Jean-Jacques Rousseau

2º CYCLE • ÉCOLES D'INGÉNIEURS

Cristallographie géométrique et radiocristallographie

Cours et exercices corrigés



DUNOD

Table des matières

CRISTALLOGRAPHIE GÉOMÉTRIQUE

CHAF	PITRE 1 • LES POSTULATS DE LA CRISTALLO	GRAPHIE SOST SOST SOST SOST SOST SOST SOST SOS	
1.1	Loi de constance des angles		
1.2	Loi des indices rationnels		
1.3	Les postulats de la cristallographie		
1.4	Réseau, motif et structure		
1.5	Symétries d'orientation et de position		
1.6	L'état cristallin		
	A STEMES ET RESEALLA		
CHA	PITRE 2 • LES RÉSEAUX PONCTUELS		1
2.1	Le réseau direct		1
	2.1.1 Définitions		1
	2.1.2 Doubles produits vectoriels		1
	2.1.3 Volume de la maille		1
	2.1.4 Plans du réseau direct		1
	2.1.5 Notations		1
2.2	Le réseau réciproque		1
	2.2.1 Définition	TRE A * OPERATIONS DE SYMETRIE DANS	1
	2.2.2 Exemple de réseau réciproque		1
	2.2.3 Calcul des grandeurs réciproques		1
	2.2.4 Propriétés des rangées du réseau réc	ciproque Caramana Cala	1
	2.2.5 Propriété des plans réciproques		

VI	Table des ma	tières
2.3	Les indices de Miller	16
2.4	Changements de repères dans les réseaux	17
	2.4.1 Covariance des indices de Miller des plans	17
	2.4.2 Généralisation	18
2.5	Calculs dans les réseaux	19
	2.5.1 Zones et axes de zone	20 20
	2.5.2 Rangées directes	20
	2.5.3 Rangées réciproques2.5.4 Angles entre des rangées directes	21
	2.5.5 Angles entre des rangées réciproques	21
	2.5.6 Angle de torsion	21
2.6	Repère international	22
	2.6.1 Vecteur réciproque dans le repère international	22
	2.6.2 Rangée directe dans le repère international	22
2.7	Coordonnées réduites	23
CHA	PITRE 3 • LA PROJECTION STÉRÉOGRAPHIQUE	24
3.1	Transformation stéréographique d'un point	24
3.2	Pôle d'une face	24
3.3	Projection stéréographique d'un pôle	25
3.4	Canevas de Wulff	26
	3.4.1 Description	26
	3.4.2 Construction d un stereogramme	21
	5.4.5 Othisation de canevas de Walli	
3.5	Éléments de trigonométrie sphérique	
3.6	Caractérisation d'un cristal au goniomètre	30
	3.6.1 Principe de la méthode de caractérisation	30
	 3.6.2 Détermination de α, β, γ et des rapports des axes 3.6.3 Indexation des faces 	21
3.7	Exemple de caractérisation	
3.1	3.7.1 Tracé de la projection stéréographique	
	3.7.2 Étude de cette projection stéréographique	
3.8	Projections stéréographiques des cristaux cubiques	35
	3.8.1 Angles caractéristiques	37
CH,	APITRE 4 • OPÉRATIONS DE SYMÉTRIE DANS LES RÉSEAUX CRISTALLINS	38
4.1	Definition des operations de symétrie	38
	4.1.1 Les translations	
	4.1.3 Les rotations L'inversion	39

Table	des matières	VII
	4.1.4 Produits d'opérations de symétrie	40
	4.1.5 Étude de quelques produits	40
	4.1.6 Rotations propres et impropres	45
	4.1.7 Produit d'une rotation par une translation	45
12	Représentations des opérations de symétrie	47
4.2	4.2.1 Matrices rotations	47
	4.2.2 Matrice inversion	48
	4.2.3 Transformations affines	48
	4.2.4 Matrices homogènes	49
4.3	Axes de symétrie possibles dans un réseau cristallin	49
4.3		50
4.4	Opérations de symétrie — Éléments de symétrie	30
CHA	ITRE 5 • DÉNOMBREMENT DES GROUPES PONCTUELS CRISTALLOGRAPHIQUES	52
5.1	Structure de groupe	52
	5.1.1 Axiomes de définition	52
lasi	5.1.2 Sous-groupes et coensembles	54
	5.1.3 Le groupe orthogonal O(3)	54
	5.1.4 Produit direct de deux sous-groupes d'un groupe	54
5.2	Groupes ponctuels propres et impropres	55
	5.2.1 Théorème sur les groupes impropres	55
	5.2.2 Types des groupes impropres	56
5.3	Dénombrement des groupes ponctuels	56
	5.3.1 Méthode de dénombrement	56
	5.3.2 Recherche des groupes propres d'ordre n	57
	5.3.3 Recherche des groupes impropres de G _p	62
	5.3.4 Bilan final du dénombrement	64
	through the observent	1
CHA	PITRE 6 • CLASSES, SYSTÈMES ET RÉSEAUX CRISTALLINS	65
6.1	Classes cristallines, systèmes cristallins	65
	6.1.1 Dénombrement des groupes ponctuels de réseau	65
	6.1.2 Conventions de la nomenclature internationale	67
	6.1.3 Holoédries et mériédries	68
	6.1.4 Projections stéréographiques des 32 classes	71
6.2	Classes de Laue	72
6.3	Réseaux de Bravais	72
	6.3.1 Système triclinique	75
	6.3.2 Système monoclinique	75
	6.3.3 Système orthorhombique	75
	0.14 Système triganal (maille rhomboédrique)	75
	6.3.5 Système tétragonal	75
	6.3.6 Système hexagonal	75

VIII	II Table des matiè		ères	
	6.3.7 Système cubique	Produits d'apér alors da symétria		76
6.4	Réseaux réciproques des réseaux de B	rayais		76
	6.4.1 Réseau réciproque d'un rése	ay C at gridlagan, to assigning amounts.		76
	6.4.2 Étude analytique	Troduct one receive per une traders		77
	6.4.3 Réseaux réciproques des rése	eaux F et I san <mark>te ab entersaland and anotherna</mark> s		77
6.5	Relations métriques dans les réseaux	Matrices exteriors		78
	6.5.1 Système triclinique	notassamissamiés		78
	6.5.2 Système monoclinique	Toursionantion aftimes		79
	6.5.3 Système orthorhombique	Maurices tramogenus		79
	6.5.4 Réseaux hexagonaux et rhon	nboédriques		80
	6.5.5 Système tétragonal	sittomys ob enomeld — entemys sb enou		83
	6.5.6 Système cubique			83
6.6	Filiations entre classes	* DEMONIBREMENT DES BROIFES PONS		84
CHAP	PITRE 7 • GROUPES D'ESPACE	ure de groupe		96
		Axiones de définition		86
7.1	Groupe d'espace d'un cristal	Sous-groupes et coensemples		86
	7.1.1 Propriétés du groupe7.1.2 Groupe ponctuel associé	Le groupe orthogonal O(3) RiQUE		87
	7.1.2 Groupe policities associe 7.1.3 Groupes d'espace cristallins	Produit direct de deux sous-groupes di la		87 87
7.2		Code American State Comment Co.		
	Eléments de symétrie des groupes d'e			88
7.3	Axes hélicoïdaux des groupes d'espac			88
	7.3.1 Translations permises	was as an des graupes ponctuers		88
	7.3.2 Axes binaires 7.3.3 Axes ternaires	IREERS COMMON OF SECURITY OF		90
	7.3.4 Axes quaternaires	Recherche des anapes prepres d'ardie : Racherche des eronges ningrapes de Ga		90
	7.3.5 Axes sénaires	themseldue de de la relie		91
7.4	Miroirs de glissement			
80	7.4.1 Translations permises	· CLASSES, SYSTEMMEST HESEAUX, CRIS		91 91
7.5	Notation des groupes d'espace	es repports dell'afains compress calcularcies :		
		L'emparation des proposes pendueix de		93
7.6	Construction des groupes d'espace 7.6.1 Groupes d'espace dérivés de	semptin somelanamon at illi anomeno and		94
	7.6.1 Groupes d'espace dérivés de7.6.2 Groupe P2			95
	7.6.3 Groupe P2 ₁	and the property of the second of the		95
	7.6.4 Groupe C2	a de taux est		96 96
7.7	Position des éléments de symétrie dan	s la maille		
	7.7.1 Cas des groupes symmorphic			97 97
1000	7.7.2 Cas des groupes symmorphic			98
200	7.7.3 Cas des groupes non symmo			99
7.8	Positions générales et particulières	System of the annual of the property of		
7.9	Conclusions	Systems (emigrate)		100
-		Systems management and systems		101

Table	des matières	IX
ТЦΔР	TRE 8 • UTILISATION DES TABLES INTERNATIONALES	10:
	Remarques complémentaires	10
1.1	Remarques complementaires	
	RADIOCRISTALLOGRAPHIE	
НАР	ITRE 9 • LES RAYONS X	11
0.1	Production des rayons X	11
	0.1.1 Principe de production	11
	9.1.2 Les anticathodes	11
	9.1.3 Les générateurs	11
.2	Spectre d'une anticathode	11
-	9.2.1 Spectre continu	11
	9.2.2 Spectre de raies	11
9.3	Absorption des rayons X	11
	9.3.1 Coefficient d'absorption	1
	9.3.2 Variation du coefficient d'absorption	- 1
	9.3.3 Applications	1
0.4	Détection des rayons X	1
	9.4.1 Écrans fluorescents	1
	9.4.2 Films photographiques	1
	9.4.3 Compteurs à gaz	13
	9.4.4 Compteurs à scintillation	1:
9.5	Erreurs de comptage	1
9.6	Optique des rayons X	1
	9.6.1 Optique géométrique	1
	9.6.2 Optique physique	
_ L	PITE 10 - DIFFRACTION DES PAYONS V	1
	PITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X	
10.1	Desembliques de parametre de la rangee de rotation :	1
	10.1.1 Diffraction de Fraunhofer	1
100	10.1.2 Diffraction par un réseau plan	
10.2	acs rayons & par air election	1
	10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton	1
	10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson	1
10.5	10.2.3 Facteur de Thomson	
10.3	- Musion des rayons x par la mattere	1
	- 5.5.1 Tolletion densite electromque	1
	2.2.1 acteur de diffusion atomique	1
	10.3.3 Diffusion des rayons X par un cristal	1

10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 127 10.2.3 Facteur de Thomson 128 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129	Table des matières	IX
RADIOCRISTALLOGRAPHIE CHAPITRE 9 • LES RAYONS X 9.1 Production des rayons X 9.1.1 Principe de production 9.1.2 Les anticathodes 9.1.3 Les générateurs 112 9.2 Spectre d'une anticathode 9.2.1 Spectre de raies 114 9.3 Absorption des rayons X 9.3.1 Coefficient d'absorption 9.3.2 Variation du coefficient d'absorption 9.3.3 Applications 118 9.4 Détection des rayons X 9.4.1 Écrans fluorescents 119 9.4.2 Films photographiques 9.4.3 Compteurs à gaz 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 9.6 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique géométrique 122 9.6.2 Optique physique CHAPITRE 10 ◆ DIFFRACTION DES RAYONS X 10.1 Rappels sur la diffraction 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.2 Diffusion chérente ou diffusion Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 128 10.3.1 Fonction densité électronique 128 10.3.1 Fonction densité électronique 129 120 120 121 122		
RADIOCRISTALLOGRAPHIE CHAPITRE 9 • LES RAYONS X 9.1 Production des rayons X 9.1.1 Principe de production 9.1.2 Les anticathodes 9.1.3 Les générateurs 113 9.2 Spectre d'une anticathode 9.2.1 Spectre continu 9.2.2 Spectre de raies 114 9.3 Absorption des rayons X 9.3.1 Coefficient d'absorption 116 9.3.2 Variation du coefficient d'absorption 9.3.3 Applications 118 9.4 Détection des rayons X 9.4.1 Écrans fluorescents 119 9.4.2 Films photographiques 119 9.4.3 Compteurs à gaz 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 121 9.6 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique CHAPITRE 10 ◆ DIFFRACTION DES RAYONS X 10.1 Rappels sur la diffraction 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction de Fraunhofer 10.2.1 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.3 Facteur de Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 128 10.3.1 Fonction densité électronique 129 10.3.2 Facteur de diffusion atomique	CHAPITRE 8 • UTILISATION DES TABLES INTERNATIONALES	103
### CHAPITRE 9 • LES RAYONS X	8 1 Remarques complémentaires	10/
### CHAPITRE 9 • LES RAYONS X 111 9.1 Production des rayons X 111 9.1.1 Principe de production 111 9.1.2 Les anticathodes 112 9.1.3 Les générateurs 113 9.2 Spectre d'une anticathode - 113 9.2.1 Spectre continu 113 9.2.2 Spectre de raies 114 9.3 Absorption des rayons X 116 9.3.1 Coefficient d'absorption 116 9.3.2 Variation du coefficient d'absorption 117 9.3.3 Applications 118 9.4 Détection des rayons X 119 9.4.1 Écrans fluorescents 119 9.4.2 Films photographiques 119 9.4.3 Compteurs à gaz 120 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 121 9.6 Optique des rayons X 122 9.6.1 Optique géométrique 122 9.6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1 Rappels sur la diffraction 10.1.1 Diffraction que run réseau plan 125 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 126 10.2.1 Diffusion des rayons X par un électron 126 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Compton 126 10.2.3 Facteur de Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 128 10.3.1 Fonction densité électronique 128 10.3.1 Fonction densité électronique 128 10.3.1 Fonction densité électronique 129	Logsmichea de busiles.	
CHAPITRE 9 • LES RAYONS X 111 9.1. Production des rayons X 111 9.1.1 Principe de production 111 9.1.2 Les anticathodes 112 9.1.3 Les générateurs 113 9.2 Spectre d'une anticathode 113 9.2.1 Spectre continu 113 9.2.2 Spectre de raies 114 9.3 Absorption des rayons X 116 9.3.1 Coefficient d'absorption 116 9.3.2 Variation du coefficient d'absorption 117 9.3.3 Applications 118 9.4 Détection des rayons X 119 9.4.2 Films photographiques 119 9.4.3 Compteurs à gaz 120 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 121 9.6 Optique des rayons X 122 9.6.1 Optique géométrique 122 9.6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1.1 Diffraction que run réseau plan 125 10.2.1 Diffusion des rayons X par un électron 126 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Compton 126 10.2.3 Facteur de Thomson	RADIOCRISTALLOGRAPHIE	
9.1 Production des rayons X 9.1.1 Principe de production 9.1.2 Les anticathodes 9.1.3 Les générateurs 113 9.2 Spectre d'une anticathode 9.2.1 Spectre continu 9.2.2 Spectre de raies 114 9.3 Absorption des rayons X 9.3.1 Coefficient d'absorption 9.3.2 Variation du coefficient d'absorption 9.3.3 Applications 116 9.3.3 Applications 117 9.4 Détection des rayons X 9.4.1 Écrans fluorescents 119 9.4.2 Films photographiques 9.4.3 Compteurs à gaz 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 122 9.6.0 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 10.1 Rappels sur la diffraction 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Compton 10.2.3 Facteur de Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique		
9.1 Production des rayons X 9.1.1 Principe de production 9.1.2 Les anticathodes 9.1.3 Les générateurs 113 9.2 Spectre d'une anticathode 9.2.1 Spectre continu 9.2.2 Spectre de raies 114 9.3 Absorption des rayons X 9.3.1 Coefficient d'absorption 9.3.2 Variation du coefficient d'absorption 9.3.3 Applications 116 9.3.3 Applications 117 9.4 Détection des rayons X 9.4.1 Écrans fluorescents 119 9.4.2 Films photographiques 119 9.4.3 Compteurs à gaz 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 121 9.6 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique 122 9.6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 10.1 Rappels sur la diffraction 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Compton 10.2.3 Facteur de Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique	CHAPITICE 9 LES INTOIS X	1 2 m
9,1.2 Les anticathodes 9,1.3 Les générateurs 113 9.2 Spectre d'une anticathode 9,2.1 Spectre continu 9,2.2 Spectre de raies 114 9.3 Absorption des rayons X 116 9,3.1 Coefficient d'absorption 9,3.1 Coefficient d'absorption 116 9,3.2 Variation du coefficient d'absorption 9,3.3 Applications 117 9,4.1 Écrans fluorescents 119 9,4.2 Films photographiques 119 9,4.3 Compteurs à gaz 120 9,4.4 Compteurs à scintillation 121 9,5 Erreurs de comptage 121 9,6 Optique des rayons X 122 9,6.1 Optique géométrique 9,6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 ◆ DIFFRACTION DES RAYONS X 10.1 Rappels sur la diffraction 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffrusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffrusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 10.2.3 Facteur de Thomson 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129	9.1 Production des rayons X	111
9.1.3 Les générateurs 9.1.3 Les générateurs 9.2.1 Spectre d'une anticathode 9.2.1 Spectre continu 9.2.2 Spectre de raies 114 9.3 Absorption des rayons X 116 9.3.1 Coefficient d'absorption 9.3.2 Variation du coefficient d'absorption 9.3.3 Applications 118 9.4 Détection des rayons X 119 9.4.1 Écrans fluorescents 9.4.2 Films photographiques 9.4.3 Compteurs à gaz 9.4.4 Compteurs à scintillation 9.5 Erreurs de comptage 9.6.1 Optique des rayons X 120 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1 Rappels sur la diffraction 10.2.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 10.2. Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Compton 10.2.3 Facteur de Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 128 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129		
9.2 Spectre d'une anticathode 9.2.1 Spectre continu 113 9.2.2 Spectre de raies 114 9.3 Absorption des rayons X 116 9.3.1 Coefficient d'absorption 116 9.3.2 Variation du coefficient d'absorption 117 9.3.3 Applications 118 9.4 Détection des rayons X 119 9.4.1 Écrans fluorescents 119 9.4.2 Films photographiques 119 9.4.3 Compteurs à gaz 120 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 121 9.6 Optique des rayons X 122 9.6.1 Optique géométrique 122 9.6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1 Rappels sur la diffraction 124 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 124 10.1.2 Diffrusion des rayons X par un électron 126 10.2.1 Diffusion des rayons X par un électron 127 10.2.3 Facteur de Thomson 127 10.3.1 Fonction densité électronique 128 10.3.1 Fonction densité électronique 128 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129		
9.2.1 Spectre continu 9.2.2 Spectre de raies 114 9.3 Absorption des rayons X 9.3.1 Coefficient d'absorption 9.3.2 Variation du coefficient d'absorption 116 9.3.3 Applications 118 9.4 Détection des rayons X 119 9.4.1 Écrans fluorescents 119 9.4.2 Films photographiques 119 9.4.3 Compteurs à gaz 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 121 9.6 Optique des rayons X 122 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique 122 10.1 Rappels sur la diffraction 124 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 125 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129		
9.2.2 Spectre de raies 114 9.3 Absorption des rayons X 116 9.3.1 Coefficient d'absorption 116 9.3.2 Variation du coefficient d'absorption 117 9.3.3 Applications 118 9.4 Détection des rayons X 119 9.4.1 Écrans fluorescents 119 9.4.2 Films photographiques 119 9.4.3 Compteurs à gaz 120 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 121 9.6 Optique des rayons X 122 9.6.1 Optique géométrique 122 9.6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 ◆ DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1 Rappels sur la diffraction 124 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 124 10.1.2 Diffusion des rayons X par un électron 125 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 126 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 126 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 127 10.2.3 Facteur de Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 128 10.3.1 Fonction densité électronique 128 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129		110
9.3 Absorption des rayons X 116 9.3.1 Coefficient d'absorption 116 9.3.2 Variation du coefficient d'absorption 117 9.3.3 Applications 118 9.4 Détection des rayons X 119 9.4.1 Écrans fluorescents 119 9.4.2 Films photographiques 119 9.4.3 Compteurs à gaz 120 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 121 9.6 Optique des rayons X 122 9.6.1 Optique géométrique 122 9.6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1 Rappels sur la diffraction 124 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 124 10.2.1 Diffusion des rayons X par un électron 126 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 126 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 128 10.3.1		
9.3.1 Coefficient d'absorption 9.3.2 Variation du coefficient d'absorption 9.3.3 Applications 118 9.4 Détection des rayons X 119 9.4.1 Écrans fluorescents 119 9.4.2 Films photographiques 119 9.4.3 Compteurs à gaz 120 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 121 9.6 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique 122 9.6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1 Rappels sur la diffraction 124 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 110.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 127 10.2.3 Facteur de Thomson 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique	THE REAL PROPERTY AND A STATE OF THE PARTY O	116
9.3.2 Variation du coefficient d'absorption 9.3.3 Applications 118 9.4 Détection des rayons X 119 9.4.1 Écrans fluorescents 119 9.4.2 Films photographiques 119 9.4.3 Compteurs à gaz 120 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 122 9.6.1 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 122 9.6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1 Rappels sur la diffraction 124 10.1.2 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 125 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 127 10.2.3 Facteur de Thomson 103.0 Diffusion des rayons X par la matière 103.1 Fonction densité électronique 103.2 Facteur de diffusion atomique 129		
9.3.3 Applications 9.4 Détection des rayons X 9.4.1 Écrans fluorescents 9.4.2 Films photographiques 9.4.3 Compteurs à gaz 9.4.4 Compteurs à scintillation 9.5 Erreurs de comptage 9.6.1 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1 Rappels sur la diffraction 124 10.1.2 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 125 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 128 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique	and the second district of the second of	117
9.4 Détection des rayons X 9.4.1 Écrans fluorescents 119 9.4.2 Films photographiques 119 9.4.3 Compteurs à gaz 120 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 122 9.6 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1 Rappels sur la diffraction 124 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 125 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129	9.3.3 Applications	118
9.4.1 Écrans fluorescents 9.4.2 Films photographiques 9.4.3 Compteurs à gaz 9.4.4 Compteurs à scintillation 121 9.5 Erreurs de comptage 121 9.6 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 10.1 Rappels sur la diffraction 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion cohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 10.2.3 Facteur de Thomson 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129	9.4 Détection des rayons X	119
9.4.2 Films photographiques 9.4.3 Compteurs à gaz 9.4.4 Compteurs à scintillation 9.5 Erreurs de comptage 9.6 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1 Rappels sur la diffraction 124 10.1.2 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 125 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129	0.4.1 Egrand fluorescents	119
9.4.3 Compteurs à gaz 9.4.4 Compteurs à scintillation 9.5 Erreurs de comptage 9.6 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1 Rappels sur la diffraction 124 10.1.2 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 125 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 117 10.2.3 Facteur de Thomson 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129	0.4.2 Films photographiques	119
9.4.4 Compteurs a scintilation 9.5 Erreurs de comptage 9.6 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 10.1 Rappels sur la diffraction 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129	9.4.3 Compteurs à gaz	120
9.5 Erreurs de comptage 9.6 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique 122 CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 10.1 Rappels sur la diffraction 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 10.2.3 Facteur de Thomson 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129	9.4.4 Compteurs a scintillation	121
9.6.1 Optique des rayons X 9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1 Rappels sur la diffraction 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 10.2.3 Facteur de Thomson 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129 100.3 Particular de Thomson 120 121 122 123 124 125 126 127 127 128 129 129	0.5 5	121
9.6.1 Optique géométrique 9.6.2 Optique physique CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 124 10.1 Rappels sur la diffraction 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129		
CHAPITRE 10 • DIFFRACTION DES RAYONS X 10.1 Rappels sur la diffraction 10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 10.2.3 Facteur de Thomson 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129		122
CHAPITRE 10 ● DIFFRACTION DES RAYONS X10.1 Rappels sur la diffraction12410.1.1 Diffraction de Fraunhofer12410.1.2 Diffraction par un réseau plan12510.2 Diffusion des rayons X par un électron12610.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton12610.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson12710.3 Diffusion des rayons X par la matière12810.3.1 Fonction densité électronique12810.3.2 Facteur de diffusion atomique129	9.6.2 Optique physique	122
10.1 Rappels sur la diffraction12410.1.1 Diffraction de Fraunhofer12410.1.2 Diffraction par un réseau plan12510.2 Diffusion des rayons X par un électron12610.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton12610.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson12710.2.3 Facteur de Thomson12710.3 Diffusion des rayons X par la matière12810.3.1 Fonction densité électronique12810.3.2 Facteur de diffusion atomique129		
10.1.1 Diffraction de Fraunhofer 10.1.2 Diffraction par un réseau plan 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 10.2.3 Facteur de Thomson 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129		
10.1.2 Diffraction par un réseau plan 10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 10.2.3 Facteur de Thomson 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 128	madon du parametre de la rangee de rotation, a	
10.2 Diffusion des rayons X par un électron 10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 10.2.3 Facteur de Thomson 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129		
10.2.1 Diffusion incohérente ou diffusion Compton 10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 127 10.2.3 Facteur de Thomson 128 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 129	THE SAME SAME	
10.2.2 Diffusion cohérente ou diffusion Thomson 10.2.3 Facteur de Thomson 127 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 128	10.2.1 Picc. :	
10.2.3 Facteur de Thomson 10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 128		105
10.3 Diffusion des rayons X par la matière 10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 128		100
10.3.1 Fonction densité électronique 10.3.2 Facteur de diffusion atomique 128	10 -	
10.3.2 Facteur de diffusion atomique		
1 acteur de diffusion atomique	3.3.1 Poliction defisite electronique	
	Tacted de diffusion atomique	

X Table o	des matières
10.4 Diffraction par un réseau tripériodique 10.4.1 Conditions de Laue 10.4.2 Construction d'Ewald 10.4.3 Relation de Bragg 10.4.4 Conclusions	133
10.5 Intensité des rayons diffractés 10.5.1 Facteur de Debye-Waller 10.5.2 Facteur de structure 10.5.3 Exemple de calcul de facteur de structure 10.5.4 Relation entre facteur de structure et réseau réciproque 10.5.5 Loi de Friedel 10.5.6 Facteur de Lorentz	137 138 139 139 140 140
10.6 Pouvoir réflecteur d'un cristal	141
11.1 Principe de la méthode 11.2 Dispositif expérimental 11.3 Construction du diagramme de Laue 11.4 Particularités des diagrammes de Laue 11.4.1 Zone aveugle 11.4.2 Courbes zonales 11.5 Indexation d'un cliché 11.5.1 Projection gnomonique 11.5.2 Projection stéréographique 11.5.3 Conclusions	143 144 144 146 146 146 147 148 149 151
CHAPITRE 12 • MÉTHODE DU CRISTAL TOURNANT	
12.1 Principe de la méthode 12.2 Chambre de Bragg 12.3 Détermination du paramètre de la rangée de rotation 12.4 Indexation du cliché 12.4.1 Zone aveugle	153 153
12.4.2 Relation entre les indices de la rangée de rotation et les indices des tac strate p 12.4.3 Indexation de la strate équatoriale 12.4.4 Indexation des taches des autres strates 12.4.5 Coordonnées d'une tache sur le film 12.4.6 Intérêt de la méthode	154 155 155 156
12.5 Chambre de Weissenberg 12.5.1 Principe	

Table des matières	XI
12.5.2 Strate équatoriale	157
12.5.3 Autres strates	
12.6 Méthode de Buerger	
12.6.1 Description de la méthode	
12.6.2 Le plan équatorial	160
12.6.3 Les autres plans	160
12.6.4 Rôle des écrans	
12.6.5 Intérêt de la méthode	
12.7 Goniometre à 4 cercles	
12.8 Monochromateur à cristal	100
12.8.1 Monochromateur Johansson	
CHAPITRE 13 • MÉTHODES DE DIFFRACTION SUR POUDRES	165
13.2 Description de la Chambre de Debye-Scherrer	
13.3 Indexation des anneaux	
13.3.1 Mesure des dhkl	169
13.3.2 Indexation des anneaux de diffraction	171
13.4 Chambres spéciales	171
13.4.1 Chambre à température variable 13.4.2 Chambres à focalisation	171
	172
13.5 Les diffractomètres automatiques	172
13.5.1 Diffractomètre à compteur proportionnel 13.5.2 Diffractomètre à détecteur linéaire	174
13.5.2 Diffractomètre à détecteur linéaire 13.5.3 Diffractomètre à compteur courbe	1/5
	176
13.6 Applications des méthodes de poudres 13.6.1 Identification des composées cristallisés	176
13.6.2 Analyse quantitative de composées cristallisés	170
13.6.3 Détermination des paramètres de maille	
13.6.4 Étude de textures	1/8
13.6.5 Étude de transitions de phase	1/9
13.6.6 Détermination des structures	100
CHAPITRE 14 • DIFFRACTION DES NEUTRONS ET DES ÉLECTRONS	
14.1 Diffraction des neutrons	182
14.1.1 Production at détaction	
14.1.2 Diffusion des neutrons	183
14.1.3 Particularités des méthodes de diffraction de neutrons	
14.1.4 Méthode du temps de vol	
14.1.5 Structures magnétiques	186
14.1.6 Absorption des neutrons	186

CII		Table des matie	eres
CII .		Table des me de	
	Diffraction des électrons		187
4.2	14.2.1 Production et détection	12.422 Strate appropriate	187
	14.2.2 Facteur de diffusion pour l		188
	14.2.3 Particularités des méthode		188
	3 Columbia de Brigh	142.5.2 Le plan consumply La Section	
CHAP	PITRE 15 • PRINCIPES DE LA DÉTER	MINATION DES STRUCTURES	190
5.1	Détermination de la maille	12 m.4. Relia des destinas	190
	15.1.1 Détermination des paramè	t <mark>re</mark> s de maille	190
	15.1.2 Contenu de la maille	Cétamametre à 4 cercles	191
15.2	Détermination du groupe d'espace	Managhramateur à cristal servant de sustamourband Ma	191
81	15.2.1 Détermination du groupe	le symétrie ponctuelle	191
	15.2.2 Détermination du groupe	<mark>sp</mark> atial	193
15.3	Détermination de la position des at	<mark>om</mark> es dans la maille	195
	15.3.1 Méthode par essais et erre	urs	195
	15.3.2 Méthodes utilisant la trans	<mark>fo</mark> rmation de Fo <mark>urier</mark>	196
	15.3.3 Méthodes directes	Indexahon des andeaux	198
	15.3.4 Affinement des structures	Data esta orașe de 1 f.	202
CLIAI	PITRE 16 • NOTIONS DE CRISTALLO	LIMIE do ansemi de america de diffractiones	204
103		Solelabor sendmis/Ox	
16.1	Généralités	1.1.4.1 Chambre à rempérature variable	204
	16.1.1 Liaison chimique dans les	pointelleool & evidence 2 S. A. C.L.	204
	16.1.2 Liaison ionique 16.1.3 Liaison covalente	Les diffractomètres automatiques	206
	16.1.4 Autres types de liaisons	13.5.1 Diffraciomètre à comprene propertionnel	206
	16.1.5 Les modèles de sphères ri	13.5.2 Diffractamètre à détecteur linéaire	
	16.1.6 Notion de coordinance	14.5.3 Diffractomètre à comprent césable	208
16.2		Applications des méthodes de poudres	208
10.2	Structures ioniques 16.2.1 Conditions de stabilité	Later demonstrate des generales de la CP	208
	16.2.2 Exemple de structures bin	aires des des des angres de la companya de de la companya de la co	211
	16.2.3 Composés ternaires	13.6.3 December of desputy metres via matthe	214
	16.2.4 Assemblages d'ions com	olexes : la calcite	215
16.3		The state of the sport of the sport of the state of the sport of the s	216
	16.3.1 Plan compact	Denomination its sent ture I state the Denomination of the I	217
	16.3.2 Cubique compact	TREVE - DIGERACION DES REQUIDORS ET DES EL	217
	16.3.3 Hexagonal compact		218
	16.3.4 Cubique centré	Oiffraction des neutrons	219
	16.3.5 Structures dérivées des as	semblages compacts	220
16.4	Structures covalentes	14.1.3 Partement system of the de diffrações	221
146	16.4.1 Structure du diamant	14.1.4 Michaels desembs description at 1.4.1.4	221
	16.4.2 Structure de type blende		221
	16.4.3 Structure de type wurtzite		222

16.4.4 Structure du graphite 223 16.4.5 Structure de la cuprite Cu₂O 223 16.5.1 Octaèdres liés par les sommets 224 16.5.2 Octaèdres liés par une arête 225 16.5.3 Assemblage de polyèdres par une face (NiAs) 226 CHAPITRE 17 • TECHNIQUES SPÉCIALES 228 228 17.1 Diffraction par des structures quelconques 228 17.1.1 Pouvoir diffusant 229 17.1.2 Intensité diffractée par un objet homogène illimité 230 17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène limité 230 17.1.4 Intensité diffractée par un objet homogène limité 230 17.1.5 Formule de Debye 231 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 232 17.2 EXAFS 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 <tr< th=""><th>Table</th><th>des matières</th><th>XIII</th></tr<>	Table	des matières	XIII
16.4.5 Structure de la cuprite Cu ₂ O 223 16.5 Assemblage de polyèdres 224 16.5.1 Octaèdres liés par les sommets 224 16.5.2 Octaèdres liés par une arête 225 16.5.3 Assemblage de polyèdres par une face (NiAs) 226 CHAPITRE 17 • TECHNIQUES SPÉCIALES 228 228 17.1.1 Diffraction par des structures quelconques 228 17.1.2 Intensité diffractée 229 17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène illimité 230 17.1.4 Intensité diffractée par un objet homogène limité 230 17.1.5 Formule de Debye 231 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 232 17.2 EXAFS 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242			
16.4.5 Structure de la cuprite Cu ₂ O 223 16.5 Assemblage de polyèdres 224 16.5.1 Octaèdres liés par les sommets 224 16.5.2 Octaèdres liés par une arête 225 16.5.3 Assemblage de polyèdres par une face (NiAs) 226 CHAPITRE 17 • TECHNIQUES SPÉCIALES 17.1. Diffraction par des structures quelconques 228 17.1.1 Pouvoir diffusant 228 17.1.2 Intensité diffractée 229 17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène illimité 230 17.1.4 Intensité diffractée par un objet homogène limité 230 17.1.5 Formule de Debye 231 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 232 17.2 EXAFS 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Principe et appareillage 237 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.		16 4 4 Structure du graphite	223
16.5. Assemblage de polyèdres 224 16.5.1 Octaèdres liés par les sommets 224 16.5.2 Octaèdres liés par une arête 225 16.5.3 Assemblage de polyèdres par une face (NiAs) 226 CHAPITRE 17 • TECHNIQUES SPÉCIALES 228 228 17.1.1 Diffraction par des structures quelconques 228 17.1.2 Intensité diffractée 229 17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène illimité 230 17.1.4 Intensité diffractée par un objet homogène limité 230 17.1.5 Formule de Debye 231 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 232 17.2 EXAFS 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 <		10.1.1	223
16.5.1 Octaèdres liés par les sommets 224 16.5.2 Octaèdres liés par une arête 225 16.5.3 Assemblage de polyèdres par une face (NiAs) 226 CHAPITRE 17 • TECHNIQUES SPÉCIALES 228 228 17.1.1 Diffraction par des structures quelconques 228 17.1.2 Intensité diffractée 229 17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène illimité 230 17.1.5 Formule de Debye 231 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 232 17.2 EXAFS 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.3.5 Applications 236 17.3.6 Principe et appareillage 237 17.3.7 Principe et appareillage 237 17.3.8 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4	405	Assemblage de polyèdres	224
16.5.2 Octaèdres liés par une arête 225 16.5.3 Assemblage de polyèdres par une face (NiAs) 226 CHAPITRE 17 • TECHNIQUES SPÉCIALES 228 17.1.1 Diffraction par des structures quelconques 228 17.1.2 Intensité diffractée 229 17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène ilimité 230 17.1.4 Intensité diffractée par un objet homogène limité 230 17.1.5 Formule de Debye 231 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 232 17.2 EXAFS 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242	16.5	16 5 1 Octoòdres liés par les sommets	224
CHAPITRE 17 * TECHNIQUES SPÉCIALES 228 17.1 Diffraction par des structures quelconques 228 17.1.1 Pouvoir diffusant 228 17.1.2 Intensité diffractée 229 17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène illimité 230 17.1.5 Formule de Debye 231 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 232 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 240 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 17.4.5 Expériemental et analyse des données 242 17.4.6 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 18.1.4 Exemples d'études de surfaces 242 18.1.5 Cénération des rotations 248 18.1.6 Les notions de base 245 18.1.1 Les repères cristallographiques 245 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.3 Génération des positions équivalentes 249 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 250 18.2 Affinement des structures 251 18.2 Affinement des moindres carrés 251			225
CHAPITRE 17 • TECHNIQUES SPÉCIALES 228 17.1.1 Diffraction par des structures quelconques 228 17.1.2 Intensité diffractée 229 17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène illimité 230 17.1.4 Intensité diffractée par un objet homogène limité 230 17.1.5 Formule de Debye 231 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 232 17.2 EXAFS 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4 Diffraction des rayons X par les surfaces 240 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Exemples d'études de surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 18.1.1 Les repères cristallographiques 245 <			226
17.1. Diffraction par des structures quelconques 228 17.1.1 Pouvoir diffusant 228 17.1.2 Intensité diffractée 229 17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène illimité 230 17.1.4 Intensité diffractée par un objet homogène limité 230 17.1.5 Formule de Debye 231 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 232 17.2 EXAF5 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 17.4.2 Es potions de base 245 18.1.1 Les ropères cristallographiques 245 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.2			
17.1. Diffraction par des structures quelconques 228 17.1.1 Pouvoir diffusant 228 17.1.2 Intensité diffractée 229 17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène illimité 230 17.1.4 Intensité diffractée par un objet homogène limité 230 17.1.5 Formule de Debye 231 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 232 17.2 EXAF5 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 17.4.2 Es potions de base 245 18.1.1 Les ropères cristallographiques 245 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.2	CHAP	ITRE 17 • TECHNIQUES SPÉCIALES	228
17.1.1 Pouvoir diffusant 228 17.1.2 Intensité diffractée 229 17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène ilimité 230 17.1.4 Intensité diffractée par un objet homogène limité 231 17.1.5 Formule de Debye 231 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 232 17.2 EXAFS 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.2 Exemples d'études de surfaces 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 18.1.1 Les robions de base 245			228
17.1.2 Intensité diffractée 229 17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène illimité 230 17.1.4 Intensité diffractée par un objet homogène limité 230 17.1.5 Formule de Debye 231 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 232 17.2 EXAFS 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4.1 Rayons X par les surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 17.4.2 Exemples d'études de surfaces 242 18.1.1 Les repères cristallographiques 245 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.3 Génération des positions équivalentes 249	17.1		228
17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène limité 230 17.1.5 Formule de Debye 231 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 232 17.2 EXAFS 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4.1 Rayons X par les surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 244 18.1 Les notions de base 245 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.3 Génération des positions équivalentes 249 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 250 18.2 Affinement des structures 251			
17.1.4 Intensite diffraction de Debye 231 17.1.5 Formule de Debye 232 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4 Diffraction des rayons X par les surfaces 240 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 17.4.2 Exemples d'études de surfaces 242 18.1.1 Les roères cristallographiques 245 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.3 Génération des positions équivalentes 249 18.2 Affinement des structures 251 18.2.1 Méthode des moindres carrés 251 <		17.1.3 Intensité diffractée par un objet homogène illimité	
17.1.5 Pormule de Debye 232 17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4 Diffraction des rayons X par les surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 244 18.1 Les notions de base 245 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.3 Génération des positions équivalentes 249 18.2 Affinement des structures 251 18.2.1 Méthode des moindres carrés 251		17.1.4 Intensité diffractée par un objet homogène limité	
17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps anospices 234 17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4 Diffraction des rayons X par les surfaces 240 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 17.4.2 Exemples d'études de surfaces 242 17.4.2 Exemples d'études de surfaces 242 17.4.2 Exemples d'études de surfaces 242 18.1 Les notions de base 245 18.1.1 Les repères cristallographiques 245 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.3 Génération des positions équivalentes 249 18.2 Affinement des structures 251			7072/2
17.2.1 Principe 234 17.2.2 Formule de Stern 234 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4 Diffraction des rayons X par les surfaces 240 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 244 18.1 Les notions de base 245 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.3 Génération des positions équivalentes 249 18.2 Affinement des structures 251 18.2.1 Méthode des moindres carrés 251		17.1.6 Diffraction des rayons X par les corps amorphes	232
17.2.1 Frincipe 234 17.2.2 Formule de Stern 235 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4 Diffraction des rayons X par les surfaces 240 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 244 18.1 Les notions de base 245 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.3 Génération des positions équivalentes 249 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 250 18.2 Affinement des structures 251 18.2.1 Méthode des moindres carrés 251	17.2	EXAFS	
17.2.2 Formule de Stein 17.2.3 Dispositif expérimental 235 17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 236 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4 Diffraction des rayons X par les surfaces 240 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 244 18.1 Les notions de base 245 18.1.1 Les repères cristallographiques 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 250 18.2 Affinement des structures 251 18.2.1 Méthode des moindres carrés		17.2.1 Principe = 9000/94/9001780 T3 3008/04/0	
17.2.4 Analyse des spectres EXAFS 235 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4 Diffraction des rayons X par les surfaces 240 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 244 18.1 Les notions de base 245 18.1.1 Les repères cristallographiques 245 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.3 Génération des positions équivalentes 249 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 250 18.2 Affinement des structures 251 18.2.1 Méthode des moindres carrés 251	-	17.2.2 Formule de Stern	
17.2.4 Altalyse des spectres EXATO 17.2.5 Applications 236 17.3 Spectrométrie d'émission, fluorescence X 17.3.1 Principe et appareillage 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4 Diffraction des rayons X par les surfaces 17.4.1 Rayons X et surfaces 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 17.4.3 Structure des surfaces 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 18.1 Les notions de base 18.1.1 Les repères cristallographiques 18.1.2 Représentation des rotations 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 18.2 Affinement des structures 18.2.1 Méthode des moindres carrés			
17.2.5 Applications 237 17.3.1 Principe et appareillage 237 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 238 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4 Diffraction des rayons X par les surfaces 240 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 17.4.1 Es notions de base 245 18.1.1 Les repères cristallographiques 245 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.3 Génération des positions équivalentes 249 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 250 18.2 Affinement des structures 251 18.2.1 Méthode des moindres carrés 251			
17.3.1 Principe et appareillage 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4 Diffraction des rayons X par les surfaces 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 244 18.1 Les notions de base 18.1.1 Les repères cristallographiques 18.1.2 Représentation des rotations 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 250 18.2 Affinement des structures 251 18.2.1 Méthode des moindres carrés		17.2.5 Applications	
17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires 17.3.3 Analyse quantitative 239 17.4 Diffraction des rayons X par les surfaces 240 17.4.1 Rayons X et surfaces 240 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 242 17.4.3 Structure des surfaces 242 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 244 18.1 Les notions de base 245 18.1.1 Les repères cristallographiques 18.1.2 Représentation des rotations 248 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 250 18.2 Affinement des structures 251 18.2.1 Méthode des moindres carrés	17.3	Spectrométrie d'émission, fluorescence X	
17.3.3 Analyse quantitative 17.4 Diffraction des rayons X par les surfaces 17.4.1 Rayons X et surfaces 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 17.4.3 Structure des surfaces 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 17.4.5 Exemples d'études de surfaces 242 CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 18.1 Les notions de base 18.1.1 Les repères cristallographiques 18.1.2 Représentation des rotations 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 18.2 Affinement des structures 18.2.1 Méthode des moindres carrés 239 240 240 240 241 242 242 242 244 245 246 247 247 248 249 249 249 249 249 249 249		17.3.1 Principe et appareillage	
17.4.1 Rayons X et surfaces 17.4.1 Rayons X et surfaces 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 17.4.3 Structure des surfaces 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 17.4.5 Exemples d'études de surfaces 17.4.6 Exemples d'études de surfaces CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 18.1 Les notions de base 18.1.1 Les repères cristallographiques 18.1.2 Représentation des rotations 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 18.2 Affinement des structures 18.2.1 Méthode des moindres carrés		17.3.2 Fluorescences primaires et secondaires	
17.4.1 Rayons X et surfaces 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 17.4.3 Structure des surfaces 17.4.4 Exemples d'études de surfaces 242 CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 18.1 Les notions de base 18.1.1 Les repères cristallographiques 18.1.2 Représentation des rotations 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 18.2 Affinement des structures 18.2.1 Méthode des moindres carrés		17.3.3 Analyse quantitative	
17.4.1 Rayons X et surfaces 17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données 17.4.3 Structure des surfaces 17.4.4 Exemples d'études de surfaces CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 18.1 Les notions de base 18.1.1 Les repères cristallographiques 18.1.2 Représentation des rotations 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 18.2 Affinement des structures 18.2.1 Méthode des moindres carrés	17.4	Diffraction des rayons X par les surfaces	
17.4.2 Dispositi experimental et aliaryse des donnees 17.4.3 Structure des surfaces 17.4.4 Exemples d'études de surfaces CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 18.1 Les notions de base 18.1.1 Les repères cristallographiques 18.1.2 Représentation des rotations 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 18.2 Affinement des structures 18.2.1 Méthode des moindres carrés		17.4.1 Rayons X et surfaces	
17.4.4 Exemples d'études de surfaces CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 18.1 Les notions de base 18.1.1 Les repères cristallographiques 18.1.2 Représentation des rotations 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 18.2 Affinement des structures 18.2.1 Méthode des moindres carrés		17.4.2 Dispositif expérimental et analyse des données	
CHAPITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE 18.1 Les notions de base 18.1.1 Les repères cristallographiques 18.1.2 Représentation des rotations 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 250 18.2 Affinement des structures 18.2.1 Méthode des moindres carrés			
18.1 Les notions de base 18.1.1 Les repères cristallographiques 18.1.2 Représentation des rotations 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 18.2 Affinement des structures 18.2.1 Méthode des moindres carrés 245 245 246 247 248 249 249 249 250 251		17.4.4 Exemples d'études de surfaces	242
18.1 Les notions de base24518.1.1 Les repères cristallographiques24518.1.2 Représentation des rotations24818.1.3 Génération des positions équivalentes24918.1.4 Calcul des facteurs de structure25018.2 Affinement des structures25118.2.1 Méthode des moindres carrés251	CHA	APITRE 18 • CALCULS EN CRISTALLOGRAPHIE	244
18.1.1 Les repères cristallographiques 18.1.2 Représentation des rotations 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 250 18.2 Affinement des structures 18.2.1 Méthode des moindres carrés 245 248 249 250 251			245
18.1.2 Représentation des rotations 18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 18.2 Affinement des structures 18.2.1 Méthode des moindres carrés 248 249 250 251	10.	and the state of t	
18.1.3 Génération des positions équivalentes 18.1.4 Calcul des facteurs de structure 18.2 Affinement des structures 18.2.1 Méthode des moindres carrés 249 250 251			
18.1.4 Calcul des facteurs de structure 18.2 Affinement des structures 18.2.1 Méthode des moindres carrés 250 251			
18.2 Affinement des structures 251 18.2.1 Méthode des moindres carrés 251		18.1.4 Calcul des facteurs de structure	
18.2.1 Méthode des moindres carrés	18.		251
- Carlouc des mondres carres		18.2.1 Méthodo dos maindas acurá	
Les programmes de détermination des structures		18.2.2 Les programmes de détermination des structures	252
18.2.3 Le programme SHELX 253		18.2.3 Le programme SHFLX	

×	Table des ma	atières
	18.3 Exemples de programmes simples	255
	18.3.1 Synthèse de clichés de diffraction	
	18 3.2 Projection etérécorrenbieus	
	18.3.3 Représentation d'une structure	
	18.3.4 Représentation des formes cristallines	250
	EXERCICES ET PROBLÈMES	
ÉN	NONCÉS DES EXERCICES	262
Dans	IONCÉS DES PROBLÈMES	263
	LUTIONS DES EXERCICES	
	LITIONS DES PROPIÈMES	
301		306
	ANNEXES	
ANN	NEXE A • ATLAS DES FORMES CRISTALLOGRAPHIQUES	318
ANN	NEXE B • PROJECTIONS GNOMONIQUE ET ORTHOGRAPHIQUE	348
2.1	Projection gnomonique	348
2.2	Projection frontale	351
2.3	Projection orthogonale	352
ANN	IEXE C • LES 17 GROUPES PLANS	
3.1		354
	Axes de rotation et réseaux plans	354
3.2	Mailles de Bravais	355
3.3	Classes planes	356
3.4	Groupes plans	356
ANN	EXE D • LES 230 GROUPES D'ESPACE	359
ANN	EXE E • PROGRAMMES D'APPLICATION (SITE INTERNET)	362
BIBLI	IOGRAPHIE SHEWANDON AND WAR AN	365
INDE	Les notions de bases	
TOL	X 19. 1. 1. 19. 19. 19. 19. 19. 19. 19. 1	367

SCIENCES SUP

Jean-Jacques Rousseau

CRISTALLOGRAPHIE GÉOMÉTRIQUE ET RADIOCRISTALLOGRAPHIE

Cet ouvrage est destiné aux étudiants de deuxième cycle universitaire de physique, chimie et sciences de la Terre, ainsi qu'aux élèves ingénieurs. La première partie introduit les principes de base de la cristallographie géométrique, par l'étude des réseaux, des opérations de symétrie, du dénombrement et de la construction des groupes ponctuels et des groupes d'espace. La seconde partie, consacrée à la radiocristallographie, décrit la production des rayons X et leurs propriétés, puis présente les principes de la détermination des structures, grâce aux techniques classiques de diffraction et aux méthodes d'interprétation des diagrammes et des clichés obtenus (de Laue, chambres de Bragg, de Weissenberg, de Debye-Scherrer...). Elle aborde enfin les outils informatiques utilisés en cristallographie, ainsi que les particularités de la diffraction des neutrons et des électrons. Le cours se termine par des notions de base de cristallochimie et par la description de quelques structures types. Il est complété par une cinquantaine d'exercices et de problèmes corrigés.

En complément à l'utilisation de ce livre, différents programmes de visualisation (projections stéréographiques des groupes ponctuels et des groupes d'espace, éléments de symétrie dans les cristaux, faciès des cristaux, structures cristallines...) et de simulation (diagrammes de Laue, méthodes du cristal tournant : clichés de Buerger, de Debye-Scherrer, de Weissenberg) sont fournis sur le site Web de l'auteur.

WWW Atlas des formes cristallographiques sur le Web



ISBN 2 10 004902 X Code 044902

JEAN-JACQUES ROUSSEAU est professeur à l'université du Maine (Le Mans).





ET DE LA VIE