

Nous avons programmé en langage FORTRAN II pour IBM 1620 tous les calculs qui sont développés dans ce mémoire. Des applications numériques de correction de profil de diffraction X seront publiées ultérieurement.

C'est grâce aux conseils de Monsieur le Professeur Céa, Directeur du Centre de Calcul Automatique de la Faculté des Sciences de Rennes, que nous avons pu mener à bien ce travail: nous lui exprimons ici notre plus vive reconnaissance.

Références

- ALEXANDER, L. (1948). *J. Appl. Phys.* **19**, 1068.
 ALEXANDER, L. (1950). *J. Appl. Phys.* **21**, 126.
 BRACEWELL, R. N. & ROBERTS, J. A. (1954). *Austr. J. Phys.* **7**, 615.
 BURGER, H. V. & CITTERT, P. H. VAN (1932). *Z. Physik.* **79**, 722.
 CÉA, J. (1968). *Cours d'Anal. Num. 3^e cycle: Optimisation*. Fac. Sci. Rennes.
 CITTERT, P. H. VAN (1931). *Z. Physik.* **69**, 298.
 DURAND, E. (1961). *Solution Numérique des Equations Algébriques*. 2. Paris: Masson et Cie.
 ERGUN, S. (1968). *J. Appl. Cryst.* **1**, 19.
 FOX, T. & GOODWIN, E. J. (1953). *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond.* **A245**, 501.
 HULST, H. C. VAN DE (1941). *Bull. Astr. Inst. Netherl.* **9**, 225.
 JONES, F. W. (1938). *Proc. Roy. Soc. Lond.* **A166**, 16.
 KOCHENDÖRFER, A. (1937). *Z. Kristallogr.* **97**, 469.
 KUKOL, V. V. (1964). *Zavodsk. Lab.* **30**, 441.
 PATERSON, M. S. (1950). *Proc. Phys. Soc. Lond.* **A63**, 477.
 PHILLIPS, D. L. (1962). *J. Ass. Comput. Machin.* **9**, 1, 84.
 PORTEUS, J. O. (1962). *J. Appl. Phys.* **33**, 700.
 ROLLETT, J. S. & HIGGS, L. A. (1962). *Proc. Phys. Soc.* **79**, 87.
 SAKAI, H. (1962). Progress Report. The John Hopkins University.
 SAUDER, W. C. (1966). *J. Appl. Phys.* **37**, 1495.
 SHULL, C. G. (1946). *Phys. Rev.* **70**, 679.
 STOKES, A. R. (1948). *Proc. Phys. Soc. Lond.* **61**, 382.
 TIHONOV, A. N. (1963a). *Dokl. Akad. Nauk.* **151**, 501.
 TIHONOV, A. N. (1963b). *Dokl. Akad. Nauk.* **153**, 49.
 TOURNARIE, M. (1955). *C.R. Acad. Sci. Paris.* **241**, 1923.
 TOURNARIE, M. (1956). *C.R. Acad. Sci. Paris.* **242**, 2016.
 TOURNARIE, M. (1958). *Bull. Soc. Franç. Minér. Crist.* **81**, 278.
 WILSON, A. J. C. (1964). *Théorie Mathématique de la Diffractométrie des Poudres aux Rayons X*. Eindhoven: Centrex.
 YOUNG, R. A., GERDES, R. J. & WILSON, A. J. C. (1967). *Acta Cryst.* **22**, 155.

Acta Cryst. (1969). **A25**, 338

Méthode Directe de Correction des Profils de Raies de Diffraction des Rayons X.

II. Influence de la Fente Réceptrice sur l'Enregistrement d'un Profil de Raie de Diffraction X.

PAR D. LOUËR ET D. WEIGEL

Faculté des Sciences, Laboratoire de Chimie Générale B, 35-Rennes, France

(Reçu le 16 septembre 1968)

The numerical method of deconvolution described in part I is applied to a study of a broadening factor of the diffractometer: the receiving slit. By considering this factor the validity of this direct method of deconvolution, which can also be applied to analytical profiles and to experimental profiles, is verified. These results are compared with those obtained with the Stokes method for the Fourier analysis of line profiles and with those obtained with the Ergun method. An experimental study shows the importance of the divergence of parallelism between the receiving slit and the beam of X-rays.

Introduction

L'emploi, lors de l'enregistrement d'un profil de diffraction X, d'une fente d'analyse d'une certaine largeur, parallèle au faisceau, provoque un élargissement du profil étudié (Alexander, 1950; Wilson, 1964). Cet élargissement ne s'accompagne pas d'un déplacement du centre de gravité. Toutefois, ce paramètre est important, et le choix de la largeur de la fente doit dépendre du rapport entre le fond continu et le maximum du pic de diffraction X et de la précision, ainsi que du pouvoir de résolution (Langford, 1968). Nous décri-

rons, dans ce mémoire, l'influence de la largeur de la fente réceptrice sur le profil, ainsi que la correction de ce profil par les méthodes de déconvolution. Une étude complémentaire sur l'erreur de parallélisme entre la fente d'analyse et le faisceau conduit à des conclusions intéressantes sur le plan expérimental.

La relation existant entre le profil vrai $f(x)$ et le profil expérimental $h(x)$ se traduit mathématiquement par l'équation (1) (mémoire précédent):

$$h(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(y)g(x-y)dy, \quad (1)$$

où $g(x-y)$ est le facteur expérimental, c'est à dire ici la fente réceptrice, définie de la façon suivante:

$$g(x-y) = \begin{cases} 1 & \text{si } -a < x-y < +a \\ 0 & \text{si } x-y < -a \text{ et } x-y > +a. \end{cases}$$

Il est alors aisé de définir les bornes d'intégration de l'équation (1):

$$h(x) = \int_{x-a}^{x+a} f(y) dy. \quad (2)$$

Le problème revient donc à obtenir le vrai profil à partir de l'équation (2). Nous avons effectué cette opération de déconvolution à l'aide de trois méthodes développées respectivement par Louër, Weigel & Louboutin (1969), par Stokes (1948) et par Ergun (1968). La première a été décrite dans le mémoire I. Dans cette étude nous avons utilisé deux procédés voisins, que nous définirons de la façon suivante, pour ne pas alourdir la suite du texte:

Méthode A: l'intégrale (2) est calculée à l'aide de la formule de Simpson.

Méthode B: l'interpolation de $f(y)$ se fait avec des fonctions du type $\frac{\sin \psi_j(y)}{\psi_j(y)}$, en supposant les valeurs $f(y_j)$

identiquement nulles pour y_j à l'extérieur de l'intervalle $[x_1, x_n]$. L'intervalle $[x_1, x_n]$ correspond au domaine de définition du profil $h(x)$. Dans les deux cas nous montrerons la nécessité de la stabilisation.

La méthode de Stokes (1948), basée sur l'analyse de Fourier, a été appliquée telle qu'elle a été décrite par l'auteur, c'est à dire sans considérer le bruit de fond, dont l'importance a été signalée par Tournarie (1958).

La méthode de déconvolution d'Ergun (1968) est basée sur des convolutions successives. Le produit de convolution (1) s'écrit:

$$h = f * g.$$

Ergun définit l'incrément u_n de la façon suivante:

$$u_n = h - (f_n * g)$$

l'itération se terminant par:

$$f_{n+1} = f_n + u_n.$$

On choisit h comme valeur initiale de f . Le calcul des produits de convolution a été fait à l'aide de la formule de Simpson. Nous avons choisi comme critère de convergence la somme des valeurs absolues $S = \sum |u(x)|$. La fonction $g(y)$ est normalisée, c'est à dire dans notre cas:

$$\int_{-a}^a g(y) dy = 1.$$

Pour utiliser cette méthode on doit choisir entre deux options: la première consiste en une application rigoureuse; dans ce cas, nous devons noter qu'à chaque convolution effectuée, le domaine de définition de $f(x)$ est diminué de la valeur a , de chaque côté du profil. Donc, après quelques itérations, si $g(x)$ est large par

rapport à $h(x)$, la réduction de l'intervalle de définition de $f(x)$ peut devenir importante. La deuxième option que propose Ergun permet d'éviter cette réduction à chaque convolution, à l'aide de l'approximation suivante: il suppose que $f(x) = h(x)$ dans les intervalles $x = x_1$ à $x_1 + a$ et $x = x_n - a$ à x_n ; x_1 et x_n étant les bornes de l'intervalle de définition de $h(x)$.

Nous avons programmé en langage FORTRAN II les trois méthodes que nous venons de décrire et effectué les calculs sur un ordinateur IBM 1620.

Déconvolution de profils analytiques

L'utilisation de courbes analytiques permet de mettre en évidence, très facilement, l'élargissement des profils provoqué par une fente d'analyse. La correction mathématique de tels profils élargis est généralement aisée.

(1) Représentation du phénomène: opération de convolution

Soit un profil, représenté par une courbe analytique, et supposé représenter le profil vrai f . Si nous le balayons avec une fente, l'aire interceptée, pour chaque position x_i du milieu de la fente, de largeur $2a$, est proportionnelle à l'intensité et correspond à $h(x_i)$. La surface du profil ainsi délimité est comprise entre les limites $x_i - a$ et $x_i + a$. Afin de bien mettre en évidence le phénomène d'élargissement, nous nous sommes donnés, à titre d'exemple, deux fonctions analytiques f . L'opération de balayage du profil f par une fente revient donc à faire la convolution entre les fonctions f et g , soit $(f * g)$. Dans la suite de ce mémoire, nous appellerons ω la largeur à mi-hauteur, c'est à dire la distance entre les deux points pour lesquels l'intensité du profil tombe à la moitié de la valeur de celle du pic.

Choisissons d'abord, pour la fonction f , un profil gaussien correspondant à la courbe d'erreur:

$$f(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-y^2/2),$$

l'équation (2) devient:

$$h(x) = \int_{x-a}^{x+a} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-y^2/2) dy.$$

A l'aide d'une table donnant les valeurs des fonctions:

$$\varphi = \int_0^r \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-y^2/2) dy,$$

nous avons déterminé les valeurs numériques de $h(x_i)$ pour plusieurs positions de la fente sur le profil. Cette position est déterminée à l'aide de l'abscisse comptée à partir du maximum du profil symétrique. Ce travail a été effectué pour des fentes de largeurs $2a = 0,80; 1,60; 2,00; 3,00$. L'influence de la fente d'analyse sur l'enregistrement du profil est représentée sur la Fig. 1, où la courbe (a) représente le profil vrai f de largeur à mi-hauteur $\omega_f = 2,34$ et les courbes (b), (c), (d), (e)

correspondent aux profils élargis résultant de la convolution ($f * g$). A partir de ces profils, nous avons représenté le pourcentage d'élargissement (à mi-hauteur) en fonction du rapport $p = 2a/\omega_f$ [Fig. 2, courbe (a)].

Pour des raisons pratiques, liées essentiellement à la capacité de l'ordinateur utilisé (IBM 1620) et au développement de la méthode *B*, nous avons choisi comme deuxième exemple pour f , la fonction $f(y) = (1 + 64y^6)^{-1}$. La détermination des aires interceptées par la fente de largeur $2a$, lorsqu'elle balaye le profil a été faite par calcul, en intégrant:

$$h(x) = \int_{x-a}^{x+a} \frac{1}{1 + 64y^6} dy,$$

car il n'existe pas, à notre connaissance, de tables de cette fonction. Le résultat mathématique de cette intégration est le suivant:

$$\begin{aligned} h(x) = & \frac{1}{8\sqrt{3}} [\log |4(x-a)^2 - 2\sqrt{3}(x-a) + 1| \\ & - \log |4(x+a)^2 - 2\sqrt{3}(x+a) + 1| \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} [\arctg (4x + 4a - \sqrt{3}) - \arctg (4x - 4a - \sqrt{3})] \\ & + \frac{1}{6} [\arctg (2x + 2a) - \arctg (2x - 2a)] \\ & + \frac{1}{8\sqrt{3}} [\log |4(x+a)^2 + 2\sqrt{3}(x+a) + 1| \\ & - \log |4(x-a)^2 + 2\sqrt{3}(x-a) + 1| \\ & + \frac{1}{\sqrt{2}} [\arctg (4x + 4a + \sqrt{3}) - \arctg (4x - 4a + \sqrt{3})]. \end{aligned}$$

Le calcul de cette expression, c'est à dire l'obtention des valeurs $h(x_i)$, pour différentes positions x_i de la fente, conduit à la courbe (b) de la Fig. 2.

Les courbes (a) et (b) de la Fig. 2 caractérisent quantitativement l'élargissement des profils résultant de la convolution entre un profil analytique et une fonction 'créneau' g .

(2) Opération de déconvolution de courbes analytiques symétriques

Si nous considérons les profils élargis h calculés au paragraphe précédent, l'opération de déconvolution de ces profils doit reproduire les courbes d'origine, c'est à dire les profils vrais f qui étaient définis par l'une des deux fonctions:

$$f(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-y^2/2) \text{ ou } f(y) = \frac{1}{1 + 64y^6}.$$

Pour cette inversion du produit de convolution, nous avons utilisé la méthode *B* sans stabilisation ($\varepsilon = 0$). Dans ce cas, le système d'équations linéaires n'est plus indéterminé (mémoire I). Cette étude a été faite pour une fente de largeur $2a = 1,00$ et pour des pas de discrétisation θ différents: 0,1; 0,2; 0,3. De ce fait, le nombre de valeurs $h(x_i)$ étant limité à 39 dans les trois cas, pour des raisons de capacité de l'ordinateur utilisé, les 'queues' de courbes sont supprimées à partir des valeurs correspondant respectivement à 18,9%; 0,13% et 0,03% de la valeur du maximum du profil. Les résultats obtenus sont rassemblés dans le Tableau 1. L'importante troncature due au pas $\theta = 0,1$ conduit naturellement à des résultats aberrants. Dans les deux autres cas, les résultats sont très satisfaisants. Nous pouvons noter que les 'queues' de courbe présentent toujours de très légères oscillations, d'amplitude infé-

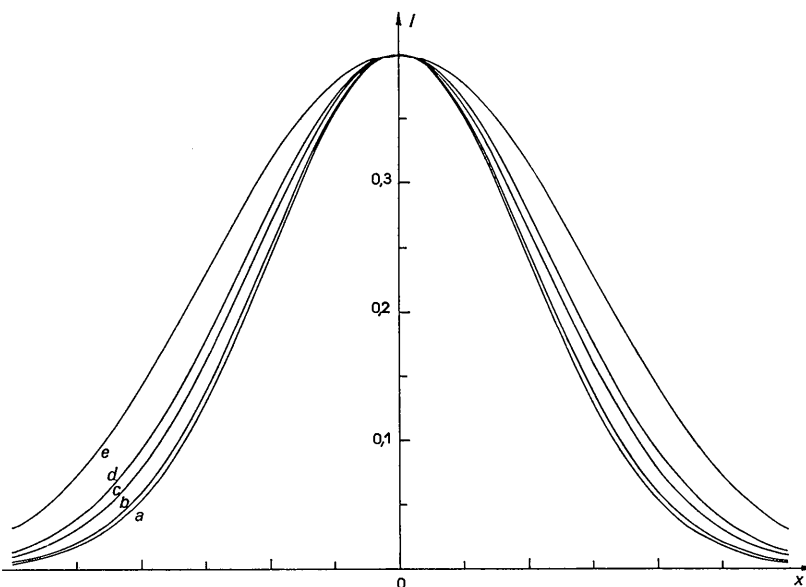


Fig. 1. Influence d'une fente réceptrice sur l'enregistrement d'un faisceau. Le profil (a) est la courbe d'erreur $f(y) = (\sqrt{2\pi})^{-1} \exp(-y^2/2)$, et les courbes (b), (c), (d) et (e) représentent les profils élargis par des fentes de largeurs 0,80; 1,60; 2,00 et 3,00 respectivement.

rière à 10^{-3} . Elles sont dues au mauvais conditionnement du produit de convolution, et non aux approximations faites par l'emploi de formules de quadrature. En effet, si nous considérons un profil constitué par des polynômes du second degré, la formule de Simpson (méthode *A*) représente alors exactement le profil. Dans ce cas, aucune erreur ne se trouve introduite par la formule de quadrature. On remarque cependant, dans le résultat, de légères oscillations sur les 'queues' de courbe. L'expérience montre que lorsque le paramètre de stabilisation ε tend vers zéro, la précision s'améliore sur le 'corps' de courbe, par contre l'amplitude des oscillations sur les 'queues' de courbe a tendance à croître très légèrement, et ceci quelque soit le pas d'interpolation (Louboutin, 1968).

Cette étude montre donc que notre méthode directe de déconvolution s'applique très bien, sans stabilisation, lorsqu'il s'agit de courbes analytiques. Il y a lieu de faire appel à la stabilisation lorsque l'imprécision augmente sur le second membre, c'est à dire sur h . En effet, si nous faisons varier la valeur $h(x_i)$ d'un seul point, d'abscisse x_i , du 'corps' de la courbe, de 2%, le profil obtenu pour $\varepsilon=0$ est catastrophique. Dans ce cas on vérifie qu'une stabilisation de l'opérateur permet de pondérer cette imprécision et conduit ainsi à une solution satisfaisante.

Nous pouvons remarquer que l'inversion de la convolution, lorsqu'il s'agit de profils analytiques, se fait

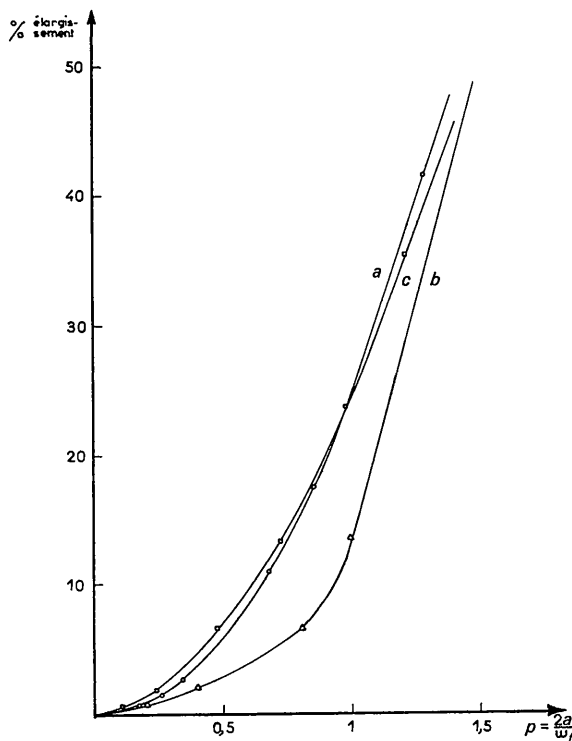


Fig.2. Pourcentage d'élargissement à mi-hauteur d'un profil f en fonction de $p=2a/\omega_f$. (a) Profil gaussien; (b) $f(y)=(1+64y^6)^{-1}$; (c) profil expérimental.

Tableau 1. Valeurs $f(y_i)$ obtenues par notre méthode de déconvolution ($\theta=0,1$; $\theta=0,2$; $\theta=0,3$) et par la méthode de Stokes

Les valeurs exactes sont rassemblées dans la première colonne.

Vraies valeurs de $f(x)$	$\theta=0,1$	$\theta=0,2$	$\theta=0,3$	Méthode de Stokes
0,0003		0,0005		0,0003
0,0004				
0,0006		0,0004	0,0005	0,0007
0,0009				
0,0012		0,0015		0,0013
0,0017			0,0016	
0,0024		0,0024		0,0025
0,0033				
0,0044		0,0045	0,0045	0,0045
0,0060				
0,0079		0,0079		0,0080
0,0104			0,0105	
0,0136		0,0133		0,0136
0,0175				
0,0224		0,0223	0,0221	0,0225
0,0283				
0,0355		0,0358		0,0357
0,0440			0,0438	
0,0540		0,0537		0,0543
0,0656	0,0231			
0,0790	0,0576	0,0793	0,0791	0,0794
0,0941	0,0545			
0,1109	0,1760	0,1107		0,1114
0,1295	0,3883		0,1295	
0,1497	0,2217	0,1498		0,1502
0,1714	0,1409			
0,1942	0,1922	0,1944	0,1943	0,1946
0,2179	0,1931			
0,2420	0,2200	0,2421		0,2423
0,2661	0,2492		0,2660	
0,2897	0,3014	0,2898		0,2899
0,3123	0,3012			
0,3332	0,4322	0,3329	0,3332	0,3333
0,3521	0,6421			
0,3683	0,4733	0,3687		0,3683
0,3814	0,3804		0,3816	
0,3910	0,4174	0,3913		0,3910
0,3970	0,3998			
0,3989	0,3989	0,3989	0,3989	0,3989

aussi bien par la méthode de Stokes (Tableau 1). Les résultats sont tout à fait comparables aux nôtres. Nous avons vérifié que la méthode d'Ergun permettait d'effectuer aisément l'opération de déconvolution d'un profil gaussien.

(3) Opération de déconvolution de 'courbes analytiques dissymétriques'

Pratiquement les courbes expérimentales ne sont ni analytiques, ni symétriques dans la plupart des cas. Afin de mener méthodiquement cette étude, nous allons traiter le cas des 'courbes analytiques dissymétriques'. Un tel profil peut être obtenu en raccordant par leur maximum, deux demi courbes de Gauss, par exemple $h_1(y) = \exp(-y^2/2)$, définie sur les valeurs négatives de y , et $h_2(y) = \exp(-y^2)$, définie sur les valeurs positives de y .

Nous avons utilisé la méthode *B* pour l'inversion du produit de convolution, en stabilisant à l'aide des matrices $({}^tA'A' + \varepsilon I)$ et $({}^tA'A' + \varepsilon M)$ définies dans le mé-

moire I, pour plusieurs valeurs du paramètre régularisant. Les résultats obtenus sont rassemblés sur la Fig. 3 pour plusieurs valeurs de ε . Bien que la fonction $h(x)$ soit composée par des profils analytiques, la stabilisation est indispensable. Alors que pour $\varepsilon=0$, le résultat est aberrant, on voit le profil f prendre une allure physiquement correcte lorsque la valeur de ε augmente. Mais il faut s'assurer que les courbes obtenues vérifient bien les données initiales. C'est pour cette raison que nous comparons, dans le Tableau 2, les précisions suivant le degré de stabilisation, en vérifiant le produit de convolution $(f_{\varepsilon}^* * g) = h_{\nu}$ (mémoire I) pour quelques valeurs de ε (1,5; 2; 5). Nous traduisons cette imprécision par Δ , qui représente le pourcentage d'écart pour chaque valeur, par rapport aux données initiales $h(x_i)$ soit:

$$\Delta\% = \left| \frac{h(x_i) - h_{\nu}(x_i)}{h(x_i)} \cdot 100 \right|.$$

Si nous considérons les trois exemples de stabilisation à l'aide de la matrice $({}^tA'A' + \varepsilon I)$, on constate que l'imprécision augmente avec ε , c'est à dire avec la stabilisation. Ce phénomène s'accompagnant d'une augmentation de la valeur du déterminant δ de cette matrice, nous pouvons augmenter δ , pour une même valeur de ε , en introduisant la matrice M , à l'aide de la matrice $({}^tA'A' + \varepsilon M)$ (mémoire I). Nous pouvons constater dans le Tableau 2 que la précision est meilleure pour $\varepsilon M = 2M$ que pour $\varepsilon I = 2I$, alors que la régularisation du profil f pour $\varepsilon M = 2M$ correspond sensiblement à celle obtenue pour $\varepsilon I = 5I$. Il y aura donc lieu de préférer la stabilisation par εM pour le problème de la déconvolution.

Remarquons que la déconvolution de 'profils analytiques dissymétriques' se fait aussi de façon satisfaisante par la méthode de Stokes (Tableau 2). Quant à la méthode d'Ergun, l'application de l'option 1 est impossible ici, en raison du peu de points caractérisant le profil $h(x)$. Le procédé consistant à donner aux valeurs de $f(x)$ éliminées à chaque itération, les valeurs $h(x)$ correspondantes (option 2) n'a pas conduit à un résultat satisfaisant, probablement en raison de l'importance des valeurs extrêmes de chaque côté du profil.

Déconvolution de profils expérimentaux

(1) Conditions expérimentales

Pour étudier l'influence de la largeur de la fente réceptrice sur un profil de diffraction X, nous avons enregistré la distribution de l'intensité sur la 'ligne' de focalisation d'un monochromateur cylindrique, avec des largeurs de fente différentes. Les caractéristiques techniques du matériel utilisé et des conditions de travail sont les suivantes:

Le générateur de rayons X Siemens est stabilisé et équipé d'un tube micro-foyer linéaire C.G.R. à anticathode de cuivre. Le monochromateur à lame de quartz courbé C.G.R. du type Guinier, est à focalisation dissymétrique (petite distance = 130 mm; grande

distance = 510 mm). Nous avons choisi l'angle de 4° comme angle moyen d'émergence à la sortie du tube à rayons X. Après une étude systématique de la surface de la lame de quartz, seule la partie centrale ($\frac{1}{3}$) a été irradiée. Nous obtenons ainsi la meilleure image et nous réduisons l'importance d'un facteur d'élargissement du profil. En effet, lorsque la lame du monochromateur est totalement irradiée, les rayonnements réfléchis par les parties extrêmes de la lame correspondent à des angles d'émergence β d'environ 7° et 3° respectivement, alors que le centre du monochromateur 'voit' l'anticathode sous l'angle de 5° ; il en résulte un élargissement non négligeable du profil (Langford, 1968). La recherche de conditions optimales de réflexion sur la lame de quartz n'a pas permis d'éliminer totalement la radiation $K\alpha_2$, la proportion résiduelle de $K\alpha_2$ est de l'ordre de 0,8% lorsque le monochromateur est réglé pour réfléchir le rayonnement $K\alpha_1$.

La fente d'analyse, construite à l'Institut de Recherche sur la Catalyse de Villeurbanne, possède des lèvres anti-diffusantes en tantale massif. Son support est représenté dans la Fig. 4. Ses déplacements sont perpendiculaires au faisceau diffracté et sont repérés à 0,01 mm près (b). Elle permet un réglage continu de la largeur $2a$ à partir de la valeur minimale de 7μ (c). Nous avons doté le support de la fente d'un mouvement goniométrique qui permet une rotation des deux lèvres de la fente dans son plan et autour de son centre (d).

La détection se fait à l'aide d'un compteur à scintillation Siemens, thermostatisé par une circulation d'eau. La baie de mesure Siemens est munie d'une discrimina-

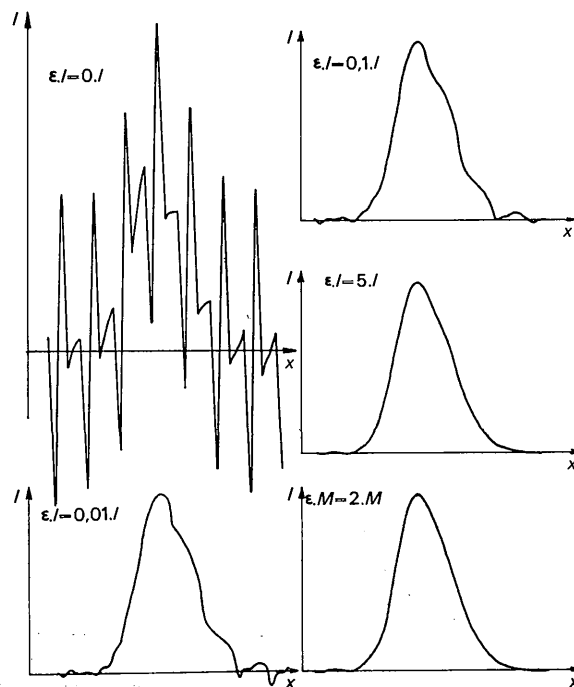


Fig. 3. Exemple de régularisation, lors de la déconvolution d'un profil 'analytique dissymétrique'.

tion de hauteur d'impulsions. Un réglage fin de la discrimination nous a permis de déterminer les conditions optimales de tension du compteur pour avoir la meilleure résolution possible. Les comptages pour les maxima des profils de diffraction avoisinent 10^5 coups. Les points définissant le profil expérimental ont été obtenus en faisant la moyenne de cinq comptages successifs, afin de diminuer l'erreur statistique de comptage. La déconvolution des profils expérimentaux s'est faite après avoir soustrait le fond continu qui se trouve obligatoirement surimposé aux profils $h(x)$.

(2) *Influence de l'erreur de parallélisme*

A l'aide du dispositif goniométrique décrit précédemment, nous avons étudié expérimentalement l'influence de l'inclinaison de la fente dans un plan perpendiculaire au faisceau et par rapport à celui-ci, sur le profil enregistré. Une inclinaison d'un angle α de la fente provoque, en général, un déplacement du maximum du profil et un élargissement de ce dernier. Pour ce travail nous avons utilisé une fente de 20μ .

Si l'on porte sur un graphique la largeur à mi-hauteur ω des profils observés en fonction de l'angle d'inclinaison α , on obtient une courbe du type de celle représentée dans la Fig. 5 [courbe (a)]. On peut constater que, dans notre cas, la position verticale de la fente, notée zéro, n'est pas rigoureusement parallèle au faisceau, l'écart angulaire étant ici de $0,25^\circ$. De plus, l'élargissement du profil croît très vite quand α s'écarte de la position optimale. La position optimale de la fente (α_0) peut se déduire aussi de la courbe (b) (Fig. 5) où nous avons porté la valeur des maxima des profils de diffraction, en fonction de l'angle d'inclinaison α . Il est bien évident que l'influence de l'inclinaison de la fente sera d'autant plus sensible que le pic de diffraction sera fin. Cette série d'expériences permet donc d'amener la fente d'analyse rigoureusement parallèle au faisceau étudié.

Une fois réglé le parallélisme entre la fente d'analyse et le faisceau diffracté, nous avons enregistré, avec un pas de 10μ , le même profil avec des fentes de largeurs différentes: 10, 20, 40, 60, 80 et 100μ . Un enregistre-

Tableau 2. *Influence de la stabilisation sur la déconvolution d'un profil 'analytique dissymétrique'. Comparaison avec la méthode de Stokes*

$h(x)$	$\varepsilon I = 1,5I$		$\varepsilon I = 2I$		$\varepsilon I = 5I$		$\varepsilon M = 2M$		Méthode de Stokes	
	h_v	$\Delta\%$	h_v	$\Delta\%$	h_v	$\Delta\%$	h_v	$\Delta\%$	h_v	$\Delta\%$
0,0000	-0,0011		-0,0001		-0,0004		-0,0009			
0,0001	0,0002		0,0002		0,0002		0,0003		-0,0004	
0,0003	0,0013		0,0012		0,0007		0,0010		0,0007	
0,0011	0,0013		0,0013		0,0011		0,0014		0,0019	
0,0031	0,0026	16,13	0,0025	19,35	0,0026	16,13	0,0025	19,35	0,0032	3,22
0,0079	0,0067	15,18	0,0068	13,92	0,0072	8,86	0,0069	12,65	0,0069	12,65
0,0183	0,0184	0,54	0,0185	1,09	0,0186	1,64	0,0185	1,09	0,0175	4,37
0,0391	0,0404	3,32	0,0403	3,07	0,0399	2,04	0,0404	3,32	0,0396	1,27
0,0773	0,0776	0,38	0,0775	0,25	0,0769	0,51	0,0780	0,90	0,0785	1,55
0,1408	0,1395	0,92	0,1392	1,13	0,1382	1,84	0,1400	0,56	0,1411	0,21
0,2369	0,2344	1,05	0,2341	1,18	0,2326	1,81	0,2356	0,54	0,2355	0,59
0,3678	0,3665	0,35	0,3660	0,49	0,3633	1,22	0,3686	0,21	0,3664	0,38
0,5272	0,5265	0,13	0,5257	0,28	0,5205	1,27	0,5298	0,49	0,5281	0,17
0,6976	0,6942	0,48	0,6928	0,68	0,6843	1,90	0,6989	0,18	0,7000	0,34
0,8521	0,8449	0,84	0,8428	1,09	0,8306	2,52	0,8502	0,22	0,8522	0,01
0,9607	0,9510	1,00	0,9484	1,28	0,9339	2,79	0,9562	0,46	0,9566	0,42
1,0000	0,9928	0,72	0,9904	0,96	0,9767	2,33	0,9990	0,10	0,9998	0,02
0,9814	0,9775	0,39	0,9756	0,59	0,9639	1,78	0,9845	0,31	0,9855	0,41
0,9286	0,9240	0,49	0,9222	0,69	0,9112	1,87	0,9298	0,13	0,9286	0,00
0,8472	0,8411	0,72	0,8392	0,94	0,8288	2,17	0,8459	0,15	0,8446	0,30
0,7448	0,7382	0,88	0,7365	1,11	0,7272	2,36	0,7425	0,30	0,7438	0,13
0,6310	0,6267	0,68	0,6254	0,88	0,6176	2,12	0,6306	0,06	0,6324	0,22
0,5153	0,5138	0,29	0,5128	0,48	0,5068	1,65	0,5170	0,32	0,5167	0,27
0,4057	0,4044	0,32	0,4037	0,49	0,3994	1,55	0,4069	0,29	0,4053	0,10
0,3075	0,3054	0,68	0,3049	0,84	0,3019	1,82	0,3072	0,09	0,3063	0,39
0,2247	0,2224	1,02	0,2220	1,20	0,2200	2,09	0,2237	0,44	0,2242	0,22
0,1582	0,1571	0,69	0,1568	0,88	0,1553	1,83	0,1580	0,12	0,1589	0,44
0,1073	0,1076	0,28	0,1074	0,09	0,1062	1,02	0,1081	0,74	0,1081	0,74
0,0699	0,0702	0,43	0,0702	0,43	0,0695	0,57	0,0707	1,14	0,0699	0,00
0,0441	0,0436	1,13	0,0436	1,13	0,0434	1,58	0,0439	0,45	0,0431	2,26
0,0266	0,0258	3,00	0,0258	3,00	0,0259	2,63	0,0260	2,25	0,0261	1,88
0,0156	0,0152	2,56	0,0152	2,56	0,0151	3,20	0,0153	1,92	0,0160	2,56
0,0087	0,0092	5,74	0,0091	4,59	0,0088	1,15	0,0091	4,59	0,0095	9,19
0,0049	0,0053	8,16	0,0052	6,12	0,0050	2,04	0,0052	6,12	0,0049	0,00
0,0026	0,0025	3,84	0,0025	3,84	0,0025	3,84	0,0025	3,84	0,0019	26,92
0,0013	0,0010		0,0010		0,0011		0,0010		0,0008	
0,0005	0,0001		0,0002		0,0003		0,0002		0,0008	
0,0002	0,0005		0,0005		0,0002		0,0004		0,0008	
0,0000	0,0002		0,0002		0,0001		0,0002		0,0002	

ment correspondant au faisceau réel pour une fente infiniment fine, il est possible de déterminer rigoureusement la largeur du profil vrai f par extrapolation pour $2a$ tendant vers zéro. Pour cela, portons la largeur à mi-hauteur ω , des profils expérimentaux, en fonction de la largeur de la fente $2a$ (Fig. 6); par extrapolation on déduit la largeur ω_f du profil vrai f , soit ici $\omega_f=82,5\mu$.

Il est alors possible de déterminer le pourcentage d'élargissement en fonction de p (Tableau 3), ce qui conduit à une courbe représentée dans la Fig. 2 [courbe (c)], du même type que celles obtenues avec des profils analytiques.

Tableau 3. Pourcentage d'élargissement à mi-hauteur en fonction de la largeur de la fente, $2a$, pour un profil expérimental (I) et pour un profil gaussien (II)

$2a(\mu)$	$\omega(\mu)$	I	II
100	111,5	35,15	38,2
80	102	23,63	24,4
60	93,5	13,33	12,8
40	88	6,66	4,9
20	84	1,81	1,3
10	83	0,60	0,4

(3) Déconvolution des profils expérimentaux

L'opération de déconvolution des profils expérimentaux, enregistrés avec des fentes d'analyse de largeurs différentes, doit donner le profil vrai $f(x)$ ayant pour

largeur à mi-hauteur $\omega_f=82,5\mu$. Cette inversion du produit de convolution a été faite à l'aide de la méthode A , de la méthode de Stokes et de la méthode d'Ergun. Nous avons associé à la méthode A la stabilisation par la matrice $({}^tA'A' + \varepsilon M)$. En ce qui concerne la déconvolution par la méthode d'Ergun, nous avons utilisé l'option 2 pour la correction des trois profils enregistrés avec des fentes de largeurs 100, 80 et 60μ , car l'option 1 aurait nécessité de connaître les profils sur un intervalle beaucoup plus grand. Le profil enregistré avec une fente de largeur 20μ a été corrigé à l'aide de l'option 1.

Dans le Tableau 4 nous donnons toutes les valeurs numériques correspondant à un exemple de déconvolution: il s'agit de la déconvolution du profil enregistré avec une fente de 60μ , effectuée par les méthodes A (I), de Stokes (III) et d'Ergun (II). Les profils déconvolués correspondants sont représentés dans les Figs. 7 et 8. Les valeurs $h(x_i)$ ont été divisées par 10^5 ; ceci n'affecte pas la forme du profil résultant, mais seulement sa hauteur. Les vérifications $h_v(x_i)$ ont été faites à l'aide des équations suivantes:

$$h_v(x_i) = A' \cdot f(y_j) \text{ pour la méthode } A \text{ (mémoire I)}$$

et

$$h_v(x_i) = \sum_{x-a}^{x+a} f(y_j) \text{ pour la méthode de Stokes.}$$

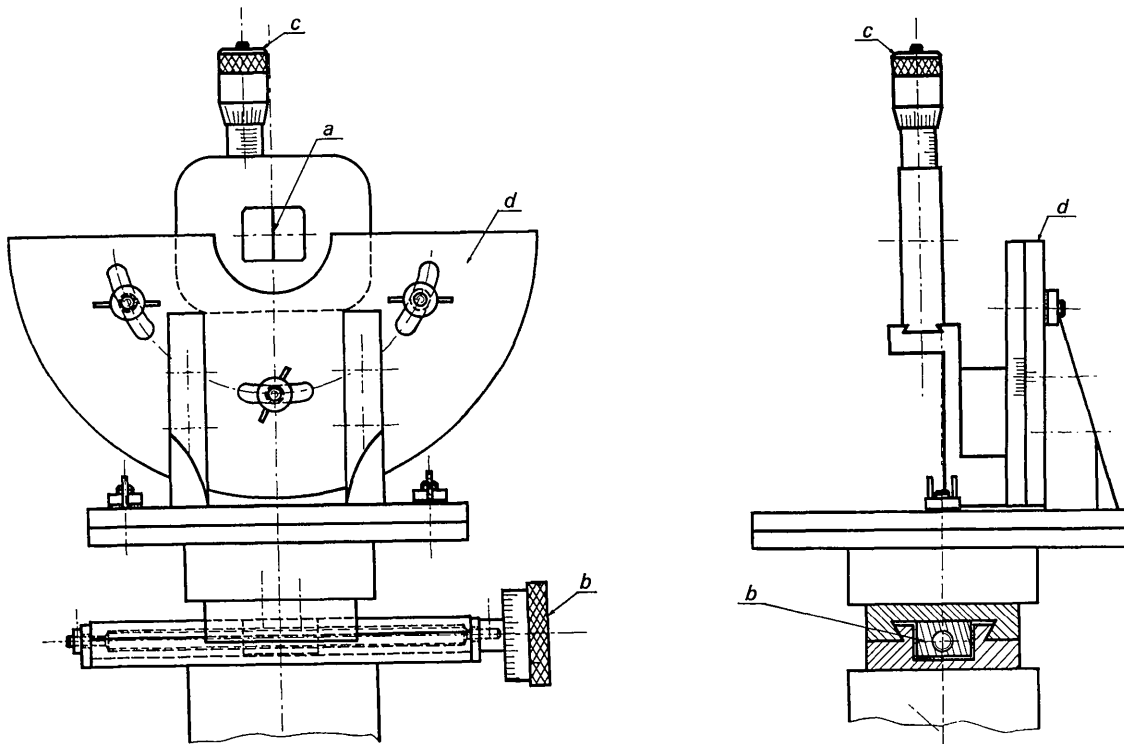


Fig. 4. Support de la fente d'analyse (vues de face et de profil). a , Fente d'analyse; b , déplacement de la fente perpendiculairement au faisceau; c , réglage de la largeur de la fente; d , dispositif permettant l'inclinaison de la fente.

Les expressions de Δ pour ces deux méthodes ont été définies précédemment. Pour la méthode d'Ergun, nous appelons Δ l'expression suivante:

$$\Delta = \left| \frac{u(x_i) \cdot 100}{h(x_i)} \right|,$$

l'incrément $u(x_i)$ ayant été défini au début de ce mémoire.

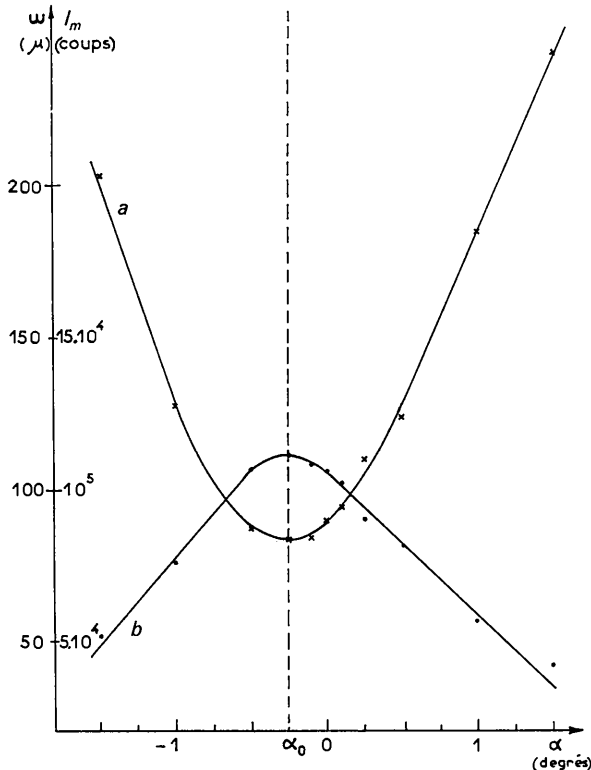


Fig. 5. Influence de l'erreur de parallélisme entre la fente d'analyse et le faisceau. Largeur à mi-hauteur ω (a) et intensité du maximum (b) des profils enregistrés en fonction de l'angle d'inclinaison α .

De tels résultats s'obtiennent avec tous les profils expérimentaux. Les Figs. 7, 8, 9 et 10 permettent une comparaison de notre méthode avec celle de Stokes d'une part (Figs. 7, 9 et 10) et avec celle d'Ergun d'autre part (Figs. 8, 9 et 10). Dans tous les cas les profils sont ramenés à la même échelle. Les profils vrais obtenus sont comparés au profil expérimental enregistré avec une fente de largeur de 10μ (Figs. 7, 8 et 9), car on peut considérer qu'il est très proche du profil réel; l'élargissement à mi-hauteur étant de 0,6% seulement (Tableau 3).

On constate que les résultats obtenus par notre procédé direct de déconvolution répondent au problème physique. Les profils f sont très proches du profil enregistré avec une fente de 10μ ; leur largeur à mi-hauteur avoisine bien $82,5\mu$ (Tableau 5). Dans tous les cas, l'imprécision sur le 'corps' de la courbe est inférieure à 1%.

La méthode de Stokes conduit à des résultats présentant souvent de nombreuses oscillations, sans signification physique. Il ressort du Tableau 5 que cette méthode réduit trop les profils expérimentaux $h(x)$ et d'une façon générale, d'autant plus que la fonction $g(x)$, c'est à dire la fente réceptrice, est large. On constate sur les Figs. 7 et 9 que les profils $f(x)$ ne répondent pas au problème physique.

Les profils $f(x)$ obtenus par la technique développée par Ergun manquent de régularité en général, certaines déformations apparaissent même sur les sommets des profils (Figs. 8 et 9). Toutefois, les largeurs à mi-hauteur s'écartent peu de la valeur $82,5\mu$. Dans la plupart des exemples, nous avons observé une diminution de la somme $S = \sum |u(x)|$ jusqu'à la cinquième itération environ; ensuite S diverge. Les différents résultats obtenus avec cette méthode correspondent donc à la valeur minimale de S .

Les précisions figurant dans le Tableau 4 sont données à titre indicatif, elles montrent que les vérifications effectuées à partir des solutions $f(x)$ sont bien en accord avec les données initiales. Toutefois, elles ne sont pas le seul critère permettant de choisir telle solution plutôt

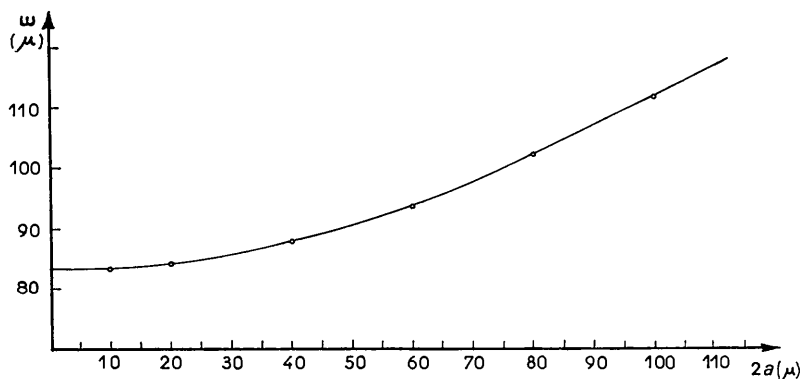


Fig. 6. Largeur à mi-hauteur ω du profil expérimental en fonction de la largeur de la fente $2a$.

qu'une autre. En effet, à un résultat aberrant (par exemple Fig.3, $\varepsilon=0$) peut correspondre une précision excellente. Les résultats représentés sur la Fig.3 nous montrent qu'il est nécessaire de considérer aussi la régularité du profil. Ainsi la précision correspondant à la méthode de Stokes est relativement bonne (Tableau 4), alors que le profil n'est pas une solution du

problème physique (cf. Tableau 5: largeur à mi-hauteur 75μ , au lieu de la valeur attendue $82,5\mu$).

En remarque, nous pouvons noter que le calcul des dimensions du foyer thermique du tube à rayons X, d'après le profil vrai, conduit à une largeur de foyer deux à trois fois plus importante que celle annoncée par le constructeur. Ceci est probablement dû à des

Tableau 4. Exemple numérique de déconvolution d'un profil expérimental $h(x)$, enregistré avec une fente d'analyse de largeur $2a=60\mu$, par notre méthode (I), celle d'Ergun (II) et celle de Stokes (III)

$h(x_i)$	I		II		III	
	$f(y_j)$	$\Delta\%$	$f(y_j)$	$\Delta\%$	$f(y_j)$	$\Delta\%$
	0,00029					
	0,00029					
	0,00030					
0,001796	0,00029	0,20				
0,001900	0,00028	0,43				
0,002000	0,00030	0,17				
0,002130	0,00036	0,87	0,00031	2,35		
0,002340	0,00039	0,59	0,00037	0,78		
0,002560	0,00042	0,80	0,00045	2,17		
0,002826	0,00048	0,73	0,00048	0,56		
0,002925	0,00046	1,19	0,00044	1,29		
0,003395	0,00055	1,59	0,00059	1,56		
0,003567	0,00054	1,77	0,00053	1,49		
0,004090	0,00066	0,03	0,00063	1,04		
0,004707	0,00077	0,58	0,00078	1,67		
0,005385	0,00082	0,73	0,00087	1,12		
0,006250	0,00099	1,03	0,00095	1,23		
0,007402	0,00124	0,04	0,00111	2,40		
0,008545	0,00125	1,86	0,00138	1,12	-0,00251	
0,010585	0,00165	1,92	0,00194	3,67	-0,00153	
0,011715	0,00202	1,06	0,00169	2,51	0,00056	36,34
0,013972	0,00237	0,95	0,00207	2,00	0,00262	7,51
0,016827	0,00250	1,43	0,00287	2,04	0,00364	6,25
0,019737	0,00304	0,38	0,00318	0,19	0,00337	2,94
0,023047	0,00369	1,38	0,00351	0,78	0,00244	2,43
0,027590	0,00434	0,16	0,00462	2,11	0,00188	0,55
0,033037	0,00548	0,47	0,00529	0,25	0,00240	2,11
0,037680	0,00618	1,17	0,00517	4,22	0,00396	2,46
0,047140	0,00744	1,18	0,00786	0,21	0,00591	1,90
0,054952	0,00801	0,21	0,00943	1,84	0,00745	0,51
0,066705	0,01061	0,00	0,01096	0,43	0,00828	0,95
0,078832	0,01280	0,79	0,01114	1,42	0,00872	1,92
0,102150	0,01559	0,07	0,01498	1,37	0,00951	0,80
0,133665	0,01766	0,04	0,01895	2,45	0,01137	0,08
0,185430	0,02456	0,53	0,02461	0,01	0,01480	1,00
0,252270	0,03416	0,72	0,03168	1,62	0,02021	1,53
0,358430	0,05136	0,18	0,05331	0,38	0,02841	1,12
0,473100	0,07079	0,42	0,07383	0,35	0,04072	0,61
0,616367	0,10432	0,27	0,10059	0,98	0,05852	0,72
0,736162	0,12866	0,58	0,12193	1,42	0,08213	1,37
0,870375	0,15495	0,67	0,16361	1,23	0,10961	1,25
0,931090	0,16829	0,20	0,17623	1,19	0,13637	0,05
0,945727	0,18038	0,02	0,17252	0,60	0,15611	0,23
0,896377	0,17002	0,14	0,16011	0,94	0,16294	0,84
0,812312	0,14460	0,46	0,15083	1,11	0,15390	0,69
0,678222	0,11273	0,40	0,12197	1,46	0,13051	0,79
0,523085	0,08390	0,23	0,08103	1,29	0,09848	0,30
0,379545	0,05634	0,86	0,04986	3,04	0,06568	1,06
0,264127	0,03264	0,92	0,03358	0,46	0,03907	0,49
0,180007	0,02012	0,00	0,02332	2,16	0,02227	1,53
0,117235	0,01401	0,46	0,01291	0,18	0,01473	0,69
0,082915	0,01179	2,44	0,01152	2,32	0,01285	2,06
0,060195	0,00977	2,69	0,01064	6,47	0,01233	2,62
0,041107	0,00742	4,36	0,00579	0,93	0,01032	5,63
0,030947	0,00505	3,07	0,00399	6,08	0,00645	3,62
0,022612	0,00176	1,95	0,00288	4,46	0,00225	2,08
0,017562	0,00105	0,24	0,00242	0,84	-0,00030	5,46

Tableau 4 (suite)

0,014747	0,00195	7,40	0,00254	4,10	-0,00036	13,94
0,012017	0,00257	3,84	0,00197	2,62	0,00140	4,99
0,010380	0,00294	3,90	0,00147	2,95	0,00331	6,20
0,009047	0,00199	6,59	0,00122	3,38	0,00388	15,37
0,008782	0,00060	1,65	0,00152	2,43	0,00274	9,42
0,008230	0,00015	3,12			0,00076	1,86
0,007705	0,00098	3,24			-0,00068	24,25
0,007667	0,00177	1,85			-0,00073	73,54
	0,00208					
	0,00180					
	0,00172					

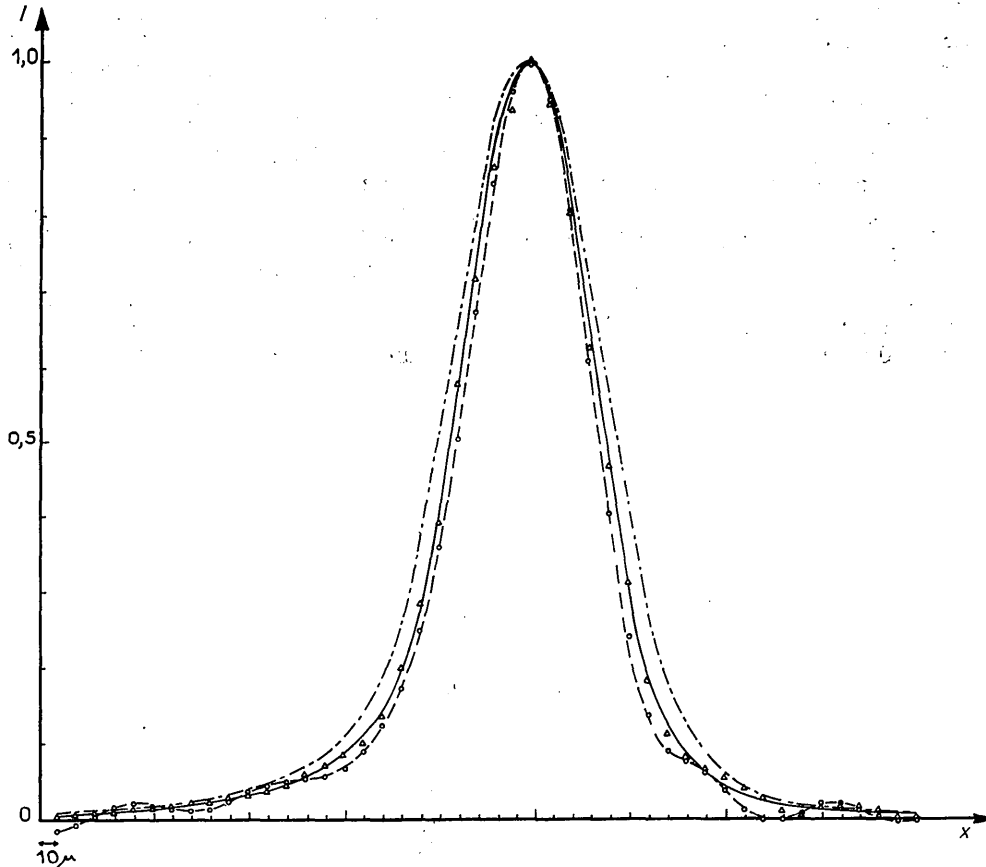


Fig. 7. Déconvolution d'un profil expérimental enregistré avec une fente de 60μ . ----- $h(x)$; ——— profil expérimental enregistré avec une fente de 10μ ; -○-○-○- $f(x)$ obtenu par la méthode de Stokes; Δ $f(x)$ obtenu par notre méthode ($\epsilon=5$).

facteurs d'élargissement autres que la fente réceptrice, par exemple le monochromateur.

Conclusions

Ce travail nous a permis de tester la méthode directe de déconvolution proposée dans le mémoire I, et de la comparer aux méthodes de Stokes et d'Ergun. L'aspect strictement expérimental a, en outre, conduit à des conclusions pratiques intéressantes.

L'opération de déconvolution, par cette méthode, de profils analytiques symétriques, où l'imprécision est

seulement due aux erreurs d'arrondi, se fait très facilement; le mauvais conditionnement de l'équation (1) n'apparaît pas (Tableau 1). Il intervient lorsque le profil analytique est dissymétrique. Dans ce dernier cas, le procédé de stabilisation permet d'obtenir une solution satisfaisante. La Fig. 3 montre clairement l'influence du paramètre régularisant ϵ . La déconvolution de ces profils analytiques par les méthodes de Stokes et d'Ergun conduit à des résultats équivalents.

La correction des profils expérimentaux conduit à des résultats différents suivant les procédés utilisés, sauf lorsque la fonction $g(x)$ est étroite par rapport au

Tableau 5. Comparaison des largeurs à mi-hauteur des profils $f(x)$ obtenus par notre méthode (I) et par la méthode de Stokes (II)

$2a(\mu)$	I		II	
	ε	$\omega_f(\mu)$	$\omega_f(\mu)$	
100	5	84	—	
80	5	82,5	74,5	
60	5	82	75	
40	5	83	80	
20	1	82,5	82	

profil $h(x)$, c'est à dire lorsque l'élargissement instrumental est très faible (Fig. 10).

L'opération de déconvolution de profils expérimentaux par notre méthode nécessite absolument l'application du procédé de stabilisation. En effet, à une certaine dissymétrie du profil, s'ajoute une erreur expérimentale, liée à divers phénomènes: le bruit de fond, une mauvaise estimation du fond continu, une erreur sur le pas lors de l'enregistrement d'un profil. Or nous avons vu qu'une fluctuation de 2% sur la valeur d'un seul point d'un profil analytique conduisait à des résultats aberrants. L'introduction de la technique de stabilisation, permettant une pondération de l'imprécision expérimentale, donne une solution qui converge

vers la solution cherchée. Les divers profils enregistrés avec des fentes de largeur variable ont redonné sensiblement le même profil vrai $f(x)$, après déconvolution (Figs. 7 et 9).

La méthode de Stokes nous a donné, dans la plupart des cas, des résultats incohérents (Tableau 5); ils doivent être imputés à diverses causes, telles que le bruit de fond (Tournarie, 1958), la troncature, qui était, dans cette étude, de l'ordre de 1% par rapport au maximum du profil (Young, Gerdes & Wilson, 1967).

L'application à quelques profils expérimentaux de la méthode directe de déconvolution proposée par Ergun, montre qu'au résultat satisfaisant obtenu lorsque la fonction $g(x)$ est étroite par rapport au profil $h(x)$ (Fig. 10), s'associe une convergence rapide du procédé itératif. Dans les autres cas, on observe une diminution de S pendant quatre à cinq itérations, puis une augmentation. Il semblerait donc que le procédé itératif d'Ergun ne 'converge' pas dans tous les cas. En conséquence, le résultat le plus précis est obtenu pour la valeur minimale de S . C'est là une limitation par rapport à la méthode que nous proposons; il n'est pas possible, en effet, d'obtenir une meilleure précision que celle que nous impose le résultat correspondant au minimum de S . D'autre part, l'imprécision sur le

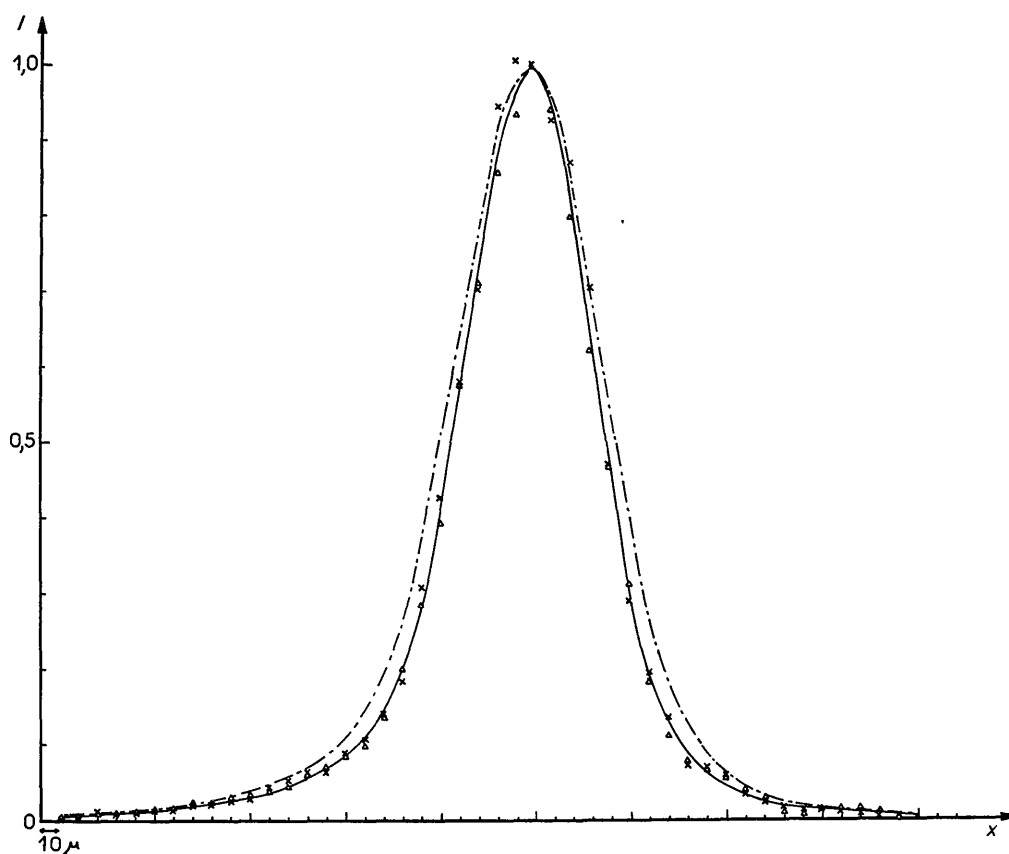


Fig. 8. Déconvolution d'un profil expérimental enregistré avec une fente de 60μ ; ----- $h(x)$; ——— profil expérimental enregistré avec une fente du 10μ ; \times $f(x)$ obtenu par la méthode d'Ergun; \triangle $f(x)$ obtenu par notre méthode ($\varepsilon=5$).

'corps' du profil est souvent supérieure à l'erreur expérimentale: dans plusieurs cas (Figs. 8 et 9) le résultat s'écarte du profil attendu, notamment vers le maximum de la courbe. D'ailleurs, l'application rigoureuse de cette méthode (option 1) est délicate, car elle nécessite la connaissance du profil $h(x)$ très loin de son maximum, en raison de la réduction de l'intervalle de définition de $f(x)$ à chaque itération. Ce facteur augmente donc le temps nécessaire à l'enregistrement expérimental des profils par rapport à la méthode originale que nous proposons. On peut penser que lorsqu'on utilise l'option 2, le fait d'imposer les valeurs extrêmes de f_n à chaque convolution risque d'avoir une influence regrettable sur le résultat (Figs. 8 et 9).

L'aspect strictement expérimental de cette étude a montré l'influence de l'erreur de parallélisme entre la fente d'analyse et le faisceau. Ce facteur est d'autant plus important que le profil enregistré est dissymétrique. Dans ces conditions, une inclinaison d'un angle α provoque un déplacement du maximum du pic, associé à un élargissement du profil. Il ne faudra donc pas négliger ce facteur, lors du réglage de la géométrie du diffractomètre, par exemple, en vue de la détermination précise des distances réticulaires. Si la distri-

bution de l'intensité est gaussienne, on vérifie aisément que l'élargissement provoqué par une inclinaison de la fente, conduit à des courbes analogues à celles de la Fig. 4. Par contre, dans ce cas, aucun déplacement du paramètre de position n'est observé, en raison de la symétrie du profil. En réalité, les profils expérimentaux s'écartent de cette hypothèse: en effet, si l'on compare les pourcentages expérimentaux d'élargissement à mi-hauteur, à ceux obtenus à partir d'un profil vrai f gaussien, de largeur à mi-hauteur $\omega_f = 82,5\mu$ (Tableau 3) on constate que les résultats expérimentaux s'écartent de ceux correspondant à l'hypothèse gaussienne (Fig. 2). Bien que certains facteurs expérimentaux contribuent à rendre asymétrique le profil $K\alpha_1$, il est certain, de toutes façons, que l'hypothèse représentant la distribution $K\alpha_1$ par un profil gaussien, ou même du type $(1+k^2x^2)^{-1}$, est approchée (Backovsky & Bednar, 1967).

En résumé, ce travail, basé sur l'étude d'un facteur géométrique, nous a montré que la déconvolution des profils analytiques s'effectuait aisément quelque soit le procédé employé; par contre la déconvolution de profils expérimentaux est soumise au mauvais conditionnement de l'équation (1), engendrant des solutions diverses suivant les méthodes utilisées, ou suivant le degré

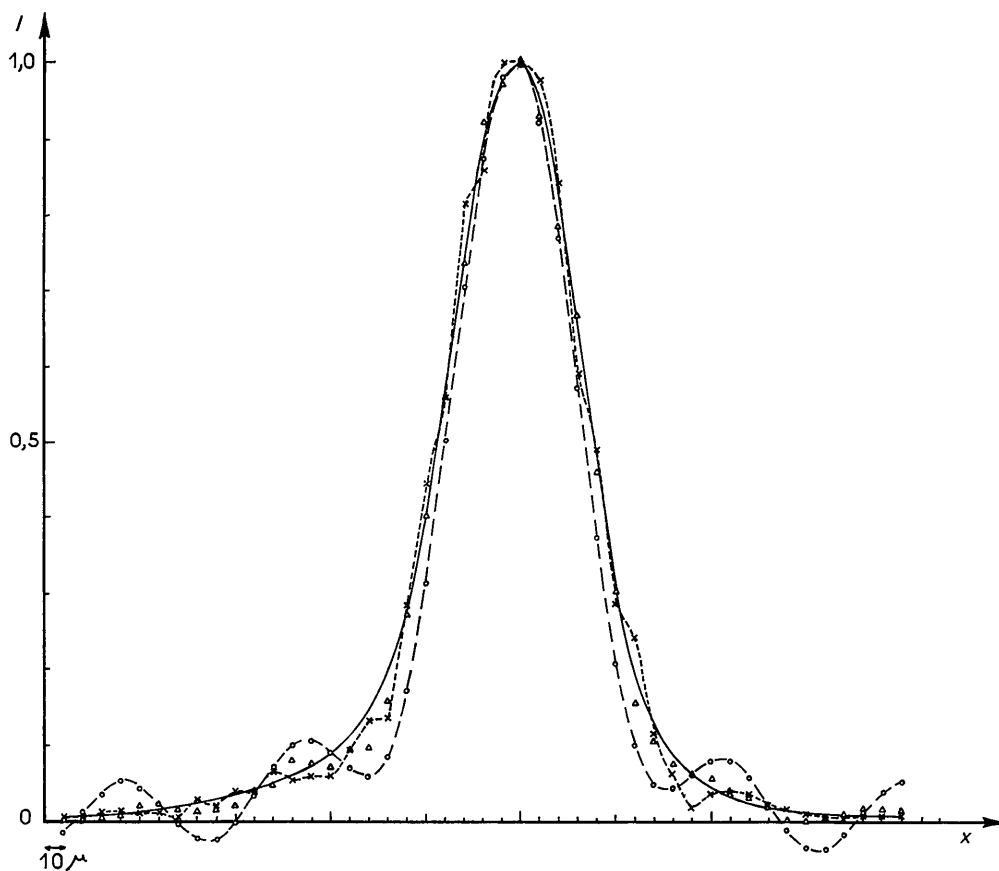


Fig. 9. Déconvolution d'un profil expérimental enregistré avec une fente de 80μ . --- profil expérimental enregistré avec une fente de 10μ ; -○-○-○- $f(x)$ obtenu par la méthode de Stokes; ×-×-×- $f(x)$ obtenu par la méthode d'Ergun; △ $f(x)$ obtenu par notre méthode ($\epsilon=5$).

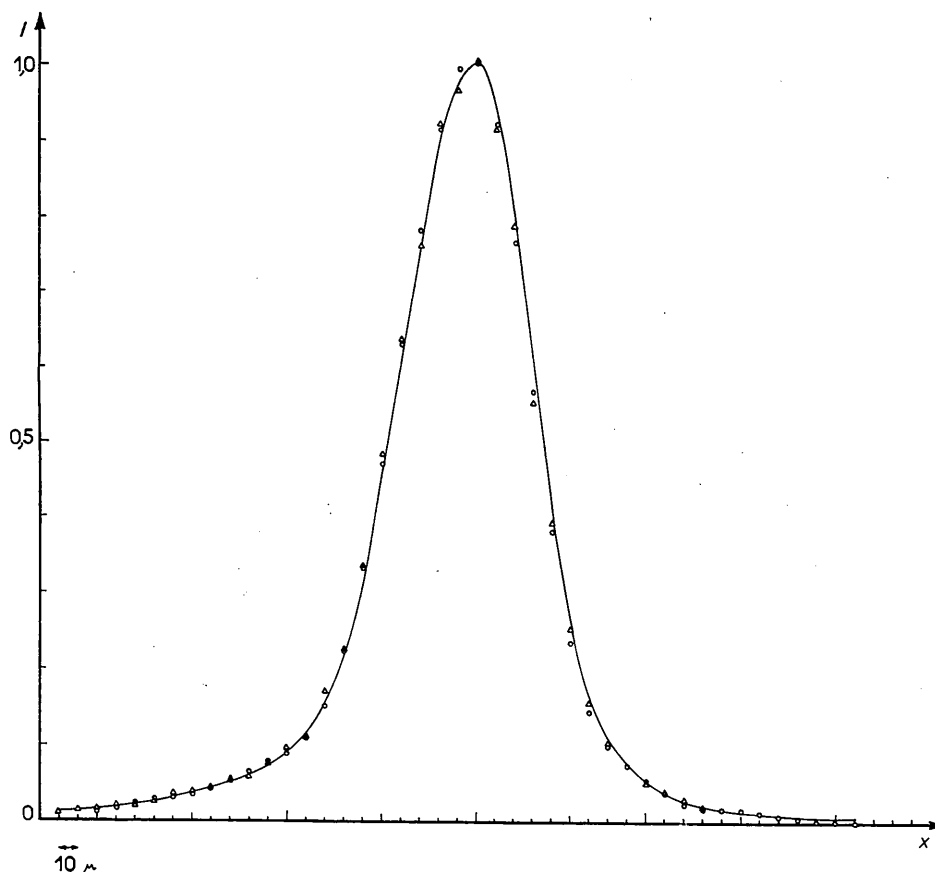


Fig. 10. Déconvolution d'un profil expérimental enregistré avec une fente de 20μ . $f(x)$ obtenu par notre méthode ($\varepsilon=1$); $\circ f(x)$ obtenu par la méthode de Stokes; $\triangle f(x)$ obtenu par la méthode d'Ergun.

de stabilisation pour notre méthode. Une certaine cohérence intervient seulement, entre ces différents procédés, lorsque le profil $h(x)$ est très large par rapport à $g(x)$, c'est à dire lorsque l'élargissement des raies dû à l'appareil est petit devant celui que l'on cherche à mesurer. Dans les autres cas, nous avons vu que la méthode de Stokes n'a pas conduit aux résultats attendus. Celle d'Ergun a permis d'obtenir des solutions proches du profil réel f , mais présentant souvent des anomalies aux alentours du maximum, et correspondant généralement à une imprécision plus grande qu'avec la méthode originale que nous proposons. Nous pouvons noter qu'un des avantages de la méthode développée dans le mémoire I, c'est que la technique de stabilisation, permettant une pondération de l'erreur expérimentale, régularise le résultat. Il a été, en effet, montré qu'il était souvent nécessaire de procéder à un lissage des données expérimentales avant d'utiliser la méthode de Stokes, si l'on ne voulait pas obtenir un résultat aberrant (Tournarie, 1958). L'obtention d'une gamme de solutions f_g^* permet de choisir le profil définitif en fonction de la régularité et de la précision, cette dernière étant comprise à l'intérieur de l'intervalle de confiance fixé par l'expérience. En pratique, l'obtention de trois à quatre solutions f_g^* semble suffire pour

obtenir le meilleur résultat. D'autre part, la mise en application de notre méthode, à l'aide d'un ordinateur électronique, est aisée, surtout si l'on choisit la formule de Simpson pour opérer la quadrature.

Nous remercions Monsieur M. Lemoine pour sa collaboration efficace dans l'enregistrement des profils de raies de diffraction X de cette étude.

References

- ALEXANDER, L. (1950). *J. Appl. Phys.* **21**, 126.
 BACKOVSKY, J. & BEDNAR, J. (1967). *Cesk. Casopis Fys.* **17**, (1) 107.
 ERGUN, S. (1968). *J. Appl. Cryst.* **1**, 19.
 LANGFORD, J. I. (1968). *J. Appl. Cryst.* **1**, 48.
 LOUBOUTIN, R. (1968). Communication personnelle.
 LOUËR, D., WEIGEL, D. & LOUBOUTIN, R. (1969). *Acta Cryst.* **A25**, 335.
 STOKES, A. R. (1948). *Proc. Phys. Soc. Lond.* **61**, 382.
 TOURNARIE, M. (1958). *Bull. Soc. franç. Minér. Crist.* **81**, 278.
 WILSON, A. J. C. (1964). *Théorie mathématique de la Diffraction des Poudres aux Rayons X*. Eindhoven: Centrex.
 YOUNG, R. A., GERDES, R. J. & WILSON, A. J. C. (1967). *Acta Cryst.* **22**, 155.