perpendiculaire, aucun groupe G_3 ne peut être obtenu. On construit enfin, en partant des groupes 222 et mmm , les produits semi-directs $23^{(3)} = 222_A 3^{(3)}$ et $m3^{(3)} = 23^{(3)} \times \bar{1}$ ou $mmm_A 3^{(3)}$ à l'aide du nouveau générateur coloré $a = 3^{(3)}$. Il n'existe aucune autre possibilité.

2. Supposons maintenant qu'à une opération géométrique puisse être associée une permutation quelconque des trois couleurs. Un groupe G_3 à trois couleurs peut être construit à partir de G si G possède

Tableau 1. Sous-groupes d'indice 3 et 6 des groupes ponctuels G et représentations associées

H est un sous-groupe invariant de G , d'indice 3 (colonne de gauche) ou 6 (colonne de droite), H' est un sous-groupe non invariant.

G	H	Γ	G	H'	H	Γ
3	1	E	32	2	1	E
$\bar{3}$	$\bar{1}$	E_R^*	$3m$	m	1	E
6	2	E''	$\bar{3}m$	$2/m$	$\bar{1}$	E_R^*
$\bar{6}$	m	E''	622	222	2	E_2
$6/m$	$2/m$	E_R^*	$6mm$	$2mm$	2	E_2
23	222	E	$\bar{6}2m$	$m2m$	m	E_2
$m3$	mmm	E_R	$6/mmm$	mmm	$2/m$	E_R^*
			432	422	222	E
			$\bar{4}3m$	$\bar{4}2m$	222	E
			$m3m$	$4/mmm$	mmm	E_R

un sous-groupe H' d'indice 3 non invariant. Il existe alors deux sous-groupes H'' et H''' conjugués de H' dans G : les trois sous-groupes ont en commun un sous-groupe H invariant d'indice six tel que le groupe facteur G/H est isomorphe du groupe 32 ou groupe de toutes les permutations de trois couleurs.

Pour énumérer ces nouveaux groupes G_3 , on doit donc rechercher tous les sous-groupes d'indice 3 non invariants des groupes ponctuels. On peut aussi construire les groupes G_3 , c'est-à-dire les couples (G, H') , par induction: on ajoute aux éléments d'un groupe H' un axe ternaire qui ne les laisse pas globalement invariants, mais tel que l'ensemble obtenu reste un groupe fini. Par exemple, si $H' = 2, m, 2/m$, on ajoute un axe 3 perpendiculaire à l'axe 2 ou parallèle au miroir; si H' est orthorhombique, on ajoute un axe 3 parallèle à un axe binaire, etc. On peut aussi rechercher des sous-groupes invariants H d'indice 6, tels que $G/H \approx 32$, ou encore les représentations de type E , isomorphes de 32, qui se rencontrent dans les groupes diédriques et cubiques ($432 = 222_A 32$ par exemple). Le Tableau 1 résume les résultats.

Groupes d'espace à trois couleurs

Pour énumérer les groupes de Shubnikov, on doit rechercher les sous-groupes (invariants) d'indice 2 des groupes d'espace (Belov, Neronova & Smirnova, 1957; Zamorzaev, 1963; Opechowski & Guccione, 1965).

De même pour énumérer les groupes d'espace G_{e3} à trois couleurs (Zamorzaev, 1969; Harker, 1981), on doit rechercher les sous-groupes d'indice 3 des 230 groupes d'espace. Ces sous-groupes sont maximaux mais non nécessairement invariants. Deux cas sont possibles.

(1) Le sous-groupe H_e du groupe d'espace G_e a le même réseau T que G_e , son groupe ponctuel H est un sous-groupe d'indice 3 du groupe ponctuel G de G_e : c'est un sous-groupe du type 'isotranslation' (Hermann, 1929). Dans ce cas, G_{e3} a un réseau T_3 monocouleur identique à T , son groupe ponctuel G_3 est coloré.

Tableau 2. Les réseaux à trois couleurs

G est un groupe ponctuel qui laisse T_3 invariant.

Système	Réseau T monocouleur de maille (a, b, c)	Réseau T_3 coloré	G admissible	Réseau T_k	k
Triclinique	P	P_{3c}	1	$P(a, b, 3c)$	$[00\frac{1}{3}]$
Monoclinique	P	P_{3c}	2	$P(a, b, 3c)$	$[00\frac{1}{3}]$
		P_{3a}	m	$P(3a, b, c)$	$[\frac{1}{3}00]$
		B_{3c}	2	$B(a, b, 3c)$	$[00\frac{1}{3}]$
	B	B_{3b}	m	$B(a, 3b, c)$	$[0\frac{1}{3}0]$
		B_{3a}	m	$B(3a, b, c)$	$[\frac{1}{3}00]$
		P_{3c}	$mm2$	$P(a, b, 3c)$	$[00\frac{1}{3}]$
Orthorombique	C	C_{3c}	$mm2$	$C(a, b, 3c)$	$[00\frac{1}{3}]$
	B	B_{3c}	$mm2$	$B(a, b, 3c)$	$[00\frac{1}{3}]$
	F	F_{3c}	$mm2$	$F(a, b, 3c)$	$[00\frac{1}{3}]$
	I	I_{3c}	$mm2$	$I(a, b, 3c)$	$[00\frac{1}{3}]$
	P	P_{3c}	4, 4 mm	$P(a, b, 3c)$	$[00\frac{1}{3}]$
Quadratique	I	I_{3c}	4, 4 mm	$I(a, b, 3c)$	$[00\frac{1}{3}]$
		$R_{3b} = R_{3a, 3b, 3c}$	3, 3 m	$P(3a, 3b, 3c)$	$[\frac{1}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{3}]$
Hexagonal	P	P_{3c}	3, 3 $m1, 31m, 6, 6mm$	$P(a, b, 3c)$	$[00\frac{1}{3}]$
		P_{3a}	3, 3 $m, 321, 6, 62m$	$P(2a + b, a - b, c)$	$[\frac{1}{3}\frac{1}{3}0]$
		$P_{3r} = P_{3a, 3b, 3c}$	3, 3 m	$R(2a + b, a - b, 3c)$	$[\frac{1}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{3}]$

Si H est invariant dans G , H_e est invariant dans G_e . G est alors l'un des groupes 3, $\bar{3}$, 6, $\bar{6}$, $6/m$, 23, $m\bar{3}$. Il existe 27 groupes G_e ayant un tel groupe ponctuel: il leur correspond 27 groupes G_{e3} de réseau monocouleur.

Si H n'est pas invariant dans G (il est alors noté H'), H_e n'est pas invariant dans G_e (et sera noté H'_e). C'est le cas si $G = 32, 3m, \bar{3}m, 622, 6mm, \bar{6}2m, 6/mmm, 432, \bar{4}3m, m\bar{3}m$. Il existe 61 groupes G_e de ce type et il leur correspond 61 groupes G_{e3} de réseau monocouleur; par exemple, $G_e = P\bar{3}1m$, $H'_e = C2/m$ et H_e (invariant d'indice 6) = $P\bar{1}$.

(2) Le sous-groupe H_e de G_e est un sous-groupe 'isoclasse' de G_e , son réseau T_k est un sous-groupe d'indice 3 de T . Le groupe G_{e3} associé a pour réseau l'un des 17 réseaux T_3 à trois couleurs. H_e est un sous-groupe maximal, il peut être invariant ou non: $H_e = P2_z$ (maille $a, b, 3c$) est invariant dans $G_e = P2(a, b, c)$; $H'_e = P\bar{1}(a, b, 3c)$ n'est pas invariant dans $G_e = P\bar{1}(a, b, c)$ et alors H_e (invariant d'indice 6) = $P1(a, b, 3c)$.

Pour que H_e soit invariant dans G_e , il suffit que le réseau T_3 , formé de plans empilés de couleurs successives 1, 2, 3, 1, ..., soit invariant dans le groupe ponctuel G . Une telle situation est évidemment impossible en symétrie cubique ou si G est centrosymétrique. Elle est par contre possible si G est pyroélectrique (axes et miroirs perpendiculaires aux plans réticulaires de couleurs alternées) ou si le réseau T_3 est hexagonal est de type $P_{3a} = P_{3a, 3b, 3c}$ ($G = 321, \bar{6}$ ou $\bar{6}2m$). Dans le cas du réseau hexagonal $P_{3r} = P_{3a, 3b, 3c}$, le groupe G admissible est nécessairement pyroélectrique du fait du triplement de la maille suivant c . On remarque que les réseaux T de G_e et T_k de H_e sont de même type, sauf si T_3 est de type R_{3h} (alors le réseau T_k est de type P) ou P_{3r} (alors

T_k est de type R). Le Tableau 2 décrit les réseaux T_3 . L'indice $3a, 3b, 3c$ décrit un triplement de la maille suivant a, b, c ; si T n'est pas primitif, un tel triplement implique que certaines translations non entières sont colorées.

Le réseau T_3 , isomorphe de T , n'est pas invariant dans G si G est cubique ou centrosymétrique, ou si la succession des plans colorés de T_3 ne se fait pas parallèlement à l'axe principal de G . Alors, il existe un sous-groupe H'_e d'indice 3 non invariant, de classe G et de réseau T_k (en général de même type que T). H'_e et les sous-groupes H''_e et H'''_e conjugué sont de même symbole; leur intersection H_e , sous-groupe invariant d'indice 6, a pour réseau T_k et groupe ponctuel le sous-groupe H des éléments de G qui conservent les réseaux T_k et T_3 . Par exemple, si $G_e = P222$ et $T_3 = P_{3c}$, $H'_e = P222(a, b, 3c)$ et $H_e = P112(a, b, 3c)$.

Enumération directe des sous-groupes isoclasse d'indice 3 des groupes d'espace

Pour chercher les sous-groupes H_e (ou H'_e) d'indice 3 isoclasse des groupes d'espace G_e , nous utilisons une démarche déjà suivie pour les sous-groupes d'indice 2 (Bertaut, 1976). Nous supposons connus les réseaux à trois couleurs (Zamorzaev, 1969) et nous recherchons la possibilité de ne conserver du réseau T de G_e que les translations monocouleur T_k d'un réseau T_3 isomorphe de T . Alors, H_e étant un sous-groupe d'indice 3 de même classe G que G_e , G_e se décompose suivant:

$$G_e = H_e + (\varepsilon|t)H_e + (\varepsilon|2t)H_e$$

$(\varepsilon|t)$ n'appartenant pas à T_k .

Tableau 3. Possibilité de triplement de la maille de G_e parallèlement à un axe (α/τ_α)

Axe (α/τ_α)	Condition $n_\alpha p_\alpha = 3t$	p	α dans G_e	α dans H_e
2	$2p = 3t$	0,3	2	2
	$2p = 3t$	3/2	2_1	2_1
3	$3p = 3t$	0	3	3
	$3p = 3t$	1	3	3_1
		2	3	3_2
4	$4p = 3t$	0	4	4
		3/4	4_3	4_1
		3/2	4_2	4_2
		9/4	4_1	4_3
		6	6	6
6	$6p = 3t$	0	6	6
		1/2	6_3	6_1
		1	6	6_2
		3/2	6_3	6_3
		2	6	6_4
		5/2	6_3	6_5

n_α étant l'ordre de la rotation α de G et p la composante de τ_α suivant α , un élément (α/τ_α) de G_e ne peut appartenir à H_e que si la translation $(\alpha/\tau_\alpha)^{n_\alpha} = (\varepsilon/n_\alpha p)$ appartient à T_k et est donc de la forme $(\varepsilon/0, 0, 3t)$ modulo une translation de T_k . Cette remarque permet de savoir si la décomposition de G_e ci-dessus est possible quand un axe, hélicoïdal ou non, (α/τ_α) est parallèle à la direction de triplement de la maille; pour qu'il en soit ainsi il peut arriver que la translation τ_α ne puisse être choisie intérieure à la maille élémentaire de T .

(1) Le Tableau 3 montre que la décomposition est possible pour des axes 2, 2_1 , 3, 4, 4_1 , 4_2 , 4_3 , 6, 6_3 . On vérifie qu'elle est également possible pour des miroirs avec glissement parallèle à la direction de triplement de la maille.

Plus précisément si $G_e = P2_1$, l'axe $[2_z|001/2]$ ne peut se trouver dans un sous-groupe H_e de maille $(a, b, 3c)$ qui contient au contraire l'axe hélicoïdal $[2_z|003/2]$ (axe 2_1 dans H_e). De même si $G_e = P4_1$, l'axe $[4_z|001/4]$ n'est pas contenu dans H_e isoclasse, qui contient au contraire l'axe $[4_z|003/4]$; cet axe est un axe 4_1 dans H_e .

(2) Si (α/τ_α) est un axe 3, 6 ou 6_3 , il existe plusieurs choix possibles pour τ_α autorisant un triplement de la maille parallèlement à cet axe, et par la suite plusieurs sous-groupes (non conjugués) H_e de G_e . Le Tableau 4 indique les sous-groupes H_e (ou H'_e) obtenus à partir des groupes G_e de classe 6.

(3) L'existence d'axes 3_1 , 3_2 , 6_1 , 6_2 , 6_4 , ou 6_5 ne permet pas un triplement de la maille selon leur direction.

La condition $n_\alpha p = 3t$ ci-dessus est nécessaire mais non suffisante si G n'est pas un groupe cyclique. Si α et β sont deux générateurs de G , tels que $\alpha^{i_\alpha} \cdot \beta^{j_\beta} = \varepsilon$, toute combinaison des éléments correspondants (α/τ_α) et (β/τ_β) de G_e , en particulier la translation $(\alpha/\tau_\alpha)^{i_\alpha} \cdot (\beta/\tau_\beta)^{j_\beta}$ doit appartenir à T_k . Par exemple, si (α/τ_α) est une rotation et $(\beta/\tau_\beta) = (\beta/0)$ une inversion de centre supposé situé à l'origine, la translation $2\tau_\alpha$ doit appartenir à T_k . Par exemple, si $G_e = P4_2/n$,

Tableau 4. Sous-groupes H_e et H'_e des groupes G_e de classe 6

G_e	Maille triple	H_e	$H'_e(H_e)$
$P6$	$a, b, 3c$	$P6, P6_2, P6_4$	$P6 (P3)$
$P6_1$	$3a, 3b, c$		$P6_1 (P3_1)$
$P6_2$	$3a, 3b, c$		$P6_2 (P3_2)$
$P6_3$	$a, b, 3c$	$P6_1, P6_3, P6_5$	
	$3a, 3b, c$		$P6_3 (P3)$
$P6_4$	$3a, 3b, c$		$P6_4 (P3_1)$
$P6_5$	$3a, 3b, c$		$P6_5 (P3_2)$

la rotation $(4_z|0 1/2 1/2)$ ne peut être conservée dans un sous-groupe de classe $4/m$; par contre, la rotation $(4_z|0 1/2 3/2)$ peut l'être et y devient une axe 4_2 .

Sous-groupes isosymboliques

Un sous-groupe H_e (ou H'_e) de G_e obtenu suivant les règles ci-dessus n'est pas nécessairement invariant dans G_e : pour qu'il le soit, il faut que son réseau soit invariant dans G . Cherchons par ailleurs dans quel cas le sous-groupe et G_e lui-même sont isosymboliques (Billiet, 1973; Bertaut & Billiet, 1979): c'est toujours le cas, sauf si $G = 4$ ou si G est rhomboédrique ou hexagonal.

(1) Il faut que les réseaux de H_e et G_e soient de même nature, ce qui exclut le cas où G_e possède un réseau rhomboédrique ou un réseau hexagonal (cas où la maille triple est $3a, 3b, 3c$).

(2) Si G_e est symmorphique, on peut tripler la maille suivant une direction quelconque. On construit ainsi des sous-groupes de G_e (voir le Tableau 4 pour le groupe $P6$), dont un pour chaque maille triple est isosymbolique, sauf en symétrie trigonale: si la maille triple est $(3a, 3b, c)$, la maille de H_e n'a pas la même orientation que celle de G_e .

(3) Comme le montre le Tableau 3, les groupes $(P4_1, P4_3)$ ou $(P4_3, P4_1)$ ne sont pas isosymboliques mais énantiomorphes.

(4) Finalement, si on triple la maille perpendiculairement à toutes les translations τ_α , on obtient un sous-groupe isosymbolique. Ainsi, $G_e = P6_1$ et $H_e = P6_1$ (maille triple $3a, 3b, c$). Mais cette condition suffisante n'est pas nécessaire si G_e contient des axes 4_2 ou 6_3 parallèles à la direction de triplement de la maille (Tableau 3). Ainsi $G_e = P4_2/mnm$ et $H_e = P4_2/mnm$ (triplément de la maille suivant c , cas de la structure trirutile), ou $G_e = P6_3/m$ et $H_e = P6_3/m$.

Remarques:

L'énumération des groupes G_{e3} peut s'effectuer de manière directe, comme celle des groupes d'espace (Zachariasen, 1951) et des groupes magnétiques (Sivardière, 1970): connaissant les groupes ponctuels G et G_3 , nous en cherchons les extensions G_{e3} possibles par les 14 réseaux de Bravais T et les 17 réseaux à trois couleurs T_3 , sans supposer connus auparavant

les groupes G_e isomorphes. Partant des relations entre générateurs α, β, \dots de G ou G_3 :

$$\alpha^i \beta^j \dots = \varepsilon$$

nous écrivons qu'elles restent vraies entre les générateurs correspondants de G_{e3} modulo une translation monocouleur.

(1) Si le réseau T utilisé est monocouleur, le groupe ponctuel de G_{e3} doit être coloré. Or, à chaque groupe G correspond au plus un seul groupe G_3 isomorphe caractérisé par les mêmes relations entre générateurs. Par conséquent, la recherche des groupes G_{e3} de classe G_3 et de réseau T s'effectue comme celle des groupes G_e de classe G et de réseau T . Comme il existe 27 groupes G_e de classe 3, 6, $\bar{6}$, $\bar{3}$, $6/m$, 23 et $m3$, il existe 27 groupes G_{e3} ayant une classe à trois couleurs.

(2) Si le réseau T_3 utilisé est à trois couleurs, un groupe G_{e3} de réseau T_3 est obtenu à partir de chaque groupe d'espace H_e de classe G et de réseau T_k , extension de G par T_k , en lui adjoignant les translations colorées de $T - T_k$. Cette méthode est bien sûr équivalente à la précédente: au lieu de chercher un sous-groupe H_e d'indice 3 de G_e , de réseau T_k , on cherche directement un groupe H_e de réseau T_k et on obtient G_e en complétant H_e par les translations de $T - T_k$. Considérons, par exemple, le réseau T_k de maille $(a, b, 3c)$ et le groupe $G = 4$. Les groupes H_e possibles sont $P4_3, P4_1, P4_2$ et $P4_3$ d'où, en ajoutant les translations c et $2c$, les surgroupes $G_e = P4, P4_3, P4_2$, et $P4_1$ respectivement.

La notation de G_{e3} selon Belov est T_3G . La notation d'Opechowski & Guccione (1965) (OG) est obtenue en ramenant les translations τ_α des générateurs (α/τ_α) de H_e à la maille élémentaire de T : des éléments colorés apparaissent alors dans le symbole ponctuel. De cette notation, on déduit G_e en supprimant les indications de couleur, d'où le symbole de Harker pour G_{e3} : $G_e(T_3)H_e$.

Par exemple (Tableau 5) si $H_e = P4_3$ (maille $a, b, 3c$), $G_e = P4_1$ et $G_{e3} = P_{3c}4_3$ en notation de Belov. Si on se ramène à la maille (a, b, c) , la notation est celle d'OG: $P_{3c}4_1^{(3)}$. Cherchons également les groupes G_{e3} de classe 3 et de réseau $T_3 = P_{3c}$. On obtient aisément les groupes H_e : $P3, P3_1$, et $P3_2$ auxquels correspondent les groupes G_{e3} suivants: $P_{3c}3, P_{3c}3^{(3)}$ et $P_{3c}3^{(3)}$ (OG). De même si $H_e = Pca2_1$ (maille $a, b, 3c$), $G_e = Pca2_1$, $G_{e3} = P_{3c}ca2_1$ (Belov) ou $P_{3c}c^{(3)}a2_1^{(3)}$ (OG). L'exposant (3) signifie qu'à l'opération ternaire est associée la permutation P_2 des trois couleurs alors que la permutation P_1 est associée à la translation c .

Notons enfin que si G possède un groupe à trois couleurs isomorphe G_3 , on peut rechercher des groupes G_{e3} comme extension de G_3 par T_k . Si par exemple $G_3 = 3^{(3)}$, on doit avoir:

$$(3^{(3)}100\tau)^3 = (\varepsilon|003)$$

Tableau 5. Groupe G_{e3} de réseau quadratique P_{3c} et de classe isomorphe du groupe 4

H_e	$P4$	$P4_1$	$P4_2$	$P4_3$
G_e	$P4$	$P4_3$	$P4_2$	$P4_1$
G_{e3} (Belov)	$P_{3c}4$	$P_{3c}4_1$	$P_{3c}4_2$	$P_{3c}4_3$
G_{e3} (OG)	$P_{3c}4$	$P_{3c}4_3$	$P_{3c}4_2^{(3)}$	$P_{3c}4_1^{(3)}$
G_{e3} (Harker)	$P4(3c)P4$	$P4_3(3c)P4_1$	$P4_2(3c)P4_2$	$P4_1(3c)P4_3$

d'où: $\tau = 0$, G_{e3} est le groupe $P_{3c}3^{(3)}$ obtenu dans l'exemple ci-dessus. Si G_3 est le groupe conjugué de $3^{(3)}$, on obtient de même le groupe $P_{3c}3^{(3)}$.

Enumération des groupes G_{e3} par induction

Cette méthode, déjà utilisée pour les groupes d'espace et les groupes magnétiques (Sivardière, 1975), complète la méthode directe précédente qui fournit aisément les groupes de classe cyclique: ces groupes étant connus, on cherche à leur adjoindre de nouveaux éléments qui laissent invariant chacun de leurs éléments.

(1) Si le réseau est monocouleur, on peut ajouter un centre de symétrie. On obtient ainsi les seuls groupes:

$$P\bar{3} = P3^{(3)} \times \bar{1}$$

$$R\bar{3}^{(3)} = R3^{(3)} \times \bar{1}$$

$$P6/m = P6^{(3)} \times \bar{1}$$

$$P6_3^{(3)}/m = P6_3^{(3)} \times \bar{1}.$$

(On ne peut en effet ajouter un centre de symétrie à un groupe de réseau P possédant des axes $3_1, 3_2, 6_1, 6_2, 6_4$, ou 6_5 .) Partant enfin des groupes monocouleurs de classe 222 ou mmm dans lesquels les trois axes binaires ou les trois miroirs jouent des rôles équivalents, on obtient les groupes:

$$P23^{(3)} = P222_A 3^{(3)}$$

$$F23^{(3)} = F222_A 3^{(3)}$$

$$I23^{(3)} = I222_A 3^{(3)}$$

$$P2_1 3^{(3)} = P2_1 2_1 2_1 3^{(3)}$$

$$I2_1 3^{(3)} = I2_1 2_1 2_1 3^{(3)}$$

$$\text{et } Pm3^{(3)} = Pmmm_A 3^{(3)}$$

$$Pn3^{(3)} = Pnnn_A 3^{(3)}$$

$$Fm3^{(3)} = Fmmm_A 3^{(3)}$$

$$Fd3^{(3)} = Fddd_A 3^{(3)}$$

$$Im3^{(3)} = Immm_A 3^{(3)}$$

$$Pa3^{(3)} = Pbca_A 3^{(3)}$$

$$Ia3^{(3)} = Ibca_A 3^{(3)}.$$

(2) Partons maintenant des groupes cycliques de réseau T_3 tricolore. Le réseau devant être laissé

invariant par les éléments ponctuels nouveaux, on ne peut évidemment ajouter un centre de symétrie. Si par exemple $T_3 = P_{3c}$, seuls des miroirs m parallèles à l'axe c peuvent être introduits. Partant de $G_{e3} = G_3(3c)H_e$, on construit un groupe \tilde{H}_e en complétant H_e par un miroir m , d'où un surgroupe \tilde{G}_e de G_e et le surgroupe $\tilde{G}_{e3} = \tilde{G}_e(3c)\tilde{H}_e$ de G_{e3} . Ainsi, le groupe $G_{e3} = P6_3(3c)P6_1$ ne possède pas de surgroupe de classe $6mm$, alors que $P6_3(3c)P6_3$ possède les surgroupes $P6_3cm(3c)P6_3cm$ et $P6_3mc(3c)P_3mc$. Le Tableau 6 indique les surgroupes des groupes G_{e3} de réseau P_{3c} et P_{3a} et de classe 3.

Énumération des groupes G_{e3} par la méthode des représentations

Pour énumérer les groupes d'espace magnétiques, on peut utiliser les représentations alternantes des groupes d'espace (Bertaut, 1968; Sivardière, 1969, 1973). De la même manière, pour énumérer les groupes G_{e3} isomorphes d'un groupe G_e et tels que H_e soit invariant d'indice trois dans \tilde{G}_e , on peut utiliser les représentations cycliques d'ordre 3 de G_e , dont les noyaux sont des sous-groupes H_e (Koptsik & Kuzhukeev, 1973); nous explicitons ici cette méthode.

Une représentation Γ_{*k_i} d'un groupe G_e est construite à partir d'une représentation $\Delta_k(\varepsilon|t) = \exp i \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}$.

Pour qu'elle soit unidimensionnelle, il faut que le vecteur \mathbf{k} soit invariant dans G :

$$\alpha \mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{K} \quad \forall \alpha \in G.$$

Alors l'étoile $*k$ des vecteurs équivalents à \mathbf{k} dans G se réduit à \mathbf{k} , et $\Gamma_{*k_i} = \Gamma_{k_i}$ s'identifie à Δ_k pour les éléments de T . On veut de plus que $\Gamma_{k_i}(\alpha|\tau_\alpha) = 1, j = \exp 2\pi i/3$ ou j^2 ; cette deuxième condition implique $k_x, k_y, k_z = 0, 1/3$.

Si $\mathbf{k} = 0$, Γ_{0i} est engendrée par une représentation $\Gamma_i = \Gamma_3$ cyclique d'ordre 3 du groupe ponctuel G , s'il en existe une (ce qui implique: $G = 3, 6, \bar{6}, \bar{3}, 6/m, 23$ ou $m3$). Le groupe G_{e3} associé à Γ_{03} a un groupe ponctuel coloré G_3 isomorphe de G , et son réseau est monocoloré: on peut noter G_{e0}^i les groupes colorés de ce type.

Si $\mathbf{k} \neq 0$, les deux conditions ci-dessus déterminent les réseaux T_3 à trois couleurs et les groupes ponctuels G correspondants (Tableau 2). En particulier l'invariance de \mathbf{k} élimine tous les groupes cubiques.

(a) Dans un système non hexagonal, puisque $k_i = 0$ ou $1/3$, on ne peut avoir que: $\alpha \mathbf{k} = \mathbf{k}$ ($\mathbf{K} = 0$). \mathbf{k} étant un vecteur polaire, cette condition signifie que G doit être un groupe pyroélectrique et fixe les directions possibles de \mathbf{k} dans chaque système.

– En triclinique, \mathbf{k} a une direction quelconque et l'on peut toujours trouver un rangée c parallèle à \mathbf{k} .

– En monoclinique, \mathbf{k} est parallèle à l'axe binaire 2_c ou parallèle au miroir m_{ab} .

Tableau 6. *Surgroupes des groupes G_{e3} de classe 3 et de réseau P_{3a} ou P_{3c}*

G_{e3} est donné en notation de Belov, \tilde{G}_{e3} en notation plus explicite de Harker.

H_e	G_{e3}	G_e	\tilde{H}_e	\tilde{G}_{e3}
$P3$	$P_{3c}3$	$P3$	$P3m1$ $P31m$ $P3c1$ $P31c$	$P3m1(3c)P3m1$ $P31m(3c)P3m1$ $P3c1(3c)P3c1$ $P31c(3c)P31c$
	$P_{3a}3$	$P3$	$P3m1$ $P3c1$ $P312$	$P31m(3a)P3m1$ $P31c(3a)P3c1$ $P321(3a)P312$
$P3_1$	$P_{3c}3_1$ $P_{3a}3_1$	$P3_1$	$P3_12$	$P3_121(3a)P3_12$
$P3_2$	$P_{3c}3_2$ $P_{3a}3_2$	$P3_2$	$P3_212$	$P3_212(3a)P3_212$

– Dans les autres systèmes, \mathbf{k} est parallèle à l'axe polaire.

(b) Dans le système hexagonal, $\mathbf{k}_1 = [00\ 1/3]$ est invariant ($\mathbf{K} = 0$) si G est pyroélectrique ($3, 3m, 6, 6mm$). Il faut aussi envisager $\mathbf{k}_2 = [1/3\ 1/3\ 0]$ et $\mathbf{k}_3 = [1/3\ 1/3\ 1/3]$. \mathbf{k}_3 ne peut être invariant que si G est pyroélectrique; par contre, \mathbf{k}_2 est invariant également si $G = 32, \bar{6}, \bar{6}2m$ (l'axe binaire étant parallèle à \mathbf{k}).

Nous supposons dorénavant \mathbf{k} non nul et invariant dans G . \mathbf{k} étant intérieur à la première zone de Brillouin, on a:

$$\Gamma_{ki}(\alpha|\tau_\alpha) = \Gamma_i(\alpha) e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \tau_\alpha},$$

Γ_i étant une représentation unidimensionnelle de G qui est soit l'identité Γ_1 , soit une représentation cyclique Γ_3 d'ordre 3, soit une autre représentation unidimensionnelle Γ_i de G .

1^{er} cas: G_e est symmorphique ou tel que les translations τ_α sont toutes perpendiculaires à \mathbf{k} . Alors le facteur de phase $e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \tau_\alpha}$ est égal à l'unité et il faut choisir pour Γ_i soit la représentation identité, soit une représentation cyclique Γ_3 d'ordre 3, si elle existe. Les groupes colorés correspondants sont uniques et notés respectivement G_{ek}^1 et G_{ek}^3 .

Considérons, par exemple, les groupes de classe $mm2$ pour $\mathbf{k} = [00\ 1/3]$. Les groupes G_e suivants fournissent chacun un groupe G_{ek}^1 dont le symbole de Harker est $G_e(3c)G_e$, et dont les notations de Belov et OG ont le même symbole ponctuel coloré:

$$Pmm2, Pma2, Pba2, Cmm2,$$

$$Amm2, Ama2, Abm2, Aba2$$

$$Fmm2, Imm2, Iba2, Ima2.$$

Considérons de même le groupe $P3$ pour $\mathbf{k} = [00\ 1/3]$. Si on choisit $\Gamma_i = \Gamma_1$, représentation identité du groupe 3, on obtient le groupe $P_{3c}3 = P3(3c)P3$ de type G_{ek}^1 ; si on choisit pour Γ_i la représentation cyclique de 3 ou sa conjuguée, on obtient les groupes $P_{3c}3^{(3)}$ et $P_{3c}3^{(3')}$ respectivement, de type G_{ek}^3 .

On obtient finalement 45 groupes G_{ek}^1 et six groupes G_{ek}^3 ; ces derniers sont de classe 3 ou 6: G_e et H_e ne sont pas isosymboliques.

2ème cas: G_e n'est pas symmorphique et toutes les translations τ_α ne sont pas perpendiculaires à \mathbf{k} . Alors le facteur de phase $\varphi_\alpha = e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \tau_\alpha}$ n'est pas toujours égal à l'unité.

Supposons que G_e possède un axe 2_1 ou un miroir avec glissement de type c , n ou d : $\varphi_\alpha = \pm j, \pm j^2$. Il est *a priori* possible, en utilisant pour Γ_i une représentation alternante de G , d'obtenir des caractères $\Gamma_{ki}(\alpha|\tau_\alpha)$ égaux à 1, j ou j^2 . Considérons, par exemple, les groupes de classe $mm2$ et de réseau primitif tel que $Pmc2_1$ ou $Pcc2$: deux des opérations $2_z, m_{xz}$ ou m_{yz} sont telles que $\varphi_\alpha = -j$ ou $-j^2$; on utilisera donc pour Γ_i la représentation alternante de $mm2$ dans laquelle ces deux opérations ont le caractère -1 . Ainsi au groupe $G_e = Pmc2_1$ correspond le groupe de type G_{ek} ($i \neq 1, 3$): $P_{3c}mc^{(3)}2_1^{(3)}$ (notation de OG) ou $P_{3c}mc2_1$ (notation de Belov).

Si G_e possède un axe 3_1 ou 3_2 parallèle à \mathbf{k} , $\varphi_\alpha \neq 1, j, j^2$ et on ne peut trouver de représentation Γ_i du groupe 3 telle que Γ_{ki} soit cyclique d'ordre 3. Si G_e possède un axe 4_1 ou 4_3 parallèle à \mathbf{k} , $\varphi_\alpha = \pm i$: on utilisera pour Γ_i une représentation cyclique d'ordre 4 du groupe 4 et s'il s'agit d'un axe 4_2 , la représentation alternante. Si enfin, G_e possède un axe $6_1, 6_2, 6_4$, ou 6_5 parallèle à \mathbf{k} , $\varphi_\alpha = e^{i n \pi / 9}$ ($n = 1, 2, 4, 5$) et on ne peut trouver de représentation Γ_i du groupe 6 telle que Γ_{ki} soit cyclique d'ordre 3. Si par contre, on a un axe 6_3 parallèle à \mathbf{k} , $\varphi_\alpha = -j$ ou $-j^2$, on peut utiliser pour Γ_i soit la représentation alternante, soit l'une des représentations Γ_5 et $\Gamma_6 = \Gamma_5^*$ d'où les trois groupes $P6_3(3c)P6_3, P6_3(3c)P6_1, P6_3(3c)P6_5$ (les deux derniers ne sont pas membres d'une même paire de Koptsik).

Les résultats précédents peuvent être vérifiés directement de la manière suivante. Considérons un groupe G_e possédant un axe $2 = (2|001/2)$, et $\mathbf{k} = [001/3]$: $2_1^2 = (2|001/2)^2 = (\varepsilon|001)$.

On doit pouvoir trouver un caractère $\Gamma_{ki}(2_1) = 1, j$ ou j^2 tel que: $\Gamma_{ki}(2_1)^2 = \Gamma_{ki}(\varepsilon|001) = j$. On peut choisir $\Gamma_{ki}(2_1) = j^2$ et par suite un axe 2_1 (ou de même un miroir c, d , ou n avec glissement) parallèle à l'axe c est compatible avec un triplement de la maille suivant c . Le Tableau 7 présente les résultats relatifs à tous les types d'axes hélicoïdaux. On en déduit que:

- un triplement de maille suivant une direction c ne fournit de sous-groupe invariant H_e qu'en l'absence d'axe $3_1, 3_2, 6_1, 6_2, 6_4$ ou 6_5 parallèle à c ;
- le groupe $P6_3$ possède trois sous-groupes H_e , comme on l'a déjà vu précédemment.

L'utilisation des représentations cycliques d'ordre 3 d'un groupe G_e permet donc d'énumérer les groupes G_{e3} isomorphes de G_e et associés aux sous-groupes H_e d'indice 3 invariants dans G_e . Pour trouver les groupes G_{e3} associés aux sous-groupes H'_e d'indice 3 non invariants et aux sous-groupes H_e d'indice 6

Tableau 7. *Compatibilité entre axes hélicoïdaux parallèles à l'axe c et triplement de la maille suivant c*

n_α^n	$\Gamma_{ki}(n_\alpha^n)$	$\Gamma_{ki}(n_\alpha)$
$2_1^2 = (\varepsilon 001)$	j	j^2
$3_1^3 = (\varepsilon 001)$	j	
$3_2^3 = (\varepsilon 002)$	j^2	
$4_1^4 = (\varepsilon 001)$	j	j
$4_2^4 = (\varepsilon 002)$	j^2	j^2
$4_3^4 = (\varepsilon 003)$	j	1
$6_1^6 = (\varepsilon 001)$	j	
$6_2^6 = (\varepsilon 002)$	j^2	
$6_3^6 = (\varepsilon 003)$	1	1, j, j^2
$6_4^6 = (\varepsilon 004)$	j	
$6_5^6 = (\varepsilon 005)$	j^2	

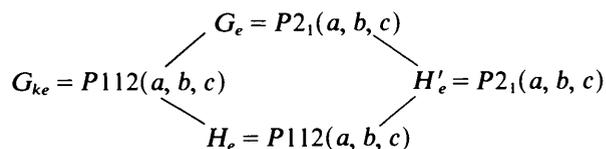
invariants, nous devons rechercher les représentations Γ_{*ki} de G_e de dimension deux isomorphes du groupe 32: leurs noyaux sont les groupes H_e invariants d'indice 6 tels que $G_e/H_e = 32$.

1er cas: $\mathbf{k} = 0$, et Γ_i est une représentation de G de type E (voir Tableau 1). Alors, H_e d'indice 6, noyau de Γ_{*ki} , est un sous-groupe isotranslation tel que $G/H = 32$ et G_{e3} est de type 1. (Si $\mathbf{k} \neq 0$ est invariant dans G_e et Γ_i de type E , Γ_{*ki} n'est pas de type E puisque $\exp i \mathbf{k} \cdot \mathbf{t} = 1, j, j^2$.)

2ème cas: \mathbf{k} n'est pas invariant dans G , et l'étoile de \mathbf{k} comporte deux branches \mathbf{k} et $-\mathbf{k}$ (sinon Γ_{*ki} est de dimension supérieure à 2): les groupes cubiques sont donc exclus. Le groupe ponctuel G_k , formé des éléments β conservant \mathbf{k} , est invariant d'indice 2 dans G : $G_k + \alpha G_k, \alpha \mathbf{k} = -\mathbf{k}$. Par suite le groupe d'espace G_{ke} est invariant d'indice 2 dans G_e .

Soit γ_{ki} une représentation admissible de G_{ke} , cyclique d'ordre 3 (il n'en existe pas nécessairement). Son noyau, de groupe ponctuel G_k et de réseau T_k , est invariant d'indice 3 dans G_{ke} et d'indice 6 dans le groupe G_e : c'est donc un groupe H_e .

On a par exemple, avec $\mathbf{k} = [001/3]$:



Le Tableau 8 donne les groupes G_k pour les groupes G non cubiques et les vecteurs \mathbf{k} tels que l'étoile ne contienne que \mathbf{k} et $-\mathbf{k}$ (le lien entre réseau et vecteur \mathbf{k} est indiqué au Tableau 2).

Propriétés des groupes à trois couleurs

Les groupes à trois couleurs présentent des propriétés analogues à celles des groupes magnétiques (Sivardière, 1970).

(a) Les groupes G_{e3} isomorphes d'un même groupe d'espace G_e forment avec G_e lui-même, un groupe multiplicatif abélien isomorphe de celui formé par les représentations cycliques d'ordre 3 de G_e . Il

Tableau 8. Groupe G_k associée à G

G	Réseau	G_k	G	Réseau	G_k
$\bar{1}, m$	3c	1	$\bar{3}, 32$	3a 3c	3
2	3a	1		3r, 3h	
2/m	3a 3c	m 1	3m	3a	3
222	3c	112	$\bar{3}m$		3m
$m_y, m_x, 2$	3a	1m1	6	3c	3
mmm	3c	2 _z mm	6	3a	3
4	3c	2	6/m	3c 3a	6 6
422, 4/m	3c	4	$\bar{6}2m$	3c	3m
$\bar{4}2m$	3c	2mm	6mm	3a	3m
4/mmm	3c	4mm	622	3c 3a	6 32
			6/mmm	3c 3a	6mm $\bar{6}2m$

faut ici envisager les couples de représentations conjuguées, ou encore les groupes conjugués de chaque paire de Koptsik.

Les groupes $G_{e_3}^0$ forment avec G_e un sous-groupe, les groupes $G_{e_3}^k$ ne forment pas un sous-groupe. On a:

$$G_{ek}^1 \times G_{e_0}^3 = G_{ek}^3$$

$$G_{ek}^1 \times G_{ek'}^1 = G_{ek+k'}^1.$$

Par exemple: si $G_e = P6_3$, le groupe est formé de G_e , des groupes $G_{e_0}^3$ colorés, ($P6_3^{(3)}$ et son conjugué $P6_3^{(3)}$) enfin, des trois groupes G_{ek}^1 mentionnés plus haut et de leurs conjugués.

(b) Les groupes $G_{e_0}^i$ de classe isomorphe de G forment un groupe abélien additif dont l'unité est le groupe symmorphique $T_A G$. Ainsi:

$$P6_3^{(3)} + P6_3^{(3)} = P6^{(3)}.$$

les groupes G_{ek}^1 de réseau T_3 et de classe isomorphe à G forment un groupe dont l'unité est le groupe

symmorphique $T_{3A} G$. Par exemple:

$$P_{3c}ma2 + P_{3c}bm2 = P_{3c}ba2.$$

Enfin, les groupes G_{ek}^i de réseau T_3 et de classe isomorphe à G forment un groupe plus large que le précédent. Par exemple:

$$P_{3c}cc2 + P_{3c}mn2_1 = P_{3c}ca2_1.$$

Références

- BELOV, N. V., NERONOVA, N. N. & SMIRNOVA, T. S. (1957). *Sov. Phys. Crystallogr.* **2**, 311–322.
- BERTAUT, E. F. (1968). *Acta Cryst. A* **24**, 217–231.
- BERTAUT, E. F. (1976). *Acta Cryst. A* **32**, 976–983.
- BERTAUT, E. F. & BILLIET, Y. (1979). *Acta Cryst. A* **35**, 733–745.
- BILLIET, Y. (1973). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **66**, 327–334.
- CURIEN, H. & LE CORRE, Y. (1958). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **31**, 126–132.
- HARKER, D. (1976). *Acta Cryst. A* **32**, 133–139.
- HARKER, D. (1981). *Acta Cryst. A* **37**, 286–292.
- HERMANN, C. (1929). *Kristallogr. Z.* **69**, 533.
- INDENBOM, V. L., BELOV, N. V. & NERONOVA, N. N. (1960). *Sov. Phys. Crystallogr.* **5**, 477–481.
- KOLPAKOV, A. V., OVCHINNIKOVA, E. N. & KUZMIN, R. N. (1977). *Sov. Phys. Crystallogr.* **20**, 135–138.
- KOPTSIK, V. A. & KUZHUKEEV, Z. H. (1973). *Sov. Phys. Crystallogr.* **17**, 622–627.
- NIGGLI, A. & WONDRAUSCHEK, H. (1960). *Kristallogr. Z.* **114**, 215–225.
- OPECHOWSKI, W. & GUCCIONE, R. (1965). *En Magnetism II*, édité par G. T. RADO & H. SUHL. New York: Academic Press.
- SIVARDIÈRE, J. (1969). *Acta Cryst. A* **25**, 658–665.
- SIVARDIÈRE, J. (1970). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **93**, 146–152.
- SIVARDIÈRE, J. (1973). *Acta Cryst. A* **29**, 639–644.
- SIVARDIÈRE, J. (1975). *Acta Cryst. A* **31**, 790–793.
- SIVARDIÈRE, J. (1981). *Acta Cryst. A* **37**, 775–778.
- SIVARDIÈRE, J. & BERTAUT, E. F. (1970). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **93**, 515–526.
- ZACCHARIASEN, W. H. (1951). *Theory of X-ray Diffraction in Crystals*. New York: Wiley.
- ZAMORZAEV, A. M. (1963). *Sov. Phys. Crystallogr.* **7**, 661–668.
- ZAMORZAEV, A. M. (1969). *Sov. Phys. Crystallogr.* **14**, 155–159.

Acta Cryst. (1984). **A40**, 580–587

On Periodic and Non-periodic Space Fillings of E^m Obtained by Projection

BY P. KRAMER AND R. NERI

Institut für Theoretische Physik der Universität Tübingen, Federal Republic of Germany

(Received 5 December 1983; accepted 26 April 1984)

Abstract

A periodic lattice in E^n is associated with an n -grid and its dual, and with a point symmetry group G . Given a subgroup H of G , a subspace E^m , $m < n$, of E^n , invariant under H , is chosen and a projection of the n -grid from E^n to E^m is defined. The translational

and point symmetries of the projected n -grid are analyzed. A projection of the cubic n -grid from E^n to E^{n-1} based on $H = S(n)$ yields a periodic n -grid. A projection of the cubic 12-grid from E^{12} to E^3 based on $H = A(5)$ yields a non-periodic 12-grid. This 12-grid is characterized by three real numbers and from its projection has a well defined orientation. The dual