

AAVDP 软件使用手册

Version 1.0.0, Jun 1, 2024

Edit by

Yan Zhang

Ruifeng Zhang

M I C I D

Materials Integrated Computation and Intelligent Design

目录

1 AAVDP 简介.....	4
2 AAVDP 的配置和使用.....	5
3 AAVDP 理论背景.....	7
3.1 基础理论.....	8
3.1.1 晶体点阵和布拉格方程.....	8
3.1.2 倒易点阵和衍射矢量方程.....	8
3.2 X 射线和中子衍射.....	9
3.3 电子衍射.....	11
3.3.1 衍射强度.....	11
3.3.2 衍射花样.....	16
3.4 结构有序分析.....	20
4 AAVDP 功能介绍.....	21
4.1 X 射线衍射 (X-ray Diffraction)	21
4.2 选区中子衍射 (Selected-area Neutron Diffraction)	22
4.3 选区电子衍射 (Selected-area Electron Diffraction)	23
4.4 运动学菊池衍射 (Kinematic Kikuchi Diffraction)	25
4.4 动力学菊池衍射 (Dynamic Kikuchi Diffraction)	26
4.5 径向分布函数 (Radial Distribution Function)	27
4.6 静态结构因子 (Static Structure Factor)	28
5 应用实例.....	29
5.1 Cu 和 ZnO 和 Al ₂ O ₃ 晶体 X 射线衍射	29

5.2 FeCo 晶体 X 射线和中子衍射	30
5.2 Ni 和 Fe 和 Zr 和 Al ₂ O ₃ 晶体电子衍射	31
5.3 Ni 和 Fe 和 Zr 晶体运动学菊池衍射	33
5.4 Ni 和 Fe 和 Zr 晶体动力学菊池衍射	34
5.5 Cu-Zr 熔液径向分布函数	36
5.6 Cu-Zr 熔液静态结构因子	36
参考文献	38

1 AAVDP 简介

AAVDP (Automatic Analysis of Virtual Diffraction Pattern) 是一款由北京航空航天大学 MICID 团队设计和开发的原子级晶体结构衍射模拟和分析程序。该程序致力于解决在晶体学、物理学、化学和材料科学等领域中衍射模拟和分析的种种不便，助力分析各类晶体结构、晶体缺陷等。尽管现有的相关程序提供了部分衍射模拟功能，但往往受限于功能扩展性、自动化程度和可视化工具的多重限制。比如，LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)^[1]作为分子动力学模拟程序的典型代表虽然附加了 X 射线衍射和电子衍射模拟功能，但是缺乏相关的运动学和动力学菊池衍射模拟功能，另外，程序缺乏对分析结果的可视化；现有的第三方衍射模拟软件尽管提供了衍射分析和可视化功能，但安装依赖繁杂，对新用户不够友好，如 EMSOFT^[2]。AAVDP 则弥补了这些不足，它提供了简洁易用的用户界面和强大的衍射模拟分析功能，使得研究者可以迅速而准确地完成晶体衍射的模拟和分析。

AAVDP 的编写基于 C/C++ 语言，体量小，具有高效和稳定等特点；程序支持在 linux、macOS 或 windows 系统下运行，显示出强大的可移植性；AAVDP 的前后处理采用一体化流程设计，能够便捷提取原子级结构模拟和分析数据，并生成图片，大大提升数据处理和分析的效率；此外，作为高通量控制子模块，AAVDP 可以轻松集成到 MICID 研究组的集成化平台 SPaMD^[3]中，为用户提供自动化衍射分析功能。

总之，AAVDP 作为一款功能强大、操作简便的原子级结构衍射模拟和分析软件，将为广大研究者提供有力的技术支持，推动晶体学、材料科学等领域的研究进展。

2 AAVDP 的配置和使用

获取 AAVDP 安装包

- (1) 直接从 MICID 网站下载，链接如下：<http://micid.top/software/aavdp>
- (2) 发送注册表到 zrfcms@buaa.edu.cn，获取百度网盘链接。
- (3) 直接从 github 下载，链接如下：<https://github.com/zrfcms/aavdp>

在 Linux 系统下安装步骤

在 Linux 系统下需要默认已经安装完成 gcc 和 g++ 编译器，以及 AAVDP 编译运行需要的库：libpng、hdf5 和 lapacke。

```
>>tar -xvf AAVDP-x.x.x.tar
```

```
>>cd AAVDP-x.x.x.
```

```
>>make
```

安装完成的 AAVDP 保存在 bin 文件夹下。为了方便应用，建议将 AAVDP 的绝对路径添加到环境变量中。可以按照如下步骤操作：

```
>>pwd 获取当前所在路径
```

```
>>echo 'export PATH=当前所在路径:$PATH' >> ~/.bashrc
```

```
>>source ~/.bashrc
```

在 MAC 系统下安装步骤

在 Mac 系统下需要默认已经安装完成 gcc 和 g++ 编译器，以及 AAVDP 编译运行需要的库：libpng、hdf5 和 lapacke。

```
>>tar -xvf AAVDP-x.x.x.tar
```

```
>>cd AAVDP-x.x.x.
```

```
>>make
```

安装完成的 AAVDP 保存在 bin 文件夹下。关于路径的设置与 Linux 类似。

在 Win 系统下安装步骤

如需要在 win 环境下使用 AAVDP，请先安装 Cygwin 软件。随后进入安装路径下的 home 文件夹，将 AAVDP-x.x.x.tar 复制到该文件夹下。

启动程序 Cygwin64 终端，在新窗口中输入：

```
>>tar -xvf AAVDP-x.x.x.tar
```

```
>>cd AAVDP-x.x.x.
```

```
>>make
```

安装完成的 AAVDP 保存在 bin 文件夹下。

3 AAVDP 理论背景

衍射是波在传播途中遇到障碍物时偏离原来直线传播的物理现象。由于晶体内部原子排列的周期性，入射波遇到晶体时产生的衍射会生成晶体结构的“指纹”。

根据入射波的种类，衍射分析技术分为 X 射线衍射（XRD，X-ray Diffraction）、中子衍射（SND，Selected-area Neutron Diffraction）和电子衍射（SED，Selected-area Electron Diffraction）。X 射线波长范围在 $0.1\sim 100\text{\AA}$ ，X 射线照射晶体样品时，在原子内受核束缚较紧的电子上发生相干散射（散射波和入射波波长相同），或者与自由电子或受核束缚较弱的电子碰撞，发生非相干散射（散射波和入射波波长不同），前者是衍射分析的基础，因此散射强度与原子序数相关。中子束德布罗意波长约为 1.0\AA ，与原子核相互作用产生弹性散射（入射中子方向改变但不损失能量）和非弹性散射（入射中子方向改变且损失能量），散射强度与原子质量相关。电子束与中子束类似，但是德布罗意波长约在 10^{-2}\AA 量级，可生产衍射花样和菊池花样等重要晶体学“指纹”。

虚拟衍射分析技术在科学研究和技术应用中扮演着举足轻重的角色。它不仅是研究晶体结构的关键手段，更是深入探索晶体性质、性能及其应用的基石。在晶体学、材料科学等多个领域，虚拟衍射分析技术都展现出了广泛的应用价值，为科研工作者提供了强大的技术支持。

3.1 基础理论

3.1.1 晶体点阵和布拉格方程

实际晶体结构可视为完整无缺的理想晶体，其中的每个质点（原子、离子等）抽象为规则排列于空间的具有完全相同环境的几何点，即阵点。由阵点在三维空间规则排列的阵列称为点阵。假设晶体点阵的基矢为 \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 、 \mathbf{c} ，点阵矢量 \mathbf{R} 如下：

$$\mathbf{R} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$$

约化的 $[uvw]$ 表示一晶向，与 $[uvw]$ 晶向垂直的晶面用 (hkl) 表示：

$$hu + kv + wl = 0$$

研究晶体结构主要依靠分析入射线与晶体相互作用产生的衍射现象。衍射分析的基础是布拉格方程：

$$2d_{HKL} \sin \theta = \lambda$$

其中， (HKL) 是干涉指数，与晶面指数 (hkl) 的关系是： $H = nh$ ， $K = nk$ ， $L = nl$ ， n 为整数， d_{HKL} 是 (HKL) 干涉面间距； θ 是半衍射角，等于入射线和衍射线（反射线）之间的夹角的一半； λ 是入射线波长。 (HKL) 干涉面是 (hkl) 真实晶面的扩展， (HKL) 干涉面的一级衍射等同于 (hkl) 晶面的 n 级衍射。当半衍射角 θ 和干涉面间距 d_{HKL} 满足布拉格方程，相邻干涉面上的衍射线干涉加强；当半衍射角 θ 和干涉面间距 d_{HKL} 偏离布拉格方程，相邻干涉面上的衍射线干涉减弱。

3.1.2 倒易点阵和衍射矢量方程

倒易点阵是在晶体点阵基础上按照一定的数学转换公式建立起来的空间点

阵，假设倒易点阵的基矢为 \mathbf{a}^* 、 \mathbf{b}^* 、 \mathbf{c}^* ，两者数学关系如下：

$$\begin{aligned}\mathbf{a}^* &= \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} \\ \mathbf{b}^* &= \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} \\ \mathbf{c}^* &= \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})}\end{aligned}$$

相应地，倒易矢量 \mathbf{G} 可表示如下：

$$\mathbf{G} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$$

据此可推断出倒易矢量 \mathbf{G}_{hkl} 的两个基本性质，倒易矢量 \mathbf{G}_{hkl} 垂直于晶体点阵中的 (hkl) 晶面；倒易矢量 \mathbf{G}_{hkl} 长度等于 (hkl) 晶面间距的倒数：

$$|\mathbf{G}_{hkl}| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

若入射线单位矢量 \mathbf{S}_0 与衍射线单位矢量 \mathbf{S}_1 之间的几何关系表达为衍射矢量 $\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_0$ ，布拉格方程可表达为衍射矢量方程：

$$\frac{\mathbf{S}_1}{\lambda} - \frac{\mathbf{S}_0}{\lambda} = \mathbf{G}_{HKL}$$

更进一步，若入射线和衍射线表达为波矢量 \mathbf{K}_0 和 \mathbf{K}_1 ，衍射矢量方程成立的时候， $\mathbf{K} = \mathbf{K}_1 - \mathbf{K}_0$ 等同于倒易矢量 \mathbf{G}_{HKL} 。

假设 \mathbf{K}_0 的起端为 C，末端为倒易空间的坐标原点 O^* ，以 C 为球心在倒易空间内生成一半径为 $\frac{1}{\lambda}$ 的球面，基于衍射矢量方程可知，凡是与球面相交的倒易阵点均满足干涉加强条件；与球面不相交的倒易阵点均偏离干涉加强条件，此即厄瓦尔德图解。

3.2 X 射线和中子衍射

经分析，实验中 X 射线衍射强度与下述因子相关：

1) 偏振因子：量化一束非偏振 X 射线照射单一电子产生的相干散射中的

偏振化现象，随衍射角 2θ 变化；

- 2) 结构因子：一束 X 射线照射一晶胞，基于一系列假定可推导得到一个晶胞内所有原子散射的相干散射波振幅与一个电子散射的相干散射波振幅的比值，与原子种类、几何位置相关；
- 3) 洛伦兹因子：基于 X 射线衍射几何特征推导得到，随衍射角 2θ 变化；
- 4) 多重性因子：量化等价 \mathbf{K} 对同一衍射角 2θ 的衍射强度的贡献，即等价 \mathbf{K} 的数量；
- 5) 吸收因子：量化衍射强度由于样品对 X 射线的吸收发生的衰减现象，随衍射角 2θ 变化；
- 6) 温度因子：量化热振动原子偏离理想位置的程度，随温度变化。

因此，对于倒易点阵内的任一波矢量 \mathbf{K} ，模拟的 X 射线衍射强度 $I_x(\mathbf{K})$ 计算如下^[4]：

$$I_x(\mathbf{K}) = Lp(\theta) \cdot \frac{F(\mathbf{K}) \cdot F(\mathbf{K})^*}{N}$$
$$\frac{\sin \theta}{\lambda} = \frac{|\mathbf{K}|}{2}$$

其中， $Lp(\theta)$ 是洛伦兹-偏振因子， $F(\mathbf{K})$ 是结构因子， N 是总原子数， $F(\mathbf{K})$ 和 $Lp(\theta)$ 公式如下：

$$F(\mathbf{K}) = \sum_{j=1}^N f_j(\theta) \cdot \exp(2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_j)$$
$$Lp(\theta) = \frac{1 + \cos^2(2\theta)}{\cos(\theta) \sin^2(\theta)}$$

其中， $f_j(\theta)$ 是第 j 个原子的原子散射因子， θ 是半衍射角， \mathbf{R}_j 是第 j 个原子的空间几何位置。原子散射因子计算如下：

$$f_j(\theta) = e^{-M_j(\theta)} f_j^0(\theta)$$

$f_j^0(\theta)$ 为绝对零度时的原子散射因子，基于实验原子散射因子曲线拟合得到如下近似高斯公式^[5]：

$$f_j^0\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = \sum_i^4 a_i \exp\left(-b_i \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}\right) + c$$

其中，211 种原子和离子类型的 a_i 、 b_i （ $i = 1, 2, \dots, 5$ ）和 c 参照 [Atomic form factors \(tugraz.at\)](http://www.tugraz.at/factors)^[6]网站。 $e^{-M_j(\theta)}$ 为校正原子散射因子的温度因子：

$$M_j\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = dw_j \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}$$

其中， dw_j 为德拜-沃勒因子^[7]。X 射线衍射的波长范围在100~0.1Å，一般采用 $\lambda_x = 1.54180\text{Å}$ （Cu 靶的 K_α 射线）。

中子衍射强度 $I_n(\mathbf{K})$ 相比 $I_x(\mathbf{K})$ 的不同有^[8]：一是仅需考虑衡量衍射几何特征的洛伦兹因子 $\frac{1}{\cos(\theta)\sin^2(\theta)}$ ，无需考虑偏振因子 $\frac{1+\cos^2(2\theta)}{2}$ ；二是 $f_j^0(\theta)$ 恒定为相干散射长度 b_j^c ，具体可参照 [Neutron scattering lengths and cross sections \(nist.gov\)](http://www.nist.gov/scattering_lengths)^[9]网站， b_j^c 对元素或者同位素的敏感性很高，因此，中子衍射更适用于过渡金属或合金的化学有序研究。

以衍射角 2θ 为自变量时，根据上述公式可生成 $I - 2\theta$ 曲线， I 一般以相对值量化，单位是 a.u. (Arbitrary Units)。模拟的 $I - 2\theta$ 曲线除了上述因子，还将多重性因子纳入考量，即等价 \mathbf{K} 的数量 M ，等价 \mathbf{K} 对同一衍射角 2θ 的衍射强度有贡献。

3.3 电子衍射

3.3.1 衍射强度

电子衍射强度 $I_e(\mathbf{K})$ 相比 $I_x(\mathbf{K})$ 的不同有：一是不考虑洛伦兹-偏振因子和温

度因子；二是原子散射因子 $f_j(\theta)$ 采用如下高斯公式^[10]：

$$f_j\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = \sum_i^5 a_i \exp\left(-b_i \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}\right)$$

其中，电子衍射下 98 种原子类型的 a_i 和 b_i （ $i = 1, 2, \dots, 5$ ）由 Peng 等人^[11]提供。

入射电子束的波长大约在 10^{-2}\AA 量级，一般采用 $\lambda_e = 0.0251\text{\AA}$ （等同于加速电压 200kV）。

更复杂的衍射强度计算涉及到薛定谔方程：加速电压为 E 的高能电子束散射可由经相对论改正的定态薛定谔方程描述，公式如下：

$$\Delta\Psi + 4\pi^2 K_0^2 \Psi = -4\pi^2 U(\mathbf{r})\Psi$$

$$U(\mathbf{r}) \equiv \frac{2me}{h^2} V(\mathbf{r}) = \frac{\sigma}{\pi\lambda} V(\mathbf{r})$$

其中， K_0 是相对论波数，基于德布罗意方程可推出 K_0 与加速电压 E 相关； $m = m_0\gamma$ ， m 是相对论电子质量， $\gamma = 1 + \frac{eE}{m_0 c^2}$ ， m_0 是电子的静止质量， $m_0 = 9.109389 \times 10^{-31}\text{kg}$ ， e 是电子电荷， $e = 1.602177 \times 10^{-19}\text{C}$ ， h 是普朗克常量， $h = 6.626075 \times 10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}$ ， c 是光速， $c = 2.99792458 \times 10^8\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ； σ 是相互作用常数， $\sigma \equiv \frac{2\pi me\lambda}{h^2}$ ， $V(\mathbf{r})$ 是静电晶格势。该方程准确描述了高能电子束散射相关的所有相对论效应，即相对论波数和相对论电子质量。 $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + iW(\mathbf{r})$ 可经傅里叶转换 $f(\mathbf{r}) = \mathcal{F}^{-1}[f(\mathbf{g})] \equiv \iiint f(\mathbf{g})e^{2\pi i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{g}$ 将实空间转换为倒空间，结果如下：

$$V(\mathbf{r}) = V_0 + V'(\mathbf{r}) + iW(\mathbf{r}) = V_0 + \sum_{\mathbf{g} \neq 0} V_{\mathbf{g}} e^{2\pi i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{g}} W_{\mathbf{g}} e^{2\pi i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}}$$

其中， V_0 是正内电位， $V_{\mathbf{g}}$ 和 $W_{\mathbf{g}}$ 是傅里叶系数，分别描述电子弹性散射和非弹性散射效应，可基于 Weickenmeier-Kohl 方法^[12]计算。由此可得到经相对论改正和傅里叶变换的描述高能电子动力学散射的薛定谔方程，公式如下：

$$\Delta\Psi + 4\pi^2 k_0^2 \Psi = -4\pi^2 [U + iU']\Psi$$

$$U(\mathbf{r}) = \frac{2me}{h^2} \sum_{\mathbf{g} \neq 0} V_{\mathbf{g}} e^{2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}}$$

$$U'(\mathbf{r}) = \frac{2me}{h^2} \sum_{\mathbf{g}} W_{\mathbf{g}} e^{2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}}$$

其中, $k_0 \equiv \frac{\sqrt{2me\hat{\Phi}_c}}{h}$, $\hat{\Phi}_c = \hat{\Phi} + \gamma V_0$, $\hat{\Phi}$ 为相对论改正后的加速电位, 与加速电压 E 相关; $U + iU'$ 是复晶格势, 假设 \mathbf{q} 为任意倒易阵点, $U + iU'$ 可傅里叶展开为如下公式:

$$U + iU' = \sum_{\mathbf{q}} (U_{\mathbf{q}} + iU'_{\mathbf{q}}) e^{2\pi i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

运动学理论认为入射波和衍射波之间无相互作用, 且样品对入射波仅散射一次、无吸收效应, 因此, 衍射强度与 $|V_{\mathbf{g}}|^2$ 成正比; 动力学理论需要考虑入射波和衍射波之间的相互作用以及入射波通过样品时所产生的多次散射和吸收效应, 需要求解傅里叶转换的薛定谔方程: 假设高能电子束沿 \mathbf{e}_z 方向垂直照射厚度为 z_0 的样品带的条件下, 波函数 $\Psi(\mathbf{r})$ 可展开为如下两种形式:

一是布拉格条件限制情况下, 电子仅沿入射波 \mathbf{k}_0 和衍射波 $\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}$ 运动, 波函数 $\Psi(\mathbf{r})$ 平面波展开如下:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \psi_{\mathbf{g}} e^{2\pi i (\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}}$$

其中, \mathbf{g} 为厄瓦尔德球面上的所有倒易阵点。假设 \mathbf{g}' 为不在厄瓦尔德球面上的所有倒易阵点, $\mathbf{g}' - \mathbf{g}$ 可替换 \mathbf{q} 。再经高能近似和完美晶体假设, 薛定谔方程可转换为如下描述任意衍射束振幅随样品深度的变化的方程:

$$\frac{d\psi_{\mathbf{g}}}{dz} - 2\pi i s_{\mathbf{g}} \psi_{\mathbf{g}} = i\pi \sum_{\mathbf{g}'} \frac{e^{i\theta_{\mathbf{g}-\mathbf{g}'}}}{q_{\mathbf{g}-\mathbf{g}'}} \psi_{\mathbf{g}'}$$

$$s_g \equiv \frac{k_0^2 - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{g})^2}{2|\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}| \cos \alpha}$$

$$\frac{1}{q_g} \equiv \frac{1}{\xi_g} + i \frac{e^{i\beta_g}}{\xi'_g}$$

其中， s_g 是沿样品法线方向 \mathbf{e}_z 评估倒易阵点和厄瓦尔德球面的偏差参数，用于分辨 \mathbf{g} 和 \mathbf{g}' ； α 是 \mathbf{e}_z 和 $\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}$ 的夹角； $\beta_g = \theta'_g - \theta_g$ ， θ_g 和 θ'_g 分别是 U_g 和 U'_g 的相位； ξ_g 是消光距离， ξ'_g 是吸收长度：

$$\frac{1}{\xi_g} \equiv \frac{|U_g|}{|\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}| \cos \alpha}$$

$$\frac{1}{\xi'_g} \equiv \frac{|U'_g|}{|\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}| \cos \alpha}$$

二是不做布拉格条件限制情况下， $\Psi(\mathbf{r})$ 可转换成如下布洛赫波：

$$\Psi(\mathbf{r}) = C(\mathbf{r})e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{g}} e^{2\pi i (\mathbf{k} + \mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}}$$

其中， \mathbf{k} 为布洛赫波矢量， $C_{\mathbf{g}}$ 是布洛赫波系数。与 $\psi_{\mathbf{g}}$ 不同， $C_{\mathbf{g}}$ 不依赖原子位置。将布洛赫波代入薛定谔方程可构建布洛赫波矢量 \mathbf{k} 和入射电子能量（与 k_0 相关）的色散关系：

$$[k_0^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{g})^2]C_{\mathbf{g}} + \sum_{\mathbf{h} \neq \mathbf{g}} U_{\mathbf{g}-\mathbf{h}}C_{\mathbf{h}} = 0$$

N 波束且考虑吸收效应的条件下，有 $2N$ 个布洛赫波矢量 $\mathbf{k}^{(j)} = \mathbf{k}_0 + \Gamma^{(j)}\mathbf{n}$ ，

$\Gamma^{(j)} = \gamma^{(j)} + iq^{(j)}$ ， $\mathbf{n} = -\mathbf{e}_z$ ， $\Psi(\mathbf{r})$ 可转换成如下布洛赫波：

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_j \alpha^{(j)} \sum_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{g}}^{(j)} e^{2\pi i (\mathbf{k}^{(j)} + \mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}}$$

其中， $\alpha^{(j)}$ 是第 j 个布洛赫波的激活振幅，结合布拉格条件下 $\Psi(\mathbf{r})$ 的平面波展开，可推出 $\alpha^{(j)}$ 是 $C^{(j)}$ 的逆。高能近似条件下，仅考虑正向散射，有 N 个布洛赫波矢量，上述色散关系可转变如下：

$$2k_0 s_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{g}}^{(j)} + \sum_{\mathbf{h} \neq \mathbf{g}} U_{\mathbf{g}-\mathbf{h}} C_{\mathbf{h}}^{(j)} = 2k_n \Gamma^{(j)} C_{\mathbf{g}}^{(j)}$$

等同于如下本征值方程：

$$\begin{pmatrix} iU'_0 & U_{-\mathbf{g}} + iU'_{-\mathbf{g}} & \dots & U_{-\mathbf{h}} + iU'_{-\mathbf{h}} \\ U_{\mathbf{g}} + iU'_{\mathbf{g}} & 2k_0 s_{\mathbf{g}} + iU'_0 & \dots & U_{\mathbf{g}-\mathbf{h}} + iU'_{\mathbf{g}-\mathbf{h}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ U_{\mathbf{h}} + iU'_{\mathbf{h}} & U_{\mathbf{h}-\mathbf{g}} + iU'_{\mathbf{h}-\mathbf{g}} & \dots & 2k_0 s_{\mathbf{h}} + iU'_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0^{(j)} \\ C_{\mathbf{g}}^{(j)} \\ \vdots \\ C_{\mathbf{h}}^{(j)} \end{pmatrix} = 2k_n \Gamma^{(j)} \begin{pmatrix} C_0^{(j)} \\ C_{\mathbf{g}}^{(j)} \\ \vdots \\ C_{\mathbf{h}}^{(j)} \end{pmatrix}$$

其中， $k_n = \mathbf{n} \cdot \mathbf{k}_0$ ，该方程定义了强衍射波 \mathbf{g} 之间的相互作用。若将偏离布拉格条件的弱衍射波 \mathbf{g}' ($|s_{\mathbf{g}}| \gg \lambda |U_{\mathbf{g}}|$) 与强衍射波 \mathbf{g} 之间的相互作用纳入考量，可得到如下方程：

$$\begin{pmatrix} \bar{\eta}_0^{(j)} + i\bar{U}'_0 & \bar{U}_{-\mathbf{g}} + i\bar{U}'_{-\mathbf{g}} & \dots & \bar{U}_{-\mathbf{h}} + i\bar{U}'_{-\mathbf{h}} \\ \bar{U}_{\mathbf{g}} + i\bar{U}'_{\mathbf{g}} & \bar{\eta}_{\mathbf{g}}^{(j)} + i\bar{U}'_0 & \dots & \bar{U}_{\mathbf{g}-\mathbf{h}} + i\bar{U}'_{\mathbf{g}-\mathbf{h}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{U}_{\mathbf{h}} + i\bar{U}'_{\mathbf{h}} & \bar{U}_{\mathbf{h}-\mathbf{g}} + i\bar{U}'_{\mathbf{h}-\mathbf{g}} & \dots & \bar{\eta}_{\mathbf{h}}^{(j)} + i\bar{U}'_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0^{(j)} \\ C_{\mathbf{g}}^{(j)} \\ \vdots \\ C_{\mathbf{h}}^{(j)} \end{pmatrix} = 0$$

$$\bar{U}_{\mathbf{g}-\mathbf{h}} \equiv U_{\mathbf{g}-\mathbf{h}} - \sum_{\mathbf{h}'} \frac{U_{\mathbf{g}-\mathbf{h}'} U_{\mathbf{h}'-\mathbf{h}}}{\eta_{\mathbf{h}'}^{(j)}}$$

$$\bar{\eta}_{\mathbf{g}}^{(j)} \equiv \eta_{\mathbf{g}}^{(j)} - \sum_{\mathbf{h}'} \frac{|U_{\mathbf{g}-\mathbf{h}'}|^2}{\eta_{\mathbf{h}'}^{(j)}}$$

其中， $\eta_{\mathbf{g}}^{(j)} \equiv 2[k_0 s_{\mathbf{g}} - k_n \Gamma^{(j)}]$ ，基于该方程可求解布洛赫波激活振幅 $\alpha^{(j)}$ 和布洛赫波系数 $C_{\mathbf{g}}^{(j)}$ 。基于布洛赫波的概率解释，可得到如下经样品内 N 个等价原子群 S 散射的厚度平均强度（概率）：

$$I(E, z_0) = \sum_n \sum_{i \in S_n} \left[\frac{1}{z_0} \int_0^{z_0} \Psi^*(\mathbf{r}_i) \Psi(\mathbf{r}_i) dz \right] = \sum_{\mathbf{g}} \sum_{\mathbf{h}} S_{\mathbf{gh}} L_{\mathbf{gh}}$$

其中， $S_{\mathbf{gh}}$ 是描述入射波和衍射波之间的相互作用的因子：

$$S_{\mathbf{gh}} \equiv \sum_n \sum_{i \in S_n} Z_n^2 e^{-M_{\mathbf{h}-\mathbf{g}}^{(n)}} e^{2\pi i (\mathbf{h}-\mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}_i}$$

其中， Z_n 是等价原子群 S_n 的原子序数， $e^{-M_{\mathbf{h}-\mathbf{g}}^{(n)}}$ 是温度因子， $M_{\mathbf{h}-\mathbf{g}}^{(n)} = dw_n \left(\frac{\mathbf{h}-\mathbf{g}}{2}\right)^2$ ，与前式等同。 $L_{\mathbf{gh}}$ 是描述入射波通过样品时所产生的多次散射和吸收效应的因子：

$$L_{gh} \equiv \sum_j \sum_k C_g^{(j)*} \alpha^{(j)*} \mathcal{M}_{jk} \alpha^{(k)} C_h^{(k)}$$

其中， $\mathcal{M}_{jk}(E)$ 公式如下：

$$\mathcal{M}_{jk}(E) \equiv \frac{1}{z(E)} \int_0^{z(E)} \lambda(E, z) e^{-2\pi(\alpha_{jk} + i\beta_{jk})z} dz$$

$$\alpha_{jk} = q^{(j)} + q^{(k)}$$

$$\beta_{jk} = \gamma^{(j)} - \gamma^{(k)}$$

其中， $z(E)$ 和 $\lambda(E, z)$ 是电子的积分深度和散射概率，由蒙特卡罗模拟获取，如图 1 所示：每一入射电子进入样品后不断重复随机移动和随机散射两个过程，电子能量遵循 CSDA 近似（Continuous Slowing Down Approximation，电子能量 E_i 仅与 $|\mathbf{s}_i|$ 相关），直到电子损失能量超出预设值，或者电子离开样品。

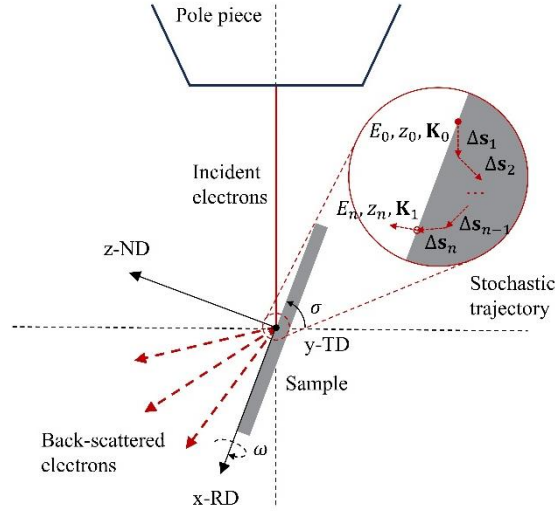


图 1 蒙特卡罗模拟入射电子束照射样品产生背散射电子的过程

3.3.2 衍射花样

以波矢量 \mathbf{K} 为空间坐标时，可生成二维或三维衍射花样。波矢量 \mathbf{K} 的取样有以下两种形式：

一是直接自定义倒易网格，如图 2。更进一步，以波矢量 \mathbf{K} 为中心轴生成

Kossel 锥与投影屏幕相交生成菊池线，如图 3 所示，菊池球面上的 \mathbf{K} 菊池线成对出现，菊池线强度由评估面内的倒易阵点的电子衍射强度贡献。为避免邻近平行菊池线重叠，假设菊池线间距为 δ ， δ 需满足如下公式：

$$\frac{|\mathbf{K}|}{2} - \frac{\delta}{2} < \frac{\mathbf{K} \cdot \mathbf{P}}{|\mathbf{K}| \lambda |\mathbf{P}|} < \frac{|\mathbf{K}|}{2} + \frac{\delta}{2}$$

为保证投影屏幕上的菊池线至少有两个像素点的宽度（避免信号丢失），这要求其分辨率（每英寸像素点个数）足够大：

$$Resolution \geq \frac{4}{D \delta \lambda}$$

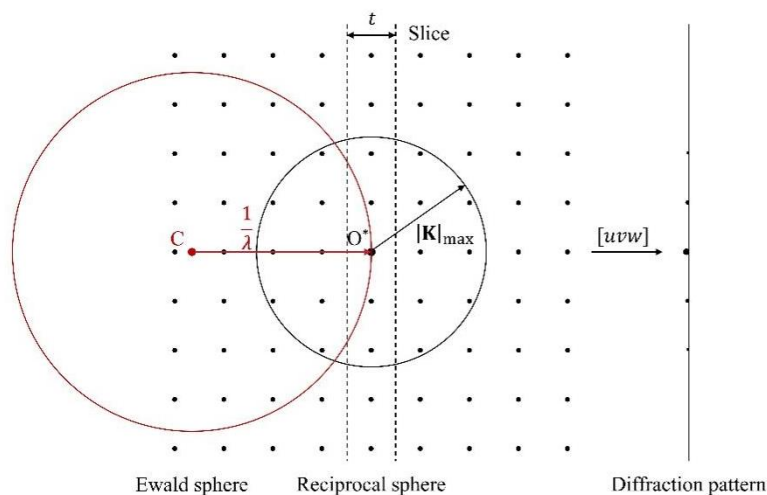


图 2 模拟二维衍射花样为与晶带轴 $[uvw]$ 垂直的倒易球截面上的衍射强度分布。

模拟三维衍射花样为整个倒易球内的衍射强度分布。要求 $\frac{1}{\lambda} \gg |\mathbf{K}|_{\max}$ ，此时倒易球截面内的厄瓦尔德球面近似为平面

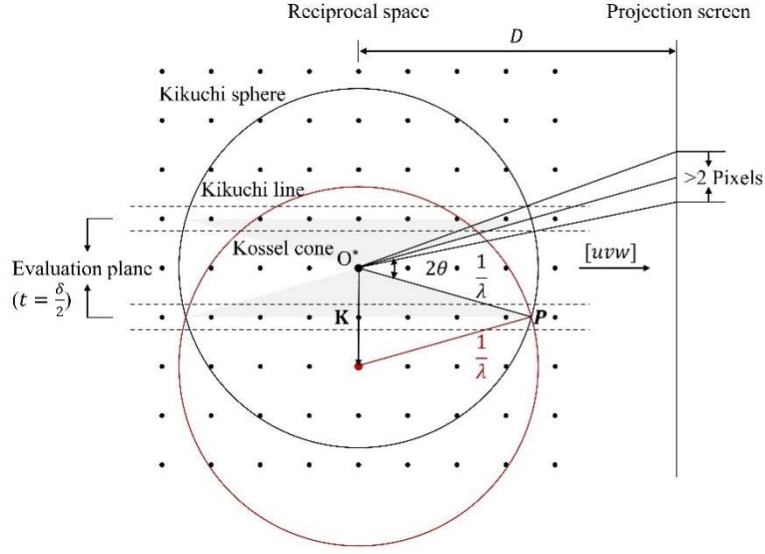


图 3 模拟二维和三维菊池花样为菊池球面上的菊池线强度经球面投影得到的菊池线强度分布

二是基于晶胞点群构建取样方案，再将选取的波矢量 \mathbf{K} 映射到整个倒易球面上。修正的 Lambert 映射构建二维正方形或六边形网格和三维球面等面积网格之间的双向映射，假设一半边长为 $L = \sqrt{\pi/2}$ 的 $(2N + 1) \times (2N + 1)$ 正方形网格上一网格点 (a, b) 与北半球面上一网格点 (x, y, z) 对应（ $(0, 0)$ 与 $(0, 0, 1)$ 对应），两者转换关系如下：

$$(x, y, z) = \begin{cases} \left(\frac{2a}{\pi} \sqrt{\pi - a^2} \cos \frac{b\pi}{4a}, \frac{2a}{\pi} \sqrt{\pi - a^2} \sin \frac{b\pi}{4a}, 1 - \frac{2a^2}{\pi} \right) & 0 < |b| \leq |a| \leq L \\ \left(\frac{2b}{\pi} \sqrt{\pi - b^2} \sin \frac{a\pi}{4b}, \frac{2b}{\pi} \sqrt{\pi - b^2} \cos \frac{a\pi}{4b}, 1 - \frac{2b^2}{\pi} \right) & 0 < |a| \leq |b| \leq L \end{cases}$$

$$(a, b) = \begin{cases} \text{sign}(x) \sqrt{2(1-z)} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2}, \frac{2}{\sqrt{\pi}} \tan^{-1} \frac{y}{x} \right) & 0 \leq |y| \leq |x| \\ \text{sign}(y) \sqrt{2(1-z)} \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \tan^{-1} \frac{x}{y}, \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) & 0 < |x| \leq |y| \end{cases}$$

假设一边长为 $L = 2\sqrt{\pi}3^{-3/4}$ 的六边形网格上网格点 (a, b) 根据如下规则可划分为六个区域：

$$I_0 = \left\{ (a, b) \in \mathbb{R}^2, 0 \leq a, -\frac{a}{\sqrt{3}} \leq b \leq \frac{a}{\sqrt{3}} \right\}$$

$$\begin{aligned}
I_1 &= \left\{ (a, b) \in \mathbb{R}^2, 0 \leq a, \frac{a}{\sqrt{3}} \leq b \right\} \\
I_2 &= \left\{ (a, b) \in \mathbb{R}^2, a \leq 0, -\frac{a}{\sqrt{3}} \leq b \right\} \\
I_3 &= \left\{ (a, b) \in \mathbb{R}^2, a \leq 0, \frac{a}{\sqrt{3}} \leq b \leq -\frac{a}{\sqrt{3}} \right\} \\
I_4 &= \left\{ (a, b) \in \mathbb{R}^2, a \leq 0, b \leq \frac{a}{\sqrt{3}} \right\} \\
I_5 &= \left\{ (a, b) \in \mathbb{R}^2, 0 \leq a, b \leq -\frac{a}{\sqrt{3}} \right\}
\end{aligned}$$

并且可映射到圆形网格点 (\tilde{a}, \tilde{b}) (半径 $R = \sqrt{2}$), 两者转换关系如下:

$(a, b) \in I_0 \cup I_3$:

$$(\tilde{a}, \tilde{b}) = 3^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2}{\pi}} a \left(\cos \frac{b\pi}{2\sqrt{3}a}, \sin \frac{b\pi}{2\sqrt{3}a} \right)$$

$(a, b) \in I_1 \cup I_4$:

$$(\tilde{a}, \tilde{b}) = \frac{3^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\pi}} (a + \sqrt{3}b) \left(\sin \frac{2\pi a}{3(a + \sqrt{3}b)}, \cos \frac{2\pi a}{3(a + \sqrt{3}b)} \right)$$

$(a, b) \in I_2 \cup I_5$:

$$(\tilde{a}, \tilde{b}) = \frac{3^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\pi}} (a - \sqrt{3}b) \left(\sin \frac{2\pi a}{3(a - \sqrt{3}b)}, -\cos \frac{2\pi a}{3(a - \sqrt{3}b)} \right)$$

$(\tilde{a}, \tilde{b}) \in I_0 \cup I_3$:

$$(a, b) = 3^{-\frac{1}{4}} \sqrt{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2} \text{sign}(\tilde{a}) \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}}, \sqrt{\frac{6}{\pi}} \tan^{-1} \frac{\tilde{b}}{\tilde{a}} \right)$$

$(\tilde{a}, \tilde{b}) \in I_1 \cup I_4$:

$$(a, b) = \frac{3^{\frac{1}{4}} \sqrt{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2}}{\sqrt{2\pi}} \text{sign}(\tilde{a}) \left(\sqrt{3} \left(\frac{\pi}{6} - \tan^{-1} \frac{\tilde{b} - \sqrt{3}\tilde{a}}{\tilde{a} + \sqrt{3}\tilde{b}} \right), \frac{\pi}{2} + \tan^{-1} \frac{\tilde{b} - \sqrt{3}\tilde{a}}{\tilde{a} + \sqrt{3}\tilde{b}} \right)$$

$(\tilde{a}, \tilde{b}) \in I_2 \cup I_5$:

$$(a, b) = \frac{3^{\frac{1}{4}} \sqrt{\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2}}{\sqrt{2\pi}} \text{sign}(\tilde{a}) \left(\sqrt{3} \left(\frac{\pi}{6} + \tan^{-1} \frac{\tilde{b} + \sqrt{3}\tilde{a}}{\tilde{a} - \sqrt{3}\tilde{b}} \right), -\frac{\pi}{2} + \tan^{-1} \frac{\tilde{b} + \sqrt{3}\tilde{a}}{\tilde{a} - \sqrt{3}\tilde{b}} \right)$$

网格点 (\tilde{a}, \tilde{b}) 与北半球面上一网格点 (x, y, z) 对应 ((0,0)与(0,0,1)对应), 两者

转换关系如下：

$$(x, y, z) = \left(\frac{a}{2} \sqrt{4 - (\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2)}, \frac{b}{2} \sqrt{4 - (\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2)}, 1 - \frac{1}{2}(\tilde{a}^2 + \tilde{b}^2) \right)$$

$$(\tilde{a}, \tilde{b}) = \sqrt{\frac{2}{1+z}}(x, y)$$

3.4 结构有序分析

描述结构有序程度的常用分析技术有径向分布函数和静态结构因子。径向分布函数 $g_{ij}(r)$ 描述的是在距离 i 原子 r 、厚度 Δr 的球壳内发现 j 原子的概率，与 j 原子在整个模拟体系中均匀分布的概率之比，公式如下：

$$g_{ij}(r) = \frac{1}{\rho_j} \frac{\sum_i^{N_i} n_{ij}(r)}{N_i V(r)}$$

$$V(r) = \frac{4}{3}\pi \left(r + \frac{1}{2}\Delta r \right)^3 - \frac{4}{3}\pi \left(r - \frac{1}{2}\Delta r \right)^3$$

其中， ρ_j 为单位体积的 j 原子数， $n_{ij}(r)$ 为距离 i 原子 $r - \frac{1}{2}\Delta r$ 到 $r + \frac{1}{2}\Delta r$ 的球壳内的 j 原子数， $V(r)$ 为相应的球壳体积。明显地， $g_{ij}(r)$ 是无量纲的。基于 $g_{ij}(r)$ 曲线分析可得到一系列重要参数：最近邻原子平均距离，即第一峰值；最近邻配位数，即第一半峰面积的两倍；等等^[13]。

静态结构因子 $S_{ij}(\mathbf{q})$ 一般公式^[14]如下：

$$S_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^{N_i} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \sum_{j=1}^{N_j} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} \right\rangle$$

其中，波矢 \mathbf{q} 的增量为 $\Delta \mathbf{q} = (2\pi/L_x, 2\pi/L_y, 2\pi/L_z)$ ， L_x 、 L_y 、 L_z 为受周期性边界条件限制的模拟体系的尺寸，任何小于 $\Delta \mathbf{q}$ 的波矢是不具有实际物理意义的。

可将 $S_{ij}(\mathbf{q})$ 重新表示为 $S_{ij}(q)$ （ q 为 \mathbf{q} 的模），通过对相同 q 的 $S_{ij}(\mathbf{q})$ 求平均，可得到 $S_{ij}(q)$ 。 $S_{ij}(q) - 1$ 与径向分布函数 $g_{ij}(r) - 1$ 互为傅里叶转换，公式如下：

$$S_{ij}(q) - 1 = 4\pi \int_0^{\infty} \frac{\sin(qr)}{qr} [g_{ij}(r) - 1] r^2 dr$$

同样地，基于 $S_{ij}(q)$ 曲线分析可得到一系列重要信息：液态金属分类，根据第二峰位和第一峰位比值，可将液态金属分为 3 种类型，大部分的液态金属比值为 1.86，Ga、Sn、Bi 等比值为 1.96，In、Tl 比值为 1.88；Hansen-Verlet 凝固判据，统计发现，液态结构因子在熔点附近时，第一峰值均达到相同高度（大约 2.8）；等等^[13]。

4 AAVDP 功能介绍

本手册将介绍 AAVDP 基本命令行使用方法，包括对衍射模拟、结构分析等。AAVDP 通用语法格式和规则如下：

General Syntax:

AAVDP <--mode> (inputfile) <-parameter> [value]

Description:

在该命令行格式中，--mode 代表运行模式标签，采用“--”作为前缀，比如--xrd、--sed、--kkd、--dkd、--rdf、--ssf 等。-parameter 代表对应运行模式需要的参量标签，其格式采用“-”作为前缀，value 代表具体的参数值。

4.1 X 射线衍射（X-ray Diffraction）

Mode: xrd

Syntax:

AAVDP --xrd [inputfile] -e [type1] [type2] ... [typeN] -dw [DW1] [DW2] ... [DWN]

-l [lambda] -2t [min2Theta] [max2Theta] -n [nbin] -c [c1] [c2] [c3] -auto/manu -
without_lorentz_factor

Description:

该模式用于模拟入射 X 射线与晶体样品相互作用产生的衍射现象，要求输入晶体模型文件路径 `inputfile`（LAMMPS Data 格式），默认输出晶体模型文件目录下的`[inputfile_name].xrd`，具体包含衍射角、衍射强度、归一化衍射强度信息。参量标签`-e`和`-dw`分别指定晶体模型文件里的 N 个晶体原子类型（211 种，包含 H-Cf 多种元素和离子，具体参见 [Atomic form factors \(tugraz.at\)](http://tugraz.at)网站）和对应的德拜-沃勒因子^[7]，前者无默认值，后者默认为 0.0\AA^2 ；`-l` 指定入射波波长 λ ，默认为 1.54180\AA ；`-2t` 指定衍射角 2θ 最小值和最大值，用于限制倒易球半径范围，默认为 0° 和 180° ；`-n` 指定衍射角 2θ 分区数，默认为 0，表示不对衍射角 2θ 分区输出；`-c` 用于指定倒易空间内三轴方向上的倒易阵点间距，显示`-auto`表示基于晶体模型三轴尺寸自动计算倒易阵点间距， c_1 、 c_2 、 c_3 是缩放因子，默认为 1.0，显示`-manu`表示手动设置倒易阵点间距， c_1 、 c_2 、 c_3 是倒易阵点间距，默认为 0.1\AA^{-1} ；`-without_lorentz_factor` 指定输出衍射强度不包含洛伦兹因子。

4.2 选区中子衍射（Selected-area Neutron Diffraction）

Mode: snd

Syntax:

AAVDP --snd [inputfile] -e [type1] [type2] ... [typeN] -dw [DW1] [DW2] ... [DWN]
-l [lambda] -2t [min2Theta] [max2Theta] -n [nbin] -c [c1] [c2] [c3] -auto/manu -
without_lorentz_factor

Description:

该模式用于模拟入射中子波与晶体样品相互作用产生的衍射现象，要求输入晶体模型文件路径 `inputfile`（LAMMPS Data 格式），默认输出晶体模型文件目录下的`[inputfile_name].xrd`，具体包含衍射角、衍射强度、归一化衍射强度信息。参量标签`-e`和`-dw`分别指定晶体模型文件里的 N 个晶体原子类型（336 种，包含 H-Cm 多种元素和同位素，具体可参照 [Neutron scattering lengths and cross sections \(nist.gov\)](https://www.nist.gov/pml/scattering/neutron-scattering-lengths-and-cross-sections)网站）和对应的德拜-沃勒因子^[7]，前者无默认值，后者默认为 0.0\AA^2 ；`-l` 指定入射波波长 λ ，默认为 1.54180\AA ；`-2t` 指定衍射角 2θ 最小值和最大值，用于限制倒易球半径范围，默认为 0° 和 180° ；`-n` 指定衍射角 2θ 分区数，默认为 0，表示不对衍射角 2θ 分区输出；`-c` 用于指定倒易空间内三轴方向上的倒易阵点间距，显示`-auto`表示基于晶体模型三轴尺寸自动计算倒易阵点间距，`c1`、`c2`、`c3`是缩放因子，默认为 1.0，显示`-manu`表示手动设置倒易阵点间距，`c1`、`c2`、`c3`是倒易阵点间距，默认为 0.1\AA^{-1} ；`-without_lorentz_factor` 指定输出衍射强度不包含洛伦兹因子。

4.3 选区电子衍射（Selected-area Electron Diffraction）

Mode: sed

Syntax:

```
AAVDP --sed [inputfile] -e [type1] [type2] ... [typeN] -l [lambda] -q [Kmax] -z [u] [v]
[w] -t [thickness] -c [c1] [c2] [c3] -auto/manu -vtk

AAVDP --sed [hdf5file] -z [z1] [z2] [z3] -x [x1] [x2] [x3] -t [thickness] -thr
[intensity_threshold]
```

Description:

该模式用于模拟入射电子波与晶体样品相互作用产生的衍射现象。要求输入晶体模型文件路径 `inputfile` (LAMMPS Data 格式), 默认输出晶体模型文件目录下的`[inputfile_name].uvw.h5`, 具体包含衍射矢量、衍射强度、归一化衍射强度等信息。参量标签`-e` 指定晶体模型文件里的 N 个晶体原子类型 (98 种, 包含 H-Cf 多种元素), 无默认值; `-l` 指定入射波波长 λ , 默认为 0.0251\AA (等同于加速电压 200kV); `-q` 指定倒易矢量 \mathbf{K} 最大长度 $|\mathbf{K}|_{max}$, 默认为 1.70\AA^{-1} ($H^2 + K^2 + L^2 < 20$), 该参数用于限制倒易球半径; `-z` 指定晶带轴 $[uvw]$, 也是入射波方向, 默认为 $[000]$, 表示不预设晶带轴; `-t` 指定与预设晶带轴 $[uvw]$ 垂直的厄瓦尔德球截面厚度 t , 默认为 0.1\AA^{-1} ; `-c` 用于指定倒易空间内三轴方向上的倒易阵点间距 (正交), 显示`-auto` 表示基于晶体模型三轴尺寸自动计算倒易阵点间距, c_1 、 c_2 、 c_3 是缩放因子, 默认为 1.0, 显示`-manu` 表示手动设置倒易阵点间距, c_1 、 c_2 、 c_3 是倒易阵点间距, 默认为 0.1\AA^{-1} ; `-vtk` 指定是否输出三维可视化数据文件 (要求晶体模型盒子为正交体系), 即晶体模型文件目录下的`[inputfile_name].uvw.vtk`, 可用 paraview 软件可视化和后处理。

若需要输出二维可视化数据文件, 要求输入包含衍射矢量、衍射强度、归一化衍射强度等信息的 `hdf5` 文件, 默认输出 `hdf5` 文件目录下的`[hdf5file_name].uvw.sed`。参量标签`-z` 指定晶带轴 $[uvw]$, 也是入射波方向, 默认为 $[001]$; `-t` 指定与预设晶带轴 $[uvw]$ 垂直的厄瓦尔德球截面厚度 t , 默认为 0.1\AA^{-1} ; `-x` 指定二维平面上的 x 轴, 默认为 $[000]$, 表示指定截面内衍射长度最短的衍射矢量为 x 轴; `-thr` 指定衍射强度阈值, 默认为 0.001, 仅输出大于 0.001 的衍射强度。

.vtk 文件格式如下：

```
# vtk DataFile Version 3.0 [1]文件头
ELECTRON DIFFRACTION INTENSITY DISTRUBUTION [2]标题
ASCII [3]数据类型，ASCII
DATASET STRUCTURED_POINTS [4]数据集类型，结构化点
DIMENSIONS 51 51 51 [5]数据空间尺寸，必须大于 1
ASPECT_RATIO 0.070045 0.070045 0.070045 [6]数据点间距，必须大于 0.0
ORIGIN -1.75112 -1.75112 -1.75112 [7]数据空间原点
POINT_DATA 132651 [8]数据点数目
SCALARS intensity float [9]标量，数据点属性名为 intensity，属性类型为 float
LOOKUP_TABLE default [10]查找表，用于查找数据点的标量属性，数据点无属性默认为-1
-1
...
```

4.4 运动学菊池衍射（Kinematic Kikuchi Diffraction）

Mode: kkd

Syntax:

AAVDP --kkd [hdf5file] -z [u] [v] [w] -thr [threshold] -d [distance] -dpi [resolution] -
w [width] -h [height]

Description:

该模式用于模拟入射电子波与晶体样品相互作用产生的菊池衍射现象，分为两步：第一步模拟选区电子衍射，生成三维电子衍射信息，包含入射波波长、倒易矢量和相应的电子衍射强度，具体参数参见 4.3；第二步构建菊池球面，并

执行三维-二维映射，要求输入第一步生成的[inputfile_name].000.h5，默认输出菊池花样图片文件，文件路径默认为 hdf5 文件目录下的 [hdf5file_name].uvw.png。参量标签-z 指定晶带轴[uvw]，也是入射波方向，默认为[000]，表示三维坐标囊括整个菊池球；-thr 指定衍射强度阈值，默认为 0.001，仅大于 0.001 的衍射强度对菊池线强度有贡献；-d 指定投影屏幕距离，默认为 3.0 英寸；-dpi 指定投影屏幕分辨率，默认为 512；-w 和-h 投影屏幕宽度和高度，默认为 6.0 英寸和 4.0 英寸。

4.4 动力学菊池衍射（Dynamic Kikuchi Diffraction）

Mode: dkd

Syntax:

AAVDP --dkd [inputfile] -e [type1] [type2] ... [typeN] -dw [DW1] [DW2] ... [DWN]

AAVDP --dkd [hdf5file] -m -t [omega] [sigma] -E [Emax] [Emin] [Ebin] -z [zmax]

[zstep] -ne [nume] -np [nump] -L [length] -dpi [resolution]

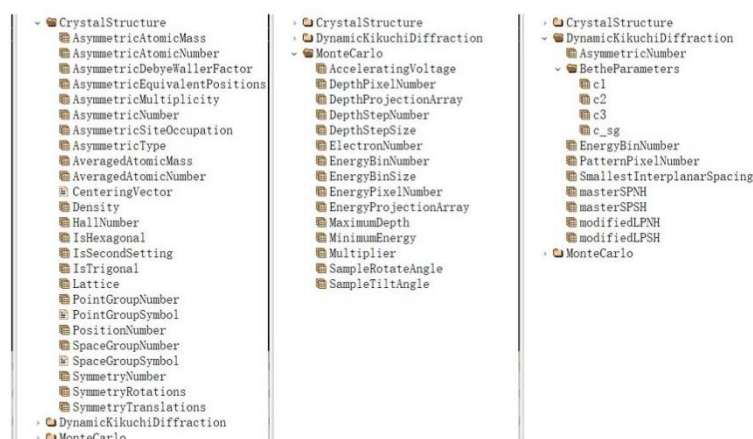
AAVDP --dkd [hdf5file] -k -d [dmin] -b [c1] [c2] [c3] [c_sg] -L [length] -dpi [resolution]

AAVDP --dkd [hdf5file] -g -L [length] -dpi [resolution]

Description:

该模式用于模拟入射电子波与晶体样品相互作用产生的菊池衍射现象，分为三步：第一步分析输入晶体模型文件的原子、结构、对称性信息，要求输入晶体模型文件路径 inputfile（LAMMPS Data 格式），参量标签-e 指定晶胞原子类型（H-Cf），-dw 指定德拜-沃勒因子^[15]；第二步获取入射电子束生成的背散

射电子的能量、空间分布，参量标签-t 指定样品旋转角 ω 和倾斜角 ε ，默认为 0° 和 75.7° ，-E 指定电子能量最大值（入射电子加速电压）、电子能量最小值、电子能量分区宽度，默认为 20.0keV、10.0keV、1.0keV，-z 指定电子入射样品深度最大值、电子入射样品深度步长，默认为 100.0nm、1.0nm，-ne 指定入射电子数量，默认为10000，-np 指定能量分布阵列尺寸，默认为501，要求为奇数；第三步获取最终的背散射电子菊池衍射花样，参量标签-d 指定面间距最小值，默认为 0.05nm，-b 指定 Bethe 参数，默认为4.0、8.0、50.0、1.0。每步默认输出信息数据文件，文件路径默认为晶胞模型文件目录下的 [cellfile_name].dkd.hdf5，hdf5 文件信息如下：



该文件可输出背散射电子能量分布和菊池衍射花样图片，参量标签-L 指定图片尺寸，默认为 6 英寸，-dpi 指定图片分辨率，默认为 512，

4.5 径向分布函数（Radial Distribution Function）

Mode: rdf

Syntax:

AAVDP --rdf [inputfile] -r [rmax] -n [nbin] -partial

Description:

该模式用于计算径向分布函数，要求输入晶体模型文件路径 `inputfile` (LAMMPS Data 格式)，默认输出可视化数据文件，文件路径默认为晶体模型文件目录下的`[inputfile_name].rdf`，具体包含半径和对应的径向分布函数信息。参量标签`-r` 指定径向分布函数半径最大值，默认为 5.0\AA ；`-n` 径向分布函数半径分区数，默认为 200；`-partial` 指定是否计算偏径向分布函数。

4.6 静态结构因子 (Static Structure Factor)

Mode: `ssf`

Syntax:

`AAVDP --ssf [inputfile] -q [qmax] -n [nbin] -partial`

Description:

该模式用于计算静态结构因子，要求输入晶体模型文件路径 `inputfile` (LAMMPS Data 格式)，默认输出可视化数据文件，文件路径默认为晶体模型文件目录下的`[inputfile_name].ssf`。具体包含波矢模和对应的静态结构因子信息。参量标签`-q` 指定静态结构因子波矢的模的最大值，默认为 5.0\AA ；`-n` 指定静态结构因子波矢的模的分区数，默认为 200；`-partial` 指定是否计算偏静态结构因子。

5 应用实例

5.1 Cu 和 ZnO 和 Al₂O₃ 晶体 X 射线衍射

这里选取三种典型的晶体材料作为演示，说明 AAVDP 程序的 X 射线衍射分析功能，包括面心立方 Cu、六方 ZnO 和 α -Al₂O₃，衍射分析命令行如下。图 4 和图 5 给出了相应的对比情况，可以看出，AAVDP 能够给出基本一致的结果。根据图 4b 可知，预设的倒易间距影响衍射峰位置，其中自动模式下的倒易间距为 0.27571Å，手动模式下倒易间距为 0.27000Å；根据图 4d 可知，是否将洛伦兹-偏振因子纳入考虑严重影响衍射峰高度。

```
>>./AAVDP.exe --xrd ./examples/Cu_xrd/Cu.lmp -e Cu -2t 0.0 60.0 -n 240 -auto
```

```
>>./AAVDP.exe --xrd ./examples/Cu_xrd/Cu.lmp -e Cu -2t 0.0 60.0 -n 240 -c 0.27  
0.27 0.27 -manu
```

```
>>./AAVDP.exe --xrd ./examples/ZnO_xrd/ZnO.lmp -e Zn O -2t 0.0 60.0 -n 240 -auto
```

```
>>./AAVDP.exe --xrd ./examples/ZnO_xrd/ZnO.lmp -e Zn O -2t 0.0 60.0 -n 240 -auto  
-without_lorentz_factor
```

```
>>./AAVDP.exe --xrd ./examples/Al2O3_xrd/Al2O3.lmp -e Al O -2t 0.0 60.0 -n 240 -  
auto
```

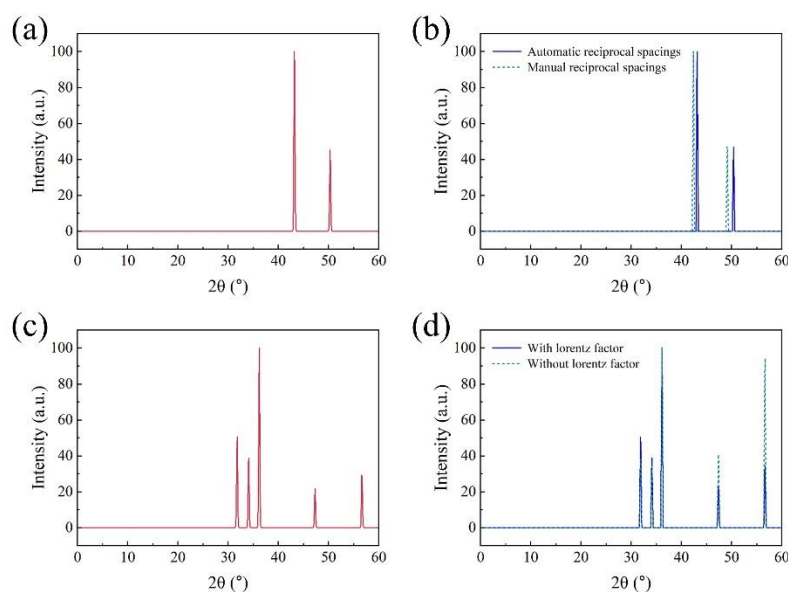


图 4 (a) Cu 晶体 X 射线衍射图谱^[16] (ICSD); (b) Cu 晶体 X 射线衍射图谱 (AAVDP); (c) ZnO 晶体 X 射线衍射图谱^[17] (ICSD); (d) ZnO 晶体 X 射线衍射图谱 (AAVDP)。ICSD 为 [ICSD - \(fiz-karlsruhe.de\)](http://www.fiz-karlsruhe.de/ICSD)网站。

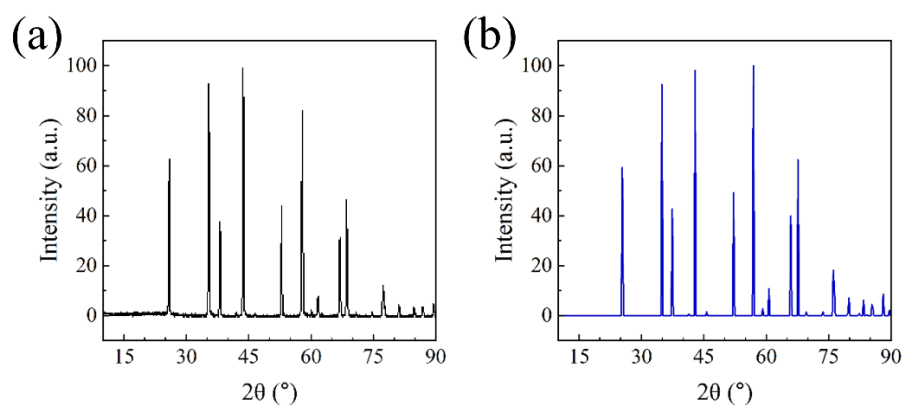


图 5 (a) α - Al_2O_3 晶体 X 射线衍射图谱^[18] (实验); (b) α - Al_2O_3 晶体 X 射线衍射图谱 (AAVDP)

5.2 FeCo 晶体 X 射线和中子衍射

这里选取 FeCo 合金作为演示，说明 AAVDP 程序的中子衍射分析功能，衍射分析命令行如下。图 6 给出了与前人的模拟结果的对比情况，可以看出，

AAVDP 能够给出基本一致的结果，且中子衍射在合金的化学有序研究上的优势。

```
>>./AAVDP.exe --xrd ./examples/FeCo_snd/FeCo.lmp -e Fe Co -dw 0.5500 0.5500 -
```

```
2t 0.0 150.0 -l 1.5400 -auto
```

```
>>./AAVDP.exe --snd ./examples/FeCo_snd/FeCo.lmp -e Fe Co -dw 0.5500 0.5500 -
```

```
2t 0.0 150.0 -l 1.5400 -auto
```

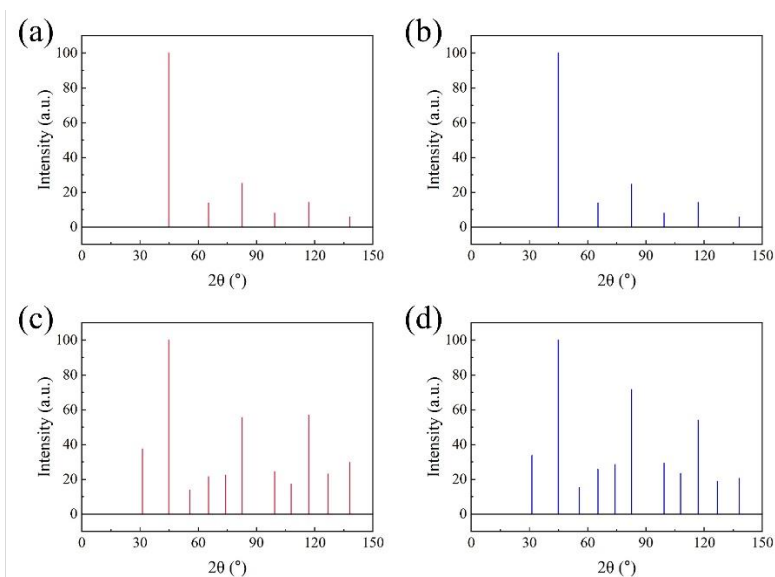


图 6 (a) FeCo 晶体 X 射线衍射图谱^[8] (Marc De Graef 和 Michael E. McHenry 等人); (b) FeCo X 射线衍射图谱 (AAVDP); (c) FeCo 晶体 X 射线衍射图谱^[8] (Marc De Graef 和 Michael E. McHenry 等人); (d) FeCo X 射线衍射图谱 (AAVDP)

5.2 Ni 和 Fe 和 Zr 和 Al₂O₃ 晶体电子衍射

这里选取四种典型的晶体材料作为演示，说明 AAVDP 程序的电子衍射分析功能，包括面心立方 Ni、体心立方 Fe、密排六方 Zr 和 α -Al₂O₃，衍射分析命令行如下。图 7 和图 8 给出了相应的衍射花样和花样对比情况，可以看出，

AAVDP 能够给出基本一致的结果。

```
>>AAVDP --sed ./examples/Ni_sed/Ni.lmp -e Ni -auto
```

```
>>AAVDP --sed ./examples/Ni_sed/Ni.000.h5 -x 0 1 -1 -z 0 1 1
```

```
>>AAVDP --sed ./examples/Fe_sed/Fe.lmp -e Fe -auto
```

```
>>AAVDP --sed ./examples/Fe_sed/Fe.000.h5 -z 0 1 1
```

```
>>AAVDP --sed ./examples/Zr_sed/Zr.lmp -e Zr -auto
```

```
>>AAVDP --sed ./examples/Zr_sed/Zr.000.h5 -z 0 0 1
```

```
>>AAVDP --sed ./examples/Al2O3_sed/Al2O3.lmp -e Al O -auto
```

```
>>AAVDP --sed ./examples/Al2O3_sed/Al2O3.000.h5 -x 0 0 1 -z 2 1 0
```

```
>>AAVDP --sed ./examples/Al2O3_sed/Al2O3.000.h5 -z 0 0 1
```

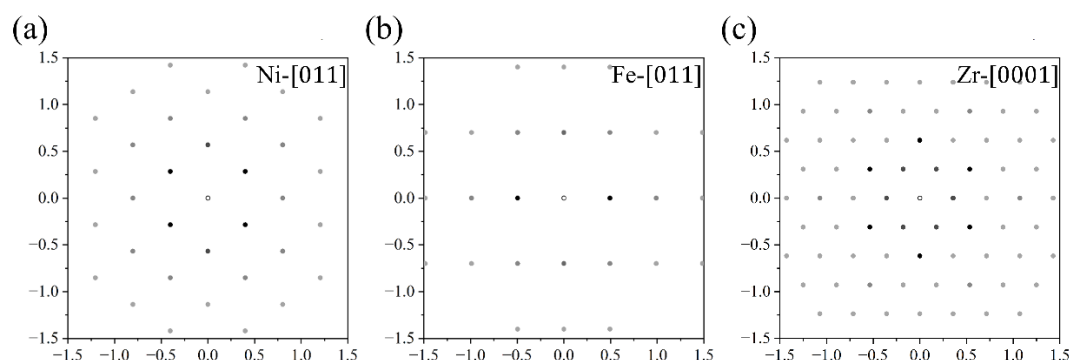


图 7 (a) Ni 晶体电子衍射花样，晶带轴为[011] (AAVDP); (b) Fe 晶体电子衍射花样，晶带轴为[011] (AAVDP); (c) Zr 晶体电子衍射花样，晶带轴为[0001] (AAVDP)

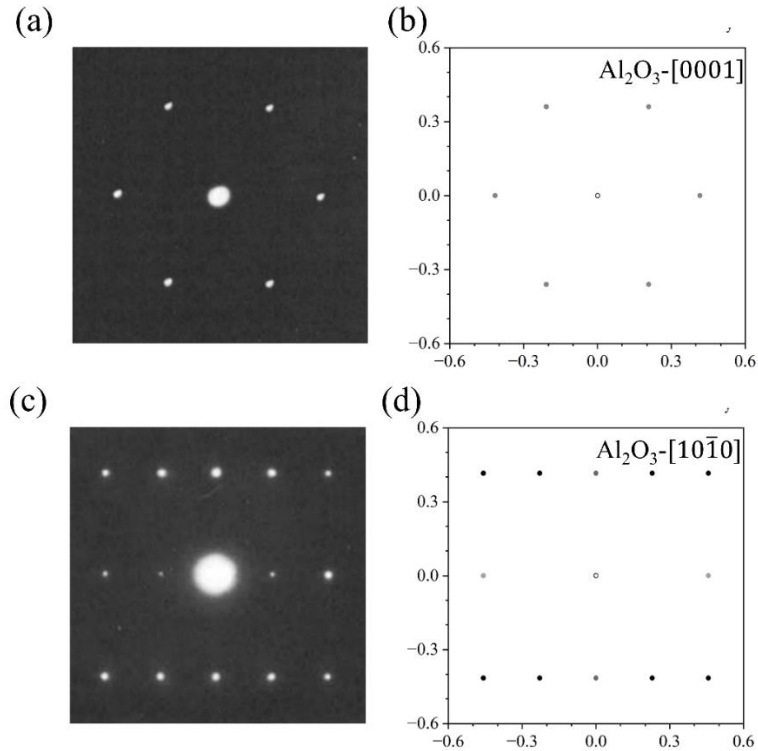


图 8 (a) α - Al_2O_3 电子衍射花样，晶带轴为 $[0001]$ ^[19]（实验）；(b) α - Al_2O_3 模拟电子衍射花样，晶带轴为 $[0001]$ （AAVDP）；(c) α - Al_2O_3 电子衍射花样，晶带轴为 $[10\bar{1}0]$ ^[19]（实验）；(d) α - Al_2O_3 模拟电子衍射花样，晶带轴为 $[10\bar{1}0]$ （AAVDP）。

5.3 Ni 和 Fe 和 Zr 晶体运动学菊池衍射

这里选取三种典型的晶体材料作为演示，说明 AAVDP 程序的运动学菊池衍射分析功能，包括面心立方 Ni、体心立方 Fe、密排六方 Zr，衍射分析命令行如下。图 9 给出了相应的菊池花样和花样对比情况，可以看出，AAVDP 能够给出基本一致的结果。

```
>>AAVDP --sed ./examples/Ni_kkd/Ni_10x10x10.lmp -e Ni -auto
```

```
>>AAVDP --kkd ./examples/Ni_kkd/Ni_10x10x10.000.h5 -z 0 1 1 -d 2.0
```

```
>>AAVDP --sed ./examples/Fe_kkd/Fe_10x10x10.lmp -e Fe -auto
```

```
>>AAVDP --kkd ./examples/Zr_kkd/Zr_10x10x10.000.h5 -z 0 3 1 -d 2.0
```

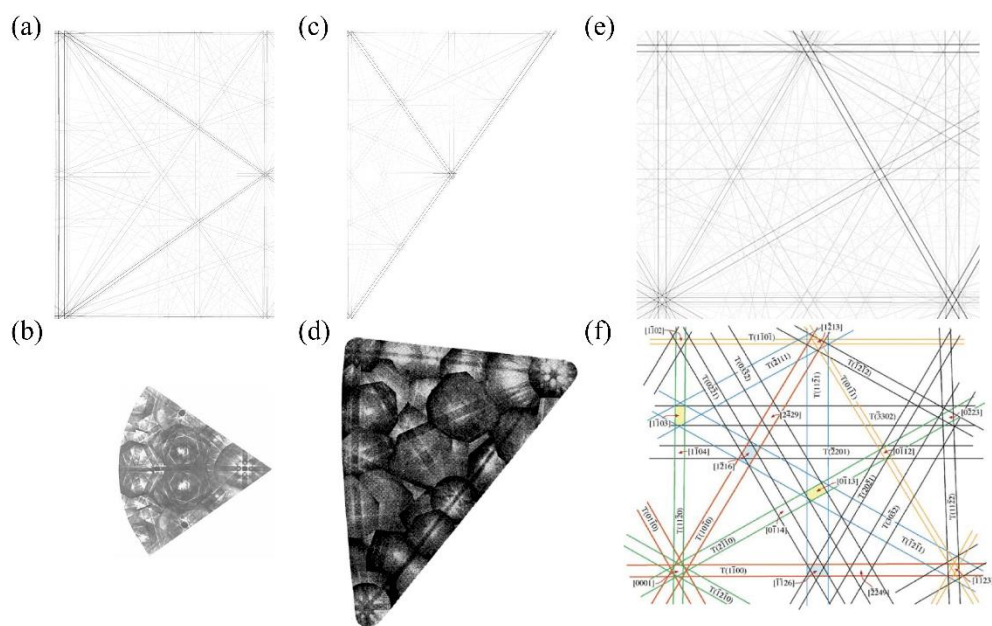


图 9 (a) Ni 模拟电子菊池花样, 晶带轴为 $[011]$ (AAVDP); (b) Ni 电子菊池花样, 晶带轴为 $[011]^{[20]}$ (实验); (c) Fe 模拟电子菊池花样, 晶带轴为 $[011]$ (AAVDP); (d) Fe 电子菊池花样, 晶带轴为 $[011]^{[20]}$ (实验); (e) Zr 模拟电子菊池花样, 晶带轴为 $[0001]$ (AAVDP); (f) 标准 HCP 电子菊池花样, 晶带轴为 $[0001]^{[20]}$ (实验)

5.4 Ni 和 Fe 和 Zr 晶体动力学菊池衍射

这里选取三种典型的晶体材料作为演示，说明 AAVDP 程序的动力学菊池衍射分析功能，包括面心立方 Ni、体心立方 Fe、密排六方 Zr，衍射分析命令

行如下。图 10 给出了相应的菊池花样和花样对比情况，可以看出，AAVDP 能够给出基本一致的结果。

```
>>AAVDP --dkd ./examples/Ni_dkd/Ni.lmp -e Ni -dw 0.0035
```

```
>>AAVDP --dkd ./examples/Ni_dkd/Ni.h5 -m -t 0.0 75.7 -E 20.0 19.0 1.0 -z 100.0
```

```
1.0 -ne 20000 -np 501
```

```
>>AAVDP --dkd ./examples/Ni_dkd/Ni.h5 -k -d 0.1 -b 4.0 8.0 50.0 1.0
```

```
>>AAVDP --dkd ./examples/Fe_dkd/Fe.lmp -e Fe -dw 0.0032
```

```
>>AAVDP --dkd ./examples/Fe_dkd/Fe.h5 -m -t 0.0 75.7 -E 20.0 19.0 1.0 -z 100.0
```

```
1.0 -ne 20000 -np 501
```

```
>>AAVDP --dkd ./examples/Fe_dkd/Fe.h5 -k -d 0.1 -b 4.0 8.0 50.0 1.0
```

```
>>AAVDP --dkd ./examples/Zr_dkd/Zr.lmp -e Zr -dw 0.0056
```

```
>>AAVDP --dkd ./examples/Zr_dkd/Zr.h5 -m -t 0.0 75.7 -E 20.0 19.0 1.0 -z 100.0 1.0
```

```
-ne 20000 -np 501
```

```
>>AAVDP --dkd ./examples/Zr_dkd/Zr.h5 -k -d 0.1 -b 4.0 8.0 50.0 1.0
```

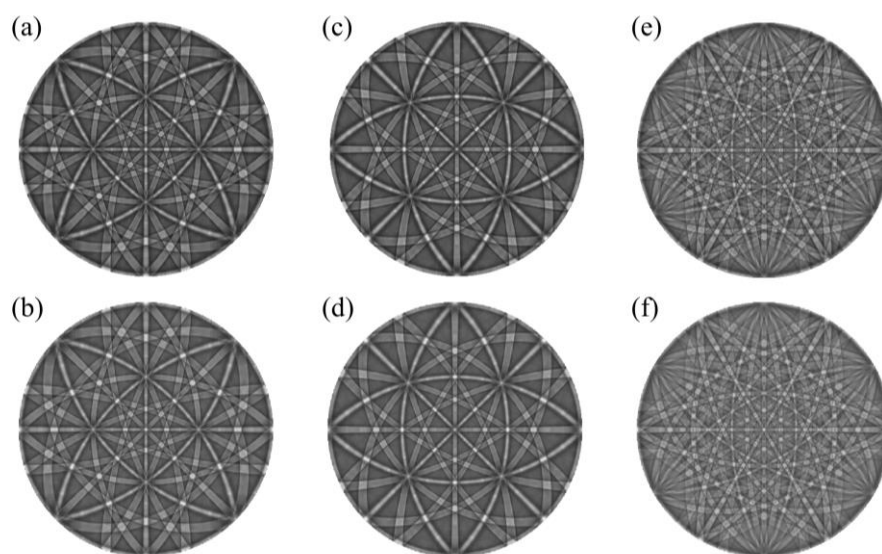


图 10 (a) Ni 模拟电子菊池花样^[2] (EMSOFT); (b) Ni 模拟电子菊池花样

(AAVDP); (c) Fe 模拟电子菊池花样^[2] (EMSOFT); (d) Fe 模拟电子菊池花样 (AAVDP); (e) Fe 模拟电子菊池花样^[2] (EMSOFT); (f) Fe 模拟电子菊池花样 (AAVDP)

5.5 Cu-Zr 熔液径向分布函数

这里选取 Cu-Zr 熔液作为演示, 说明 AAVDP 程序的径向分布函数分析功能, 函数分析命令行如下。图 11 给出了相应的径向分布函数对比情况, 可以看出, AAVDP 能够给出基本一致的结果。

```
>>AAVDP --rdf ./examples/CuZr_rdf/Cu50Zr50.liquid.lammps -r 10.0 -n 100 -partial
```

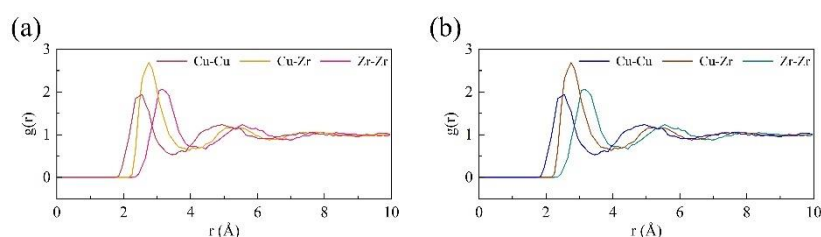


图 11 (a) Cu-Zr 熔液径向分布函数^[21] (OVITO); (b) Cu-Zr 熔液径向分布函数 (AAVDP);

5.6 Cu-Zr 熔液静态结构因子

这里选取 Cu-Zr 非晶作为演示, 说明 AAVDP 程序的静态结构因子分析功能, 函数分析命令行如下。图 12 给出了相应的静态结构因子对比情况, 可以看出, AAVDP 能够给出基本一致的结果。

```
>>AAVDP --ssf ./examples/CuZr_ssf/Cu50Zr50.liquid.lammps -q 10.0 -n 100 -partial
```

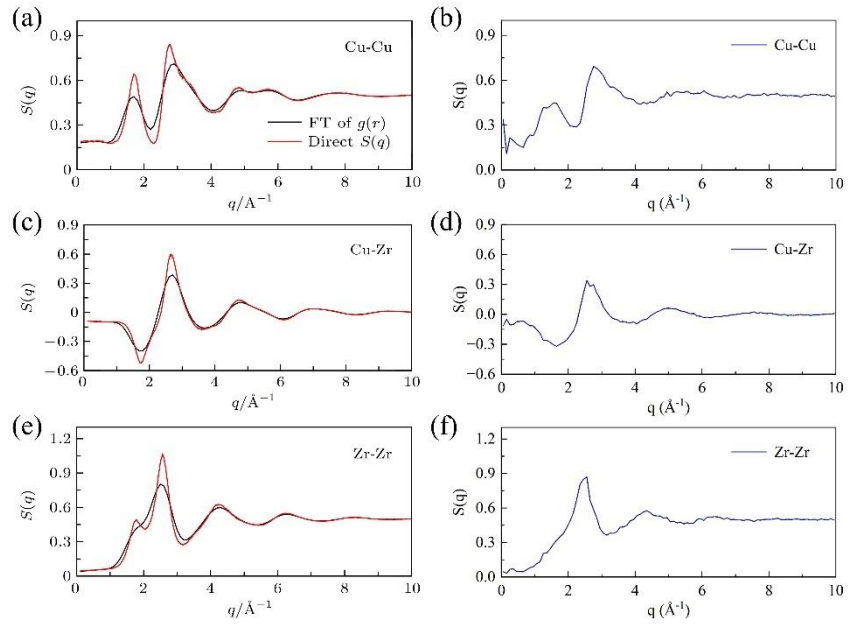


图 12 (a) Cu-Zr 熔液 Cu-Cu 静态结构因子^[14] (武振伟、汪卫华等人); (b) Cu-Zr 熔液 Cu-Cu 静态结构因子; (c) Cu-Zr 熔液 Cu-Zr 静态结构因子^[14] (武振伟、汪卫华等人); (d) Cu-Zr 熔液 Cu-Zr 静态结构因子; (e) Cu-Zr 熔液 Zr-Zr 静态结构因子^[14] (武振伟、汪卫华等人); (f) Cu-Zr 熔液 Zr-Zr 静态结构因子;

参考文献

- [1] Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics[J]. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1): 1–19.
- [2] Singh S, Ram F, Graef M D. EMsoft: open source software for electron diffraction/image simulations[J]. Microscopy and Microanalysis, 2017, 23(S1): 212–213.
- [3] Liu Z R, Yao B N, Zhang R F. SPaMD studio: An integrated platform for atomistic modeling, simulation, analysis, and visualization[J]. COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE, Amsterdam: Elsevier, 2022, 210: 111027.
- [4] Coleman S P, Spearot D E, Capolungo L. Virtual diffraction analysis of Ni [0 1 0] symmetric tilt grain boundaries[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, IOP Publishing, 2013, 21(5): 055020.
- [5] Brown P J, Fox A G, Maslen E N, O’Keefe M A, Willis B T M. Intensity of diffracted intensities[J]. urn:isbn:978-1-4020-1900-5, International Union of Crystallography, 2006, C: 554–595.
- [6] Doyle P A, Turner P S. Relativistic Hartree–Fock X-ray and electron scattering factors[J]. Acta Crystallographica Section A, 1968, 24(3): 390–397.
- [7] Peng L-M, Ren G, Dudarev S L, Whelan M J. Debye–Waller Factors and Absorptive Scattering Factors of Elemental Crystals[J]. Acta Crystallographica Section A, 1996, 52(3): 456–470.
- [8] Graef M, McHenry M. Structure of Materials: An Introduction to Crystallography, Diffraction and Symmetry[A]. 2004.

- [9] Sears V F. Neutron scattering lengths and cross sections[J]. Neutron News, Taylor & Francis, 1992, 3(3): 26–37.
- [10] Colliex C, Cowley J M, Dudarev S L, Fink M, Gjønnnes J, Hilderbrandt R, Howie A, Lynch D F, Peng L M, Ren G, Ross A W, Smith V H J, Spence J C H, Steeds J W, Wang J, Whelan M J, Zvyagin B B. Electron diffraction[J]. urn:isbn:978-1-4020-1900-5, International Union of Crystallography, 2006, C: 259–429.
- [11] Peng L-M, Ren G, Dudarev S L, Whelan M J. Robust Parameterization of Elastic and Absorptive Electron Atomic Scattering Factors[J]. Acta Crystallographica Section A, 1996, 52(2): 257–276.
- [12] Weickenmeier A, Kohl H. Computation of absorptive form factors for high-energy electron diffraction[J]. Acta Crystallographica Section A Foundations of Crystallography, 1991, 47(5): 590–597.
- [13] 张世良, 威力, 高伟, 冯士东, 刘日平. 分子模拟中常用的结构分析与表征方法综述[J]. 燕山大学学报, 2015, 39(3): 213–220.
- [14] 武振伟, 汪卫华. 非晶态物质原子局域连接度与弛豫动力学[J]. 物理学报, 2020, 69(6): 206–221.
- [15] Peng L-M, Ren G, Dudarev S L, Whelan M J. Debye–Waller Factors and Absorptive Scattering Factors of Elemental Crystals[J]. Acta Crystallographica Section A Foundations of Crystallography, 1996, 52(3): 456–470.
- [16] Holgersson S. Röntgenographische Strukturuntersuchungen von einigen Metallegierungen (Die Reihen AuAg und NiCu)[J]. Annalen der Physik, 1926, 384(1): 35–54.

- [17] Akyol M, Ekicibil A, Firat T, Kıymaç K. The Structural and Magnetic Properties of $\text{Zn}_{0.8-4x}\text{Dy}_x\text{O}_y$ ($0.05 \leq x \leq 0.10$) Compounds Prepared by Solid-State Reactions[J]. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 2013, 26(7): 2439–2445.
- [18] Li Z, Wu K, Cao J, Wang Y. Controlled synthesis of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ via the hydrothermal-pyrolysis method[J]. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, IOP Publishing, 2017, 207(1): 012004.
- [19] Lee W E, Lagerlof K P D. Structural and electron diffraction data for sapphire ($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$)[J]. Journal of Electron Microscopy Technique, 1985, 2(3): 247–258.
- [20] Herron A D, Coleman S P, Dang K Q, Spearot D E, Homer E R. Simulation of kinematic Kikuchi diffraction patterns from atomistic structures[J]. MethodsX, 2018, 5: 1187–1203.
- [21] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool[J]. MODELLING AND SIMULATION IN MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING, 2010, 18(1).