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

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

(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

$$m = \tau n \,. \tag{2}$$

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

$$\xi_T = \tau \xi_P \,. \tag{3}$$

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

$$\overline{\xi_P^2} = n \,, \tag{4}$$

et pour une réflexion spéciale de poids statistique p

$$\overline{\xi_P^2} = pn \,. \tag{5}$$

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

$$\overline{\xi_T^2} = \tau^2 n = \tau m \,. \tag{6}$$

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

$$\overline{\xi_T^2} = \tau p m \,. \tag{7}$$

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

$$\sum_s \xi(H_s) \tag{8}$$

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

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

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

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

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

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

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).