

## 目次

1. Overview.....	2
1.1. License.....	2
1.3. 必要/推奨動作環境.....	2
1.3. ReciPro の特徴.....	2
2. Main window.....	3
2.1. File menu.....	3
2.2. Rotation control.....	4
2.3. Crystal List.....	4
2.4. Crystal Information.....	4
2.5. Functions.....	5
3. Rotation geometry.....	6
3.1. ReciPro coordinate system (ZXZ).....	6
3.2. Experimental coordinate system.....	6
3.3. Link.....	7
4. Structure Viewer.....	8
3.1. OpenGL ウィンドウ.....	8
3.2. File menu.....	8
3.3. Tab menu.....	8
3.4. Coordinate information.....	9
3.5. Toolbar.....	9
5. Stereonet.....	10
5.1. Drawing area.....	10
5.2. File menu.....	10
5.3. Mode.....	10
5.4. Indices.....	10
5.5. タブメニュー.....	10
6. Crystal diffraction.....	11
6.1. Drawing area.....	11
6.2. File menu.....	11
6.3. Monitor / Detector geometry/ Reset center.....	11
6.3. Tab menu.....	11
6.4. Spot property.....	12
6.5. Mouse position.....	12
6.6. Toolbar.....	13
6.7. Detector geometry.....	13
6.8. CBED setting.....	13
6.9. Diffraction spot information.....	13
7. HRTEM simulation.....	15
8. TEM ID.....	16
9. Spot ID.....	17
10. Powder diffraction.....	18
Appendix.....	19
A.1. ReciPro における座標系の定義.....	19
A.2. Crystal diffraction における座標系の定義.....	19
A.3. Principle of Bethe method.....	21
A.4. Principle of HRTEM simulation.....	21

## 1. Overview

ReciPro は、結晶構造の情報から、様々な結晶学的計算や電子回折、X 線回折、高分解能像などをシミュレーションしたり解析したりするソフトウェアです。

ご意見やご要望はメール ([seto@crystal.kobe-u.ac.jp](mailto:seto@crystal.kobe-u.ac.jp))あるいは GitHub の Issue (<https://github.com/seto77/ReciPro/issues>)でお知らせ下さい。

### 1.1. License

本ソフトウェアは MIT ライセンスの下で配布しています (<https://github.com/seto77/ReciPro/blob/master/LICENSE.md>)。下記の条件を受け入れていただけるのであれば、誰でも自由に無料で、このソフトウェアを使っていただくことができます。

- このソフトウェアをコピーして使ったり、配布したり、変更を加えたり、変更を加えたものを配布したり、商用利用したり、有料で販売したり、なんにでも自由につかってください。
- 再配布する場合は、このソフトウェアの著作権とこのライセンスの全文を、ソースコードの中やソースコードに同梱したライセンス表示用の別ファイルなどに掲載してください。
- このソフトウェアにはなんの保証もついていません。たとえば、このソフトウェアを利用したことで何か問題が起きたとしても、作者はなんの責任も負いません。

### 1.3. 必要/推奨動作環境

ReciPro が動作するための必要環境は、

- .Net Framework 4.8 以上が動作する Windows OS
- OpenGL 4.3 以上に対応したグラフィックス<sup>1</sup>

です。.Net Framework 4.8 は、[こちら](#)のページからインストールすることが出来ます。Windows 10 で最新のアップデートが行われている場合は .Net Framework 4.8 はすでにインストールされているはずです。

また、ReciPro の機能の中には、大きな計算リソースを必要とするものがあります。速度向上のために、できる限りマルチスレッド化や GPU 利用を行っています。快適な使用のためには、以下のスペックを持つような計算能力の高いコンピュータの使用を推奨します。

- Windows 10 64 bit 版
- 16GB 以上のメモリ
- 8 コア以上の CPU (特に電子回折動力学計算を行う時)
- OpenGL 4.3 に対応した外付け GPU (特に Structure Viewer を使う時)

### 1.3. ReciPro の特徴

#### Full GUI

ReciPro の全ての操作はグラフィカルなインターフェースを通じて行われます。ファイルの入出力のほとんどはマ

ウスによるドラッグドロップに対応しています。

#### 結晶リスト

ReciPro では複数の結晶をまとめて取り扱うことが出来ます。結晶毎にファイルを作ったたくさんのウィンドウを立ち上げるような必要はありません。

また、同一作者が開発しているソフトウェア "CSManager"<sup>2</sup>を使えば、膨大な数の結晶構造を簡単にインポートすることができます。

#### 空間群

ReciPro は空間群データベースを内蔵しており、International Tables for Crystallography Volume A (以降、この文書では ITA と略します)に含まれる 230 個の空間群に加えて、軸の変換を考慮したサブセット(530 個)の空間群(Hall symbol)の対称要素、ワイコフ位置、消滅測などが利用できます<sup>3</sup>。

#### 原子情報

ReciPro は原子番号 1(H)から 98 (Cf)までの全ての元素に関する原子価や半径、特性 X 線のエネルギー、同位体比に関する情報などを内蔵しています。また、X 線と電子線に対する原子散乱因子の近似計算に必要なパラメータや、中性子に対する原子の散乱長に関するパラメータも内蔵しています。

#### フレキシブルな結晶方位の設定

ReciPro では、結晶の方位を晶体軸指数や結晶面指数で設定することもできますし、マウスで任意の方位に回転することもできます。また、結晶の回転状態は結晶構造やステレオネット、あるいは単結晶回折のシミュレーションの際に、同期的に使用されます。

<sup>1</sup> OpenGL は、グラフィックスハードウェア向けのライブラリであり、OpenGL 4.3 は 2012 年に発表されたバージョンです。現在利用されているほとんどの PC は OpenGL 4.3 に対応していますが、残念ながら以下のケースでは OpenGL 4.3 を利用できないようです。

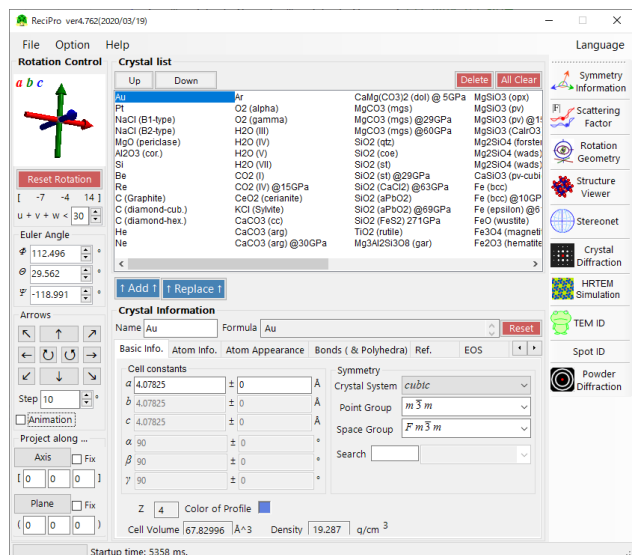
- Mac OS から Parallel desktop 環境で Windows を起動している場合
- Remote Desktop で Windows を利用している場合

なお、OpenGL 4.3 が利用できない場合でも ReciPro は利用できますが、OpenGL 描画関連の機能は無効となります。

<sup>2</sup> CSManager は <https://github.com/seto77/CSManager/releases/latest> からダウンロードできます。

<sup>3</sup> 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



ReciPro が正常に起動すると、上のようなウィンドウが表示されます。このウィンドウで計算対象の結晶を選択し、その結晶を回転させ、さらに様々な機能呼び出します。

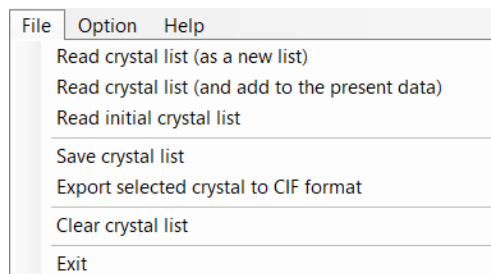
このウィンドウは大きく分けて

- File menu (最上部)
- Rotation control (左部)
- Crystal List (中央上部)
- Crystal Information (中央下部)
- Functions (右部)

から構成されています。以下に詳細を説明します。

### 2.1. File menu

#### File



#### Read crystal list (as new list)

結晶リストファイル(拡張子 xml)を新たに読み込みます。すでに読み込まれていた結晶リストは削除されます。

#### Read crystal list (and add to the present data)

結晶リストファイル(拡張子 xml)を読み込みます。読み込んだ結晶リストは現在のリストの後に付け加えられます。

#### Read initial crystal list

起動時に読み込んだ結晶リストを再度読み込みます。

#### Save crystal list

結晶リストを保存します。

#### 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。

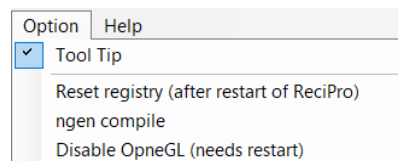
#### Clear crystal list

現在の結晶リストを全て削除します。

#### Exit

アプリケーションを終了します。

#### Option



#### Tool tip

チェックするとツールチップを表示します。

#### Reset registry (after restart of ReciPro)

再起動時にレジストリをリセットします。レジストリには、ウィンドウサイズや波長、カメラ長などの情報が格納されています。何らかの原因によってソフトウェアの動作が不安定になった場合は、レジストリのリセットが有効かもしれません。

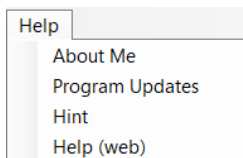
#### ngen compile

プログラムをあらかじめコンパイルすることによって、起動時間が速くなります。ただし、その効果はあまり大きくありません。

#### Disable OpenGL (needs restart)

チェックすると、OpenGL 機能をオフにします。ReciPro は OpenGL 4.3 以降の機能を使用して、三次元的な描画を行っています。ただし古い PC をお使いの場合や、リモートデスクトップ環境、あるいは Mac 上での Windows エミュレーション環境の場合は、OpenGL のバージョンが 4.3 未満かもしれません。そのような場合は、この項目をチェックしてください。

#### Help



#### About me

コピーライトやバージョンアップ履歴、マニュアル(このページ)を表示します。

#### Program updates

新しいバージョンがリリースされているかをチェックし、リリースされている場合はアップデートを行います。

#### Hint

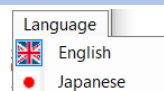
Deprecated.

#### Help (PDF)

このページを表示します。

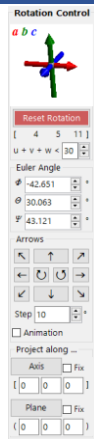
#### Language

言語を切り替えます。現在は英語と日本語のみ対応しています。切り替え後は、再起動が必要です。



## 2.2. Rotation control

このコントロールは、選択している結晶の回転状態を表示/設定します。上部には結晶の回転状態が表示されており、この領域をマウスでドラッグすることで回転することができます。結晶軸はそれぞれ 赤: a 軸, 緑: b 軸, 青: c 軸として表示されています。



### Reset rotation

“Reset rotation”を押すと結晶方位が初期状態にリセットされます。ReciPro における結晶方位の「初期状態」とは

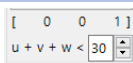
c 軸は、スクリーンに対して垂直

b 軸は、b 軸をスクリーン投影した時に上方向を向く

という方向として定義されています<sup>4</sup>。

### Zone axis

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<sup>5</sup>。

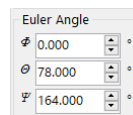


### Euler angles

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

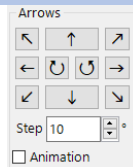
- $\Psi$ : Z 軸回転
- $\theta$ : X 軸回転
- $\Phi$ : Z 軸回転

と定義し、 $\Psi$ ,  $\theta$ ,  $\Phi$  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

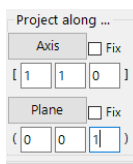
矢印ボタンをおすと、矢印の方向に角度 Step 分だけ回転します。また“Animation”をチェックした場合は、矢印の方向の回転が指定した速度で結晶が連続的に回転します。



### 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。<sup>6</sup>



### Axis

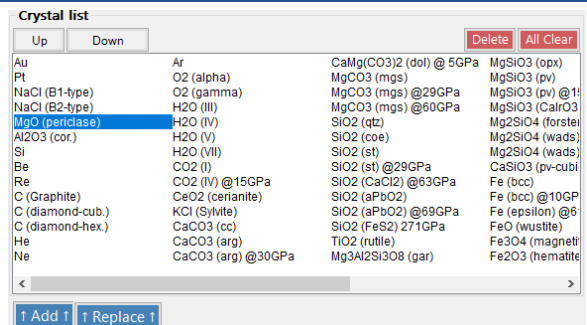
指定した晶帯軸をスクリーン面の垂直手前方向に設定し、結晶を回転します。このときこの軸に垂直な

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<sup>7</sup>。

リスト内から結晶を選択すると、下の画面(Crystal 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。

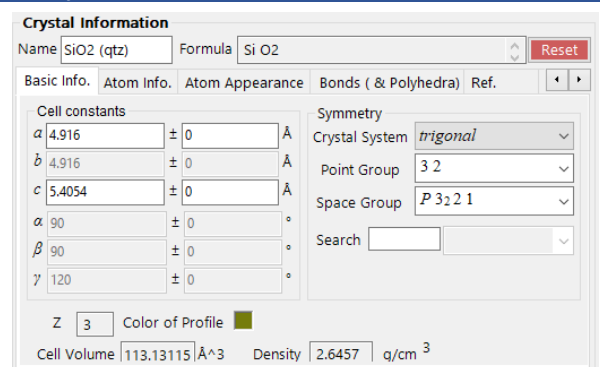
### Delete/All clear

選択されている結晶をリストから削除します。あるいは、リスト中のすべての結晶を削除します。

### Add/Replace

設定した結晶をリスト最後尾に追加します。あるいは、設定した結晶を、リスト中の選択している結晶と入れ替えます。

## 2.4. Crystal Information



結晶の格子定数/対称性/原子位置などを設定/表示します。

<sup>4</sup> このオイラー角の記号および定義は、Oxford 社の EBSD ソフト(旧 HKL 社の CHANNEL5)と同じです。そのため、Oxford 社の EBSD お使いの方は、出力される角度をそのままインプットすることが出来ます。

<sup>5</sup> 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。

<sup>6</sup> 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。

<sup>7</sup> 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。

この部分に CIF ファイルや AMC ファイルをドラッグドロップして任意の結晶を読み込むことができます。結晶に何らかの変更を加えた場合は、必ず“Add”あるいは“Replace”ボタンを押してください。押さなかった場合その情報は Crystal list 中に保存されず、変更内容は失われてしまいます。

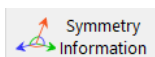
この項目の説明は長いので、[別のページ](#)で詳しく説明します。

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。

## 2.5. Functions

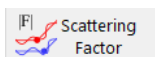
### Symmetry information

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。



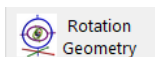
### Scattering factor

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。



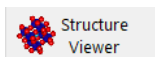
### Rotation geometry

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。



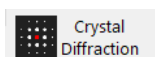
### Stereonet

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。



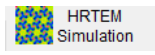
### Crystal diffraction

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。



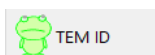
### HRTEM simulation

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。



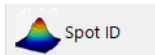
### TEM ID

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。



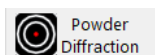
### Spot ID

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





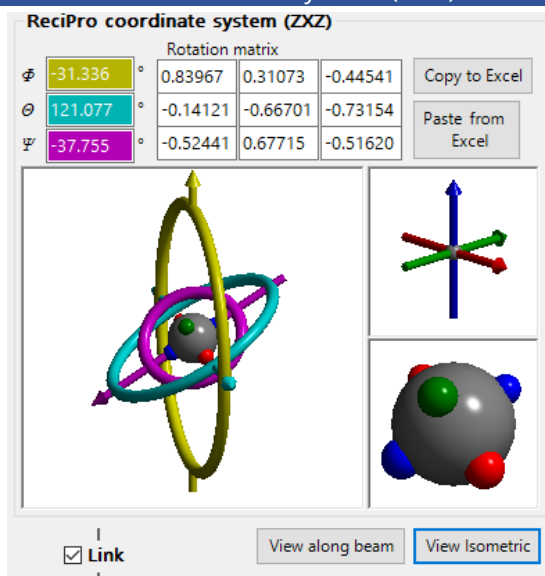
### 3. Rotation geometry

このウィンドウは、結晶の回転状態を  $3 \times 3$  行列で表現したり、異なるオイラー座標系に変換したりする機能を提供します。

ReciPro では  $\Psi$ ,  $\theta$ ,  $\Phi$  の三つのオイラー角を Z-X-Z の順に作用させて、結晶の回転状態を表現します。ただしこの表現は、必ずしも実際の光学系におけるゴニオメーターの回転軸と一致しません。

ReciPro におけるオイラー角を任意の定義のオイラー角に変換することによって、実験室でのゴニオメーターの調整をサポートします。

#### 3.1. ReciPro coordinate system (ZXZ)



“Rotation geometry” 画面の上半分は、“ReciPro 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  $\Phi$ ,  $\theta$ ,  $\Psi$  の値は Main window で設定されたオイラー角と同期しています。 $\Psi$ ,  $\theta$ ,  $\Phi$  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  $3 \times 3$  行列の回転行列が表示されます。

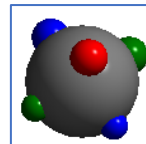
#### OpenGL windows

OpenGL で描画されているウィンドウは、回転の状況を 3 次元的に描画したものです。3 つの Torus が描画されているウィンドウでは、3 つの回転軸の状況を描画しています。黄色の Torus を貫く矢印は、オイラー角  $\Phi$  の回転軸に対応しており、ゴニオメーターにおける上位(1<sup>st</sup>)の回転軸になります。水色の矢印は  $\theta$  に対応する中位(2<sup>nd</sup>)の回転軸で、ピンク色の矢印は  $\Psi$  に対応する下位(3<sup>rd</sup>)の回転軸です。

赤、緑、青の矢印が表示されている Window は、実空間直交座標における X, Y, Z 軸を表しています。この Window で表示される矢印は、Main window の Rotation control で表示されている矢印(結晶軸)と異なるものであることに注意して下さい。

ゴニオメーターの中心に表示されているグレーの球体は、回転した物体の状態を表現しています。赤、緑、青の

球体はこの物体の方向を表す目印です<sup>8</sup>。 $\Phi$ ,  $\theta$ ,  $\Psi$  が全てゼロの時、赤、緑、青の球体は、それぞれ実空間直交座標の +X, +Y, +Z と一致する方向です。オイラー角を変化させると、物体は様々な方向に回転します。



OpenGL で描画されているウィンドウは、マウスの左ドラッグによる回転操作を受け付けます。ただしこの回転操作は結晶そのものを回転するわけではなく、“Rotation geometry”での投影方向を変更しているだけであるということに注意して下さい。結晶そのものを回転する場合は、Main window 側から回転操作をおこなってください。ReciPro における座標系について詳しく知りたい方は、Appendix を参照して下さい。

#### Copy to Excel

$3 \times 3$  の回転行列を、Excel に貼り付け可能な Tab 区切り形式でクリップボードにコピーします。

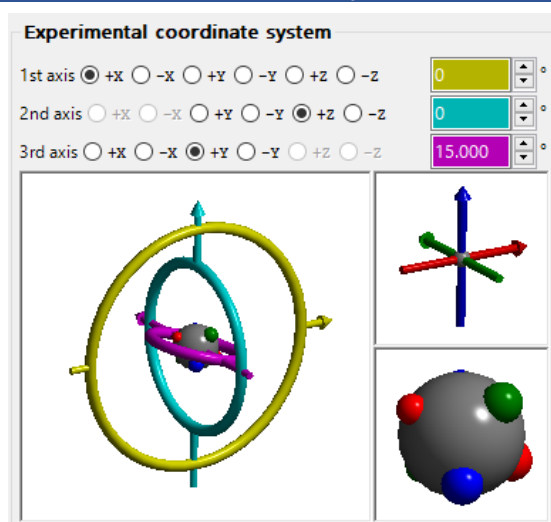
#### Paste from Excel

Excel 形式の  $3 \times 3$  の Tab 区切り数値がクリップボードにコピーされているとき、それを回転行列として設定します。

#### 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<sup>9</sup>。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。

#### 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。

#### 1<sup>st</sup>, 2<sup>nd</sup>, 3<sup>rd</sup> axes

ゴニオメーターの回転軸は、上位(1<sup>st</sup>)、中位(2<sup>nd</sup>)、下位

<sup>8</sup> よく見ると、赤、緑、青の球体には大小二つのサイズがあります。大きい方はプラス、小さい方向はマイナスの方向に対応しています。

<sup>9</sup> 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<sup>rd</sup>) 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<sup>10</sup>。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

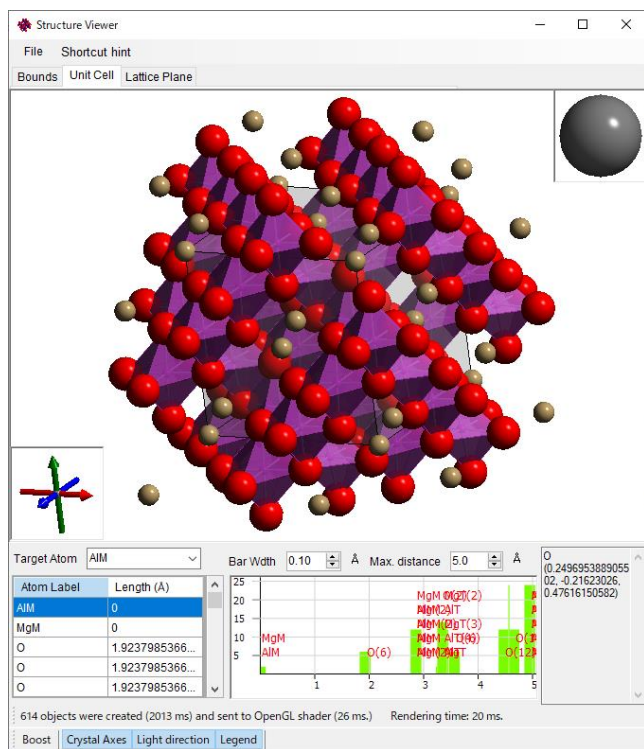
これは、“Rotation geometry”の大きな機能です。“Link”をチェックすると、“ReciPro coordinate system”と“Experimental coordinate system”の間で、物体の方位が一致するように互いのオイラー角を調整します。すなわち、ReciPro とは異なる定義の回転軸で表現されるゴニオメーターに対して、そのオイラー角の情報を提供します。



例えば実験室のゴニオメーターを調整し、ある結晶の **a** 軸を **X** 線入射方向、**b** 軸を水平方向に一致させたとします。そして Experimental coordinate system でその実験室のゴニオメーターのオイラー角を入力して下さい。さらに(Link のチェックを外した状態で、) ReciPro の Main window で結晶を適当に回転させ、スクリーン垂直方向(ビーム方向)を **a** 軸、横方向を **b** 軸と一致させてください。この状態で Link をチェックすると、それ以降 Main window で結晶を別の方位に向けたとき、その方位を実現するゴニオメーターの角度が表示されるということになります。

<sup>10</sup> ReciPro で採用しているゴニオメーターは、1<sup>st</sup>: +Z, 2<sup>nd</sup>: +X, 3<sup>rd</sup>: +Z に対応しています。

## 4. Structure Viewer



Structure viewer は、Main window で選択した結晶の結晶を三次元的に描画します。Open GL 4.3 を利用した描画を行っているため、対応したビデオカードが必要です。

### 3.1. OpenGL ウィンドウ

中央に結晶構造が描画されます。右上には照明の方向が描画されます。左下には結晶軸の方向が表示されます。

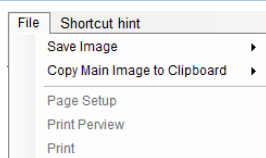
#### マウス操作

以下のようなマウス操作を受け付けます。

- Left drag: 回転
- Center drag: 平行移動
- Right up/down or wheel: 拡大、縮小
- Left double click: 原子選択/解除
- Right click (原子選択時): 原子の詳細情報表示
- CTRL + Right double click: Change perspective <-> orthogonal projection.
- CTRL + Right up/down: Change degree of perspective.

### 3.2. File menu

#### File



#### Save image

描画画像をファイルに保存します。ファイル名を指定して保存してください。

#### Copy main image to clipboard

描画画像をクリップボードにコピーします。適当な

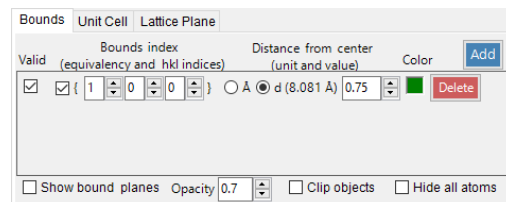
ソフトに貼り付けてください。CTRL+SHIFT+c でも同等の動作をします。

#### Shortcut hint

Shortcut hint が表示されます。

### 3.3. Tab menu

#### Bounds



このタブでは、結晶の描画範囲を、結晶面の指数と中心からの距離によって指定します。

#### Add/Delete

新しい Bound を加えたい場合は“Add”ボタンを、既存の結晶面を削除したい場合は“Delete”ボタンを押してください。

#### Bound list

一番左のチェックボックスは、その Bound を有効にするかどうかを設定します。チェックを外すと、その Bound は考慮されません。

“Bounds index”では、bound 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<sup>11</sup>。

“Distance from center”では、結晶の中心から Bound 面までの距離を設定します。距離の単位は、Å か d を選択できます。前者を選択した場合は、入力した値がそのまま距離になります(右の図では 0.75 Å)。後者を選択した場合は、入力値に結晶面の d 値をかけたものが距離になります(図の場合は、 $8.081 \times 0.75 = 6.06 \text{ Å}$ )になります。

もし、入力した bounds が不完全で、空間的に閉じた領域を定義出来ない場合、Recipro は自動的に単位格子一つ分の領域を bound と設定して描画を行います。

#### Show bound planes / Opacity

Bound planes を表示するかどうかを決定します。また表示する場合、その透明度を Opacity で設定します(0 が透明、1 が不透明)。

#### Clip objects

チェックすると、Bounds で指定された範囲内のみを厳密に描画し、Bounds と交差するオブジェクトはクリップします。

#### Hide atoms

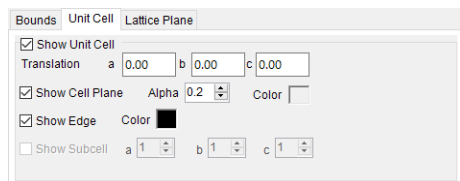
チェックすると、全ての atoms, bonds, polyhedra を

<sup>11</sup> 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), (-1-10), (-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。



非表示にします<sup>12</sup>。

## 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

全ての空間群には既定の原点があります。単位格子の中心を、空間群原点から並進させたいときは、a,b,c 軸方向に並進量を設定してください。

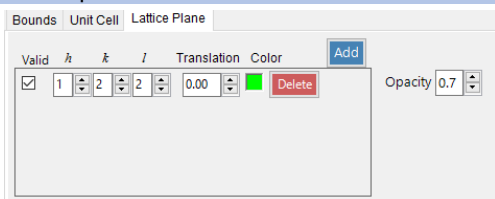
### Show cell plane

単位格子を構成する 6 枚の面を描画するかどうかを設定します。描画する場合はその面の色や透明度を設定します。

### 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。

## Lattice plane



このタブでは、結晶面の描画に関する設定を行います。

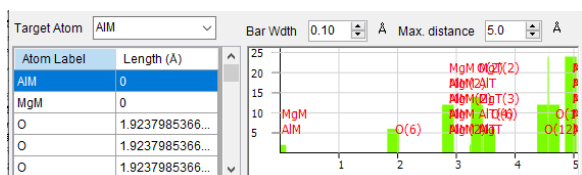
### Add/Delete

新しい Bound を加えたい場合は“Add”ボタンを、既存の結晶面を削除したい場合は“Delete”ボタンを押してください。

### Crystal plane list

“Valid”がチェックされている結晶面を描画します。結晶面は Miller で指定します。また、結晶面を並進移動させたい場合は、“Translation”に入力してください。

## 3.4. Coordinate information



“Structure viewer”の下部には、原子の配位に関する情報が表示されます。

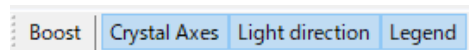
### Table (Left side)

左側のテーブルには、Target atom として指定した原子の周囲に、どのような原子がどれくらいの距離で存在するかを表示します。

### Graph (right side)

左のテーブルの情報をグラフ化したものです。“Bar width” を適当な太さに調整することによって、“Target atom”の配位数が推定できます。

## 3.5. Toolbar



“Structure viewer”の最下部に設置されているツールバーから、描画対象のオブジェクトを選択できます。

### Legend

原子の色、大きさを凡例表示します。

### Lightning ball

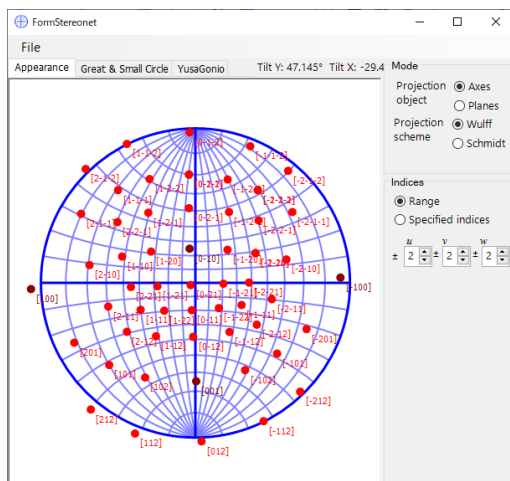
光源の位置(向き)を指定します。左ドラッグで変更できます。

### Crystal Axes

軸の向きを表示します。軸の大きさは格子定数を反映しています。このボックスでもマウスによる回転ができます。

<sup>12</sup> “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。

## 5. Stereonet



ステレオネット投影による結晶面・軸の方位関係を表示します。

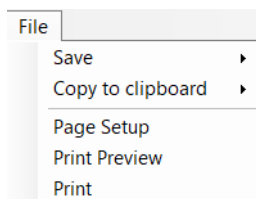
### 5.1. Drawing area

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



### 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。面積は保存されません。
- Scmidt: 等積投影を計算します。角度は保存されません。

### 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。

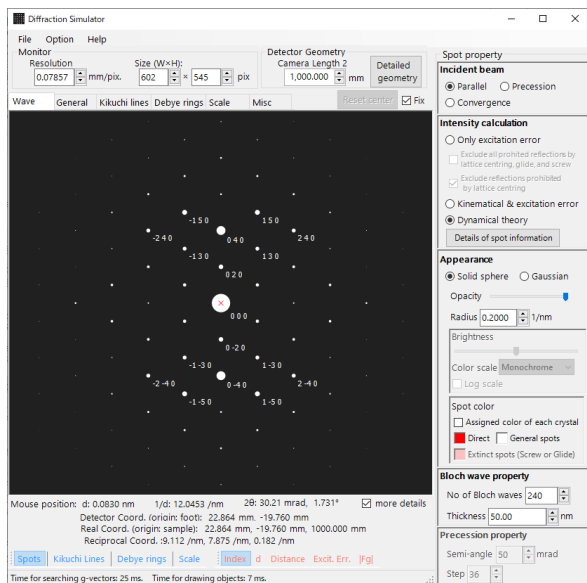
#### Outline

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. Drawing area

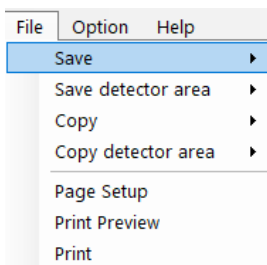
画面の中央に表示されているエリアに、diffraction をシミュレーションします。

#### 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: 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

### 6.2. File menu



#### Save / Save detector area

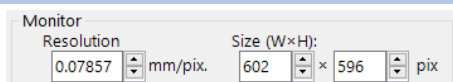
表示されている画像を保存します。後者は detector area を設定している場合に表示されます。

#### 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

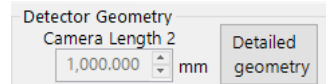
1 ピクセルあたりの長さ(mm)を設定します。この値は単なるスケールの問題なので、実際の値でなくても

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

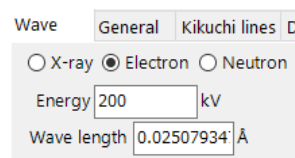
試料から検出器までの距離が表示されます。

#### 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

線源として X 線を指定します。特性 X 線を選択した場合は、元素の種類および遷移条件 (Siegbahn notation) を指定してください。放射光などによる X 線を選択したい場合は、Element を 0 番に指定し、エネルギーが波長を直接入力してください。

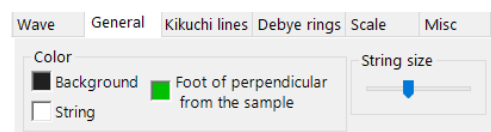
#### Electron

エネルギーが波長を直接入力してください。

#### Neutron

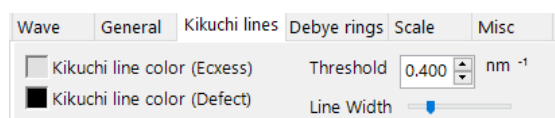
エネルギーが波長を直接入力してください。

### General



スポット、文字、菊池線などの色の設定を行います。

### Kikuchi lines

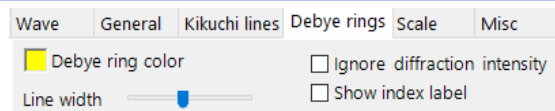


Kikuchi lines に関する設定を行います。Tool bar で Kikuchi lines を選択しているときにアクティブになります。

#### 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



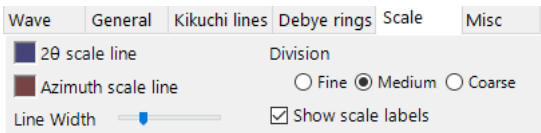
Wave General Kikuchi lines Debye rings Scale Misc

Debye ring color ☐ Ignore diffraction intensity

Line width ☐ Show index label

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。

## Scale



Wave General Kikuchi lines Debye rings Scale Misc

2 $\theta$  scale line Division  
Azimuth scale line ☐ Fine ☒ Medium ☐ Coarse

Line Width ☒ Show scale labels

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

### 2 $\theta$ /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。

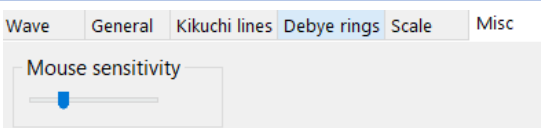
### Division

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



Wave General Kikuchi lines Debye rings Scale Misc

Mouse sensitivity

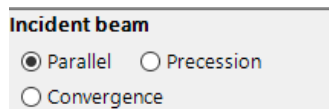
### Mouse sensitivity

マウスで回転操作をする際のマウス感度を設定します。

## 6.4. Spot property

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。

## Incident beam



**Incident beam**

☒ Parallel ☐ Precession

☐ Convergence

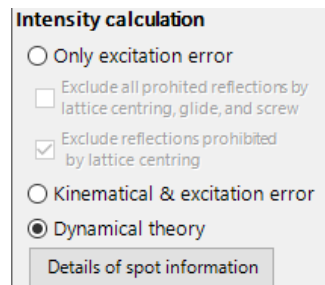
入射するビームの種類を選択します。

### Parallel

### Precession

### Convergence

## Intensity calculation



**Intensity calculation**

☐ Only excitation error

☐ Exclude all prohibited reflections by lattice centring, glide, and screw

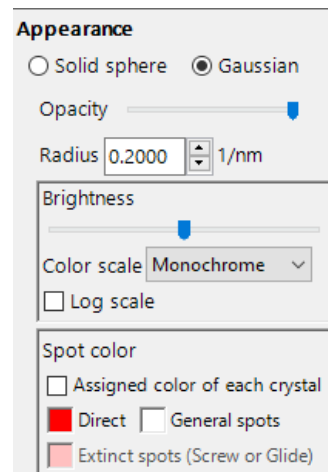
☒ Exclude reflections prohibited by lattice centring

☐ Kinematical & excitation error

☒ Dynamical theory

[Details of spot information](#)

## Appearance



**Appearance**

☐ Solid sphere ☒ Gaussian

Opacity

Radius 0.2000 1/nm

Brightness

Color scale Monochrome

☐ Log scale

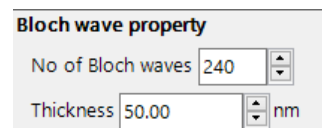
Spot color

☐ Assigned color of each crystal

☒ Direct ☐ General spots

☐ Extinct spots (Screw or Glide)

## Bloch wave property



**Bloch wave property**

No of Bloch waves 240

Thickness 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。

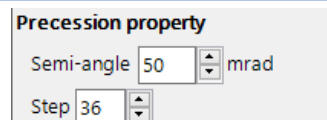
### No of Bloch waves

計算に取り入れる Bloch wave の数を設定します。

### Thickness

試料の厚みを設定します。

## Precession property



**Precession property**

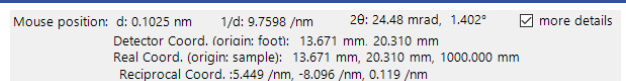
Semi-angle 50 mrad

Step 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

## 6.5. Mouse position



Mouse position: d: 0.1025 nm 1/d: 9.7598 /nm 2 $\theta$ : 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

チェックすると表示領域が拡張し、より細かい情報

## 6.6. Toolbar

Spots Kikuchi Lines Debye rings Scale Index d Distance Excit. Err. |Fg|

Diffraction spots の表示/非表示を切り替えます。

Diffraction spots の表示/非表示を切り替えます。

Debye rings の表示/非表示を切り替えます<sup>13</sup>。

Scale line の表示/非表示を切り替えます。

Detector geometry

Camera length 2 1,000 mm  $\phi$  -1.059221°  $\tau$  0° ☐ Schematic diagram

☒ Set detector area & overlapped image.

Detector width 2,064 pix. pix. size 0.099 mm Foot of the perpendicular from the sample fx 1,078.60236 pixel  
height 1,548 pix. fy 888.22938 pixel

Opacity Gradient **Positive Film** Scale 1 **Liner Scale** Scale 2 **Gray scale**




Brightness Min int. Max int.



Set detector area &amp; overlapped image

## 6.8. CBED setting





CBED


### Input parameters


Max # of Bloch waves   Division of disk diameter   

Max semiangle  mrad  disk is divided into 13273 points 




☒ Draw guide circles



Thickness from   to   with step of   nm 



Solver  



Thread  

### Output parameters



Image size    $\times 2$  pixels Thickness   nm 

Brightness   

Max   

Gamma   

(enhance outer disks)

Gradient   Color  

## Input parameters

CBED の計算時に、何個の Bloch waves を計算に取り入れるかを指定します。計算量は Bloch wave の数の 3 乗に比例しますので、大きな値を入れた場合は計算時間が長くなります。

収束角を指定します。

CBED の disc の大きさを示す guide circle を表示します。Max semiangle を決定する際に役立ちます。

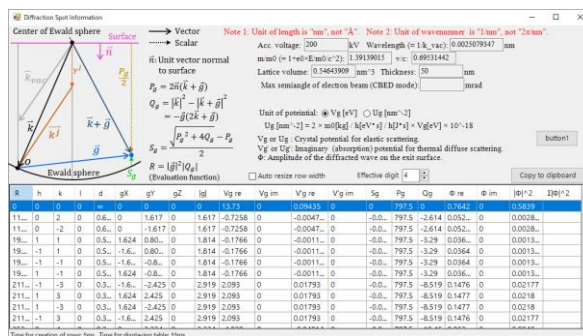
CBED の disc の解像度を指定します。Disc はおよそここで指定された数値の二乗に  $\pi/4$  を乗じたピクセルに分割されます。ピクセル数は計算量に比例しますので、大きな値を入れた場合は計算時間が長くなります。

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、

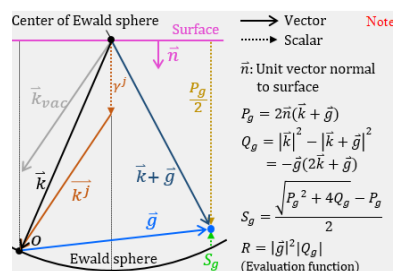
- Auto: 以下の三つから自動で高速のものを選択
- MKL: Intel 社のライブラリ MKL (<https://software.intel.com/en-us/mkl>) を使用
- Eigen: オープンソースライブラリ Eigen (<https://gitlab.com/libeigen/eigen>) を使用
- Managed: オープンソースライブラリ Mathnet (<https://github.com/mathnet/>) を使用

作者の経験によれば、Bloch 波の数が小さい( $< \sim 500$ )ss 場合は Eigen が、大きい場合( $> \sim 500$ )は MKL が最も高速である傾向があります。

## 6.9. Diffraction spot information



## Definitions of symbols

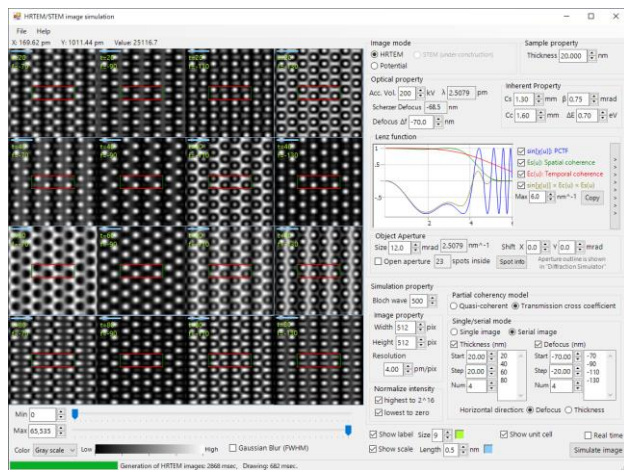


<sup>13</sup> Debye rings は、試料が多結晶体であるときに現れ





## 7. HRTEM simulation



この

Image mode

Sample property





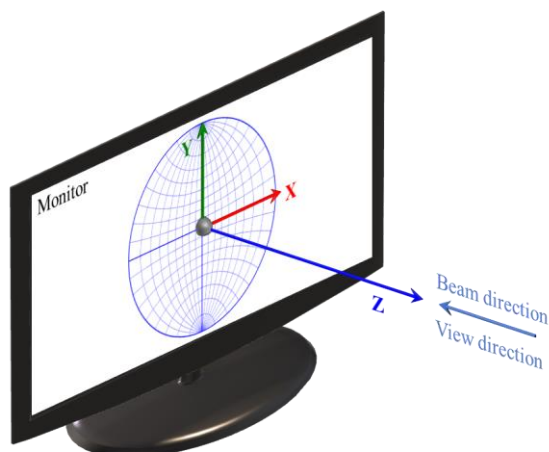




## Appendix

### A.1. ReciPro における座標系の定義

#### Definition of orientation



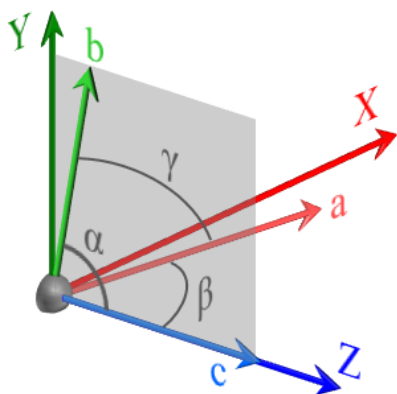
ReciPro では、様々な“方向”を取り扱いますので、その定義を説明します。ReciPro は上の図のように、

- ・ X 軸はモニター面の右方向
- ・ Y 軸はモニター面の上方向
- ・ Z 軸はモニター面の垂直手前方向

という右手系座標系を採用しています。ビーム方向はモニターを見つめる視線の方向と一致しており、上の座標系では-Z軸方向に相当します。

ReciPro で行う演算のほとんどは、方向(すなわち  $3 \times 3$  の回転行列)だけが意味を持ち、原点の位置を意識する必要はありません。ただし、“Crystal diffraction” function では、原点位置を明確に考慮する必要があります。これについては A.2.をご覧ください。

#### Initial crystal direction



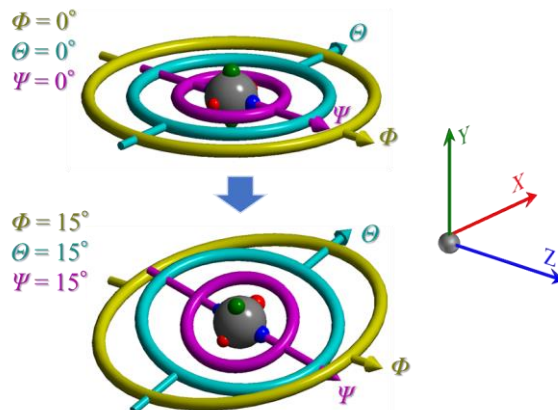
ReciPro は、結晶の初期状態 (初回起動時あるいは [Reset rotation](#) を押した後の状態)の方位を、上の図のように定義します<sup>14</sup>。すなわち、

- ・ 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] 結晶軸に一致し、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<sup>15</sup>。

#### Euler angles



ReciPro では結晶を様々な方向に回転させることが出来ます。その結晶方位を表現するのが Euler angles です。ReciPro における Euler angles は上の図のように  $\phi$ ,  $\theta$ ,  $\psi$  という 3 つの記号を使います。上の図の上の方に示したように、角度  $\phi$ ,  $\theta$ ,  $\psi$  がすべてゼロの時、それらの角度が相当する回転軸の方向は、それぞれ Z, X, Z と一致します<sup>16</sup>。

3 つのオイラー角には主従関係があることに注意してください。 $\phi$  は最も上位(1<sup>st</sup>)の回転であり、 $\theta$  がそれに続きます(2<sup>nd</sup>)。  $\psi$  は最も下位(3<sup>rd</sup>)の回転です。下位の回転軸の方向は、上位の回転の状態によって変化します<sup>17</sup>。例として、上の図の下の方に、 $\phi$ ,  $\theta$ ,  $\psi$  を全て 15° にした状態を示しました。角度  $\phi$  に相当する回転軸は常に Z 軸と一致しますが、角度  $\theta$  と角度  $\psi$  に相当する回転軸は、一般的に X, Y, Z のどれとも一致しません。

### A.2. Crystal diffraction における座標系の定義

“Crystal diffraction”では detector 面に写る回折パターンをシミュレーションしてモニターに表示します。Detector はピクセルの集合体を作る有限の大きさの平面であり、sample (scattering matter) から一定の距離に置かれています。さらにその Detector は入射ビームに対して傾いているかもしれません。このような状況を正確にシミュレーションするために、detector と sample (scattering matter) との間の幾何学的関係や、detector のピクセルサイズ・ピクセル数といった情報が重要になります。

<sup>14</sup> 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。

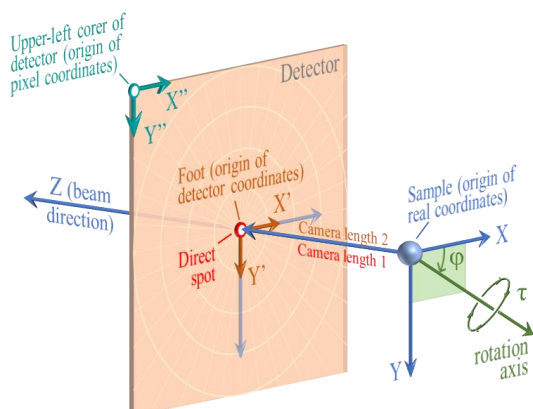
<sup>15</sup> cubic, tetragonal, or orthogonal の時、a, b, c 軸の初期方位はそれぞれ X, Y, Z 軸と一致します。hexagonal, trigonal, or monoclinic の時、b, c 軸はそれぞれ Y, Z 軸と一致しますが、a 軸は X 軸と一致しません。triclinic の時、c 軸は Z 軸と一致しますが、a, b 軸は X, Y 軸と一致しません。

<sup>16</sup> Euler angles の定義についても、Oxford 社の EBSD ソフトのインターフェースと互換性があります。

<sup>17</sup> 線形代数的な表現では、最終的な回転状態を R ( $3 \times 3$  行列)としたとき、R は以下のように計算できます。

$$R = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \psi & -\sin \psi & 0 \\ \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

## Before rotation



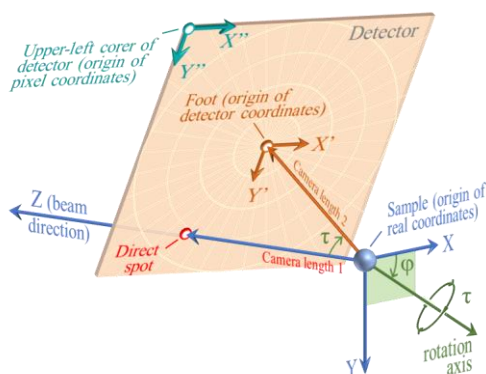
まず、上の図のように、detector が傾いていない(入射ビームと detector 平面の法線が一致する)状態を考えます。

Real coordinates は sample を原点とする三次元直交座標系であり、単位は mm です。Z 軸はビーム方向と必ず一致します (A.1.の定義と異なることに注意<sup>18</sup>)。X 軸方向は、Z 軸方向を正面に見て右向であり、Y 軸の方向は下向です。Sample と detector の最短距離 (すなわち sample と direct spot [= the foot of the perpendicular from the sample, or "Foot"]との距離)は Camera length 1 あるいは 2 と定義されます。

Detector coordinates は"Foot"を原点とする二次元座標系であり、単位は mm です。検出器平面の右方向が X'軸、下方向が Y'軸です。

また Pixel coordinates は検出器の左上の点を原点とする二次元座標系であり、単位はピクセルです。Detector coordinates と同じく検出器平面の右方向が X''軸、下方向が Y''軸です。

## After rotation



次に、上の図のような検出器が傾いた状態を考えます。

検出器の傾きを表現するために、回転軸の方向 ( $\phi$ )と回転量( $\tau$ )という二つのパラメータを導入します。回転軸は XY 平面( $Z=0$  平面)上にあると考えて、X 軸からの角度を  $\phi$  とします。そして、 $\phi$  によって定義される回転軸の周りに、右ネジの方向で  $\tau$  だけ回転させる操作を行います。

上記の回転操作によって検出器が傾いた結果、"Direct spot"

と"Foot"は一致しない状態になります。ReciPro では、前者と sample の距離を Camera length 1 と呼び、後者と sample の距離は Camera length 2 と呼びます。Detector coordinates の原点は常に"Foot"であり、Pixel coordinates の原点は常に Upper left corner of detector であることに注意してください。また、検出器が傾くと X, Y の方向と X', Y'の方向は一致しないことにも注意してください。

いかに、各パラメータの意味・定義を改めて列記します。

## 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.

## 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).

## $\phi$

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

## $\tau$

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

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

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

<sup>18</sup> 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。

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