

Indexer des clichés de diffraction et Tracer des projections
stéréographiques avec les programmes Index et Stereo-Proj
Février 2014

Prérequis:

Aucun sur Windows XP et Windows 7. Nécessite Python 2.7(avec Matplotlib, Numpy et tkinter) sous les autres plateformes (installé par défaut dans la plupart des distributions linux)

Index

Permet d'indexer un cliché de diffraction

Stereo-Proj

Permet de tracer une projection stéréo à partir des clichés de diffraction pour un cristal donné (marche bien *a priori* pour le cubique).

Procédure :

Sous windows, décompresser l'archive et exécuter les programme stereo-proj.exe et index.exe
ou executer directement les scripts stereo-proj.py et index.py dans le répertoire prog-python

Index:

76 Indexer un cliché de diffraction

Ouvrir Structures

Paramètres cristallins

a	<input type="text"/>	RESET
b	<input type="text"/>	
c	<input type="text"/>	
alpha	<input type="text"/>	Indice max: <input type="text" value="5"/>
beta	<input type="text"/>	Groupe d'espace
gamma	<input type="text"/>	P63/mmc,Mg <input type="text"/>

Calibrations

d(angstroem), inclinaison	d(angstroem)
<input type="text"/>	<input type="text"/>

CALCULER

1. Ouvrir une image



2. Rentrer les paramètres cristallins (en Angstroems et en degré) ou directement un structure



Paramètres cristallins

a

b

c

alpha

beta

gamma

RESET

Indice max

Groupe d'espace

Il est possible d'enregistrer les paramètres d'une structure en modifiant le fichier structure.txt et space_group.txt

```
structure.txt - Notepad2
File Edit View Settings ?
1 Aluminium 4.0496 4.0496 4.0496 90 90 90 Fm-3m,Al
2 Fer(bcc) 2.8665 2.8665 2.8665 90 90 90 Im-3m,Fe
3 Zirconium 3.232 3.232 5.147 90 90 120 P63/mmc,Mg
4 Silicium 5.4309 5.4309 5.4309 90 90 90 Fd-3m,Si
5
```

Le format est: Nom a b c alpha beta gamma Groupe d'espace

```
space_group.txt - Notepad2
File Edit View Settings ?
1 Fm-3m,Al
2 1 0 0 0
3 1 0.5 0.5 0
4 1 0 0.5 0.5
5 1 0.5 0 0.5
6 Im-3m,Fe
7 1 0 0 0
8 1 0.5 0.5 0.5
9 P63/mmc,Mg
10 1 0 0 0
11 1 0.33333 0.66666 0.5
12 Fd-3m,Si
13 1 0 0 0
14 1 0.25 0.25 0.25
15 1 0.5 0.5 0
16 1 0.75 0.75 0.25
17 1 0.5 0 0.5
18 1 0 0.5 0.5
19 1 0.75 0.25 0.75
20 1 0.25 0.75 0.75
21
```

La liste des groupes d'espace se trouvent dans le fichier space_group.txt:

Le format est

Nom du groupe

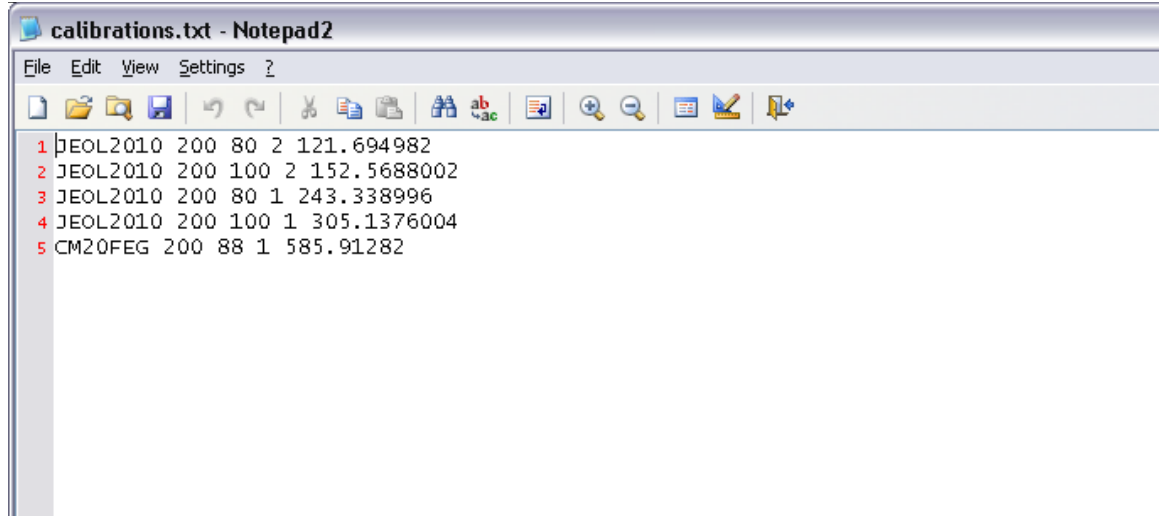
Facteur atomique de l'atome 1 x1 y1 z1

...

Facteur atomique de l'atome n xn yn zn

Liste des atomes dans la maille

3. Entrer la calibration de l'image. On peut également rentrer d'autre dans le fichier calibrations.txt




```
1 JEOL2010 200 80 2 121.694982
2 JEOL2010 200 100 2 152.5688002
3 JEOL2010 200 80 1 243.338996
4 JEOL2010 200 100 1 305.1376004
5 CM20FEG 200 88 1 585.91282
```

Le format est: Nom du microscope, Energie, Longueur de caméra, Binning, produit $px \cdot Ang$ (seule cette dernière valeur est importante, les autres sont des aides mémoire)

4. Cliquer sur l'image pour entrer le point de référence (1) et la tache à indexer (point 2)
Il s'affiche les valeurs de distance avec la référence ainsi que l'angle d'inclinaison par rapport à la verticale
Pour effacer et recommencer, cliquer sur RESET

74 Indexer un cliché de diffraction

Ouvrir Structures



(1) Almgth_trac_15janv_15 (100 %)

Parametres cristallins

a 4.0496
b 4.0496
c 4.0496

alpha 90
beta 90
gamma 90

RESET

Indice max 5

Groupe d'espace Fm-3m,Al

Calibrations JEOL2010', '200', '80', '2', '0.04491834

d(angstroem), inclinaison d(angstroem)

0.0 0
2.35 67.99

CALCULER

4. Cliquer sur CALCULER pour connaître les plans possibles correspondants

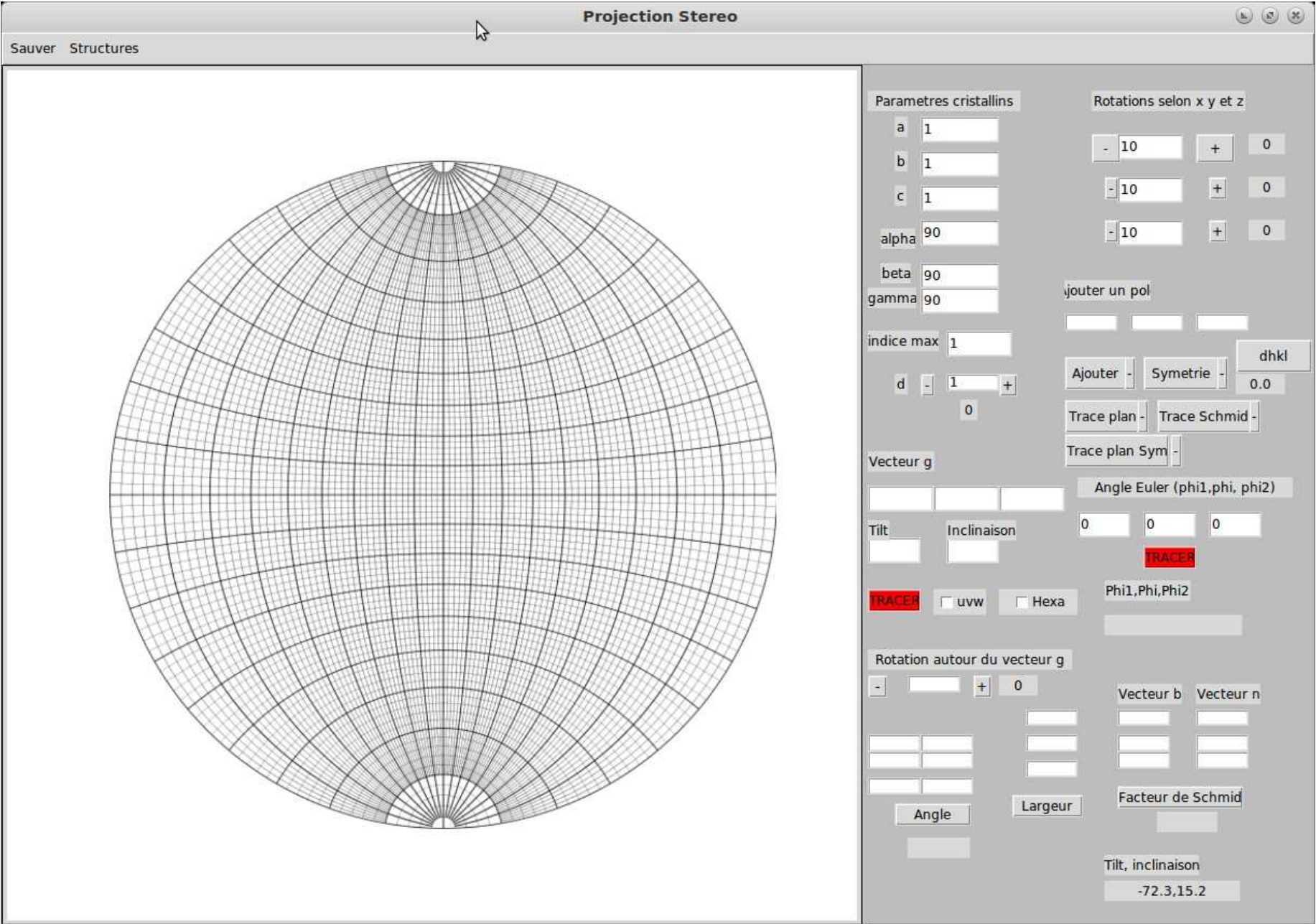
Inclinaison	d(angstroem)
2.338 -1 -1 -1 16.0	2.338 -1 -1 -1 16.0
2.338 -1 -1 1 16.0	2.338 -1 -1 1 16.0
2.338 -1 1 -1 16.0	2.338 -1 1 -1 16.0
2.338 -1 1 1 16.0	2.338 -1 1 1 16.0
2.338 1 -1 -1 16.0	2.338 1 -1 -1 16.0
2.338 1 -1 1 16.0	2.338 1 -1 1 16.0
2.338 1 1 -1 16.0	2.338 1 1 -1 16.0
2.338 1 1 1 16.0	2.338 1 1 1 16.0

CALCULER

Il s'affiche, la distance interréticulaire, les indices des plans ainsi que l'intensité (unités arbitraires).

Avec ces informations: plan diffractant, inclinaison et en connaissant le tilt de l'image on peut commencer à tracer la projection stéréo à l'aide du programme Trace-Stereo décrit après.

Stereo-Proj:



- Rentrer les paramètres de mailles et les angles alpha, beta et gamma (et éventuellement l'indice max que l'on veut voir apparaître).
- Entrer un vecteur diffraction ainsi que les angles de tilt (selon x) et l'angle d'inclinaison beta :

Vecteur g

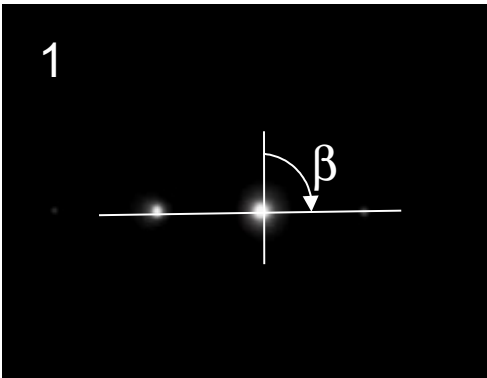
--	--	--

Tilt

Inclinaison

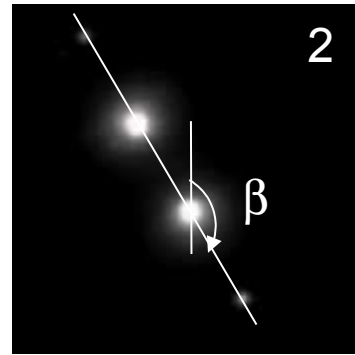
Parametres cristallins

a	1
b	1
c	1
alpha	90
beta	90
gamma	90
indice max	1



{111} beta=90

Tilt -22.2



{111} beta=147.5

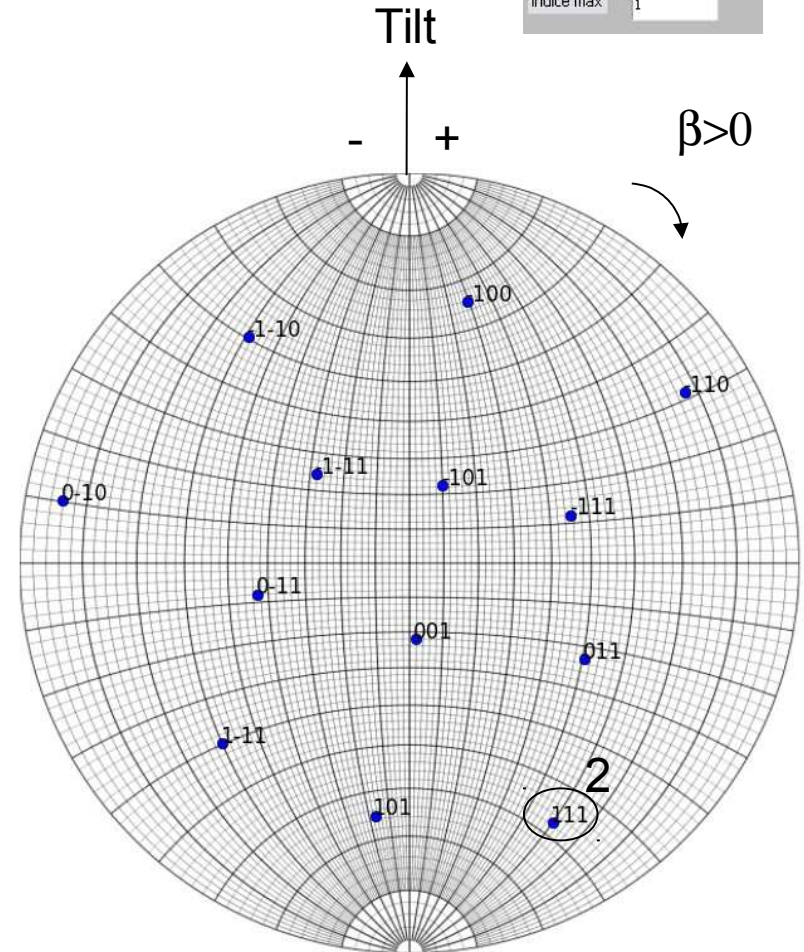
Tilt 30

Exemple dans Al (cubique a=b=c=1 alpha=beta=gamma=90°):

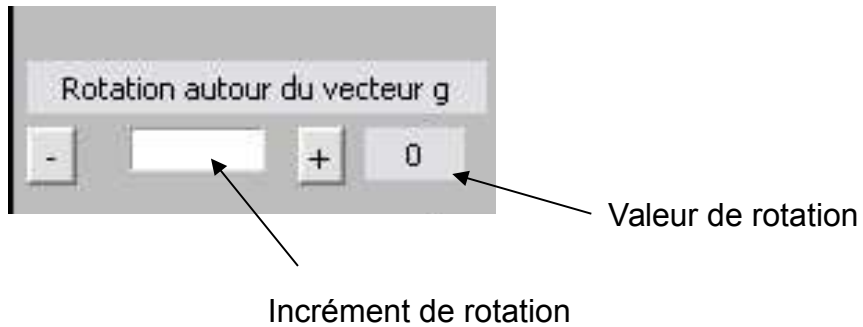
Ici on rentre (111) comme vecteur de diff, puis beta=147.5 et Tx=30, j'obtiens:



On prend la convention tilt + et angle d'inclinaison comme indiqués sur la figure



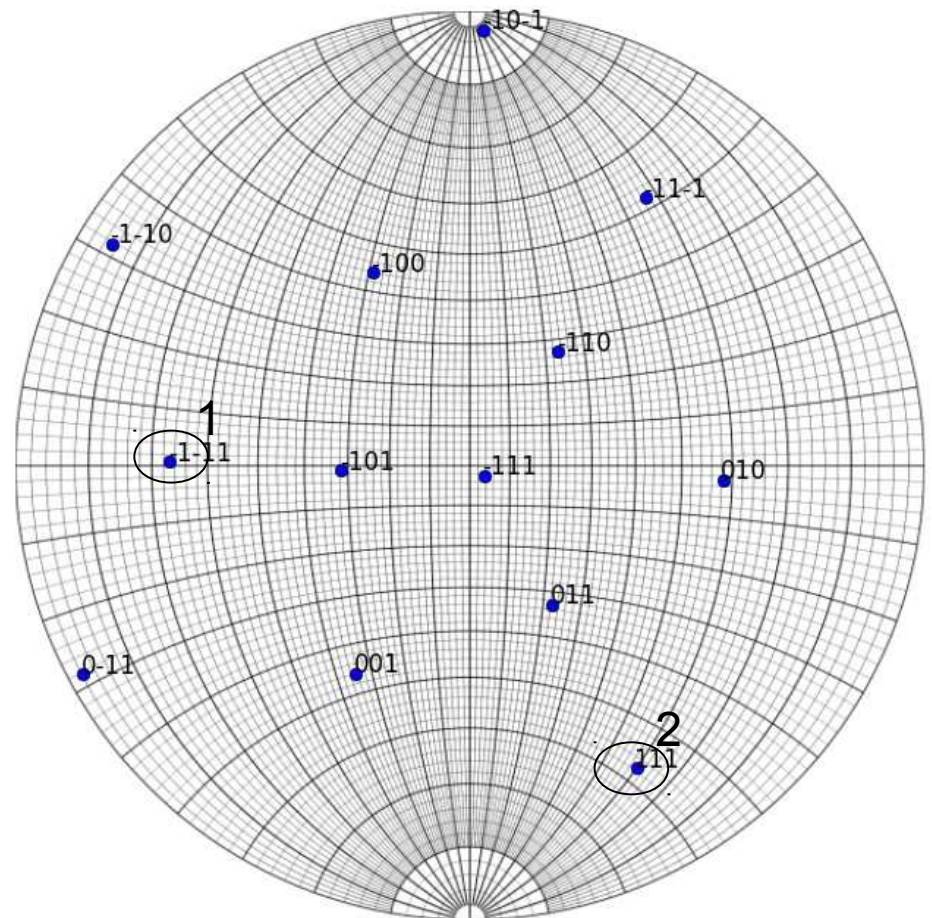
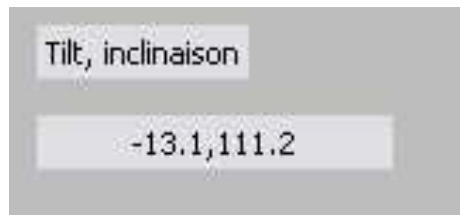
Pour obtenir la bonne projection, on tourne autour du vecteur diffraction jusqu'à obtenir la bonne configuration:
Ici, 47°



Les angles d'Euler sont indiqués

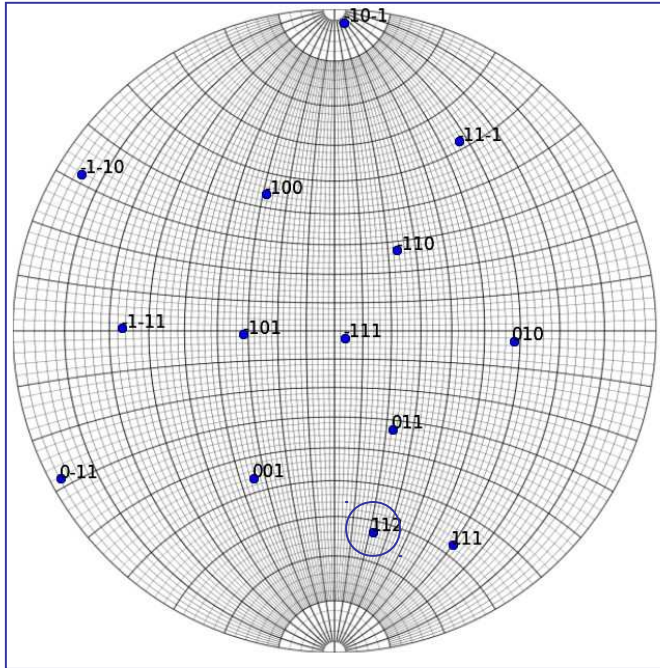


En passant avec la souris sur la projection est indiquée
l'inclinaison et le tilt: cela permet de réaliser positionner le
second vecteur deux ondes

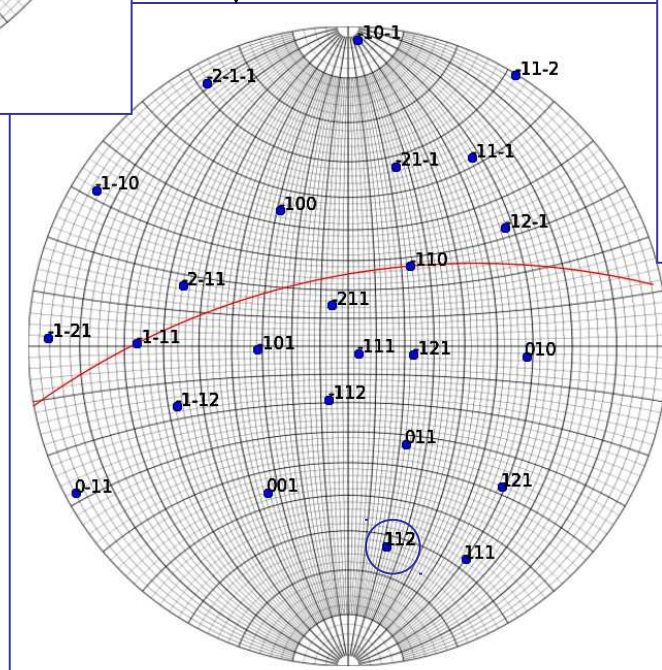
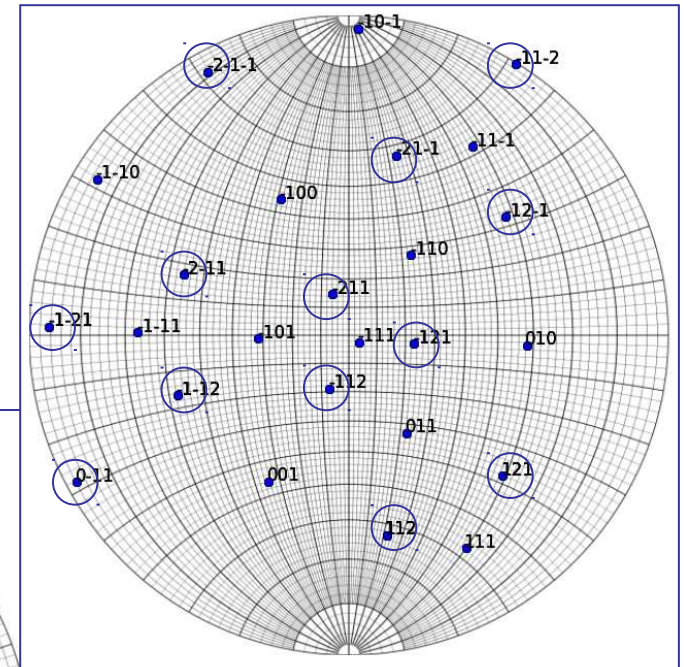
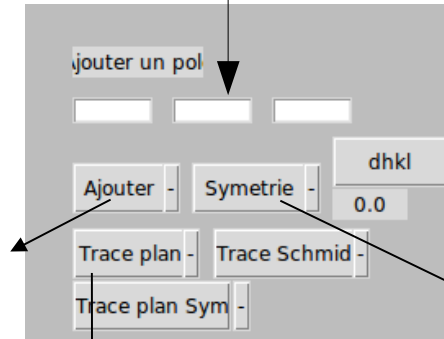


Autres fonctionnalités:

- Tracer les direction uvw plutôt que les plans hkl en cochant:
- Ajouter un pôle, tracer le plan correspondant, afficher les pôles équivalents par symétrie

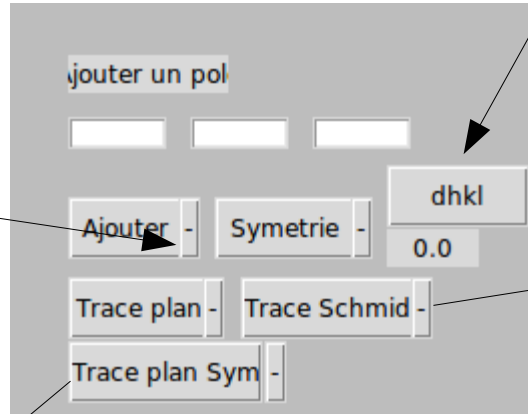


Commencer par indiquer le pôle à considérer

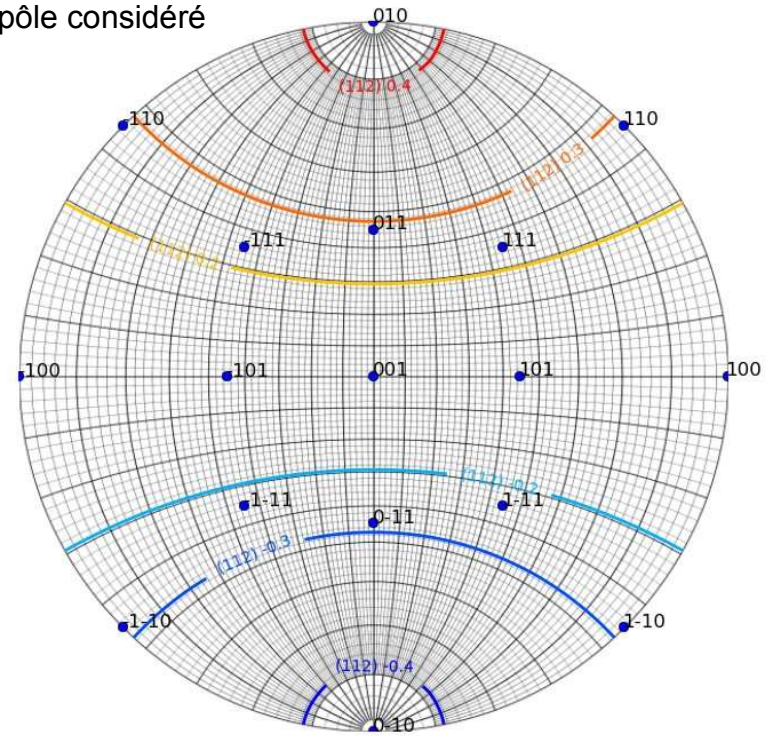
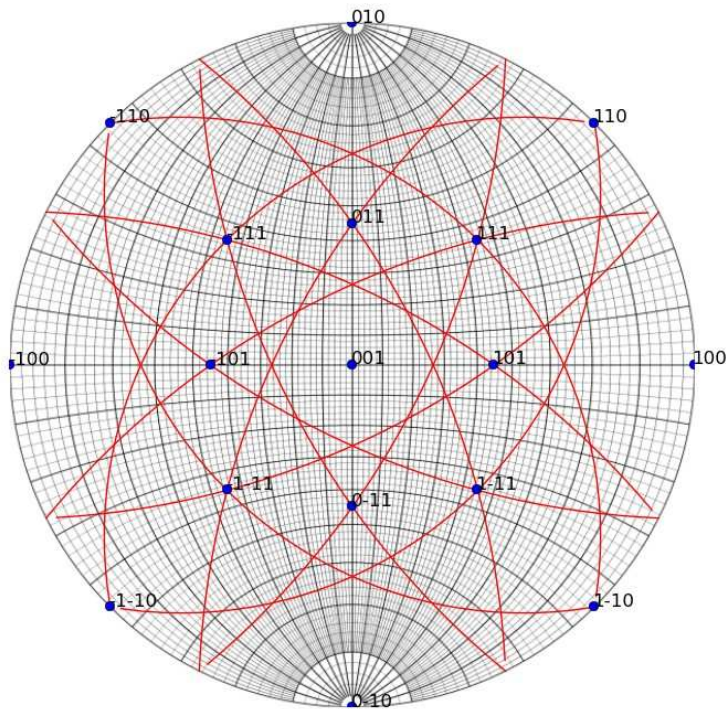


Affiche la distance inter-réticulaire du pôle considéré

Les boutons moins permettent d'effacer, plans, pôle...




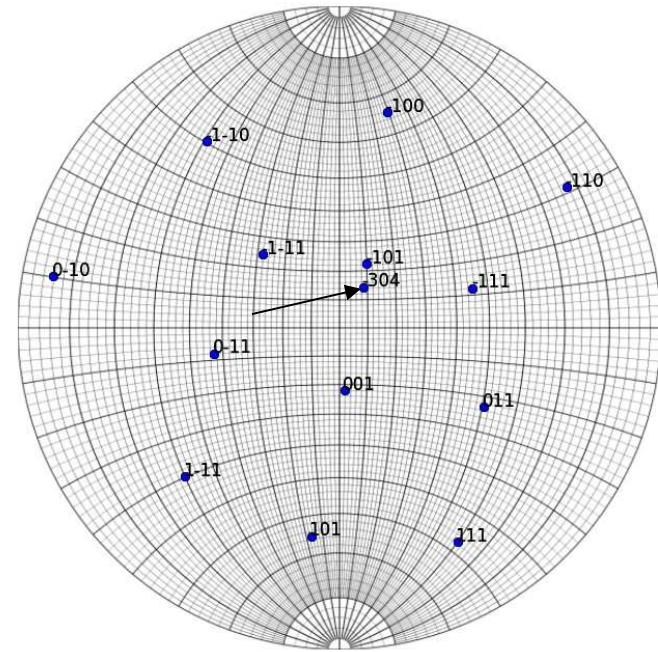
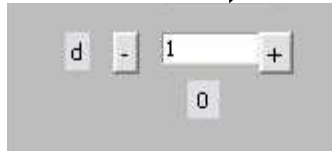
Trace l'ensemble des plans de mêmes types



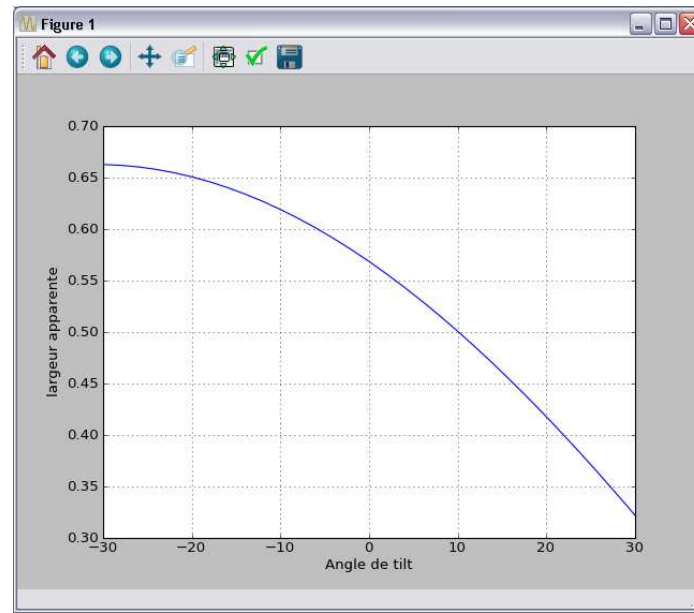
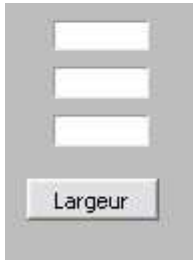
Trace les iso-contours du facteur de Schmid pour le plan considéré

Autres fonctionnalités:

- Cliquer un pole: en faisant un clic droit sur la projection stereo, on affiche le pole d'indice maximum 8, le plus proche de la position cliquée
 - Affiche de plus ou moins de poles sur la projection
- 



- Représenter la variation de la largeur apparente d'un plan



Autres fonctionnalités:

- Calculer l'angle entre deux directions données

Interface for calculating the angle between two directions. It features two input fields for direction components. The first direction has components (1, 1) and the second has components (1, 0). An 'Angle' button is present, and the result '30.0' is displayed below it.

- Calculer le facteur de Schmid (en supposant que l'axe de sollicitation est l'axe z de l'échantillon)

Interface for calculating the Schmid factor. It has two columns of input fields: 'Vecteur b' and 'Vecteur n'. The values entered are (1, 1, 0) for Vecteur b and (1, 1, 1) for Vecteur n. A 'Facteur de Schmid' button is shown, with the result '0.44' displayed below it.

- Faire des rotations selon les axes x,y et z (incrément par défaut 10°)

Interface for performing rotations. It is titled 'Rotations selon x y et z'. It contains three rows of controls, each with a minus button, a value field (all set to 10), a plus button, and a zero button.

- Sauver la projection (format jpeg par défaut)

Interface for saving the projection. It has a title bar '7% Projection Stereo' and a button labeled 'Sauver'.

- Tracer directement avec les angles d'Euler

- Indication des angles d'Euler

Angle Euler (phi1,phi, phi2)

0 0 0

TRACER

Phi1,Phi,Phi2

0,0,0

- Pour les hexagonaux, cocher la case hexa pour la notation à 4 indices (pour afficher les directions ne pas oublier de coher uvw)

☐ Hexa