

## Structures Cristallines de $\text{Pb}_4\text{In}_9\text{S}_{17}$ et $\text{Pb}_3\text{In}_{6,67}\text{S}_{13}$

PAR DARIA GINDEROW

Laboratoire de Minéralogie–Cristallographie de l'Université de Paris VI, 4 place Jussieu,  
75230 Paris CEDEX 05, France

(Reçu le 16 décembre 1977, accepté le 18 janvier 1978)

$\text{Pb}_4\text{In}_9\text{S}_{17}$  crystallizes in space group *Pbam*, with cell constants  $a = 22.761$ ,  $b = 15.201$ ,  $c = 3.858$  Å,  $Z = 2$ . The structure was solved by the heavy-atom method. Refinement was carried out by the full-matrix least-squares procedure with 2486 observed reflexions; the final  $R$  value is 6.8%.  $\text{Pb}_3\text{In}_{6,67}\text{S}_{13}$  crystallizes in space group *B2/m*, with cell constants  $a = 38.129$ ,  $b = 13.809$ ,  $c = 3.869$  Å,  $\gamma = 91.25^\circ$ ,  $Z = 4$ . The structure was solved by the direct method. Refinement was carried out by the full-matrix least-squares procedure with 3612 observed reflexions; the final  $R$  value is 7.9%. In these structures, all the atoms are on special positions  $x, y, 0$  and  $x, y, \frac{1}{2}$ .

### Introduction

Hahn & Kingler (1950) ont préparé un composé dont la formule serait  $\text{PbIn}_2\text{S}_4$ , ils en ont fait un diagramme de poudre et signalent le nombre important de raies, ceci suggère l'existence de grands paramètres cristallins comme pour  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$ ; ce dernier a été étudié par Lappe, Niggli, Nitsche & White (1962) et Donika, Radaustan, Kiosse, Semiletov, Donika & Mustya (1971). Il nous semblait intéressant de reprendre la synthèse de  $\text{PbIn}_2\text{S}_4$ , c'est ainsi qu'à défaut d'obtenir le composé de formule escomptée, nous avons trouvé des cristaux aux formules qui lui sont approchées soit:  $\text{Pb}_4\text{In}_9\text{S}_{17}$  et  $\text{Pb}_3\text{In}_{6,67}\text{S}_{13}$ , ils font l'objet de notre propos.

### Parties expérimentales

(1) *Préparation des échantillons.* Les cristaux sont obtenus par chauffage à haute température ( $900^\circ\text{C}$ ) d'un mélange de PbS et de  $\text{In}_2\text{S}_3$  pendant une durée de 12 h dans un tube de verre de silice scellé sous vide.

(2) *Groupes spatiaux.* Les groupes spatiaux et les dimensions de la maille ont été déterminés par enregistrement au moyen d'une chambre de Weissenberg. Les valeurs des paramètres des mailles et les intensités des réflexions ont été mesurées sur un diffractomètre à quatre cercles, en utilisant la radiation Mo  $K\alpha$  sélectionnée par un monochromateur de graphite pour les angles  $\theta$  inférieurs à  $37^\circ$ .

#### (a) $\text{Pb}_4\text{In}_9\text{S}_{17}$

Sur 3246 réflexions indépendantes, 2486 réflexions ont été retenues. Nous avons retiré les réflexions ayant  $F_o$  inférieur à 24,88 et 13 réflexions mesurées à des angles  $\theta$  inférieurs à  $4,89^\circ$ .

Les intensités diffractées ont été corrigées des facteurs de Lorentz et de polarisation. Malgré un coefficient d'absorption linéaire assez élevé ( $336\text{ cm}^{-1}$  pour la radiation utilisée), aucune correction d'absorption n'a été faite, le cristal étant de très petites dimensions ( $0,4 \times 0,02 \times 0,02$  mm).

Les données cristallographiques sont les suivantes: cristal de formule  $\text{Pb}_4\text{In}_9\text{S}_{17}$ , appartenant au système orthorhombique, ayant un ensemble d'extinctions systématiques compatible avec le groupe spatial *Pbam*. La masse est de 2407 g, la densité mesurée par pesée est de  $6,0$  (2)  $\text{g cm}^{-3}$ . Les paramètres de la maille étant:  $a = 22,761$  (9),  $b = 15,201$  (6),  $c = 3,858$  (2) Å; le volume calculé est  $V = 1335$  (1) Å<sup>3</sup>, ce qui donne  $2,00 \pm 0,13$  unités formulaires par maille. La densité calculée est  $d_c = 6,0\text{ g cm}^{-3}$ .

#### (b) $\text{Pb}_3\text{In}_{6,67}\text{S}_{13}$

Sur 5552 réflexions indépendantes, 3612 réflexions ont été retenues, elles correspondent aux réflexions avec  $F_o$  supérieur à 30,46.

Les intensités diffractées ont été corrigées des facteurs de Lorentz et de polarisation ainsi que de l'absorption; le coefficient d'absorption linéaire étant de  $331\text{ cm}^{-1}$  pour la radiation utilisée et les dimensions du cristal de  $0,4 \times 0,14 \times 0,06$  mm. La correction d'absorption a été faite par la méthode analytique de de Meulenaer & Tompa (1965).

Les données cristallographiques sont les suivantes: cristal de formule  $\text{Pb}_3\text{In}_{6,67}\text{S}_{13}$ , appartenant au système monoclinique et au groupe spatial *B2/m*. La masse est de 1804 g, la densité mesurée par pesée est de  $6,0$  (2)  $\text{g cm}^{-3}$ . Les paramètres de la maille étant:  $a = 38,129$  (15),  $b = 13,809$  (5),  $c = 3,869$  (2) Å,  $\gamma = 91,25^\circ$  (2); le volume calculé est  $V = 2037$  (3) Å<sup>3</sup>, ce qui donne  $4,00 \pm 0,13$  unités formulaires par maille. La densité calculée est  $d_c = 5,9\text{ g cm}^{-3}$ .

### Détermination des structures

Pour les deux structures, les études de la répartition du pouvoir diffusant (méthode *MULTAN*) confirment assez nettement l'existence d'un centre de symétrie.

Les atomes sont en position  $x, y, \frac{1}{2}$ . L'affinement des coordonnées atomiques et des coefficients de température a été réalisé par la méthode des moindres carrés (matrice complète).

Les facteurs de diffusion atomique introduits dans le calcul sont ceux de Doyle & Turner (1968), en tenant compte de la contribution de la diffusion anormale afférente au rayonnement utilisé.

Les coordonnées atomiques sont rassemblées dans le Tableau 1.\*

#### (1) $Pb_4In_9S_{17}$

La structure a été résolue en utilisant la technique de la méthode de l'atome lourd. La fonction de Patterson tridimensionnelle a permis de localiser les atomes de plomb et d'indium. Les positions des autres atomes ont été déterminées par des synthèses de Fourier successives avec les réflexions  $hk0$ , soit 456 réflexions observées. Pour tous les atomes avec des facteurs d'agitation thermique isotrope, le facteur  $R$  est égal à 0,11 ( $R = \sum \Delta |F_{oc}| / \sum |F_o|$ ). L'affinement de la structure a été poursuivi avec des facteurs d'agitation thermique anisotrope et la valeur finale du facteur  $R$  est devenue égale à 0,068 pour les 2486 réflexions retenues (0,115 pour les 3246 réflexions indépendantes).

Nous remarquons que les atomes Pb(1) et S(9), liés entre-eux et avec S(9) placé sur un axe binaire (Fig. 5), ont des facteurs d'agitation thermique très voisins et plus élevés que l'ensemble des autres atomes de soufre, soit 3,01 et 2,98 Å<sup>2</sup>, quand la moyenne pour les atomes de soufre est de 0,91 Å<sup>2</sup>.

#### (2) $Pb_3In_{6,67}S_{13}$

La structure a pu être résolue par la méthode directe (*MULTAN*) à condition de choisir le groupe spatial  $Bm$  pour les calculs, bien que le groupe spatial réel soit  $B2/m$ , car tous les atomes sont en position spéciale. L'affinement par moindres carrés a été conduit à partir de  $Pb_3In_6S_{13}$ , mais nous avons des facteurs d'agitation thermique isotrope soit anormalement élevés (6,07 Å<sup>2</sup>) pour Pb(1), soit très bas (0,80 Å<sup>2</sup>) pour le site I (Fig. 2); par ailleurs, la valeur du facteur  $R$  ne s'abaisse pas au-dessous de 0,096 pour les 3612 réflexions retenues.

\* Les listes des facteurs de structure et des facteurs d'agitation thermique ont été déposées au dépôt d'archives de la British Library Lending Division (Supplementary Publication No. SUP 33361: 155 pp.). Des copies peuvent être obtenues en s'adressant à: The Executive Secretary, International Union of Crystallography, 13 White Friars, Chester CH1 1NZ, Angleterre.

Pour vérifier le taux d'occupation des sites, nous avons affiné les coefficients d'occupation de tous les sites conjointement avec les coefficients d'agitation thermique anisotrope et nous avons obtenu pour ces coefficients d'occupation des valeurs qui oscillaient entre 0,98 et 1,02 sauf pour Pb(1) et le site I où nous avons respectivement 0,667 et 1,205. Nous en déduisons les deux cas suivants. (i) Cas du site Pb(1): ce site est occupé au  $\frac{2}{3}$ , un atome de plomb occupe ce site deux fois sur trois. (ii) Cas du site I: il doit être considéré comme un site mixte ou l'atome de plomb remplacerait l'atome d'indium dans une certaine proportion. La valeur 1,205 a été calculée à partir des facteurs de diffusion atomique corrigés de la diffusion anormale de l'atome d'indium, soit 48,3 e pour la valeur réelle; ainsi, le

Tableau 1. Coordonnées atomiques normalisées ( $\times 10^4$ ) avec écarts types entre parenthèses

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
<b><math>Pb_4In_9S_{17}</math></b>			
Pb(1)	618 (0)	2006 (1)	0 (0)
Pb(2)	2175 (0)	871 (1)	0 (0)
In(1)	0 (0)	5000 (0)	5000 (0)
In(2)	1348 (1)	4313 (1)	0 (0)
In(3)	2582 (1)	3294 (1)	5000 (0)
In(4)	3890 (1)	2291 (1)	0 (0)
In(5)	4198 (1)	4484 (1)	5000 (0)
S(1)	694 (2)	3689 (3)	5000 (0)
S(2)	3399 (2)	3974 (3)	0 (0)
S(3)	2086 (2)	4770 (3)	5000 (0)
S(4)	4331 (2)	686 (3)	0 (0)
S(5)	4570 (2)	2925 (3)	5000 (0)
S(6)	3171 (2)	1908 (3)	5000 (0)
S(7)	1253 (2)	980 (3)	5000 (0)
S(8)	1915 (2)	2779 (3)	0 (0)
S(9)	0 (0)	0 (0)	0 (0)
<b><math>Pb_3In_{6,67}S_{13}</math></b>			
Pb(1)	3486 (1)	2228 (2)	0 (0)
Pb(2)	664 (0)	2763 (1)	5000 (0)
Pb(3)	1703 (0)	3435 (1)	5000 (0)
I	2529 (0)	1267 (1)	5000 (0)
In(1)	0 (0)	0 (0)	0 (0)
In(2)	4138 (0)	-35 (2)	0 (0)
In(3)	1656 (1)	655 (2)	0 (0)
In(4)	4581 (0)	2922 (2)	0 (0)
In(5)	2815 (1)	4122 (2)	0 (0)
In(6)	3939 (1)	4640 (2)	5000 (0)
In(7)	0 (0)	5000 (0)	0 (0)
S(1)	4682 (2)	1035 (5)	0 (0)
S(2)	3757 (2)	743 (6)	5000 (0)
S(3)	2918 (4)	374 (10)	0 (0)
S(4)	542 (2)	1035 (6)	0 (0)
S(5)	1319 (2)	1457 (6)	5000 (0)
S(6)	2120 (2)	1924 (6)	0 (0)
S(7)	2908 (2)	2868 (6)	5000 (0)
S(8)	3511 (2)	4465 (6)	0 (0)
S(9)	4127 (2)	2896 (6)	5000 (0)
S(10)	4505 (2)	4900 (6)	0 (0)
S(11)	45 (2)	3182 (6)	0 (0)
S(12)	1129 (2)	3561 (6)	0 (0)
S(13)	2164 (2)	4512 (6)	0 (0)

calcul nous donne 58,2 e au niveau du site. Si  $k$  est le coefficient d'occupation du site pour l'atome d'indium:  $k \times 48,3 + (1 - k) \times 78,2 = 58,2$  et  $k = 0,67$ . Ce site est donc occupé aux  $\frac{2}{3}$  In et au  $\frac{1}{3}$  par Pb.

Nous avons attribué au site I, un tableau de facteur de diffusion atomique calculé par rapport aux proportions trouvées; ensuite, nous avons réalisé un dernier affinement du coefficient d'occupation du site I et nous avons obtenu la valeur de 0,974, ce qui confirme cette hypothèse.

Ainsi la formule devient  $Pb_3In_{6,67}S_{13}$ . Au dernier cycle d'affinement avec des facteurs d'agitation thermique anisotrope, le facteur  $R$  est égal à 0,079 pour les 3612 réflexions retenues (0,112 pour les 5552 réflexions indépendantes). Les facteurs de température isotropes deviennent alors  $3,9 \text{ \AA}^2$  pour Pb(1) et  $1,5 \text{ \AA}^2$  pour le site I.

Nous remarquons que l'atome S(3), qui est commun à cinq sites mixtes I et un site lacunaire Pb(1) (Fig. 2), présente une valeur d'agitation thermique élevée de  $3,9 \text{ \AA}^2$ , alors que la moyenne pour l'ensemble des atomes de soufre est de  $1,16 \text{ \AA}^2$ . Il est possible que cette agitation thermique traduise simplement le fait que la position de S(3) calculée par l'affinement ne soit qu'une position fictive résultante de plusieurs positions réelles très voisines occupées successivement par cet atome de soufre en rapport avec l'occupation des sites Pb(1) et I.

Nous avons calculé les volumes des cavités renfermant les atomes lourds (Tableau 2). La valeur de la cavité octaédrique dans la galène est de  $26,5 \text{ \AA}^3$ . Pour la structure  $Pb_4In_9S_{17}$ , en accord avec l'affinement des coefficients d'occupation de tous les sites, nous pouvons déduire qu'ils sont entièrement occupés. La valeur plus élevée pour In(5)–S ( $25,52 \text{ \AA}^3$ ) correspondrait à une agitation thermique isotrope également plus élevée par rapport aux autres atomes d'indium. Dans le cas de  $Pb_3In_{6,67}S_{13}$ , les sites Pb(2) et Pb(3) entièrement occupés, ont bien un volume de  $24,65 \text{ \AA}^3$  inférieur à celui du site Pb(1) de  $26,41 \text{ \AA}^3$  dont le coefficient d'occupation a été calculé égal à  $\frac{2}{3}$ . Quant au site I, le seul à avoir été calculé mixte, il a un volume de grandeur suffisante ( $26,31 \text{ \AA}^3$ ) pour contenir du plomb.

### Description et discussion des structures

Les Figs. 1 et 2 représentent les projections suivant l'axe  $c$  des structures  $Pb_4In_9S_{17}$  et  $Pb_3In_{6,67}S_{13}$ ; les Figs. 3 et 4 donnent leur vue stéréoscopique.

#### Environnement des atomes de plomb

Les atomes de plomb sont entourés d'atomes de soufre placés aux sommets d'un prisme trigonal pyramidé sur deux faces latérales, ils sont donc octocoordonnés, sauf dans le cas du site I (Fig. 6) où l'atome est hexacoordonné.

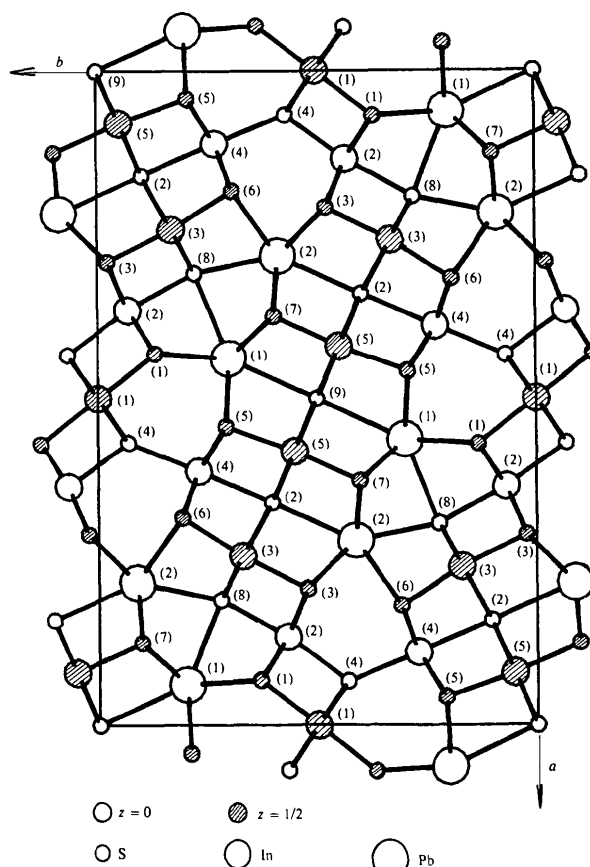


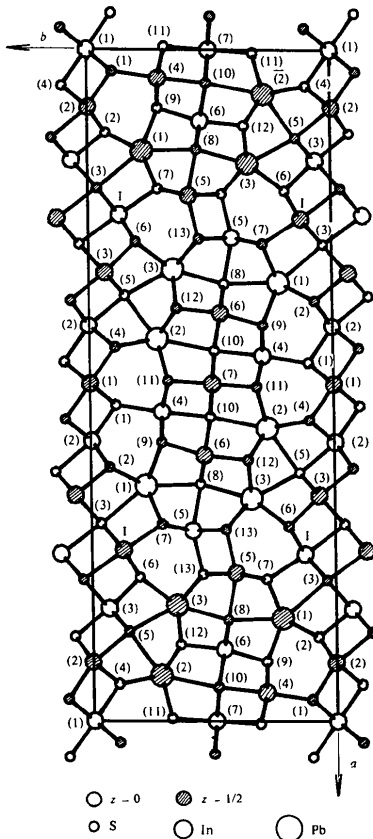
Fig. 1. Maille cristalline de  $Pb_4In_9S_{17}$ .

Tableau 2. Valeurs des volumes ( $\text{\AA}^3$ ) des cavités octaédriques et des cavités prismatiques triangulaires

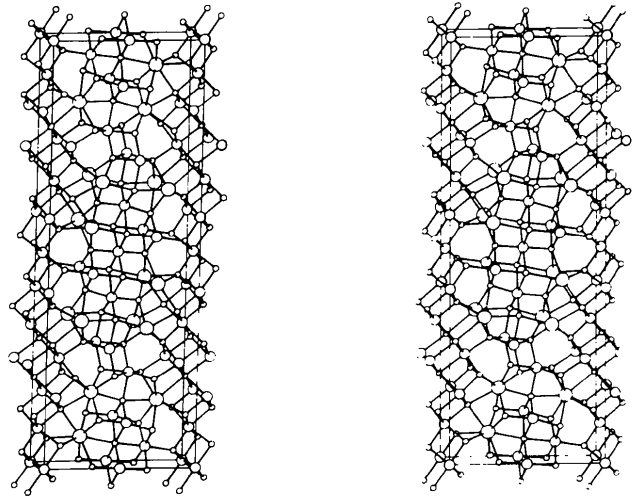
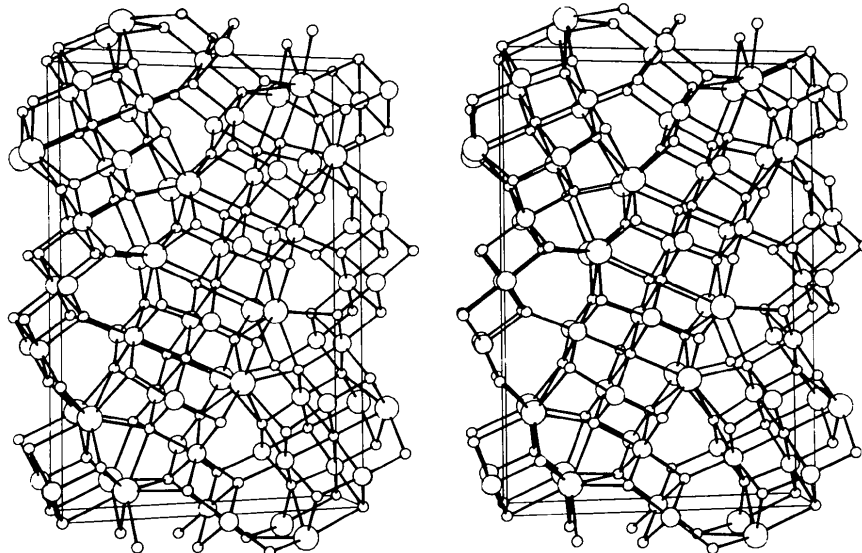
	$Pb_4In_9S_{17}$	$Pb_3In_{6,67}S_{13}$
I–S		26,31
In(1)–S	24,09	24,17
In(2)–S	24,00	23,95
In(3)–S	24,67	24,77
In(4)–S	24,69	24,42
In(5)–S	25,52	23,94
In(6)–S		24,67
In(7)–S		24,56
Pb(1)–S	25,66	26,41
Pb(2)–S	25,52	24,65
Pb(3)–S		24,64

#### (1) $Pb_4In_9S_{17}$

Les prismes sont groupés par quatre en partageant soit un sommet par l'atome S(9), soit une face par trois atomes S(7), S(7), S(8). De plus, chaque prisme partage une face avec un tétraèdre d'atomes de soufre ne comportant pas de cation à l'intérieur. Les deux tétraèdres sont constitués par les atomes suivant: S(1), S(5), S(4), S(4) et S(6), S(3), S(4), S(4) (Fig. 5). Tous les atomes de plomb sont au même niveau  $z = 0$ .

Fig. 2. Maillage cristalline de  $\text{Pb}_3\text{In}_{6,67}\text{S}_{13}$ .(2)  $\text{Pb}_3\text{In}_{6,67}\text{S}_{13}$ 

Les prismes sont groupés par trois, en partageant soit un sommet par l'atome S(8), soit une face par les atomes S(5), S(12), S(12) (Fig. 6). Les sites Pb(2) et Pb(3) sont occupés à 100%; par contre, le site Pb(1) est occupé au  $\frac{2}{3}$  par un atome de plomb et partagé au  $\frac{1}{3}$  par un atome de plomb et un atome S(3) avec le site I, octaédrique, qui lui-même est occupé au  $\frac{1}{3}$  par un atome de plomb. Nous pouvons supposer que lorsque le site Pb(1) est vide, le site I a un atome de plomb et lorsqu'il y a un atome de plomb en Pb(1), il y a un atome d'indium dans le site I. Ainsi, il y aurait un nombre constant d'atomes de plomb dans chaque maille.

Fig. 4. Maillage cristalline de  $\text{Pb}_3\text{In}_{6,67}\text{S}_{13}$ , représentation stéréoscopique vue suivant  $c$ ,  $b$  étant l'axe horizontal et  $a$  l'axe vertical.Fig. 3. Maillage cristalline de  $\text{Pb}_4\text{In}_9\text{S}_{17}$ , représentation stéréoscopique vue suivant  $c$ ,  $b$  étant l'axe horizontal et  $a$  l'axe vertical.

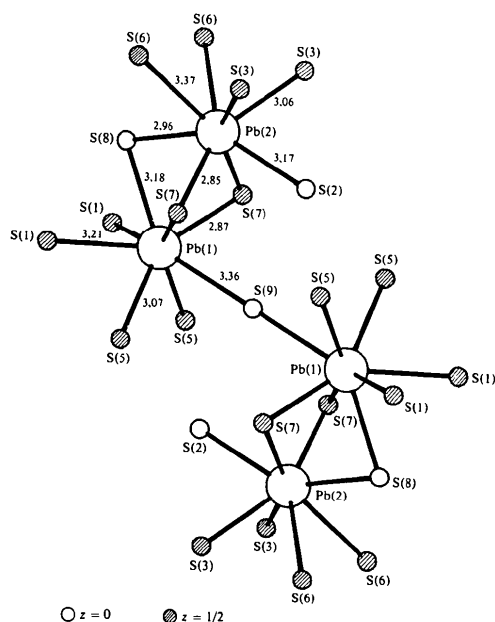


Fig. 5. Représentation de l'environnement des atomes de plomb de  $Pb_4In_9S_{17}$  avec les distances exprimées en Å.

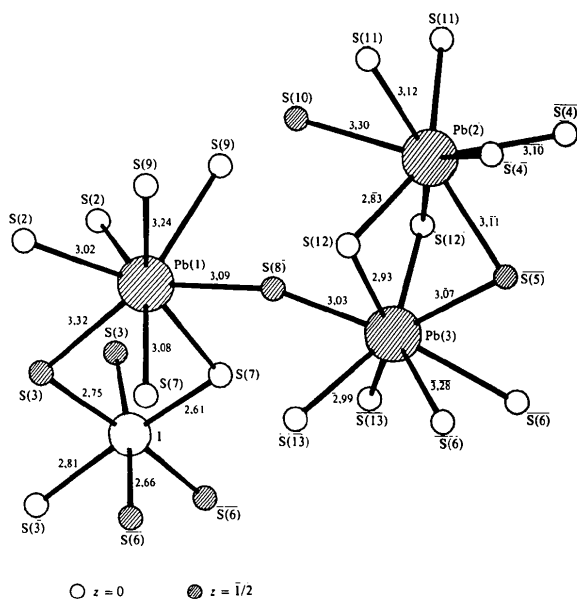


Fig. 6. Représentation de l'environnement des atomes de plomb de  $Pb_3In_{6,67}S_{13}$  avec les distances exprimées en Å.

Comme dans  $Pb_4In_9S_{17}$ , les prismes autour des atomes Pb(2) et Pb(3) partagent chacun une face avec un tétraèdre d'atomes de soufre vide. Ces tétraèdres sont constitués par les atomes suivant: S(11), S(4), S(1), S(1) et S(6), S(13), S(7), S(7). Les deux atomes S(7) sont liés au site Pb(1), celui-ci partage une face commune avec un autre tétraèdre d'atomes de soufre vide S(2), S(9), S(1), S(1). Les atomes de plomb sont soit au niveau  $z = 0$ , soit à  $z = \frac{1}{2}$ .

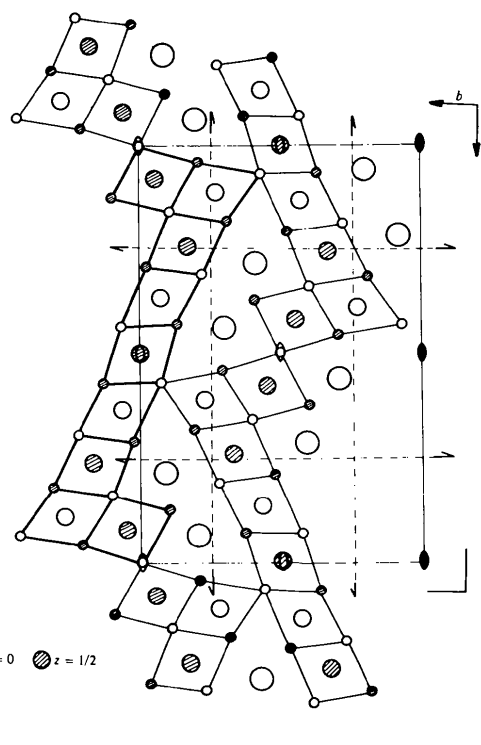


Fig. 7. Motif structural de  $Pb_4In_9S_{17}$ , représenté en trait renforcé.

Le Tableau 3 donne les valeurs des distances et des angles de liaisons Pb-S dans le cas des atomes de plomb octocoordonnés. Les distances des atomes de plomb aux atomes de soufre voisins varient de 2,83 à 3,37 Å. Ces distances sont comparables aux valeurs extrêmes de 2,95 et 3,39 Å trouvées pour les liaisons Pb-S dans un sulfure de plomb et d'arsenic naturel, la baumhauerite (Le Bihan, 1962) ainsi que 2,91 et 3,32 Å pour un autre sulfure de plomb et d'antimoine naturel, la zinckénite (Lebas & Le Bihan, 1976), les distances dans la galène étant de 2,97 Å.

#### Environnement des atomes d'indium

Tous les atomes d'indium sont entourés par six atomes de soufre constituant un environnement octaédrique. Ces octaèdres, certains très déformés [In(2), In(5) dans  $Pb_3In_{6,67}S_{13}$ ] mettent en commun soit une, soit deux arêtes ou un sommet pour former deux chaînes plissées d'octaèdres de soufre (Figs. 7 et 8).

Les valeurs des distances et des angles liés aux atomes d'indium sont mentionnées dans le Tableau 4. Les distances In-S varient de 2,46 à 2,92 Å dans la présente étude; pour  $In_2S_3\beta$  et  $ZnIn_2S_4$ , ces distances sont en moyenne de 2,61 Å (Steigmann, Sutherland & Goodyear, 1965; Donika *et al.*, 1971).

Une liaison In-S de type covalent serait théoriquement la somme des rayons covalent, soit 2,48 Å (1,44 + 1,04 Å); tandis qu'une liaison ionique aurait pour

Tableau 3. Valeurs des distances interatomiques (Å) et des angles (°) liés aux atomes de plomb avec leurs déviations standard et les transformations de coordonnées quand elles ont lieu

<b>Pb<sub>3</sub>In<sub>9</sub>S<sub>17</sub></b>							
Pb(1)—S(1)*	3,209 (4)	S(1)—Pb(1)—S(5 <sup>ii</sup> )	68,7 (1)	Pb(2)—S(2)	3,165 (5)	S(2)—Pb(2)—S(3)	74,3 (1)
Pb(1)—S(5)*	3,068 (4)	S(1)—Pb(1)—S(5 <sup>iii</sup> )	113,1 (1)	Pb(2)—S(3)*	3,058 (3)	S(2)—Pb(2)—S(6 <sup>i</sup> )	69,4 (1)
Pb(1)—S(7)*	2,871 (4)	S(1)—Pb(1)—S(7 <sup>i</sup> )	90,1 (1)	Pb(2)—S(6)*	3,368 (4)	S(2)—Pb(2)—S(6)	134,8 (1)
Pb(1)—S(8)	3,179 (5)	S(1)—Pb(1)—S(7)	144,1 (1)	Pb(2)—S(8)	2,960 (5)	S(2)—Pb(2)—S(8)	144,1 (1)
Pb(1)—S(9)	3,357 (1)	S(1)—Pb(1)—S(8)	69,83 (9)	Pb(2)—S(7)*	2,854 (4)	S(2)—Pb(2)—S(7)	75,5 (1)
S(1)—S(5 <sup>ii</sup> )	3,543 (6)	S(1)—Pb(1)—S(9)	138,29 (7)	S(2)—S(3)	3,757 (6)	S(3 <sup>iv</sup> )—Pb(2)—S(6)	61,62 (9)
S(1)—S(5 <sup>iii</sup> )	5,238 (9)	S(1)—Pb(1)—S(1 <sup>i</sup> )	73,91 (9)	S(2)—S(6 <sup>i</sup> )	3,722 (6)	S(3 <sup>v</sup> )—Pb(2)—S(6)	104,32 (9)
S(1)—S(7 <sup>i</sup> )	4,310 (9)	S(5 <sup>ii</sup> )—Pb(1)—S(7)	89,3 (1)	S(2)—S(6)	6,031 (6)	S(3)—Pb(2)—S(8)	130,2 (1)
S(1)—S(7)	5,784 (9)	S(5 <sup>iii</sup> )—Pb(1)—S(7)	146,4 (1)	S(2)—S(8)	5,827 (6)	S(3)—Pb(2)—S(7)	90,6 (1)
S(1)—S(8)	3,656 (5)	S(5)—Pb(1)—S(8)	135,2 (1)	S(2)—S(7)	3,693 (6)	S(3 <sup>iv</sup> )—Pb(2)—S(3 <sup>v</sup> )	78,23 (9)
S(1)—S(9)	6,136 (9)	S(5)—Pb(1)—S(9)	72,89 (8)	S(3 <sup>iv</sup> )—S(6)	3,302 (6)	S(6)—Pb(2)—S(8)	71,1 (1)
S(5 <sup>ii</sup> )—S(7)	4,177 (9)	S(5 <sup>ii</sup> )—Pb(1)—S(5 <sup>iii</sup> )	77,9 (1)	S(3 <sup>v</sup> )—S(6)	5,078 (6)	S(6)—Pb(2)—S(7 <sup>i</sup> )	94,6 (1)
S(5 <sup>iii</sup> )—S(7)	5,686 (9)	S(7)—Pb(1)—S(8)	74,5 (1)	S(3)—S(8)	3,610 (5)	S(6)—Pb(2)—S(7)	148,7 (1)
S(5)—S(8)	5,775 (9)	S(7)—Pb(1)—S(9)	73,62 (9)	S(3)—S(7)	4,203 (6)	S(6)—Pb(2)—S(6 <sup>i</sup> )	69,88 (9)
S(5)—S(9)	3,825 (4)	S(7)—Pb(1)—S(7 <sup>i</sup> )	84,4 (1)	S(6)—S(8)	3,693 (6)	S(8)—Pb(2)—S(7)	78,3 (1)
S(7)—S(8)	3,670 (6)	S(8)—Pb(1)—S(9)	136,47 (8)	S(6)—S(7)	4,586 (6)	S(7)—Pb(2)—S(7 <sup>i</sup> )	85,0 (1)
S(7)—S(9)	3,752 (5)			S(6)—S(7)	5,993 (6)		
S(8)—S(9)	6,070 (9)			S(8)—S(7)	3,670 (6)		
<b>Pb<sub>3</sub>In<sub>6,67</sub>S<sub>13</sub></b>							
Pb(1)—S(2)*	3,018 (6)	S(2)—Pb(1)—S(3)	72,9 (2)	Pb(2)—S(4)*	3,099 (6)	S(4)—Pb(2)—S(5)	70,3 (2)
Pb(1)—S(7)*	3,078 (7)	S(2)—Pb(1)—S(7 <sup>i</sup> )	92,9 (2)	Pb(2)—S(5)	3,114 (8)	S(4)—Pb(2)—S(11 <sup>i</sup> )	69,8 (2)
Pb(1)—S(9)*	3,235 (6)	S(2)—Pb(1)—S(7)	148,9 (2)	Pb(2)—S(11)*	3,116 (6)	S(4)—Pb(2)—S(11)	115,4 (2)
Pb(1)—S(3)	3,32 (1)	S(2)—Pb(1)—S(8)	132,6 (2)	Pb(2)—S(12)*	2,831 (6)	S(4)—Pb(2)—S(12 <sup>i</sup> )	87,4 (2)
Pb(1)—S(8)	3,088 (9)	S(2)—Pb(1)—S(9)	62,8 (2)	Pb(2)—S(10)	3,304 (8)	S(4)—Pb(2)—S(12)	143,9 (2)
S(2)—S(3)	3,76 (1)	S(2)—Pb(1)—S(9 <sup>i</sup> )	108,0 (2)	S(4)—S(5)	3,576 (8)	S(4)—Pb(2)—S(10)	136,3 (2)
S(2)—S(7 <sup>i</sup> )	4,41 (1)	S(2)—Pb(1)—S(2 <sup>i</sup> )	79,7 (2)	S(4)—S(11 <sup>i</sup> )	3,562 (8)	S(4)—Pb(2)—S(4 <sup>i</sup> )	77,3 (2)
S(2)—S(7)	5,87 (1)	S(3)—Pb(1)—S(7)	76,2 (2)	S(4)—S(12 <sup>i</sup> )	5,259 (9)	S(5)—Pb(2)—S(11)	136,8 (1)
S(2)—S(8)	5,58 (1)	S(3)—Pb(1)—S(8)	141,0 (2)	S(4)—S(12 <sup>i</sup> )	4,113 (8)	S(5)—Pb(2)—S(12)	73,8 (2)
S(2)—S(9)	3,26 (1)	S(3)—Pb(1)—S(9)	134,2 (2)	S(4)—S(12)	5,647 (9)	S(5)—Pb(2)—S(10)	137,9 (2)
S(2)—S(9 <sup>i</sup> )	5,06 (1)	S(7)—Pb(1)—S(8)	73,7 (2)	S(4)—S(10)	5,953 (9)	S(11)—Pb(2)—S(12 <sup>i</sup> )	88,5 (2)
S(3)—S(7)	3,94 (1)	S(7)—Pb(1)—S(9)	94,8 (2)	S(5)—S(11)	5,791 (9)	S(11)—Pb(2)—S(12)	145,3 (2)
S(3)—S(8)	6,03 (1)	S(7)—Pb(1)—S(9)	146,7 (2)	S(5)—S(12)	3,579 (9)	S(11)—Pb(2)—S(10)	69,7 (2)
S(3)—S(9)	6,03 (1)	S(7)—Pb(1)—S(7)	77,9 (2)	S(5)—S(10)	5,991 (9)	S(11)—Pb(2)—S(11 <sup>i</sup> )	76,8 (2)
S(7)—S(8)	3,70 (1)	S(8)—Pb(1)—S(9)	73,0 (2)	S(11)—S(12 <sup>i</sup> )	4,161 (9)	S(12)—Pb(2)—S(10)	75,7 (2)
S(7)—S(9 <sup>i</sup> )	4,64 (1)	S(9)—Pb(1)—S(9 <sup>i</sup> )	73,5 (1)	S(11)—S(12)	5,682 (9)	S(12)—Pb(2)—S(12 <sup>i</sup> )	86,2 (2)
S(7)—S(9)	6,05 (1)			S(11)—S(10)	3,675 (9)		
S(8)—S(9)	3,765 (9)			S(12)—S(10)	3,785 (9)		
Pb(3)—S(5)	3,070 (8)	S(5)—Pb(3)—S(6)	70,3 (2)	S(6)—S(12 <sup>i</sup> )	4,443 (8)	S(6)—Pb(3)—S(8)	138,9 (2)
Pb(3)—S(6)*	3,282 (7)	S(5)—Pb(3)—S(12)	73,2 (2)	S(6)—S(12)	5,892 (8)	S(6)—Pb(3)—S(6 <sup>i</sup> )	72,2 (2)
Pb(3)—S(12)*	2,929 (6)	S(5)—Pb(3)—S(13)	135,0 (2)	S(6)—S(13 <sup>i</sup> )	3,574 (8)	S(12)—Pb(3)—S(13 <sup>i</sup> )	88,6 (2)
Pb(3)—S(13)*	2,989 (6)	S(5)—Pb(3)—S(8)	136,0 (2)	S(6)—S(13)	5,267 (8)	S(12)—Pb(3)—S(13)	146,1 (2)
Pb(3)—S(8)	3,029 (9)	S(6)—Pb(3)—S(12 <sup>i</sup> )	91,2 (2)	S(6)—S(8)	5,909 (8)	S(12)—Pb(3)—S(8)	74,1 (2)
S(5)—S(6)	3,659 (9)	S(6)—Pb(3)—S(12)	143,2 (2)	S(12)—S(13 <sup>i</sup> )	4,132 (9)	S(12)—Pb(3)—S(12 <sup>i</sup> )	82,7 (2)
S(5)—S(12)	3,579 (8)	S(6)—Pb(3)—S(13 <sup>i</sup> )	69,3 (2)	S(12)—S(13)	5,661 (9)	S(13)—Pb(3)—S(8)	72,1 (2)
S(5)—S(13)	5,602 (8)	S(6)—Pb(3)—S(13)	114,2 (2)	S(12)—S(8)	3,59 (1)	S(13)—Pb(3)—S(13 <sup>i</sup> )	80,7 (2)
S(5)—S(8)	5,658 (8)			S(13)—S(8)	3,539 (9)		

## Transformations des coordonnées

(i)	$x,$	$y,$	$-z$	(vi)	$\frac{1}{2} - x,$	$-y,$	$\frac{1}{2} + z$
(ii)	$\frac{1}{2} + x,$	$\frac{1}{2} - y,$	$z$	(vii)	$\frac{1}{2} - x,$	$-y,$	$\frac{1}{2} - z$
(iii)	$\frac{1}{2} + x,$	$\frac{1}{2} - y,$	$-z$	(ix)	$\frac{1}{2} + x,$	$y,$	$\frac{1}{2} + z$
(iv)	$\frac{1}{2} - x,$	$\frac{1}{2} + y,$	$z$	(x)	$\frac{1}{2} + x,$	$y,$	$\frac{1}{2} - z$
(v)	$\frac{1}{2} - x,$	$\frac{1}{2} + y,$	$-z$				

\* Signifie qu'il y a deux liaisons identiques.

longueur 2,65 Å (0,81 + 1,84 Å) (Pauling, 1945). On observe un type de liaison intermédiaire covalent et ionique, le caractère de l'un ou l'autre étant fonction de la distance interatomique de la liaison.

## Comparaison des deux structures

Nous pouvons distinguer les particularités communes aux deux structures de celles qui les différencient.

## Caractères communs

En examinant l'assemblage des octaèdres de soufre centrés par des atomes d'indium, nous remarquons (Figs. 7 et 8) que dans les deux cristaux, ces octaèdres partagent une arête commune avec leur équivalent par translation du petit paramètre  $c$  (3,858 et 3,869 Å). Dans le plan  $ab$ , ils mettent en commun soit des arêtes ou des sommets. Cette association des octaèdres de soufre définit des parois plissées qui sont en contact l'une avec l'autre uniquement par des sommets.

Tableau 4. Valeurs des distances interatomiques (Å) et des angles ( $^\circ$ ) liés aux atomes d'indium avec leurs déviations standards et les transformations de coordonnées (Tableau 3) quand elles ont lieu $Pb_4In_9S_{17}$ 

Octaèdre In(1)–S				Octaèdre In(3)–S			
In(1)–S(1)*	2,543 (4)	S(1 <sup>1b</sup> )–In(1)–S(4)	87,2 (1)	S(3)–S(8)	3,610 (5)	S(8)–In(3)–S(8 <sup>b</sup> )	97,0 (1)
In(1)–S(4)†	2,670 (3)	S(1 <sup>1b</sup> )–In(1)–S(4)	92,8 (1)	S(3)–S(6)	3,302 (6)		
S(1 <sup>1b</sup> )–S(4)	3,598 (5)	S(4)–In(4)–S(4 <sup>a</sup> )	92,5 (1)	S(8)–S(6)	3,693 (6)		
S(1 <sup>1b</sup> )–S(4)	3,775 (5)						
Octaèdre In(2)–S				Octaèdre In(4)–S			
In(2)–S(1)*	2,615 (3)	S(1)–In(2)–S(3)	85,4 (1)	In(4)–S(5)*	2,655 (3)	S(5)–In(4)–S(2)	84,3 (1)
In(2)–S(3)*	2,651 (3)	S(1)–In(2)–S(3 <sup>b</sup> )	173,1 (1)	In(4)–S(2)	2,792 (5)	S(5)–In(4)–S(6)	84,8 (1)
In(2)–S(4)	2,596 (4)	S(1)–In(2)–S(4)	87,3 (1)	In(4)–S(6)*	2,596 (3)	S(5)–In(4)–S(6 <sup>b</sup> )	171,5 (1)
In(2)–S(8)	2,666 (5)	S(1)–In(2)–S(8)	87,6 (1)	In(4)–S(4)	2,638 (4)	S(5)–In(4)–S(4)	96,6 (1)
S(1)–S(3 <sup>b</sup> )	3,570 (5)	S(1)–In(2)–S(1 <sup>b</sup> )	95,1 (1)	S(5)–S(2)	3,657 (6)	S(5)–In(4)–S(5 <sup>b</sup> )	93,2 (1)
S(1)–S(3)	5,256 (5)	S(3)–In(2)–S(4)	99,6 (1)	S(5)–S(6 <sup>b</sup> )	3,541 (6)	S(2)–In(4)–S(6)	87,3 (1)
S(1)–S(4)	3,598 (5)	S(3)–In(2)–S(8)	85,5 (1)	S(5)–S(6)	5,237 (6)	S(2)–In(4)–S(4)	178,8 (1)
S(1)–S(8)	3,656 (5)	S(3)–In(2)–S(3 <sup>b</sup> )	93,4 (1)	S(5)–S(4)	3,950 (6)	S(6)–In(4)–S(4)	91,9 (1)
S(3)–S(4)	4,007 (5)	S(4)–In(2)–S(8)	172,5 (1)	S(2)–S(6)	3,722 (6)	S(6)–In(4)–S(6 <sup>b</sup> )	96,0 (1)
S(3)–S(8)	3,610 (5)			S(2)–S(4)	5,430 (6)		
S(4)–S(8)	5,251 (5)			S(6)–S(4)	3,761 (5)		
Octaèdre In(3)–S				Octaèdre In(5)–S			
In(3)–S(2)*	2,873 (4)	S(2)–In(3)–S(3)	88,3 (1)	In(5)–S(9)*	2,769 (1)	S(9)–In(5)–S(7)	90,8 (1)
In(3)–S(3)	2,511 (4)	S(2)–In(3)–S(8)	89,3 (1)	In(5)–S(7)	2,495 (5)	S(9)–In(5)–S(2)	91,5 (1)
In(3)–S(8)*	2,576 (3)	S(2)–In(3)–S(8 <sup>b</sup> )	173,6 (1)	In(5)–S(2)*	2,762 (4)	S(9)–In(5)–S(2 <sup>b</sup> )	179,8 (1)
In(3)–S(6)	2,497 (5)	S(2)–In(3)–S(6)	87,5 (1)	In(5)–S(5)	2,518 (5)	S(9)–In(5)–S(5)	92,6 (1)
S(2)–S(3)	3,757 (6)	S(2)–In(3)–S(2 <sup>b</sup> )	84,4 (1)	S(9)–S(7)	3,752 (5)	S(9)–In(5)–S(9 <sup>b</sup> )	88,33 (4)
S(2)–S(8 <sup>b</sup> )	3,835 (6)	S(3)–In(3)–S(8)	90,4 (1)	S(9)–S(2 <sup>b</sup> )	3,963 (5)	S(7)–In(5)–S(2)	89,1 (1)
S(2)–S(8)	5,440 (6)	S(3)–In(3)–S(6)	174,2 (1)	S(9)–S(2)	5,531 (5)	S(7)–In(5)–S(5)	175,3 (1)
S(2)–S(6)	3,722 (6)	S(8)–In(3)–S(6)	93,4 (1)	S(9)–S(5)	3,825 (4)	S(2)–In(5)–S(5)	87,6 (1)
				S(7)–S(2)	3,693 (6)	S(2)–In(5)–S(2 <sup>b</sup> )	88,6 (1)
				S(7)–S(5)	5,009 (6)		
				S(2)–S(5)	3,657 (6)		

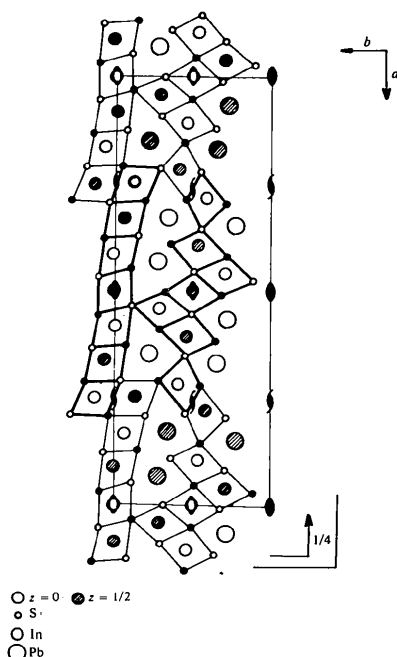
 $Pb_3In_{6,67}S_{13}$ 

Octaèdre I ( $\frac{2}{3}$ In + $\frac{1}{3}$ Pb)				Octaèdre In(3)–S			
I–S(3)*	2,75 (1)	S(3)–I–S(3 <sup>vi</sup> )	87,8 (3)	S(3 <sup>vi</sup> )–S(5 <sup>a</sup> )	5,90 (1)	S(5)–In(3)–S(5 <sup>a</sup> )	96,9 (2)
I–S(3 <sup>vi</sup> )	2,81 (1)	S(3)–I–S(3 <sup>b</sup> )	89,6 (3)	S(3 <sup>vi</sup> )–S(6)	3,72 (1)		
I–S(6)*	2,658 (6)	S(3)–I–S(6)	88,1 (3)	S(5)–S(6)	3,659 (9)		
I–S(7)	2,613 (9)	S(3)–I–S(6 <sup>b</sup> )	173,2 (3)				
S(3)–S(3 <sup>vi</sup> )	3,856 (9)	S(3 <sup>vi</sup> )–I–S(6)	85,7 (3)	Octaèdre In(4)–S			
S(3)–S(6)	3,758 (9)	S(3)–I–S(7)	95,0 (3)	In(4)–S(1)	2,643 (8)	S(1)–In(4)–S(9)	95,6 (2)
S(3)–S(6 <sup>b</sup> )	5,393 (9)	S(3 <sup>vi</sup> )–I–S(7)	176,1 (3)	In(4)–S(9)*	2,596 (5)	S(1)–In(4)–S(10)	177,7 (2)
S(3 <sup>vi</sup> )–S(6)	3,72 (1)	S(6)–I–S(7)	91,7 (2)	In(4)–S(10)	2,753 (9)	S(1)–In(4)–S(11)	91,3 (2)
S(3)–S(7)	3,95 (1)	S(6)–I–S(6 <sup>b</sup> )	93,4 (2)	In(4)–S(11)*	2,639 (5)	S(9)–In(4)–S(10)	85,9 (2)
S(3 <sup>vi</sup> )–S(7)	5,42 (1)			S(1)–S(9)	3,880 (8)	S(9)–In(4)–S(11)	84,3 (2)
S(6)–S(7)	3,78 (1)			S(1)–S(10)	5,390 (9)	S(9)–In(4)–S(11 <sup>b</sup> )	172,9 (2)
				S(1)–S(11)	3,775 (8)	S(9)–In(4)–S(9 <sup>b</sup> )	96,4 (2)
				S(9)–S(10)	3,65 (1)	S(10)–In(4)–S(11)	87,1 (2)
				S(9)–S(11)	3,51 (1)	S(11)–In(4)–S(11 <sup>b</sup> )	94,5 (2)
				S(9)–S(11 <sup>b</sup> )	5,223 (9)		
				S(10)–S(11)	3,717 (7)		
Octaèdre In(1)–S				Octaèdre In(5)–S			
In(1)–S(4)*	2,488 (7)	S(1)–In(1)–S(4 <sup>vi</sup> )	85,8 (2)	In(5)–S(7)*	2,626 (6)	S(7)–In(5)–S(8)	88,2 (2)
In(1)–S(1)†	2,707 (5)	S(1)–In(1)–S(4 <sup>ix</sup> )	94,2 (2)	In(5)–S(8)	2,687 (8)	S(7)–In(5)–S(13)	106,6 (2)
S(4 <sup>ix</sup> )–S(1)	3,808 (8)	S(1)–In(1)–S(1 <sup>a</sup> )	91,1 (2)	In(5)–S(13)	2,550 (8)	S(7)–In(5)–S(13 <sup>vi</sup> )	86,0 (2)
S(4 <sup>vi</sup> )–S(1)	3,541 (9)			In(5)–S(13 <sup>vii</sup> )	2,702 (6)	S(7)–In(5)–S(13 <sup>viii</sup> )	170,3 (2)
				S(7)–S(8)	3,70 (1)	S(7)–In(5)–S(7 <sup>b</sup> )	94,9 (2)
				S(7)–S(13)	4,15 (1)	S(8)–In(5)–S(13)	157,7 (2)
				S(7)–S(13 <sup>vii</sup> )	3,64 (1)	S(8)–In(5)–S(13 <sup>viii</sup> )	82,1 (2)
				S(7)–S(13 <sup>viii</sup> )	5,31 (1)	S(13)–In(5)–S(13 <sup>vii</sup> )	82,4 (2)
				S(8)–S(13 <sup>vii</sup> )	3,539 (9)	S(13 <sup>vii</sup> )–In(5)–S(13 <sup>viii</sup> )	91,5 (2)
				S(8)–S(13)	5,137 (9)		
				S(13)–S(13 <sup>vii</sup> )	3,446 (9)		
Octaèdre In(2)–S				Octaèdre In(6)–S			
In(2)–S(1)	2,521 (7)	S(1)–In(2)–S(2)	102,3 (2)	In(6)–S(8)*	2,538 (5)	S(8)–In(6)–S(9)	96,0 (2)
In(2)–S(2)*	2,659 (6)	S(1)–In(2)–S(4 <sup>vi</sup> )	85,7 (2)	In(6)–S(9)	2,527 (8)	S(8)–In(6)–S(10 <sup>a</sup> )	171,9 (2)
In(2)–S(4 <sup>vi</sup> )*	2,685 (5)	S(1)–In(2)–S(5 <sup>vi</sup> )	166,8 (2)	In(6)–S(10)*	2,917 (6)	S(8)–In(6)–S(10)	88,8 (2)
In(2)–S(5 <sup>vi</sup> )	2,599 (8)	S(2)–In(2)–S(4 <sup>vi</sup> )	86,7 (2)	In(6)–S(12)	2,503 (8)	S(8)–In(6)–S(12)	90,9 (2)
S(1)–S(2)	4,035 (9)	S(2)–In(2)–S(4 <sup>vii</sup> )	171,8 (2)	S(8)–S(9)	3,765 (9)	S(8)–In(6)–S(8 <sup>b</sup> )	99,3 (2)
S(1)–S(4 <sup>vi</sup> )	3,541 (9)	S(2)–In(2)–S(5 <sup>vi</sup> )	86,7 (2)	S(8)–S(10 <sup>b</sup> )	5,440 (9)	S(9)–In(6)–S(10)	83,8 (2)
S(1)–S(5 <sup>vi</sup> )	5,085 (9)	S(2)–In(2)–S(2 <sup>b</sup> )	93,3 (2)	S(8)–S(10)	3,824 (9)	S(9)–In(6)–S(12)	169,4 (2)
S(2)–S(4 <sup>vii</sup> )	5,330 (9)	S(4)–In(2)–S(5)	85,2 (2)	S(8)–S(12)	3,590 (9)	S(10)–In(6)–S(12)	88,3 (2)
S(2)–S(4 <sup>vi</sup> )	3,67 (1)	S(4)–In(2)–S(4 <sup>a</sup> )	90,1 (2)	S(9)–S(10)	3,65 (1)	S(10)–In(6)–S(10 <sup>a</sup> )	83,1 (2)
S(2)–S(5 <sup>vi</sup> )	3,61 (1)			S(9)–S(12)	5,009 (9)		
S(4)–S(5)	3,576 (8)			S(10)–S(12)	3,785 (9)		
Octaèdre In(3)–S							
In(3)–S(2 <sup>vi</sup> )	2,466 (8)	S(2)–In(3)–S(3)	88,4 (3)				
In(3)–S(3 <sup>vi</sup> )*	2,92 (1)	S(2 <sup>vi</sup> )–In(3)–S(5)	91,2 (2)				
In(3)–S(5)*	2,586 (5)	S(2 <sup>vi</sup> )–In(3)–S(6)	173,9 (2)				
In(3)–S(6)	2,462 (9)	S(3 <sup>vi</sup> )–In(3)–S(5)	90,0 (3)				
S(2)–S(3)	3,77 (1)	S(3 <sup>vi</sup> )–In(3)–S(5 <sup>b</sup> )	173,1 (3)				
S(2 <sup>vi</sup> )–S(5)	3,61 (1)	S(3 <sup>vi</sup> )–In(3)–S(6)	87,1 (3)				
S(2 <sup>vi</sup> )–S(6)	4,925 (9)	S(3)–In(3)–S(3 <sup>b</sup> )	83,0 (3)				
S(3 <sup>vi</sup> )–S(5)	3,895 (9)	S(5)–In(3)–S(6)	92,9 (2)				

Tableau 4 (suite)

Octaèdre In(7)-S			
In(7)-S(10)†	2,704 (5)	S(10)-In(7)-S(11 <sup>ka</sup> )	90,7 (2)
In(7)-S(11)*	2,520 (8)	S(10)-In(7)-S(11 <sup>kb</sup> )	89,4 (2)
S(10)-S(11 <sup>ka</sup> )	3,717 (9)	S(10)-In(7)-S(10 <sup>b</sup> )	91,4 (2)
S(10)-S(11 <sup>kb</sup> )	3,675 (9)		

\* Signifie qu'il y a deux liaisons identiques.  
 † Signifie qu'il y a quatre liaisons identiques.

Fig. 8. Motif structural de  $Pb_3In_{6,67}S_{13}$  représenté en trait renforcé.

En ce qui concerne les atomes de plomb, nous remarquons que dans les deux cas, ceux-ci se placent de préférence dans des cavités ménagées entre les parois.

### Caractères différents

La première structure se caractérise par sa simplicité, en effet, il n'y a qu'un type de paroi d'octaèdres et celle-ci a pour composition  $In_9S_{17}$  (Fig. 7). Si nous tenons compte de la translation  $c$ , la structure peut-être schématisée en rubans qui s'associent entre-eux ponctuellement par des sommets d'octaèdres [les atomes de soufre S(4)]. Ces rubans réservent des canaux dans lesquels se trouvent les atomes de plomb et des cavités qui sont constituées de tétraèdres d'atomes de soufre vides.

Par contre, l'examen de la seconde structure montre l'existence d'un désordre statistique et des parois d'octaèdres de deux types (Fig. 8) dont l'une rappelle celle que nous avons vue dans le premier cristal mais la formule comprend sept sites d'atomes d'indium, dont deux sont le site mixte I et douze atomes de soufre, tandis que l'autre, de forme plus complexe, a pour formule  $In_7S_{14}$ . Comme précédemment, la translation suivant  $c$  nous amène à imaginer des rubans s'associant entre-eux par des sommets [les atomes de soufre S(1) et S(7)] mais les canaux aménagés entre ces rubans sont soit simples ou doubles, c'est-à-dire avec une colonne d'atomes de plomb et une cavité ou comme  $Pb_4In_9S_{17}$ , deux colonnes d'atomes de plomb et deux cavités.

### Conclusion

Les deux cristaux sont bien de la même famille, l'équilibre des charges électriques est conditionné par l'absence ou la présence d'un désordre dans la structure.

Les cristaux caractérisés par des parois formées d'octaèdres de 'sulfure d'indium' sont effectivement allongés suivant l'axe  $c$  et aplatis dans la direction normale à leur épaisseur, à savoir  $b$ . Ce qui est conforme à la théorie des chaînes de liaison périodique de Hartman (1973).

### Références

- DONIKA, F. G., RADAUSTAN, S. I., KIOSSE, G. A., SEMILETOV, S. A., DONIKA, T. V. & MUSTYA, I. G. (1971). *Sov. Phys. Crystallogr.* **16**, 190-192.
- DOYLE, P. A. & TURNER, P. S. (1968). *Acta Cryst.* **A24**, 390-397.
- HAHN, H. & KINGLER, W. (1950). *Z. Anorg. Chem.* **263**, 177-190.
- HARTMAN, P. (1973). *Crystal Growth. An Introduction*. Amsterdam: North Holland.
- LAPPE, F., NIGGLI, A., NITSCHKE, R. & WHITE, J. G. (1962). *Z. Kristallogr.* **117**, 146-152.
- LEBAS, G. & LE BIHAN, M. T. (1976). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **99**, 351-360.
- LE BIHAN, M. T. (1962). *Bull. Soc. Fr. Minéral. Cristallogr.* **85**, 15-47.
- MEULENAER, J. DE & TOMPA, H. (1965). *Acta Cryst.* **19**, 1014-1018.
- PAULING, L. (1945). *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals*. Ithaca: Cornell Univ. Press.
- STEIGMANN, G. A., SUTHERLAND, H. H. & GOODYEAR, J. (1965). *Acta Cryst.* **19**, 967-971.