Canadian Mineralogist
Vol. 16, pp. 291-292 (1978)

SUR QUELQUES RELATIONS D'ÉQUIVALENCE DANS LES GROUPES D'ESPACE MAGNÉTIQUES*

E. F. BERTAUT
Laboratoire de Cristallographie, C.N.R.S., 166 X, 38042 Grenoble, France

Sommaire

Si dans la décomposition d'un groupe d'espace un sous-groupe d'indice 2 intervient deux fois, c'est-à-dire dans deux repères différents, une relation d'équivalence entre groupes magnétiques est induite. La méthode qui utilise conjointement les symboles de Belov d'une part et ceux d'Opechowski–Guccione d'autre part évite certainement des erreurs de tabulation.

Abstract

When, in the decomposition of a space group a subgroup of index 2 occurs twice, *i.e.*, in different settings, an equivalency relation between magnetic groups is induced. The method which uses Belov and Opechowski–Guccione symbols jointly definitely avoids errors in tabulation.

Par définition, un groupe d'espace G a un sous-groupe maximal H d'indice 2 si

$$G = H + gH \tag{1}$$

Par définition un groupe d'espace magnétique G_m est tel que

$$G_m = H + g'H \tag{2}$$

Ici le sous-groupe H ne contient que des opérations de symétrie cristallographique classique, g est une opération de symétrie contenue dans G et non dans H; g' est une opération d'antisymétrie contenue dans G_m. Les groupes G et G_m sont isomorphes. On peut se demander quand deux groupes magnétiques G_{m1} et G_{m2} sont équivalents.

Aux groupes d'espace magnétiques se rattachent deux notations, celle de Belov *et al.* (1957), abrégée B, et celle d'Opechowski–Guccione (1964), abrégée O-G. Ces notations sont différentes lorsque g' est une antitranslation. C'est ce cas que nous étudions ici. La notation de Belov est alors H_{g^1}, c'est-à-dire qu'elle contient le symbole du sous-groupe H qui ne comporte que des éléments de symétrie et qui donc est un symbole de Hermann-Mauguin. L'indice inférieur désigne l'antitranslation.

Exemple: Si G est le groupe $Ccca$–D_{2h}^{22} dont le symbole explicité (= "full symbol") peut s'écrire C^{ncb}_{cna} (*cf.*, Tables Internationales 1952; Bertaut 1976a), ses huit sous-groupes maximaux de classe *mmm* sont H = *Pncb*, *Pcnb, Pnna, Pcca, Pcna, Pnca, Pccb* et *Pnnb*. L'antitranslation $\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,0$ est notée par l'indice inférieur C chez Belov *et al.* Donc P_Cnna, par exemple, est la notation B d'un groupe magnétique. Pour déceler les équivalences dans les notations B, il suffit de consulter les tables de conversion (Tables Internationales 1952) correspondant à des repères différents (= "different settings"). On trouve ainsi les équivalences

$$Pncb \doteqdot Pcna \doteqdot Pban - D_{2h}^{4}$$

Appliquant les mêmes transformations d'axes à l'indice C on trouve que P_Cncb et P_Ccna sont équivalents à P_Aban.

Il est évident que deux groupes magnétiques sont équivalents s'ils correspondent au même symbole standard de Belov. On peut également dire que chaque fois que la décomposition d'un groupe d'espace G (1) contient le sous-groupe H deux fois dans des repères différents, une relation d'équivalence est induite dans G_m (2). Le Tableau 1 montre que, parmi les huit sous-groupes de classe *mmm* de *Ccca*, il n'y en a que quatre qui sont distincts.

Dans la notation O–G des groupes magnétiques G_m, on garde le symbole de G avec des lettres non primées pour les éléments de symétrie classique et primées pour les éléments d'an-

TABLEAU 1. SOUSGROUPES DE CLASSE *mmm* DE *Ccca* = C^{ncb}_{cna} - D^{22}_{2h}

Centre en 0 0 0	*Pncb* (*Pban*)*	*Pcnb* (*Pban*)	*Pnna*	*Pcca*
Centre en ½ ½ 0	*Pcna* (*Pban*)	*Pnca* (*Pban*)	*Pccb* (*Pcca*)	*Pnnb* (*Pnna*)

* Les symboles qui ne sont pas conventionnels sont suivis par le symbole standard entre parentheses. Ce tableau est extrait des tableaux déposés, mais non imprimés avec la publication (Bertaut 1976a), sous le No. SUP 31500 de la British Library Lending Division; pour la microfiche de 14 pages, écrire à Executive Secretary, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH 1NZ, England.

*Dédié au Professeur J. D. H. Donnay pour son 75e anniversaire.

TABLEAU 2. GROUPES D'ESPACE MAGNETIQUES DE RESEAU C_P (P_C) ET DE FAMILLE *Ccca*

Symbole B.*	Plans d'Antisymétrie	Symbole O.G.	Symbole B. (standard)
$P_C ncb$	$c'\cdot a'$	$C_P c'ca'$	$P_A ban(D_{2h}^4)$
$P_C cnb$	$\cdot c'a'$	$C_P cc'a'$	$P_B bcn(D_{2h}^{14})$
$P_C nna$	$c'c'\cdot$	$C_P c'c'a$	$P_C nna(D_{2h}^6)$
$P_C cca$	$\cdot\ \cdot\ \cdot$	$C_P cca$	$P_C cca(D_{2h}^8)$
$P_C cna$	$\cdot c'\cdot$	$C_P cc'a$	$P_A ban(D_{2h}^4)$
$P_C nca$	$c'\cdot\ \cdot$	$C_P c'ca$	$P_B bcn(D_{2h}^{14})$
$P_C ccb$	$\cdot\ \cdot a'$	$C_P cca'$	$P_C cca(D_{2h}^8)$
$P_C nnb$	$c'c'a'$	$C_P c'c'a'$	$P_C nna(D_{2h}^6)$

* B.: Belov; O.G.: Opechowski-Guccione

tisymétrie. Un indice inférieur, ici *P* pour primitif, spécifie la nouvelle périodicité. (Exemple: $C_Pc'ca'$). Or puisqu'on connaît les plans de symétrie, présents dans le symbole de Belov, on connaît aussi ceux d'antisymétrie qui leur sont associés par l'antitranslation $\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\,0$ en se référant au "symbole explicité". C'est ainsi que l'on gardera parmi les lettres *c, c* et *a* celles qui sont déjà contenues dans le symbole de Belov (1ère colonne du Tableau 2); celles qui n'y sont pas sont forcément des plans d'antisymétrie, repérés par des lettres primées (2e colonne du Tableau 2). Il est alors facile de construire le symbole d'Opechowski & Guccione (3e colonne, Tableau 2) et d'écrire, grâce au symbole standard de Belov (4e colonne, Tableau 2), les relations d'équivalence suivantes qui ne sont pas évidentes à priori:

$$\begin{aligned} C_Pc'ca' &\doteqdot C_Pcc'a \\ C_Pcc'a' &\doteqdot C_Pc'ca \\ C_Pc'c'a &\doteqdot C_Pc'c'a \\ C_Pcca &\doteqdot C_Pcca' \end{aligned} \tag{3}$$

En même temps (3) corrige des erreurs existant dans la tabulation d'Opechowski & Guccione (1964).

Le lecteur pourra essayer à titre d'exercice de trouver des relations d'équivalence de G_m lorsque G est *Cmma* avec le résultat de relations tout à fait analogues à (3), c et c' étant remplacés par m et m' respectivement.

Il existe des méthodes plus directes, empruntées à la théorie des représentations, pour établir les relations d'équivalence (3), mais elles sont plus difficiles à manipuler (Bertaut 1975) que l'utilisation faite ici des deux notations des groupes magnétiques.

Finalement insistons, en dehors du sujet traité, sur d'autres avantages des deux notations et de leur tabulation: le passage de la notation d'Opechowski–Guccione à celle de Belov fournit tous les sous-groupes maximaux d'indice 2 qui sont "klassengleich" (isoclass: Bertaut 1976b), alors que le passage inverse, c'est-à-dire du symbole de Belov à celui d'Opechowski & Guccione, fournit les super-groupes minimaux (Bertaut 1977).

References

BELOV, N. V., NERONOVA, N. N. & SMIRNOVA, T. S. (1957): Les groupes de Shubnikov. *Kristallografiya* **2**, 315-325 (en russe).

BERTAUT, E. F. (1975): Equivalency relations in magnetic space groups (II). *Annls Phys. Sér.* **14**, 2, 109-124.

——— (1976a): Study of principal subgroups and of their general positions in C and I groups of class *mmm*–D_{2h}. *Acta Cryst.* **A32**, 380-387.

——— (1976b): On maximal subgroups with increased unit cells. *Acta Cryst.* **A32**, 976-983.

——— (1977): Minimal supergroups and magnetic space groups (III). *Annls Phys. Sér.* **15**, 2, 169-177.

HENRY, N. F. M. & LONSDALE, K., eds. (1952): *International Tables for X-Ray Crystallography. 1. Symmetry Groups.* Int. Union Cryst., Kynoch Press, Birmingham, England.

OPECHOWSKI, W. & GUCCIONE, R. (1965): Magnetic symmetry. *In* Magnetism. IIA. Statistical Models, Magnetic Symmetry, Hyperfine Interactions, and Metals (G. T. Rado & H. Suhl, eds.), Academic Press, New York.

Manuscrit reçu mars, 1978.