

structured even if not one structure factor in the projection plane can be measured; (iii) it increases significantly the effective resolution in the third dimension, making considerably enhanced 3D reconstructions and non-crystallographic projections possible.

References

- BUERGER, M. J. (1960). *Crystal Structure Analysis*, ch. 14, pp. 380–384. New York: John Wiley.
- COLLINS, D. M. (1982). *Nature (London)*, **29B**, 49–51.
- GILLON, B. & SCHWEIZER, J. (1989). *Study of Chemical Bonding in Molecules: the Interest of Polarized Neutron Diffraction*, edited by J. MARUANI. *Molecules in Physics, Chemistry and Biology*, Vol. II, pp. 111–147. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers.
- GULL, S. F. & DANIELL, G. J. (1978). *Nature (London)*, **272**, 686–690.
- GULL, S. F. & SKILLING, J. (1989). *MEMSYS Users' Manual*. Maximum Entropy Data Consultants Ltd, 33 North End, Meldreth, Royston SG8 6NR, England.
- LIVESEY, A. K. & SKILLING, J. (1985). *Acta Cryst.* **A41**, 113–122.
- PAPOULAR, R. J. (1992). *Acta Cryst.* **A48**, 244–246.
- PAPOULAR, R. J. & DELAPALME, A. (1994). *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1486–1489.
- PAPOULAR, R. J. & GILLON, B. (1990a). *Neutron Scattering Data Analysis 1990*, edited by M. W. JOHNSON. *Inst. Phys. Conf. Ser. No.* 107, pp. 101–116.
- PAPOULAR, R. J. & GILLON, B. (1990b). *Europhys. Lett.* **13**, 429–434.
- PAPOULAR, R. J., PRANDL, W. & SCHIEBEL, P. (1992). *Maximum Entropy and Bayesian Methods*, edited by G. ERICKSON, C. RAY-SMITH & P. NEUDORFER, pp. 359–376. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers.
- PAPOULAR, R. J., ROTH, G., HEGER, G., HALUSKA, M. & KUZMANY, H. (1993). *Proceedings IWEP NM93*, edited by H. KUZMANY. *Springer Series in Solid State Sciences*, No. 117, pp. 189–194.
- PAPOULAR, R. J. & SCHWEIZER, J. (1991). Proceedings of the 6th International Neutron School on Neutron Physics, Alushta, Russia, 8–18 October 1991, pp. 170–189.
- PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T. & FLANNERY, B. P. (1992). *Numerical Recipes: the Art of Scientific Computing*, 2nd ed., pp. 795–817. Cambridge Univ. Press.
- RESSOUCHE, E., ZHELUDDEV, A., BOUCHERLE, J. X., GILLON, B., REY, P. & SCHWEIZER, J. (1993). *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **232**, 13–25.
- SAKATA, M., MORI, R., KUMAZAWA, S. & TAKATA, M. (1990). *J. Appl. Cryst.* **23**, 526–534.
- SAKATA, M. & SATO, M. (1990). *Acta Cryst.* **A46**, 263–270.
- SAKATA, M., UNO, T., TAKATA, M. & HOWARD, C. (1993). *J. Appl. Cryst.* **26**, 159–165.
- SAKATA, M., UNO, T., TAKATA, M. & MORI, R. (1992). *Acta Cryst.* **B48**, 591–598.
- SKILLING, J. & GULL, S. F. *Maximum Entropy and Bayesian Methods in Inverse Problems*, edited by C. RAY SMITH & W. T. GRANDY JR, pp. 83–132. Dordrecht: Reidel.
- ZHELUDDEV, A., BARONE, V., BONNET, M., DELLEY, B., GRAND, A., RESSOUCHE, E., REY, P., SUBRA, R. & SCHWEIZER, J. (1994). *J. Am. Chem. Soc.* **116**, 2019–2027.

Acta Cryst. (1995). **A51**, 300–304

Über isomorphe Untergruppen von Raumgruppen der Kristallklassen $4, \bar{4}, 4/m, 3, \bar{3}, 6, \bar{6}$ und $6/m$

VON ULRICH MÜLLER

Fachbereich Biologie/Chemie, Universität-GH, D-34109 Kassel, Deutschland

UND ACHIM BRELLE

Fachbereich Mathematik/Informatik, Universität-GH, D-34109 Kassel, Deutschland

(Eingegangen am 18. August 1994, angenommen am 3. November 1994)

Abstract

Number theory is used to derive which indices of symmetry reduction can occur for maximal isomorphic subgroups of space groups belonging to the crystal classes mentioned in the title and having unit cells with enlarged base vectors \mathbf{a} and \mathbf{b} . In the case of the crystal classes $4, \bar{4}$ and $4/m$, the possible index values are $i = p^2$ with $p \equiv 3 \pmod{4}$, $i = 2$ and $i = p \equiv 1 \pmod{4}$ ($p =$ prime number). In the crystal classes $3, \bar{3}, 6, \bar{6}$ and $6/m$, $i = p^2$ with $p \equiv 2 \pmod{3}$, $i = 3$ and $i = p \equiv 1 \pmod{3}$ are possible. The number of isomorphic subgroups of index i (maximal and non-maximal) can be calculated with the formula $R(i) = \sum \chi_D(m)$, where m runs through all divisors of i and $\chi_D(m)$ is the Dirichlet character mod $|D|$; $D = -4$ for

the tetragonal and $D = -3$ for the trigonal and hexagonal space groups. $\chi_{-4}(m)$ is equal to 0 for $m \equiv 0 \pmod{2}$, 1 for $m = p \equiv 1 \pmod{4}$, -1 for $m = p \equiv 3 \pmod{4}$, and the corresponding product for nonprime values of m . $\chi_{-3}(m)$ is equal to 0 for $m \equiv 0 \pmod{3}$, 1 for $m = p \equiv 1 \pmod{3}$, -1 for $m = p \equiv 2 \pmod{3}$, and their corresponding product for nonprime m . $R(i)$ is the number of conjugacy classes, each of which comprises i conjugate subgroups (for $i > 2$).

Einleitung

Das auf Hermann (1960) zurückgehende und von Bärnighausen (1980) entwickelte Konzept zum Aufzei-

gen von Strukturverwandtschaften mit Hilfe von Gruppe-Untergruppe-Beziehungen ist ein klares und wertvolles Hilfsmittel in der Kristallchemie und -physik (Chapuis, 1992; Müller, 1991, 1992). Häufig spielen dabei isomorphe Untergruppen eine Rolle. Von einer Raumgruppe G ist eine Untergruppe H dann isomorph, wenn sie vom gleichen oder vom enantiomorphen Raumgruppentyp wie G ist (Bertaut & Billiet, 1979; Billiet, 1973; Billiet & Bertaut, 1989). H hat eine Elementarzelle, die um den Faktor i größer ist als die von G , wobei i der (ganzzahlige) Index der Symmetriereduktion ist. Auf welche Art die Elementarzelle vergrößert werden kann, hängt vom Raumgruppentyp ab; Billiet & Bertaut (1989) haben die möglichen Typen von Transformationsmatrizen für alle Raumgruppentypen tabelliert. Sie gehen jedoch nur teilweise darauf ein, welche Einschränkungen gelten, wenn H eine *maximale* isomorphe Untergruppe von G ist.

Dreidimensionale Raumgruppen sind auflösbare Gruppen. Dies folgt aus der Definition, wonach eine (endliche oder unendliche) Gruppe auflösbar ist, wenn eine subnormale Reihe von Untergruppen $G \supset P_1 \supset P_2 \supset \dots \supset P_n = \{1\}$ existiert, bei der jede Faktorgruppe G/P_1 bzw. P_j/P_{j+1} abelsch ist (Baumslag & Chandler, 1968; Suzuki, 1980). Ist eine Gruppe P_j auflösbar, dann sind es auch alle ihre Untergruppen. Die Faktorgruppe $P_1 = G/T$ einer Raumgruppe G nach der Gesamtheit ihrer Translationen T ist isomorph zur zugehörigen Punktgruppe. Die Gruppe der Translationen T ist abelscher Normalteiler und die kristallographischen Punktgruppen haben maximal die Ordnung 48 (Ascher & Janner, 1965). Alle Gruppen mit Ordnung kleiner 60 sind auflösbar (Huppert, 1967), und damit auch P_1 und G . Bei auflösbaren Gruppen können die Indices für die maximalen Untergruppen nur Primzahlpotenzen sein.

Sofern die Richtungen der drei Basisvektoren von G und ihrer maximalen Untergruppe H_1 übereinstimmen, kann die Vergrößerung der Elementarzelle nur durch Vervielfachung eines oder mehrerer Basisvektoren um eine Primzahl p erfolgen. Für den Index i gibt es dann eine der folgenden Möglichkeiten:

- (1) $i = p$ bei Vervielfachung eines Basisvektors;
- (2) bei tetragonalen, trigonalen und hexagonalen Raumgruppen ist $i = p^2$, wenn die Basisvektoren \mathbf{a}_0 und \mathbf{b}_0 beide um den Faktor p vergrößert werden;
- (3) bei kubischen Raumgruppen muß $i = p^3$ sein.

Nicht alle Primzahlen können vorkommen; je nach Raumgruppentyp gelten bestimmte Einschränkungen für ihre möglichen Zahlenwerte (Bertaut & Billiet, 1979; Billiet & Bertaut, 1989).

Wenn G und H_1 den Kristallklassen $4, \bar{4}, 4/m, 3, \bar{3}, 6, \bar{6}$ oder $6/m$ angehören, können die Basisvektoren \mathbf{a}_1 und \mathbf{b}_1 von H_1 anders orientiert sein als bei G . Welche Werte der Index i in diesem Fall haben kann, wird im folgenden gezeigt. Billiet & Bertaut (1989) hatten nur untersucht, welche Indices i bei Vergrößerungen von c auftreten können.

Zahlentheoretische Vorbetrachtung

Eine positive ganze Zahl i (sie wird in den folgenden Abschnitten der Untergruppenindex sein) soll durch eine binäre primitive quadratische Form dargestellt werden:

$$i = f(r, s) = ar^2 + brs + cs^2 \quad (1)$$

wobei die Koeffizienten a, b und c vorgegebene ganzzahlige Werte ohne gemeinsamen Teiler sind und r und s beliebige ganze Zahlen sein können. Die Diskriminante D beträgt:

$$D = b^2 - 4ac. \quad (2)$$

Ein Automorphismus einer binären quadratischen Form $f(r, s)$ ist eine Variablensubstitution, unter der die Form invariant bleibt, d.h. mit

$$\begin{aligned} r' &= \alpha r + \beta s \\ s' &= \gamma r + \delta s \end{aligned} \quad \det \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} = 1 \quad (3)$$

$\alpha, \beta, \gamma, \delta$ ganzzahlig

und

$$\begin{aligned} f(r, s) &= ar^2 + brs + cs^2 \\ f(r', s') &= f(\alpha r + \beta s, \gamma r + \delta s) \\ &= a' r'^2 + b' r's' + c' s'^2 \end{aligned} \quad (4)$$

gilt $a = a', b = b'$ und $c = c'$. Die Automorphismen einer binären quadratischen Form bilden eine Gruppe U_f , die endlich ist falls $D < 0$. Es ist

$$U_f = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \right\}, \quad D = -4 \quad (5)$$

$$U_f = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\}, \quad D = -3. \quad (6)$$

Wie aus den Erläuterungen in den folgenden Abschnitten folgt, interessieren uns hier nur die Fälle mit den Diskriminanten $D = -4$ und $D = -3$. Für diese Diskriminanten ist die Anzahl der Äquivalenzklassen von positiv definiten primitiven quadratischen Formen gleich 1. Dann ist die Anzahl $R(i)$ der Darstellungen, d.h. die Anzahl der unter U_f inäquivalenten Möglichkeiten, wie die Zahl i durch quadratische Formen (1) in ganzzahligen r und s ausgedrückt werden kann (Zagier,

1981)

$$R(i) = \sum_{m|i} \chi_D(m) \quad (7)$$

wobei m alle positiven Teiler von i durchläuft. $\chi_D(m)$ ist ein primitiver Dirichlet-Charakter mod $|D|$, der folgende Werte annimmt:

$$\begin{aligned} \chi_{-3}(2) &= -1 \\ \chi_{-4}(2) &= 0 \\ \chi_D(p) &= (D|p), \quad p = \text{ungerade Primzahl} \\ \chi_D(m) &= \chi_D(p_1) \cdot \chi_D(p_2) \cdot \dots, \quad m = p_1 p_2 \dots \end{aligned} \quad (8)$$

$(D|p)$ ist das Legendre-Symbol; für $D = -4$ und $D = -3$ und ungerade Primzahlen p hat es die Werte (Apostol, 1976):

$$(-4|p) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } p \equiv 1 \pmod{4} \\ -1 & \text{wenn } p \equiv 3 \pmod{4} \end{cases} \quad (9)$$

$$(-3|p) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } p \equiv 1 \pmod{3} \\ 0 & \text{wenn } p = 3 \\ -1 & \text{wenn } p \equiv 2 \pmod{3} \end{cases} \quad (10)$$

Isomorphe Untergruppen von Raumgruppen der Kristallklassen 4, $\bar{4}$ und $4/m$

Es seien \mathbf{a}_0 und \mathbf{b}_0 die Basisvektoren von G und \mathbf{a}_1 und \mathbf{b}_1 diejenigen ihrer maximalen isomorphen Untergruppe H_1 . Dann gilt die Transformation

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{b}_1 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} \quad S = \begin{pmatrix} r & s \\ -s & r \end{pmatrix}. \quad (11)$$

r und s sind ganze Zahlen. Je nach Raumgruppentyp bestehen noch bestimmte Einschränkungen bezüglich der Paritäten [bestimmte Kombinationen von geraden und/oder ungeraden Zahlen für r und s (Billiet & Bertaut, 1989)]. Der Vergrößerungsfaktor der Elementarzelle und damit der Index i ist gleich der Vergrößerung der Basisfläche der Elementarzelle (Fig. 1):

$$i = \det S = r^2 + s^2. \quad (12)$$

Wird in einer Folge von Gruppe-Untergruppe-Beziehungen $G \xrightarrow{i_1} H_1 \xrightarrow{i_2} H_2 \rightarrow \dots$ die Elementarzelle mehrmals vergrößert, dann ist der Index von G nach H_j gleich $i' = i_1 i_2 \dots = (r_1^2 + s_1^2)(r_2^2 + s_2^2) \dots$. i' ist das Produkt aus mehreren Summen von je zwei Quadratzahlen und ist selbst wieder eine Summe von zwei Quadratzahlen.

Die Gleichung $i = r^2 + s^2$ ist eine quadratische Form (1) mit den Koeffizienten $a = c = 1$, $b = 0$. Ihre Diskriminante beträgt $D = -4$.

Für maximale isomorphe Untergruppen mit $i = p$ ist die Anzahl der Darstellungen für i nach den Gleichungen

(7), (8) und (9):

$$\begin{aligned} R(i) &= \chi_{-4}(1) + \chi_{-4}(i) \\ &= \begin{cases} 1 & \text{für } i = 2 \\ 2 & \text{für } i = p \equiv 1 \pmod{4} \\ 0 & \text{für } i = p \equiv 3 \pmod{4} \end{cases} \end{aligned} \quad (13)$$

Demnach sind maximale isomorphe Untergruppen mit Primzahlindex nur und immer dann möglich, wenn $i = 2$ oder $i = p \equiv 1 \pmod{4}$. Dies entspricht dem Fermatschen Satz, nachdem jede Primzahl $p \equiv 1 \pmod{4}$ als Summe $r^2 + s^2$ von zwei Quadratzahlen darstellbar ist und jede Summe von zwei Quadratzahlen, die eine Primzahl ist, entweder 2 oder $1 \pmod{4}$ beträgt (Hasse, 1964; LeVeque, 1977). Beispiele:

$$i = 5 = 1^2 + 2^2 = 2^2 + 1^2 \equiv 1 \pmod{4}$$

2 Darstellungen

$$i = 29 = 2^2 + 5^2 = 5^2 + 2^2 \equiv 1 \pmod{4}$$

2 Darstellungen

$$i = 7 \equiv 3 \pmod{4}$$

nicht darstellbar.

Wenn $s = 0$ ist, so hat die maximale Untergruppe die Basisvektoren $r\mathbf{a}_0$, $r\mathbf{b}_0$, und der Index beträgt $i = r^2$. In diesem Fall muß $r = p \equiv 3 \pmod{4}$ sein. Wäre $r = p \equiv 1 \pmod{4}$, so ließe sich diese Zahl als Summe von zwei Quadratzahlen darstellen und die Untergruppe vom Index r^2 wäre nicht maximal; das gleiche gilt, wenn r eine gerade Zahl ist. Damit bleiben für maximale Untergruppen mit $i = p^2$ nur noch Zahlen $p \equiv 3 \pmod{4}$ möglich. Das Quadrat einer Zahl dieses Typs beträgt immer $1 \pmod{4}$.

Die Anzahl der maximalen isomorphen Untergruppen folgt aus der Anzahl der Darstellungsmöglichkeiten. Für $i = p \equiv 1 \pmod{4}$ gibt es nach Gleichung (13) zwei Darstellungsmöglichkeiten. Es sei betont, daß z.B. die Untergruppen mit $(r, s) = (2, 1)$ und $(r, s) = (1, 2)$ verschiedene Untergruppen sind, die verschiedene Translationsgitter haben (Billiet & Sayari, 1984; Fig. 1). Durch einfaches Vertauschen von r und s erhält man also keinen Automorphismus, wie man mit Hilfe der Gleichungen (3), (4) und (5) feststellen kann. Dagegen sind $(r, s) = (1, 2)$ und $(r, s) = (-2, 1)$ über die dritte Transformation von U_f [Gleichung (5)] äquivalent; geometrisch bedeutet das, daß beide dasselbe Kristallgitter ergeben. Um unter den vier verschiedenen, über U_f äquivalenten Matrizen S eine eindeutige Wahl zu treffen, wurden von Billiet & Sayari (1984) Auswahlregeln aufgestellt.

Der Fall $i = 2$ ist ein besonderer Fall; obwohl es nur eine Darstellung gibt, $i = 1^2 + 1^2$, gibt es zwei Untergruppen, die sich in der Lage ihres Ursprungs unterscheiden, nämlich bei $0,0,0$ bzw. $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ von G ; diese Untergruppen sind nicht konjugiert, aber euklidisch

äquivalent (Billiet & Sayari, 1984; Koch, 1984). Für $i > 2$ gehören zu jeder Transformationsmatrix S (d.h. zu jeder inäquivalenten Darstellung von i) i maximale Untergruppen, die in G konjugiert sind; sie können durch Translationsvektoren von G ineinander überführt werden. Insgesamt gibt es also $2i$ maximale isomorphe Untergruppen in zwei Konjugiertenklassen wenn $i = p \equiv 1 \pmod{4}$. Wenn $i = p^2$ ist, $p \equiv 3 \pmod{4}$, gibt es nur eine unter U_f inäquivalente Transformationsmatrix S und eine Konjugiertenklasse.

Bei nichtmaximalen isomorphen Untergruppen kann der Index jeden Zahlenwert annehmen, der sich gemäß $i = 2^n p_1 p_2 \dots q_1^2 q_2^2 \dots$ in Primzahlfaktoren zerlegen läßt, mit $p_j \equiv 1 \pmod{4}$ und $q_j \equiv 3 \pmod{4}$ (einzelne p_j oder q_j dürfen gleich sein). Eine solche Zahl ist immer $i \not\equiv 3 \pmod{4}$. Nichtmaximale isomorphe Untergruppen können also nur gerade Indices oder $i \equiv 1 \pmod{4}$ haben, wobei aber keineswegs alle Zahlen $1 \pmod{4}$ möglich sind.

Die Anzahl der Untergruppen mit einem bestimmten Index i hängt davon ab, auf wie viele unter U_f inäquivalente Arten i als Summe von je zwei Quadratzahlen dargestellt werden kann. Es gibt $R(i)$ Konjugiertenklassen, mit $R(i)$ gemäß Gleichungen (7) bis (9). Beispiele:

$$R(25) = \chi_{-4}(1) + \chi_{-4}(5) + \chi_{-4}(25) = 3$$

3 Darstellungen:

$$25 = 5^2 = 3^2 + 4^2 = 4^2 + 3^2$$

$$\begin{aligned} R(45) &= \chi_{-4}(1) + \chi_{-4}(3) + \chi_{-4}(5) \\ &\quad + \chi_{-4}(9) + \chi_{-4}(15) + \chi_{-4}(45) \\ &= 1 - 1 + 1 + 1 - 1 + 1 = 2 \end{aligned}$$

$$45 = 3^2 + 6^2 = 6^2 + 3^2$$

$$\begin{aligned} R(65) &= \chi_{-4}(1) + \chi_{-4}(5) + \chi_{-4}(13) + \chi_{-4}(65) \\ &= 1 + 1 + 1 + 1 = 4 \end{aligned}$$

$$65 = 1^2 + 8^2 = 8^2 + 1^2 = 4^2 + 7^2 = 7^2 + 4^2$$

$$\begin{aligned} R(21) &= \chi_{-4}(1) + \chi_{-4}(3) + \chi_{-4}(7) + \chi_{-4}(21) \\ &= 1 - 1 - 1 + 1 = 0. \end{aligned}$$

$R(21) = 0$ ist ein Beispiel für die allgemeine Aussage, daß (mit $D = -4$) eine Zahl $i = p_1^{n_1} p_2^{n_2} \dots$ immer und nur dann $R(i) = 0$ ergibt, wenn mindestens eine Primzahl $p_j \equiv 3 \pmod{4}$ mit ungeradem Exponenten n_j in der Primzahlzerlegung vorkommt. Dies gilt, da $R(i)$ eine zahlentheoretisch multiplikative Funktion ist, d.h. für $p_j \neq p_k, k \neq j$ ist

$$R(i) = R(p_1^{n_1} p_2^{n_2} \dots) = R(p_1^{n_1}) R(p_2^{n_2}) \dots$$

Für $p_j \equiv 3 \pmod{4}$ und n_j ungerade ist $R(p_j^{n_j}) = 0$; für $p_j = 2$ und für $p_j \equiv 1 \pmod{4}$ ist $R(p_j^{n_j}) > 0, n_j \in \mathcal{N}$ beliebig. Dies ist eine Bestätigung für die Aussage, daß der Index einer maximalen Untergruppe eine Primzahl

oder das Quadrat einer Primzahl sein muß. Wäre z.B. $i = p_1 p_2$ darstellbar, p_1 und p_2 aber nicht, dann gäbe es eine maximale Untergruppe mit diesem Index i . Gerade Potenzen $n_j > 2$ lassen sich immer in Quadrate zerlegen und ergeben deshalb keine maximalen Untergruppen.

Isomorphe Untergruppen von Raumgruppen der Kristallklassen $3, \bar{3}, 6, \bar{6}$ und $6/m$

Die Transformationsmatrix für die Basisvektoren \mathbf{a}_0 und \mathbf{b}_0 für trigonale und hexagonale isomorphe Untergruppen hat die Form:

$$S = \begin{pmatrix} r & s \\ -s & r-s \end{pmatrix} \quad \det S = r^2 - rs + s^2. \quad (14)$$

Analog zu den tetragonalen Raumgruppen gilt: Bei einer Folge $G \xrightarrow{i_1} H_1 \xrightarrow{i_2} H_2 \rightarrow \dots$ ist $i' = i_1 i_2 = (r_1^2 - r_1 s_1 + s_1^2)(r_2^2 - r_2 s_2 + s_2^2) \dots$, wobei i' wieder als quadratische Form der Art $r^2 - rs + s^2$ darstellbar ist. Wenn $i = uv = r^2 - rs + s^2$, dann sind auch die Faktoren u und v durch quadratische Formen dieser Art darstellbar; andernfalls könnte es maximale Untergruppen geben, die keinen Primzahlindex haben.

Die Gleichung $i = r^2 - rs + s^2$ ist eine quadratische Form (1) mit den Koeffizienten $a = 1, b = -1, c = 1$. Ihre Diskriminante beträgt $D = -3$.

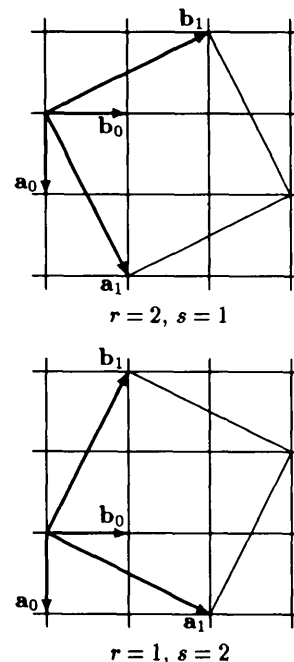


Fig. 1. Beispiel für die Vergrößerung der Elementarzelle einer tetragonalen Raumgruppe um den Faktor $i = 5$ mit $(r, s) = (2, 1)$ und $(r, s) = (1, 2)$. Die beiden Zellen gehören zu verschiedenen Untergruppen. Dagegen ist $(r, s) = (-2, 1)$ äquivalent zu $(r, s) = (1, 2)$ und $(r, s) = (-1, 2)$ äquivalent zu $(r, s) = (2, 1)$.

Für maximale Untergruppen mit $i = p$ ist die Anzahl der Darstellungen für i gemäß der Gleichungen (7), (8) und (10):

$$R(i) = \chi_{-3}(1) + \chi_{-3}(i) = \begin{cases} 1 & \text{für } i = 3 \\ 2 & \text{für } i = p \equiv 1 \pmod{3} \\ 0 & \text{für } i = p \equiv 2 \pmod{3}. \end{cases} \quad (15)$$

Daraus folgt: maximale isomorphe Untergruppen sind nur möglich, wenn $i = 3$ oder $i = p \equiv 1 \pmod{3}$. Jede Primzahl $p \equiv 1 \pmod{3}$ ist als Summe $r^2 - rs + s^2$ auf zwei Arten darstellbar, d.h. für jeden Index $i = p \equiv 1 \pmod{3}$ gibt es zwei Konjugiertenklassen von maximalen isomorphen Untergruppen.

Wenn $s = 0$ ist (d.h. gleiche Orientierung der Basisvektoren von \mathbf{G} und \mathbf{H}_1), gilt $i = r^2$. Für maximale Untergruppen muß dann $r = p \equiv 2 \pmod{3}$ sein, denn anderenfalls wäre eine Untergruppe mit dem Index r möglich. In diesem Fall gibt es eine Konjugiertenklasse.

Die Anzahl von nichtmaximalen isomorphen Untergruppen folgt aus den Gleichungen (7), (8) und (10). Es

gibt $R(i)$ Konjugiertenklassen. Beispiele:

$$R(21) = \chi_{-3}(1) + \chi_{-3}(3) + \chi_{-3}(7) + \chi_{-3}(21) = 1 + 0 + 1 + 0 = 2$$

$$21 = 1^2 - 1 \times 5 + 5^2 = 5^2 - 5 \times 1 + 1^2.$$

Zwei weitere Lösungen, $(r, s) = (5, 4)$ und $(r, s) = (4, 5)$ sind mittels der fünften Transformation von U_f [Gleichung (6)] zu den Lösungen $(r, s) = (1, 5)$ bzw. $(r, s) = (5, 1)$ äquivalent. Dies kann man sich auch graphisch veranschaulichen (Fig. 2).

$$R(12) = \chi_{-3}(1) + \chi_{-3}(2) + \chi_{-3}(3) + \chi_{-3}(4) + \chi_{-3}(6) + \chi_{-3}(12) = 1 - 1 + 0 + 1 + 0 + 0 = 1$$

$$12 = 2^2 - 2 \times 4 + 4^2.$$

Die Lösung $(r, s) = (4, 2)$ ist zur Lösung $(r, s) = (2, 4)$ äquivalent. Der Fall, daß (r, s) äquivalent zu (s, r) ist wie im diesem Beispiel, tritt dann auf, wenn $s = 2r$ oder $r = 2s$. Beide Lösungen ergeben dasselbe Gitter (Fig. 2). Der Index i ist dann durch 3 teilbar.

Immer und nur dann, wenn in der Primzahlzerlegung $i = p_1^{n_1} p_2^{n_2} \dots$ mindestens eine Primzahl $p_j \equiv 2 \pmod{3}$ zu einer ungeraden Potenz n_j vorkommt, ist $R(i) = 0$. Deshalb sind z.B. keine hexagonalen Untergruppen mit Index 5, 8 oder 10 möglich.

Literatur

- APOSTOL, T. M. (1976). *Introduction to Analytic Number Theory*, S. 176–186. Heidelberg: Springer.
- ASCHER, E. & JANNER, A. (1965). *Helv. Phys. Acta*, **38**, 551–572.
- BÄRNIGHAUSEN, H. (1980). *MATCH, Commun. Math. Chem.* **9**, 129–175.
- BAUMSCHLAG, B. & CHANDLER, B. (1968). *Schaum's Outline of Theory and Problems of Group Theory*, S. 161–162. New York: McGraw-Hill.
- BERTAUT, E. F. & BILLIET, Y. (1979). *Acta Cryst.* **A35**, 733–745.
- BILLIET, Y. (1973). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **96**, 327–334.
- BILLIET, Y. & BERTAUT, E. F. (1989). *International Tables for Crystallography*, Vol. A, S. 816–823. Dordrecht: Kluwer.
- BILLIET, Y. & SAYARI, A. (1984). *Acta Cryst.* **A40**, 624–631.
- CHAPUIS, G. (1992). *Modern Perspectives in Inorganic Crystal Chemistry*, herausgeber E. PARTHÉ, S. 1–16. Dordrecht: Kluwer.
- HASSE, H. (1964). *Vorlesungen über Zahlentheorie*, S. 98, 167, 172. Berlin: Springer.
- HERMANN, C. (1960). *Z. Kristallogr.* **113**, 142–154.
- HUPPERT, B. (1967). *Endliche Gruppen*, S. 37–46, 164. Berlin: Springer.
- KOCH, E. (1984). *Acta Cryst.* **A40**, 593–600.
- LEVEQUE, W. J. (1977). *Fundamentals of Number Theory*, S. 183. Reading: Addison-Wesley.
- MÜLLER, U. (1991). *Anorganische Strukturchemie*, S. 287–300. Stuttgart: Teubner.
- MÜLLER, U. (1992). *Inorganic Structural Chemistry*, S. 235–246. Chichester: Wiley.
- SUZUKI, M. (1980). *Group Theory*, Bd. I, S. 118. Berlin: Springer.
- ZAGIER, D.B. (1981). *Zetafunktionen und quadratische Körper*, S. 57–65. Heidelberg: Springer.

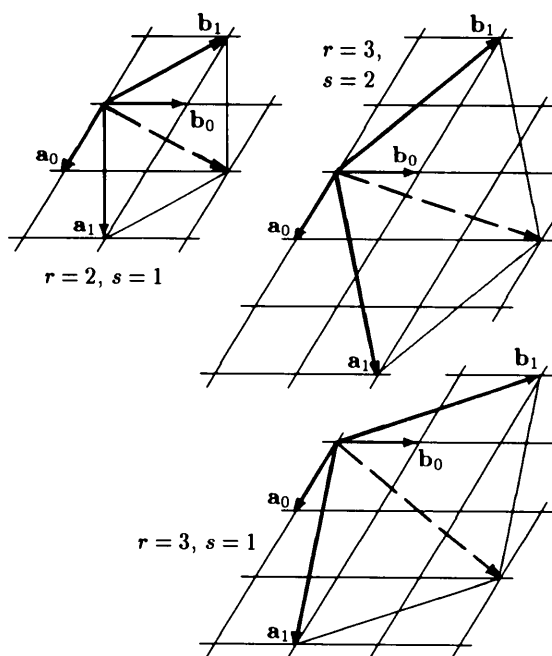


Fig. 2. Beispiele für Vergrößerungen der Elementarzelle einer trigonalen oder hexagonalen Raumgruppe. Die beiden Untergruppen mit $i = 7$, $(r, s) = (3, 2)$ und $(r, s) = (3, 1)$, sind zwei verschiedene Untergruppen Äquivalent zu $(r, s) = (3, 1)$ ist $(r, s) = (2, 3)$ (gestrichelter Vektor), d.h. beide ergeben dasselbe Gitter; ebenso sind $(r, s) = (3, 2)$ und $(r, s) = (1, 3)$ äquivalent. Für $i = 3$ gibt es nur eine Art zur Zellvergrößerung, $(r, s) = (2, 1)$ und $(r, s) = (1, 2)$ sind äquivalent.