Acta Cryst. (1956). **9**, 322

Les groupes de translation non primitifs et la méthode statistique.

Par E. F. Bertaut, *Laboratoire d'Électrostatique et de Physique du Métal, Institut Fourier, Grenoble, France*

(*Reçu le* 12 *janvier* 1956)

Dans cette note on généralise l'emploi de la méthode statistique pour les groupes de translation non primitifs. Les notations sont celles du mémoire (Bertaut, 1955) que cette note complète. Le facteur de structure normalisé continue à être défini par

$$E(h) = \sum_{j=1}^{t} \varphi_j(h)\xi_j(h) \qquad (1)$$

(ξ partie trigonométrique; φ facteur atomique 'modifié'; t nombre de positions indépendantes).

Nous discuterons d'abord les propriétés de ξ, ensuite celles de φ.

Soit T un groupe de translation non primitif (A, B, C, I, R, F) d'ordre τ ($\tau = 2$ pour A, B, C, I; $\tau = 3$ pour R; $\tau = 4$ pour F). Si n est l'ordre de symétrie (= nombre de points équivalents) dans le groupe primitif P, l'ordre de symétrie m dans le groupe correspondant T sera

$$m = \tau n\,. \qquad (2)$$

Notons par ξ_T et ξ_P les parties trigonométriques correspondantes des facteurs de structure. Quand $\xi_T \neq 0$, on a

$$\xi_T = \tau\xi_P\,. \qquad (3)$$

Rappelons que dans le groupe P on a pour une réflexion générale

$$\overline{\xi_P^2} = n\,, \qquad (4)$$

et pour une réflexion spéciale de poids statistique p

$$\overline{\xi_P^2} = pn\,. \qquad (5)$$

De (3) et (4) on déduit que pour une réflexion générale

$$\overline{\xi_T^2} = \tau^2 n = \tau m\,. \qquad (6)$$

L'ordre de translation τ das un groupe T agit donc exactement comme le poids statistique p dans un groupe P (c'est à dire le nombre de points équivalents est multiplié par un facteur τ).

Plus généralement on a pour une réflexion de poids p

$$\overline{\xi_T^2} = \tau p m\,. \qquad (7)$$

Pour les groupes P les produits $\xi(h)\xi(h')$, et les puissances ξ^2, ξ^3 et ξ^4 ont été linéarisées sous la forme

$$\sum_s \xi(H_s) \qquad (8)$$

dans des tables (Bertaut & Dulac, 1955). Pour les produits et puissances correspondantes des groupes T les formes linéaires (8) des tables restent valables à condition de les multiplier par τ pour les produits et puissances d'ordre deux, par τ^2 pour les produits et puissances d'ordre trois etc.

φ dans (1) est toujours défini de façon que $E(h)$ soit normalisé $(\overline{E(h)^2} = 1)$, c'est à dire tel que

$$\varphi_j(h) = f_j(h)/\sqrt{\overline{F(h)^2}}\,. \qquad (9)$$

On a donc dans un groupe de translation T pour une réflexion de poids statistique p

$$\varphi_j(h) = f_j(h)/\sqrt{\left(\sum_{j=1}^{t} p\tau m_j f_j(h)^2\right)}\,. \qquad (10)$$

Souvent il est possible de remplacer $f_j(h)$ par le nombre Z_j d'électrons sur l'atome j.

Avec les modification décrites ici, en particulier grâce aux formules (3), (7) et (10), il est aisé de transposer les résultats de la méthode de détermination de signes et d'approche directe (Bertaut, 1955) pour les groupes de translation non primitifs.

Références

Bertaut, E. F. (1955). *Acta Cryst.* **8**, 823.

Bertaut, E. F. & Dulac, J. (1955). *Tables de Linéarisation des Produits et Puissances des Facteurs de Structure.* Grenoble: Laboratoire d'Électrostatique et de Physique du Métal.

Acta Cryst. (1956). **9**, 322

Tables de linéarisation des produits et puissances des facteurs de structure.

Par E. F. Bertaut et J. Dulac, *Laboratoire d'Électrostatique et de Physique du Métal, Institut Fourier, Grenoble, France*

(*Reçu le* 15 *janvier* 1956)

Des tables de linéarisation des produits et puissances des facteurs de structure présentent un interêt à la fois théorique et pratique.

Interêt théorique: — Soit un ensemble de q objets e_j ($j = 1, \ldots, q$). Si l'on a

$$e_j e_k = \sum_{l=1}^{n} g_{jkl} e_l \qquad (l = 1, \ldots, n) \qquad (1)$$

où les g_{jkl} sont des nombres réels ou complexes, on dit que les e_j constituent la base d'une algèbre (Bhagavantam & Venkatarayudu, 1951).

Or les parties trigonométriques $\xi(h_j)$ des facteurs de structure sont de tels objets puisqu'on peut linéariser leurs produits (Bertaut, 1955) sous la forme (1). Les $\xi(h)$ constituent donc la base d'une algèbre commutative. C'est l'algèbre du groupe d'espace correspondant, en d'autres termes, *les relations de linéarisation* (1) écrites avec les $\xi(h)$ pour un groupe donné, *sont* aussi *représentatives du groupe* que le sont par exemple l'énumération des coordonnées de points équivalents ou l'énumération des opérations de symétrie.

Interêt pratique: — La méthode statistique (Bertaut, 1955) de détermination de signes fait intervenir le calcul de valeurs moyennes de produits de facteurs de structure, l'expression la plus générale étant

$$\overline{E^a(h_1)E^b(h_2)\dots E^k(h_m)} \quad (a, b, \dots, k = \text{exposants entiers}) . \qquad (2)$$

Pour l'évaluer dans un groupe donné, on doit écrire la relation de linéarisation

$$\xi^a(h_1)\xi^b(h_2)\dots\xi^k(h_m) = \sum_s a_s\xi(H_s) \qquad (3)$$

et y chercher le coefficient de la partie non aléatoire (c'est à dire a_s avec la condition $H_s = 0$).

La linéarisation de produits tels que (3) est également nécessaire dans la méthode d'approche directe (Bertaut, 1955).

Les tables de linéarisation que nous avons rédigées (Bertaut & Dulac, 1955) contiennent l'information suivante:

1°. Groupes centrosymétriques. — On donne

(*a*) les relations de symétrie entre les facteurs de structure (par exemple $\xi(hkl)=\xi(\bar{h}\bar{k}\bar{l})=\xi(h\bar{k}\bar{l})(-1)^{k+1}=\xi(\bar{h}k\bar{l})(-1)^{1+h}=\xi(\bar{h}\bar{k}l)(-1)^{h+k}$ dans le groupe D_{2h}^2–*Pnnn*),

(*b*) la linéarisation des produits de deux facteurs de structure $\xi(h)\xi(h')$,

(*c*) la linéarisation des carrés $\xi(h)^2$,

(*d*) la linéarisation des puissances troisièmes et quatrièmes de $\xi(h)$ quand l'ordre de symétrie ne dépasse pas 8.

2°. Groupes sans centre de symétrie. — On donne les relations de linéarisation des carrés des modules $|\xi(h)|^2$ qui servent à la détermination des facteurs de structure invariants (indépendants du choix de l'origine) et de leurs signes réels (± 1).

3°. Groupes plans. — La même information que sous 1° et 2° est donnée.

Une préface de 18 pages explique les abréviations et notations et l'usage des tables, la détermination des poids statistiques p, des facteurs atomiques 'modifiés', l'application des tables à la détermination des signes des facteurs de structure et à l'évaluation des moyennes (2).

Une table de matières permet de retrouver aisément les tableaux de correspondant à un groupe donné.

Les tables de linéarisation (75 pages) ont été reproduites en 100 exemplaires seulement.* Si les tables s'avéraient utiles pour le cristallographe, une réimpression pourrait être envisagées dans une meilleure présentation.

Références

BERTAUT, E. F. (1955). *Acta Cryst.* 8, 823.

BERTAUT, E. F. & DULAC, J. (1955). *Tables de Linéarisation des Produits et Puissances des Facteurs de Structure.* Grenoble: Laboratoire d'Électrostatique et de Physique du Métal.

BHAGAVANTAM, S. & VENKATARAYUDU, T. (1951). *Theory of Groups and its Application to Physical Problems.* Waltair: Andhra University.

* Les tables de linéarisation ont été imprimées sur stencil par les soins du Laboratoire d'Électrostatique et de Physique du Métal, Centre National de la Recherche Scientifique, Institut Fourier, Grenoble, France; elles sont cédées au prix coûtant de 400 fr. + frais d'expédition.

Des microfilms peuvent être obtenus par le Centre de Documentation du Centre National de la Recherche Scientifique, 18 Rue Pierre Curie, Paris 5e, France.

Notes and News

Announcements and other items of crystallographic interest will be published under this heading at the discretion of the Editorial Board. Copy should be sent direct to the British Co-editor (R. C. Evans, Crystallographic Laboratory, Cavendish Laboratory, Cambridge, England).

Acta Crystallographica

Prof. E. W. Hughes will not be able to assume his duties as American Co-editor until June 1956. Articles should, therefore, not be submitted to him before that date.

Double reflexion in aluminium–copper alloys

An error occurs in the above article by J. M. Silcock (*Acta Cryst.* (1956), 9, 86). In Table 1 the phrase in brackets in the heading of the first column should read '(Al lattice indices)'.

X-Ray Microscopy and Microradiography

A Symposium on the above subject, sponsored by the International Union of Pure and Applied Physics, will be held in the Cavendish Laboratory, Cambridge, England, during the period 16–21 August 1956. The Symposium will include all microscopic methods which employ X-rays, and it is intended to be a gathering of those with some direct experience or interest, rather than a large public conference. Primary emphasis will be placed on the physical methods in theory and practice. Sessions are planned on the reflexion method, the contact method