

Brug af main.py i SpherePlotting

Kræver eksterne biblioteker Numpy og Matplotlib. Derudover er alt andet inkluderet i mappen.

I funktionen `_plot_peak` i `polarized_neutrons.py` skal værdien af variabelen `HB3A` ændres, så det passer til, om simuleringen er for HB3A (sæt til 1) eller for LLB (sæt til -1). Dette relaterer sig til retningen af magnetfeltet i det eksperimentelle setup.

Nødvendigt for at læse cif-filen

`_cifname`: filnavnet på den cif-fil der skal læses

`_blockname`: navnet på den blok i cif-filen, der skal læses.

Nødvendigt at tilføje manuelt

Skrive det peak, der skal regnes for, ind i listen `hkl`, som `[h,k,l]`

Angive styrke af magnetfelt

Angive værdi af polariseringen

Indlæse magnetiske atomer som variable ("`Dy1 = ...`" i eksemplet)

Angive ion-type for den magnetiske ion ("`Dy1.ion = 'Dy3'`" i eksemplet)

Bruges til at slå approksimationer til magnetiske formfaktorer op i Python-dictionaries

Angive hvilken type magnetisk formfaktor, der skal bruges ("`Dy1._type_magnetic ...`" i eksemplet)

Default-værdi er bare at bruge 'j0', som er ok for overgangsmetaller. Alternativt kan 'dipole' angives som i eksemplet. Det er bedre for lanthanider.

Angive S, L og J for ionen vha. `atom._angular_S`, `atom.angular_L` og `atom.angular_J`.