

Recipro Manual

目次

| | |
|--|---|
| 1. Overview | 1 |
| 1.1. License | 1 |
| 1.2. 必要/推奨動作環境 | 1 |
| 1.3. ReciPro の特徴 | 1 |
| 2. Main window | 1 |
| 2.1. File menu | 2 |
| 2.2. Rotation control | 2 |
| 2.3. Crystal List | 3 |
| 2.4. Crystal Information | 3 |
| 3. Symmetry information | 4 |
| Symmetry informationエラー! ブックマークが定義されていません。 | |
| Geometrics calculationエラー! ブックマークが定義されていません。 | |
| Appendix | 4 |

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)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、このソフトウェアを利用したことでも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
 - OpenGL 4.3 以上に対応したグラフィックス
- です。 .Net Framework 4.8 以上の環境は、Window 7 SP1 以降であれば、
[https://support.microsoft.com/ja-jp/help/4503548/microsoft-net-](https://support.microsoft.com/ja-jp/help/4503548/microsoft-net-framework-4-8-offline-installer-for-windows)

[framework-4-8-offline-installer-for-windows](https://support.microsoft.com/ja-jp/help/4503548/microsoft-net-framework-4-8-offline-installer-for-windows)

のページから .Net Framework 4.8 を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 のインストールは必要ありません。

また、Recipro の機能の中には、大きな計算量を必要とするのがあります。快適な使用のためには、計算能力の高いコンピュータが必要となります。以下のスペックを推奨します。

- 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 以降に対応した外付け GPU (特に Structure Viewer を使う時)

1.3. ReciPro の特徴

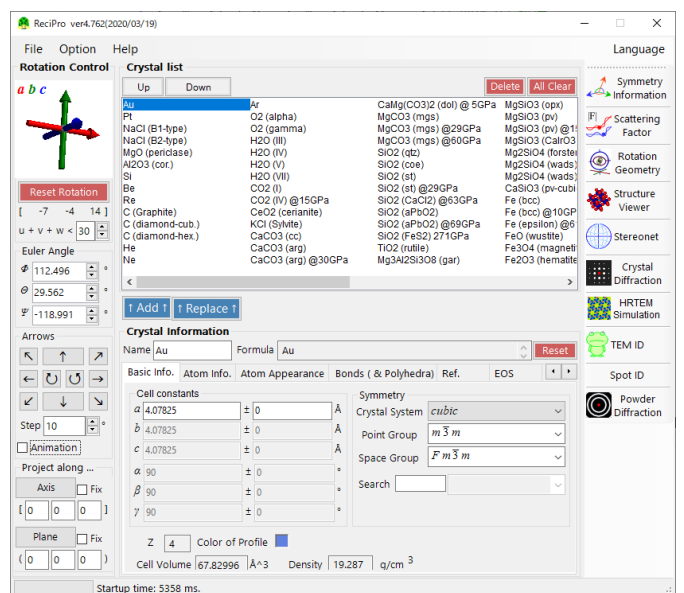
空間群

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¹。

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。

2. Main window



Recipro が正常に起動すると、右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)

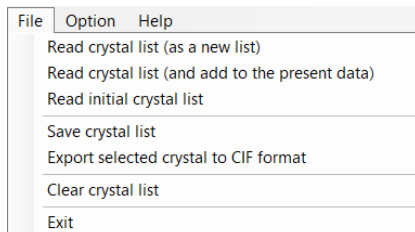
¹ Hall symbol の表記方法については、International tables for crystallography, Volume B (ITB) の 1.4. Symmetry in reciprocal space をご覧ください。

- Rotation control (左部)
- Crystal List (中央上部)
- Crystal Information (中央下部)
- 各種機能呼び出しボタン (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

2.1.1. 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。

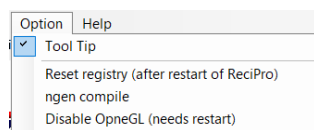
Clear crystal list

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。

2.1.2. 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おり、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

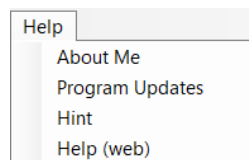
プログラムをあらかじめコンパイルすることによ

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。

2.1.3. 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

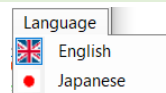
Deprecated.

Help (Web)

Web 上でこのページを表示します。

2.1.4. 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。

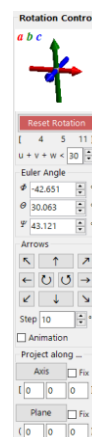


2.2. Rotation control

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。

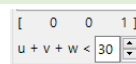
“Reset rotation”を押すと結晶の回転状態が初期状態にリセットされます。Recipro における「初期状態」とは

- 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²。



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。



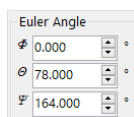
² このオイラー角の記号および定義は、Oxford 社の EBSD ソフトと同じです。そのため、Oxford 社の EBSD お使いの方は、出力される角度をそのままインプットすることが出来ます。

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

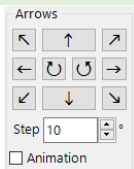
- Ψ : Z 軸回転
- θ : X 軸回転
- Φ : Z 軸回転

と定義し、 Ψ , θ , Φ の順に回転操作を施します。詳しい座標系は、Appendix をご覧ください。



Arrows

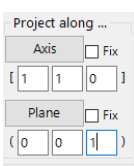
矢印ボタンをおすと、矢印の方向に角度 Step 分だけ回転します。また“Animation”をチェックした場合は、矢印の方向の回転が指定した速度で結晶が連続的に回転します。



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。³



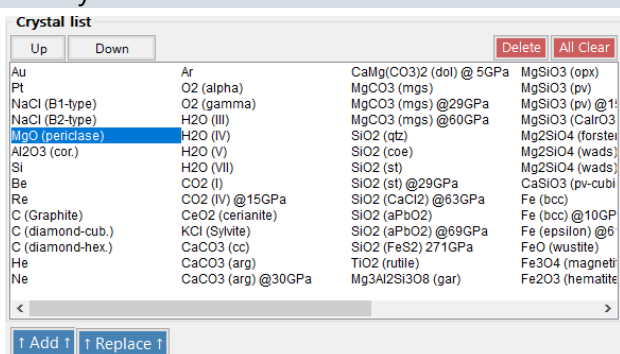
Axis

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。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

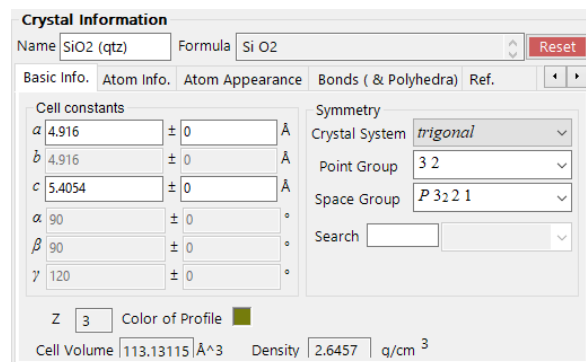
選択した結晶の順番を上/下に移動します。

Delete/All clear

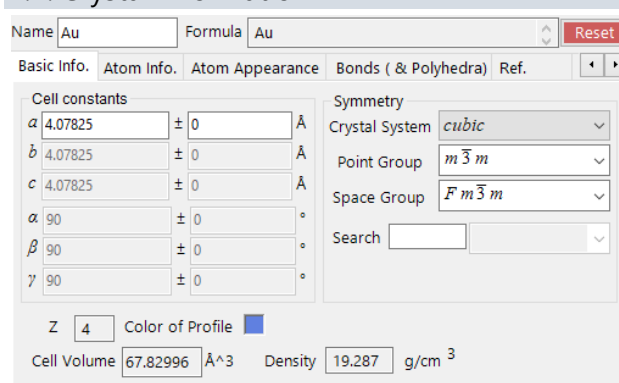
選択されている結晶をリストから削除します。あるいは、リスト中のすべての結晶を削除します。

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。結晶の何らかの要素を変更した場合、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。

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。この項目は別のページで説明します。

Scattering factor

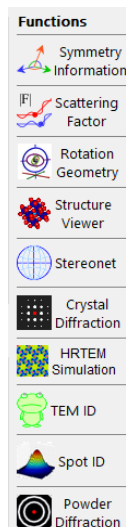
結晶面をリストアップし、結晶構造因子を計算します。この項目は別のページで説明します。

Rotation geometry

回転状態(行列)を 3 次元的に描画し、解析します。

Structure viewer

結晶の構造を 3 次元的に描画します。結晶面、単位格



³ 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。

子、配位多面体なども描画できます。詳しくは結晶構造の項にて。

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。詳しくはステレオネットの項にて。

Crystal diffraction

電子/X線の回折のシミュレーションを行います。詳しくは単結晶回折の項にて。

HRTEM simulation

HRTEM (High resolution TEM)のシミュレーションを行います。

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TEM IDの項にて。

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。

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。

3. Symmetry information

このウィンドウは、現在選択している結晶の対称性に関する情報を表示し、さらに結晶面/晶帯軸間の角度関係/周期長などを計算します。

左上の“Number”には、空間群の通し番号(ITAに準拠)と、その空間群に中心位置や軸交換に関するバリエーションがある場合は補助番号が表示されます。

Appendix

