ReciPro Manual

Copyright© Yusuke SETO

目次

[1. Overview 2](#_Toc50493996)

[1.1. License 2](#_Toc50493997)

[1.3. 必要/推奨動作環境 2](#_Toc50493998)

[1.3. ReciProの特徴 2](#_Toc50493999)

[2. Main window 3](#_Toc50494000)

[2.1. File menu 3](#_Toc50494001)

[2.2. Rotation control 4](#_Toc50494002)

[2.3. Crystal List 4](#_Toc50494003)

[2.4. Crystal Information 5](#_Toc50494004)

[2.5. Functions 5](#_Toc50494005)

[3. Rotation geometry 6](#_Toc50494006)

[3.1. ReciPro coordinate system (ZXZ) 6](#_Toc50494007)

[3.2. Experimental coordinate system 7](#_Toc50494008)

[3.3. Link 7](#_Toc50494009)

[4. Structure Viewer 8](#_Toc50494010)

[4.1. Main area 8](#_Toc50494011)

[4.2. File menu 8](#_Toc50494012)

[4.3. Tab menu 8](#_Toc50494013)

[4.4. Toolbar 11](#_Toc50494014)

[5. Stereonet 12](#_Toc50494015)

[5.1. Main area 12](#_Toc50494016)

[5.2. File menu 12](#_Toc50494017)

[5.3. Mode 12](#_Toc50494018)

[5.4. Indices 12](#_Toc50494019)

[5.5. タブメニュー 12](#_Toc50494020)

[6. Crystal diffraction 13](#_Toc50494021)

[6.1. Main area 13](#_Toc50494022)

[6.2. File menu 13](#_Toc50494023)

[6.3. Monitor / Detector geometry/ Reset center 13](#_Toc50494024)

[6.3. Tab menu 13](#_Toc50494025)

[6.4. Spot property 14](#_Toc50494026)

[6.5. Toolbar 15](#_Toc50494027)

[6.6. Detector geometry 15](#_Toc50494028)

[6.7. CBED setting 16](#_Toc50494029)

[6.8. Diffraction spot information 16](#_Toc50494030)

[7. HRTEM simulation 17](#_Toc50494031)

[7.1. Main area 17](#_Toc50494032)

[7.2. File menu 17](#_Toc50494033)

[7.3. Image mode 17](#_Toc50494034)

[7.4. Sample property 17](#_Toc50494035)

[7.5. Optical property 17](#_Toc50494036)

[7.6. Simulation property 18](#_Toc50494037)

[7.7. Appearance 18](#_Toc50494038)

[8. TEM ID 19](#_Toc50494039)

[8.1. TEM condition 19](#_Toc50494040)

[8.2. Photo1, 2, 3 19](#_Toc50494041)

[9. Spot ID 20](#_Toc50494042)

[7.1. Main area 20](#_Toc50494043)

[7.2. Optics 20](#_Toc50494044)

[7.3. Spot 20](#_Toc50494045)

[7.4. Index 21](#_Toc50494046)

[10. Powder diffraction 22](#_Toc50494047)

[11. Crystal database 23](#_Toc50494048)

[11.1. Table 23](#_Toc50494049)

[11.2. Search options 23](#_Toc50494050)

[Appendix 24](#_Toc50494051)

[A.1. ReciProにおける座標系の定義 24](#_Toc50494052)

[A.2. Crystal diffraction における座標系の定義 24](#_Toc50494053)

[A.3. Principle of Bethe method 26](#_Toc50494054)

[A.4. Principle of HRTEM simulation 26](#_Toc50494055)

# 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]](#footnote-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, Wycoff 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 symbols[[2]](#footnote-2)).

### 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.

# 2. Main window

When ReciPro is successfully launched[[3]](#footnote-3), 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

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

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

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.

#### Version history

#### License

#### Github page

#### Report bugs, requests, or comments

#### 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。

#### 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

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

### Current direction

結晶の現在の回転状態が表示されます。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であり、b軸は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、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]](#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](D:\\Users\\seto\\source\\repos\\ReciPro\\ReciPro\\doc\\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](file:///D:\Users\seto\source\repos\ReciPro\ReciPro\doc\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](file:///D:\Users\seto\source\repos\ReciPro\ReciPro\doc\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

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.

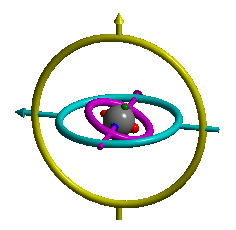
## 3.1. ReciPro coordinate system (ZXZ)

“Rotation geometry” 画面の上半分は、”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。

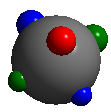
上部に表示されているΦ, θ, Ψの値はMain windowで設定されたオイラー角と同期しています。Ψ, θ, Φの値を変更したい場合はMain Window側からおこなって下さい。

” 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

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.

# 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。

## 4.1. Main area

画面の上部に結晶構造が描画されます。左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。右側には原子の凡例が表示されます。

### 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.

## 4.2. 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。

## 4.3. Tab menu

### 4.3.1. Bounds

このタブでは、結晶の描画範囲を指定します。指定の仕方には、単位格子を基準にする方法と、結晶面によって指定する方法があります。上部のラジオボタンによって切り替えることが出来ます。

#### Bounds defined by cell

このモードでは、単位格子のa, b, c軸を描画範囲の単位とします。

”Center”は中心となる分率座標を指定し、”Range”で各軸の上限/下限値を指定します。

よく使う値については右側のプリセットボタンで直接指定することもできます。

#### Bounds defined by crystal planes

このモードでは、結晶面を基準にして描画範囲を指定します。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1つ分の領域をboundと設定して描画を行います。

##### Bound list

Bound planeのリストが表示されます。Bound planeを一時的に無効にしたい場合は、リスト中の一番左のチェックボックスを案チェックしてください。

新しいBound planeを加えたい場合は”Add”ボタンを、置き換えたい場合は”Replace”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。

ここで行った変更を恒久的に保存したい場合は、必ず”Main Window”でも”Add”あるいは”Replace”を行ってください。そうしないと、”Main Window”の結晶リストの選択を変更した際、ここで行った変更内容は失われてしまいます。

##### 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[[11]](#footnote-11)。

##### Distance from origin

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、”d”か”Å”を選択できます。前者の場合は、入力した値に結晶面のd値をかけたものが距離になります(図の場合は、d×1.5 = 9.949Å)になります。後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。どちらかを変更すると、もう片方も自動で変更されます。

#### 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 by bounds planes

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)。

### 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

結晶に含まれる原子のリストが表示されます。リストへの操作はAdd, Replace, Deleteすることで行います。原子の描画を一時的に無効にしたい場合は、リスト中の一番左のチェックボックスをアンチェックしてください。

ここで行った変更を恒久的に保存したい場合は、必ず”Main Window”でも”Add”あるいは”Replace”を行ってください。そうしないと、”Main Window”の結晶リストの選択を変更した際、ここで行った変更内容は失われてしまいます。

#### Element & Position

この部分は、

##### Label

原子のラベルを入力します。

##### Element

元素を表示/設定します。

##### X, Y, Z

原子の分立座標を表示/設定します。0から1までの実数を入力してください。1/2や2/3のような分数も入力できます。

##### Occ

原子の占有度を指定します。0から1までの実数で指定してください。

#### Origin shift

原子位置のシフトを行います。プリセットされたボタンを押すか、Custom値を入れて“Apply custom shift”ボタンを押します。

#### Appearance

描画する原子の半径や色、質感を設定します。

##### Radius

原子半径を指定します。

##### Atom color

原子の描画色を設定します。

##### Material

描画時の原子の質感を設定します。(Ambient: 環境光の強さ; Emission: 放射光の強さ; Shininess: 反射光の強さ; Diffusion: 拡散光の強さ; Specular: 反射光の強さ; Alpha: 透明度)

##### Apply to same elements

“Appearance”タブを選択したときにのみ現れます。設定した情報(イオン半径と描画色)を同元素種の原子すべてに適用します。

### 4.3.3. Bonds (& Polyhedra)

このタブでは結晶構造描画時に使われる結合ボンドとボンドで構成される多面体の情報を入力します。

#### Bond list

ボンド情報が表示されます。リストへの操作はAdd, Replace, Deleteすることで行います。ボンドを一時的に無効にしたい場合は、リスト中の一番左のチェックボックスをアンチェックしてください。

ここで行った変更を恒久的に保存したい場合は、必ず”Main Window”でも”Add”あるいは”Replace”を行ってください。そうしないと、”Main Window”の結晶リストの選択を変更した際、ここで行った変更内容は失われてしまいます。

#### Bond property

ボンド情報を設定/表示します。

##### 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

チェックするとコントロールがアクティブになり、ボンドによって構成される多面体を(多面体が成立すれば)表示します。

##### Inner Bonds

チェックすると多面体の中にあるボンドを表示します。

##### Center Atom

チェックすると多面体の中心原子を表示します。

##### Inner Bonds

チェックすると多面体の頂点原子を表示します。

##### Color

多面体の面の描画色を設定します。

##### Alpha

多面体の面の透明度を設定します。

##### Show Edge

チェックすると多面体の綾(頂点間を結ぶ線)を表示します。

##### Color

稜線の色を設定します。

##### Width

稜線の太さを設定します。

### 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

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。

### 4.3.5. 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。上部にLattice planeリストが表示されます。リストへの操作はAdd, Replace, Deleteすることで行います。Lattice planeを一時的に無効にしたい場合は、リスト中の一番左のチェックボックスをアンチェックしてください。

このタブで行った変更を恒久的に保存したい場合は、必ず”Main Window”でも”Add”あるいは”Replace”を行ってください。そうしないと、”Main Window”の結晶リストの選択を変更した際、ここで行った変更内容は失われてしまいます。

#### H k l indices

結晶面をMiller指数で指定します。

#### Translation

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。

### 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)

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。

### 4.3.7. Information

クリックした原子の情報が表示されます。只今機能実装中につき未完成です。

### 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

投影方法を設定します。 ”Orthographic”では完全な平行投影(無限遠投影)を行います。“Perspective”では、トラックバーで設定される視点距離から遠近感のある投影を行います。

#### Depth fading out

画面奥行き方向に関して遠くに描画される物体のフェードアウト処理を行います。”Far”で設定された値よりも遠くの物体は完全に透明になり、”Near”で設定された物体よりも近くにある物体は完全に不透明です。中間の物体は、0-1の範囲の透明度に設定されます。

#### Rendering quality

描画品質を選択します。品質を高くすると描画処理が遅くなりますので、お使いのGPU性能にあった品詞を選んでください。

#### Transparency mode

半透明な物体(原子や多面体)の重なり合いを計算する際のアルゴリズムを選択します。 ”Approximate”は、物体の配置によっては不正確な描画になる可能性がありますが、高速です。” Perfect”は、正確に透明度を計算しますが、計算速度が非常に遅くなりますので、外付けGPUカードが必須となります。

## 4.4. 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。

### 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。

### 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。

### Legend

原子の凡例を表示します。表示される文字をラベルにするか、Miscタブから元素名にするか、選択できます。

### Like Vesta

著名なソフトウェアVestaと同じような見栄えになるように、原子色/サイズ、結合設定を変更します。

# 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. 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

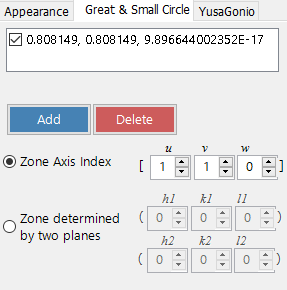
#### Size

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

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](#_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入力します。

#### Neutron

エネルギーか波長を入力します。

### 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](#_6.6._Toolbar)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](#_6.6._Toolbar)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](#_6.6._Toolbar)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](#_6.6._Toolbar)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

歳差運動をしているIncident beamをシミュレーションします。Wave sourceとして電子を選択したときのみ有効となります。このモードを選択すると、“Intensity calculation”は自動的にDynamical theoryに設定されます。

#### 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](#_6.8._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

Excitation error (すなわち、エワルド球面と逆格子点との幾何学的距離)を元に強度を計算します。Excitation errorが小さいほど強度は高くなり、その最大値は後述するRadiusの値となります。Excitation errorが大きくなると強度は小さくなり、Excitation errorがRadiusを超えるとゼロになります。

#### 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

動力学的回折理論 (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、その球体とエワルド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、Radius×(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、Radius×(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

“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

“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

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。

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

### Set detector area & overlapped image

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 the image.

## 6.7. 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

電子線の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。

#### 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

Simulationされた画像が表示されます。マウスの右クリックで縮小、右ドラッグで拡大できます。

### 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。

### Color

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

### 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。

* Sin[χ(u)]: Phase contrast transfer function (PCTF)
* Es(u): Spatial coherence envelope function
* Ec(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変化します。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mrad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

計算に取り込む最大のBloch波の数を設定します。

### Image Property

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

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

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

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

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

### Label

ラベル (t: thickness [nm], f: defocus [nm] )を表示するどうか、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どうか、およびスケールの長さと色を設定します。

### Unit cell

単位格子を表示する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の観察条件を入力します。

## 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

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

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[[14]](#footnote-14)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。

### 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

“Crystal database” functionは、2万件以上の結晶構造についての検索およびインポート機能を提供します。

このデータベースは”American Mineralogist Crystal Structure Database”に基づくものです。この結晶データを使用する際は、<http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php>をよく読んで、次の文献を必ず引用してください。

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

## 11.1. Table

データベースに含まれている結晶が表示されます。検索条件を入力されている場合は、特定の条件に合った結晶のみが表示されます。

Table中の任意の結晶を選択すると、Main windowの”Crystal information” にその結晶の情報が転送されます。 ”Crystal list”に追加したい場合は、”Add”あるいは”Replace”ボタンを押してください。

## 11.2. Search options

検索条件を入力します。入力した後は”Search”ボタンあるいはエンターキーを押してください。

### Name

結晶の名称を入力します。

### 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出来ます。

### Reference

論文名、雑誌名、著者名を入力します。

### Crystal system

結晶系を入力します。

### Cell Param

格子定数と許容する誤差を入力します。

### 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](#_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[[15]](#footnote-15)。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[[16]](#footnote-16)。

### 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[[17]](#footnote-17)。

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[[18]](#footnote-18)。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[[19]](#footnote-19))。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[[20]](#footnote-20)。ReciProでは、前者とsampleの距離をCamera length 1 (C1) と呼び、後者とsampleの距離はCamera length 2 (C2) [[21]](#footnote-21)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 (C2)

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 (C1)

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. CSManagerは<https://github.com/seto77/CSManager/releases/latest> からダウンロードできます。 [↑](#footnote-ref-1)
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。 [↑](#footnote-ref-2)
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。 [↑](#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. 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。 [↑](#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。つまり、結晶の形状を表現することが出来ます。 [↑](#footnote-ref-12)
13. 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。 [↑](#footnote-ref-13)
14. 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。

    ただし、,

    角括弧([])内の第1項 )は2次元コーシー分布関数です。また、第2項 は2次元ガウス関数です。

    はスポットの中心座標、は軸を軸に回転する角度、は軸に対する半値幅、はコーシー分布関数とガウス関数の比率を意味します。はこの関数の積分強度に対応します。また、後半の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。 [↑](#footnote-ref-14)
15. 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-15)
16. 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-16)
17. 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-17)
18. 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-18)
19. 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-19)
20. Footの座標 (FX, FY)とDirect spotの座標 (DX, DY)は、次の関係があります。

    DX = FX - C2 × sin(Φ) × tan(τ)

    DY = FY + C2 × cos(Φ) × tan(τ) [↑](#footnote-ref-20)
21. Camera length 1 (C1)とCamera length 2 (C2)の関係は C1 × cos(τ) = C2です。 [↑](#footnote-ref-21)