



- Réduction de données de diffraction de monocristaux enregistrées sur un “détecteur plan” par la méthode de rotation, à longueur d’onde fixe
  - 1 monocristal
  - Pas de recouvrement entre les “images”
  - Jeu de donnée doit être continu
- Très orienté PX/synchrotron
- Concurrents principaux:
  - Mosfilm/imosfilm
  - Denzo/hkl
  - (D\*trek (rigaku), eval (?) )

- XDS : réduction des données
- XSCALE : mise à l'échelle multiples jeux de données
- XDSCONV : conversion des fichiers HKL au format shelx ou CNS

# XDS

- Fichier instructions + paramètres: XDS.INP
- Instructions:
  - “JOB”
  - “REFINE”
- Paramètres généraux:
  - Chemin vers les fichiers “données”,
  - Détecteur (orientation, taille des pixels, etc...) → fixe
  - Description du montage expérimental (axe de rotation, faisceau RX, distance détecteur-échantillon, etc... ) → variable
- Paramètres particuliers: fonction instruction JOB.

- Pour chaque JOB, il y a des fichiers de sorties:
  - \*.pck (vieux format) ou .cbf → images, visibles avec xds-viewer; exemple: FRAME.cbf,
  - \*.LP → fichiers textes (sortie écran + info, ~ .lst)
  - \*.xds : XPARAM.XDS, SPOT.XDS → nécessaires pour passer d'un job à un autre
  - XDS\_ASCII.HKL : LE fichier résultat

# JOB

- **XYCORR** : corrections géométriques du détecteur

– Exemple: Pilatus

!correction tables to compensate the misorientations of the modules

X-GEO\_CORR= ../x\_geo\_corr.cbf

Y-GEO\_CORR= ../y\_geo\_corr.cbf

- **INIT** : regarde si un pixel appartient au bruit de fond ou à une tâche de diffraction ('strong' pixel)

- **COLSPOT**: recherche de spots dans les images définies par “SPOT\_RANGE= ? ??”, crée un fichier SPOT.XDS
  
- **IDXREF**: indexation
  - Propose une maille,
  - Indexe SPOT.XDS (les plus forts)
  - Crée un fichier “XPARM.XDS” (~ matrice d’orientation + description du montage expérimental)
  
- **DEFPIX**: regarde les parties du détecteur “masquées” par le montage expérimental  
(VALUE\_RANGE\_FOR\_TRUSTED\_DETECTOR\_PIXELS= 7000 30000)

- **XPLAN**: stratégie
- **INTEGRATE** : integration
  - REFINE(INTEGRATE)= BEAM ORIENTATION CELL! AXIS  
DISTANCE
  - DELPHI=10
  - Doit avoir un fichier “XPARAM.XDS”
- **CORRECT** : corrections (Lorentz, polarisation, etc...) + statistiques, crée le fichier XDS\_ASCII.HKL
- **ALL**



# XDSCONV

INPUT\_FILE=XDS\_ASCII.HKL

OUTPUT\_FILE=az246\_14.hkl SHELX

MERGE=FALSE

**XSCALE**