ReciPro Manual

Copyright© Yusuke SETO

目次

[1. Overview 2](#_Toc37487190)

[1.1. License 2](#_Toc37487191)

[1.3. 必要/推奨動作環境 2](#_Toc37487192)

[1.3. ReciProの特徴 2](#_Toc37487193)

[2. Main window 3](#_Toc37487194)

[2.1. File menu 3](#_Toc37487195)

[2.2. Rotation control 4](#_Toc37487196)

[2.3. Crystal List 4](#_Toc37487197)

[2.4. Crystal Information 4](#_Toc37487198)

[2.5. Functions 5](#_Toc37487199)

[3. Rotation geometry 6](#_Toc37487200)

[3.1. ReciPro coordinate system (ZXZ) 6](#_Toc37487201)

[3.2. Experimental coordinate system 6](#_Toc37487202)

[3.3. Link 7](#_Toc37487203)

[4. Structure Viewer 8](#_Toc37487204)

[3.1. OpenGLウィンドウ 8](#_Toc37487205)

[3.2. File menu 8](#_Toc37487206)

[3.3. Tab menu 8](#_Toc37487207)

[3.4. Coordinate information 9](#_Toc37487208)

[3.5. Toolbar 9](#_Toc37487209)

[5. Stereonet 10](#_Toc37487210)

[5.1. Drawing area 10](#_Toc37487211)

[5.2. File menu 10](#_Toc37487212)

[5.3. Mode 10](#_Toc37487213)

[5.4. Indices 10](#_Toc37487214)

[5.5. タブメニュー 10](#_Toc37487215)

[6. Crystal diffraction 11](#_Toc37487216)

[6.1. Drawing area 11](#_Toc37487217)

[6.2. File menu 11](#_Toc37487218)

[6.3. Monitor / Detector geometry/ Reset center 11](#_Toc37487219)

[6.3. Tab menu 11](#_Toc37487220)

[6.4. Spot property 12](#_Toc37487221)

[6.5. Mouse position 12](#_Toc37487222)

[6.6. Toolbar 13](#_Toc37487223)

[6.7. Detector geometry 13](#_Toc37487224)

[6.8. CBED setting 13](#_Toc37487225)

[6.9. Diffraction spot information 13](#_Toc37487226)

[7. HRTEM simulation 15](#_Toc37487227)

[8. TEM ID 16](#_Toc37487228)

[9. Spot ID 17](#_Toc37487229)

[10. Powder diffraction 18](#_Toc37487230)

[Appendix 19](#_Toc37487231)

[A.1. ReciProにおける座標系の定義 19](#_Toc37487232)

[A.2. Crystal diffraction における座標系の定義 19](#_Toc37487233)

[A.3. Principle of Bethe method 21](#_Toc37487234)

[A.4. Principle of HRTEM simulation 21](#_Toc37487235)

# 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、このソフトウェアを利用したことで何か問題が起こったとしても、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[[1]](#footnote-1)

です。.Net Framework 4.8は、[こちら](https://support.microsoft.com/ja-jp/help/4503548/microsoft-net-framework-4-8-offline-installer-for-windows)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て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”[[2]](#footnote-2)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[[3]](#footnote-3)。

### 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。

# 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、さらに様々な機能を呼び出します。

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。

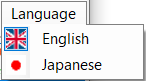
#### Hint

Deprecated.

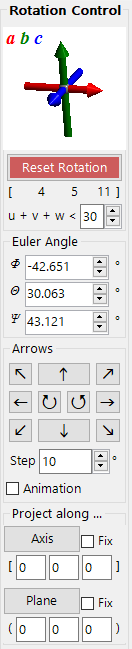
#### Help (PDF)

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

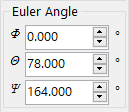
b軸は、b軸をスクリーン投影した時に上方向を向く

という方向として定義されています[[4]](#footnote-4)。

### 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[[5]](#footnote-5)。

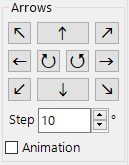
### Euler angles

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

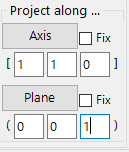
* Ψ: Z軸回転
* θ: X軸回転
* Φ: Z軸回転

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](#_3._Rotation_geometry_1)や[Appendix](#_A.1._ReciProにおける座標系の定義)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下院点します。

### 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]](#footnote-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です[[7]](#footnote-7)。

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。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出来ます。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](CrystalInformationManual(ja).pdf)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[別のファイル](CrystalInformationManual(ja).pdf)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](CrystalInformationManual(ja).pdf)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](#_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](#_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](#_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](#_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](#_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](#_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](#_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](#_10._Powder_diffraction)の項を参照してください。

# 3. Rotation geometry

このウィンドウは、結晶の回転状態を3×3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Ψ, θ, Φ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。

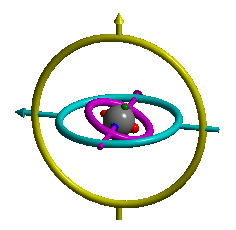
## 3.1. ReciPro coordinate system (ZXZ)

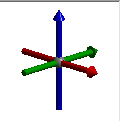
“Rotation geometry” 画面の上半分は、”ReciPro coordinate system” で表現された結晶の回転状態を表示/設定する部分です。

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側からおこなって下さい。

” 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

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Φの回転軸に対応しており、ゴニオメーターにおける上位(1st)の回転軸になります。水色の矢印はθに対応する中位(2nd)の回転軸で、ピンク色の矢印はΨに対応する下位(3rd)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[[8]](#footnote-8)。Φ, θ, Ψ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下さい。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

3×3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3×3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[[9]](#footnote-9)。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。

### 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) についてぞれぞれ±X, ±Y, ±Zの中から選択してください[[10]](#footnote-10)。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。

# 4. Structure Viewer

Structure viewerは、Main windowで選択した結晶の結晶を三次元的的に描画します。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[[11]](#footnote-11)。

“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0.75Å)。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、8.081×0.75 = 6.06Å)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を非表示にします[[12]](#footnote-12)。

### 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。

# 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

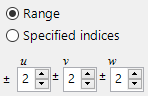
Wulff: 等角投影を計算します。面積は保存されません。

Scmidt: 等積投影を計算します。角度は保存されません。

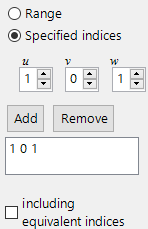
## 5.4. Indices

　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 equibalent 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

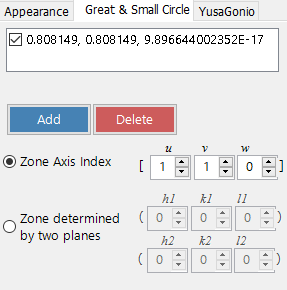
#### Size

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](#_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線を選択したい場合は、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、エネルギーか波長を直接入力してください。

#### Electron

エネルギーか波長を直接入力してください。

#### Neutron

エネルギーか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。

#### Threhold

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。

### 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

入射するビームの種類を選択します。

#### Parallel

#### Precession

#### Convergence

### Intensity calculation

### Appearance

### Bloch wave property

“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

“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

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、より細かい情報が表示されます。

## 6.6. Toolbar

#### Spots

Diffraction spotsの表示/非表示を切り替えます。

#### Kikuchi lines

Diffraction spotsの表示/非表示を切り替えます。

#### Debye rings

Debye ringsの表示/非表示を切り替えます[[13]](#footnote-13)。

#### Scale

Scale lineの表示/非表示を切り替えます。

## 6.7. Detector geometry

### 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.](#_A.2._Crystal_diffraction)を参照してください。

### Set detector area & overlapped image

チェックすると、検出器の

## 6.8. CBED setting

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

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。

#### Max semiangle

収束角を指定します。

#### Draw guide circles

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。

#### Division of disk diameter

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π/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。

#### 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
* 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(< ~500)ss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そうです。

## 6.9. Diffraction spot information

### Definitions of symbols

# 7. HRTEM simulation

この

Image mode

Sample property

# 8. TEM ID

# 9. Spot ID

# 10. Powder diffraction

# 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3×3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](#_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]](#footnote-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]](#footnote-15)。

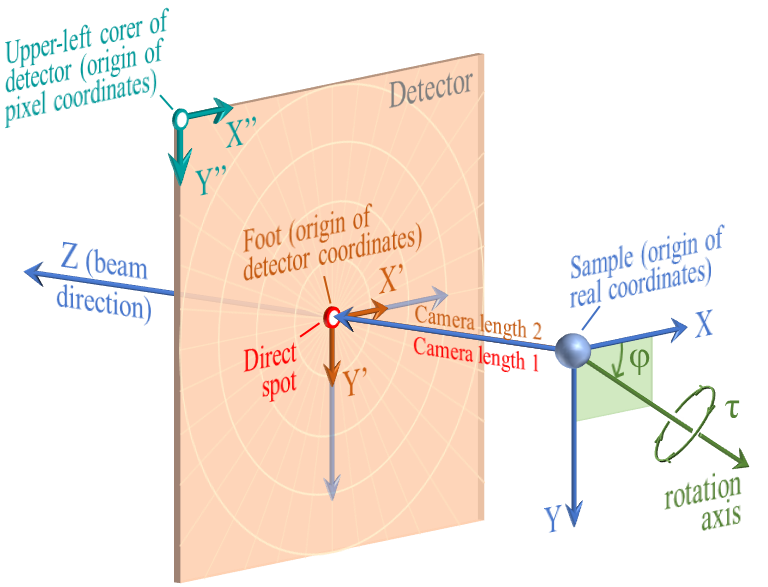
### Euler angles

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*Φ*, *θ*, *Ψ*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*Φ*, *θ*, *Ψ*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[[16]](#footnote-16)。

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。*Φ*は最も上位(1st )の回転であり、θがそれに続きます(2nd )。*Ψ*は最も下位(3rd )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[[17]](#footnote-17)。例として、上の図の下の方に、*Φ*, *θ*, *Ψ*を全て15°にした状態を示しました。角度*Φ*に相当する回転軸は常にZ軸と一致しますが、角度*θ*と角度*Ψ*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が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。



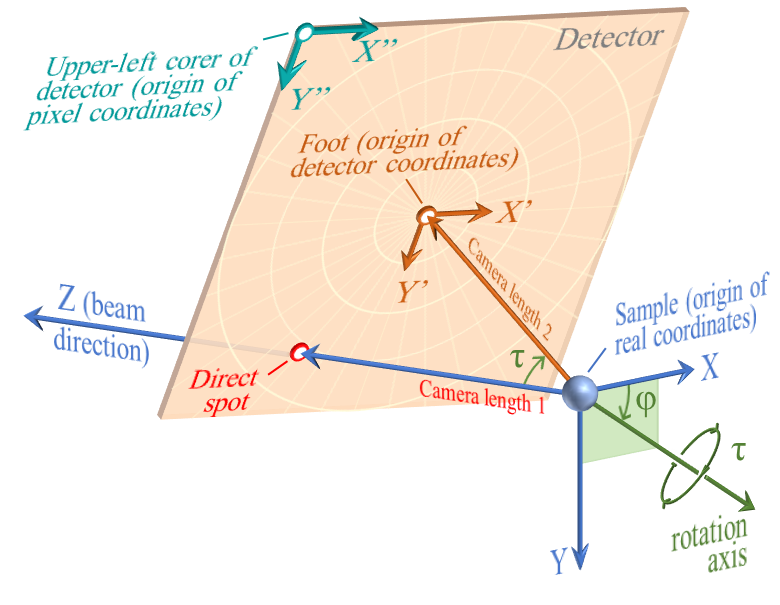
Before rotation

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[[18]](#footnote-18))。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 (*φ*)と回転量(*τ*)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*φ*とします。そして、*φ*によって定義される回転軸の周りに、右ネジの方向で*τ*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).

#### Φ

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

#### Τ

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 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

1. 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。 [↑](#footnote-ref-1)
2. CSManagerは<https://github.com/seto77/CSManager/releases/latest> からダウンロードできます。 [↑](#footnote-ref-2)
3. 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。 [↑](#footnote-ref-3)
4. 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。 [↑](#footnote-ref-4)
5. 例えば、[0 0 1] 晶体軸からほんのわずか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。 [↑](#footnote-ref-5)
6. 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。 [↑](#footnote-ref-6)
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。 [↑](#footnote-ref-7)
8. 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。 [↑](#footnote-ref-8)
9. 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。 [↑](#footnote-ref-9)
10. 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。 [↑](#footnote-ref-10)
11. 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。 [↑](#footnote-ref-11)
12. “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。 [↑](#footnote-ref-12)
13. Debye ringsは、試料が多結晶体であるときに現れ [↑](#footnote-ref-13)
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。 [↑](#footnote-ref-14)
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。 [↑](#footnote-ref-15)
16. 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。 [↑](#footnote-ref-16)
17. 線形代数的な表現では、最終的な回転状態をR (3×3行列)としたとき、Rは以下のように計算できます。 [↑](#footnote-ref-17)
18. 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。 [↑](#footnote-ref-18)