**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 variablen 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 tilfølge 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.