

**Questionnaire pour les participants à l'École thématique « Analyse Structurale par  
Diffraction des Rayons X et Contributions de la RMN à la Détermination Structurale »,  
Pont-à-Mousson, 7-11 juillet 2014**

1. Calculez la distance entre deux atomes ayant coordonnées fractionnaires 0,50950 0,31730 0,22800 et 0,32790 0,35450 0,23310 dans un cristal ayant paramètres de maille  $a = 8,5784 \text{ \AA}$ ,  $b = 12,9600 \text{ \AA}$ ,  $c = 7,2112 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 90,30^\circ$ ,  $\beta = 116,03^\circ$ ,  $\gamma = 89,125^\circ$ .
2. Quel est l'ordre du groupe ponctuel  $\bar{4}2m$ ?
3. Quelle est la différence entre les groupes  $\bar{4}2m$  et  $\bar{4}m2$ ?
4. À quel système cristallin appartient un cristal ayant groupe d'espace  $R3m$ ?
5. Quelle est la différence entre les groupes ponctuels 32 et 23 ?
6. Quelles sont les restrictions imposées par la symétrie d'un cristal monoclinique sur son réseau de Bravais ?
7. Combien de directions de symétrie y-a-t il dans un réseau cubique ?
8. Quel est le groupe d'espace symmorphique qui correspond au groupe  $Ccce$  ?
9. Quelles est la symétrie du site de la position de Wyckoff de multiplicité minimale dans les groupes d'espace  $P2_1/m2_1/m2/n$  et  $C2/c2/c2/e$  ? Quelles sont les multiplicités des ces positions ?
10. Combien de centres d'inversion contient une maille primitive, si le groupe d'espace est centro-symétrique ?
11. Pourquoi un réseau tétragonal (quadratique) ne peut être décrit par une maille centrée A ?
12. Pourquoi dans les *Tables Internationales de Cristallographie*, on ne trouve pas de groupe de type  $C2/a$  ?
13. Trois groupes symmorphiques correspondent au groupe ponctuel trigonal 32 :  $P312$ ,  $P321$  et  $R32$ . Pourquoi a-t-on deux groupes d'espaces si le réseau est hexagonal mais un seul si le réseau est rhomboédrique ?
14. Un composé existe en deux polymorphes, de symétrie  $Pcca$  à haute température et  $P222_1$  à basse température. Si vous voulez comparer les deux structures dans un même référentiel, vous devez utiliser un setting non standard soit pour le groupe soit pour le sous-groupe. Quels sont les symboles des ces settings ?
15. Donnez les conditions de réflexion (« extinctions systématiques ») correspondant à un miroir  $a_{[001]}$  et à un axe hélicoïdal  $4_{3[100]}$ .