

**Questionnaire pour les participants à l'École thématique « Analyse Structurale par
Diffraction des Rayons X et Contributions de la Diffusion Totale à la Détermination
Structurale », Pont-à-Mousson, 3-7 juillet 2017**

*Les participants à l'école sont censés maîtriser les fondements de la cristallographie. Ce questionnaire sert à l'auto-évaluation des participants : terminez le questionnaire avant de regarder les réponses. Si vous obtenez un faible score vous avez intérêt à participer à la journée pré-école dans laquelle les notions de base de cristallographie géométrique seront présentées. Toutefois, si les notions de symétrie, groupe, réseau de Bravais, réseau réciproque, structure atomique vous sont complètement étrangères, vous avez plutôt besoin de suivre une formation pour les débutants car **ce notions sont considérées comme acquises par le participant.***

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 centrosymétrique ?
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 $4_{3[100]}$.