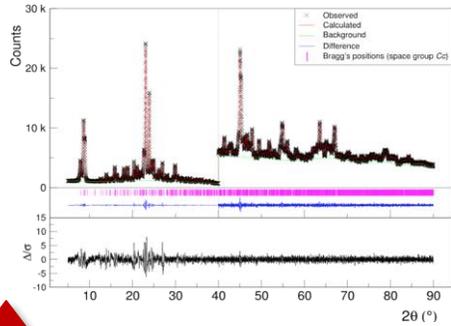
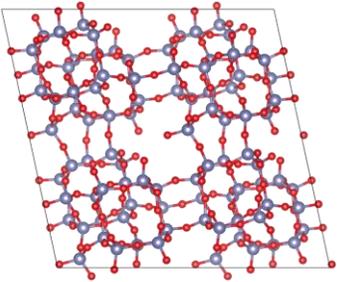


Détermination Structurale par diffraction des rayons X sur poudre : Cas de la zéolithe SSZ-74 (1, 2)

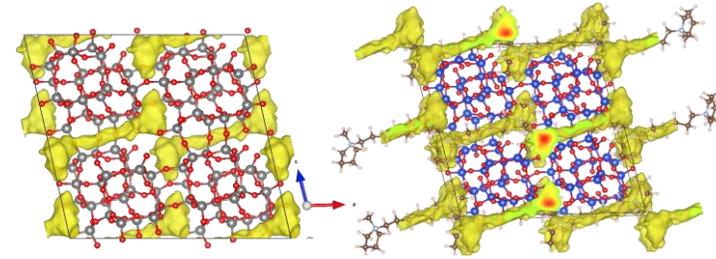
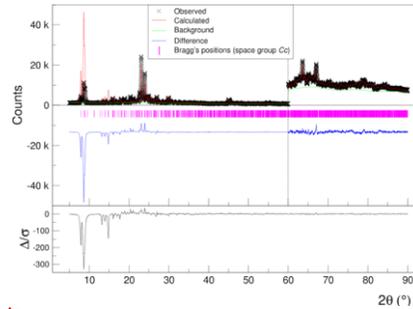
1 Affinement de Le Bail



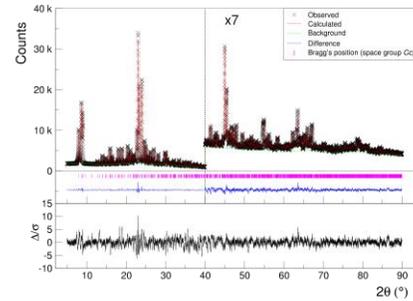
- ## 2
- Affinement de type Rietveld
 - Introduction des atomes de charpente
 - Recherche du facteur d'échelle



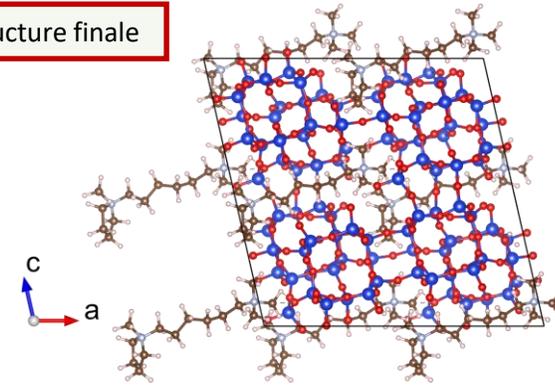
- ## 3
- Différence de Fourier
 - Introduction des molécules organiques



4 Affinement de Rietveld final



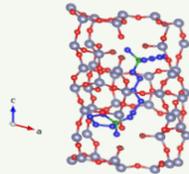
5 Structure finale



L'étude structurale par affinement de Rietveld a révélé une orientation inattendue pour la molécule au sein des canaux.

Orientation proposée dans la **littérature** [2] :

- Molécules **selon l'axe [001]**,
- Groupements terminaux dans cavités formées par les lacunes
- Conformation **syn**



Nouvelle orientation **expérimentale** [1] :

- Molécules dans les canaux sinusoïdaux **selon l'axe [110]**.
- Conformation **anti** plus stable (DFT).

