

- (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. & LAWRENSON, J. E. (1972). *Acta Cryst.* **A28**, 485–489, 489–493.
International Tables for X-ray Crystallography (1952). Vol. I. Birmingham: Kynoch Press.
NEUBÜSER, J. & WONDRATSCHEK, H. (1966a). *Krist. Tech.* **1** (4), 529–543.
NEUBÜSER, J. & WONDRATSCHEK, 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

passages groupe spatial ↔ sous-groupe spatial; cette question est capitale pour la compréhension géométrique des transitions de phase à structures cristallines apparentées. Lorsqu'il s'agit de groupes d'espace ordinaires, cette question est maintenant bien résolue. On trouvera de nombreuses références, par exemple dans Billiet, Sayari & Zarrouk (1978). Il n'en est pas de même pour les groupes d'espace colorés dont les familles de Wyckoff sont d'ailleurs mal connues. Aucun travail systématique ne semble avoir paru à ce sujet; seules quelques tentatives ont été faites et présentent des désaccords. La difficulté principale paraît être située au niveau de la représentation des familles grises. Ainsi Janner & Ascher (1963) donnent comme coordonnées des positions d'une famille grise d du groupe d'espace deux-coloré tridimensionnel $R\bar{3}'c'$ (1/2, 0, 0, 0; 0, 1/2, 0, 0; 1/2, 1/2, 0, 0; 1/2, 0, 1/2, 0; 0, 1/2, 1/2, 0; 1/2, 1/2, 1/2, 0) tandis que Belguith (1980) donne comme coordonnées dans le même cas (1/2, 0, 0, ±t; 0, 1/2, 0, ±t; 1/2, 1/2, 0, ±t; 1/2, 0, 1/2, ±t; 0, 1/2, 1/2, ±t; 1/2, 1/2, 1/2, ±t). Il y a moyen de rationaliser cette question: d'une part, en introduisant en plus du concept de position grise le concept de position incolore et, d'autre part, en remarquant qu'un groupe d'espace deux-coloré n -dimensionnel est isomorphe d'un groupe de symétrie semi-cristallin $(n+1)$ -dimensionnel (Belov & Tarkhova, 1956; Billiet & Weigel, 1981). Les cristaux deux-colorés* n -dimensionnels apparaissent dès lors comme des *projections cotées* (au sens de la géométrie cotée) de semi-cristaux $(n+1)$ -dimensionnels et il est aisé d'obtenir les familles de Wyckoff des groupes deux-colorés n -dimensionnels à partir des familles de Wyckoff des groupes de symétrie semi-cristallins $(n+1)$ -dimensionnels. Ce concept sera illustré dans le présent mémoire par les rapports existant entre les semi-cristaux $(2+1)$ -dimensionnels, c'est-à-dire les structures feuilletés ou couches, et les cristaux deux-colorés deux-dimensionnels.

I. Exemple

(1) *Semi-cristal de groupe de symétrie $\mathcal{P}m2a$* (Fig. 1)

Ce semi-cristal $(2+1)$ -dimensionnel s'étend dans l'espace trois-dimensionnel autour d'un plan π . La structure se répète selon un groupe de translation bidimensionnel engendré par deux translations de vecteurs a et b perpendiculaires situés dans le plan π ; il n'y a pas de répétition par translation dans la troisième direction; c'est ce que traduit le symbole \mathcal{P} de $\mathcal{P}m2a$; les autres éléments de symétrie sont:

- des miroirs dont les plans-supports sont perpendiculaires à la direction a et donc perpendiculaires au plan π (symbole m),

- des axes binaires dont les supports sont situés dans le plan π et parallèles à la direction b (symbole 2),

- un glissement dont la partie miroir est supportée par le plan π et dont la partie translation est de vecteur $a/2$ (symbole a).

Une origine O étant choisie dans le plan π sur l'un des axes binaires, chaque position est caractérisée par trois coordonnées (x, y, t) relatives au repère (O, a, b, c) , le vecteur c de ce repère étant perpendiculaire au plan (a, b) et de longueur quelconque. Dans ces conditions, une famille de Wyckoff générale s'écrit (nous justifierons dans § II l'emploi du symbole d):

$$4(d) 1 \quad x, y, t; \bar{x}, y, \bar{t}; 1/2 - x, y, t; 1/2 + x, y, \bar{t} \pmod{n, n', 0}.$$

n et n' sont des entiers quelconques traduisant la répétition bidimensionnelle. Il y a deux types de familles spéciales (l'emploi des symboles c et a sera justifié dans § II):

$$2(c) m \quad 1/4, y, t; 3/4, y, \bar{t} \pmod{n, n', 0};$$

$$2(a) 2 \quad 0, y, 0; 1/2, y, 0 \pmod{n, n', 0}.$$

Dans l'exemple choisi (Fig. 1), le semi-cristal comporte quatre familles à savoir deux familles générales et deux familles spéciales, chacune d'entre elles étant caractérisée par des valeurs particulières des coordonnées $(\pmod{n, n', 0})$:

$$4(d_1) 1 \quad x_1, y_1, t_1; \bar{x}_1, y_1, \bar{t}_1; 1/2 - x_1, y_1, t_1; 1/2 + x_1, y_1, \bar{t}_1$$

$$(x_1 \neq k/4, k \text{ entier}, t_1 \neq 0);$$

$$4(d_2) 1 \quad 0, y_2, t_2; 0, y_2, \bar{t}_2; 1/2, y_2, t_2; 1/2, y_2, \bar{t}_2$$

$$(t_2 \neq 0);$$

$$2(c) m \quad 1/4, y_3, t_3; 3/4, y_3, \bar{t}_3;$$

$$2(a) 2 \quad 0, y_4, 0; 1/2, y_4, 0.$$

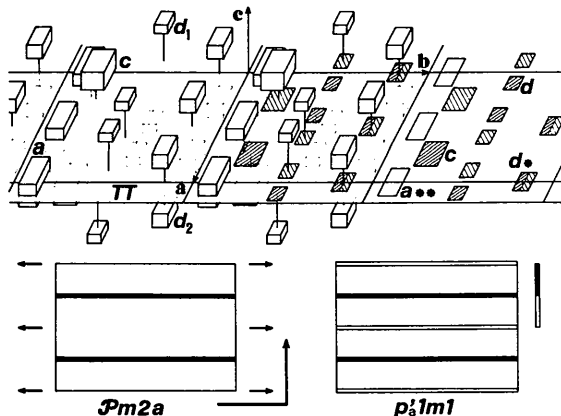


Fig. 1. Semi-cristal de groupe de symétrie $\mathcal{P}m2a$ et cristal deux-coloré deux-dimensionnel de groupe d'espace p_2^1m1 .

* Le présent mémoire ne concerne que les groupes colorés d'indice de couleur au plus égal à deux.

(2) *Cristal deux-coloré deux-dimensionnel de groupe d'espace p'_a1m1 (Fig. 1)*

Ce cristal s'étend dans le plan π ; il se répète selon le groupe de translation bidimensionnel engendré par les vecteurs perpendiculaires \mathbf{a} et \mathbf{b} (symbole p de p'_a1m1); les autres éléments de symétrie sont:

- une translation colorée de vecteur $\mathbf{a}/2$ [symbole $'_a$ selon les conventions de Belov & Tarkhova (1956)],
- des miroirs ordinaires dont les droites-supports situées dans π sont perpendiculaires à la direction \mathbf{a} (symbole m),
- des miroirs colorés dont les droites-supports sont également situées dans π et perpendiculaires à la direction \mathbf{a} (symbole m') (selon les règles de priorité du symbolisme, seuls les miroirs m qui ont la même direction que les miroirs m' apparaissent dans le symbole du groupe d'espace).

Tout point du plan π est caractérisé par trois nombres (x, y, t) . Les deux premiers sont les coordonnées classiques donnant la position par rapport au repère $(O, \mathbf{a}, \mathbf{b})$, le troisième est relatif à la couleur associée au point (t pour une couleur, \bar{t} pour la couleur opposée). Dans l'exemple choisi le cristal coloré comporte quatre familles de Wyckoff, à savoir, une famille générale et trois familles spéciales (mod $n, n', 0$):

$$4(d)1 \quad x_1, y_1, t_1; \bar{x}_1, y_1, \bar{t}_1; 1/2 - x_1, y_1, t_1;$$

$$1/2 + x_1, y_1, \bar{t}_1;$$

$$(2)(d^*)(m') \quad 0, y_2, \pm t_2; 1/2, y_2, \pm t_2;$$

$$2(c)m \quad 1/4, y_3, t_3; 3/4, y_3, \bar{t}_3;$$

$$2(a^{**})m' \quad 0, y_4, 0; 1/2, y_4, 0.$$

Chaque position de la famille générale d (le symbolisme utilisé sera justifié dans § II) est porteuse d'une unique couleur. Il en est de même pour la famille spéciale c . Quand à la famille d^* , chaque position est porteuse de deux couleurs différentes et opposées (\pm se lit *plus et moins*), c'est une famille grise (symbole $*$). Enfin chaque position de la famille a^{**} est caractérisée par la couleur nulle $t=0$; c'est une famille incolore (symbole $**$).

(3) *Comparaison du semi-cristal et du cristal coloré*

Les groupes $\mathcal{P}m2a$ et p'_a1m1 sont isomorphes, c'est-à-dire, constituent deux réalisations concrètes du même groupe abstrait (Belov & Tarkhova, 1956). Dans le premier cas le symbolisme a été adapté à la description d'un semi-cristal (2+1)-dimensionnel, il dérive directement du symbolisme des groupes d'espace trois-dimensionnels (cf. § II). Dans le second cas le symbolisme a été adapté à la description d'un cristal deux-dimensionnel deux-coloré, il dérive du symbolisme des groupes d'espace deux-dimension-

nels.† Les miroirs m (droites) de p'_a1m1 sont les restrictions au plan π des miroirs m (plans) de $\mathcal{P}m2a$; les miroirs m' (droites) de p'_a1m1 jouent le rôle des axes binaires (droites) de $\mathcal{P}m2a$; la translation colorée $'_a$ de p'_a1m1 est l'image du glissement a de $\mathcal{P}m2a$.

Le cristal coloré apparaît alors comme étant la projection cotée dans le plan π du semi-cristal s'étendant de part et d'autre de π , la couleur jouant le rôle de la cote associée à chaque point de la projection. La famille d du cristal coloré (p'_a1m1) est la projection cotée de la famille d_1 du semi-cristal ($\mathcal{P}m2a$). La famille grise d^* de p'_a1m1 comporte deux positions bicolorées par maille, c'est la projection de la famille d_2 de $\mathcal{P}m2a$ comportant quatre positions par maille, mais il convient de remarquer que les positions de d_2 se projettent deux à deux sur le même point du plan π qui se trouve alors muni de deux cotes opposées. La famille c de p'_a1m1 est la projection cotée de la famille c de $\mathcal{P}m2a$. La famille incolore a^{**} de p'_a1m1 se confond avec la famille a de $\mathcal{P}m2a$: on peut aussi la considérer comme étant la limite de la famille grise d^* quand les deux couleurs opposées tendent l'une vers l'autre; ce qui correspond à la limite de deux positions du semi-cristal, symétriques par rapport à π , tendant l'une vers l'autre ($t = -t = 0$).

II. Construction des familles de Wyckoff des semi-cristaux (2+1)-dimensionnels et des cristaux deux-colorés deux-dimensionnels

On peut très facilement étendre aux cristaux deux-colorés deux-dimensionnels une méthode utilisée par Wood (1964a, b) pour trouver les familles de Wyckoff des semi-cristaux (2+1)-dimensionnels. Rappelons brièvement la méthode de Wood. Soit le groupe d'espace tridimensionnel C_{2v}^4 ($Pma2$) dans l'orientation non conventionnelle $\mathcal{P}m2a$ (cf. *International Tables for X-ray Crystallography*, 1952). Ce groupe d'espace possède:

- des miroirs perpendiculaires à la direction \mathbf{a} de supports $1/4 + k/2, y, z$ (k entier),
- des axes binaires horizontaux de supports $k/2, y, k'/2$ (k et k' entiers),
- des glissements a de supports $x, y, k/2$ (k entier).

On voit donc que le groupe $\mathcal{P}m2a$ possède tous les éléments de symétrie du groupe $\mathcal{P}m2a$; en d'autres termes $\mathcal{P}m2a$ est un sous-groupe de $\mathcal{P}m2a$. Pour obtenir $\mathcal{P}m2a$ il faut supprimer dans $\mathcal{P}m2a$ toutes les translations ayant une composante non nulle le long de \mathbf{c} et plus généralement les opérations de symétrie incompatibles avec la seule répétition bidimensionnelle de translation; ce qui revient à dire

† A ce propos, le lecteur se rappellera les permutations éventuelles des symboles lorsqu'on passe des groupes bidimensionnels aux groupes tridimensionnels; par exemple $2mm \leftrightarrow mm2$.

Tableau 1. Familles de Wyckoff des groupes bidimensionnels colorés

Les groupes sont rangés selon l'ordre adopté par Belov & Tarkhova (1956). Pour chaque groupe bicoloré g , on a fait figurer d'abord son numéro, ensuite le symbole adapté à la description des semi-cristaux, ensuite le numéro et le symbole du groupe d'espace G (cf. *International Tables for X-ray Crystallography*, 1952) à partir duquel g est construit; le symbole de G est éventuellement suivi de la permutation des axes lorsque l'orientation utilisée n'est pas 'standard'. Viennent ensuite les familles de Wyckoff de G qui appartiennent à g (modulo $n, n', 0$) (Wood, 1964ab). On trouve ensuite le symbole de g adapté à la description des cristaux colorés et les familles de Wyckoff de G donnant par restriction à la répétition bidimensionnelle les familles de g : pour les familles grises sont éventuellement indiquées les valeurs particulières des paramètres de position; il y a autant de types de familles grises * que de types de familles incolores **.

1	$\mathcal{P}\bar{1}2(P\bar{1})$; i, e, d, c, a ; $p_2'11 i, i^*(x=y=1/2), i^*(x=1/2, y=0), i^*(x=0, y=1/2), i^*(x=y=0), e^{**}, d^{**}, c^{**}, a^{**}$	39	$\mathcal{P}4/nmm$ 129($P4/nmm$); k, j, i, g, f, d, c, a ; $p_c'4mm k, k^*(x=y), j, j^*(x=1/4), i, g^{**}, f^*, d^{**}, c, a^{**}$
2	$\mathcal{P}11b$ 7($P11b$); $a; p_b'1a$	40	$\mathcal{P}4/nbm$ 125($P4/nbm$); $n, m, k, i, h, g, e, c, a$; $p_c'4gm n, n^*(y=0), n^*(y=x), m, m^*(x=1/4), k^{**}, i^{**}, h^*, g^*, e^{**}, c^{**}, a^{**}$
3	$\mathcal{P}112/b$ 13($P112/b$); g, f, e, d, a ; $p_b'211 g, g^*(x=y=1/2), g^*(x=y=0), f, e, d^{**}, a^{**}$	41	$\mathcal{P}312$ 149($P312$); l, j, i, h, g, e, c, a ; $p_3m'1 l^*(y=\bar{x}), j^{**}, i^*, h^*, g^*, e^{**}, c^{**}, a^{**}$
4	$\mathcal{P}121$ 3($P121$); e, c, a ; $p_1m'1 e, e^*(x=1/2), e^*(x=0), c^{**}, a^{**}$	42	$\mathcal{P}321$ 150($P321$); g, e, d, c, a ; $p_31m' g, g^*(y=0), e^{**}, d, c^*, a^{**}$
5	$\mathcal{P}12,1$ 4($P12,1$); $a; p_1g'1 a$	43	$\mathcal{P}\bar{3}$ 147($P\bar{3}$); g, e, d, c, a ; $p_6' g^*(x=1/2, y=0), e^{**}, d, c^*, a^{**}$
6	$\mathcal{P}121$ 5($C121$); c, a ; $c_1m'1 c, c^*(x=0), a^{**}$	44	$\mathcal{P}\bar{3}12/m$ 162($P\bar{3}12/m$); l, k, i, h, f, e, c, a ; $p_6'm'm l, l^*(y=\bar{x}), k, k^*(x=1/2), i^{**}, h^*, f^{**}, e^*, c^{**}, a^{**}$
7	$\mathcal{P}m2, b$ 26($Pmc2_1$); \bar{a}, c, b ; c, b, a ; $p_b'1m1 c, b, a$	45	$\mathcal{P}\bar{3}2/m1$ 164($P\bar{3}2/m1$); j, i, g, e, d, c, a ; $p_6'mm' j, j^*(y=0), m, m^*(x=1/2), g^{**}, e^{**}, d, c^*, a^{**}$
8	$\mathcal{P}b2b$ 27($Pcc2_1$); \bar{a}, c, b ; e, c, a ; $p_b'1g1 e, e^*(x=1/2), e^*(x=0), c^{**}, a^{**}$	46	$\mathcal{P}622$ 177($P622$); $n, l, j, i, h, f, e, c, a$; $p_6m'm' n, n^*(y=0), n^*(y=\bar{x}), l^{**}, j^{**}, i^*, h^*, f^{**}, e^*, c^{**}, a^{**}$
9	$\mathcal{P}m2a$ 28($Pma2$); \bar{a}, c, b ; d, c, a ; $p_a'1m1 d, d^*(x=0), c, a^{**}$	47	$\mathcal{P}1$ 1($P1$); $a; p_1 a$
10	$\mathcal{P}b2, a$ 29($Pca2_1$); \bar{a}, c, b ; $a; p_a'1g1 a$	48	$\mathcal{P}112$ 3($P112$); e, d, b, c, a ; $p_211 e, d, c, b, a$
11	$\mathcal{P}m2, n$ 31($Pmn2_1$); \bar{a}, c, b ; b, a ; $p_c'1m1 b, a$	49	$\mathcal{P}m11$ 6($P1m1$); b, a, \bar{c} ; c, b, a ; $p_1m1 c, b, a$
12	$\mathcal{P}b2n$ 30($Pnc2_1$); b, c, a ; c, a ; $p_c'1g1 c, c^*(x=0), a^{**}$	50	$\mathcal{P}b11$ 7($P11b$); c, b, a ; $a; p_1g1 a$
13	$\mathcal{C}m2a$ 39($Abm2$); b, c, a ; d, c, a ; $c_1'm1 d, d^*(x=0), c, a^{**}$	51	$\mathcal{C}m11$ 8($C1m1$); b, a, \bar{c} ; b, a ; $c_1m1 b, a$
14	$\mathcal{P}2/m11$ 10($P12/m1$); b, a, \bar{c} ; $o, n, m, j, i, e, d, b, a$; $p_2'mm' o, o^*(x=1/2), o^*(x=0), n, n^*(x=1/2), n^*(x=0), m, m^*(x=1/2), m^*(x=0), j^{**}, i^{**}, e^{**}, d^{**}, b^{**}, a^{**}$	52	$\mathcal{P}mm2$ 25($Pmm2$); $i, h, g, f, e, d, c, b, a$; $p_2mm i, h, g, f, e, d, c, b, a$
15	$\mathcal{P}222$ 16($P222$); $u, t, s, r, q, o, m, k, i, e, c, b, a$; $p_2m'm' u, u^*(x=1/2), u^*(x=0), u^*(y=1/2), u^*(y=0), i^*, s^*, r^*, q^*, o^{**}, m^{**}, k^{**}, i^{**}, e^{**}, c^{**}, b^{**}, a^{**}$	53	$\mathcal{P}ma2$ 28($Pma2$); d, c, b, a ; $p_2mg d, c, b, a$
16	$\mathcal{P}12/a1$ 13($P12/c1$); c, \bar{b}, a ; g, e, c, a ; $p_2'm'g g, g^*(x=1/4), g^*(x=y=1/2), g^*(x=y=0), e^{**}, c^{**}, a^{**}$	54	$\mathcal{P}ba2$ 32($Pba2$); c, b, a ; $p_2gg c, b, a$
17	$\mathcal{P}2_1/m11$ 11($P12_1/m1$); b, a, \bar{c} ; f, e, b, a ; $p_2'mg' f, f^*(x=y=1/2), f^*(x=y=0), e, b^{**}, a^{**}$	55	$\mathcal{C}mm2$ 35($Cmm2$); f, e, d, c, b, a ; $c_2mm f, e, d, c, b, a$
18	$\mathcal{P}2_1/b11$ 14($P112_1/b$); c, \bar{b}, a ; e, c, a ; $p_2'gg' e, e^*(x=1/2, y=0), e^*(x=y=0), c^{**}, a^{**}$	56	$\mathcal{P}4$ 75($P4$); d, c, b, a ; $p_4 d, c, b, a$
19	$\mathcal{P}2,2$ 2 18($P2_1,2$); c, b, a ; $p_2g'g' c, b, a$	57	$\mathcal{P}4mm$ 99($P4mm$); g, f, e, d, c, b, a ; $p_4mm g, f, e, d, c, b, a$
20	$\mathcal{P}2,22$ 17($P222_1$); c, b, a ; e, c, b, a ; $p_2m'g' e, e^*(x=1/4), c^{**}, b, a$	58	$\mathcal{P}4bm$ 100($P4bm$); d, c, b, a ; $p_4gm d, c, b, a$
21	$\mathcal{C}2/m11$ 12($C12/m1$); b, a, \bar{c} ; j, i, g, e, b, a ; $c_2'mm' j, j^*(y=0), j^*(x=y=1/4), i, i^*(y=1/2), i^*(y=0), g^{**}, e^{**}, b^{**}, a^{**}$	59	$\mathcal{P}3$ 143($P3$); d, c, b, a ; $p_3 d, c, b, a$
22	$\mathcal{C}222$ 21($C222$); l, k, j, i, g, e, b, a ; $c_2m'm' l, l^*(x=0), l^*(y=0), k, j^*, i^*, g^{**}, e^{**}, b^{**}, a^{**}$	60	$\mathcal{P}3m1$ 156($P3m1$); e, d, c, b, a ; $p_3m1 e, d, c, b, a$
23	$\mathcal{P}mmb$ 51($Pmma$); b, a, \bar{c} ; $l, k, j, i, g, f, e, b, a$; $p_b'2mm l, l^*(y=0), k, j, j^*(y=0), i, i^*(y=0), g^{**}, f, e, b^{**}, a^{**}$	61	$\mathcal{P}31m$ 157($P31m$); d, c, b, a ; $p_31m d, c, b, a$
24	$\mathcal{P}mab$ 57($Pbcm$); c, \bar{b}, a ; e, d, c, a ; $p_b'2mg e, e^*(x=y=0), d, c, a^{**}$	62	$\mathcal{P}6$ 168($P6$); d, c, b, a ; $p_6 d, c, b, a$
25	$\mathcal{P}maa$ 49($Pccm$); c, \bar{b}, a ; $r, q, p, m, l, k, f, e, d, a$; $p_a'2mg r, r^*(x=1/2), r^*(x=0), r^*(y=1/4), q^*(x=1/2), q^*(x=0), p^{**}, m^{**}, l^{**}, k^{**}, i^{**}, f^{**}, e^{**}, d^{**}, a^{**}$	62	$\mathcal{P}6mm$ 183($P6mm$); f, e, d, c, b, a ; $p_6mm f, e, d, c, b, a$
26	$\mathcal{P}bab$ 54($Pcca$); \bar{a}, c, b ; f, d, c, a ; $p_b'2gg f, f^*(x=1/4), f^*(x=y=0), d^{**}, c, a^{**}$	64	$\mathcal{P}11m$ 6($P11m$); c, a ; $p_1' c^*, a^{**}$
27	$\mathcal{P}mnn$ 59($Pmnn$); g, f, e, c, b, a ; $p_c'2mm g, g^*(x=y=1/4), f, e, c^{**}, b, a$	65	$\mathcal{P}112/m$ 10($P112/m$); $o, m, l, k, j, i, g, d, c, a$; $p_2111' o^*, m^{**}, l^*, k^*, j^*, i^*, g^{**}, d^{**}, c^{**}, a^{**}$
28	$\mathcal{P}man$ 53($Pmna$); \bar{a}, c, b ; i, h, g, e, b, a ; $p_c'2mg i, i^*(y=0), m, m^*(y=1/2), m^*(y=0), g, e^{**}, b^{**}, a^{**}$	66	$\mathcal{P}m2m$ 25($Pmm2$); \bar{a}, c, b ; i, h, g, e, c, a ; $p_1m11' i^*, h^*, g^*, e^{**}, c^{**}, a^{**}$
29	$\mathcal{P}ban$ 50($Pban$); m, l, k, i, g, e, b, a ; $p_c'2gg m, m^*(x=1/4), m^*(y=1/4), m^*(x=y=0), l^*, k^*, i^{**}, g^{**}, e^{**}, b^{**}, a^{**}$	67	$\mathcal{P}b2, m$ 26($Pmc2_1$); b, c, a ; c, a ; $p_1g11' c^*, a^{**}$
30	$\mathcal{C}mma$ 67($Cmma$); $o, n, m, l, j, h, g, e, c, a$; $c_2mm o, o^*(x=1/4), o^*(y=0), n, n^*(x=1/4), m, m^*(y=0), l^*, j^{**}, h^{**}, g, e^{**}, b^{**}, a^{**}$	68	$\mathcal{C}m2m$ 38($Amm2$); b, c, a ; f, d, c, a ; $c_1m11' f^*, d^{**}, c^*, a^{**}$
31	$\mathcal{P}4$ 81($P4$); h, g, f, e, c, a ; $p_4' h, g, f, e, c^{**}, a^{**}$	69	$\mathcal{P}mmm$ 47($Pmmm$); $\alpha, \gamma, x, w, v, u, t, s, r, q, o, m, k, i, f, e, b, a$; $p_2mm1' \alpha^*, \gamma^{**}, x^*, w^*, v^*, u^*, t^*, s^*, r^*, q^*, o^{**}, m^{**}, k^{**}, i^{**}, f^{**}, e^{**}, b^{**}, a^{**}$
32	$\mathcal{P}4/n$ 85($P4/n$); g, f, d, c, a ; $p_c'4 g, g^*(x=y=1/4), f^*, e^*, c^{**}, a^{**}$	70	$\mathcal{P}mam$ 51($Pmma$); \bar{a}, c, b ; l, k, i, h, g, e, c, a ; $p_2mg1' l^*, k^*, i^{**}, h^*, g^*, e^{**}, c^{**}, a^{**}$
33	$\mathcal{P}4m2$ 115($P4m2$); $l, k, j, h, g, f, e, b, a$; $p_4'mm' l, l^*(x=y), k, j, h^{**}, g, f^*, e^*, b^{**}, a^{**}$	71	$\mathcal{P}bam$ 55($Pbam$); i, g, f, e, c, a ; $p_2gg1' i^*, g^{**}, f^*, e^*, c^{**}, a^{**}$
34	$\mathcal{P}42m$ 111($P42m$); $o, n, m, l, i, h, g, e, d, a$; $p_4'm'm o, o^*(y=1/2), o^*(y=0), n, m^*, l^{**}, i^{**}, h^*, g^*, e^{**}, d^{**}, a^{**}$	72	$\mathcal{C}mmm$ 65($Cmmm$); $r, p, o, n, m, l, k, i, g, e, b, a$; $c_2mm1' r^*, p^{**}, o^*, n^*, m^*, l^*, k^*, i^{**}, g^{**}, e^{**}, b^{**}, a^{**}$
35	$\mathcal{P}422$ 89($P422$); $p, o, l, j, i, h, g, e, c, a$; $p_4m'm' p, p^*(y=1/2), p^*(y=0), p^*(y=x), o^{**}, l^{**}, j^{**}, i^*, h^*, g^*, e^{**}, c^{**}, a^{**}$	73	$\mathcal{P}4/m$ 83($P4/m$); l, j, i, h, g, e, c, a ; $p_41' l^*, j^{**}, i^*, h^*, g^*, e^{**}, c^{**}, a^{**}$
36	$\mathcal{P}4b2$ 117($P4b2$); i, g, f, e, c, a ; $p_4'gm' i, i^*(y=x+1/2), g^{**}, f^*, e^*, c^{**}, a^{**}$	74	$\mathcal{P}4/mmm$ 123($P4/mmm$); $u, t, s, r, p, n, l, j, i, h, g, f, c, a$; $p_4mm1' u^*, i^*, s^*, r^*, p^{**}, n^{**}, l^{**}, j^{**}, i^*, h^*, g^*, f^{**}, c^{**}, a^{**}$
37	$\mathcal{P}42, m$ 113($P42, m$); f, e, d, c, a ; $p_4'g'm f, e, d^*, c, a^{**}$	75	$\mathcal{P}4/mbm$ 127($P4/mbm$); l, k, i, g, f, e, a ; $p_4gm1' l^*, k^*, i^{**}, g^{**}, f^*, e^*, d^{**}, a^{**}$
38	$\mathcal{P}42,2$ 90($P42,2$); g, e, d, c, a ; $p_4g'm' g, g^*(y=x), e^{**}, d^*, c, a^{**}$	76	$\mathcal{P}6$ 174($P\bar{6}$); l, j, i, h, g, e, c, a ; $p_3' l^*, j^{**}, i^*, h^*, g^*, e^{**}, c^{**}, a^{**}$
		77	$\mathcal{P}6m$ 187($P6m2$); $o, n, l, j, i, h, g, e, c, a$; $p_3'm1 o^*, n^*, l^{**}, j^{**}, i^*, h^*, g^*, e^{**}, c^{**}, a^{**}$
		78	$\mathcal{P}62m$ 189($P62m$); l, j, i, h, f, e, c, a ; $p_3'1m l^*, j^{**}, i^*, h^*, f^{**}, e^*, c^{**}, a^{**}$
		79	$\mathcal{P}6/m$ 175($P6/m$); l, j, i, h, f, e, c, a ; $p_61' l^*, j^{**}, i^*, h^*, f^{**}, e^*, c^{**}, a^{**}$
		80	$\mathcal{P}6/mmm$ 191($P6/mmm$); $r, p, o, n, l, j, i, h, f, e, c, a$; $p_6mm1' r^*, p^{**}, o^*, n^*, l^{**}, j^{**}, i^*, h^*, f^{**}, e^*, c^{**}, a^{**}$

que l'on va supprimer de $Pm2a$ les opérations dont le support, restreint à la dimension deux, n'est pas

situé dans le plan π . Voici les familles de Wyckoff de $Pm2a$ (orientation non conventionnelle):

- 4 (d) 1 $x, y, z; \bar{x}, y, \bar{z}; 1/2 - x, y, z;$
 $1/2 + x, y, \bar{z} \pmod{n, n', n''};$
 2 (c) m $1/4, y, z; 3/4, y, \bar{z} \pmod{n, n', n''};$
 2 (b) 2 $0, y, 1/2; 1/2, y, 1/2 \pmod{n, n', n''};$
 2 (a) 2 $0, y, 0; 1/2, y, 0 \pmod{n, n', n''}.$

La restriction à la seule répétition bidimensionnelle de translation donne les familles de Wyckoff de $\mathcal{P}m2a$, en remplaçant la lettre z par la lettre t pour rappeler le rôle particulier de la troisième coordonnée:

- 4 (d) 1 $x, y, t; \bar{x}, y, \bar{t}; 1/2 - x, y, t;$
 $1/2 + x, y, \bar{t} \pmod{n, n', 0};$
 2 (c) m $1/4, y, t; 3/4, y, \bar{t} \pmod{n, n', 0};$
 2 (a) 2 $0, y, 0; 1/2, y, 0 \pmod{n, n', 0}.$

On obtient les trois types de familles notés d, c, a issus des types de familles d, c, a de $Pm2a$; on ne peut pas obtenir de familles issues du type b de $Pm2a$ car ces positions sont toutes situées sur des axes binaires en dehors du plan π .

La méthode de Wood s'étend sans difficulté aux autres groupes de symétrie semi-cristallins (2+1)-dimensionnels: les résultats sont rappelés dans le Tableau 1 sous forme extrêmement condensée. La construction des familles de Wyckoff des groupes deux-colorés deux-dimensionnels n'offre aucune difficulté à partir des familles de Wyckoff des groupes de symétrie semi-cristallins (2+1)-dimensionnels, ainsi que nous l'avons montré dans § I. Les résultats figurent également dans le Tableau 1.

III. Conclusion

Par le procédé que nous avons utilisé, on retrouve les quatre catégories de groupes colorés.

1ère catégorie: Groupes monoclores. Ces cristaux

ne comportent ni familles grises, ni familles incolores.

2ème catégorie: Groupes biclores vrais n'ayant pas de translation colorée. Cette catégorie de cristaux colorés possède des familles de positions unicolores et souvent des familles grises et des familles incolores.

3ème catégorie: Groupes biclores vrais ayant des translations colorées. Cette catégorie admet des familles de positions unicolores et souvent des familles grises et incolores.

4ème catégorie: Groupes gris. Ce type de cristaux colorés n'admet que des familles grises et incolores.

Il convient de remarquer qu'un groupe coloré contient autant de types de familles grises que de types de familles incolores puisqu'une famille incolore est la limite d'une famille grise quand les deux couleurs tendent l'une vers l'autre.

L'extension de ces concepts aux cristaux trois-dimensionnels deux-colorés n'offre pas de difficulté: ces cristaux sont les *projections cotées* de semi-cristaux (3+1)-dimensionnels qui s'étendent donc en dimension quatre de part et d'autre d'un hyperplan de dimension trois, la répétition périodique intervenant uniquement selon un groupe de translation trois-dimensionnel de cet hyperplan; on retrouve exactement les mêmes propriétés pour les familles de Wyckoff: familles de positions unicolores, grises et incolores.

Références

- BELGUITH, J. (1980). Thèse de 3ème cycle, Tunis, Tunisie.
 BELOV, N. V. & TARKHOVA, T. N. (1956). *Kristallografiya*, **1**, 4-9.
 BILLIET, Y., SAYARI, A. & ZARROUK, H. (1978). *Acta Cryst.* **A34**, 414-421, 811-819.
 BILLIET, Y. & WEIGEL, D. (1981). *Acta Cryst.* **A37**, C348.
International Tables for X-ray Crystallography (1952). Tome I. Birmingham: Kynoch Press.
 JANNER, A. & ASCHER, E. (1963). *Cobalt Ions in Non-metallic Structures*. Tome II. Bruxelles: Centre d'Information du Cobalt.
 WOOD, E. A. (1964a). *Bell Syst. Tech. J.* **43**, 541-559.
 WOOD, E. A. (1964b). *Bell Teleph. Syst. Tech. Pub. Monograph* No. 4680.

Acta Cryst. (1984). **A40**, 635-642

A Retabulation of the 80 Layer Groups for Electron Diffraction Usage

By P. GOODMAN

CSIRO Division of Chemical Physics, PO Box 160, Clayton, Victoria, Australia 3168

(Received 17 June 1983; accepted 15 June 1984)

Abstract

The 80 space groups of infinitely extended layers are identified as the defining groups for transmission electron diffraction symmetries obtained from lamellar crystals. These layer groups are retabulated using

a notation which characterizes the symmetries of convergent-beam diffraction patterns. The new tabulation provides a means for determining the three-dimensional space group of a particular structure from one or more convergent-beam zone-axis patterns. This is a two-stage process, involving