

Index a diffraction pattern with index  
January 2015

Index:

Index

Open Spectrum Structures

Crystal parameters

a

b

c

alpha

beta

gamma

RESET

Max indices

5

Space group

Calibrations

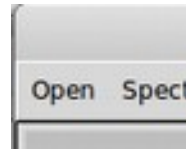
d(angstroem), inclination

d(angstroem)

Number of spots

Calculate

1. Open an image



2. Enter the crystal parameters (in Angstroems) or directly from the structure file



Parametres cristallins

a

b

c

alpha

beta

gamma

Indice max

Groupe d'espace

RESET

It is possible to add a structure by modifying the structure.txt and 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
```

Format: Name a b c alpha beta gamma Space Group

```
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 0.333333 0.666666 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
```

Space group list is in space\_group.txt:

Name of the group

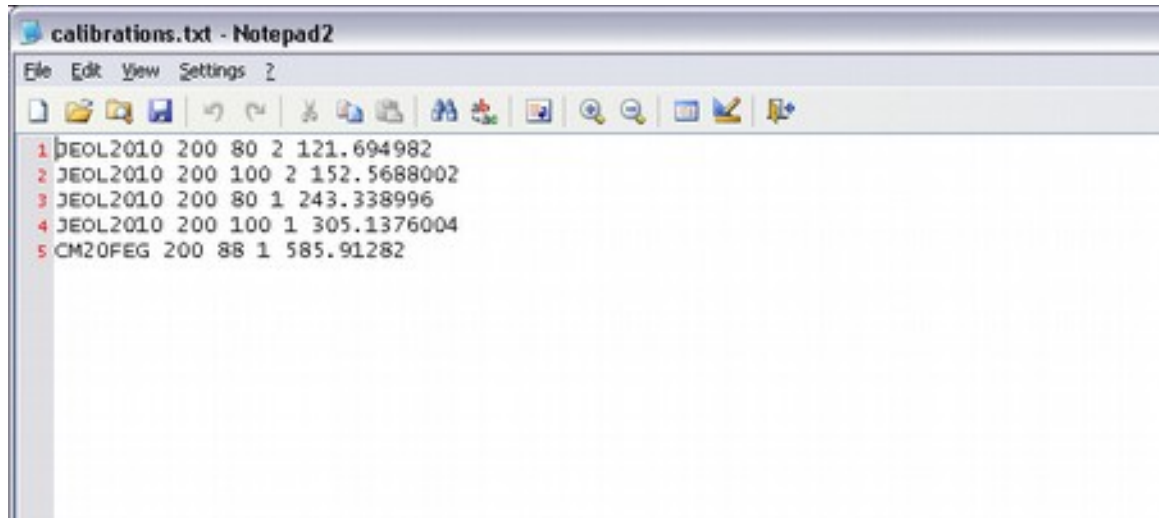
Atomic structure factor of atom 1 x1 y1 z1

...

Atomic structure factor of atom n xn yn zn

} Liste des atomes dans la maille

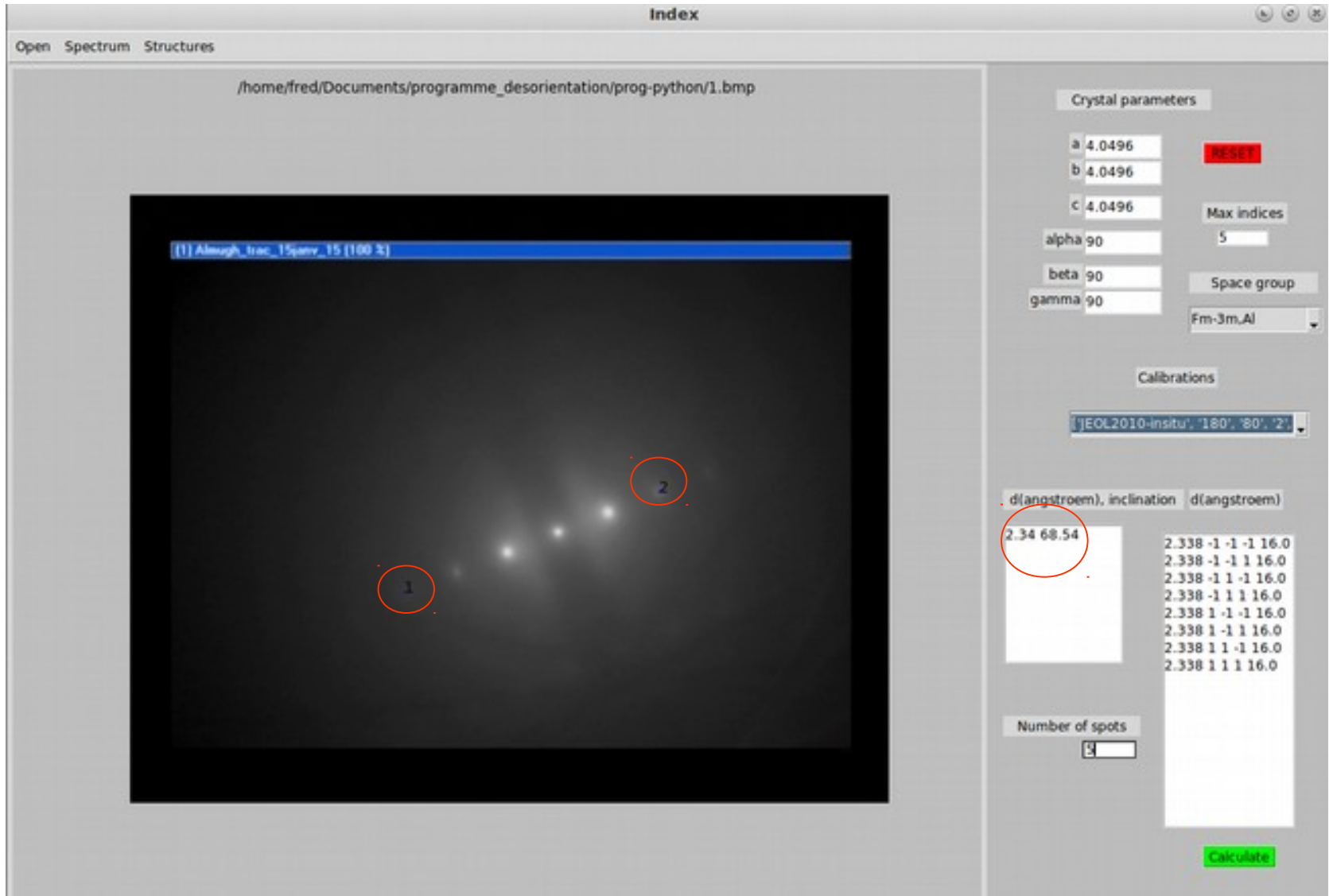
3. Enter the image calibration. You can modify it in calibrations.txt



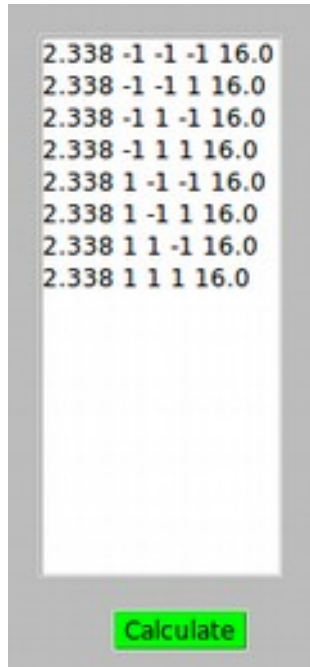
```
1 JEOL2010 200 80 2 121.694982
2 JEOL2010 200 100 2 152.5688002
3 JEOL2010 200 80 1 243.338996
4 JEOL2010 200 100 1 305.1376004
5 CM20FEG 200 88 1 585.91282
```

Format: Name of the microscope, Energy, Camera Length, Binning, product  $px \times \text{interplanar distance}$  Angstrom

4. Click on the image to enter the reference point (1) et the spot to index (point 2)  
Interplanar distance value and inclination angle (with respect to the vertical) are shown
- To remove points click RESET
  - Don't forget to fill the number of spots (i.e. x times the shortest distance in the reciprocal space)



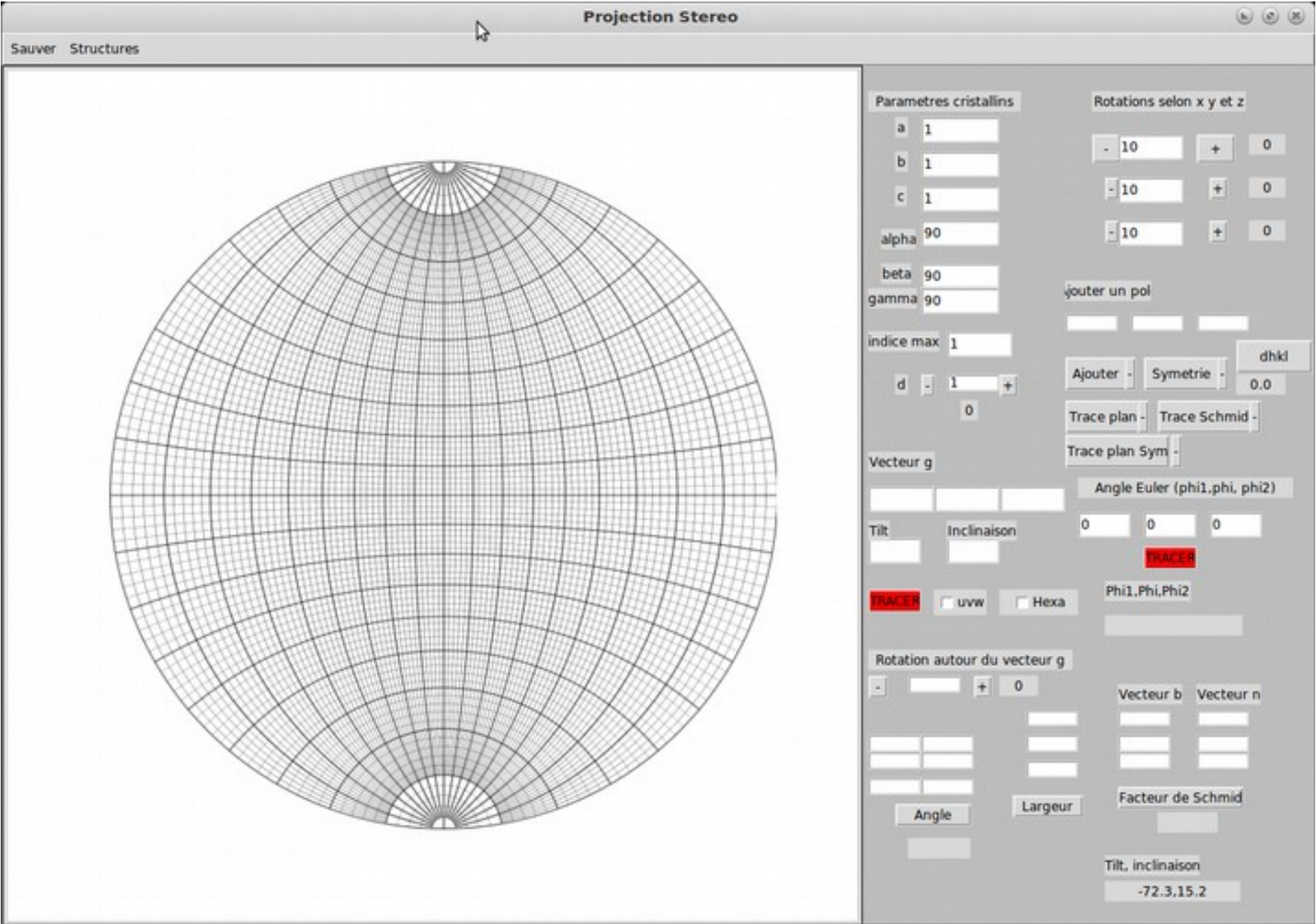
4. Click on calculate to know the possible spot indices



Output : interplanar distance, spot indices, diffracted intensity (arbitrary units)

Use this data to draw the stereographic projection

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

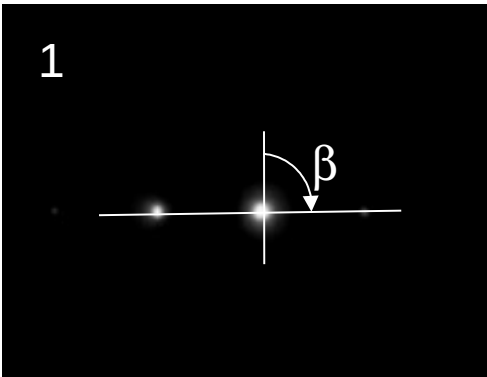
c 1

alpha 90

beta 90

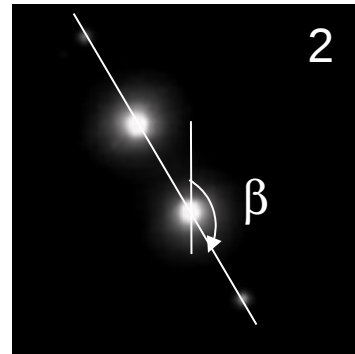
gamma 90

indice max 1



{111} beta=90

Tilt -22.2



{111} beta=147.5

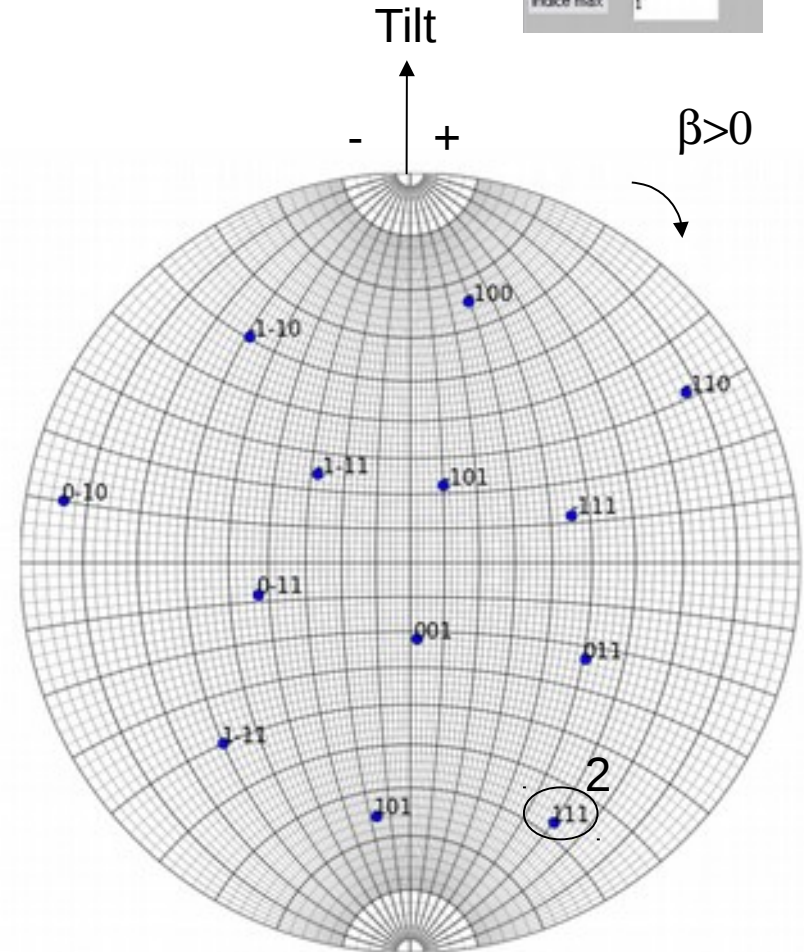
Tilt 30

**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,  $47^\circ$

Rotation autour du vecteur  $g$

-        +    0

Valeur de rotation

Incrément de rotation

Les angles d'Euler sont indiqués

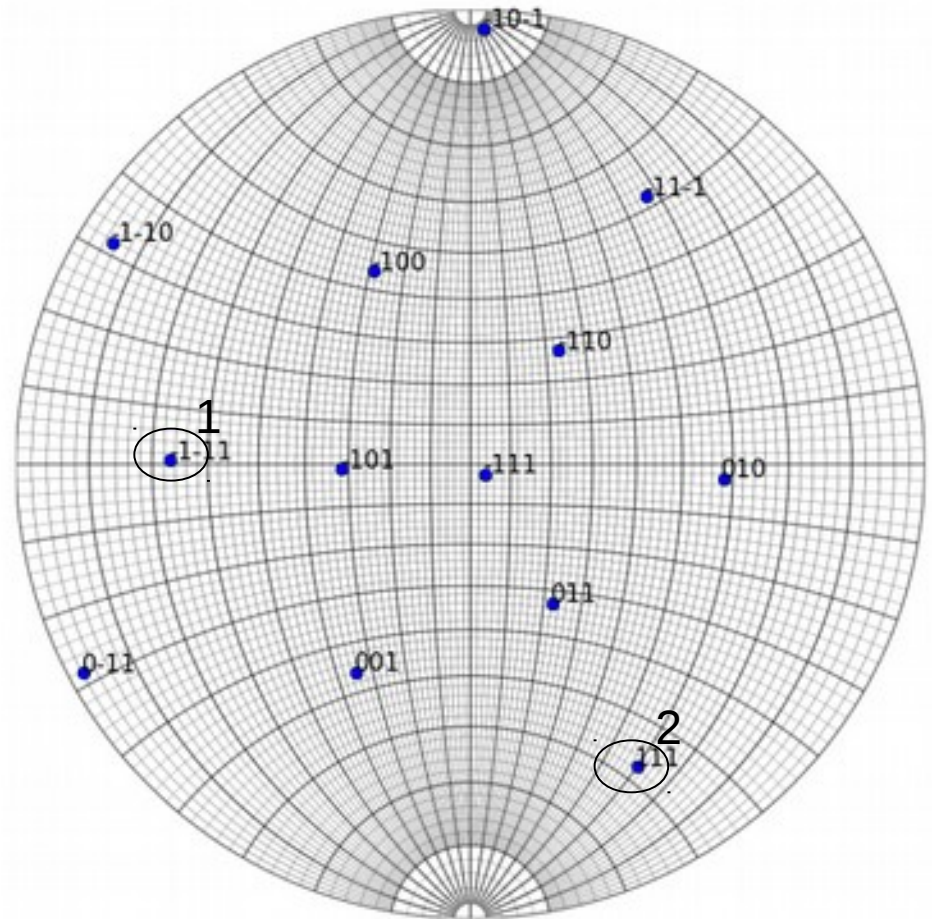
Phi1,Phi,Phi2

-28.7,55.1,-50.3

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

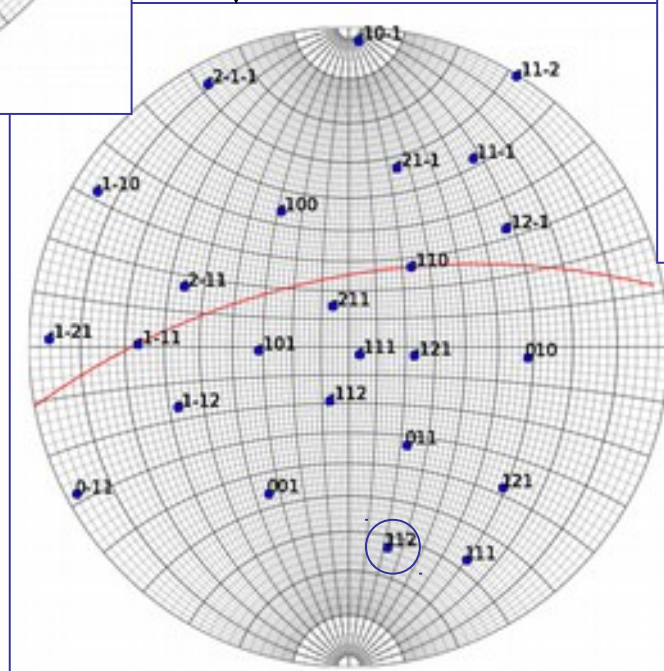
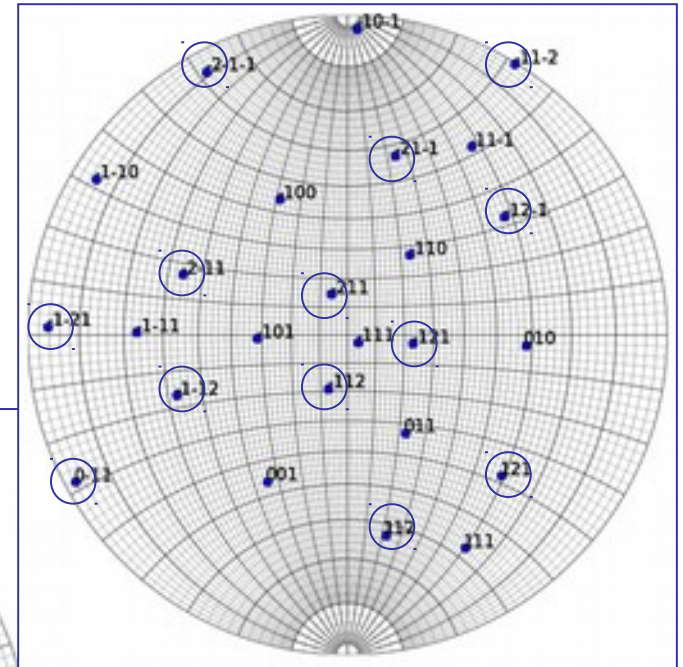
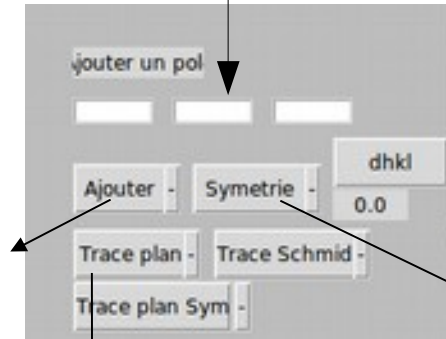
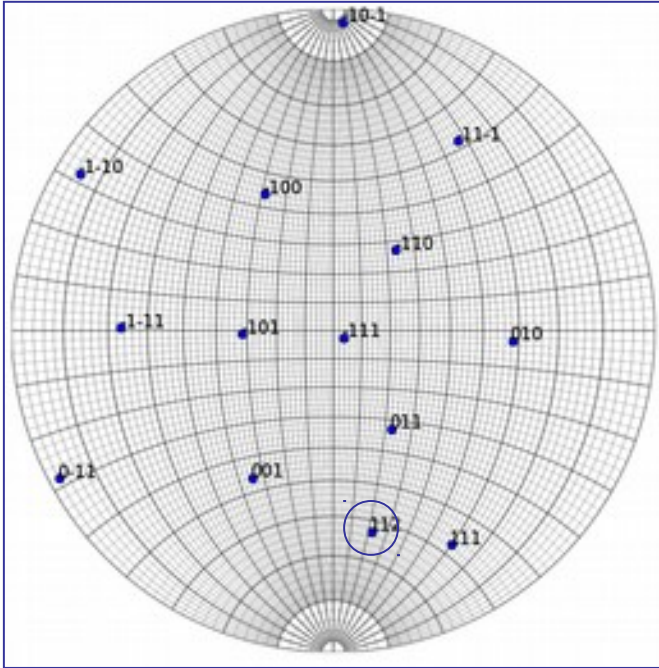
Tilt, inclinaison

-13.1,111.2



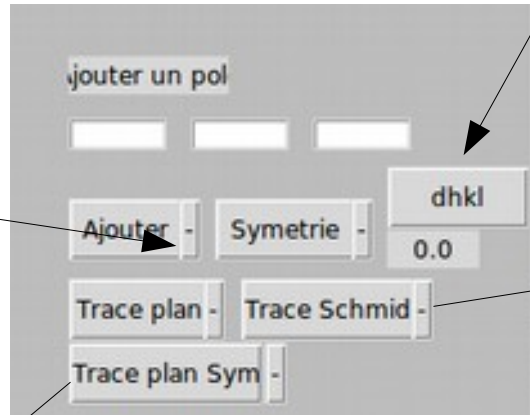
UVW

- Commencer par indiquer le pôle à considérer

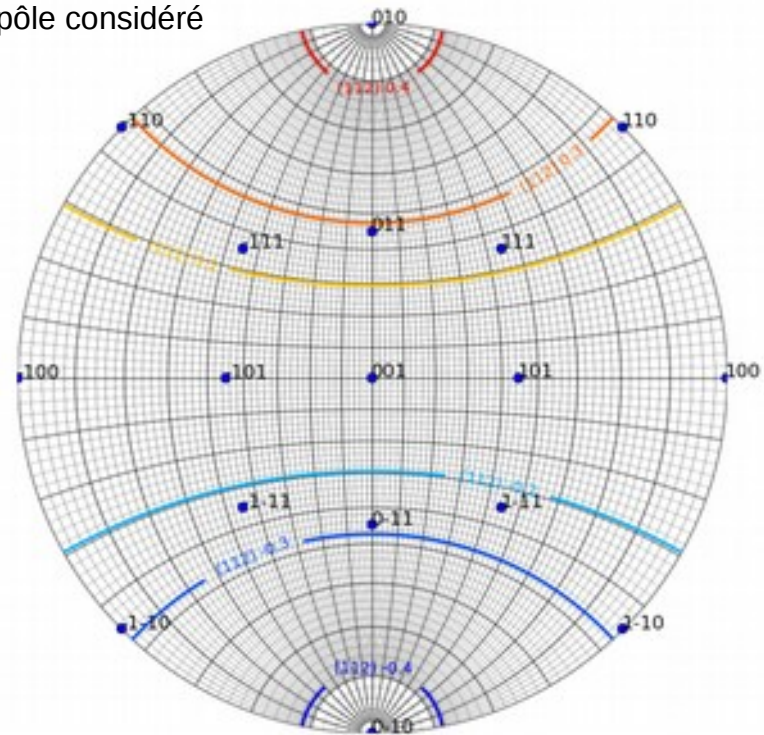
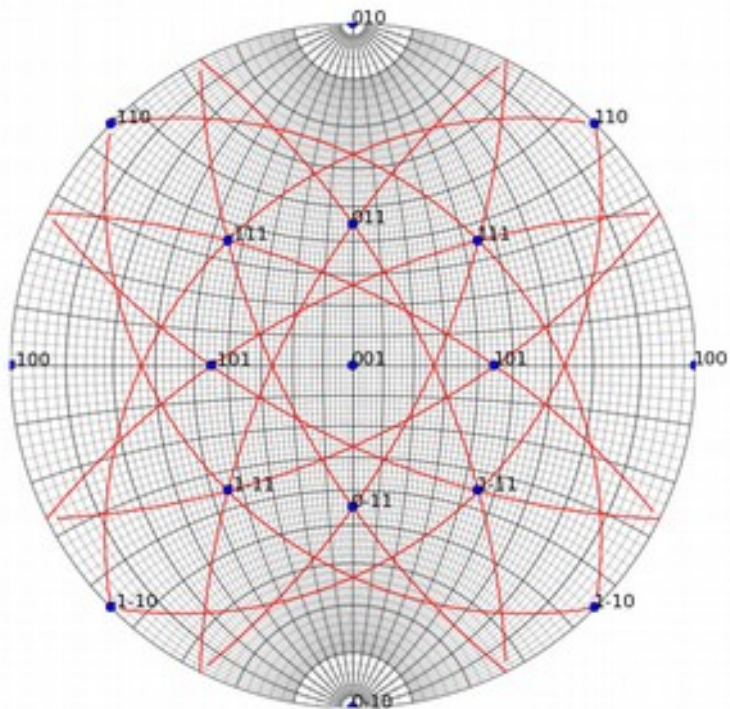


Affiche la distance inter-réticulaire du pôle considéré

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




Trace l'ensemble des plans de mêmes types

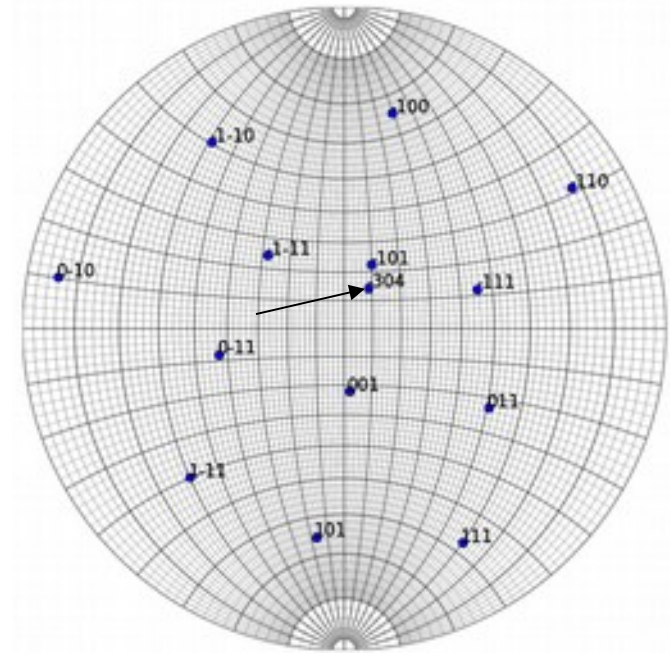


Trace les iso-contours du facteur de Schmid pour le plan considéré

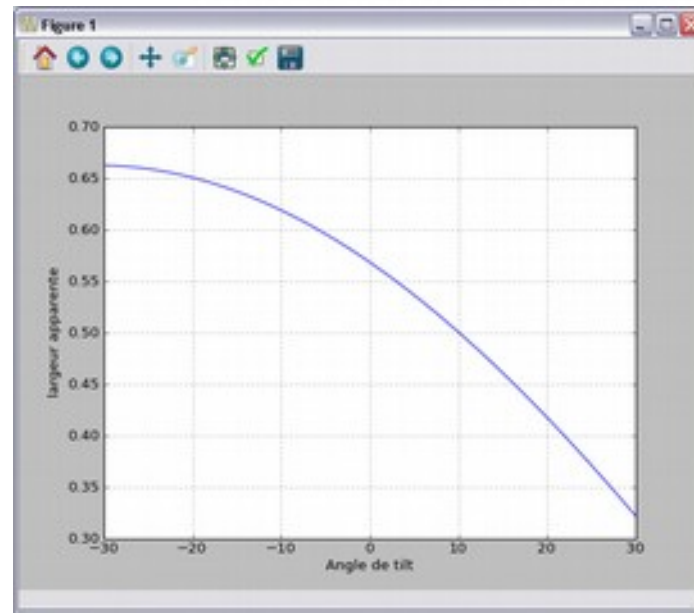


### Autres fonctionnalités:

- 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). A third input field shows the value '2' next to a vertical line, possibly representing a distance or a specific component. Below these fields is a button labeled 'Angle'. At the bottom, a display shows the result '30.0'.

- 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 labeled 'Vecteur b' and 'Vecteur n'. Under 'Vecteur b', the values are 1, 1, and 0. Under 'Vecteur n', the values are 1, 1, and 1. A button labeled 'Facteur de Schmid' is positioned below the inputs. The result '0.44' is displayed at the bottom.

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

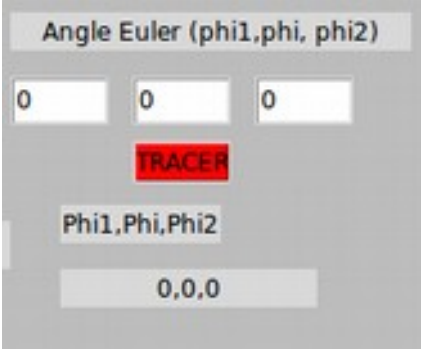
Interface for performing rotations around the x, y, and z axes. The title is 'Rotations selon x y et z'. It contains three rows of controls. Each row has a minus button, a text input field containing '10', a plus button, and a zero button. This layout allows for setting rotation angles for each axis.

- Sauver la projection (format jpeg par défaut)

Interface for saving the projection. The window title is '74 Projection Stereo'. Below the title bar is a button labeled 'Sauver'. The main area of the window is currently empty, likely intended for a visual representation of the data.

- Tracer directement avec les angles d'Euler

- Indication des angles d'Euler



Angle Euler (phi1,phi, phi2)

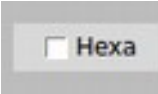
0 0 0

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