

# Anleitung OrientExpress:

Das Laue-Bild wird in einer Größe von 2000x2000 Pixel aufgenommen. Damit es vollständig mit der Software OrientExpress abgebildet und analysiert werden kann, muss es vorher auf eine Größe von 600x600 Pixel (durch PictureManager) gebracht werden.

1. OrientExpress auf dem Desktop öffnen  
→ *Data* → *Keyboard* → kristallographische Daten eingeben (Gitterparameter, Kristallsystem, Raumgruppe, Abstand Bildplatte-Probe (3 cm), Winkel (180°), Röntgenwellenlängenbereich (0.5 - 5Å), Abmessungen der Bildplatte (10cm x 10cm), Geometrie bei „Flat“ belassen → *Save*
2. → *Coordinates* → *Image* → entsprechendes Bild auswählen und hochladen
3. → *Scale* → *Measure* → zwei gegenüberliegende weiße Punkte auf der Aufnahme anklicken → Abstand zwischen den zwei Punkten eingeben 1 Inch = 2.54 cm → *OK*  
→ *Origin* → *Circle* → Kreis in die Mitte der Aufnahme schieben (weiße Mitte) und mit dem Tab unten soweit vergrößern, dass alle 4 weißen Punkte auf dem Kreis liegen, ggf. den Kreis noch einmal etwas verschieben → *OK*
4. → *Measure Coord.* → Reflexe auf der Laue Aufnahme anklicken (hierbei ist es sinnvoll, solche Reflexe zu nehmen, durch die möglichst viele `Girlanden` gehen) → *Save Coord.* → Name eingeben → *Speichern*
5. → *Indexation Search* → Bei „If unknown Miller indices“ die minimalen und maximalen hkl-Werte eingeben (die Werte sollten so gewählt werden, dass die unter Punkt 4 markierten Reflexe innerhalb dieser Werte liegen, ansonsten müssen die hkl-Werte höher eingestellt werden) → *OK*
6. → *Simulation* → *Laue* → *Adjust the spot radius* (vergrößern) → auf einzelne Reflexe auf der Aufnahme klicken, um die Millerschen Indizes aufzuzeigen (hier findet die Auswertung der Aufnahme statt und man soll am Ende eine Aussage über die Orientierung der Probe treffen) → Screen Shot → Speichern des Bildes in „Paint“

Für die Simulation der 4-, 3-, 2-zähligen Symmetrie, nach Punkt 1.:

∴ *Matrix* → *Aquisition* → *OK* → *OX axis* (beliebige Millersche Indizes eintragen, je nachdem welche Symmetrie man simulieren möchte → *Récipt.* anwählen → *OK* → Screen Shot → Speichern in „Paint“