

was introduced (Figgis, Reynolds & Williams, 1980) to allow sufficient radial flexibility in the form factor when moving from the free ion to the molecule. However, these results indicate that the expansion of the form factor in reciprocal space, owing to the inclusion of correlation effects, corresponding to a contraction of the orbitals in real space, has virtually eliminated the need for the radial parameter  $\chi^{3d-3d}$ . Thus it seems the radial parameter was, in this case, accounting for small inadequacies owing to the use of free-ion form factors in the crystal.

### Summary

The inclusion of the more important double excitation configurations and all single configurations leads to changes in the single valence orbital HF form factors of transition-metal atoms which maximize at  $K/4\pi \sim 0.4 \text{ \AA}^{-1}$ , where they amount to  $\sim 5\%$  of the form factor at that value of  $K$ . The curves are, with one exception, expanded in reciprocal space, corresponding to a contraction of the spin density distribution in real space. For the ions with high-spin ground states the effects are much smaller. The changes in these form factors seem to be of relatively small

importance in the analysis of spin density distributions, at the present level of accuracy of the experimental measurement. Further examples may be considered in the future using the CI form factors in the refining procedure.

The X-ray form factors are contracted in reciprocal space by about the same absolute amount (Table 2) as the spin-only magnetic form factors are expanded.

### References

- CHANDLER, G. S., FIGGIS, B. N., PHILLIPS, R. A., REYNOLDS, P. A., MASON, R. & WILLIAMS, G. A. (1982). *Proc. R. Soc. London*, **384**, 31–48.
- CLEMENTI, E. & ROETTI, C. (1974). *At. Data Nucl. Data Tables*, **14**, 177–478.
- FIGGIS, B. N., REYNOLDS, P. A. & WILLIAMS, G. A. (1980). *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* pp. 2339–2347.
- FIGGIS, B. N., REYNOLDS, P. A., WILLIAMS, G. A., MASON, R., SMITH, A. R. P. & VARGHESE, J. N. (1980). *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* pp. 2333–2338.
- GLASS, R. (1984). In preparation.
- GLASS, R. & HIBBERT, A. (1978). *Comp. Phys. Commun.* **16**, 19–34.
- HALPERN, O. & JOHNSON, M. H. (1939). *Phys. Rev.* **55**, 898–923.
- HIBBERT, A. (1975). *Comput. Phys. Commun.* **9**, 141–172.
- STEINSVOLL, O., SHIRANE, G., NATHANS, R., BLUME, M., ALPERIN, H. A. & PICKERT, S. J. (1967). *Phys. Rev.* **161**, 499–506.

*Acta Cryst.* (1984). **A40**, 624–631

## Les Sous-Groupes Isomorphes d'un Groupe d'Espace de Type $p4$ .

### I. Détermination Univoque\*

PAR YVES BILLIET†

*Faculté des Sciences et Techniques, Université de Bretagne Occidentale, 6, avenue Le Gorgeu, 29283 Brest, France et Recherches en Symétrie Cristallographique, A5, 35, Cité du 8 mai 1945 (600 Logements), Sétif, Algérie*

ET ABDELHAMID SAYARI

*Département de Chimie, Faculté des Sciences, Campus Universitaire, Tunis, Tunisie*

(Reçu le 9 décembre 1983, accepté le 19 avril 1984)

### Abstract

From a given standard setting ( $O, \mathbf{A}, \mathbf{B}$ ) (conventional unit-cell origin and vectors) of a two-dimensional space group  $G(p4)$ , it is possible, for each isomorphic subgroup  $g(p4)$ , to select exactly one standard setting ( $o, \mathbf{a}, \mathbf{b}$ ) subject to the following conditions. (1) *Vector conditions*:  $\mathbf{a} = p_1\mathbf{A} + p_2\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{b} = -p_2\mathbf{A} + p_1\mathbf{B}$ ,

$p_1 > 0$ ,  $p_2 \geq 0$  ( $p_1, p_2 \in \mathbb{Z}$ ). (2) *Origin conditions*: (a) if  $(p_1 + p_2)$  is odd, then the coordinates  $X, Y$  of  $o$ , with respect to  $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$ , obey the next conditions:  $X, Y$  integers,  $0 \leq X < \text{GCD}(p_1, p_2)$ ,  $0 \leq Y < (p_1^2 + p_2^2) / \text{GCD}(p_1, p_2)$ ,  $\text{GCD} =$  greatest common divisor; (b) if  $(p_1 + p_2) / \text{GCD}(p_1, p_2)$  is even, then  $2X$  and  $2Y$  are both even or odd,  $0 \leq X < \text{GCD}(p_1, p_2)$ ,  $0 \leq Y < (p_1^2 + p_2^2) / 2\text{GCD}(p_1, p_2)$ ; (c) if  $p_1, p_2$  are even and  $(p_1 + p_2) / \text{GCD}(p_1, p_2)$  is odd then  $2X$  and  $2Y$  are both even or odd,  $0 \leq X < \text{GCD}(p_1, p_2) / 2$  and  $0 \leq Y < (p_1^2 + p_2^2) / \text{GCD}(p_1, p_2)$ . In any case there are exactly  $(p_1^2 + p_2^2)$  subgroups relevant to the same vector conditions. Tables of isomorphic subgroups  $p(4)$  are given for indices up to 25.

\* English translations, 'not refereed', may be obtained from the authors upon request.

† Auteur responsable, adresse actuelle: Ecole Nationale d'Ingénieurs, B.P.W. 1038 Sfax, Tunisie.

### Introduction

De nombreux travaux consacrés aux sous-groupes spatiaux des groupes d'espace ont trait aux sous-groupes maximum (Ascher, 1968; Bertaut, 1976 *a, b*; Boyle & Lawrenson, 1972 *a, b*; Neubüser & Wondratschek, 1966 *a, b*); les tables de sous-groupes figurant dans ces travaux sont souvent incomplètes pour deux raisons: d'une part, pour ce qui est des sous-groupes isomorphes, elles ne signalent que les sous-groupes de symbole énantiomorphe d'indice minimum sans donner aucune indication sur les sous-groupes isosymboliques et, d'autre part, elles ne fournissent aucune spécification d'origine quand plusieurs sous-groupes de même symbole sont caractérisés par des repères conventionnels ayant les mêmes vecteurs. D'autres travaux portent sur la dérivation des sous-groupes isosymboliques (Billiet, 1973) et isomorphes (Bertaut & Billiet, 1979) mais ne déterminent pas ceux qui sont maximum; de plus les tables de sous-groupes de ces travaux sont surabondantes car tous les repères conventionnels sont donnés, en orientation et en origine, pour tous les sous-groupes de même symbole. Enfin, plus récemment, des travaux se sont attachés à la mise au point de méthodes permettant la dérivation complète et univoque des sous-groupes spatiaux (Billiet, 1980; Senechal, 1980).

Le but que nous nous fixons est, à terme, l'étude précise des sous-groupes *maximum isomorphes* de tous les groupes spatiaux. Dans le présent mémoire, nous nous limiterons à la dérivation complète et univoque des sous-groupes isomorphes d'un groupe d'espace bidimensionnel de symbole  $p4$ ; nous déterminerons parmi ces sous-groupes ceux qui sont maximum dans un mémoire suivant. Ces résultats pourront être directement appliqués à la dérivation des sous-groupes maximum isomorphes des groupes spatiaux tridimensionnels des classes 4,  $\bar{4}$  et  $4/m$ .

### I. Dérivation des repères conventionnels des sous-groupes isomorphes d'un groupe $p4$

En dimension 2, les sous-groupes isomorphes admettent toujours le même symbole cristallographique que le groupe l'espace de départ. Nous utilisons pour dériver ces sous-groupes une méthode mise au point antérieurement (Billiet, 1973; Billiet, Sayari & Zarrouk, 1978) à laquelle nous renvoyons le lecteur pour tout détail supplémentaire. Rappelons brièvement qu'on détermine les conditions qu'un repère conventionnel  $(o, \mathbf{a}, \mathbf{b})$  d'un groupe d'espace bidimensionnel  $g$  doit remplir par rapport à un repère conventionnel donné  $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$  d'un groupe d'espace  $G$  pour que les générateurs de  $g$  appartiennent à  $G$  et qu'en conséquence  $g$  soit sous-groupe de  $G$ .\*

\* Les repères conventionnels sont directs.

Dans le cas du groupe  $G(p4)$ , le repère conventionnel est constitué d'une origine  $O$  située sur un axe 4 et de deux vecteurs perpendiculaires  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$  de sorte que la maille ainsi définie soit élémentaire (cf. *International Tables for X-ray Crystallography*, 1952): le centre de cette maille est également situé sur un axe 4 (Fig. 1). La situation est analogue pour un repère conventionnel  $(o, \mathbf{a}, \mathbf{b})$  du groupe  $g(p4)$ . Les conditions pour que  $g(p4)$  soit sous-groupe de  $G(p4)$  s'expriment alors comme il suit (Sayari, Billiet & Zarrouk, 1978).

(i) Les vecteurs  $\mathbf{a}$  et  $\mathbf{b}$  doivent être des vecteurs de translation de  $G(p4)$ :

$$[\mathbf{a}, \mathbf{b}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]S;$$

$$S = \begin{bmatrix} n_1 & -n_2 \\ n_2 & n_1 \end{bmatrix}; n_i \in \mathbb{Z}; n_1^2 + n_2^2 > 1. \dagger$$

(ii) L'origine  $o$  doit être située sur un axe 4 de  $G(p4)$ : si  $X_o$  et  $Y_o$  désignent les coordonnées de  $o$  par rapport à  $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$ , alors  $2X_o$  et  $2Y_o$  doivent être des entiers tous deux pairs (mode 1) ou tous deux impairs (mode 2).

De cette manière, chaque sous-groupe  $p4$  est obtenu une infinité de fois car, d'une part, plusieurs choix sont possibles pour l'orientation des vecteurs  $\mathbf{a}$  et  $\mathbf{b}$  et, d'autre part, l'origine peut être choisie d'une infinité de façons différentes. Il est donc nécessaire de déterminer chaque sous-groupes  $p4$  de manière univoque en sélectionnant un repère bien donné en orientation et en origine.

### II. Sélection d'une orientation par sous-groupe

Soit un sous-groupe  $g(p4)$  dont un repère conventionnel  $(o, \mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1)$  est défini par les coordonnées de son origine et la matrice  $S_1$  de type  $S$ :

$$[\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]S_1;$$

$$S_1 = \begin{bmatrix} m_1 & -m_2 \\ m_2 & m_1 \end{bmatrix}; m_i \in \mathbb{Z}; m_1^2 + m_2^2 > 1.$$

Alors ce sous-groupe admet exactement trois autres repères conventionnels  $(o, \mathbf{a}_2, \mathbf{b}_2)$ ,  $(o, \mathbf{a}_3, \mathbf{b}_3)$  et

† Si  $n_1^2 + n_2^2 = 1$ ,  $(o, \mathbf{a}, \mathbf{b})$  ne définit pas un sous-groupe propre mais constitue un autre repère conventionnel du groupe de départ  $G(p4)$ .

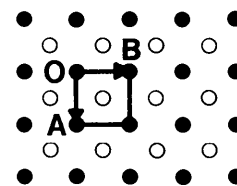


Fig. 1.  $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$  est un repère conventionnel du groupe  $G(p4)$ . Les ronds noirs représentent les axes 4 de mode 1 tandis que les ronds blancs représentent les axes 4 de mode 2.

$(o, \mathbf{a}_4, \mathbf{b}_4)$ , de même origine, associés aux matrices  $S_2$ ,  $S_3$  et  $S_4$  de type  $S$  (Billiet, Sayari & Zarrouk, 1978; Sayari, Billiet & Zarrouk, 1978) (Fig. 2):

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{a}_2, \mathbf{b}_2] &= [\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1] \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \\
 &= [\mathbf{A}, \mathbf{B}]S_2; S_2 = \begin{bmatrix} -m_2 & -m_1 \\ m_1 & -m_2 \end{bmatrix}; \\
 [\mathbf{a}_3, \mathbf{b}_3] &= [\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1] \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \\
 &= [\mathbf{A}, \mathbf{B}]S_3; S_3 = \begin{bmatrix} -m_1 & m_2 \\ -m_2 & -m_1 \end{bmatrix}; \\
 [\mathbf{a}_4, \mathbf{b}_4] &= [\mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1] \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \\
 &= [\mathbf{A}, \mathbf{B}]S_4; S_4 = \begin{bmatrix} m_2 & m_1 \\ -m_1 & m_2 \end{bmatrix}.
 \end{aligned}$$

Comme les vecteurs  $\mathbf{a}_1$  et  $\mathbf{b}_1$  ne sont pas nuls, l'un au moins des coefficients  $m_1, m_2$  n'est pas nul. Quatre cas se présentent.

(a) La direction du vecteur  $\mathbf{a}_1$  est située dans le quadrant angulaire semi-ouvert  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}[$  et celle de  $\mathbf{b}_1$  est située dans  $[\mathbf{B}, -\mathbf{A}[$ :  $m_1 > 0$  et  $m_2 \geq 0$ .\* Le repère  $(o, \mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1)$  est le seul à avoir cette propriété et seule la matrice  $S_1$  est du type  $P$ :

$$P = \begin{bmatrix} p_1 & -p_2 \\ p_2 & p_1 \end{bmatrix}; p_i \in \mathbb{Z}; p_1^2 + p_2^2 > 1; p_1 > 0; p_2 \geq 0.$$

(b) La direction du vecteur  $\mathbf{a}_1$  est située dans  $[\mathbf{B}, -\mathbf{A}[$ :  $m_1 \leq 0$  et  $m_2 > 0$ . Le repère  $(o, \mathbf{a}_4, \mathbf{b}_4)$  est le seul à avoir des vecteurs dont les directions sont respectivement situées dans les quadrants semi-ouverts  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}[$  et  $[\mathbf{B}, -\mathbf{A}[$  et seule la matrice  $S_4$  est du type  $P$  (Fig. 2).

(c) La direction de  $\mathbf{a}_1$  est située dans  $[-\mathbf{A}, -\mathbf{B}[$ :  $m_1 < 0$  et  $m_2 \leq 0$ . Seul le repère  $(o, \mathbf{a}_3, \mathbf{b}_3)$  voit ses vecteurs situés dans les quadrants  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}[$  et  $[\mathbf{B}, -\mathbf{A}[$  et seul  $S_3$  est de type  $P$ .

(d)  $\mathbf{a}_1$  est situé dans  $[-\mathbf{B}, \mathbf{A}[$ :  $m_1 \geq 0$  et  $m_2 < 0$ . Seul  $(o, \mathbf{a}_2, \mathbf{b}_2)$  voit ses vecteurs situés dans  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}[$  et  $[\mathbf{B}, -\mathbf{A}[$  et seul  $S_2$  est de type  $P$ .

En d'autres termes, il est possible sans changer l'origine  $o$  de caractériser le sous-groupe  $g(p4)$  par une matrice de type  $P$  et comme il n'existe pas d'autres repères conventionnels de  $g(p4)$  laissant l'origine  $o$  invariante cette matrice est unique.

**Remarque:** Si  $p_2 \neq 0$  et si  $p_2 \neq p_1$ , l'échange des rôles de  $p_1$  et  $p_2$  dans la matrice  $P$  conduit à un sous-groupe  $g'(p4)$  différent de  $g(p4)$ . Si  $p_2 = p_1$ ,  $g$  et  $g'$  sont confondus, toute question d'origine mise à part.

\* Le quadrant angulaire semi-ouvert  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}[$  est le secteur angulaire allant de la direction du vecteur  $\mathbf{A}$  comprise à la direction du vecteur  $\mathbf{B}$  non comprise.

Dans ce qui suit, on supposera que les vecteurs  $\mathbf{a}$  et  $\mathbf{b}$  de  $g(p4)$  sont donnés par une matrice de type  $P$ : leurs directions respectives seront donc situées dans les quadrants  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}[$  et  $[\mathbf{B}, -\mathbf{A}[$ .

### III. Selection d'une origine par sous-groupe

Considérons le groupe d'espace  $G(p4)$  rapporté à sa maille conventionnelle  $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$ : ses axes 4 sont de deux sortes (Fig. 1). Il y a d'abord les axes 4 dont les coordonnées  $X$  et  $Y$  sont des entiers ( $2X, 2Y$  pairs, mode 1); il y a ensuite ceux dont les coordonnées sont des demi-entiers ( $2X, 2Y$  impairs, mode 2). Les axes 4 des sous-groupes  $p4$  appartiennent à l'un et (ou) l'autre mode selon le cas.

Exposons sur quel principe repose la sélection d'une origine pour chaque sous-groupe.† Pour toute matrice  $P$ , il existe un sous-groupe  $g^\circ(p4)$  dont l'origine est confondue avec l'origine  $O$  de  $G(p4)$ . Ce sous-groupe possède deux axes 4 situés dans la maille conventionnelle élémentaire  $(O, \mathbf{a}, \mathbf{b})$  et reliés par la vecteur  $(\mathbf{a} + \mathbf{b})/2$  (Fig. 3); de même, tout autre

† Il y a de nombreuses façons de sélectionner une origine par sous-groupe. Celle que nous présentons ici a l'avantage d'être très facilement mise en oeuvre du point de vue numérique.

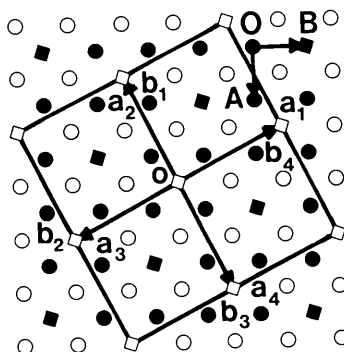


Fig. 2. Les carrés représentent les axes 4 du sous-groupe  $g(p4)$  défini par le repère conventionnel  $(o, \mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1)$ :  $\mathbf{a}_1 = -\mathbf{A} + 2\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{b}_1 = -2\mathbf{A} - \mathbf{B}$ ,  $X_o = \frac{3}{2}$ ,  $Y_o = -\frac{3}{2}$ .

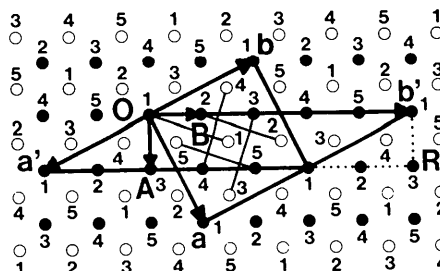


Fig. 3. Le sous-groupe  $g^\circ(p4)$  est défini par:  $\mathbf{a} = 2\mathbf{A} + \mathbf{B}$ ,  $\mathbf{b} = -\mathbf{A} + 2\mathbf{B}$ ; il y a quatre autres sous-groupes définis par les mêmes relations vectorielles et des origines différentes. Les axes quaternaires de ces cinq sous-groupes sont repérés, pour chacun d'entre eux, par un nombre allant de 1 à 5. La maille  $(O, \mathbf{a}', \mathbf{b}')$  de  $g^\circ(p4)$  est définie par:  $\mathbf{a}' = \mathbf{A} - 2\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{b}' = 5\mathbf{B}$ . Les mailles  $(O, \mathbf{a}, \mathbf{b})$  et  $(O, \mathbf{a}', \mathbf{b}')$  et le rectangle  $R$  contiennent chacun deux axes 4 de chacun des cinq sous-groupes.

sous-groupe  $p4$  relevant de la même matrice  $P$ , mais d'origine différente, possède deux axes 4 situés dans la maille  $(o, \mathbf{a}, \mathbf{b})$  de  $g^o$  et reliés par le vecteur  $(\mathbf{a} \pm \mathbf{b})/2$  (Fig. 3). Comme la maille  $(O, \mathbf{a}, \mathbf{b})$  contient 2 Dét  $P$  axes 4 du groupe  $G$ , le nombre de sous-groupes relevant de la matrice  $P$  est égal à  $n = \text{Dét } P = p_1^2 + p_2^2$ . Tout autre maille élémentaire de  $g^o$  contient aussi deux axes 4 de chacun des  $n$  sous-groupes  $p4$  définis par la matrice  $P$ , en particulier, une maille élémentaire  $(O, \mathbf{a}', \mathbf{b}')$  dont le vecteur  $\mathbf{b}'$  est colinéaire au vecteur  $\mathbf{B}$  et de même sens (Fig. 3). C'est encore le cas du rectangle  $R$  construit sur  $O$  et  $\mathbf{b}'$  et admettant la même hauteur que le parallélogramme  $(O, \mathbf{a}', \mathbf{b}')$ . Puisque chaque axe 4 est une origine conventionnelle possible pour un sous-groupe défini par la matrice  $P$ , il s'agit, pour identifier chacun des  $n$  sous-groupes, de déterminer les  $n$  couples d'axes 4 situés dans le rectangle  $R$ , c'est-à-dire, de ne considérer finalement qu'un seul axe 4 par couple, dans ce rectangle.

Nous allons d'abord construire la maille  $(O, \mathbf{a}', \mathbf{b}')$  de  $g^o$  et le rectangle  $R$  et nous démontrerons ensuite les propriétés de dénombrement des axes 4 énoncées ci-dessus. Sans changer l'origine  $O$ , considérons le changement de maille élémentaire de  $g^o$  défini par

$$[\mathbf{a}', \mathbf{b}'] = [\mathbf{a}, \mathbf{b}]Q;$$

$$Q = \begin{bmatrix} p & e \\ -q & f \end{bmatrix} \text{ avec Dét } Q = pf + eq = 1.$$

On a  $[\mathbf{a}', \mathbf{b}'] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]M$  avec  $M = PQ$ , c'est-à-dire,

$$M = \begin{bmatrix} p_1p + p_2q & p_1e - p_2f \\ p_2p - p_1q & p_2e + p_1f \end{bmatrix}.$$

Soit  $D(p_1, p_2)$  le plus grand commun diviseur (PGCD) de  $p_1$  et  $p_2$ ; définissons les quantités  $p'_1 = p_1/D(p_1, p_2)$  et  $p'_2 = p_2/D(p_1, p_2)$ ;  $p'_1$  et  $p'_2$  sont des entiers premiers entre eux. Il est donc possible de choisir  $e$  et  $f$  respectivement égaux à  $p'_2$  et  $p'_1$  car, dans ces conditions, il existe au moins deux entiers  $p$  et  $q$  tels que  $pf + eq = pp'_1 + p'_2q = 1$  (théorème de Bezout). Il en résulte:

$$M = \begin{bmatrix} D(p_1, p_2) & 0 \\ p_2p - p_1q & (p_1^2 + p_2^2)/D(p_1, p_2) \end{bmatrix}.$$

La matrice  $M$  définit bien une maille élémentaire  $(O, \mathbf{a}', \mathbf{b}')$  de  $g^o(p4)$  dont le vecteur  $\mathbf{b}'$  est colinéaire à  $\mathbf{B}$ . Le rectangle  $R$  est alors défini par les vecteurs  $\mathbf{A}D(p_1, p_2)$  et  $\mathbf{B}(p_1^2 + p_2^2)/D(p_1, p_2)$  portés à partir du point  $O$ . Ce rectangle contient  $2(p_1^2 + p_2^2)$  axes 4 du groupe  $G$  et les coordonnées  $X, Y$  de ces axes relatives à  $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$  remplissent les conditions suivantes (Fig. 3):

- (i)  $2X$  et  $2Y$  sont des entiers de même parité;
- (ii)  $0 \leq X < D(p_1, p_2)$ ;
- (iii)  $0 \leq Y < (p_1^2 + p_2^2)/D(p_1, p_2)$ .

Pour la moitié d'entre eux ces axes 4 sont de mode 1, les autres sont de mode 2.

Considérons maintenant un sous-groupe  $g(p4)$  relevant de la matrice  $P$  et d'une origine  $o$  de coordonnées  $X_o, Y_o$  relatives à  $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$ . Si  $o$  n'est pas situé dans le rectangle  $R$ , construisons une autre origine conventionnelle possible pour  $g(p4)$  et située dans  $R$ . Pour cela posons  $D_1 = D(p_1, p_2)$  et  $D_2 = (p_1^2 + p_2^2)/D(p_1, p_2)$ . Soit alors  $k_1D_1$  le plus grand multiple de  $D_1$  inférieur ou égal à  $X_o$ ; ce qui se traduit par:

$$k_1D_1 \leq X_o < (k_1 + 1)D_1, \quad k_1 \in \mathbb{Z}. \quad (I)$$

De même, soit  $k_2D_2$  le plus grand multiple de  $D_2$  inférieur ou égal à  $Y_o - k_1(p_2p - p_1q)$ :

$$k_2D_2 \leq Y_o - k_1(p_2p - p_1q) < (k_2 + 1)D_2, \quad k_2 \in \mathbb{Z}. \quad (I')$$

Considérons alors le point  $o_1$  défini par le vecteur  $oo_1$ :

$$\begin{aligned} oo_1 &= -\mathbf{a}'k_1 - \mathbf{b}'k_2 \\ &= -\mathbf{A}D_1k_1 - \mathbf{B}[(p_2p - p_1q)k_1 + D_2k_2]. \end{aligned}$$

Comme  $k_1$  et  $k_2$  sont des entiers, le vecteur  $oo_1$  est un vecteur de translation de  $g(p4)$  et  $o_1$  est une autre origine conventionnelle possible pour ce sous-groupe. Voici les coordonnées  $X_{o_1}, Y_{o_1}$  de cette origine par rapport à  $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$ :

$$X_{o_1} = X_o - D_1k_1$$

et

$$Y_{o_1} = Y_o - [(p_2p - p_1q)k_1 + D_2k_2].$$

En tenant compte de (I) et (I'), on aboutit à:

$$0 \leq X_{o_1} < D(p_1, p_2)$$

et

$$0 \leq Y_{o_1} < (p_1^2 + p_2^2)/D(p_1, p_2).$$

Ce qui démontre que  $o_1$  est bien situé à l'intérieur du rectangle  $R$ . Remarquons que  $2X_o, 2Y_o, 2X_{o_1}, 2Y_{o_1}$  sont des entiers de même parité; en d'autres termes,  $o$  et  $o_1$  sont des origines de même mode.

Ainsi que nous allons le montrer maintenant, le sous-groupe  $g(p4)$  admet une autre origine située dans le rectangle  $R$ . Quatre cas se présentent.

*1er cas.* Supposons  $p_1$  et  $p_2$  de parités différentes. Soit  $o_2$  le point défini par le vecteur  $oo_2 = (\mathbf{a} + \mathbf{b})/2$ ;  $o_2$  est bien une origine conventionnelle possible pour le groupe  $g(p4)$  et on a:  $oo_2 = \mathbf{A}(p_1 - p_2)/2 - \mathbf{B}(p_1 + p_2)/2$ . On en tire les coordonnées de  $o_2$  par rapport à  $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$ :

$$X_{o_2} = X_o + (p_1 - p_2)/2$$

et

$$Y_{o_2} = Y_o + (p_1 + p_2)/2.$$

Comme  $p_1$  et  $p_2$  ont des parités différentes,  $2X_{o_2}$  et  $2Y_{o_2}$  sont des entiers de la même parité *mais opposée* à celle de  $2X_o$  et  $2Y_o$ : si  $o$  est de mode 1 (respectivement 2),  $o_2$  est de mode 2 (respectivement 1). Par le procédé exposé dans le paragraphe précédent, il est loisible de construire à partir de  $o_2$  une origine conventionnelle possible  $o_3$  pour le groupe  $g(p4)$  et située à l'intérieur du rectangle  $R$ :  $o_3$  sera de même mode que  $o_2$ . En conclusion, si  $o_1$  est de mode 1 (respectivement 2),  $o_3$  sera de mode 2 (respectivement 1). Dans ces conditions  $g(p4)$  possède une origine et une seule du mode 1 située à l'intérieur du rectangle  $R$  et donnée par les coordonnées  $X, Y$  relatives à  $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$  (Fig. 4):

$$X \text{ et } Y \text{ entiers, } 0 \leq X < D(p_1, p_2), \\ 0 \leq Y < (p_1^2 + p_2^2) / D(p_1, p_2).$$

Il y a donc autant de sous-groupes qu'il y a d'origines de mode 1 dans le rectangle  $R$ . Celles-ci sont au nombre de  $\text{Det } P$  car il y a  $D(p_1, p_2)$  valeurs possibles pour  $X$  et  $(p_1^2 + p_2^2) / D(p_1, p_2)$  valeurs possibles de  $Y$  pour chaque valeur de  $X$ .

2<sup>ème</sup> cas. Supposons  $p_1$  et  $p_2$  impairs. Alors  $p'_1 = 2k_3 + 1$  et  $p'_2 = 2k_4 + 1$  ( $k_3$  et  $k_4 \in \mathbb{Z}$ ). Supposons de plus que l'origine  $o_1$  vérifie les conditions suivantes:

$$0 \leq X_{o_1} < D(p_1, p_2), \\ 0 \leq Y_{o_1} < (p_1^2 + p_2^2) / 2D(p_1, p_2);$$

ce qui revient à dire que  $o_1$  est supposé être situé dans la première moitié du rectangle  $R$  définie par l'origine  $O$  et les vecteurs  $\mathbf{A}D(p_1, p_2)$  et  $\mathbf{B}(p_1^2 + p_2^2) / 2D(p_1, p_2)$ . Soit alors  $o_4$  le point défini par le vecteur  $o_1 o_4$ :

$$o_1 o_4 = (\mathbf{a} + \mathbf{b}) / 2 + \mathbf{a}k_4 + \mathbf{b}k_3;$$

c'est bien une autre origine conventionnelle possible pour le groupe  $g(p4)$ :

$$o_1 o_4 = (\mathbf{a} + \mathbf{b}) / 2 + \mathbf{a}(p'_2 - 1) / 2 + \mathbf{b}(p'_1 - 1) / 2 \\ = \mathbf{B}(p_1^2 + p_2^2) / 2D(p_1, p_2);$$

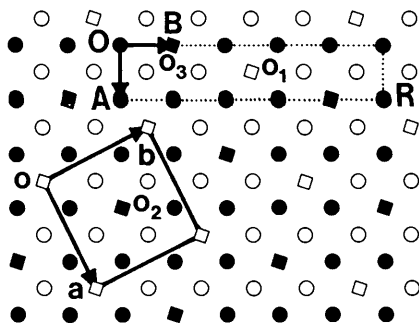


Fig. 4. Le sous-groupe  $g(p4)$  est défini par:  $\mathbf{a} = 2\mathbf{A} + \mathbf{B}$ ,  $\mathbf{b} = -\mathbf{A} + 2\mathbf{B}$ ,  $X_o = \frac{5}{2}$ ,  $Y_o = -\frac{3}{2}$ . Le rectangle  $R$  contient deux origines possibles pour ce sous-groupe:  $o_1$  est de mode 2,  $o_3$  est de mode 1.  $o_3$  est l'origine sélectionnée pour  $g(p4)$ .

on en déduit les coordonnées de  $o_4$  par rapport à  $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$ :

$$X_{o_4} = X_{o_1}$$

et

$$Y_{o_4} = Y_{o_1} + (p_1^2 + p_2^2) / 2D(p_1, p_2); \\ 0 \leq X_{o_4} < D(p_1, p_2)$$

et

$$(p_1^2 + p_2^2) / 2D(p_1, p_2) \leq Y_{o_4} < (p_1^2 + p_2^2) / D(p_1, p_2);$$

$o_4$  est donc une origine de même mode que  $o_1$  et située dans la seconde moitié du rectangle  $R$ . De même, si on suppose que  $o_1$  est situé dans la seconde moitié de  $R$ , on peut montrer que le groupe  $g(p4)$  possède une autre origine conventionnelle  $o_5$ , de même mode, située dans la première moitié de  $R$  et définie par le vecteur  $o_1 o_5 = -(\mathbf{a} + \mathbf{b}) / 2 - \mathbf{a}k_4 - \mathbf{b}k_3$ . En d'autres termes,  $g(p4)$  possède une origine et une seule située dans la première moitié de  $R$ , c'est-à-dire, définie par les coordonnées  $X$  et  $Y$  relatives à  $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$  (Fig. 5):

$$2X \text{ et } 2Y \text{ entiers de même parité, } 0 \leq X < D(p_1, p_2), \\ 0 \leq Y < (p_1^2 + p_2^2) / 2D(p_1, p_2).$$

Il y a autant de sous-groupes que d'origines vérifiant ces conditions; comme  $X$  peut prendre  $2D(p_1, p_2)$  valeurs possibles et comme  $Y$  peut prendre  $(p_1^2 + p_2^2) / 2D(p_1, p_2)$  valeurs possibles pour chaque valeur de  $X$ , il y a  $\text{Det } P$  sous-groupes différents. Pour la moitié d'entre eux, ces sous-groupes ont des origines de mode 1 et les autres ont des origines de mode 2.

3<sup>ème</sup> cas. Supposons  $p_1$  et  $p_2$  pairs avec  $p'_1$  et  $p'_2$  impairs. Le raisonnement est analogue au 2<sup>ème</sup> cas et les résultats sont les mêmes (Fig. 6).

4<sup>ème</sup> cas. Supposons  $p_1$  et  $p_2$  pairs avec  $p'_1$  et  $p'_2$  de parités différentes. Dans ces conditions, il existe

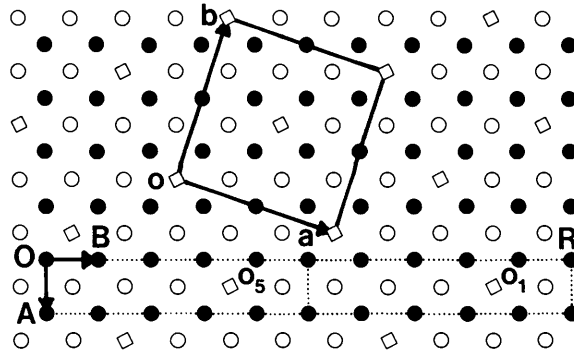


Fig. 5. Le sous-groupe  $g(p4)$  est défini par:  $\mathbf{a} = \mathbf{A} + 3\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{b} = -3\mathbf{A} + \mathbf{B}$ ,  $X_o = -\frac{3}{2}$ ,  $Y_o = \frac{5}{2}$ . Ces sous-groupe ne possède que des axes 4 du même mode 2. Le rectangle  $R$  contient deux origines possibles pour ce sous-groupe:  $o_1$  est situé dans la seconde moitié et  $o_5$  dans la première moitié.  $o_5$  est l'origine sélectionnée pour  $g(p4)$ .

au moins un couple de nombres impairs  $(2k_5 + 1)$ ,  $(2k_6 + 1)$  tels que:

$$(2k_5 + 1)p'_1 - (2k_6 + 1)p'_2 = 1 \quad (k_5, k_6 \in \mathbb{Z}).^*$$

Par ailleurs, soit  $k_7 D_2$  le plus grand multiple de  $D_2$  inférieur ou égal à  $Y' = Y_{o_1} + p_1/2 + p_2/2 + p_2 k_5 + p_1 k_6$ :

$$k_7 D_2 \leq Y' < (k_7 + 1) D_2, \quad k_7 \in \mathbb{Z}. \quad (II)$$

Supposons de plus que les coordonnées de  $o_1$  relatives à  $(O, A, B)$  vérifient les conditions suivantes:

$$\begin{aligned} 0 \leq X_{o_1} < D(p_1, p_2)/2, \\ 0 \leq Y_{o_1} < (p_1^2 + p_2^2)/D(p_1, p_2); \end{aligned} \quad (II')$$

ce qui revient à supposer  $o_1$  situé dans la première moitié du rectangle  $R$  définie par l'origine  $O$  et les vecteurs  $AD(p_1, p_2)/2$  et  $B(p_1^2 + p_2^2)/D(p_1, p_2)$ . Remarquons au passage que ce découpage du rectangle  $R$  est différent de celui des 2ème et 3ème cas. Considérons alors le point  $o_6$  défini par le vecteur  $o_1 o_6$ :

$$o_1 o_6 = (a + b)/2 + a(k_5 - k_7 p'_2) + b(k_6 - k_7 p'_1);$$

$o_6$  est bien une autre origine conventionnelle possible pour  $g(p_4)$  et on démontre sans difficulté:

$$\begin{aligned} o_1 o_6 = AD_1/2 + B(p_1/2 + p_2/2 + p_2 k_5 \\ + p_1 k_6 - k_7 D_2). \end{aligned}$$

On en déduit les coordonnées de  $o_6$  relatives à  $(O, A, B)$ :

$$X_{o_6} = X_{o_1} + D_1/2,$$

$$Y_{o_6} = Y_{o_1} + p_1/2 + p_2/2 + p_2 k_5 + p_1 k_6 - k_7 D_2.$$

\* En effet  $x$  et  $y$  étant premiers entre eux, il existe au moins un couple d'entiers  $h, k$  tels que  $hx + ky = 1$  (théorème de Bezout). Supposons  $x$  pair et  $y$  impair, alors  $k$  est nécessairement impair. Si  $h$  est impair, le couple  $h, k$  est un couple de nombres impairs répondant à la question. Si  $h$  est pair, posons  $h' = h + y$  et  $k' = k - x$ , alors  $h'x + k'y = 1$  et le couple  $h', k'$  est un couple de nombres impairs répondant à la question.

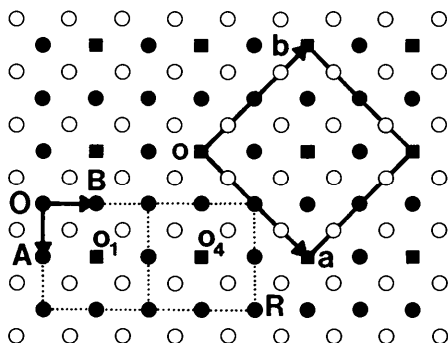


Fig. 6. Le sous-groupe  $g(p_4)$  est défini par:  $a = 2A + 2B$ ,  $b = -2A + 2B$ ,  $X_{o_1} = -1$ ,  $Y_{o_1} = 3$ . Ce sous-groupe ne possède que des axes 4 de mode 1. Deux origines,  $o_1$  et  $o_4$ , sont possibles pour ce sous-groupe dans le rectangle  $R$ ;  $o_1$  est l'origine sélectionnée car elle est située dans la première moitié.

En tenant compte de (II) et (II'), on aboutit à:

$$\begin{aligned} D(p_1, p_2)/2 \leq X_{o_6} < D(p_1, p_2), \\ 0 \leq Y_{o_6} < (p_1^2 + p_2^2)/D(p_1, p_2); \end{aligned}$$

$o_6$  est donc une origine de même mode que  $o_1$  et située dans la seconde moitié du rectangle  $R$ . De la même façon, si on suppose que  $o_1$  est situé dans la seconde moitié de  $R$ , on peut montrer que  $g(p_4)$  possède une autre origine conventionnelle  $o_7$ , de même mode, située dans la première moitié de  $R$  et définie par le vecteur  $o_1 o_7$ :

$$o_1 o_7 = -(a + b)/2 - a(k_5 + k_7 p'_2) + b(k_6 + k_7 p'_1)$$

(à condition de remplacer la quantité  $Y'$  par la quantité  $Y'' = Y_{o_1} - p_1/2 - p_2/2 - p_2 k_5 - p_1 k_6$ ). En conclusion  $g(p_4)$  possède une origine conventionnelle et une seule située dans la première moitié du rectangle  $R$ , c'est-à-dire, définie par les coordonnées  $X$  et  $Y$  relatives à  $(O, A, B)$  (Fig. 7):

$2X$  et  $2Y$  entiers de même parité,

$$0 \leq X < D(p_1, p_2)/2,$$

$$0 \leq Y < (p_1^2 + p_2^2)/D(p_1, p_2).$$

Il y a donc autant de sous-groupes que d'origine situées dans le demi-rectangle en question. Celles-ci sont au nombre de  $\text{Dét}P$  car  $X$  peut prendre  $D(p_1, p_2)$  valeurs et  $Y$  peut prendre  $(p_1^2 + p_2^2)/D(p_1, p_2)$  valeurs pour chaque valeur de  $X$ . Ces sous-groupes ont, pour la moitié d'entre eux, des origines de mode 1, et pour le reste, des origines de mode 2.

**Conclusion.** Quels que soient  $p_1 > 0$  et  $p_2 \geq 0$ , il y a exactement  $\text{Dét}P = p_1^2 + p_2^2$  sous-groupes de même orientation définie par la matrice  $P$  et d'origines différentes. Du point de vue de la théorie des groupes, les axes 4 de mode 1 sont conjugués dans  $G$ ; de même les axes 4 de mode 2 sont conjugués dans  $G$ ;

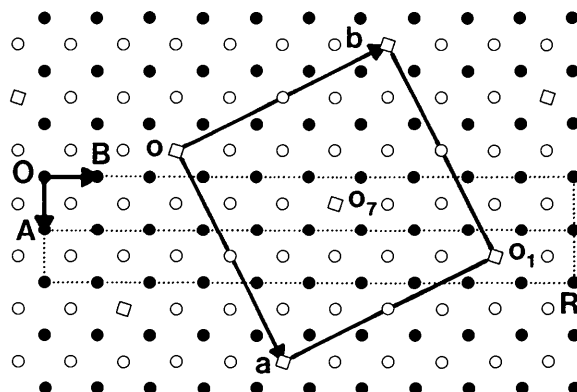


Fig. 7. Le sous-groupe  $g(p_4)$  est défini par:  $a = 4A + 2B$ ,  $b = -2A + 4B$ ,  $X_{o_1} = -\frac{1}{2}$ ,  $Y_{o_1} = \frac{3}{2}$ . Ce sous-groupe ne possède que des axes 4 de mode 2. Il y a deux origines possibles,  $o_1$  et  $o_7$ , situées dans le rectangle  $R$ ; l'origine  $o_7$  est sélectionnée pour  $g(p_4)$  puisqu'elle est située dans la première moitié de  $R$ .

mais les axes de mode 1 ne sont pas conjugués des axes de mode 2, ils sont seulement équivalents par les automorphismes extérieurs de  $G$ . Il en résulte, si  $\text{Dét } P$  est impair, c'est-à-dire, si  $p_1$  et  $p_2$  sont de parités différentes (1er cas), que les  $\text{Dét } P$  sous-groupes forment une seule classe de conjugaison car chacun possède des axes 4 de mode 1 et des axes 4 de mode 2. Si  $\text{Dét } P$  est pair, c'est-à-dire, si  $p_1$  et  $p_2$  sont de la même parité (2ème, 3ème et 4ème cas), les sous-groupes se répartissent en deux classes de conjugaison comprenant chacune  $\text{Dét } P/2$  sous-groupes, car chaque sous-groupe ne possède que des axes 4 appartenant à un seul mode; mais tous ces sous-groupes sont équivalents par les automorphismes extérieurs de  $G$ . Dans le cas où  $p_1 \neq p_2 \neq 0$ , il existe une matrice  $P'$ , de même déterminant, qui diffère de la matrice  $P$  par l'interversion des rôles de  $p_1$  et  $p_2$ ; les  $\text{Dét } P$  sous-groupes correspondants à  $P'$  sont différents des  $\text{Dét } P$  sous-groupes correspondants à  $P$ , ils ne sont pas conjugués de ces derniers mais ils leur sont équivalents par les automorphismes extérieurs de  $G$ .

#### IV. Tables de sous-groupes isomorphes

Dans le cas des sous-groupes isomorphes, le déterminant de la matrice de passage est égal à l'indice (Billiet, 1973). Les méthodes mises au point précédemment permettent d'élaborer sans difficulté des tables de sous-groupes isomorphes  $p4$  donnant, par indice croissant, le nombre de sous-groupes, leur 'identité' (orientation et origine) et leurs relations d'équivalence (conjugaison dans  $G$ , équivalence par les automorphismes extérieurs de  $G$ : en abrégé, AEG-équivalence). Pour terminer ce mémoire, nous donnons quelques exemples de tables de sous-groupes isomorphes  $p4$ , c'est-à-dire, pour tous les indices permis entre 2 et 25.

**Indice 2** (2ème cas): 2 sous-groupes, non conjugués, AEG-équivalents.

$$p_1 = p_2 = 1.$$

1ère classe: 1 sous-groupe:  $X = Y = 0$ .

2ème classe: 1 sous-groupe:  $X = Y = \frac{1}{2}$ .

**Indice 4** (4ème cas): 4 sous-groupes AEG-équivalents.

$$p_1 = 2, p_2 = 0.$$

1ère classe: 2 sous-groupes conjugués:

$$X = 0; Y = 0, 1.$$

2ème classe: 2 sous-groupes conjugués:

$$X = \frac{1}{2}; Y = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}.$$

**Indice 5** (1er cas): 10 sous-groupes AEG-équivalents (Fig. 4).

$$(a) p_1 = 2, p_2 = 1.$$

5 sous-groupes conjugués:  $X = 0; Y = 0, 1, 2, 3, 4$ .

(b)  $p_1 = 1, p_2 = 2$ . [La suite comme (a).]

**Indice 8** (3ème cas): 8 sous-groupes AEG-équivalents (Fig. 6).

$$p_1 = p_2 = 2.$$

1ère classe: 4 sous-groupes conjugués:

$$X = 0, 1; Y = 0, 1.$$

2ème classe: 4 sous-groupes conjugués:

$$X = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; Y = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}.$$

**Indice 9** (1er cas): 9 sous-groupes conjugués.

$$p_1 = 3, p_2 = 0.$$

$$X = 0, 1, 2; Y = 0, 1, 2.$$

**Indice 10** (2ème cas): 20 sous-groupes AEG-équivalents (Fig. 5).

$$(a) p_1 = 3, p_2 = 1.$$

1ère classe: 5 sous-groupes conjugués:

$$X = 0; Y = 0, 1, 2, 3, 4.$$

2ème classe: 5 sous-groupes conjugués:

$$X = \frac{1}{2}; \\ Y = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}.$$

(b)  $p_1 = 1, p_2 = 3$ . [La suite comme (a).]

**Indice 13** (1er cas): 26 sous-groupes AEG-équivalents.

$$(a) p_1 = 3, p_2 = 2.$$

13 sous-groupes conjugués:

$$X = 0; Y = 0, 1, \dots, 11, 12.$$

(b)  $p_1 = 2, p_2 = 3$ . [La suite comme (a).]

**Indice 16** (4ème cas): 16 sous-groupes AEG-équivalents.

$$p_1 = 4, p_2 = 0.$$

1ère classe: 8 sous-groupes conjugués:

$$X = 0, 1; Y = 0, 1, 2, 3.$$

2ème classe: 8 sous-groupes conjugués:

$$X = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; Y = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}.$$

**Indice 17** (1er cas): 34 sous-groupes AEG-équivalents.

$$(a) p_1 = 4, p_2 = 1.$$

17 sous-groupes conjugués:

$$X = 0; Y = 0, 1, \dots, 15, 16.$$

(b)  $p_1 = 1, p_2 = 4$ . [La suite comme (a).]

**Indice 18** (2ème cas): 18 sous-groupes AEG-équivalents.

$$p_1 = p_2 = 3.$$

1ère classe: 9 sous-groupes conjugués:

$$X = 0, 1, 2; Y = 0, 1, 2.$$

2ème classe: 9 sous-groupes conjugués:

$$X = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}; Y = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}.$$

**Indice 20** (4ème cas): 40 sous-groupes AEG-équivalents (Fig. 7).

$$(a) p_1 = 4, p_2 = 2.$$

1ère classe: 10 sous-groupes conjugués:

$$X = 0; Y = 0, 1, \dots, 8, 9.$$

2ème classe: 10 sous-groupes conjugués:

$$X = \frac{1}{2}; Y = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, \frac{17}{2}, \frac{19}{2}.$$

(b)  $p_1 = 2, p_2 = 4$ . [La suite comme (a).]

**Indice 25** (1er cas): 75 sous-groupes; les sous-groupes

(b) et (c) sont AEG-équivalents.

- (a)  $p_1 = 5, p_2 = 0$ .  
 25 sous-groupes conjugués:  
 $X = 0, 1, 2, 3, 4; Y = 0, 1, 2, 3, 4$ .
- (b)  $p_1 = 4, p_2 = 3$ .  
 25 sous-groupes conjugués:  
 $X = 0; Y = 0, 1, \dots, 23, 24$ .
- (c)  $p_1 = 3, p_2 = 4$ . [La suite comme (b).]

Nous tenons à remercier le Professeur E. F. Bertaut pour de fructueuses discussions, notamment sur la sélection d'une origine par sous-groupe.

#### Références

ASCHER, E. (1968). *Lattices of Equi-translation Subgroups of the Space Groups*. Communication privée.

- BERTAUT, E. F. (1976). *Acta Cryst.* **A32**, 380–387, 976–983.  
 BERTAUT, E. F. & BILLIET, Y. (1979). *Acta Cryst.* **A35**, 733–745.  
 BILLIET, Y. (1973). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **96**, 327–334.  
 BILLET, Y. (1980). *Match*, **9**, 177–190.  
 BILLIET, Y., SAYARI, A. & ZARROUK, H. (1978). *Acta Cryst.* **A34**, 414–421.  
 BOYLE, L. L. & LAWRENSEN, J. E. (1972). *Acta Cryst.* **A28**, 485–489, 489–493.  
*International Tables for X-ray Crystallography* (1952). Vol. I. Birmingham: Kynoch Press.  
 NEUBÜSER, J. & WONDRAUSCHEK, H. (1966a). *Krist. Tech.* **1** (4), 529–543.  
 NEUBÜSER, J. & WONDRAUSCHEK, H. (1966b). *Lists of Subgroups of Space Groups*. Communication privée.  
 SAYARI, A., BILLIET, Y. & ZARROUK, H. (1978). *Acta Cryst.* **A34**, 553–555.  
 SENECHAL, M. (1980). *Acta Cryst.* **A36**, 845–850.

*Acta Cryst.* (1984). **A40**, 631–635

## Les Cristaux Deux-Colorés Deux-Dimensionnels Considérés comme Projections Cotées de Semi-cristaux (2 + 1)-Dimensionnels\*

PAR JAMIL BELGOUTH

*Département de Chimie, Ecole Nationale d'Ingénieurs de Sfax, BPW, Sfax, Tunisie*

YVES BILLIET†

*Faculté des Sciences et Techniques, Université de Bretagne Occidentale, 6, avenue Le Gorgeu, 29283 Brest, France et Recherches en Symétrie Cristallographique, A5, 35, Cité du 8 mai 1945 (600 Logements), Sétif, Algérie*

ET DOMINIQUE WEIGEL

*Laboratoire de Chimie Physique du Solide, Ecole Centrale des Arts et Manufactures, Grande Voie des Vignes, 92290, Chatenay-Malabry, France*

(Reçu le 14 mars 1984, accepté le 2 mai 1984)

#### Abstract

Two-colour two-dimensional crystals may be considered as heightened projections of (2+1)-dimensional semi-crystals. In these semi-crystals, the structure spreads on both sides of a plane; the positions are repeated by a translation lattice parallel to the plane; there is no crystal-lattice repetition in the third dimension. It is possible to classify the two-colour two-dimensional crystals as follows: (1) One-colour crystals, which are the projections of the semi-crystals whose equivalent positions are all situated on the same side of the plane for a given set. (2) Two-colour crystals based on ordinary lattices, which are the projections of the semi-crystals possessing equivalent positions situated on both sides of the

plane; but this plane is neither a reflection nor a glide plane of the semi-crystals. (3) Two-colour crystals based on coloured lattices, which are also the projections of the semi-crystals possessing equivalent positions on both sides of the plane; this plane is a glide plane of the semi-crystals. (4) Grey crystals, which are the projections of the semi-crystals with equivalent positions on both sides of the plane; this plane is a reflection plane of the semi-crystals. The sets of equivalent positions of the coloured groups are easily obtained from the sets of equivalent positions of the symmetry groups of the semi-crystal by a method due to Wood [*Bell Syst. Tech. J.* (1964), **43**, 541–559; *Bell Teleph. Syst. Tech. Publ.* (1964), Monogr. No. 4680].

\* English translations 'not refereed' may be obtained from the authors upon request.

† Auteur responsable, adresse actuelle: Ecole Nationale d'Ingénieurs, B.P.W. 1038 Sfax, Tunisie.

#### Introduction

Le présent travail a pour origine notre intérêt pour la connexion des familles de Wyckoff dans les