consultation, Mr Samuel Wiener for his encouragement and Professors Jimmy W. Viers and John C. Schug of the Chemistry Department of VPI & SU for discussions. The author also thanks the editors and the referees for their valuable comments and help.

References

BARRON, L. D. (1975). *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* 2, **71**, 293-300.
BARRON, L. D. (1982). *Molecular Light Scattering and Optical Activity.* Cambridge Univ. Press.
BOISEN, M. B. JR & GIBBS, G. V. (1985). *Mathematical Crystallography*, p. 32. Washington, DC: Mineralogical Society of America.
BUNN, C. W. (1961). *Chemical Crystallography.* Oxford Univ. Press.
CHEN, S. L., SCHUG, J. C. & VIERS, J. W. (1986). *Acta Cryst.* **A42**, 137-139.
GIBBS, R. E. (1926). *Proc. R. Soc. London Ser A*, **110**, 443-455.
International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology (1929). Vol. 6, edited by E. W. WASHBURN, pp. 341, 343. New York and London: McGraw-Hill.
JULIAN, C. L. & LANE, F. O. JR (1968). *J. Appl. Phys.* **39**, 2316-2324.
KLEINMAN, D. A. & SPITZER, W. G. (1962). *Phys. Rev.* **125**, 16-30.
MASON, S. F. (1982). *Molecular Optical Activity and the Chiral Discriminations*, p. 16. Cambridge Univ. Press.
WAHLSTROM, E. E. (1979). *Optical Crystallography*, 5th ed., p. 373. New York: Wiley.
XU, G. X. (1978). *Structure of Matter*, Vol. 1, p. 169, Table 5-13. Beijing: People's Educational Publisher.

Acta Cryst. (1993). **A49**, 154-159

Le Coloriage des Familles de Positions Equivalentes Générales et Spéciales dans les Groupes d'Espace Bidimensionnels Quadricolorés*

PAR MONGI REKIK

Département de Physique, Faculté des Sciences, BP W, 3038 Sfax, Tunisie

ET YVES BILLIET†

Département de Chimie, Faculté des Sciences, BP 825, Niamey, Niger

(*Reçu le 21 avril 1992, accepté le 28 mai 1992*)

Abstract

The properties of the colouring of the general and special sets of equivalent points are studied for the 184 classes of equivalent four-coloured space groups connected with the 17 two-dimensional space groups. Every general set of equivalent points is divided into four equal subsets of points bearing one of the colours C_1, C_2, C_3, C_4. The same situation occurs in some cases for special sets of equivalent points. In particular cases, a special set of two-coloured equivalent points may be divided into two equal subsets (*e.g.* one subset of positions bearing the colours C_1C_2, the other one bearing the colours C_3C_4) or into four equal subsets (*e.g.* C_1C_2, C_1C_3, C_2C_4, C_3C_4) or into six equal subsets (C_1C_2, C_1C_3, C_1C_4, C_2C_3, C_2C_4, C_3C_4). There exist special sets bearing three colours; they divide into four equal subsets ($C_1C_2C_3$, $C_1C_2C_4$, $C_1C_3C_4$, $C_2C_3C_4$). There are also special sets of equivalent points bearing the four colours. The study is illustrated by several examples.

* An unrefereed English translation may be obtained from the authors upon request.

† Auteur responsable à qui doit être envoyée toute correspondance.

0108-7673/93/010154-06$06.00

Introduction

Dans un mémoire précédent (Rekik & Billiet, 1991), nous avons donné la liste des 281 sous-groupes d'indice 4 des 17 groupes d'espace bidimensionnels; ils se répartissent en 184 classes de sous-groupes conjugués.

Un groupe d'espace quadricoloré est un couple 'groupe d'espace G - sous-groupe g d'indice 4' [pour la définition et les propriétés fondamentales des groupes colorés voir, par exemple, Jarratt & Schwarzenberger (1980), Schwarzenberger (1980, 1984) et Senechal (1975, 1979, 1988)]; chaque complexe a_ig de la partition de G relative à g correspond à une couleur C_i (quatre couleurs en tout: C_1, C_2, C_3, C_4):

$$G = a_1g + a_2g + a_3g + a_4g$$

$$\text{avec } a_1 \in g, \quad a_j \notin a_ig, \quad j > i.$$

Si le sous-groupe g' est conjugué de g, le couple G–g' définit par convention un groupe d'espace quadricoloré équivalent à celui défini par G–g; il existe donc 184 classes de groupes quadricolorés équivalents correspondant aux 17 groupes d'espace bidimensionnels.

Le présent mémoire s'intéresse à la distribution des couleurs dans les familles de positions équivalentes générales et spéciales; un tel travail a été fait dans le cas des groupes d'espace bidimensionnels bicolorés (Belguith, Billiet & Weigel, 1984) mais ne semble pas avoir été réalisé pour les groupes d'espace quadricolorés.

Le repère conventionnel utilisé pour le groupe G étant $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$ (origine et vecteurs) et celui utilisé pour le sous-groupe g étant $(o, \mathbf{a}, \mathbf{b})$, on conviendra par la suite d'exprimer par la série de six nombres $(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6)$ le passage du repère $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$ au repère $(o, \mathbf{a}, \mathbf{b})$:

$$\mathbf{Oo} = n_1\mathbf{A} + n_2\mathbf{B}; \quad \mathbf{a} = n_3\mathbf{A} + n_4\mathbf{B}; \quad \mathbf{b} = n_5\mathbf{A} + n_6\mathbf{B}.$$

Et d'une façon générale, les composantes des vecteurs, les coordonnées des positions seront exprimées par rapport au repère conventionnel $(O, \mathbf{A}, \mathbf{B})$ de G. Les lettres m et n désigneront toujours des entiers quelconques dans les expressions des coordonnées.

I. Cas des familles générales

Lorsqu'il s'agit d'une famille générale, chaque position est porteuse d'une seule couleur. Les opérations de symétrie du complexe a_1g permutent entre elles les positions de couleur C_1, celles du complexe a_2g transforment les positions de couleur C_1 en les positions de couleur C_2, celles de a_3g transforment les positions de couleur C_1 en les positions de couleur C_3 et celles de a_4g les positions de couleur C_1 en les positions de couleur C_4. De sorte que pour le quart d'entre elles les positions de la famille générale portent la couleur C_1 et leur ensemble est invariant par le sous-groupe $g_1 = g$; pour un autre quart les positions sont porteuses de la couleur C_2 et leur ensemble est invariant par le sous-groupe $g_2 = a_2ga_2^{-1}$ conjugué de g; de même pour un autre quart (couleur C_3 et sous-groupe conjugué $g_3 = a_3ga_3^{-1}$) et pour le dernier quart (couleur C_4 et sous-groupe conjugué $g_4 = a_4ga_4^{-1}$).

Chaque sous-groupe conjugué de g apparaît donc comme sous-groupe d'invariance de l'un ou l'autre des quatre ensembles de positions portant la même couleur; on comprend dès lors la raison qui amène à considérer comme équivalents les groupes colorés engendrés par des couples G–g et G–g' où g' est conjugué de g. Dans le cas où les quatre sous-groupes g_1, g_2, g_3, g_4 sont tous distincts, chacun d'entre eux est sous-groupe d'invariance d'un seul ensemble de positions de la même couleur. S'il n'existe que deux sous-groupes conjugués distincts, chacun d'entre eux est sous-groupe d'invariance de deux ensembles de positions de même couleur. Enfin si g est invariant, alors chacun des quatre ensembles de positions de même couleur est invariant par g. Le sous-groupe de G laissant invariant, couleur par couleur, les quatre ensembles de position en même temps est le groupe intersection g_0 de g_1, g_2, g_3, g_4 dans tous les cas.

Exemple 1. Considérons le groupe $G = p6mm$ et le sous-groupe d'indice 4 $g = p6mm$ $(0, 0, 2, 0, 0, 2)$; ils engendrent le groupe d'espace quadricoloré noté $p6mm$–$p6mm$ $(0, 0, 2, 0, 0, 2)$. Les générateurs des complexes de la partition de G relative à g sont: $a_1 = 1$, $a_2 = t(1, 0)$, $a_3 = t(0, 1)$, $a_4 = t(1, 1)$. La famille générale f de G est colorée comme suit:*

C_1: $x+k, y+l;\ \bar{y}+k, x-y+l;\ \bar{x}+y+k, \bar{x}+l;$
$\bar{x}+k, \bar{y}+l;\ y+k, \bar{x}+y+l;\ x-y+k, x+l;$
$\bar{y}+k, \bar{x}+l;\ \bar{x}+y+k, y+l;\ x+k, x-y+l;$
$y+k, x+l;\ x-y+k, \bar{y}+l;\ \bar{x}+k, \bar{x}+y+l;$
avec $k = 2m$, $l = 2n$;

C_2: même écriture que C_1, avec $k = 2m+1$, $l = 2n$;

C_3: même écriture, $k = 2m$, $l = 2n+1$;

C_4: même écriture, $k = 2m+1$, $l = 2n+1$.

Les quatre sous-groupes g_1, g_2, g_3, g_4 sont distincts; ils ont le même symbole $p6mm$; leurs repères conventionnels respectifs sont définis par $(0, 0, 2, 0, 0, 2)$, $(1, 0, 2, 0, 0, 2)$, $(0, 1, 2, 0, 0, 2)$ et $(1, 1, 2, 0, 0, 2)$. Le sous-groupe g_0 est $p2$ $(0, 0, 2, 0, 0, 2)$.

Exemple 2. Soit le groupe d'espace quadricoloré $p4gm$–$p4$ $(0, 0, 1, 1, -1, 1)$; $a_1 = 1$, $a_2 = t(0, 1)$, $a_3 = m(\frac{1}{4}+x, \frac{1}{4}-x)$, $a_4 = g[(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})\ x, \bar{x}]$. La famille générale d de $p4gm$ est ainsi colorée:

C_1: $x+k, y+l;\ \bar{y}+k, x+l;\ \bar{x}+k, \bar{y}+l;$
$y+k, \bar{x}+l$; avec $k = m$ et $l = m+2n$;

C_2: même écriture que C_1,
avec $k = m$ et $l = m+2n+1$;

C_3: $\bar{y}+k, \bar{x}+l;\ \bar{x}+k, y+l;\ y+k, x+l;$
$x+k, \bar{y}+l$; avec $k = m+\frac{1}{2}$
et $l = m+2n+\frac{1}{2}$;

C_4: même écriture que C_3, avec $k = m+\frac{1}{2}$
et $l = m+2n+\frac{3}{2}$.

C_1 et C_2 ont le même sous-groupe d'invariance $g_1 = g_2$; de même pour C_3 et C_4, $g_3 = g_4$; g_1 et g_3 ont le même symbole $p4$; leurs repères conventionnels respectifs sont donnés par $(0, 0, 1, 1, -1, 1)$ et $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1, -1, 1)$. Le sous-groupe g_0 est $p2$ $(0, 0, 1, 1, -1, 1)$.

Exemple 3. Soit le groupe coloré $p6mm$–$p3$ $(0, 0, 1, 0, 0, 1)$; $a_1 = 1$, $a_2 = 2(0, 0)$, $a_3 = m(x, \bar{x})$, $a_4 = m(x, x)$. Le coloriage de la famille générale f est le

* Les notations des opérations de symétrie et des familles de positions sont conformes aux *International Tables for Crystallography* (1987).

suivant:

C_1: $x+m, y+n; \bar{y}+m, x-y+n;$
$\bar{x}+y+m, \bar{x}+n;$

C_2: $\bar{x}+m, \bar{y}+n; y+m, \bar{x}+y+n;$
$x-y+m, x+n;$

C_3: $\bar{y}+m, \bar{x}+n; \bar{x}+y+m, y+n;$
$x+m, x-y+n;$

C_4: $y+m, x+n; x-y+m, \bar{y}+m;$
$\bar{x}+m, \bar{x}+y+m.$

Chacun des quatre ensembles admet $g=p3$ $(0,0,1,0,0,1)$ comme sous-groupe d'invariance; g_0 se confond avec lui.

II. Cas des familles spéciales

On sait qu'une position d'une famille spéciale S peut être interprétée comme étant le résultat du regroupement de plusieurs positions d'une famille générale en un point situé sur un ou plusieurs éléments de symétrie ponctuelle (axe de rotation, miroir, lorsqu'il s'agit de groupes d'espace bidimensionnels). Plusieurs possibilités de coloriage des positions spéciales apparaissent; selon le cas une position spéciale sera porteuse d'une ou plusieurs couleurs, la position sera dite monocolorée ou polycolorée.

1. *Chaque position spéciale est monocolorée*

Ceci résulte du fait que le regroupement des positions pour donner la famille spéciale S se fait à l'intérieur de chaque ensemble de positions générales ayant la même couleur. Le résultat est sensiblement identique au cas des familles générales: la famille spéciale obtenue se divise en quatre sous-ensembles égaux, chacun constitué de positions ayant l'une seule des quatre couleurs. Le sous-groupe $g_i(S)$ du sous-ensemble portant la couleur C_i est confondu avec g_i; de même le sous-groupe $g_0(S)$ laissant invariant, couleur par couleur, les quatre sous-ensembles est g_0.

Exemple 4. (Suite de l'exemple 1.) G–g = $p6mm$–$p6mm$ $(0,0,2,0,0,2)$. La famille spéciale d de G s'obtient à partir de la famille générale f en faisant $y=0$; il en résulte un regroupement, par deux positions à la fois de la même couleur, sur des miroirs de G; la famille spéciale d ainsi obtenue est colorée de la manière suivante:

C_1: $x+k, l; k, x+l; \bar{x}+k, \bar{x}+l;$
$\bar{x}+k, l; k, \bar{x}+l; x+k, x+l;$
avec $k=2m, l=2n$;

C_2: même écriture que C_1,
avec $k=2m+1, l=2n$;

C_3: même écriture, $k=2m, l=2n+1$;

C_4: même écriture, $k=2m+1, l=2n+1$.

$$g_1(d)=p6mm\ (0,0,2,0,0,2),$$
$$g_2(d)=p6mm\ (1,0,2,0,0,2),$$
$$g_3(d)=p6mm\ (0,1,2,0,0,2),$$
$$g_4(d)=p6mm\ (1,1,2,0,0,2),$$
$$g_0(d)=p2\ (0,0,2,0,0,2).$$

2. *Chaque position spéciale est bicolorée*

(*a*) *Cas simple.* Le regroupement de positions fait intervenir deux ensembles différents de positions générales ayant la même couleur: la famille spéciale S ainsi obtenue se divise alors en deux sous-ensembles égaux, l'un constitué de positions portant deux des quatre couleurs, l'autre portant les deux autres couleurs. Le sous-groupe d'invariance $g_{ij}(S)$ du sous-ensemble de positions portant les deux couleurs C_i et C_j est le sous-groupe engendré par la réunion de g_i, de g_j et des groupes ponctuels des points où ont lieu les regroupements C_iC_j. Le sous-groupe laissant invariant à la fois les deux sous-ensembles est le groupe intersection $g_0(S)$ de leurs sous-groupes d'invariance. Notons au passage que ce regroupement entre deux ensembles différents peut faire intervenir de plus un regroupement entre positions du même ensemble.

Exemple 5. (Suite de l'example 3.) G–g = $p6mm$–$p3$ $(0,0,1,0,0,1)$.

(i) La famille spéciale d de G s'obtient en faisant $y=0$ dans la famille générale f; le regroupement a lieu, par deux positions à la fois de couleurs différentes, sur des miroirs de G; le coloriage est le suivant:

C_1C_4: $x+m, n; m, x+n; \bar{x}+m, \bar{x}+n;$

C_2C_3: $\bar{x}+m, n; m, \bar{x}+n; x+m, x+n.$

Le groupe $g_{14}(d)$ est $p31m$ $(0,0,1,0,0,1)$; il en est de même pour $g_{23}(d)$ et $g_0(d)$.

(ii) La famille spéciale b de G est obtenue à partir de la famille générale f en faisant $x=\frac{1}{3}$, $y=\frac{2}{3}$; le regroupement qui en résulte se fait par six positions à la fois (trois positions d'une couleur, trois d'une autre) sur des axes ternaires (intersections de trois miroirs); on obtient le coloriage suivant:

C_1C_3: $\frac{1}{3}+m, \frac{2}{3}+n;$

C_2C_4: $\frac{2}{3}+m, \frac{1}{3}+n.$

$g_{13}(b)=g_{24}(b)=g_0(b)=p3m1\ (0,0,1,0,0,1)$.

(*b*) *Premier cas complexe.* Le regroupement de positions générales d'un ensemble donné de même couleur avec des positions générales d'un autre ensemble d'une même autre couleur fait intervenir, non pas toujours le même autre ensemble, mais alternativement deux des trois autres ensembles. On aboutit alors à une famille spéciale S formée de quatre sous-ensembles égaux portant chacun deux couleurs. Considérons le sous-ensemble portant les deux couleurs C_iC_j, son sous-groupe d'invariance $g_{ij}(S)$ est engendré par la réunion des sous-groupes suivants:

(i) le sous-groupe de g_i laissant invariant le sous-ensemble des positions générales de couleur C_i qui ont donné naissance au sous-ensemble portant les deux couleurs;

(ii) le sous-groupe analogue de g_j;

(iii) les groupes ponctuels des points sur lesquels se sont regroupées ces positions.

Exemple 6. (Suite de l'exemple 2.) G–g = $p4gm$–$p4$ $(0, 0, 1, 1, -1, 1)$. Partant de la famille générale d de $p4gm$, on obtient la famille c en faisant $y = x + \frac{1}{2}$ et les positions se regroupent par deux à la fois de couleurs différentes sur des miroirs; voici le coloriage obtenu:

$$\begin{array}{ll} C_1C_4: & x+m, x+\frac{1}{2}+m+2n; \\ & \bar{x}+m, \bar{x}-\frac{1}{2}+m+2n; \\ C_1C_3: & \bar{x}-\frac{1}{2}+m, x+m+2n; \\ & x+\frac{1}{2}+m, \bar{x}+m+2n; \\ C_2C_3: & x+m, x-\frac{1}{2}+m+2n; \\ & \bar{x}+m, \bar{x}+\frac{1}{2}+m+2n; \\ C_2C_4: & \bar{x}-\frac{1}{2}+m, x+m+2n+1; \\ & x+\frac{1}{2}+m, \bar{x}+m+2n+1. \end{array}$$

Le sous-groupe $g_{13}(c)$ a pour symbole $p2mg$ et son repère conventionnel est donné par $(0, 0, 1, 1, -1, 1)$; il en est de même pour $g_{24}(c)$. D'une façon analogue on a $g_{14}(c) = g_{23}(c) = p2mg$ $(0, 0, 1, -1, 1, 1)$. Enfin, on a $g_0(c) = p2$ $(0, 0, 1, 1, -1, 1)$.

(*c*) *Deuxième cas complexe.* Le regroupement de positions d'un ensemble donné de même couleur avec des positions d'un autre ensemble d'une autre même couleur fait intervenir successivement les trois autres ensembles. On obtient alors une famille spéciale S formée de six sous-ensembles égaux portant chacun deux couleurs. En ce qui concerne les sous-groupes d'invariance des six sous-ensembles obtenus, leurs propriétés sont analogues à celles du cas précédent.

Exemple 7. (Suite de l'exemple 1.) G–g = $p6mm$–$p6mm$ $(0, 0, 2, 0, 0, 2)$. La famille spéciale c de G est obtenue à partir de la famille générale f en faisant $x = \frac{1}{2}$ et $y = 0$; les positions générales se regroupent par quatre à la fois (deux d'une couleur, deux d'une autre) sur des axes binaires (intersections de deux miroirs); le coloriage est le suivant:

$$\begin{array}{ll} C_1C_2: & \frac{1}{2}+2m, 2n; \frac{1}{2}+2m+1, 2n; \\ C_1C_3: & 2m, \frac{1}{2}+2n; 2m, \frac{1}{2}+2n+1; \\ C_1C_4: & \frac{1}{2}+2m, \frac{1}{2}+2n; \\ & \frac{1}{2}+2m+1, \frac{1}{2}+2n+1; \\ C_2C_3: & \frac{1}{2}+2m, \frac{1}{2}+2n+1; \\ & \frac{1}{2}+2m+1, \frac{1}{2}+2n; \\ C_2C_4: & 2m+1, \frac{1}{2}+2n; \\ & 2m+1, \frac{1}{2}+2n+1; \\ C_3C_4: & \frac{1}{2}+2m, 2n+1; \\ & \frac{1}{2}+2m+1, 2n+1. \end{array}$$

Le groupe $g_{12}(c)$ a pour symbole $p2mm$ et son repère est défini par $(0, 0, 1, 0, 1, 2)$, il est confondu avec $g_{34}(c)$. D'une façon analogue, on a $g_{13}(c) = g_{24}(c) = p2mm$ $(0, 0, 0, 1, -2, -1)$ et $g_{14}(c) = g_{23}(c) = p2mm$ $(0, 0, 1, 1, -1, 1)$. Enfin, $g_0(c)$ est le groupe $p2$ $(0, 0, 2, 0, 0, 2)$.

3. *Chaque position est tricolorée*

Le regroupement de positions générales fait intervenir trois ensembles différents de positions de même couleur, la famille spéciale ainsi obtenue se divise alors en quatre sous-ensembles égaux portant chacun trois couleurs. Les propriétés de ce type de recouvrement sont par ailleurs tout à fait analogues aux cas rencontrés précédemment [§§2 (*b*), (*c*)], en ce qui concerne les sous-groupes d'invariance.

Exemple 8. (Suite de l'exemple 1.) G–g = $p6mm$–$p6mm$ $(0, 0, 2, 0, 0, 2)$. En faisant $x = \frac{1}{3}$ et $y = \frac{2}{3}$ dans la famille générale f de G, on aboutit à la famille spéciale b qui correspond au regroupement par six positions à la fois (deux positions d'une première couleur, deux positions d'une seconde couleur, deux positions d'une troisième) sur des axes ternaires (intersections de trois miroirs); la famille b est ainsi colorée:

$$\begin{array}{ll} C_1C_2C_3: & \frac{1}{3}+2m, \frac{2}{3}+2n+1; \frac{2}{3}+2m+1, \frac{1}{3}+2n; \\ C_1C_2C_4: & \frac{1}{3}+2m+1, \frac{2}{3}+2n+1; \frac{2}{3}+2m, \frac{1}{3}+2n; \\ C_1C_3C_4: & \frac{1}{3}+2m, \frac{2}{3}+2n; \frac{2}{3}+2m+1, \frac{1}{3}+2n+1; \\ C_2C_3C_4: & \frac{1}{3}+2m+1, \frac{2}{3}+2n; \frac{2}{3}+2m, \frac{1}{3}+2n+1. \end{array}$$

Le groupe $g_{123}(b)$ est confondu avec $g_4 = p6mm$ $(1, 1, 2, 0, 0, 2)$ (*cf.* exemple 1). De même $g_{124}(b) = g_3 = p6mm\,(0,1,2,0,0,2)$, $g_{134}(b) = g_2 = p6mm\,(1,0,2,0,0,2)$ et $g_{234}(b) = g_1 = p6mm$ $(0, 0, 2, 0, 0, 2)$; $g_0(b) = g_0 = p2$ $(0, 0, 2, 0, 0, 2)$.

4. *Chaque position est quadricolorée*

Le regroupement fait intervenir les quatre ensembles de positions de même couleur qui donnent donc un seul ensemble dont le sous-groupe d'invariance est G lui-même.

Exemple 9. (Suite de l'exemple 3.) G–g = $p6mm$–$p3$ $(0, 0, 1, 0, 0, 1)$. La famille c, obtenue en faisant $x = \frac{1}{2}$ et $y = 0$, correspond au regroupement de quatre positions à la fois, une de chaque couleur:

$$C_1C_2C_3C_4: \quad \tfrac{1}{2}+m, n; m, \tfrac{1}{2}+n, \tfrac{1}{2}+m, \tfrac{1}{2}+n.$$

Quant à la famille spéciale a (pour laquelle on fait $x = y = 0$), elle correspond au regroupement de 12 positions à la fois (trois de chacune des couleurs):

$$C_1C_2C_3C_4: \quad m, n.$$

Remarques finales

Les propriétés de coloriage des familles de positions équivalentes générales et spéciales, illustrées par les exemples présentés ci-dessus, ont été systématiquement étudiées pour les 184 classes de groupes quadricolorés équivalents dérivés des 17 groupes d'espace bidimensionnels.

Tous ces groupes colorés admettent évidemment des positions monocolorées, générales et éventuellement spéciales. Les groupes colorés dérivant des groupes $p1$ et pg n'admettent que des positions monocolorées, toujours générales. Des positions bicolorées existent dans des groupes colorés dérivant des groupes d'espace $p2$, pm, cm, $p2mm$, $p2mg$, $p2gg$, $c2mm$, $p4$, $p4mm$, $p4gm$, $p6$ et $p6mm$. Les positions tricolorées existent pour tous les groupes colorés dérivant des groupes $p3$, $p3m1$, $p31m$, $p6$, $p6mm$ et exclusivement pour ceux-ci. Les positions quadricolorés ne se rencontrent que dans des groupes colorés associés aux groupes $p2mm$, $c2mm$, $p4$, $p4mm$, $p4gm$ et $p6mm$.

Parmi les curiosités à noter, remarquons qu'il y a parfois plusieurs possibilités de coloriage non équivalentes pour une même famille spéciale d'un même groupe quadricoloré.

Exemple 10. Soit le groupe coloré $p4mm$–$p2mm$ $(0, 0, 2, 0, 0, 1)$. La famille générale g est ainsi colorée:

$$\begin{aligned}
C_1:&\quad x+2m, y+n;\ \bar{x}+2m, \bar{y}+n;\\
&\quad \bar{x}+2m, y+n;\ x+2m, \bar{y}+n;\\
C_2:&\quad x+2m+1, y+n;\ \bar{x}+2m+1, \bar{y}+n;\\
&\quad \bar{x}+2m+1, y+n;\ x+2m+1, \bar{y}+n;\\
C_3:&\quad \bar{y}+m, x+2n;\ y+m, \bar{x}+2n;\\
&\quad \bar{y}+m, \bar{x}+2n;\ y+m, x+2n;\\
C_4:&\quad \bar{y}+m, x+2n+1;\ y+m, \bar{x}+2n+1;\\
&\quad \bar{y}+m, \bar{x}+2n+1;\ y+m, x+2n+1.
\end{aligned}$$

$$g_1 = g_2 = p2mm\ (0, 0, 2, 0, 0, 1);$$

$$g_3 = g_4 = p2mm\ (0, 0, 1, 0, 0, 2);$$

$$g_0 = p2mm\ (0, 0, 2, 0, 0, 2).$$

Considérons maintenant la famille spéciale c obtenue par regroupement de quatre positions à la fois sur des axes binaires (intersections de deux miroirs). Il y a deux façons de le faire.

Première façon. Partant de la famille g, on fait $x=\frac{1}{2}$ et $y=0$, on aboutit à des positions bicolorées:

$$C_1C_2: \quad \tfrac{1}{2}+m, n;$$

$$C_3C_4: \quad m, \tfrac{1}{2}+n;$$

$$g_{12}(c) = g_{34}(c) = g_0(c) = p2mm\ (0, 0, 1, 0, 0, 1).$$

Deuxième façon. On fait $x=0$ et $y=\frac{1}{2}$, on obtient des positions monocolorées:

$$\begin{aligned}
C_1:&\quad 2m, \tfrac{1}{2}+n;\\
C_2:&\quad 2m+1, \tfrac{1}{2}+n;\\
C_3:&\quad \tfrac{1}{2}+m, 2n;\\
C_4:&\quad \tfrac{1}{2}+m, 2n+1.
\end{aligned}$$

$$g_1(c) = g_2(c) = p2mm\ (0, 0, 2, 0, 0, 1),$$

$$g_3(c) = g_4(c) = p2mm\ (0, 0, 1, 0, 0, 2),$$

$$g_0(c) = p2mm\ (0, 0, 2, 0, 0, 2).$$

Enfin, notons que Jarratt & Schwarzenberger (1980) considèrent aussi comme équivalents des groupes colorés G–g et G–g'' où g et g'' sont des sous-groupes non conjugués de G mais se correspondant par un automorphisme extérieur de G.* Nous n'acceptons pas cette définition plus large de l'équivalence car elle ne conduit pas forcément à des coloriages équivalents au niveau des familles de positions.

Exemple 11. Considérons le groupe $p4mm$ et ses sous-groupes $p2mm$, de repères conventionnels respectifs $(0, 0, 2, 0, 0, 1)$ et $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 2, 0, 0, 1)$, se correspondant uniquement par automorphisme extérieur de $p4mm$. Le coloriage de la famille spéciale a conduit, dans le cas de $p4mm$–$p2mm$ $(0, 0, 2, 0, 0, 1)$, à:

$$\begin{aligned}
C_1C_3:&\quad 2m, 2n;\\
C_1C_4:&\quad 2m, 2n+1;\\
C_2C_3:&\quad 2m+1, 2n;\\
C_2C_4:&\quad 2m+1, 2n+1.
\end{aligned}$$

$$g_{13}(a) = g_{24}(a) = p4mm\ (0, 0, 2, 0, 0, 2),$$

$$G_{14}(a) = g_{23}(a) = p4mm\ (1, 0, 2, 0, 0, 2),$$

$$g_0(a) = p2mm\ (0, 0, 2, 0, 0, 2).$$

Le coloriage de la famille spéciale a conduit, dans le cas de $p4mm$–$p2mm$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 2, 0, 0, 1)$, à:

$$C_1C_2C_3C_4: \quad m, n.$$

Pour conclure, signalons que les groupes d'espace bidimensionnels quadricolorés offrent des possibilités nombreuses et variées de coloriage des positions spéciales, comparées à celles présentées par les groupes d'espace bidimensionnels bicolorés et tricolorés.† Pour les groupes bicolorés, seules deux

* Selon Jarratt & Schwarzenberger (1980), il existe 96 classes de sous-groupes d'indice 4 des 17 groupes d'espace bidimensionnels, équivalents par automorphisme du groupe de départ.

† Les sous-groupes d'indice 2 des 17 groupes d'espace bidimensionnels sont au nombre de 74. Comme ils sont nécessairement invariants, ils correspondent à autant de groupes bicolorés au sens où nous l'avons défini [46 au sens de Jarratt & Schwarzenberger (1980)]. Les sous-groupes d'indice 3 sont eux au nombre de 82, répartis en 31 classes de conjugaison correspondant donc à 31 groupes tricolorés non équivalents [23 au sens de Jarratt & Schwarzenberger (1980)].

possibilités s'offrent aux familles spéciales. Ou bien, chaque position est monocolorée et la famille en question se divise en deux ensembles égaux portant l'un la couleur C_1, l'autre la couleur C_2 [exemple: famille *e* de $p2mm$–$p2mm$ $(0, 0, 2, 0, 0, 1)$]. Ou bien, toutes les positions de la famille spéciale portent les deux couleurs C_1C_2 [exemple: famille *h* de $p2mm$–$p2mm$ $(0, 0, 2, 0, 0, 1)$]. Quant aux groupes tricolorés, trois cas se présentent. Dans une famille de positions monocolorées, on rencontre trois ensembles égaux portant respectivement la couleur C_1, C_2 ou C_3 [exemple: famille *a* de $p6$–$p6$ $(0, 0, 2, 1, -1, 1)$]. Ou bien une famille de positions bicolorées se divise en trois ensembles portant respectivement les deux couleurs C_1C_2, C_1C_3 ou C_2C_3 [exemple: famille *c* de $p6$–$p6$ $(0, 0, 2, 1, -1, 1)$]. Ou encore les positions de la famille spéciale portent toutes les trois couleurs $C_1C_2C_3$ [exemple: famille *b* de $p6$–$p6$ $(0, 0, 2, 1, -1, 1)$].

Nous tenons à la disposition du lecteur intéressé les résultats de l'étude complète du coloriage des positions équivalentes générales et spéciales des 184 classes de groupes quadricolorés bidimensionnels.

Références

BELGUITH, J., BILLIET, Y. & WEIGEL, D. (1984). *Acta Cryst.* **A40**, 631-635.

International Tables for Crystallography. (1987). Tome A. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers.

JARRATT, J. D. & SCHWARZENBERGER, R. L. E. (1980). *Acta Cryst.* **A36**, 884-888.

REKIK, M. & BILLIET, Y. (1991). *Phase Transit.* **30**, 111-115.

SCHWARZENBERGER, R. L. E. (1980). *N-Dimensional Crystallography.* London: Pitman.

SCHWARZENBERGER, R. L. E. (1984). *London Math. Soc. Bull.* **16**, 209-240.

SENECHAL, M. (1975). *Z. Kristallogr.* **142**, 1-23.

SENECHAL, M. (1979). *Discret. Appl. Math.* **1**, 51-73.

SENECHAL, M. (1988). *Comput. Math. Appl.* **16**, 545-553.

Acta Cryst. (1993). **A49**, 159-161

Discrete Hilbert Transforms in Crystallography

BY A. F. MISHNEV

Institute of Organic Synthesis, Latvian Academy of Sciences, LV 1006 *Riga, Latvia*

(*Received* 30 *May* 1991; *accepted* 22 *June* 1992)

Abstract

Under the assumption that the structure amplitude of X-ray diffraction from a crystal satisfies the causal Fourier transform condition and appears to be a function with a band-limited spectrum, discrete Hilbert transforms (DHT) linking structure amplitudes having half-integral-valued Miller indices with structure amplitudes having integral-valued indices are obtained. DHT are then used to derive an interpolation formula that permits structure-amplitude reconstruction from samples with half the sampling frequency of the Nyquist rate. Some one-dimensional test calculations are also given.

Hilbert transforms (HT), or dispersion relations, are well known and widely used in optics (Loudon, 1973), in particle scattering (Hilgevoord, 1960), in electron optics (Misell, Burge & Greenaway, 1974; Saxton, 1974) and in other fields. Considerable theoretical work has been performed with the aim of extracting phase information directly from intensity data with the help of HT (Burge, Fiddy, Greenaway & Ross, 1974, 1976; Taylor, 1981). There have been only a few attempts to apply HT to solve phases in X-ray crystal structure analysis (Ramachandran, 1969; Kaufmann, 1985; Tang & Chang, 1990).

Ramachandran (1969) was the first to pay attention to the possibility of HT application in crystallography. He derived equations similar to HT by differentiating a structure-amplitude expression with respect to the reciprocal-lattice vector. However, the presence of unknown derivatives in Ramachandran's equations was an obstacle to their practical use. Kaufmann (1985) analysed the problem of extracting phase information from intensity measurements by means of HT for X-ray diffraction from crystals and pointed out the difficulties. Tang & Chang (1990) used HT for phase determination in the case of three-beam diffraction.

In this communication an attempt is made to obtain a new expression for DHT by direct discretization of the integral Hilbert transforms.

It is well known that, if a complex function of a real variable $f(x)$ has a Fourier transform $F(y)$ that vanishes for negative argument (causal Fourier transform), $f(x)$ satisfies the Hilbert transform (Toll, 1956; Wu & Ohmura, 1962)

$$f(x) = (1/\pi j) P \int_{-\infty}^{\infty} f(y)/(y-x)\, dy, \qquad (1)$$

0108-7673/93/010159-03\$06.00