

## CONTRIBUTION A L'ADAPTATION DU SYSTEME CRYSTAN SUR L'IRIS 55

M. ABENE, A. YACOUBI, A. BIZID et A. KALLEL  
Faculté des Sciences, Département de Physique  
Campus Universitaire, 1002 Le Belvédère - Tunis (TUNISIE)

### RESUME :

CRYSTAN est un système de programmes cristallographiques, rédigé en FORTAN IV pour les miniordinateurs. Sa structure en cinq blocs de programmes quasi-indépendants et assez simples ont déterminé notre choix pour ce système. Les deux blocs "méthodes de FOURIER" et "affinement par moindres carrés" ainsi qu'une grande partie du bloc "préparation des données" ont été adaptés et implantés sur l'ordinateur IRIS 55 du CIRIA de Tunis. Les différentes étapes de ce travail, les difficultés rencontrées et les résultats obtenus sur divers exemples d'application et de contrôle sont décrits dans ce travail.

### I. / INTRODUCTION

La détermination des structures cristallines à partir des milliers d'intensités de réflexion mesurées nécessite, de nos jours, l'utilisation du calcul sur ordinateur. Plusieurs systèmes de calculs cristallographiques existent actuellement (X-RAY, SDP, SHELX, NCR, ...) mais la plupart nécessitent de très gros ordinateurs.

Le système CRYSTAN, rédigé par BURZLAFF et al. (1977-1978) à l'Université d'Erlangen (R.F.A.) correspond à la taille de notre ordinateur et est particulièrement simple. En outre, il est complet et peut résoudre des structures assez complexes et même de petites protéines.

Pour cela, nous avons choisi d'adapter et d'implanter ce système sur l'ordinateur IRIS 55 du Centre de Calcul (CIRIA) du Campus Universitaire de Tunis.

Nous présentons, dans cet article, les différentes étapes de ce travail ainsi que les difficultés rencontrées et les résultats obtenus sur divers exemples de contrôle. De plus amples détails sont disponibles dans les mémoires de M M. ABENE (1982) et YACOUBI (1982) présentés à la Faculté des Sciences de Tunis.

### II. / BREFS RAPPELS SUR LA DETERMINATION DES STRUCTURES

A l'aide d'un diffractomètre à quatre cercles, on collecte les intensités  $I(\vec{H})$  des réflexions diffusées par un monocristal du matériau étudié ( $\vec{H}$  est un vecteur de diffusion correspondant à un triplet hkl de MILLER). Les intensités sont ensuite corrigées des effets géométriques et physiques (bruit de fond continu, absorption, polarisation, effet cinématique de LORENTZ) et mises à une même échelle.

En général, le facteur de structure  $F(\vec{H})$  d'une réflexion (caractérisée par  $\vec{H}$ ) est complexe et peut s'écrire :

$$F(\vec{H}) = |F(\vec{H})| \exp i\phi(\vec{H}) \quad (1)$$

$\vec{\Phi}(\vec{H})$  étant la phase associée.

D'autre part, on sait que l'intensité  $I(\vec{H})$  est proportionnelle au carré du facteur de structure et on écrira simplement :

$$I(\vec{H}) = F(\vec{H}) F^*(\vec{H}) = |F(\vec{H})|^2 \quad (2)$$

On voit que l'expérience ne fournit que les modules  $|F(\vec{H})|$  alors que la détermination de la structure nécessite en outre la connaissance des phases. C'est le problème classique d'indétermination de la phase que diverses méthodes permettent de lever avec plus ou moins de succès.

### III. / DESCRIPTION DU SYSTEME CRYSTAN

Dans ses versions adaptées au PDP 11/45 [BURZLAFF et al. (1977)] et au Philips P 855 [BURZLAFF et al. (1978)], ce système se compose des cinq blocs de programmes quasi-indépendants suivants formant une chaîne (voir figure 1, l'organigramme de CRYSTAN) :

- 1 - " Traitement de données" où les mesures expérimentales sont corrigées et les facteurs de structure observés  $F_o(\vec{H})$  déduits.

Ce bloc se compose des programmes INPUT (introduction des données physiques et structurales disponibles), PW 1100 (correction du fond continu et de la dérivé, tri des réflexions non nulles et leur mise à l'échelle), ABSORP [(correction analytique d'absorption pour monocristaux cylindriques ou sphériques (ABSOR 1), polyédriques réguliers (ABSOR 2) ou correction expérimentale d'absorption (ABSOR 3)] et DARED [correction de Lorentz-polarisation, contrôle des opérations de symétrie et calcul des facteurs de structure observés  $F_o(\vec{H})$ ].

- 2 - " Détermination des phases par les méthodes directes", ce qui permet d'ébaucher un modèle de structure.

Ce bloc est formé des programmes ENORM [calcul des facteurs de structure normalisés  $E(\vec{H})$ ], SIGMA 2 (contrôle des relations entre triplets), START (sélection d'un bon ensemble de réflexions de départ), SYMBAD (programme d'addition symbolique), FASTAN (détermination des signes des phases par la formule de la tangente pondérée - ou "weighted tangent formula") et SAYFO (continuation de cette détermination des signes par les formules de Sayre avec affinement éventuel des phases).

- 3 - " Procédures de FOURIER" où on peut aboutir à un modèle approximatif de la structure sans avoir à déterminer les phases (méthode de PATTERSON) et où on peut calculer la densité électronique une fois ces phases déterminées.

Ce bloc comporte les programmes POU PAR, PREFOU, FT1, FT2 et FT3 dont la description détaillée sera faite ultérieurement.

- 4 - " Affinement par la méthode des moindres carrés" où on ajuste les positions atomiques et les facteurs d'échelle et de température à partir d'une bonne ébauche de modèle.

Les programmes DFM, DFTO, DFIS, DFAN et DFST forment ce bloc et seront décrits ultérieurement.

- 5 - " Interprétation" où on calcule les distances interatomiques et les angles de liaison et où on représente graphiquement la structure etc. . .

Ce bloc comporte les programmes DISTAN (calcul des distances et angles de liaison), MOLEC (connexion des atomes de l'unité asymétrique à une molécule), THERM (calcul des ellipsoïdes des vibrations à partir des facteurs anisotropes de température), OPLA (calcul des plans optimaux pour un ensemble donné d'atomes) et PARAM (tabulation des coordonnées et des facteurs de température pour publication).

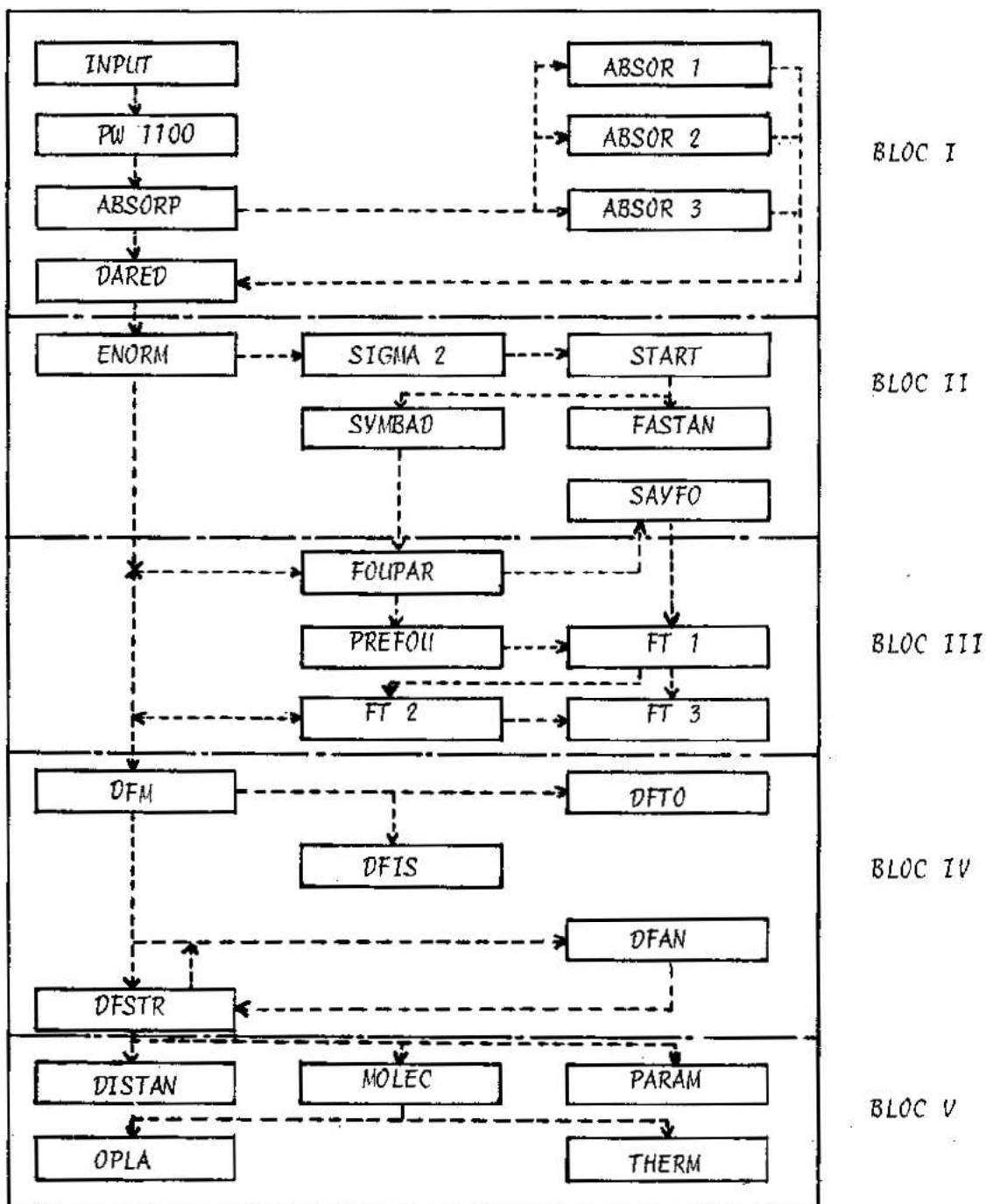


Figure 1 - Organigramme général du système CRYSTAN

Afin d'encombrer au minimum la mémoire active de l'ordinateur, chaque programme utilise en entrée (lecture) un ou plusieurs fichiers (registres de mémoire inactive) contenant les informations dont il se sert et qui sont préparés en amont de la chaîne.

De même, chaque programme élabore d'autres fichiers en sortie (écriture) qui seront utilisés par la suite des programmes en aval de la chaîne.

Trois sortes de fichiers sont utilisées dans CRYSTAN. Les fichiers temporaires, contenant des résultats de calculs intermédiaires, sont créés et effacés au cours de l'exécution d'un ou plusieurs programmes. Les semi-permanents sont créés à une étape de calcul et sont mis à jour au fur et à mesure de l'avancement de la détermination de la structure ; ils contiennent des résultats exploitables par l'utilisateur. Enfin les permanents sont destinés à contenir des données expérimentales de base : collection des intensités, tables de facteurs atomiques de diffusion, ...

Ce fractionnement présente les avantages suivants :

- On peut exécuter un ensemble de programmes importants sur un ordinateur de faible taille.
- La mise au point, l'adaptation et le contrôle s'en trouvent largement facilités.
- Chaque programme peut être exécuté autant de fois que nécessaire sans devoir exécuter toute la chaîne de programmes.

Nous avons eu, cependant, à surmonter certaines difficultés dues à la différence de configuration entre l'IRIS 55 et les mini-ordinateurs pour lesquels CRYSTAN a été élaboré. Ainsi, nous avons dû supprimer le langage conversationnel avec télétype pour le remplacer par des entrées par cartes perforées, ce qui demande de prévoir a priori tous les cheminements possibles et à leur préparer les cartes de données correspondantes. Certains sous-programmes (tels que DFM ou DFSTR) ont été segmentés car ils étaient trop grands pour la mémoire disponible. Les fichiers furent réorganisés ; les permanents ont été écrits sur un disque privé et les autres sur un autre disque de manœuvre de manière à les encombrer le moins possible. Une fois un programme adapté et minutieusement contrôlé, nous l'enregistrons sous forme binaire dans une bibliothèque IMT et sous forme FORTRAN dans une bibliothèque SOURCE.

#### IV. METHODES DE FOURIER

On sait que la densité électronique  $\rho(\vec{r})$  dans une maille du cristal s'écrit par une transformée de FOURIER inverse de l'amplitude :

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{H}} |F(\vec{H})| \exp - i \left[ 2 \pi \vec{H} \cdot \vec{r} - \Phi(\vec{H}) \right] \quad (3)$$

où  $\vec{r}$  est un vecteur de la maille dont le volume est V. Comme l'expérience ne nous fournit pas  $\Phi(\vec{H})$ , le calcul de  $\rho(\vec{r})$  ne peut donc se faire par l'équation (3). Il faut donc élaborer un modèle de structure, en déduire les facteurs de structure calculés  $F_c(\vec{H})$  à partir de la relation (4) et les comparer aux facteurs observés  $F_o(\vec{H})$ .

$$F_c(\vec{H}) = |F_c(\vec{H})| \exp \left[ i \Phi_c(\vec{H}) \right] \quad (4)$$

Le modèle sera considéré comme proche de la structure réelle lorsque le coefficient de reliabilité R défini par la relation (5) prend les valeurs initiales de l'ordre de 0,2 ou 0,3 :

$$R = \frac{\sum_{\vec{H}} \left| |F_o(\vec{H})| - |F_c(\vec{H})| \right|}{\sum_{\vec{H}} |F_o(\vec{H})|} \quad (5)$$

Dans le cas d'utilisation d'un facteur de pondération  $\omega(\vec{H})$ , on peut définir un coefficient pondéré de reliabilité  $R_\omega$  dont l'expression utilisée par les auteurs de CRYSTAN est :

$$R_\omega = \left[ \frac{\sum_{\vec{H}} \omega^2(\vec{H}) (|F_o(\vec{H})| - |F_c(\vec{H})|)^2}{\sum_{\vec{H}} \omega^2(\vec{H}) |F_o(\vec{H})|^2} \right]^{1/2} \quad (6)$$

Dans le cas où la structure comporte quelques atomes lourds, on peut calculer et utiliser la fonction de PATTERSON  $P(\vec{r}-\vec{r}')$  :

$$P(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{V} \sum_{\vec{H}} |F_o(\vec{H})|^2 \exp \left[ -2\pi i \vec{H}(\vec{r}-\vec{r}') \right] \quad (7)$$

où  $(\vec{r}-\vec{r}')$  est un vecteur interatomique

Cette fonction, dont le calcul ne nécessite pas la connaissance des phases, permet de déterminer les vecteurs interatomiques, de placer les atomes lourds dans la maille et de calculer une première estimation de  $F_c(\vec{H})$  et par suite  $\Phi_c(\vec{H})$ . Un premier calcul de la densité électronique :

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{H}} |F_o(\vec{H})| \exp -i \left[ 2\pi \vec{H}\vec{r} - \Phi_c(\vec{H}) \right] \quad (8)$$

fait apparaître de nouveaux atomes dans le modèle que l'on complètera pour recalculer  $F_c(\vec{H})$  et de proche en proche le facteur R baissera et le modèle s'approchera de la réalité.

La méthode de différence de FOURIER consiste à calculer la fonction :

$$\Delta\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{H}} (|F_o(\vec{H})| - |F_c(\vec{H})|) \exp -i \left[ 2\pi \vec{H}\vec{r} - \Phi_c(\vec{H}) \right] \quad (9)$$

On se sert de cette fonction pour faire apparaître les atomes légers de la structure et s'assurer qu'aucun atome n'est oublié ni mal placé.

Pour utiliser la chaîne des procédures de FOURIER, il nous faut au préalable avoir créé les fichiers permanents suivants :

STRDAT (A) : Contenant les informations structurales disponibles telles que maille, réseau, groupe spatial, formule chimique... et créé par le programme INPUT du bloc "Traitement des données" ;

FDAT (B) : Contenant les facteurs de structure observés  $F_o(\vec{H})$  créé par les programmes PW 1100 et DARED du même bloc précédent ;

FTCDAT (C) : Liste des facteurs de forme des atomes et ions concernés par la structure, provenant par exemple des Tables Internationales de Radio-Cristallographie (1968).

La chaîne se compose de cinq programmes (figure 2).

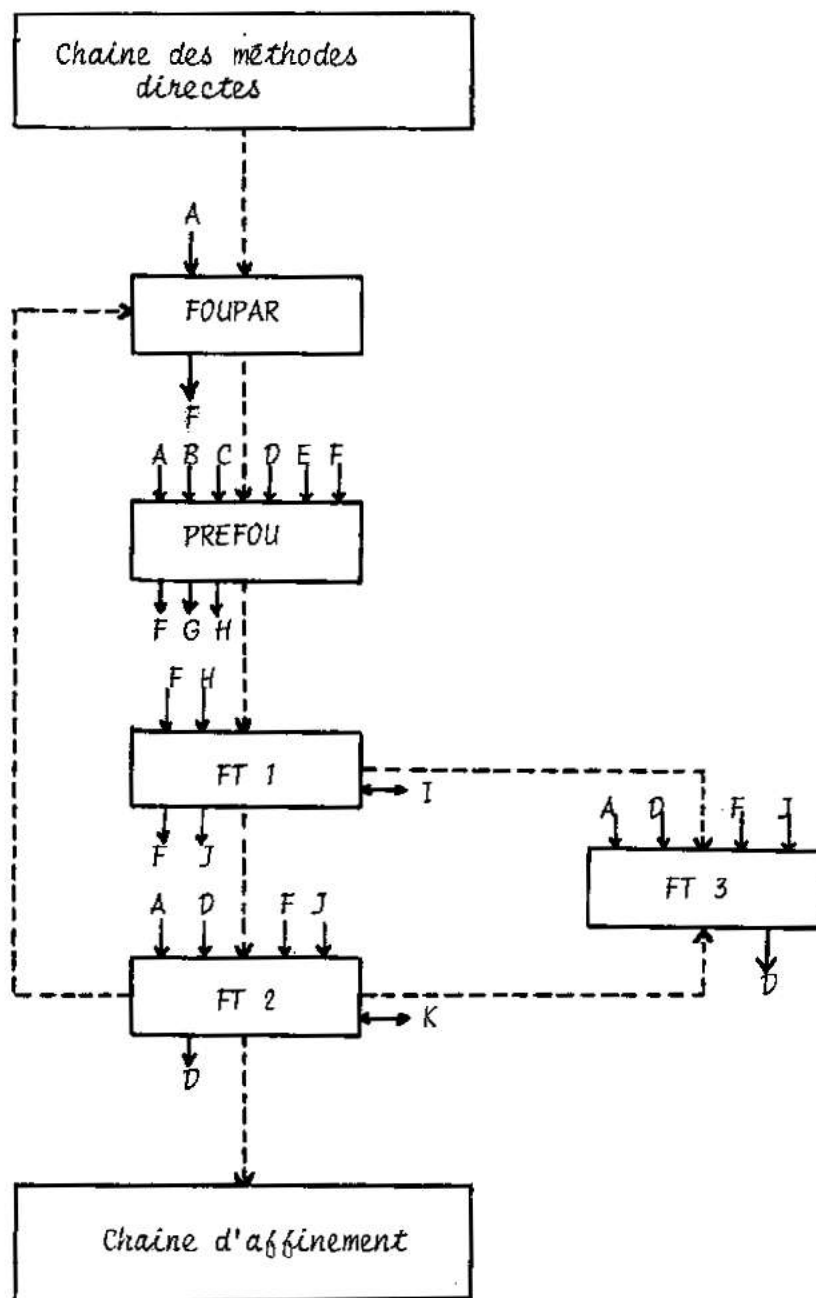


FIGURE 2 : Organigramme de la chaîne de procédures de Fourier utilisant les fichiers permanents : A(STRDAT), B(FDAT), C(FTCDAT), semi-permanents : D(LQDAT), E(SCTDAT) et temporaires : F(FOUPARDAT), G(FOUTMP), H(FOR002), I(FRTMP), J(FOURDAT) et K(FOR001).

FOUPAR : Calcule les paramètres nécessaires à la synthèse de FOURIER (dimensions et pas de la grille dans les trois directions, coordonnées des points initiaux et finaux, ...) et les stocke dans un fichier temporaire FOUPARDAT (F). Une variable d'identification IFOU permet d'orienter les calculs selon les cinq valeurs possibles IFOU = 0 (calcul de  $\rho(\vec{r})$  avec  $\phi_c(\vec{H})$  déterminées par les méthodes directes ; IFOU = 1 (fonction de PATTERSON) ; IFOU = 2 (synthèse de FOURIER avec  $F_0(\vec{H})$  et  $\phi_c(\vec{H})$  approchées) IFOU = 3 (différence de FOURIER) et IFOU = 4 (méthode de FOURIER pour les électrons de valence).

PREFOU : Suit FOUPAR et calcule les coefficients de FOURIER. Outre les fichiers STRDAT (A) FTCDAT (C) et FDAF (B) précédents il nécessite un nouveau fichier semi-permanent LQDAT (D) qui contient la liste des atomes et leurs positions dans l'hypothèse structurale qu'il faudra compléter ou affiner ultérieurement. Ces coefficients de FOURIER sont stockés dans les fichiers temporaires FOUTMP (G) et FOROO 2 (H).

FT1 : Prépare les cartes de FOURIER dans l'espace tridimensionnel qu'il stocke dans le fichier temporaire FOU DAT (J) et utilise en outre un autre fichier temporaire FRTMP (I).

FT<sub>2</sub> : Donne la densité électronique en tout point de la grille et peut repérer ses maxima pour compléter la liste des positions atomiques dans LQDAT (D). Dans ce programme FOROO 1 (K) est un fichier temporaire.

T A B L E A U I

EXEMPLES D'APPLICATION DE LA CHAINE DE FOURIER

Composé	chaîne testée	Résultats
L-Asparagine monohydrate $C_4H_8N_2O_3 \cdot H_2O$ (A. DE VRIES, 1963)	Synthèse de FOURIER FOUPAR-PREFOU-FT1-FT2	Facteur de réliabilité R=0,075
	Différence FOURIER FOUPAR-PREFOU-FT2-FT3	Sections $\Delta\rho(\vec{r})$ pratiquement nulles uniformément.
Iode I <sub>2</sub> (V. GABIS, 1980)	Fonction de PATTERSON FOUPAR-PREFOU-FT2-FT3	Calcul de plusieurs sections de la fonction de PATTERSON.

FT3 : Calcule la carte d'une section plane de la densité électronique passant par trois atomes quelconques de la structure.

Dans le tableau 1 et les figures 3 et 4, nous rapportons quelques exemples d'utilisation des procédures de FOURIER avec deux composés différents et les chaînes de calcul testées.

V. / L'AFFINEMENT

Il consiste à calculer les facteurs de structure  $F_C(\vec{H})$  à partir d'une hypothèse de structure très proche de la réalité et à modifier certains paramètres  $X_j$  de cette structure, afin d'abaisser encore plus le facteur de réliabilité R.

Ces paramètres peuvent être les positions atomiques, le facteur d'échelle, le facteur de température et parfois les taux d'occupation des sites dans le cas d'un désordre partiel.

L'affinement par la méthode des moindre carrés consiste à minimiser la quantité :

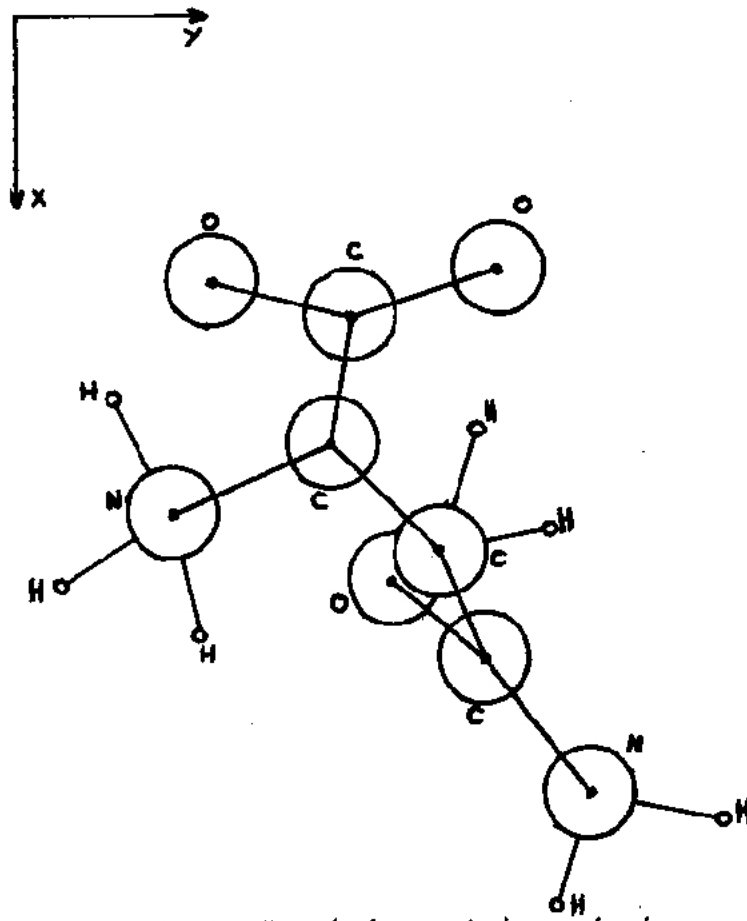


FIGURE 3 : Mode d'enchainement des principaux atomes de L-Asparagine monohydrate.

9	6	1	.	5	8	5	.	1	6	9	6	1	.	5	8	5	.	1	6	9		
6	4	.	.	3	5	3	.	.	4	6	4	.	.	3	5	3	.	.	4	6		
1	1	.	.	.	1	.	.	.	1	1	1	.	.	.	1	.	.	.	1	1		
.	.	2	2	.	.	.	2	2	.	.	.	2	2	.	.	.	2	2	.	.		
1	1	3	2	1	.	1	2	3	1	1	1	3	2	1	.	1	2	3	1	1		
2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2		
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		
1	1	2	3	2	1	2	3	2	1	1	1	2	3	2	1	2	3	2	1	1		
1	1	2	3	2	1	2	3	2	1	1	1	2	3	2	1	2	3	2	1	1		
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		
2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2		
1	1	3	2	1	.	1	2	3	1	1	1	3	2	1	.	1	2	3	1	1		
.	.	2	2	.	.	.	2	2	.	.	.	2	2	.	.	.	2	2	.	.		
1	1	.	.	.	1	.	.	.	1	1	1	.	.	.	1	.	.	.	1	1		
6	4	.	.	3	5	3	.	.	4	6	4	.	.	3	5	3	.	.	4	6		
9	6	1	.	5	8	5	.	.	1	6	9	6	1	.	5	8	5	.	.	1	6	9
6	4	.	.	3	5	3	.	.	4	6	4	.	.	3	5	3	.	.	4	6		
1	1	.	.	.	1	.	.	.	1	1	1	.	.	.	1	.	.	.	1	1		
.	.	2	2	.	.	.	2	2	.	.	.	2	2	.	.	.	2	2	.	.		
1	1	3	2	1	.	1	2	3	1	1	1	3	2	1	.	1	2	3	1	1		
2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2		
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		
1	1	2	3	2	1	2	3	2	1	1	1	2	3	2	1	2	3	2	1	1		
1	1	2	3	2	1	2	3	2	1	1	1	2	3	2	1	2	3	2	1	1		
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		
2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2		
1	1	3	2	1	.	1	2	3	1	1	1	3	2	1	.	1	2	3	1	1		
.	.	2	2	.	.	.	2	2	.	.	.	2	2	.	.	.	2	2	.	.		
1	1	.	.	.	1	.	.	.	1	1	1	.	.	.	1	.	.	.	1	1		
6	4	.	.	3	5	3	.	.	4	6	4	.	.	3	5	3	.	.	4	6		
9	6	1	.	5	8	5	.	.	1	6	9	6	1	.	5	8	5	.	.	1	6	9

FIGURE 4 : Section plane (001) de la fonction de PATTERSON pour l'iode.



$$D = \sum_{\vec{H}} w(\vec{H}) \left[ \left| F_o(\vec{H}) \right| - K \left| F_c(\vec{H}) \right| \right]^2 \quad (10)$$

en rendant aussi près que possible de zéro, les dérivées partielles  $\frac{\partial D}{\partial X_j}$

Dans cette relation,  $w(\vec{H})$  est un facteur de pondération éventuelle, et K est le facteur d'échelle.

Notons qu'il est souvent nécessaire d'admettre que chaque atome possède son propre facteur d'agitation thermique ; celle-ci pouvant être sphérique (isotrope) ou ellipsoïdale (anisotrope).

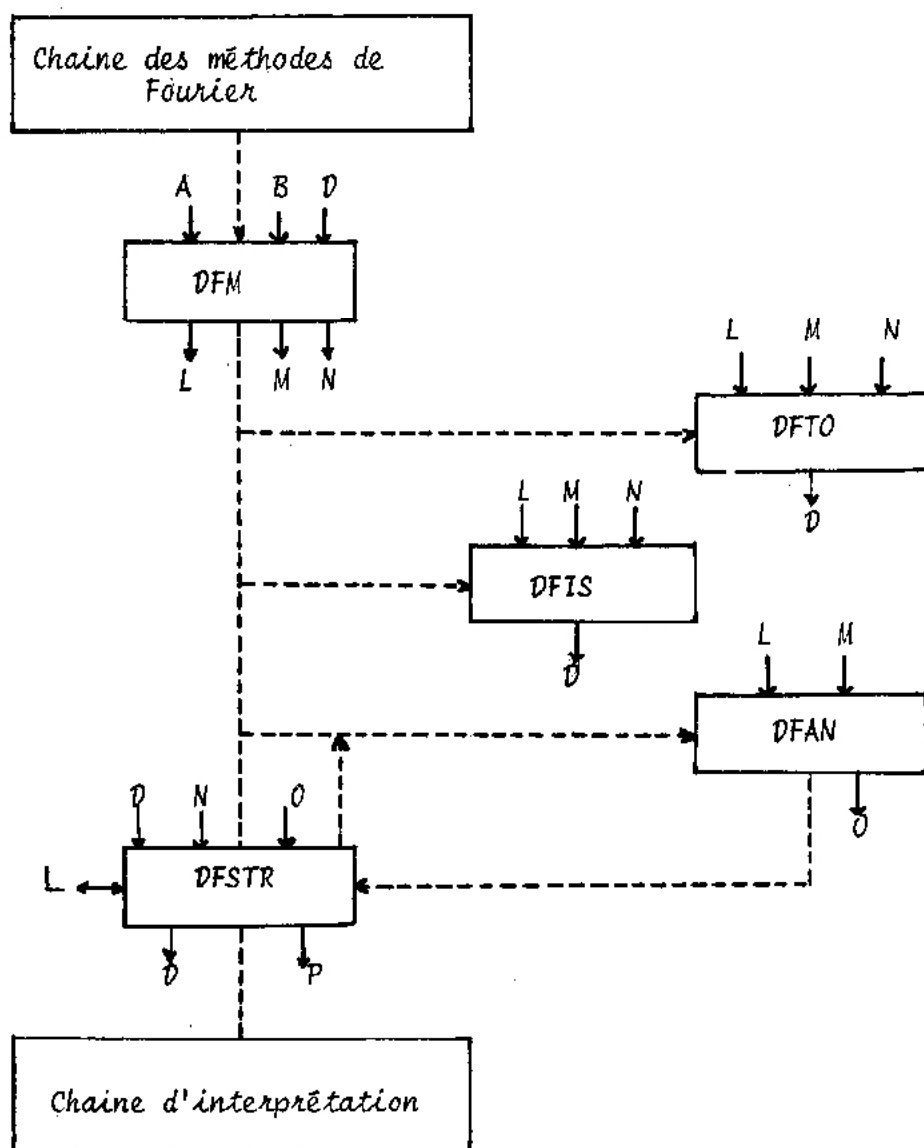


FIGURE 5 : Chaîne d'affinement par moindres carrés utilisant les fichiers permanents : A(STRDAT, B(FDAT) ; semi-permanents : D(LQDAT) et temporaires : L(FOR007), M(FTMP), N(LQOLDDAT), O(FORO03DAT), P(DLQDAT).

Lorsque l'hypothèse structurale est plausible, le facteur R décroît rapidement sans jamais atteindre zéro à cause de diverses imperfections de mesure ou des approximations simplificatrices.

Pour utiliser la chaîne d'affinement du CRYSTAN, on doit avoir créé au préalable les fichiers permanents STRDAT (A) et FDAT (B) et semi-permanent LQDAT (D). La chaîne se compose des cinq programmes suivants :

TABLEAU II

EXEMPLES D'APPLICATION DE LA CHAÎNE D'AFFINEMENT

Composé	L-Asparagine monohydrate $C_4H_7N_2O_3 \cdot H_2O$ P 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> (Réf. 6)			Zn-d'Ansit $ZnSO_4 \cdot 3NaCl \cdot 9Na_2SO_4$ I: 43d (Réf. 5)
	global	isotrope	anisotrope	global
R	0,134	0,099	0,089	0,210
	0,111	0,090	0,080	0,196
	0,101	0,088	0,076*	
	0,100	0,087		
R <sub>w</sub>	0,247	0,160	0,139	0,248
	0,177	0,146	0,123	0,219
	0,159	0,141	0,119	
	0,139	0,139		

\* Les auteurs de CRYSTAN obtiennent dans ce cas R=0,075 au bout d'un plus grand nombre de cycles.

**DFM** : Supervise toute la chaîne d'affinement et selon le type de facteur de température, il appelle tel ou tel programme. Une variable NO commande ce choix NO = 1 (facteur thermique global), 2 (facteur individuel isotrope), ou 3 (facteur individuel anisotrope).

**DFTO** : Calcule les facteurs de structure et mène une procédure de moindres carrés par blocs pour les coordonnées atomiques et les facteurs d'échelle et de température global

**DFIS** : effectue à peu près le même calcul que le précédent mais en utilisant un facteur de température individuel isotrope par atome.

**DFAN** : effectue un travail similaire en utilisant un facteur de température anisotrope par atome. Il est appelé par DFM ou DFSTR qu'il appelle à son tour.

La figure 5 montre l'organigramme de la chaîne d'affinement.

Pour tester les programmes d'affinement après adaptation et implantation sur l'ordinateur, nous avons traité tous les cas possibles à l'aide des données sur deux composés différents : L-Asparagine monohydrate et Zn - d'Ansit ; ce dernier présente des sites incomplètement occupés. Le tableau II montre les différents cas étudiés et les résultats obtenus, c'est-à-dire les valeurs des facteurs de reliabilité pondéré  $R_w$  ou non pondéré R d'un cycle à l'autre.

L'examen du tableau II nous amène à faire les remarques suivantes :

- 1 - Le nombre de cycles d'affinement, n'ayant pas été fixé a priori, est resté arbitraire.
- 2 - D'un type de calcul à l'autre, les valeurs de R et  $R_w$  ne sont pas comparables, car, parfois, les modèles utilisés ne sont pas identiques.
- 3 - Dans tous les cas, les facteurs R et  $R_w$  décroissent appréciablement et les valeurs finales de R et  $R_w$  sont très comparables à celles publiées par les autres de CRYSTAN. Ceci montre la fiabilité des programmes implantés.

## VI. / CONCLUSION

Les chaînes de procédures de FOURIER et d'affinement par moindres carrés du système CRYSTAN ont été bien adaptées et implantées sur l'IRIS 55 du CIRIA de Tunis. Elles ont été testées sur divers exemples et ceci a montré qu'elles étaient opérationnelles dans la plupart des types de calculs courants dans la détermination des structures cristallines.

Ces programmes existent actuellement dans la bibliothèque IMT du système et sont à la disposition de tout éventuel utilisateur, intéressé par le système CRYSTAN. Les modes d'emploi, les cartes d'appel ainsi que d'autres informations utiles peuvent être trouvés dans les mémoires cités en référence ou auprès des auteurs.

### Remerciements :

Les auteurs tiennent à remercier le Professeur H. BURZLAFF et ses collaborateurs de l'Université d'Erlangen (R.F.A.) pour leur avoir fourni une copie de CRYSTAN et des données utilisées pour le contrôle des programmes. Leur gratitude va aussi au personnel du CIRIA de Tunis pour leur aide

efficace et constante, ainsi qu'au Professeur E. PARTHE de l'Université de Genève (SUISSE) pour la transcription de la bande magnétique contenant les programmes en un code conforme à notre ordinateur.

#### VII. / BIBLIOGRAPHIE

- 1 - M. ABENE (1982) : "Adaptation à l'IRIS 55 d'un système de programmes de transformées de FOURIER pour la résolution des structures cristallines", mémoire de D.E.A. présenté à la Faculté des Sciences de Tunis, Septembre 1982.
- 2 - H. BURZLAFF, R. BOHME et M. GOMM (1977) : "CRYSTAN, a crystallographic Programm System for Minicomputers", Institut für Angewandte Physik, Lehrstuhl für Kristallographie, Universität Erlangen Oktober 1977 (BRD).
- 3 - H. BURZLAFF, R. BOHME et M. GOMM (1978) : "CRYSTAN, a crystallographic Programm System for Minicomputers", Ed. PHILIPS, July 1978.
- 4 - H. BURZLAFF, R. BOHME et M. GOMM (1978) : "The Crystan System" in "Computing in Crystallography", Proceedings of International Summer School in Crystallographic Computing, TWENTE (24/7-1/8/1978), H. SCHENK and al. Editors, Delft University Press (Netherlands), p. 72 / 80.
- 5 - H. BURZLAFF et H.H. GRUBE (1978), Travail soumis à publication à N. Jb. Miner. Mh. 1978, cité en référence 4 page 347.
- 6 - A. DE VRIES (1963), Thesis, Utrecht University, (Netherlands).
- 7 - V. GABIS (1980) : "Manipulations, Exercices, Problèmes Corrigés", Société Française de Minéralogie et de Cristallographie, Paris 1980.
- 8 - INTERNATIONAL TABLES FOR X-RAY CRYSTALLOGRAPHY (1968), The Kynoch Press, Birmingham (England).
- 9 - A. YACOUBI (1982) : "Adaptation à l'IRIS 55 d'un système d'affinement par moindres carrés des structures cristallines", mémoire de D.E.A. soutenu à la Faculté des Sciences de Tunis, Juin 1982.