

目次

1. Overview.....	2	9. Spot ID.....	20
1.1. License.....	2	7.1. Main area.....	20
1.3. 必要/推奨動作環境.....	2	7.2. Optics.....	20
1.3. ReciPro の特徴.....	2	7.3. Spot.....	20
2. Main window.....	3	7.4. Index.....	21
2.1. File menu.....	3	10. Powder diffraction.....	22
2.2. Rotation control.....	4	11. Crystal database.....	23
2.3. Crystal List.....	4	11.1. Table.....	23
2.4. Crystal Information.....	5	11.2. Search options.....	23
2.5. Functions.....	5	Appendix.....	24
3. Rotation geometry.....	6	A.1. ReciPro における座標系の定義.....	24
3.1. ReciPro coordinate system (ZXZ).....	6	A.2. Crystal diffraction における座標系の定義.....	24
3.2. Experimental coordinate system.....	7	A.3. Principle of Bethe method.....	26
3.3. Link.....	7	A.4. Principle of HRTEM simulation.....	26
4. Structure Viewer.....	8		
4.1. Main area.....	8		
4.2. File menu.....	8		
4.3. Tab menu.....	8		
4.4. Toolbar.....	11		
5. Stereonet.....	12		
5.1. Main area.....	12		
5.2. File menu.....	12		
5.3. Mode.....	12		
5.4. Indices.....	12		
5.5. タブメニュー.....	12		
6. Crystal diffraction.....	13		
6.1. Main area.....	13		
6.2. File menu.....	13		
6.3. Monitor / Detector geometry/ Reset center.....	13		
6.3. Tab menu.....	13		
6.4. Spot property.....	14		
6.5. Toolbar.....	15		
6.6. Detector geometry.....	15		
6.7. CBED setting.....	16		
6.8. Diffraction spot information.....	16		
7. HRTEM simulation.....	17		
7.1. Main area.....	17		
7.2. File menu.....	17		
7.3. Image mode.....	17		
7.4. Sample property.....	17		
7.5. Optical property.....	17		
7.6. Simulation property.....	18		
7.7. Appearance.....	18		
8. TEM ID.....	19		
8.1. TEM condition.....	19		
8.2. Photo1, 2, 3.....	19		

1. Overview

ReciPro is a software package for various crystallographic calculations, simulation of diffraction patterns and high-resolution TEM images, etc., from crystal structure information.

Please send us your comments and suggestions via email (seto@crystal.kobe-u.ac.jp) or via Issue on GitHub (<https://github.com/seto77/ReciPro/issues>).

1.1. License

This software is distributed under the MIT license (<https://github.com/seto77/ReciPro/blob/master/LICENSE.md>). Anyone is free to use this software, free of charge, provided that they accept the following conditions.

- You are free to copy, distribute, modify, distribute modified versions of this software, use it for commercial purposes, sell it for a fee, and do whatever you want with it.
- If you redistribute this software, you must put the copyright of this software and the full text of this license in the source code or in a separate license notice file included with the source code.
- There is no warranty for this software. The author assumes no responsibility for any problems that may arise from the use of this software.

1.3. System requirements

To run ReciPro, you need to have

- Windows OS running .Net Framework 4.8 or higher
- Graphics with support for OpenGL 1.3 or higher

.Net Framework 4.8 can be installed from Microsoft homepage; if you have the latest update in Windows 10, you should already have .Net Framework 4.8 installed.

Also, some of ReciPro features may require large computational resources. To improve the speed, we use multi-threading and GPU usage as much as possible. We recommend you to use a computer with the following specs for better performance.

- Windows 10, 64 bit version
- 16GB or more memory
- CPU with 8 or more cores (especially when performing electron diffraction kinetics calculations)
- External GPU with support for OpenGL 1.5 (especially when using Structure Viewer)

1.3. ReciPro の特徴

Full GUI

All operations in ReciPro are done through a graphical interface. Most of the input and output of files are drag & drop.

Crystal list

ReciPro allows you to handle multiple crystals at once. There is no need to create files and run many windows for each crystal.

The software "CSManager"¹, developed by the same author, allows you to import a huge number of crystal structures easily.

Space groups

ReciPro has a built-in database of space groups. The database includes symmetry elements, Wyckoff positions, extinction rules, etc. for the 230 space groups contained in International Tables for Crystallography Volume A (henceforth referred to as ITA), plus a subset (530 symbols) of space groups (Hall symbols²).

Atomic information

ReciPro contains information on valence, radius, characteristic X-ray energies and isotope ratios for elements from 1 (H) to 98 (Cf). Parameters necessary for the approximation of the atomic scattering factors for X-rays and electrons are incorporated in ReciPro. Parameters of scattering lengths for neutrons are also incorporated in ReciPro.

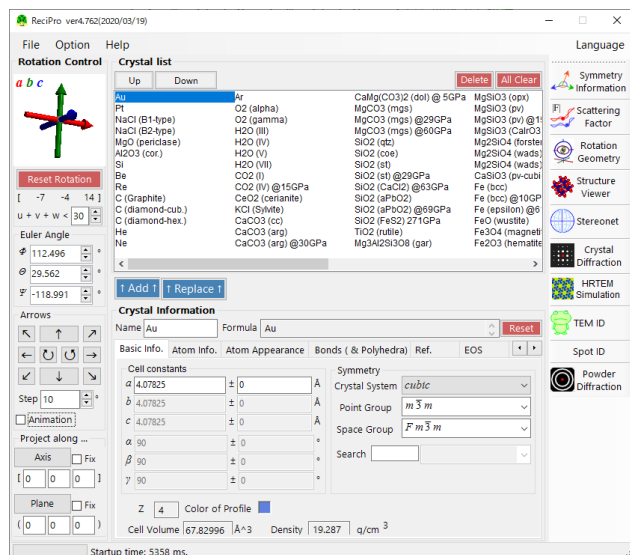
Flexible setting of crystal rotation

ReciPro allows the user to set the orientation of the crystal to a crystal axis index, a crystal plane index, or to rotate the crystal to any orientation with the mouse. The crystal rotation state can also be used synchronously to simulate crystal structure, stereonet or single crystal diffraction.

¹ CSManager は <https://github.com/seto77/CSManager/releases/latest> からダウンロードできます。

² Hall symbol の表記方法については、International tables for crystallography, Volume B (ITB)の 1.4. Symmetry in reciprocal space をご覧ください。

2. Main window



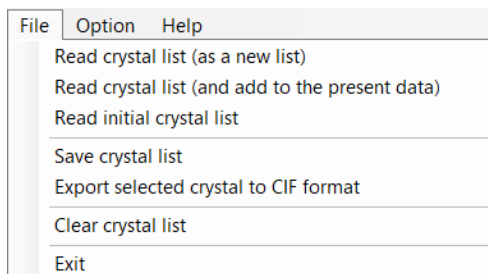
When ReciPro is successfully launched³, the main window appears. In the window, the user selects the crystal to be calculated, rotates the crystal, and invokes various other functions. This window can be divided into following types

- File menu (top of page)
- Rotation control (left part)
- Crystal List (upper center)
- Crystal Information (bottom center)
- Functions (right part)

The details are described below.

2.1. File menu

File



Read crystal list (as new list)

Reads a new crystal list file (*.xml). The already loaded crystal list will be deleted.

Read crystal list (and add to the present data)

Reads a new crystal list file (*.xml). The loaded crystal list is appended to the current list.

Read initial crystal list

Reads the list of crystals loaded at startup again.

Save crystal list

Saves the current crystal list.

Export the selected crystal to CIF format

現在選択している結晶を CIF フォーマットとして保存します。

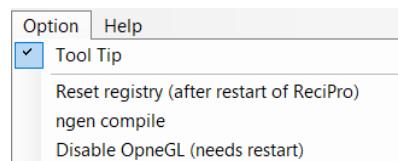
Clear crystal list

Clear all current crystal lists.

Exit

Exit the application.

Option



Tool tip

When checked, the tooltip will be displayed.

Reset registry (after restart of ReciPro)

Reset the registry on reboot. The registry contains information such as window size, wavelength, and camera length. Resetting the registry may be useful if the software becomes unstable for some reason.

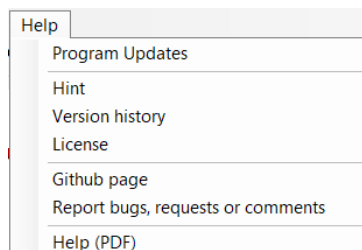
ngen compile

By pre-compiling your program, you can speed up the startup time. However, the effect is not so great.

Disable OpenGL (needs restart)

Check to turn off the OpenGL feature. ReciPro uses OpenGL 1.3 or later to draw in three dimensions. However, if you are using an older PC, remote desktop environment or Windows emulation on Mac, the OpenGL version may be less than 1.3. In that case, please check this item.

Help



Program updates

Check if a new version has been released and if so, update it.

Hint

Deprecated.

Version history

License

Github page

Report bugs, requests, or comments

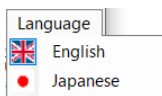
³ 起動時に空間群や原子に関する情報をロードするため、起動には若干の時間がかかります。

Help (PDF)

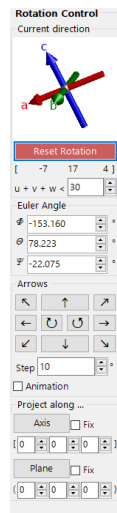
Show this page.

Language

Switch between languages. Currently, only English and Japanese are supported. Need to reboot after switching.



2.2. Rotation control



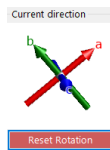
This control allows you to view/set the rotation status of the selected crystal.

Current direction

The current rotation state of the crystal is displayed. By mouse-dragging this area, you can rotate the crystal.

The axis of the crystal is shown as

- red: a-axis
- green: b-axis
- blue: c-axis



Reset rotation

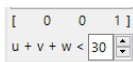
The crystal orientation is reset to the "initial state", which means that the c-axis is perpendicular to the screen and the b-axis faces upward when projected on the screen⁴.

Zone axis

Displays the zone axis corresponding to the direction perpendicular to the screen.

$u+v+w < 30$ indicates the closest azimuth for u, v, w that does not exceed 30 in absolute terms.

スクリーンに垂直な方向に対応する晶帯軸指数を表示します。 $u+v+w < 30$ とセットした場合は、 uvw の絶対値の総和が30を超えない範囲で最も近い方位を表示します⁵。

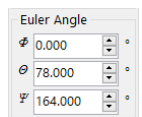


Euler angles

結晶の回転状態をオイラー角で表示/設定します。オイラー角は三つの角度の組で表現され、ReciPro では

- Ψ : Z 軸回転
- θ : X 軸回転
- Φ : Z 軸回転

と定義し、 Ψ, θ, Φ の順に回転操作を施します。座標系についての詳しい説明は [3. Rotation geometry](#) や [Appendix](#) をご覧ください。



Arrows

矢印ボタンをおすと、矢印の方向に角度 Step 分だけ回転します。

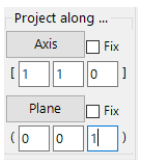
また、"Animation"をチェックした場合は、指定した回転速度で結晶が連続的に回転します。



Project along...

晶体軸あるいは結晶面の指数を指定して、結晶方位を回転させます。

"Fix"をチェックすると、指定した晶体軸あるいは結晶面が空間的に固定された状態で回転操作が行われます。⁶



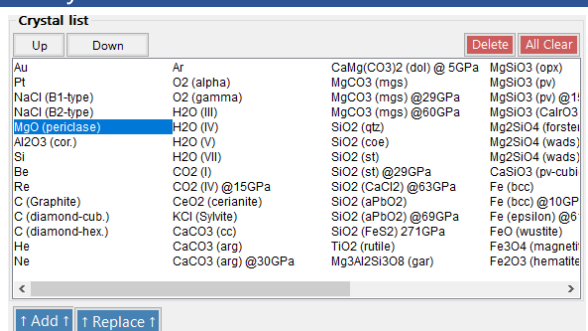
Axis

指定した晶帯軸をスクリーン面の垂直手前方向に設定し、結晶を回転します。このときこの軸に垂直な Plane が設定されている(=内積が0になっている)とその面の方向が画面上向きに設定されます。

Plane

指定した結晶面の法線をスクリーン面の垂直手前方向に設定し、結晶を回転します。このときこの面に垂直な Axis が設定されている(=内積が0になっている)とその晶帯軸の方向が画面上向きに設定されます。

2.3. Crystal List



読み込まれている結晶のリストを表示/変更します。インストール直後の初期状態では 80 個程度の結晶が含まれているはず⁷。

リスト内から結晶を選択すると、下の画面 (Crystal

⁴ The symbols and definitions for Eulerian angles are the same as those used in Oxford EBSD software (formerly HKL's CHANNEL5). Therefore, users of Oxford EBSD can input the angle output as it is.

⁵ 例えば、[0 0 1] 晶体軸からほんのわずかに結晶が回転した場合、その晶体軸は[1 0 100]のような高次の指数になってしまいます。このような表示を避けたい場合は、 $u+v+w$ の総和を小さい値に設定してください。

⁶ この機能は、撮影した写真中の回折スポットの一つが明確に指数付けできたとき、威力を発揮します。なお、Fix をチェックして晶体軸/結晶面の方向が固定されるのは、マウスや矢印による回転操作の場合のみです。オイラー角が直接入力された場合はその方位は固定されません。

⁷ 結晶のリストは、ReciPro の終了時に自動で保存され、次回起動時に自動で読み込まれます。

information)に詳細情報が表示され、計算対象の結晶として設定されます。

Up/Down

選択した結晶の順番を上/下に移動します。

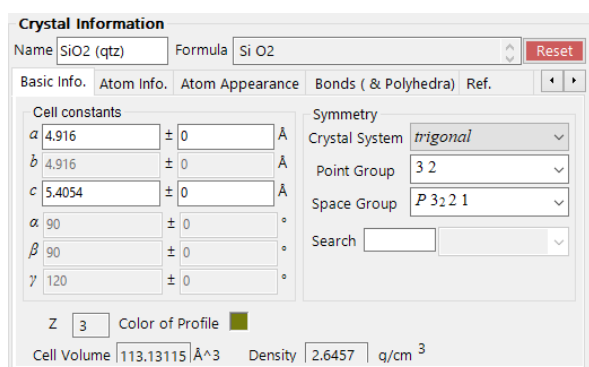
Delete/All clear

Removes the selected crystal from the list. Alternatively, removes all crystals from the list.

Add/Replace

The crystal is added to the end of the list. Alternatively, it replaces the crystal with the selected crystal in the list.

2.4. Crystal Information



Crystal lattice parameters, symmetry, and atomic position can be set and displayed in this area. By dragging and dropping CIF or AMC file to this area, you can load any crystal.

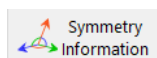
Whenever you make any changes to the crystal, you must press the "Add" or "Replace" button. If you do not press this button, the crystal will not be saved in the crystal list and your changes will be lost.

This section is very long and will be explained in detail on another page.

2.5. Functions

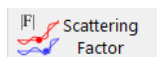
Symmetry information

選択した結晶の対称性に関する情報を表示し、結晶学的な計算を提供します。この項目は[別のファイル](#)で説明します。



Scattering factor

結晶面をリストアップし、結晶構造因子を計算します。この項目は[別のファイル](#)で説明します。



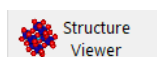
Rotation geometry

回転状態(行列)を 3 次元的に描画し、解析します。詳しくは [3. Rotation geometry](#) の項を参照してください。



Structure viewer

結晶の構造を 3 次元的に描画します。結晶面、単位格子、配位多面体なども描画できます。詳しくは [4. Structure viewer](#) の項を参照してください。



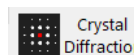
Stereonet

結晶面あるいは晶体軸の方向をステレオネット上に描画します。詳しくは [5. stereonet](#) の項を参照してください。



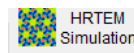
Crystal diffraction

電子/X 線の回折のシミュレーションを行います。詳しくは [6. Crystal diffraction](#) の項を参照してください。



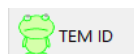
HRTEM simulation

HRTEM (High resolution TEM)のシミュレーションを行います。詳しくは [7. HRTEM simulation](#) の項を参照してください。



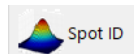
TEM ID

撮影した電子線回折写真の指数づけをおこないます。詳しくは [8. TEM ID](#) の項を参照してください。



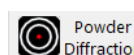
Spot ID

撮影した電子線回折データを読み込み、スポット検出、フィッティング、指数付けを行います。詳しくは [9. Spot ID](#) の項を参照してください。

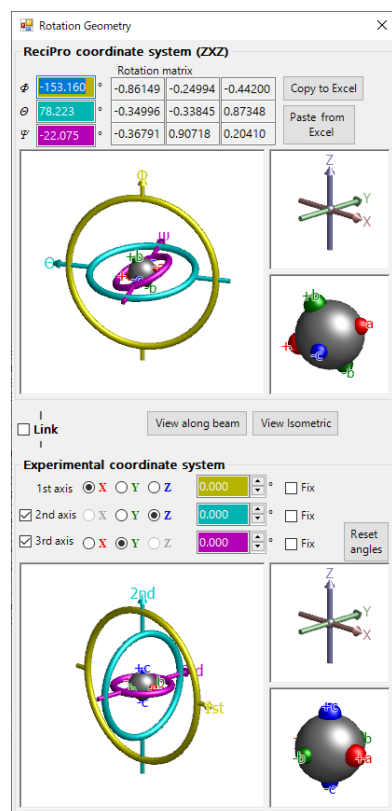


Powder diffraction

多結晶の回折パターンをシミュレーション、フィッティングします。詳しくは、[10. Powder diffraction](#) の項を参照してください。



3. Rotation geometry

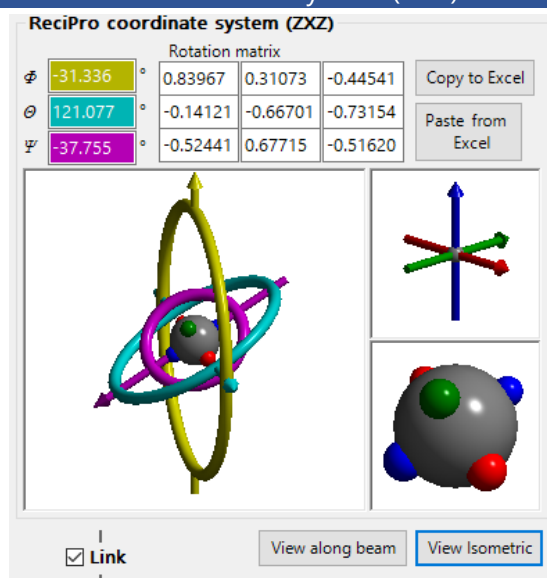


This provides a function to represent the rotational state of a crystal as a 3x3 matrix and to convert it to a different Eulerian coordinate system.

ReciPro provides three Eulerian angles, Ψ , θ , and Φ , in Z-X-Z order, to represent the rotational state of a crystal. However, this expression does not necessarily correspond to the rotation axis of the goniometer in the actual optical system.

Converting the Eulerian angle in ReciPro to an arbitrarily defined Eulerian angle supports the adjustment of the goniometer in the laboratory.

3.1. ReciPro coordinate system (ZXZ)



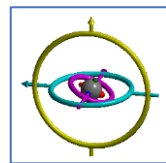
“Rotation geometry” 画面の上半分は、“Reciprocal coordinate system” で表現された結晶の回転状態を表示/設定する部分です。

上部に表示されている Φ , θ , Ψ の値は Main window で設定されたオイラー角と同期しています。 Ψ , θ , Φ の値を変更したい場合は Main Window 側からおこなってください。

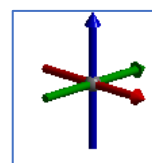
“Rotation matrix” の部分には、現在の回転状態に対応する 3×3 行列の回転行列が表示されます。

OpenGL windows

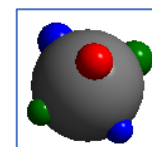
The OpenGL window is a three-dimensional representation of the current rotation situation, and the window with three toruses (doughnuts) shows the situation of the three rotation axes. The arrow through the yellow torus corresponds to the axis of rotation of the Euler angle Φ , which is the upper (1st) axis of rotation in the goniometer. The light blue arrow is the middle (2nd) axis of rotation corresponding to θ , and the pink arrow is the lower (3rd) axis of rotation corresponding to Ψ .



The red, green and blue arrows in this window represent the X, Y and Z axes in real space Cartesian coordinates. Note that the arrows displayed in this window are not the same as the arrows displayed in the Rotation control of the Main window (crystal axis).



The gray sphere in the center of the goniometer represents the state of the object as it rotates. The red, green, and blue spheres represent the direction of the object; when Φ , θ , and Ψ are all zero, the red, green, and blue spheres are in the same direction as the Cartesian coordinates +X, +Y, and +Z in real space, respectively. Varying Eulerian angles cause the object to rotate in various directions.



The window drawn in OpenGL can be rotated by dragging the left mouse button. Please note that this operation does not rotate the crystal itself, but only changes the projection direction of “Rotation geometry”. If you want to rotate the crystal itself, you need to rotate it from the main window.

Copy to Excel

Copy 3x3 rotation matrix to the clipboard in a tab-separated format that can be pasted into Excel.

Paste from Excel

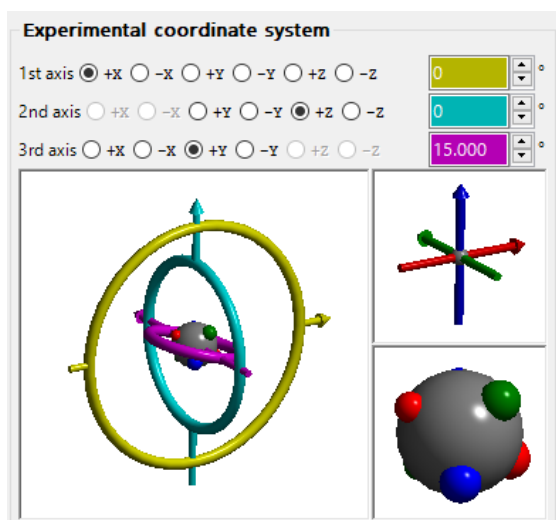
When Excel-formatted 3x3 tab-separated numbers are copied to the clipboard, you can set it as a rotation matrix.

View along beam / isometric

前者は、Main window の投影方位と一致させます。すなわち、黄色の回転軸(直交座標系における Z 軸)がスクリーン垂直になります⁸。後者は、isometric な方位で投影します。結晶が回転しているのではなく、投影方向が回転しているだけであるということにご注意ください。

⁸ ReciPro では実空間座標の Z 軸が X 線や電子線の入射方向と一致しているため、“View along beam”と表現しています。

3.2. Experimental coordinate system



“Rotation geometry” 画面の下半分は、任意の回転軸でオイラー角を定義し、そのゴニオメーターの回転状態を表示/設定する部分です。これを“Experimental coordinate system”と呼びます。OpenGL で描画されているオブジェクトの説明は、“ReciPro coordinate system”の説明と同一ですので省略します。

1st, 2nd, 3rd axes

ゴニオメーターの回転軸は、上位(1st)、中位(2nd)、下位(3rd) についてそれぞれ $\pm X$, $\pm Y$, $\pm Z$ の中から選択してください⁹。選択を切り替えると、OpenGL window のグラフィクスもそれに応じて変化します。

それぞれの回転軸に対するオイラー角は、黄色、水色、ピンク色のテキストボックスに表示されます。また、値を直接入力することも出来ます。

3.3. Link

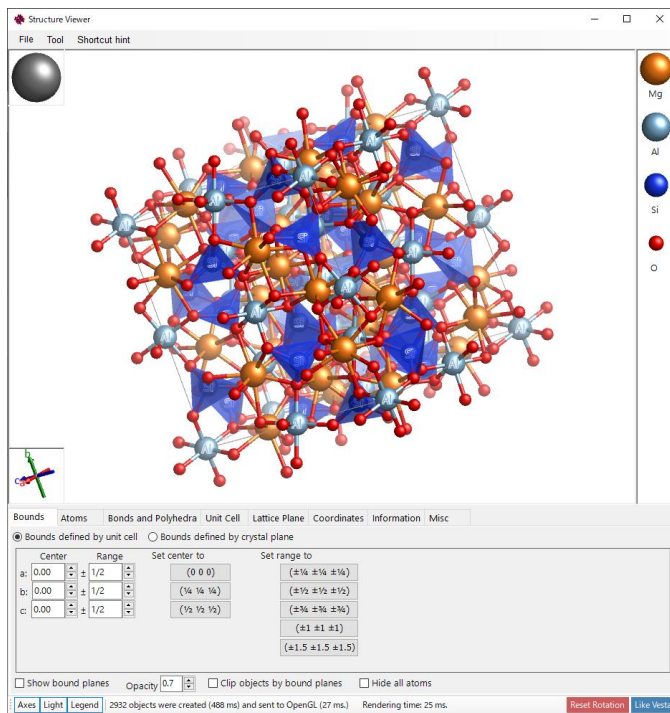
This is a great feature of "Rotation geometry". If you check "Link", you will see "ReciPro coordinate system" and "Experimental coordinate system" and adjust their Euler angles to match each other so that the object's orientation is consistent with each other. That is, it provides information on the Euler angles for a goniometer represented by a differently defined axis of rotation than ReciPro.



For example, suppose that the laboratory goniometer is adjusted so that the a-axis of a crystal is aligned with the direction of X-ray incidence and the b-axis with the horizontal direction. Enter the Eulerian angle of the laboratory goniometer in the experimental coordinate system. Furthermore, rotate the crystal in the main window of ReciPro and set the vertical direction of the screen to the a-axis and the horizontal direction to the b-axis. If Link is checked in this state, this means that when you point the crystal to a different orientation in the Main window, the angle of the goniometer that achieves the orientation will be displayed.

⁹ ReciPro で採用しているゴニオメーターは、1st: +Z, 2nd: +X, 3rd: +Z に対応しています。

4. Structure Viewer



"Structure Viewer" draws the crystal selected in the main window as a three-dimensional image. This function uses Open GL and requires a video card to draw the crystal.

4.1. Main area

In the upper part of the main area, the crystal structure is drawn. In the upper left, the direction of the light source is shown. The direction of the crystal axis is shown in the lower left. On the right, the legend of the atoms is shown.

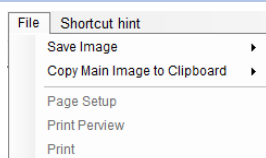
マウス操作

以下のようなマウス操作を受け付けます。

- Left drag: rotation.
- Center drag: translation
- Right up/down or wheel: zoom
- Left double click: select/unselect the atom
- Right click:
- CTRL + Right double click: Change perspective <-> orthogonal projection.
- CTRL + Right up/down: Change degree of perspective.

4.2. File menu

File



Save image

Saves the drawn image to a file.

Copy main image to clipboard

Copy the image to the clipboard, CTRL+SHIFT+c does

the same action.

Shortcut hint

Displays shortcut hint.

4.3. Tab menu

4.3.1. Bounds

In this tab, you can specify the drawing range of the crystal. There are two ways to set the range: by the unit cell or by the crystal face. You can switch between these two ways using the radio buttons at the top.

Bounds defined by cell

☒ Bounds defined by unit cell ☐ Bounds defined by crystal plane

	Center	Range	Set center to	Set range to
a:	0.00	± 0.50	(0 0 0)	(±1/2 ±1/2 ±1/2)
b:	0.00	± 0.50	(1/4 1/4 1/4)	(±3/4 ±3/4 ±3/4)
c:	0.00	± 0.50	(1/2 1/2 1/2)	(±1 ±1 ±1)

In this mode, the a, b, and c-axes of the unit cell are the unit of the drawing range.

The "Center" is the central fractional coordinate and the "Range" is the upper/lower limit for each axis.

For frequently used values, you can use the preset buttons on the right side.

Bounds defined by crystal planes

In this mode, you can specify the area to be drawn based on the crystal plane. If the input bounds is incomplete and a spatially closed region cannot be defined, ReciPro will automatically set the bound to one unit cell and draw it.

Bound list

☐ Bounds defined by unit cell ☒ Bounds defined by crystal plane

	h	k	l	Equivalency	Multiples of d	Distance (Å)	Color
<input checked="" type="checkbox"/>	1	1	1	<input checked="" type="checkbox"/>	1.000	0.663	Green

When you want to disable the boundary plane temporarily, check the leftmost checkbox in the list.

When you want to add a new bound plane, click the "Add" button, when you want to replace it, click the "Replace" button, when you want to delete an existing plane, click the "Delete" button.

If you want to permanently save the changes you have made, you have to press the "Add" or "Replace" button in the "Main Window" as well. Please do so. Otherwise, when you change the selection of the crystal list in the "Main Window", the changes you have made will be lost.

H k l indices

Bound plane を Miller 指数で設定し

ます。指数を設定する部分の左側にあるチェックボックスは、設定した面に対して結晶学的に等価な面を考慮するかどうかを決定します¹⁰。

¹⁰ 例えば立方晶系の結晶に対して equivalency をチェックして{110}を指定すると、結晶学的に等価な次の 12 枚の結晶面(110), (1-10), (-110), (-1-10), (101), (10-1), (-101), (-10-1), (011), (01-1), (0-11), (0-1-1)が bounds として設定されます。

Distance from origin

The distance from the center of the crystal to the bound face is set. The unit of distance is selectable between "d" and "Å". In the former case, the distance is the input value multiplied by the d-value of the crystal face (in the case of the figure, $d \times 1.5 = 9.949 \text{ Å}$). If you choose the latter, the input value will be the absolute distance in Å scale. If you change one of them, the other will be changed automatically.

Distance from origin
d× 1.500 (= 9.949 Å)

Show bound planes / Opacity

Shows the bound planes or not. When checked, you can set its transparency in Opacity (0 is transparent and 1 is opaque).

☐ Show bound planes Opacity 0.7

Clip objects by bounds planes

If checked, the inside area specified by bounds will be drawn, and objects that intersect with the bounds will be clipped.

☐ Clip objects by bound planes

Hide atoms

If checked, all atoms, bonds and polyhedra will be hidden.¹¹

☐ Hide all atoms

4.3.2. Atoms

このタブでは、原子の座標や見た目を設定します。

Atom list

Label	Element	X	Y	Z	Occ.	Multi.	Wyck. Let.	Site Sym.
MgX1	12: Mg	1/2	1/2	1/4	1	8	b	2.22
MgX2	12: Mg	5/8	1/4	3/8	1	32	g	1
MgY	12: Mg	1/2	1/4	1/8	0.26	16	c	-1

Add Replace Apply to Same Elements Up Down Delete

The list of atoms in the crystal is displayed. The list can be manipulated by using "Add", "Replace", and "Delete". If you want to temporarily hide an atom, uncheck the leftmost checkbox in the list.

If you want to permanently save your changes, be sure to click on "Add" or "Replace" in the "Main Window" to make the changes permanent. Please do so. Otherwise, when you change the selection of the crystal list in the "Main Window", the changes you have made will be lost.

Element & Position

Element & Position Origin shift Appearance

Label: MgX1 X: 1/2 Occ: 1

Element: 12: Mg Y: 1/2

Z: 1/4

☐ Show error

Label

Enter the label of the atom.

Element

Set the elements.

X, Y, Z

Enter a real number from 0 to 1, or a fraction such as 1/2 or 2/3.

Occ

Set the occupancy of an atom, which should be a real number between 0 and 1.

Origin shift

Element & Position Origin shift Appearance

Shift coordinates of all atoms by:

☒ + ☐ -

Apply custom shift

Shifts atomic position. Press preset buttons, or enter custom values and press the "Apply custom shift" button.

Appearance

Element & Position Origin shift Appearance

Radius: 0.445 Å Color:

Ambient: 0.1 Diffusion: 0.8 Specular: 0.7 Shininess: 20.0 Emission: 0.2 Alpha: 1.0

描画する原子の半径や色、質感を設定します。

Radius

Set the atomic radius.

Atom color

Set the color of the atom.

Material

Set the textural properties of atoms in the drawing.

Apply to same elements

Appears only when the "Appearance" tab is selected. The set properties (ionic radius and foreground color) will be applied to all the atoms of the same elemental species.

4.3.3. Bonds (& Polyhedra)

In this tab, you can enter information about the bond and polyhedron.

Bond list

	Center	Vertex	Max len.	Min len.	Bond color	Polyhedron
<input checked="" type="checkbox"/>	14: Si	8: O	2.2	0	<input type="text" value="brown"/>	<input type="text" value="blue"/>
<input checked="" type="checkbox"/>	13: Al	8: O	2.2	0	<input type="text" value="brown"/>	<input type="text" value="purple"/>

Add Replace Delete

The bond information is displayed. You can manipulate the list by using "Add", "Replace" or "Delete" buttons. If you want to temporarily disable a bond, you can uncheck the leftmost checkbox in the list.

If you want to permanently save your changes, be sure to click on the "Add" or "Replace" button in the "Main Window" to make the changes permanent. Please do so. Otherwise, when you change the selection of the crystal list in the "Main Window", the changes you have made will be lost.

Bond property

Bonds

(center) (vertex)

Bonding Atoms: 14: Si - 8: O

Length between: 0.000 - 2.200 Å

Radius: 0.100 Å Alpha: 1.0 Color:

ボンド情報を設定/表示します。

¹¹ "Show bound planes"と"Hide atoms"を両方チェックすれば、任意の結晶外形を描画することが出来ます。つまり、結晶の形状を表現することが出来ます。

Bonding Atom (center)

ボンドを構成する一方の元素種を表示/設定します。多面体を描画するときには中心になります。

Bonding Atom (vertex)

ボンドを構成するもう一方の元素種を表示/設定します。多面体を描画するときには頂点になります。

Length between ...

ボンドの長さの下限、上限を表示/設定します。このしきい値を上回る/下回る場合は描画の対象になりません。

Bond Radius

描画するボンドの太さ(半径)を表示/設定します。

Alpha

描画するボンドの透明度を表示/設定します。

Polyhedron property

Show Polyhedron

When checked, the lower control becomes active and displays the polyhedron made up of bonds (if the polyhedron is valid).

Inner Bonds

When checked/unchecked, the bonds in the polyhedron is visible/invisible.

Center Atom

When checked/unchecked, the center atom of the polyhedron is visible/invisible.

Vertex Atoms

When checked/unchecked, the vertex atoms of the polyhedron are visible/invisible.

Color

Set the transparency of the cell planes.

Alpha

Set the transparency of the cell planes.

Show Edge

Checking this box displays the polyhedron's edges (lines connecting the vertices).

Color

Set the color of the polyhedron edges.

Width

Set the line width of the polyhedron edges.

4.3.4. Unit cell

このタブでは結晶の単位格子の描画に関する設定を行います。“Show unit cell” をチェックすると、単位格子の

描画が行われます。

Translation

Every space group has a default origin. If you want the center of the unit lattice to move from the space group origin, set the translation amount in the a, b, and c axis directions.

Show cell plane

Specify whether to draw the six faces that make up the unit lattice. If you want to draw them, you can set the color and transparency of the faces.

Show edges

単位格子の稜線を描画するかどうかを設定します。描画する場合は、その稜線の色を設定します。

4.3.5. Lattice plane

In this tab, you can set up the settings for drawing the lattice plane. A list of lattice planes is displayed at the top. You can operate the list by using the “Add”, “Replace” and “Delete” buttons. To disable the lattice plane drawing, you can uncheck the leftmost checkbox in the list.

If you want to permanently save the changes made in this tab, you must also click on “Add” or “Replace” in the “Main Window” to make the changes permanent. If you have not done so, you will lose your changes when you change the selection of the crystal list in the “Main Window”. Otherwise, when you change the selection of the crystal list in the “Main Window”, the changes you have made will be lost.

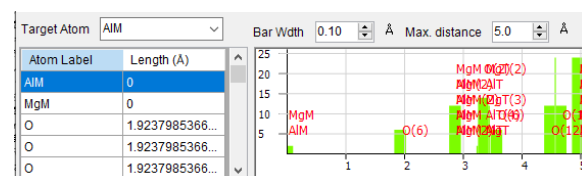
H k l indices

Specify the lattice plane with the Miller index.

Translation

Use when you want to move the lattice plane in translation.

4.3.6 Coordinate information



原子の配位に関する情報が表示されます。

Table (Left side)

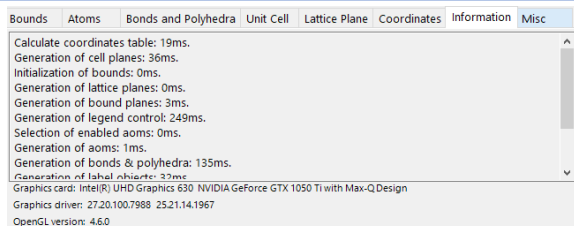
The table on the left shows what kind of atoms are around the specified target atom and at what distance.

Graph (right side)

This is a graphical representation of the information in the table on the left. You can estimate the coordination number of target atom by adjusting “Bar

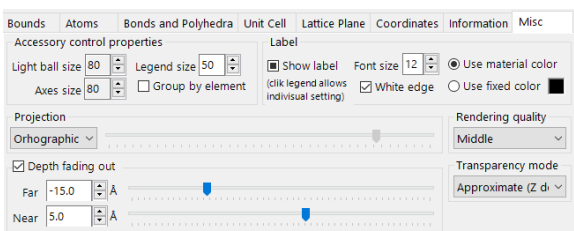
width" to an appropriate thickness.

4.3.7. Information



The information of the selected atom is displayed. This is under construction.

4.3.8. Misc.



Accessory control properties

Accessory control の大きさを設定します。また、“Group by element”をチェックすると、ラベルではなく元素ごとに凡例を表示します。

Label

原子ラベルの表示に関する設定を行います。フォントサイズや色を変更することが出来ます。

Projection

You can set the projection method. "Orthographic" produces a perfectly parallel projection (infinity projection). "Perspective" produces a perspective projection from the viewpoint distance set in the track bar.

Depth fading out

Fade out objects that are farther away in the depth direction." Objects farther away than the "Far" value will be completely transparent, and objects closer than the "Near" value will be completely opaque. The intermediate objects will be set to a transparency range of 0-1.

Rendering quality

Select the drawing quality. The higher the quality, the slower the rendering process will be, so choose the appropriate quality for your GPU's performance.

Transparency mode

Select an algorithm for calculating the overlap of translucent objects (atoms and polyhedra).

"Approximate" may result in inaccurate rendering depending on the placement of the objects, but it is fast. "Perfect" calculates the transparency accurately, but is very slow, so an external GPU card is required.

4.4. Toolbar

The object to be drawn can be selected from the toolbar at the bottom of the "Structure viewer".

Crystal Axes



Displays the orientation of the axes. The size of the axes reflects the lattice constant. You can also rotate with the mouse in this box.

Lightning ball



Specify the position (direction) of light. You can change the position of the light by dragging left.

Legend

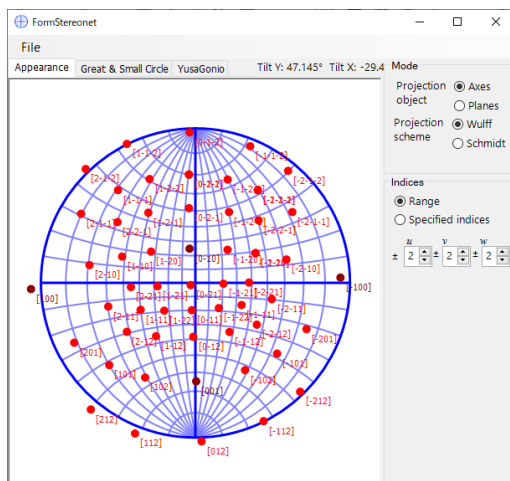


Displays the legend of the atom. You can choose to label the letters displayed, or use the element name from the Misc tab.

Like Vesta

Change the atomic color/size and bond settings to make it look similar to the well-known Vesta software.

5. Stereonet



“Stereonet” function displays the directions of the crystal planes and crystal axis using stereo-net projection.

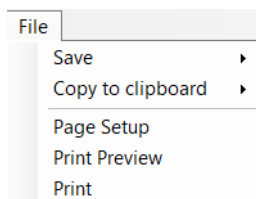
5.1. Main area

中央の部分には、選択した結晶の結晶面・晶体軸のステレオネット投影が表示されます。

マウス操作

- 左ドラッグ: 回転
- 右ドラッグ: 拡大
- 右クリック: 縮小

5.2. File menu



表示されているステレオネットを、ファイルに保存する、あるいはクリップボードにコピーします。

5.3. Mode

Projection object

- Axis: 結晶軸を描画します。
- Plane: 結晶面を描画します。

Projection Scheme

Wulff: 等角投影を計算します。角度関係を保持した投影方法です。ただし、面積(立体角)は保存されません。

Schmidt: 等積投影を計算します。面積(立体角)を保持した投影方法ですが、角度関係は保存されません。

5.4. Indices

描画する結晶面/晶帯軸を設定します。

Range

このモードでは、uvw, あるいは hkl の指数の範囲を指定します。

Specified indices

このモードでは、特定の指数の結晶面/晶帯軸を指定

します。指数を設定した後、“Add”ボタンを押すことで、描画リストに加わります。”Delete”ボタンを押すことで削除できます。“including equivalent indices”をチェックすると、結晶学的に等価な結晶面/晶帯軸を全て描画します。

5.5. タブメニュー

Appearance

Size

点の大きさや文字の大きさを指定します。ライドバーで調節できます。String Size はステレオネット上の点の横に示す指数の大きさを調整します。Point Size はステレオネット上の点の大きさを調整します。

Color

点、文字、ステレオネット輪郭線などの色の設定を行います。

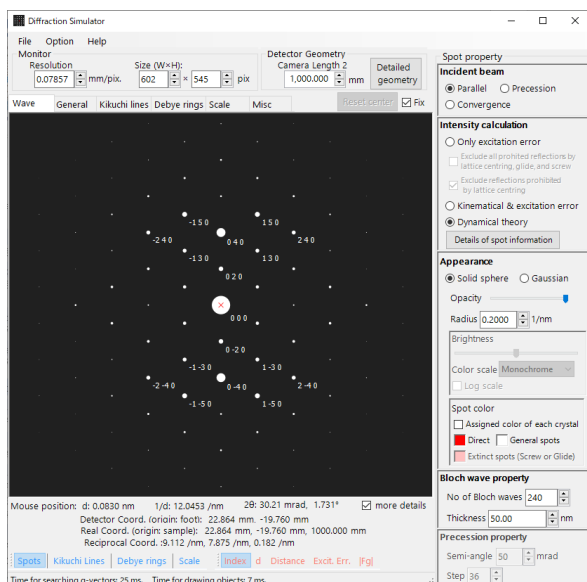
Outline

ステレオネット輪郭線の表示方法を指定します。

Great and Small Circle

大円や小円を描画します。晶体軸の指数で指定するか、二枚の結晶面の指数でしてください。

6. Crystal diffraction



“Crystal diffraction” function は、単結晶 X 線回折あるいは電子回折のシミュレーションを行います。

6.1. Main area

A diffraction pattern is simulated in the area displayed in the center of the screen.

マウス操作

以下のようなマウス操作に対応します。

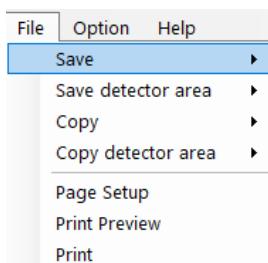
- Left drag: 回転
- Right drag: 拡大
- Right click: 縮小
- Left double click: 選択したスポットの詳細情報を表示

Mouse position

Mouse position: d: 0.1025 nm 1/d: 9.7598 /nm 2θ: 24.48 mrad, 1.402° ☒ more details
Detector Coord. (origin: foot): 13.671 mm, 20.310 mm
Real Coord. (origin: sample): 13.671 mm, 20.310 mm, 1000.000 mm
Reciprocal Coord.: 5.449 /nm, -8.096 /nm, 0.119 /nm

Drawing area 内にマウスポインタがある場合、その位置に相当する情報を表示します。“More details”をチェックすると表示領域が拡張し、より細かい情報が表示されます。

6.2. File menu



Save / Save detector area

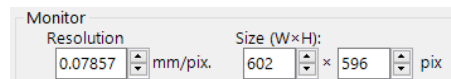
表示されている画像を保存します。後者は detector area を設定している場合に表示されます。

Save / Save detector area

表示されている画像を保存します。後者は detector area を設定している場合に表示されます。

6.3. Monitor / Detector geometry/ Reset center

Monitor



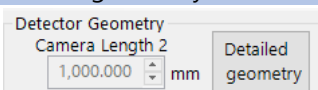
Resolution

1 ピクセルあたりの長さ(mm)を設定します。この値は単なるスケールの問題なので、実際の値でなくてもかまいません。マウスによる拡大縮小で変更されるパラメータです。

Size

Drawing area の width と height をピクセル数で指定します。お使いのディスプレイの解像度によっては自由な値を設定できない場合があります。

Detector geometry



Camera length 2

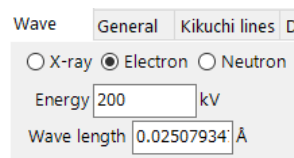
試料から検出器までの距離が表示されます。

Detailed geometry

光学系に関する設定画面が起動します。詳しくは [6.7. Detector geometry](#) をご覧ください。

6.3. Tab menu

Wave



入射波を設定します。

X-ray

Specify X-rays as the source.

To select characteristic X-rays, specify the element type and transition condition (Siegbahn notation).

When you want to select the X-ray from synchrotron radiation, specify “Element” as 0 and enter the energy or wavelength.

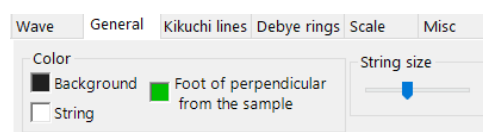
Electron

Enter the energy or wavelength.

Neutron

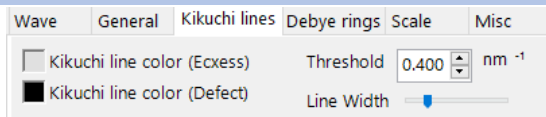
Enter the energy or wavelength.

General



Set the color of spots, letters, chrysanthemum lines, etc.

Kikuchi lines

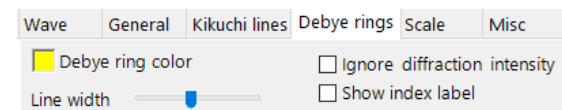


Kikuchi lines に関する設定を行います。[Tool bar](#) で Kikuchi lines を選択しているときにアクティブになります。

Threshold

この値より大きな d 値をもつ Kikuchi lines を計算対象とします。

Debye rings



Debye ring に関する設定を行います。[Tool bar](#) で Debye rings を選択しているときにアクティブになります。

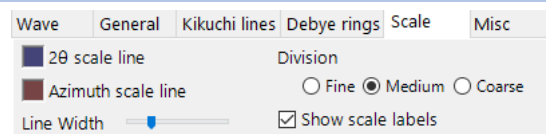
Ignore diffraction intensity

チェックすると、結晶構造因子を無視して、全てのデバイリングを同一の色で描画します。

Show index label

デバイリングの面指数を表示します。

Scale



[Tool bar](#) で Scale を選択しているときにアクティブになります。

2θ/Azimuth scale line

前者は散乱角方向、後者は方位角方向を意味しています。それぞれスケールラインの色を変更できます。

Line width

Scale line の太さを設定します。

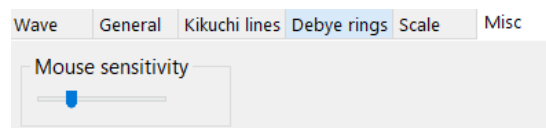
Division

Scale line の目盛間隔を設定します。

Show scale labels

Scale line にラベルを表示するかどうかを選択します。

Misc



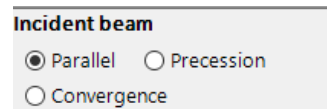
Mouse sensitivity

マウス操作をする際のマウス感度を設定します。

6.4. Spot property

回折スポットの計算、表示などに関する設定を行います。[Tool bar](#) で Spot を選択しているときにアクティブになります。

Incident beam



入射するビームの種類を選択します。

Parallel

平行な Incident beam をシミュレーションします。

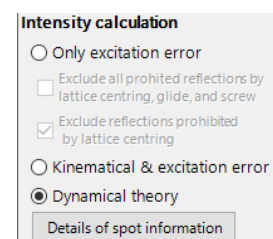
Precession

Simulates precession incident beam. This mode is only available when you select electrons as the wave source (i.e., precession electron diffraction). When you select this mode, the "Intensity calculation" is automatically set to "Dynamical theory".

Convergence

収束している Incident beam をシミュレーションします。このモードは Wave source として電子を選択したときのみ選択可能です。このモードを選択すると、“Intensity calculation”は自動的に Dynamical theory に設定され、“[CBED setting](#)”画面が表示されます。

Intensity calculation



回折スポットの強度の計算方法を選択します。

Only excitation error

The intensity is calculated based on the excitation errors (i.e., the geometric distance between the Ewald sphere and the reciprocal lattice points); the smaller the excitation error, the higher the intensity, with the maximum value being the value of Radius (see below). becomes small and zero when the excitation error exceeds Radius.

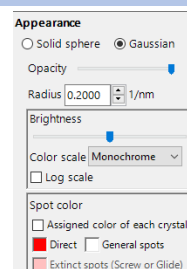
Kinematical & excitation error

Excitation error に加えて、結晶構造因子も考慮して回折強度を計算します。

Dynamical theory

動力的回折理論 (Bethe's method)を使って、回折強度を計算します。Wave source として electron を選択している場合のみ選択可能です。

Appearance



回折スポットの表示方法を設定します。

Sold sphere / Gaussian

Solid sphere を選択した場合、回折スポットを塗りつぶした円として表示します。この場合、円の面積が回折強度に対応します。

後者の場合、回折スポットを 2 次元ガウス関数として表示します。積分強度が、回折強度に対応します。

Opacity

描画する回折スポットの透明度を指定します。

Radius

逆格子点の半径を指定します。ここで指定した値は、次のように回折スポットの表示に影響します。

- Gaussian を選択している場合
- Solid sphere を選択していて、かつ“Only excitation error” あるいは“Kinematical & excitation error” を選択している場合、逆格子点を次の様な半径をもつ球体であると考えて、その球体とエwald球との断面を回折スポットとして表示します。
 - ✓ Only excitation error を選択している場合は、常に Radius
 - ✓ Kinematical & excitation error を選択している場合は、 $\text{Radius} \times (\text{運動学的な相対回折強度})^{1/3}$
- Solid sphere を選択していて、かつ“Dynamical theory” を選択している場合、表示される回折スポットの半径は、 $\text{Radius} \times (\text{動力学的な相対回折強度})^{1/2}$ になります。

Brightness

Gaussian を選択した場合にアクティブになります。スケールバーで調節します。

Color scale

Gray scale か Cold-warm color かを選択します。

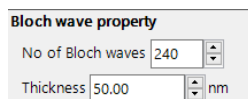
Log scale

チェックすると強度が Log scale で表示されます。

Spot color

回折スポットの色を設定します。

Bloch wave property

A dialog box titled "Bloch wave property" with two input fields: "No of Bloch waves" set to 240 and "Thickness" set to 50.00 nm.

“Intensity calculation” として、“Dynamic theory”を選択している場合にアクティブになります。

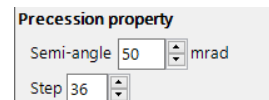
No of Bloch waves

動力学的回折強度計算の際に取り入れる Bloch wave の数を設定します。この数値は、Incident beam として Parallel あるいは Precession を選択し、Intensity calculation として Dynamic theory を選択している場合に使われます。

Thickness

試料の厚みを設定します。

Precession property

A dialog box titled "Precession property" with two input fields: "Semi-angle" set to 50 mrad and "Step" set to 36.

“Incident beam” として“Precession”を選択しているときにアクティブになります。

Semi-angle

Precession electron diffraction における入射電子の半頂角を設定します。

Step

Precession electron diffraction は、複数の方向からの parallel beam diffraction を足し合わせることによってシミュレーションします。この方向の数を設定します。

6.5. Toolbar



Spots

Toggles between show/hide diffraction spots.

Kikuchi lines

Toggles between show/hide Kikuchi lines

Debye rings

Toggles between show/hide Debye rings¹².

Scale

Toggles between show/hide scale lines.

Index / d / Distance / Excit. Err / |Fg|

スポットの近くに表示されるラベルの情報を選択します。

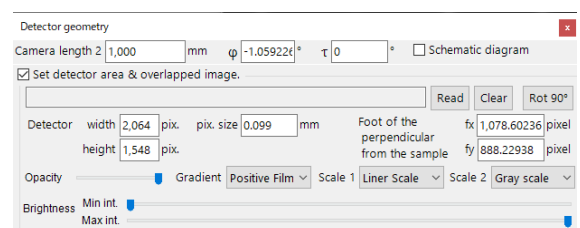
6.6. Detector geometry

検出器に関する詳細な設定を行います。

Schematic diagram

パラメータの意味を説明する模式図が表示されます。詳しくは [A.2](#) を参照してください。

Set detector area & overlapped image

A complex dialog box titled "Detector geometry" with various settings for camera length, detector area, and image display options. It includes fields for width, height, pixel size, and foot of the perpendicular, as well as checkboxes for "Set detector area & overlapped image" and "Schematic diagram".

The number and size of detector pixels can be set to superimpose a detector image on the simulated diffraction pattern or to display only the detector image border. The detector area is displayed as a green rectangle.

If you want to superimpose an image, click the Read button to read the image. Then set the pixel size and foot to the correct values. You can also adjust the image's transparency, color scale and brightness.

If you want to display only the border of the detector, set the pixel size, number of pixels and foot without loading

¹² Debye rings は、本来試料が多結晶体であるときに現れる回折スポットの集合体です。

the image.

6.7. CBED setting

The screenshot shows the CBED software interface. The 'Input parameters' section includes: 'Max # of Bloch waves' set to 64, 'Max semiangle' set to 6 mrad, 'Division of disk diameter' set to 128, 'Solver' set to 'Auto', and 'Thread' set to 4. There is a checkbox for 'Draw guide circles' and a 'Thickness from' range of 20 to 200 nm with a step of 20 nm. The 'Output parameters' section includes: 'Image size' of 512 x 512 pixels, 'Thickness' of 20 nm, 'Brightness' and 'Gamma' sliders, and 'Gradient' and 'Color' options set to 'Positive' and 'Gray scale' respectively. An 'Execute' button is located at the bottom right of the input parameters section.

CBEDは大きなリソースを必要とする計算です。そのため、リアルタイムで計算は行いません。“Execute”ボタンを押して計算を実行します。

Input parameters

Max # of Bloch waves

Specify how many Bloch waves should be included in the CBED calculation. Since the calculation time is proportional to the cube of the number of Bloch waves, the calculation time will be longer if you include a large number of Bloch waves.

Max semiangle

The convergence angle of the electron beam.

Draw guide circles

Displays guide circles that show the size of the CBED disk, which is useful for determining the Max semiangle.

Division of disk diameter

This parameter specifies the resolution of the CBED disc, which is the number of pixels multiplied by $\pi/4$. The number of pixels is proportional to the computation time, so the computation time increases when a large value is specified.

Thickness from ## to ## with step of

設定された複数の試料の厚みに対して CBED シミュレーションを行います。本ソフトでは Bethe 法による動力学的計算を行いますので、厚みが変化しても計算量はほとんど変化しません。

Solver

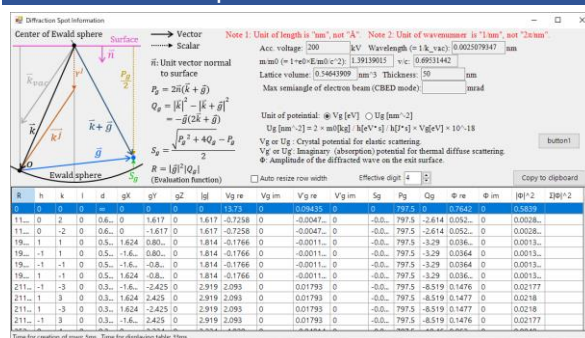
Bethe 法では固有値・固有ベクトルの計算に大きなリソースが消費されます。固有値問題のソルバーとして、

- Auto: 以下の三つから自動で高速のものを選択します。
- MKL: Intel 社のライブラリ MKL (<https://software.intel.com/en-us/mkl>) を使用します。
- Eigen: オープンソースライブラリ Eigen (<https://gitlab.com/libeigen/eigen>) を使用します。
- Managed: オープンソースライブラリ Mathnet (<https://github.com/mathnet/>) を使用します。

作者の経験によれば、Bloch 波の数が小さい(< ~500)

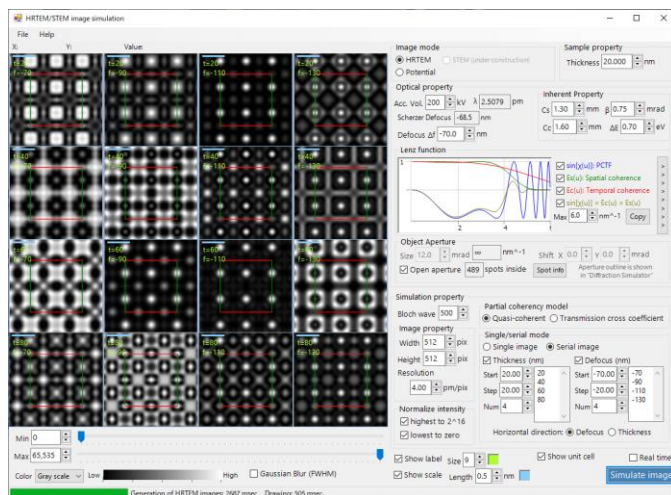
場合は Eigen が、大きい場合(> ~500)は MKL が最も高速である傾向があります。

6.8. Diffraction spot information



Dynamic theory によって計算された回折スポットの詳細情報を表示します。記号の意味は、左上の模式図を参考にしてください。

7. HRTEM simulation



"HRTEM simulation" simulates TEM lattice fringe images for the selected crystal and orientation specified in the main window. Potential can also be simulated.

Click "Simulate image" button at the bottom right to run the simulation.

7.1. Main area

The simulated image is displayed. You can zoom in by right-clicking or right-dragging on the image.

Min/Max

Set the maximum and minimum brightness of the image. You can also use the track bar to adjust it.

Color

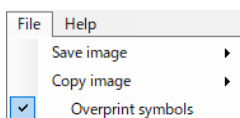
Choose between "Gray" scale or "Cold-Warm" scale.

Gaussian blur

画像に対して、ガウス関数によるフィルター(ぼかし)をかけます。ぼかしの範囲はピクセル単位で指定します。

7.2. File menu

File



画像の保存、あるいはクリップボードへのコピーを行います。"Overprint symbols"をチェックした場合は、画像にスケールや文字などの情報が書き込まれます。

Help

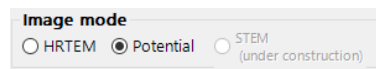
Basic concept of HRTEM simulation

HRTEM 計算の原理を PDF で参照することが出来ます。

Calculation Library

HRTEM simulation を実行する際のライブラリを選択します。通常は Native code の方が高速です。もし Native code が動作しない場合は、Managed code を使ってください。

7.3. Image mode



HRTEM モードか Potential モードを選択します。STEM モードは現在開発中であり、まだアクティブではありません。

7.4. Sample property

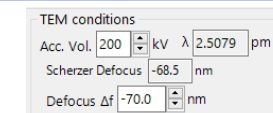
Thickness

試料の厚さを設定します。

7.5. Optical property

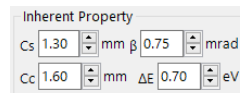
電子顕微鏡の観察条件を設定します。

TEM condition



加速電圧 (Acc. Vol.)、デフォーカスを指定します。加速電圧を変更すると、相対論補正された波長が表示されます。また、加速電圧と Cs 値に基づいて Scherzer defocus が表示されます。

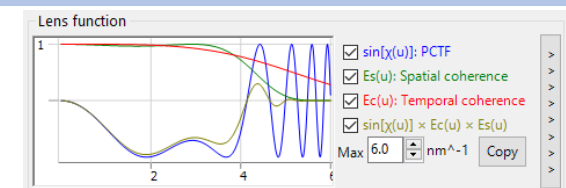
Inherent Property



電子顕微鏡に固有のパラメータを設定します。

- ・ Cs: Spherical aberration coefficient (球面収差)
- ・ Cc: Chromatic aberration coefficient (色収差)
- ・ β : Illumination semi angle due to the finite source size effect (照射半頂角)
- ・ ΔE : $1/e$ width of electron energy fluctuations (エネルギー幅)

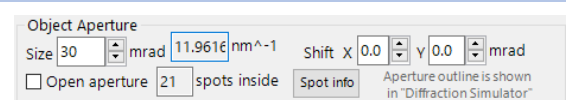
Lens function



レンズ関数を表示します。表示する項目は、以下の通りです。u 値の上限を設定することで、描画範囲を変更できます。

- ・ $\text{Sin}[\chi(u)]$: Phase contrast transfer function (PCTF)
- ・ $E_s(u)$: Spatial coherence envelope function
- ・ $E_c(u)$: Temporal coherence envelope function

Objective Aperture



対物レンズ絞りの大きさや位置を設定します。Diffraction simulator を起動すると、絞りの大きさや位置を確認することが出来ます。

Size

対物レンズ絞りの大きさを、mrad 単位で設定します。

絞りを開放したい場合は、“Open aperture”をチェックします。

設定した絞りの条件によって、Bethe 動力学法において考慮される回折スポットの数が増減します。スポットの上限数は、“Simulation property”で設定された値に制限されます。

Shift

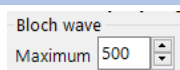
対物レンズ絞りの水平方向の位置を **mrاد** 単位で設定します。

Spot info.

詳細なスポット情報を表示します。

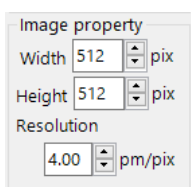
7.6. Simulation property

Bloch Wave

A screenshot of the 'Bloch wave' section in the simulation software. It shows a label 'Maximum' followed by a text input field containing the number '500' and a small up/down arrow icon.

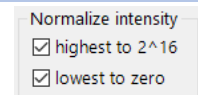
計算に取り込む最大の Bloch 波の数を設定します。

Image Property

A screenshot of the 'Image property' dialog box. It contains four input fields: 'Width' with value 512, 'Height' with value 512, 'Resolution' with value 4.00, and units 'pix' and 'pm/pix' respectively.

シミュレーションする画像のピクセル数と解像度を設定します。

Normalize Intensity

A screenshot of the 'Normalize intensity' section. It has a label 'Normalize intensity' and two checked checkboxes: 'highest to 2^16' and 'lowest to zero'.

シミュレーションする画像の強度のノーマライズ方法を設定します。

Partial Coherent model

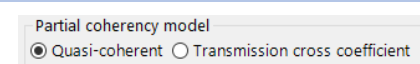
A screenshot of the 'Partial coherence model' section. It shows two radio buttons: 'Quasi-coherent' (selected) and 'Transmission cross coefficient'.

Image mode が HRTEM の時に表示されます。

HRTEM イメージを計算する際に、波の干渉を Quasi-coherent モデルに基づいて計算するか、Transmission cross coherent モデルに基づくかを選択します。後者の方が正確なシミュレーションですが、計算速度は遅くなります。

Single/Serial mode

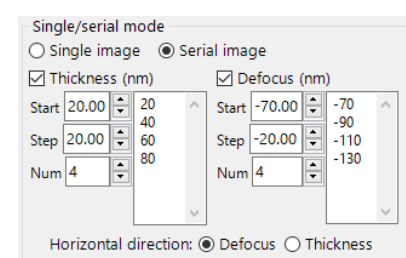
A screenshot of the 'Single/serial mode' dialog. It has two radio buttons: 'Single image' and 'Serial image' (selected). Below are two sections for 'Thickness (nm)' and 'Defocus (nm)', each with 'Start', 'Step', and 'Num' input fields. At the bottom, there are radio buttons for 'Horizontal direction: Defocus' (selected) and 'Thickness'.

Image mode が HRTEM の時に表示されます。

Single image モードでは Sample Property で設定した試料の厚みと Optical property で設定したデフォーカスに基づいて一枚の画像がシミュレーションされます。

Serial image モードでは、Start/Step/Num で設定した複数の厚み/デフォーカスに対して画像を生成します。

Potential option

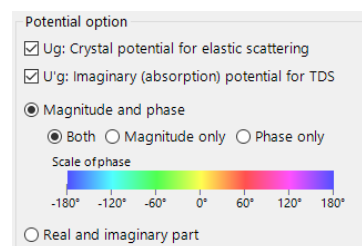
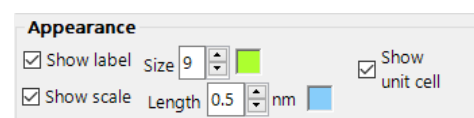
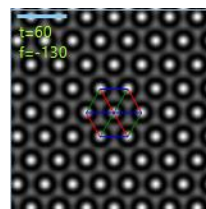
A screenshot of the 'Potential option' dialog. It has two checked checkboxes: 'Ug: Crystal potential for elastic scattering' and 'U'g: Imaginary (absorption) potential for TDS'. Below are radio buttons for 'Magnitude and phase' (selected), 'Both', 'Magnitude only', and 'Phase only'. A 'Scale of phase' color bar is shown with values from -180 to 180 degrees. At the bottom is a radio button for 'Real and imaginary part'.

Image mode が Potential の時に表示されます。

選択された potential がシミュレーション対象となります。また potential の表示方法を“Magnitude and phase”あるいは“Real and imaginary part”から選択します。

7.7. Appearance

A screenshot of the 'Appearance' dialog. It has two checked checkboxes: 'Show label' and 'Show scale'. 'Show label' has a 'Size' input field set to 9 and a color selection box. 'Show scale' has a 'Length' input field set to 0.5 and a unit selection box set to 'nm'. There is also a 'Show unit cell' checkbox.

Label

ラベル (t: thickness [nm], f: defocus [nm]) を表示するかどうか、およびラベルのサイズと色を設定します。

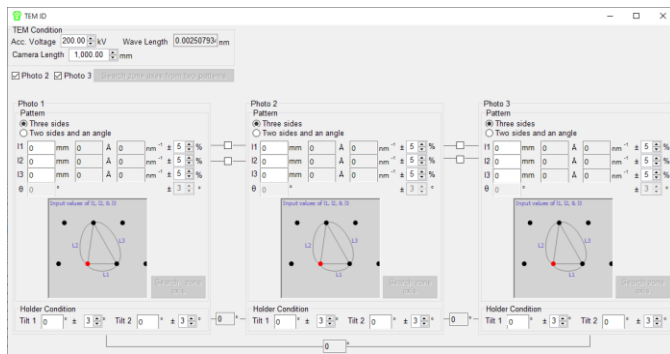
Scale

スケールバーを表示するかどうか、およびスケールの長さや色を設定します。

Unit cell

単位格子を表示するかどうかを設定します。画像に表示される単位格子の赤は a 軸、緑は b 軸、青は c 軸に対応します。s

8. TEM ID



“TEM ID”では、透過電子顕微鏡の制限視野回折によって得られた回折パターンを指数付けします。

TEM の観測条件および回折スポットの幾何学を入力し、“Search zone axes”ボタンを押すことで、候補の晶体軸が検索されます。

8.1. TEM condition

TEM の観測条件を入力します。

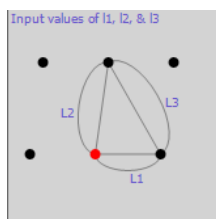
8.2. Photo1, 2, 3

回折スポットの幾何学を入力します。

検出器上でのスポット間の長さを入力する場合は、mm 単位のボックスに値を入力します。

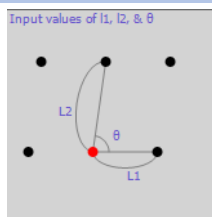
d 値が分かっている場合は、Å 単位あるいは nm⁻¹ のボックスに値を入力します。

8.2.1. Three sides



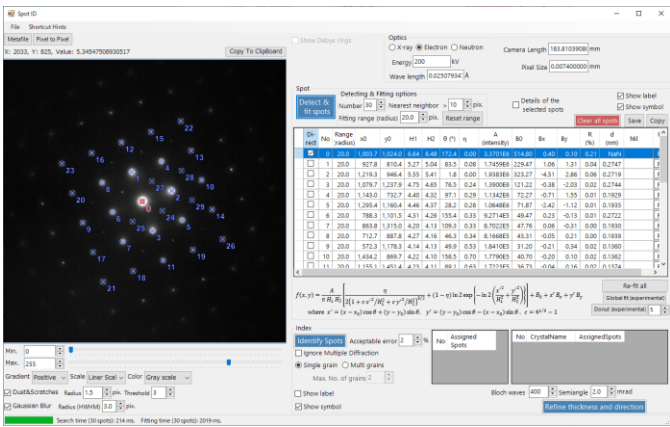
ダイレクトスポットを頂点に含む三角形の 3 辺の長さを入力します。

8.2.2. Two sides and an angle



ダイレクトスポットを頂点に含む三角形の 2 辺の長さとその 2 辺がなす角度を入力します。

9. Spot ID



回折パターンが撮影された画像中からスポットを検出し、指数付けを行います。

7.1. Main area

画像を表示します。ドラッグドロップあるいは File メニューから読み込みます。

マウスの右クリックで縮小、右ドラッグで拡大できます。さらに以下のようなマウス操作を受け付けます。

左シングルクリック: スポット選択

左ダブルクリック: スポット追加

Ctrl+左ダブルクリック: ダイレクトスポット追加

Ctrl+右シングルクリック: スポット削除

Min/Max

画像の最大輝度、最低輝度を設定します。トラックバーで調整することもできます。

Gradient

Positive か Negative かを選択します。

Scale

Linear スケールか Log スケールかを選択します。

Color

Gray scale か Cold-Warm scale のどちらかを選択します。

Dust & Scratch

画像中の 1 ピクセルないし数ピクセルから成る輝点を除去します。輝点の検出範囲をピクセル単位で指定し、検出の閾値を

Gaussian blur

画像に対して、ガウス関数によるフィルター(ぼかし)をかけます。ぼかしの範囲はピクセル単位で指定します。

7.2. Optics

Optics
☐ X-ray ☒ Electron ☐ Neutron
Energy 200 keV Camera Length 183.8103908 mm
Wave length 0.02507934 Å Pixel Size 0.007400000 mm

入射線源、エネルギー/波長、カメラ長、検出器のピクセルサイズを入力します。

*.dm3 あるいは *.dm4 ファイルを読み込んだ場合は、ファイル内の情報を使って自動的にセットされます。

7.3. Spot

Spot
Detecting & fitting options
Number 30 Nearest neighbor > 10 pix.
Fitting range (radius) 20.0 pix. Reset range
Details of the selected spots
Clear all spots Save Copy

Dir-rect	No	Range (radius)	x0	y0	H1	H2	θ (°)	η	A (intensity)	B0	Bx	By	R (%)	d (nm)	hkl	Fit
<input checked="" type="checkbox"/>	0	20.0	1003.7	1024.0	6.64	6.46	172.4	0.00	3.3701E6	514.80	0.40	0.10	0.21	NaN		Fit
<input type="checkbox"/>	1	20.0	927.8	810.4	5.27	5.04	83.5	0.08	1.7459E6	229.47	1.06	1.31	0.04	0.2747		Fit
<input type="checkbox"/>	2	20.0	1219.3	946.4	5.55	5.41	1.8	0.00	1.9383E6	323.27	-4.51	2.86	0.06	0.2719		Fit
<input type="checkbox"/>	3	20.0	1079.7	1237.9	4.75	4.65	76.5	0.24	1.3900E6	121.22	-0.38	-2.03	0.02	0.2744		Fit
<input type="checkbox"/>	4	20.0	1143.0	732.7	4.40	4.32	97.1	0.29	1.1342E6	72.27	-0.71	1.55	0.01	0.1929		Fit
<input type="checkbox"/>	5	20.0	1295.4	1160.4	4.46	4.37	28.2	0.28	1.0648E6	71.87	-2.42	-1.12	0.01	0.1935		Fit
<input type="checkbox"/>	6	20.0	788.3	1101.5	4.31	4.26	155.4	0.33	9.2714E5	49.47	0.23	-0.13	0.01	0.2722		Fit
<input type="checkbox"/>	7	20.0	863.8	1315.0	4.20	4.13	109.3	0.33	8.7022E5	47.76	0.06	-0.31	0.00	0.1930		Fit
<input type="checkbox"/>	8	20.0	712.7	887.8	4.27	4.16	46.3	0.34	8.1668E5	43.31	-0.05	0.21	0.00	0.1939		Fit
<input type="checkbox"/>	9	20.0	572.3	1178.3	4.14	4.13	49.9	0.53	1.8410E5	31.20	-0.21	0.34	0.02	0.1360		Fit
<input type="checkbox"/>	10	20.0	1434.2	869.7	4.22	4.10	158.5	0.70	1.7790E5	40.70	-0.20	0.10	0.02	0.1362		Fit
<input type="checkbox"/>	11	20.0	1155.1	1451.4	4.23	4.11	89.1	0.63	1.7223E5	36.73	-0.04	0.16	0.02	0.1374		Fit

Re-fit all
Global fit (experimental)
Donut (experimental) S

Detect & fit spots” ボタンを押すと、画像中の回折スポットを自動で検出し、そのスポットを 2 次元 Pseudo Voigt 関数¹³でフィッティングします。フィッティングの結果は、テーブルに表示されます。

Detect & Fitting options

Number

検出するスポットの最大数を設定します。

Nearest neighbor

検出するスポット間の最低距離を設定します。

Fitting range

検出されたスポットを 2 次元 Pseudo Voigt 関数でフィッティングする際の範囲を、ピクセル単位の半径で指定します。

Reset range button

テーブル中のスポットのフィッティング範囲を再セットします。

Show label/symbol

検出されたスポットのラベルおよびシンボルを、画像にオーバーラップして表示するかどうかを選択します。

Clear all spots

テーブル中のスポットを全て削除します。

¹³ フィッティングの時には、以下のような関数を用いています。

$$f(x, y) = \frac{A}{\pi H_1 H_2} \left[\frac{\eta}{2 \left[1 + c x'^2 / H_1^2 + c y'^2 / H_2^2 \right]^{3/2} + (1 - \eta) \ln 2 \exp \left\{ -\ln 2 \left(\frac{x'^2}{H_1^2} + \frac{y'^2}{H_2^2} \right) \right\}} \right] + B_0 + x' B_x + y' B_y$$

ただし、 $x' = (x - x_0) \cos \theta + (y - y_0) \sin \theta$, $y' = (y - y_0) \cos \theta - (x - x_0) \sin \theta$, $c = 4^{1/3} - 1$

角括弧[]内の第 1 項 $\eta / 2 \{ 1 + c x'^2 / H_1^2 + c y'^2 / H_2^2 \}^{3/2}$ は 2 次元コーシー分布関数です。また、第 2 項 $(1 - \eta) \ln 2 \exp \{ -\ln 2 (x'^2 / H_1^2 + y'^2 / H_2^2) \}$ は 2 次元ガウス関数です。

x_0, y_0 はスポットの中心座標、 θ は x, y 軸を x', y' 軸に回転する角度、 H_1, H_2 は x', y' 軸に対する半幅、 η はコーシー分布関数とガウス関数の比率を意味します。 A はこの関数の積分強度に対応します。また、後半の $B_0 + x' B_x + y' B_y$ の部分はバックグラウンド平面を意味しています。

フィッティングの際には、修正マルカート法を用いて逐次近似的に各パラメータを最適化します。

Save/Copy

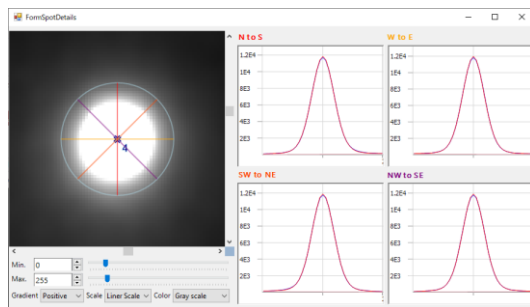
テーブルの情報をエクセル形式で保存あるいはクリップボードにコピーします。

Re-fit all

テーブル中の全てのスポットに対して、再度フィッティングを行います。

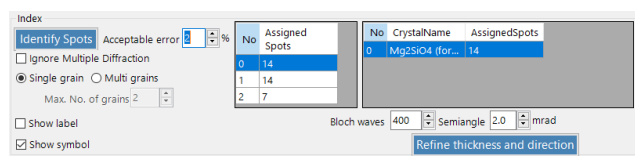
Details of the selected spots

チェックすると、以下のような別ウィンドウが表示されます。



このウィンドウでは左側に選択されているスポットの拡大が表示され、右側には4つの方向のプロファイルが表示されます。青い線が画像のデータであり、赤い線がフィッティング結果に対応します。

7.4. Index



スポットの検出が行われた状態で **Identify spots** ボタンを押すと、スポットの指数付けが行われます。メインウィンドウで選択されている結晶が対象です。

Acceptable error

どれくらいの誤差を許容するかを設定します。

Single grain/Multi grains

単一の結晶として指数付けを行うか、複数の結晶として指数付けを行うかを選択します。

Multi grains を選択した場合は、最大何個の結晶を考慮するかを指定します。

Show label/symbol

指数付けされたスポットのラベルおよびシンボルを、画像にオーバーラップして表示するかどうかを選択します。

Refine thickness and direction

Bethe 法による動力学回折効果を考慮して、検出された回折強度に最もよく一致する試料厚みおよび結晶方位を求めます。

10. Powder diffraction

Under construction

11. Crystal database

Name	Density	Formula	a	b	c	α	β	γ	Crystal S
Hydrokenosol...	2.5651	Na ₂ Si ₂ Al ₁₂ O ₃₉	9.87	9.87	9.87	90	90	90	cubic
Abernathyite	9.8707	K ₂ U ₄ As ₂ O ₁₅	7.176	7.176	10.126	90	90	90	tetrag
Abernathyite	9.6511	NH ₁₀ U ₄ As ₂	7.189	7.189	10.191	90	90	90	tetrag
Abernathyite	9.8554	K ₂ O ₃ H ₁₅ U ₄	7.171	7.171	10.048	90	90	90	tetrag
Fluorapophyllite	2.5337	K ₂ Si ₆ Na ₂ O ₃₂	8.963	8.963	15.804	90	90	90	tetrag
Fluorapophyllite	2.5453	K ₂ Ca ₄ Si ₈ O ₃₂	8.965	8.965	15.767	90	90	90	tetrag
Fluorapophyllite	2.5428	K ₂ Ca ₄ Si ₈ O ₃₂	8.96	8.96	15.8	90	90	90	tetrag
Ahrensite	4.8498	Fe ₁₆ O ₈ Si ₇	8.234	8.234	8.234	90	90	90	cubic
Hydroxyapophyllite	2.3556	K ₂ Ca ₄ Si ₈ O ₃₂	8.979	8.979	15.83	90	90	90	tetrag
Hilgardite	2.6936	Ca ₂ Cl ₈ Si ₅ O ₁₂	11.438	11.318	6.318	90	90.06	90	monoc
Ahrensite	5.5211	Fe ₁₆ Si ₄ O ₄	8.236	8.236	8.236	90	90	90	cubic
Anorthite	2.6975	Ca ₂ Si ₂ Na ₁₂	8.1736	12.8736	7.1022	93.462	116.054	90.475	triclin
Anorthite	2.6975	Ca ₂ Si ₂ Na ₁₂	8.1736	12.8736	7.1022	93.462	116.054	90.475	triclin
Anorthite	2.7016	Ca ₂ Si ₂ Na ₁₂	8.1747	12.8706	7.1014	93.461	116.056	90.474	triclin

The "Crystal database" provides the functions to search and import more than 20,000 crystal structures.

The database is based on the "American Mineralogist Crystal Structure Database". Please read the description in <http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php> carefully, and be sure to cite the following references when using the crystal data:

Downs, R.T. and Hall-Wallace, M. (2003) The American Mineralogist Crystal Structure Database. American Mineralogist 88, 247-250. (pdf file)

11.1. Table

The crystals contained in the database will be displayed. If you have entered the search criteria, only those crystals that meet the criteria will be shown.

When you select a crystal in the table, the information of the crystal is transferred to the "Crystal information" area of the "Main window". If you want to add the crystal to the "Crystal list", click the "Add" or "Replace" button.

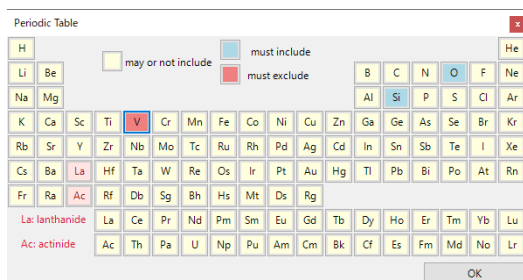
11.2. Search options

Enter your search criteria. To search, press the "Search" button or enter key.

Name

Enter crystal name.

Element



Periodic Table ボタンを押すと、別ウィンドウが立ち上がります。ここで検索対象の元素を選択します。各元素のボタンは押すごとに状態が切り替わります。

ウィンドウ上部の "may or not include", "must include", "must exclude" ボタンを押すと、全元素の状態を切り替えることができます。

Reference

Enter title, journal and author.

Crystal system

Select crystal system.

Cell Param

Enter a lattice constant and the error to be allowed.

d-spacing

強度の強い結晶面の d-spacing と許容する誤差を入力します。

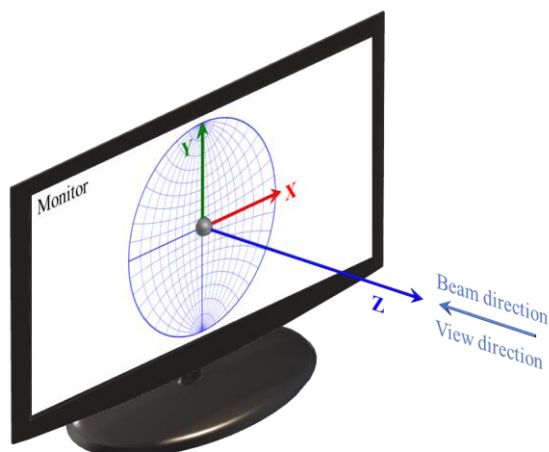
Density

密度と許容する誤差を入力します。

Appendix

A.1. ReciPro における座標系の定義

Definition of orientation



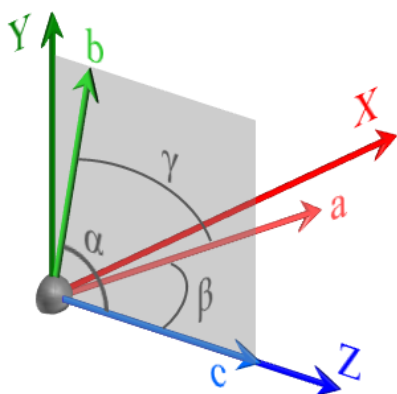
Since ReciPro handles various "directions", the definitions are explained below. In ReciPro, right-handed coordinate system is used, and axes are defined as follows:

- X-axis is to the right of the monitor surface
- Y-axis is the upward direction of the monitor surface
- The Z-axis is vertically in front of the monitor surface.

The beam direction corresponds to the direction of the line of sight looking at the monitor, which in the above coordinate system corresponds to the -Z axis direction.

Most of the operations performed in ReciPro are only in the direction (i.e. the 3x3 rotation matrix) and do not require awareness of the position of the origin. However, with the "Crystal diffraction" function, the origin position must be explicitly considered. See A.2. for more details.

Initial crystal direction



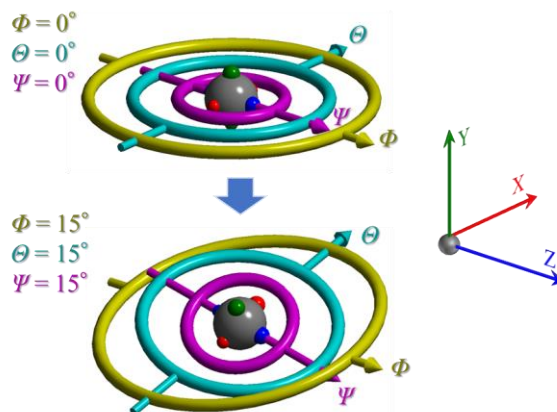
ReciPro は、結晶の初期状態 (初回起動時あるいは [Reset rotation](#) を押した後の状態)の方位を、上の図のように定義します¹⁴。すなわち、

- c 軸は Z 軸方向に一致する方向
- b 軸は YZ 平面上に存在し、Y 軸に近い方向

・ a 軸は b, c 軸によって決定する方向

上の表現を言い換えると、モニター手前方向は [001] 晶体軸に一致し、モニター右方向は (100) 結晶面の法線と一致する、ということになります。c 軸 (= [001] 晶帯軸) は必ず X 軸と一致しますが、一部の結晶系では a, b が X, Y と一致するとは限らないことに注意してください¹⁵。

Euler angles



In ReciPro, crystals can be rotated in various directions. Euler angles are used to represent the crystal orientation. The Euler angles in ReciPro uses three symbols, Φ , θ and Ψ as shown the above. When the angles Φ , θ and Ψ are all zero (upper figure), the directions of the axes of rotation corresponding to those angles are equal to Z, X, and Z, respectively.

Note that the three Euler angles have a master-slave relationship; Φ is the highest (1st) rotation, followed by θ (2nd). Ψ is the lowest (3rd) rotation. The direction of the lower rotational axis depends on the state of the upper rotation. As an example, the lower figure shows a situation where Φ , θ , and Ψ are all set to 15 degrees. The axis of rotation corresponding to angle Φ will always coincide with the Z axis, but the axis of rotation corresponding to angle θ and angle Ψ will generally not coincide with any of X, Y, or Z.

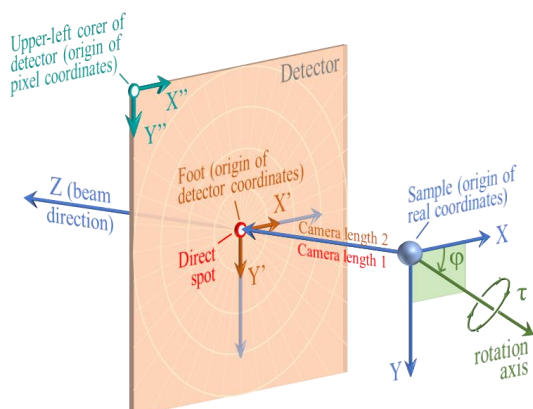
A.2. Crystal diffraction における座標系の定義

"Crystal diffraction" simulates a diffraction pattern on a detector and displays it on your monitor. The detector is a finite-sized plane created by a collection of pixels. The detector is placed at a fixed distance from the sample (scattering matter), and it may be inclined with respect to the incident beam. In order to accurately simulate this situation, information such as the geometric relationship between the detector and the sample and the pixel size/number of pixels of the detector is important.

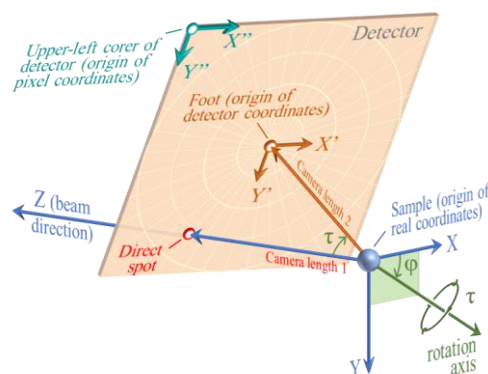
¹⁴ この定義は、Oxford 社の EBSD ソフトのインターフェースと互換性を取るためです。

¹⁵ cubic, tetragonal, or orthogonal の時、a, b, c 軸の初期方位はそれぞれ X, Y, Z 軸と一致します。hexagonal, trigonal, or monoclinic の時、b, c 軸はそれぞれ Y, Z 軸と一致しますが、a 軸は X 軸と一致しません。triclinic の時、c 軸は Z 軸と一致しますが、a, b 軸は X, Y 軸と一致しません。

Before rotation



After rotation



First, consider a situation where the detector is not tilted (i.e., the normal of the incident beam and the detector plane are the same), as shown in the above figure.

"Real coordinates" is a 3-dimensional Cartesian coordinate system in mm scale with sample as the origin. The Z axis is always the same as the beam direction (note that the definition differs from A.1.¹⁶) The direction of the X axis is right facing the Z axis and the direction of the Y axis is downward. The minimum distance of the detector (i.e. the distance between the sample and the direct spot [= the foot of the perpendicular from the sample, or "Foot"]) is defined as "Camera length 1" or "Camera length 2".

"Detector coordinates" is a two-dimensional Cartesian coordinate system in mm scale with the "foot" as the origin. X' axis is to the right of the detector plane and Y' axis is to the bottom.

"Pixel coordinates" is also a two-dimensional coordinate system with the top-left point of the detector as the origin, is in pixel scale. As in "Detector coordinates", the right direction of the detector plane is the X" axis and the down direction is the Y" axis.

Next, let's consider the situation where the detector is tilted as shown in the above figure.

Two parameters are introduced to represent the inclination of the detector: the direction of the rotation axis (ϕ) and the amount of rotation (τ). The rotation axis is considered to be in the XY plane ($Z=0$ plane) and the angle from the X axis is defined as ϕ . Then, rotate it around the axis of rotation defined by ϕ by τ in the direction of the right-hand screw.

As a result of the above rotation operation, the "direct spot" and the "foot" are not aligned with each other¹⁷. In ReciPro, the distance between the former and the sample is called "Camera length 1" (C1) and the distance between the latter and the sample is called "Camera length 2" (C2). Note that the origin of the "Detector coordinates" is always "Foot" and the origin of the "Pixel coordinates" is always the upper left corner of the detector. Also note that when the detector is tilted, the X and Y directions do not coincide with the X' and Y' directions.

Call it Camera length 1 (C1) and the distance between the latter and the sample is called Camera length 2 (C2)¹⁸, where the origin of Detector coordinates is always "Foot" and the Pixel Note that the origin of coordinates is always the upper left corner of the detector. Also note that when the detector is tilted, the X and Y directions do not coincide with the X' and Y' directions.

The definitions of each parameter are listed again in the following section.

Real coordinates (X, Y, Z)

Three dimensional coordinates of the experimental setup with millimeter unit. The origin of the coordinates is always the sample position, and Z axis direction is always parallel to the beam direction. If the detector is normal to the incident beam, X & Y axes are parallel to X' & Y' axes, respectively.

¹⁶ A.1.では ビーム方向を-Z方向と定義しましたが、“Crystal diffraction” function ではビーム方向を+Zと定義します。それに付随して、Y軸の方向も反転します。これは、過去の文献や他のソフトとの整合性を担保するためです。また、一般的にコンピュータで画像を取り扱う際には画像の下方向を+Y方向として表現するのが普通であるという事情もあります。ただし、ユーザーサイドではこのような座標系の違いを意識する必要はありません。ReciProの内部で自動的に適切な座標系変換を行っています。

¹⁷ Foot の座標 (F_x, F_y)と Direct spot の座標 (D_x, D_y)は、次の関係があります。

$$D_x = F_x - C_2 \times \sin(\Phi) \times \tan(\tau)$$

$$D_y = F_y + C_2 \times \cos(\Phi) \times \tan(\tau)$$

¹⁸ Camera length 1 (C_1)と Camera length 2 (C_2)の関係は $C_1 \times \cos(\tau) = C_2$ です。

Sample

Scattering material by the incident beam. The origin of the real coordinates.

Rotation of detector

The rotation state of the detector is represented by rotation axis direction and angle. The axis is defined on $Z=0$ plane (namely XY plane).

Φ

Angle from X axis to the rotation axis. Right-hand rule.

T

Rotation angle around the rotation axis. Right-hand rule.

Detector coordinates (X' , Y')

Two dimensional coordinates on the detector plane with millimeter unit. The origin is the foot (see below). X' & Y' axes are always parallel to X'' & Y'' , respectively.

Foot

The foot of the perpendicular from the sample. If the detector is normal to the incident beam, the foot position is identical to the direct spot. To use overlapped image mode, the foot position should be set in the pixel coordinates.

Camera length 2 (C_2)

Distance from the sample to the foot. The value is defined in millimeter.

Direct spot

Intersection of the incident beam and the detector.

Camera length 1 (C_1)

Distance from the sample to direct spot.

Pixel coordinates (X'' , Y'')

Two dimensional coordinates on the detector plane with pixel unit. X'' and Y'' directions correspond to pixel arrays of the detector. The origin is always upper-left corner of the detector.

Pixel size

Length of one side of the pixel. The value is defined in millimeter. A square pixel is only acceptable.

Detector width/height

Pixel numbers horizontally/vertically.

A.3. Principle of Bethe method

A.4. Principle of HRTEM simulation