

The rather high  $R$  values are believed to be due to the systematic errors known to affect the observed intensities. The available experimental data are not considered good enough to sustain a more accurate structure determination than the tetragonal approximation reported here. The main features of the structure, however, are probably correct. Like the previously studied tetraborate structures,  $\text{Ag}_2\text{O} \cdot 4\text{B}_2\text{O}_3$  (Krogh-Moe, 1965*a*) and  $\text{Na}_2\text{O} \cdot 4\text{B}_2\text{O}_3$  (Hyman, Perloff, Mauer & Block, 1967), the  $\text{BaO} \cdot 4\text{B}_2\text{O}_3$  structure consists of two separate interlocking three-dimensional infinite networks, each of which is built up from alternating triborate and pentaborate groups. Triborate groups are linked only to pentaborate groups as in the sodium tetraborate (whereas the group sequence is different in the silver tetraborate). Fig. 1 shows one of the twin networks in a projection along the  $c$  axis.

Bond lengths are fairly inaccurate, ranging for instance from 1.1 to 1.7 Å for the individual boron–oxygen bonds. The average boron–oxygen bond length of 1.46 Å is in better agreement with the expected values, however. The average bond length in each boron–oxygen polyhedron shows less scatter, ranging from 1.56 to 1.33 Å (the tetrahedral bond length averages being larger than the triangular). With the systematic errors in mind, no significance should be attached to the details of the structure, such as bond lengths (or the distortions of the triborate and pentaborate groups).

Further support for the above structure proposal was obtained from infrared spectroscopy. The infrared spectrum of crystalline barium tetraborate is fairly similar to that of crystalline silver tetraborate, as shown in Fig. 2. Krogh-Moe

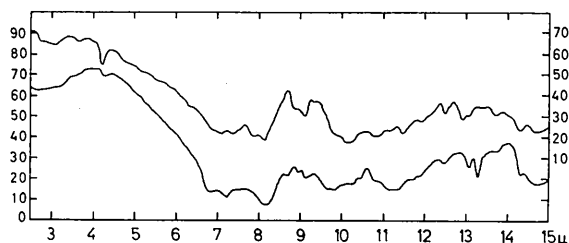


Fig. 2. Infrared spectra, in the range from 2.5 to 15 microns, of crystalline barium tetraborate (upper curve) and crystalline silver tetraborate (lower curve). The transmission percentages to the right refer to the upper curve. The spectra were obtained with KBr discs.

(1965*b*) has previously demonstrated that the infrared spectra of silver tetraborate and sodium tetraborate look much alike. The infrared spectra therefore confirm the close structural relationship of barium tetraborate with the silver and sodium tetraborates.

#### References

- HYMAN, A., PERLOFF, A., MAUER, F. & BLOCK, S. (1967). *Acta Cryst.* **22**, 815.  
 KROGH-MOE, J. (1960). *Acta Chem. Scand.* **14**, 1229.  
 KROGH-MOE, J. (1965*a*). *Acta Cryst.* **18**, 77.  
 KROGH-MOE, J. (1965*b*). *Phys. Chem. Glasses*, **6**, 46.  
 LEVIN, E. M. & MCMURDIE, H. F. (1949). *J. Amer. Ceram. Soc.* **32**, 99.

*Acta Cryst.* (1969). B25, 2154

**Korrekturen zu den Angaben 'Untergruppen' in den Raumgruppen der Internationalen Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen (1935), Band 1. Corrections to the sections 'Untergruppen' of the space groups in Internationale Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen (1935), Vol. 1.** Von E. ASCHER, *Battelle Institute, Advanced Studies Center, 7, route de Drize, 1227 Carouge, Genève, Schweiz*, und V. GRAMLICH\* und H. WONDRAUSCHKEK, *Mineralogisches Institut der Universität (Technische Hochschule), 75 Karlsruhe, Kaiserstrasse 12, Deutschland*

(Eingegangen am 13. Januar 1969)

1935 erschien der erste Band der *Internationalen Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen*. Die Beschreibung der Raumgruppen in diesem Band enthält unter der Überschrift 'Untergruppen' Angaben über gewisse Untergruppen der Raumgruppen. Die Tabellen enthalten verschiedene Irrtümer (Koptsik (1966) übernahm diese Angaben mit nur wenigen Korrekturen), die im folgenden korrigiert werden sollen. Man beachte:

1. Nur die 'zellengleichen' Untergruppen (in denen alle Translationen der Ausgangsraumgruppe erhalten bleiben) sind in Band I von 1935 aufgeführt.

2. Die Hermann–Mauguin Symbole von 1935 stimmen nicht in allen Fällen mit den Symbolen der *International*

Vol. 1 of *Internationale Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen* was published in 1935. In this Volume the description of the space groups includes some remarks on certain subgroups of the space groups under the headings 'Untergruppen'. Koptsik (1966) reproduced these data with partial corrections only. Several errors have been found and are corrected in the following. Please note:

- (i) Only the 'zellengleiche' subgroups (in which all translations of the original space group are retained) are given in the volume.  
 (ii) The Hermann–Mauguin symbols of 1935 do not always agree with the symbols given in *International Tables*

\* Gegenwärtige Anschrift: Institut f. Kristallographie und Petrographie der ETH, 8006 Zürich, Sonneggstrasse 5, Schweiz.

*Tables for X-ray Crystallography* (1952) Band I, überein. Unsere Verbesserungen beziehen sich auf die Symbole von 1935.

3. Nach unserer Kenntnis sind seit 1935 keine Arbeiten veröffentlicht worden, welche die Untergruppenbeziehungen der Raumgruppen zueinander betrachten. Lediglich zwei interne Berichte:

(a) E. Ascher: *Lattices of subgroups (with same unit cell) of the space groups*

(b) J. Neubüser und H. Wondratschek: *Tables of the maximal subgroups of the space groups*

stehen auf Anfrage in begrenzter Zahl zur Verfügung und können bei den Autoren angefordert werden.

A. Niggli, Zürich/Schweiz, hat früher für zahlreiche Raumgruppen die zellengleichen Untergruppen abgeleitet. Wir danken ihm für den Vergleich unserer Korrekturen mit seinen Aufzeichnungen.

*for X-ray Crystallography* (1952) Vol. I. Our corrections refer to the 1935 symbols.

(iii) No tables concerning subgroup relations of the space groups seem to have been published since 1935. Two internal reports are known to us:

(a) E. Ascher: *Lattices of subgroups (with same unit cell) of the space groups.*

(b) J. Neubüser and H. Wondratschek: *Tables of the maximal subgroups of the space groups.*

Both papers are available to a limited extent and can be requested from the authors.

We want to thank Prof. A. Niggli, Zürich, Switzerland, for comparing our findings with his own notes which he had made earlier on several space groups.

Seite 96	$C_4^2-Cc$	Ergänze: Untergruppe $C_1^1-C1$ ;	Page 96	$C_4^2-Cc$	Add subgroup $C_1^1-C1$ .
Seite 104	$C_{2v}^3-Pcc$	Ergänze: Untergruppe $C_1^1-P1$ ;	Page 104	$C_{2v}^3-Pcc$	Add subgroup $C_1^1-P1$ .
Seite 106	$C_{2v}^6-Pnc$	Ersetze: $Pc11$ durch $Pc$ sowie $Pn$ durch $Pn11$ ;	Page 106	$C_{2v}^6-Pnc$	For $Pc11$ read $Pc$ and for $Pn$ read $Pn11$ .
Seite 107	$C_{2v}^8-Pba$	Ergänze: $C_1^1-P1$ ;	Page 107	$C_{2v}^8-Pba$	Add $C_1^1-P1$ .
Seite 130	$D_{2h}^6-Pnna$	Ersetze: $C_2^2$ durch $C_2^2$ ;	Page 130	$D_{2h}^6-Pnna$	For $C_2^2$ read $C_2^2$ .
Seite 131	$D_{2h}^7-Pmna$	Ersetze: $C_{2v}^2$ durch $C_{2v}^4$ ;	Page 131	$D_{2h}^7-Pmna$	For $C_{2v}^2$ read $C_{2v}^4$ .
Seite 133	$D_{2h}^9-Pbam$	Ersetze: $D_2^2$ durch $D_2^3$ ; Streiche in der 3. Zeile die 2. bis 4. Untergruppe ( $C_2^2-\dots-P11m$ );	Page 133	$D_{2h}^9-Pbam$	For $D_2^2$ read $D_2^3$ ; in line 3 delete the 2nd to 4th subgroups ( $C_2^2-\dots-P11m$ ). $D_{2h}^{10}-Pccn$ For $C_1^1$ read $C_1^1$ .
Seite 138	$D_{2h}^{10}-Pccn$	Ersetze: $C_1^1$ durch $C_1^1$ ;	Page 138	$D_{2h}^{15}-Pbca$	For $P2$ read $P2_1$ .
Seite 151	$D_{2h}^{28}-Imma$	Ersetze: $C_{2v}^{21}$ durch $C_{2v}^{20}$ ;	Page 151	$D_{2v}^{28}-Imma$	For $C_{2v}^{21}$ read $C_{2v}^{20}$ .
Seite 152-159	Bei allen monoklinen Untergruppen ist die Orientierung inkonsequent angegeben. Es muss stets heissen $P112$ statt $P2$ , $P11m$ statt $Pm$ , $P112/m$ statt $P2/m$ usw.		Pages 152-159	For all the monoclinic subgroups the orientation has been stated inconsistently. In all cases read $P112$ for $P2$ , $P11m$ for $Pm$ , $P112/m$ for $P2/m$ , etc.	
Seite 159	$C_{2h}^2-P4_2/m$	Ersetze: $P_1$ durch $P1$ ;	Page 159	$C_{2h}^2-P4_2/m$	For $P_1$ read $P1$ .
Seite 160	$C_{4h}^4-P4_2/n$	Ersetze: $Pn$ durch $P11n$ ;	Page 160	$C_{4h}^4-P2_2/n$	For $Pn$ read $P11n$ .
Seite 171	$D_{2d}^6-P4c2$	Ersetze: $C_4^2$ durch $C_2^2$ ;	Page 171	$D_{2d}^6-P4c2$	For $C_4^2$ read $C_2^2$ .
Seite 187	$C_{4v}^7-P4mc$	Ergänze: Untergruppen: $C_4^3-P4_2$ ; $C_{2v}^3-Pmm$ ; $C_{2v}^{13}-Ccc$ ; $C_2^1-P112$ ; $C_1^1-Pm$ ; $C_4^4-Cc$ ; $C_1^1-P1$ ;	Page 187	$C_{4v}^7-P4mc$	Add subgroups $C_4^3-P4_2$ , $C_{2v}^3-Pmm$ , $C_{2v}^{13}-Ccc$ , $C_2^1-P112$ , $C_1^1-Pm$ , $C_4^4-Cc$ , $C_1^1-P1$ .
Seite 198	$D_4^6-P4_21$	Ersetze: $C_2^2-P2$ durch $C_2^2-P2_1$ ;	Page 198	$D_4^6-P4_21$	For $C_2^2-P2$ read $C_2^2-P2_1$ ;
Seite 205	$D_{2h}^2-P4/mcc$	Ersetze: $P_1$ durch $P1$ ;	Page 205	$D_{2h}^2-P4/mcc$	for $P_1$ read $P1$ .
Seite 209	$D_{4h}^5-P4/mbm$	Ersetze: $D_2^2$ durch $D_4^2$ ;	Page 209	$D_{4h}^5-P4/mbm$	For $D_2^2$ read $D_4^2$ .
Seite 213	$D_{2h}^8-P4/ncc$	Ersetze: $C_{2h}^2$ durch $C_{2h}^3$ ;	Page 213	$D_{4h}^8-P4/ncc$	For $C_{2h}^2$ read $C_{2h}^3$ .
Seite 215	$D_{4h}^9-P4/mmc$	Ersetze: $P42_1c$ durch $P\bar{4}2_1c$ ;	Page 215	$D_{4h}^9-P4/ncc$	For $P42_1c$ read $P\bar{4}2_1c$ .
Seite 220	$D_{4h}^3-P4/mbc$	Ersetze: $Pccm$ durch $Cccm$ ;	Page 215	$D_{4h}^9-P4/mmc$	For $Pccm$ read $Cccm$ .
Seite 221	$D_{4h}^4-P4/mnm$	Ersetze: $C_1^1-P112$ durch $C_2^1-P112$ ;	Page 220	$D_{4h}^{13}-P4/mbc$	For $C_1^1-P112$ read $C_2^1-P112$ .
Seite 222	$D_{2d}^9-P4/nmm$	Ersetze: $D_{2d}^2$ durch $D_{2d}^3$ ;	Page 221	$D_{4h}^4-P4/mnm$	For $D_{2d}^2$ read $D_{2d}^3$ ;
Seite 223	$D_{3h}^5-P4/nmc$	Ergänze: $C_1^1-P11m$ ; $C_2^2-Pn$ ; $C_3^3-Cm$ ;	Page 221	$D_{4h}^4-P4/nmm$	add $C_1^1-P11m$ , $C_2^2-Pn$ , $C_3^3-Cm$ .
Seite 259	$D_{3d}^3-C\bar{3}m$	Ersetze: $P_1$ durch $P1$ ;	Page 223	$D_{3h}^5-P4/nmc$	For $P_1$ read $P1$ .
Seite 260	$D_{3d}^4-C\bar{3}c$	Ersetze: $C_1^1-C3$ durch $C_1^1-C1$ ;	Page 259	$D_{3d}^3-C3m$	For $C_1^1-C3$ read $C_1^1-C1$ .
Seite 273	$C_{6h}^2-C6_3/m$	Ersetze: $C_{2h}^2$ durch $C_{2h}^6$ ;	Page 260	$D_{3d}^4-C\bar{3}c$	For $C_{2h}^2$ read $C_{2h}^6$ .
Seite 276	$D_{2h}^3-C\bar{6}c2$	Ersetze: $C_6^5$ durch $C_6^6$ ;	Page 273	$C_{6h}^2-C6_3/m$	For $C_6^5$ read $C_6^6$ .
Seite 283	$C_{6v}^2-C6cc$	Ersetze: $C_{2v}^1$ durch $C_{2v}^{15}$ ;	Page 276	$D_{2h}^3-C\bar{6}c2$	For $C_{2v}^1$ read $C_{2v}^{15}$ .
Seite 284	$C_{6v}^3-C6cm$	Ersetze: $Cm$ durch $Cc$ ;	Page 283	$C_{6v}^2-C6cc$	For $Cm$ read $Cc$ ; for $Cm11$ read $Cc11$ .
		$Cm11$ durch $Cc11$ ;	Page 284	$C_{6v}^3-C6cm$	For $C_6^5$ read $C_6^6$ .

- Seite 286  $C_{6v}^4-C6mc$  Ersetze:  $C_6^5$  durch  $C_6^6$ ;  
 Seite 294  $D_6^5-C6_42$  Ersetze:  $C_3$  durch  $C_3^2$ ;  
 Seite 300  $D_{6h}^3-C6/mcm$  Ersetze:  $D_3^1-C32$  durch  
 $D_2^2-C32$ ;  
 Ersetze:  $C_{2h}^4-C112_1/m$  durch  
 $C_{2h}^2-C112_1/m$ ;  
 Ersetze:  $C_{2h}^4-C2/m11$  durch  
 $C_{2h}^6-C2/c11$ ;  
 Ersetze:  $C_2^1-C112$  durch  
 $C_2^2-C112_1$ ;  
 Seite 303  $D_{6h}^4-C6/mmc$  Ersetze:  $C_{2h}^1-C112/m$  durch  
 $C_{2h}^2-C112_1/m$ ;  
 Seite 318  $T_d^4-Fd3$  Ersetze:  $C_{3i}^2-R3$  durch  $C_{3i}^3-R\bar{3}$ ;  
 Seite 329  $T_d^4-P\bar{4}3n$  Ersetze:  $C_{2v}^{11}-Cmm$  durch  
 $C_{2v}^{13}-Ccc$ ;  
 Ersetze:  $C_3^3-Cm$  durch  $C_3^4-Cc$ ;  
 Seite 333  $T_d^2-I\bar{4}3d$  Ersetze:  $F_c$  durch  $F_d$ ;  
 Seite 346  $O_h^6-P4_33$  Ersetze:  $P_{4_32}$  durch  $P_{4_321}$ ;  
 Ersetze:  $C_2^1$  durch  $C_1^1$ ;  
 Seite 350  $O_7-P4_13$  Ersetze:  $D_4^8-P4_12$  durch  
 $D_4^4-P4_12_1$ ;  
 Ersetze:  $C_4^4-P4_3$  durch  $C_4^2-P4_1$ ;  
 Ersetze:  $P_{2_12_12_1}$  durch  $P_{2_12_12_1}$ ;  
 Seite 357  $O_h^2-Pn3n$  Ergänze:  $C_{2h}^6-C2/c$ ;  $C_{2h}^4-P2/n$ ;  
 Ersetze:  $P_c$  durch  $P_n$ ;  
 Seite 360  $O_h^3-Pm3n$  Ergänze:  $C_{4h}^2-P4_2/m$ ;  $S_4^1-P\bar{4}$ ;  
 $C_4^3-P4_2$ ;  
 Ersetze:  $D_{2v}^2$  durch  $C_{2v}^1$ ;  
 Seite 362  $O_h^4-Pn3m$  Ergänze:  $C_{4h}^4-P4_2/n$ ;  $S_4^3-P\bar{4}$ ;  
 $C_4^3-P4_2$ ;  
 Ersetze:  $P_c$  durch  $P_n$ ;  
 Ersetze:  $P2/c$  durch  $P2/n$ ;  
 Seite 363  $O_h^5-Fm3m$  Ergänze:  $C_{4h}^5-F4/m$ ;  $S_4^2-F\bar{4}$ ;  
 $C_4^5-F4$ ;  
 Streiche die letzte Untergruppe der  
 4. Zeile:  $C_{2v}^{20}-Imm$ ;  
 Seite 367  $O_h^5-Fm3c$  Ergänze:  $C_{4h}^5-F4/m$ ;  $S_4^2-F\bar{4}$ ;  
 $C_4^5-F4$ ;  
 Ersetze:  $F4/mcm$  durch  $F4/mmc$ ;  
 Ersetze:  $F4cm$  durch  $F4mc$ ;  
 Seite 369  $O_h^7-Fd3m$  Ersetze:  $D_{3d}^5-R3m$  durch  
 $D_{3d}^5-R\bar{3}m$ ;  
 Ersetze:  $D_{2h}^{23}$  durch  $D_{2h}^{28}$ ;  
 Ergänze:  $C_{4h}^6-F4_1/d$ ;  $S_4^2-F\bar{4}$ ;  
 $C_4^6-F4_1$ ;  
 Seite 370  $O_h^8-Fd3c$  Streiche die letzte Untergruppe der  
 4. Zeile  $C_{2v}^{21}-Iba$ ;  
 Ergänze:  $C_{4h}^6-F4_1/d$ ;  $S_4^2-F\bar{4}$ ;  
 $C_4^6-F4_1$ ;  
 Ersetze:  $T_d^4$  durch  $T_d^5$ ;  
 Seite 374  $O_h^9-Im3m$  Ergänze:  $C_{4h}^5-I4/m$ ;  $S_4^2-I\bar{4}$ ;  $C_4^5-I4$ ;  
 Streiche die letzte Untergruppe der  
 4. Zeile  $C_{2v}^{18}-Fmm$ ;  
 Seite 375  $O_h^{10}-Ia3d$  Ergänze:  $C_{4h}^6-I4_1/a$ ;  $S_4^2-I\bar{4}$ ;  
 $C_4^6-I4_1$ ;  
 Streiche die letzte Untergruppe der  
 4. Zeile  $C_{2v}^{19}-Fdd$ ;  
 Page 286  $C_{6v}^4-C6mc$  For  $C_6^5$  read  $C_6^6$ .  
 Page 294  $D_6^5-C6_42$  For  $C_3$  read  $C_3^2$ .  
 Page 300  $D_{6h}^3-C6/mcm$  For  $D_3^1-C32$  read  
 $D_2^2-C32$ .  
 For  $C_{2h}^4-C112_1/m$  read  
 $C_{2h}^2-C112_1/m$ .  
 For  $C_{2h}^4-C2/m11$  read  
 $C_{2h}^6-C2/c11$ .  
 For  $C_2^1-C112$  read  $C_2^2-C112_1$ .  
 Page 303  $D_{6h}^4-C6/mmc$  For  $C_{2h}^1-C112/m$  read  
 $C_{2h}^2-C112_1/m$ .  
 Page 318  $T_d^4-Fd3$  For  $C_{3i}^2-R3$  read  $C_{3i}^3-R\bar{3}$ .  
 Page 329  $T_d^4-P\bar{4}3n$  For  $C_{2v}^{11}-Cmm$  read  $C_{2v}^{13}-Ccc$ .  
 For  $C_3^3-Cm$  read  $C_3^4-Cc$ .  
 Page 333  $T_d^2-I\bar{4}3d$  For  $F_c$  read  $F_d$ .  
 Page 346  $O_h^6-P4_33$  For  $P_{4_32}$  read  $P_{4_321}$ .  
 For  $C_2^1$  read  $C_1^1$ .  
 Page 350  $O_7-P4_13$  For  $D_4^8-P4_12$  read  $D_4^4-P4_12_1$ .  
 For  $C_4^4-P4_3$  read  $C_4^2-P4_1$ .  
 For  $P_{2_12_12_1}$  read  $P_{2_12_12_1}$ .  
 Page 357  $O_h^2-Pn3n$  Add  $C_{2h}^6-C2/c$ ,  $C_{2h}^4-P2/n$ ;  
 for  $P_c$  read  $P_n$ .  
 Page 360  $O_h^3-Pm3n$  Add  $C_{4h}^2-P4_2/m$ ,  $S_4^1-P\bar{4}$ ,  $C_4^3-P4_2$ .  
 For  $D_{2v}^2$  read  $C_{2v}^1$ .  
 Page 362  $O_h^4-Pn3m$  Add  $C_{4h}^4-P4_2/n$ ,  $S_4^3-P\bar{4}$ ,  $C_4^3-P4_2$ .  
 for  $P_c$  read  $P_n$ .  
 For  $P2/c$  read  $P2/n$ .  
 Page 363  $O_h^5-Fm3m$  Add  $C_{4h}^5-F4/m$ ,  $S_4^2-F\bar{4}$ ,  $C_4^5-F4$ .  
 Delete the last subgroup in line 4:  
 $C_{2v}^{20}-Imm$ .  
 Page 367  $O_h^5-Fm3c$  Add  $C_{4h}^5-F4/m$ ,  $S_4^2-F\bar{4}$ ,  $C_4^5-F4$ .  
 For  $F4/mcm$  read  $F4/mmc$ .  
 For  $F4cm$  read  $F4mc$ .  
 Page 369  $O_h^7-Fd3m$  For  $D_{3d}^5-R3m$  read  $D_{3d}^5-R\bar{3}m$ .  
 For  $D_{2h}^{23}$  read  $D_{2h}^{28}$ .  
 Add  $C_{4h}^6-F4_1/d$ ,  $S_4^2-F\bar{4}$ ,  $C_4^6-F4_1$ .  
 Page 370  $O_h^8-Fd3c$  Delete the last subgroup in line 4:  
 $C_{2v}^{21}-Iba$ .  
 Add  $C_{4h}^6-F4_1/d$ ,  $S_4^2-F\bar{4}$ ,  $C_4^6-F4_1$ .  
 For  $T_d^4$  read  $T_d^5$ .  
 Page 374  $O_h^9-Im3m$  Add  $C_{4h}^5-I4/m$ ,  $S_4^2-I\bar{4}$ ,  $C_4^5-I4$ .  
 Delete the last subgroup in line 4:  
 $C_{2v}^{18}-Fmm$ .  
 Page 375  $O_h^{10}-Ia3d$  Add  $C_{4h}^6-I4_1/a$ ,  $S_4^2-I\bar{4}$ ,  $C_4^6-I4_1$ .  
 Delete the last subgroup in line 4:  
 $C_{2v}^{19}-Fdd$ .

## References

- Internationale Tabellen zur Bestimmung von Kristallstrukturen* (1935), Bd. I. *Gruppentheoretische Tafeln*. Berlin: Borntraeger.  
*International Tables for X-ray Crystallography* (1952), Vol. I. Birmingham: Kynoch Press.  
 KOPTSIK, V. A. (1966). *Shubnikovskie gruppi*. Moscow University.