

AAVDP 软件使用手册

Version 1.0.0, Dec 22, 2024

Edit by

Yan Zhang

Ruifeng Zhang

M I C I D

Materials Integrated Computation and Intelligent Design

目录

1 AAVDP 简介.....	3
2 AAVDP 的配置和使用.....	4
3 AAVDP 理论背景.....	9
3.1 理论基础.....	9
3.1.1 晶体点阵和布拉格方程.....	9
3.1.2 倒易点阵和衍射方程.....	10
3.2 X 射线和中子衍射.....	11
3.3 电子衍射.....	15
3.3.1 衍射强度.....	16
3.3.2 衍射花样.....	21
3.4 结构有序分析.....	22
4 AAVDP 语法和功能.....	23
4.1 X 射线衍射 (X-ray Diffraction)	24
4.2 中子衍射 (Neutron Diffraction)	25
4.3 运动学电子衍射 (Kinematic Electron Diffraction)	26
4.4 运动学菊池衍射 (Kinematic Kikuchi Diffraction)	28
4.5 动力学电子衍射 (Dynamical Electron Diffraction)	29
4.6 动力学菊池衍射 (Dynamical Kikuchi Diffraction)	31
4.7 径向分布函数 (Radial Distribution Function)	33
4.8 静态结构因子 (Static Structure Factor)	33
5 应用实例.....	34

5.1 立方 NaCl 和六方 ZnO 晶体 X 射线衍射	34
5.2 立方 FeCo 和六方 LaCrGe ₃ 晶体中子衍射	35
5.3 α -Al ₂ O ₃ 晶体运动学和动力学电子衍射.....	38
5.4 Cu{111}<112>和 Fe{112}<111>孪晶运动学电子衍射	39
5.5 BCC 和 HCP 晶体运动学和动力学菊池衍射	41
5.6 FCC 螺位错和刃位错模型运动学菊池衍射	43
5.7 Cu 和 Cu ₅₀ Zr ₅₀ 熔液和非晶径向分布函数.....	46
5.8 Cu 和 Cu ₅₀ Zr ₅₀ 熔液和非晶静态结构因子	47
参考文献.....	49

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，以及对模拟结果的原位可视化功能；现有的第三方衍射模拟软件尽管提供了该方面的衍射分析和可视化功能，但安装依赖库和使用过程较为繁杂，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轻量级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，呈现出强大的可移植性和跨平台特征；AAVDP 的前后处理采用一体化流程设计，能够便捷地提取原子级模拟结构并执行衍射模拟和数据分析，并原位生成图片，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、物理学和化学

等领域的研究进展。

2 AAVDP 的配置和使用

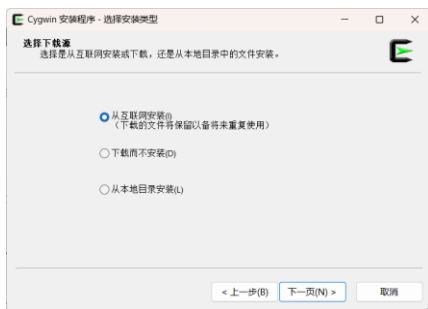
获取 AAVDP 安装包：

- (1) 直接从 MICID 网站下载，链接如下：<http://micid.top/softwares/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 Win 系统下安装步骤

- (1) [Cygwin](#) 网站上下载 setup-x86_64.exe 并双击安装，关键流程如下：

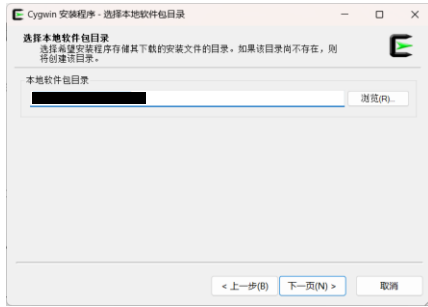
a. 选择 Cygwin 安装模式



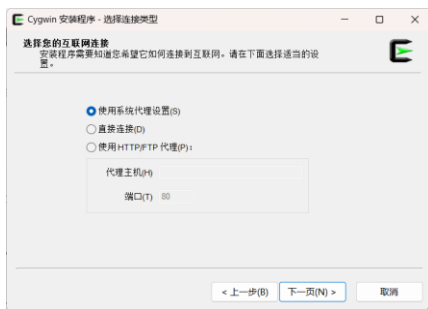
b. 选择 Cygwin 安装路径



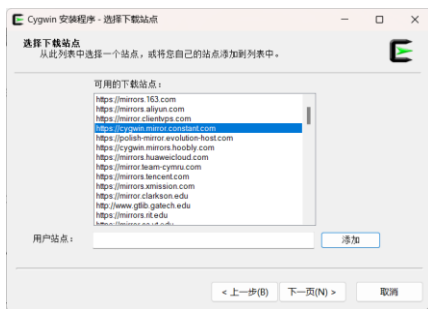
c. 选择 Cygwin 组件包下载路径



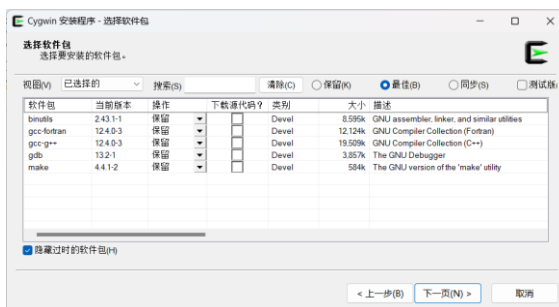
d. 选择网络连接方式



e. 选择 Cygwin 组件包下载站点



f. 选择待下载的 Cygwin 组件包



注意：保留 `setup-x86_64.exe`，便于后续更新和卸载组件。

(2) 在 Cygwin 安装路径下的用户文件夹下启动程序 `Cygwin64` 终端，在终端输入：

```
>>tar -xvf AAVDP-x.x.x.tar.gz (or unzip AAVDP-x.x.x.zip)
```

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

```
>>cp makefile.win makefile
```

```
>>make
```

生成的 AAVDP 自动存放在/bin 文件夹下。

在 Linux 系统下安装步骤

(1) 安装 gcc、g++、gfortran 和 make 编译器（GNU 版本）；

```
>>sudo apt install gcc (or g++ or gfortran or make)
```

```
>>gcc -v
```

(2) 启动命令行终端，在终端输入：

```
>>tar -xvf AAVDP-x.x.x.tar.gz (or unzip AAVDP-x.x.x.zip)
```

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

```
>>cp makefile.linux makefile
```

```
>>make
```

生成的 AAVDP 自动存放在/bin 文件夹下。

在 MAC 系统下安装步骤

(1) 默认已安装 gcc（clang 版本）、g++（clang 版本）、和 make 编译器（GNU 版本），gfortran 需基于 macOS 版本在 [Releases · fxcoudert/gfortran-for-macOS · GitHub](#) 网站下载对应的 gfortran 安装器并双击安装，默认安装路径为 /usr/local/gfortran，比如，macOS Big Sur 11.7.4 版本对应 gfortran-Intel-11.2-BigSur.dmg；

(2) 启动命令行终端，在终端输入：

```
>>tar -xvf AAVDP-x.x.x.tar.gz (or unzip AAVDP-x.x.x.zip)
```

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

```
>>cp makefile.mac makefile
```

```
>>make
```

生成的 AAVDP 自动存放在/bin 文件夹下。

附注：AAVDP 依赖 lapack、zlib 和 libpng 库，在 windows11、ubuntu 22.04 和 macOS Big Sur 11.7.4 平台上编译生成的静态链接库文件分别保存在/src/lib 目录下的 win、linux、mac 文件夹，若自行编译相关库文件，请将其覆盖对应平台文件夹下的相关库文件。具体编译流程如下：

(1) 在 [LAPACK — Linear Algebra PACKage \(netlib.org\)](https://netlib.org/lapack/lapack-3.12.0.tar.gz) 网站下载 lapack-3.12.0.tar.gz，启动命令行终端，在终端输入：

```
>>tar -xvf lapack-3.12.0.tar.gz
```

```
>>cd lapack-3.12.0
```

```
>>cp make.inc.example make.inc
```

```
>>make blaslib
```

```
>>make cblaslib
```

```
>>make lapacklib
```

```
>>make lapackelib
```

lapack-3.12.0 目录下生成静态链接库文件 librefblas.a、libcblas.a、liblapack.a、liblapacke.a，其中，blas 库提供向量和矩阵运算功能，lapack 库提供线性代数计算功能，cblas 和 lapacke 分别是 blas 和 lapack 的 c 语言接口，/CBLAS/include 和/LAPACKE/include 文件夹下生成头文件 lapack.h、lapacke.h、

lapacke_mangling.h。

注意：lapack 依赖 fortran 库，该库在不同平台下以不同形式编译，win 平台下需复制 Cygwin 安装路径下的 libgfortran.dll.a 到/src/lib 文件夹下，mac 平台下在 makefile 编译命令后添加 -lgfortran，linux 平台下需复制系统路径下的 libgfortran.a 和 libquadmath.a 到/src/lib 文件夹下。

(2) 在 [zlib Home Site](#) 和 [LIBPNG: PNG reference library - Browse /libpng16/1.6.43 at SourceForge.net](#) 网站分别下载 zlib-1.3.1.tar.gz 和 libpng-1.6.43.tar.gz，启动命令行终端，在终端输入：

```
>>tar -xvf zlib-1.3.1.tar.gz
```

```
>>cd zlib-1.3.1
```

```
>>./configure --prefix=[libpng_src_directory]
```

```
>>make && make install
```

```
>>tar -xvf libpng-1.6.43.tar.gz
```

```
>>cd libpng-1.6.43
```

```
>>./configure --prefix=[libpng_src_directory] LIBS=-L[libpng_src_directory]/lib
```

```
CPPFLAGS=-I[libpng_src_directory]/include
```

```
>> make && make install
```

libpng_src_directory 文件夹用于存放 zlib-1.3.1 和 libpng-1.6.43 编译结果文件，要求用户自定义且为绝对路径，[libpng_src_directory]/lib 文件夹下生成静态链接库文件 libz.a、libpng16.a、libpng16.la，[libpng_src_directory]/include 和 [libpng_src_directory]/include/libpng16 文件夹下生成头文件 png.h、pngconf.h、pnglibconf.h、zconf.h、zlib.h。

注意：linux 平台下要求 libpng_src_directory 在/usr/local 下，以便于 libpng-1.6.43 识别 zlib-1.3.1 的安装。

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以及入射波、衍射波之间的干涉会生成衍射花样和菊池花样等重要晶体学“指纹”，用于揭示样品结构、物相、取向等信息。根据入射波的种类，衍射分析技术分为 X 射线衍射、中子衍射和电子衍射。

虚拟衍射分析技术是在虚拟晶体或非晶体等材料模型系统上进行衍射模拟和数据分析的方法，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 理论基础

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 **a**、**b**、**c**，点阵矢量 **r** 如下：

$$\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c} \quad (3.1.1)$$

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：

$$2d_{HKL} \sin \theta = \lambda \quad (3.1.2)$$

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：

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^* &= \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} \\ \mathbf{b}^* &= \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} \\ \mathbf{c}^* &= \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

相应地，倒易矢量 \mathbf{g} 可表示如下：

$$\mathbf{g} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* \quad (3.1.4)$$

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} 的模等于 (hkl) 晶面间距的倒数。

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：

$$\frac{\mathbf{s}_1}{\lambda} - \frac{\mathbf{s}_0}{\lambda} = \mathbf{g}_{HKL} \quad (3.1.5)$$

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 ，衍射矢量方程变式如下：

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_0 = \mathbf{g}_{HKL} \quad (3.1.6)$$

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

自 1912 年由德国物理学家劳厄发现 X 射线衍射现象以来，X 射线衍射技术经历多次技术突破与拓展，从劳厄法、德拜-谢乐照相法到粉末衍射仪法，目前是物质结构分析最有效和应用最广泛的手段之一。

X 射线本身是波长范围大约在 $0.1 \sim 10 \text{\AA}$ 、以光速直线传播的电磁波，由高能电子束撞击金属靶产生，比如，Cu 靶的 K_α 射线源自 Cu 靶被撞击后原子内部 L 层电子向 K 层跃迁时辐射的光子， $\lambda = 1.54184 \text{\AA}$ 。X 射线照射样品时，在原子内受原子核束缚较紧的电子上发生相干散射，散射波与入射波波长相同，各电子的散射波波长相同且彼此具有确定的相位关系，可产生干涉现象；或者与自由电子或受原子核束缚较弱的电子碰撞，发生非相干散射，散射波与入射波波长不同。前者与布拉格方程一起构成了 X 射线衍射分析的理论基础。

X 射线衍射具有无损试样、强穿透力、不受电磁场影响的特征，主要应用

物相分析、点阵常数的精确测定、宏观内应力测定、结晶度测定等。基于实验支持和理论推导，特定 $\{hkl\}$ 晶面的 X 射线相对衍射强度如下：

$$I_{hkl} = |F_{hkl}|^2 P_{hkl} L_p(\theta) A(\theta) e^{-2M} \quad (3.2.1)$$

包含下述因子：

- 1) 结构因子 F_{hkl} ：基于 X 射线照射晶胞衍射几何推导得到的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（主要是原子序数，也就是电荷密度）、几何位置相关；
- 2) 多重性因子 P_{hkl} ：同一 $\{hkl\}$ 晶面族中等同晶面组数；
- 3) 洛伦兹-偏振因子 $L_p(\theta)$ ：洛伦兹因子^[4]基于 X 射线衍射几何特征推导得到，随衍射几何变化，比如，小晶体的洛伦兹因子为 $1/\sin 2\theta$ ，粉末多晶体的洛伦兹因子为 $1/(\cos(\theta) \sin^2(\theta))$ 。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，恒定为 $(1 + \cos^2(2\theta))/2$ ；
- 4) 温度因子 e^{-2M} ：量化热振动原子偏离理想位置的程度，随温度变化；
- 5) 吸收因子 $A(\theta)$ ：量化衍射强度由于样品对 X 射线的吸收发生的衰减现象，与样品线吸收系数、样品尺寸、衍射角 2θ 有关。若样品线吸收系数与样品尺寸乘积足够小，可基本保持恒定。

基于衍射矢量方程，可推出，对于倒易点阵内的任一倒易矢量 \mathbf{g} ，X 射线衍射强度 $I_x(\mathbf{g})$ 计算如下^[5]：

$$I_x(\mathbf{g}) = L_p(\theta) \cdot \frac{F(\mathbf{g}) \cdot F(\mathbf{g})^*}{N} \quad (3.2.2)$$

$$\frac{\sin \theta}{\lambda} = \frac{|\mathbf{g}|}{2}$$

其中， $F(\mathbf{g})$ 是结构因子， N 是总原子数， $F(\mathbf{g})$ 公式如下：

$$F(\mathbf{g}) = \sum_{j=1}^N f_j(\theta) \cdot \exp(2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}_j) \quad (3.2.3)$$

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：

$$f_j(\theta) = e^{-M_j(\theta)} f_j^0(\theta) \quad (3.2.4)$$

$f_j^0(\theta)$ 为绝对零度时的原子散射因子，无具体物理公式，但是可基于实验原子散射因子数据曲线拟合得到如下近似高斯公式^[6]：

$$f_j^0\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = \sum_i^4 a_i \exp\left(-b_i \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2}\right) + c \quad (3.2.5)$$

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://tugraz.at)网站。 $e^{-M_j(\theta)}$ 为校正原子散射因子的温度因子：

$$M_j\left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right) = B_j(T) \frac{\sin^2 \theta}{\lambda^2} \quad (3.2.6)$$

其中， $B_j(T)$ 为德拜-沃勒因子^[7]， T 为温度，单位为 K。

由上述公式可计算单一倒易矢量 \mathbf{g} 的 X 射线衍射强度，倒易矢量 \mathbf{g} 可基于 Coleman 等人^[5]提出的取样方案进行构建，适用于任意晶体模型，如图 1 所示。基于倒易轴构建一个正交或斜交网格，网格间距基于晶体模型大小设置或自定义，在半径为 $2k_0$ 的倒易球内的网格点即为待搜索的倒易矢量 \mathbf{g} ，该半径是将厄瓦尔德球绕倒易原点旋转得到的，这一步骤的目的是模拟粉末衍射仪的操作条件，在这种条件下，所有晶体取向（或入射光束方向）都可以均等地访问。之后通过统计等价 \mathbf{g} 的数量可进一步计算 $I_x(\theta)$ 。

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）。单晶的 $I - 2\theta$ 曲线在特定衍射角 2θ 呈现细长的衍射峰，具有随机晶粒取向的多晶会在多个衍射角 2θ 呈现弥散的衍射峰，

可用由 Giacovazzo 等人提出的 pseudo-Voigt 公式描述宽化的衍射峰^[8]:

$$I_x(\theta) = I_x(\theta_k) \left[\eta \frac{\sqrt{C_0}}{\pi\omega_k} \frac{1}{1 + C_0 X_k^2} + (1 - \eta) \frac{\sqrt{C_1}}{\sqrt{\pi}\omega_k} e^{-C_1 X_k^2} \right] \quad (3.2.7)$$

其中, $C_0 = 4$, $C_1 = 4 \ln 2$; η 为混合参数, $\eta = 1$ 时, 为纯洛伦兹公式, $\eta = 2$ 时, 为纯高斯公式; $X_k \equiv 2(\theta - \theta_k)/\omega_k$, ω_k 是衍射峰 k 的半高宽, 可根据谢乐公式获取:

$$\omega_k(RAD) = \frac{0.90\lambda}{D \cos \theta_k} \quad (3.2.8)$$

θ_k 是衍射峰 k 的衍射角。

中子衍射是另一项物质结构分析的重要技术。中子本身是电中性、比光子稍重的粒子, 具备磁偶极矩, 德布罗意波长约为 1.0\AA , 相当于原子间距。中子束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。中子衍射具有强穿透力、样品尺寸要求低的特征, 同时, 由于散射源是原子核而不是核外电子, 中子衍射强度 $I_n(\mathbf{g})$ 相比 $I_x(\mathbf{g})$ 主要有两处不同, 包括^[8]: 一是仅需考虑衡量衍射几何特征的洛伦兹因子, 无需考虑偏振因子; 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 \(nist.gov\)](https://www.nist.gov/patent/publication/neutron-scattering-lengths-and-cross-sections)^[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, 能弥补 X 射线无法识别同位素的缺陷。

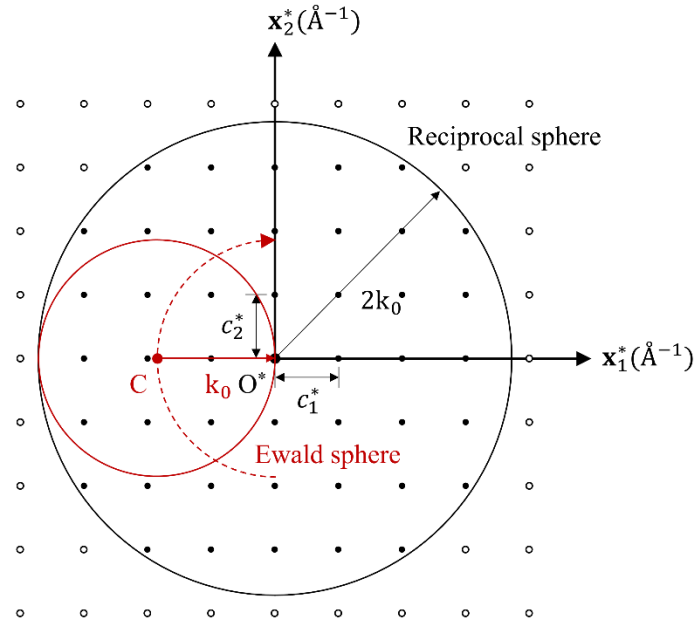


图 1 X 射线和中子衍射谱产生机理

3.3 电子衍射

电子衍射技术的基础原理相比 X 射线、中子衍射更加复杂。电子本身是带电粒子，质量约是光子或中子的 $1/2000$ ，因此，电子有易受电场影响、相对论效应等特征，更重要的是，电子的德布罗意波长约在 10^{-2}\AA 量级，一般采用 $\lambda = 0.0251\text{\AA}$ （等同于加速电压 200kV ），小量级的波长导致电子衍射相比 X 射线和中子衍射有两项显著不同：一是厄瓦尔德球半径很大，衍射角很小；二是原子散射概率高，衍射强度大。入射电子与样品原子间的相互作用有原子核对入射电子的弹性散射和核外电子对入射电子的非弹性散射，非弹性散射会生成特征 X 射线、二次电子等信号。

电子衍射的主要应用有透射电子显微镜（Transmission Electron Microscope, TEM）、扫描电子显微镜（Scanning Electron Microscope, SEM）及其搭载的电

子背散射衍射（Electron Back-scattered diffraction, EBSD），用于结构、形貌、成分、取向分析等。电子衍射花样有斑点花样和菊池花样，能够直观反映晶体结构和取向关系等。前者的衍射斑点强度和分布用于确定第二相、孪晶、有序化、取向关系等，后者的成对菊池线的间距、夹角等参数可用于衬度、结构、相变分析以及晶体的精确取向等。

3.3.1 衍射强度

电子衍射强度 I_e 计算需经由薛定谔方程推导，推导过程如下：

首先，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：

$$\Delta\Psi + 4\pi^2 k_0^2 \Psi = -4\pi^2 U(\mathbf{r})\Psi \quad (3.3.2)$$

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

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， $\gamma = 1 + \frac{eE}{m_0c^2}$ ， 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。

其次，静电晶格势 $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + iW(\mathbf{r})$ 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：

$$V(\mathbf{r}) = V_0 + V'(\mathbf{r}) + iW(\mathbf{r}) = V_0 + \sum_{\mathbf{g} \neq 0} V_{\mathbf{g}}e^{2\pi i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{g}} W_{\mathbf{g}}e^{2\pi i\mathbf{g}\cdot\mathbf{r}} \quad (3.3.3)$$

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^[10]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：

$$\Delta\Psi + 4\pi^2 k_0^2 \Psi = -4\pi^2 [U + iU']\Psi \quad (3.3.4)$$

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

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

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：

$$U + iU' = \sum_{\mathbf{q}} (U_{\mathbf{q}} + iU'_{\mathbf{q}}) e^{2\pi i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (3.3.5)$$

最后，电子衍射强度 I_e 在运动学和动力学理论的指导下分别导向不同的结果：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， I_e 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，要求解傅里叶转换的薛定谔方程(3.3.4)，求解过程如下：

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下，电子仅沿入射波 \mathbf{k}_0 和衍射波 $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_0 + \mathbf{g}$ 运动，波函数 $\Psi(\mathbf{r})$ 平面波展开如下：

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} \phi_{\mathbf{g}} e^{2\pi i (\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}} \quad (3.3.6)$$

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(3.3.4)可转换为如下描述任意衍射束振幅随样品深度变化的方程：

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_{\mathbf{g}}}{dz} - 2\pi i s_{\mathbf{g}} \phi_{\mathbf{g}} &= i\pi \sum_{\mathbf{g}'} \frac{e^{i\theta_{\mathbf{g}-\mathbf{g}'}}}{q_{\mathbf{g}-\mathbf{g}'}} \phi_{\mathbf{g}'} \\ s_{\mathbf{g}} &\equiv \frac{k_0^2 - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{g})^2}{2|\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}| \cos \alpha} \\ \frac{1}{q_{\mathbf{g}}} &\equiv \frac{1}{\xi_{\mathbf{g}}} + i \frac{e^{i\beta_{\mathbf{g}}}}{\xi'_{\mathbf{g}}} \end{aligned} \quad (3.3.7)$$

其中， $s_{\mathbf{g}}$ 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， $s_{\mathbf{g}}$ 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； α 是 \mathbf{e}_z 和 $\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}$ 的夹角； $\beta_{\mathbf{g}} = \theta'_{\mathbf{g}} - \theta_{\mathbf{g}}$ ， $\theta_{\mathbf{g}}$ 和 $\theta'_{\mathbf{g}}$ 分别是 $U_{\mathbf{g}}$ 和 $U'_{\mathbf{g}}$ 的相位； $\xi_{\mathbf{g}}$ 是消光距离， $\xi'_{\mathbf{g}}$ 是吸收长度：

$$\frac{1}{\xi_{\mathbf{g}}} \equiv \frac{|U_{\mathbf{g}}|}{|\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}| \cos \alpha}, \frac{1}{\xi'_{\mathbf{g}}} \equiv \frac{|U'_{\mathbf{g}}|}{|\mathbf{k}_0 + \mathbf{g}| \cos \alpha} \quad (3.3.8)$$

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：

$$\Psi(\mathbf{r}) = C(\mathbf{r}) e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{g}} e^{2\pi i (\mathbf{k} + \mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}} \quad (3.3.9)$$

其中， \mathbf{k} 为布洛赫波矢量， $C_{\mathbf{g}}$ 是布洛赫波系数。将布洛赫波代入薛定谔方程(3.3.4)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：

$$[k_0^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{g})^2] C_{\mathbf{g}} + \sum_{\mathbf{h} \neq \mathbf{g}} U_{\mathbf{g}-\mathbf{h}} C_{\mathbf{h}} = 0 \quad (3.3.10)$$

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

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

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_j \alpha^{(j)} \sum_{\mathbf{g}} C_{\mathbf{g}}^{(j)} e^{2\pi i (\mathbf{k}^{(j)} + \mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}} \quad (3.3.11)$$

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_g 个布洛赫波矢量，上述色散关系可转变如下：

$$2k_0 s_g C_g^{(j)} + \sum_{h \neq g} U_{g-h} C_h^{(j)} = 2k_n \Gamma^{(j)} C_g^{(j)} \quad (3.3.12)$$

等同于如下本征值方程：

$$\begin{pmatrix} iU'_0 & U_{-g} + iU'_{-g} & \dots & U_{-h} + iU'_{-h} \\ U_g + iU'_g & 2k_0 s_g + iU'_0 & \dots & U_{g-h} + iU'_{g-h} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ U_h + iU'_h & U_{h-g} + iU'_{h-g} & \dots & 2k_0 s_h + iU'_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0^{(j)} \\ C_g^{(j)} \\ \vdots \\ C_h^{(j)} \end{pmatrix} = 2k_n \Gamma^{(j)} \begin{pmatrix} C_0^{(j)} \\ C_g^{(j)} \\ \vdots \\ C_h^{(j)} \end{pmatrix} \quad (3.3.13)$$

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}' ($|s_g| \gg \lambda |U_g|$) 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：

$$\begin{pmatrix} \bar{\eta}_0^{(j)} + i\bar{U}'_0 & \bar{U}_{-g} + i\bar{U}'_{-g} & \dots & \bar{U}_{-h} + i\bar{U}'_{-h} \\ \bar{U}_g + i\bar{U}'_g & \bar{\eta}_g^{(j)} + i\bar{U}'_0 & \dots & \bar{U}_{g-h} + i\bar{U}'_{g-h} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{U}_h + i\bar{U}'_h & \bar{U}_{h-g} + i\bar{U}'_{h-g} & \dots & \bar{\eta}_h^{(j)} + i\bar{U}'_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0^{(j)} \\ C_g^{(j)} \\ \vdots \\ C_h^{(j)} \end{pmatrix} = 0 \quad (3.3.14)$$

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

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

其中， $\eta_g^{(j)} \equiv 2[k_0 s_g - k_n \Gamma^{(j)}]$ ，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 $C_g^{(j)}$ 。

基于概率解释，可知单一波矢量 \mathbf{k} 贡献的强度与 $|\phi_g|^2$ 成正比， ϕ_g 可计算如下：

$$\phi_g(z_0) = \sum_j^{N_g} \alpha^{(j)} C_g^{(j)} e^{2\pi i \Gamma^{(j)} \cdot z_0} \quad (3.3.15)$$

整个入射束 \mathbf{k}_0 贡献的强度与 $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ 成正比，可计算为经样品内 N 个等价原子群 S

散射的厚度平均强度:

$$I(z_0) = \sum_n \sum_{i \in S_n} \left[\frac{1}{z_0} \int_0^{z_0} \Psi^*(\mathbf{r}_i) \Psi(\mathbf{r}_i) dz \right] = \sum_{\mathbf{g}} \sum_{\mathbf{h}} S_{\mathbf{gh}} L_{\mathbf{gh}} \quad (3.3.16)$$

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:

$$S_{\mathbf{gh}} \equiv \sum_n \sum_{i \in S_n} Z_n^2 e^{-M_{\mathbf{h}-\mathbf{g}}^{(n)}} e^{2\pi i(\mathbf{h}-\mathbf{g}) \cdot \mathbf{r}_i} \quad (3.3.17)$$

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:

$$L_{\mathbf{gh}} \equiv \sum_j \sum_k C_{\mathbf{g}}^{(j)*} \alpha^{(j)*} \mathcal{M}_{jk} \alpha^{(k)} C_{\mathbf{h}}^{(k)} \quad (3.3.18)$$

其中, \mathcal{M}_{jk} 公式如下:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{jk} &\equiv \frac{1}{z_0} \int_0^{z_0} e^{-2\pi(\alpha_{jk} + i\beta_{jk})z} dz \\ \alpha_{jk} &= q^{(j)} + q^{(k)} \\ \beta_{jk} &= \gamma^{(j)} - \gamma^{(k)} \end{aligned} \quad (3.3.19)$$

上述表示背散射电子沿样品厚度方向均匀分布。为了更符合实际, 可由蒙特卡罗模拟获取电子分布, 如图 2 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。则式(3.3.19)可改为:

$$\mathcal{M}_{jk}(E) \equiv \frac{1}{z(E)} \int_0^{z(E)} \lambda(E, z) e^{-2\pi(\alpha_{jk} + i\beta_{jk})z} dz \quad (3.3.20)$$

其中, $z(E)$ 和 $\lambda(E, z)$ 是背散射电子的积分深度和散射概率。

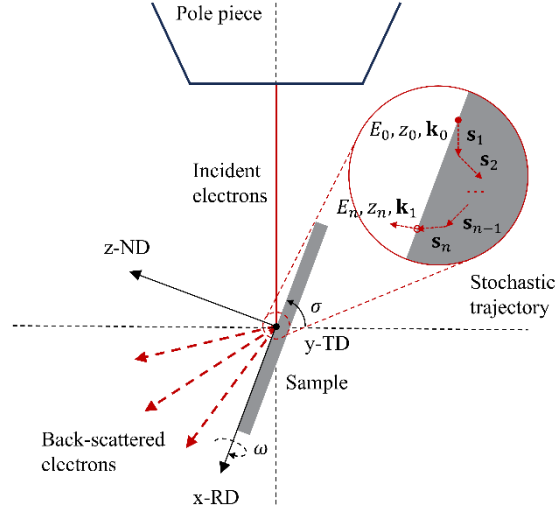


图 2 蒙特卡罗模拟入射电子束照射样品产生背散射电子的过程

3.3.2 衍射花样

入射电子与不同厚度的样品相互作用时产生不同的衍射花样：样品较薄时，出现明锐的衍射斑点；样品较厚时，出现一明一暗的菊池线对，即菊池带。

根据厄瓦尔德图解，落在厄瓦尔德球面上的倒易阵点均严格满足布拉格条件。如图 3a 所示，以 C 点为厄瓦尔德球心，厄瓦尔德半径为 $\frac{1}{\lambda}$ ，以 O^* 为倒易空间坐标原点，将待搜索倒易阵点限制在倒易球内，倒易球半径为 $|\mathbf{k}|_{\max}$ ，在厄瓦尔德球面与倒易球相交区域截取垂直晶带轴 $[uvw]$ 的切片空间，切片空间内部的倒易阵点与厄瓦尔德球面存在程度不一的偏离。一般情况下，由于厄瓦尔德球的半径很大， $\frac{1}{\lambda} \gg |\mathbf{k}|_{\max}$ ，在截取的厄瓦尔德球面可近似为一平面，因此该影响可忽略。

入射电子中有一部分电子发生非弹性散射后，能量损失较小，可继续参与晶面衍射。与入射电子不同的是，非弹性散射电子的散射方向不同，入射到相同晶面发生布拉格衍射时，其衍射方向形成一圆锥面。如图 3b 所示，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，有如下特征：由于电子

衍射的衍射角很小，菊池线一般接近为直线；由于 (hkl) 晶面有对应的平行 $(\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ 晶面，菊池球面上的 \mathbf{k} 菊池线成对出现，形成菊池带；由于非弹性散射电子散射角越大，能量损失越大，形成菊池带的非弹性散射电子的能量损失一般情况下呈现一小一大的状态，导致菊池线对呈现一明一暗的状态。

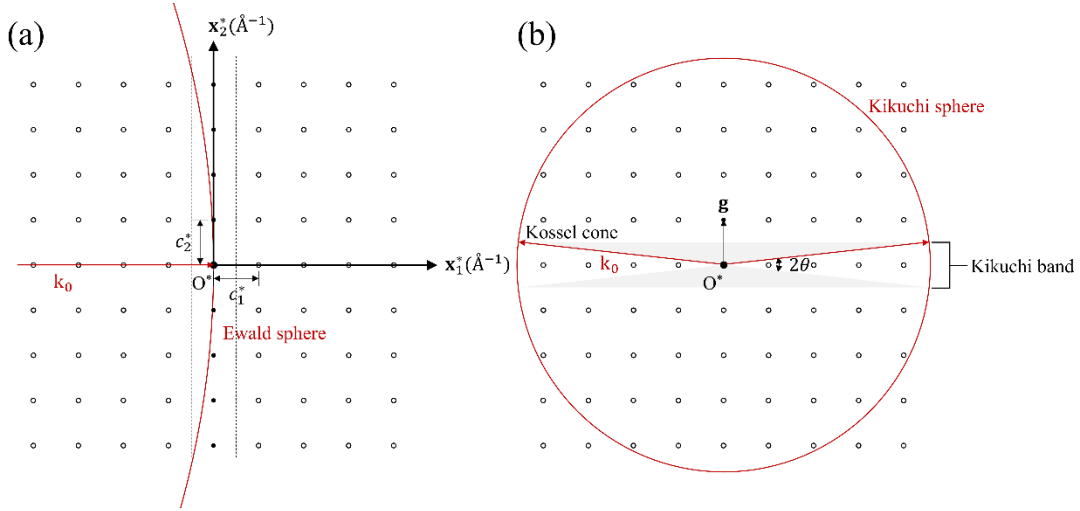


图 3 运动学电子衍射花样产生机理

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：

$$g_{ij}(r) = \frac{1}{\rho_j} \frac{\sum_i^{N_i} n_{ij}(r)}{N_i V(r)} \quad (3.4.1)$$

$$V(r) = \frac{4}{3}\pi \left(r + \frac{1}{2}\Delta r\right)^3 - \frac{4}{3}\pi \left(r - \frac{1}{2}\Delta r\right)^3 \quad (3.4.2)$$

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^[11]。

静态结构因子 $S_{ij}(\mathbf{q})$ 一般公式^[12]如下：

$$S_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^{N_i} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} \sum_{j=1}^{N_j} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \right\rangle \quad (3.4.3)$$

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：

$$S_{ij}(q) - 1 = 4\pi \int_0^\infty \frac{\sin(qr)}{qr} [g_{ij}(r) - 1] r^2 dr \quad (3.4.4)$$

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^[11]。

4 AAVDP 语法和功能

本手册将介绍 AAVDP 基本命令行使用方法，包括衍射模拟、结构分析等。

AAVDP 通用语法格式和规则如下：

General Syntax:

```
AAVDP <--mode> (inputfile) <-option> [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、--ned、--ked、--ded、--kkd、--dkd、--rdf、--ssf, inputfile 代表输入的晶体模型文件。-option 代表对应运行模式需要的参量标签，其格式采用“-”作为前缀，比如-e、-l 等，value 代表具体的参数值，比如：-e 指定晶体模型原子类型，-l 指定入射波波长 λ 。

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 [2theta_min] [2theta_max] -lp [lorentz_type] -c [c1] [c2] [c3] -
auto/manu -thr [threshold] -o [outputfile] --scherrer -m [mixing_parameter] -d
[scherrer_diameter] -d2t [2theta_bin]
```

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 inputfile (LAMMPS Data 格式或者 VASP 格式)，输出衍射角、衍射强度、归一化衍射强度等信息和相应的衍射图片。其中，参量标签-e 和-dw 分别指定晶体模型文件里的 N 个原子类型（共 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）和对应的特定温度的德拜-沃勒因子，前者无默认值，后者默认为 0.0\AA^2 ，即不计算温度因子；-l 指定入射波波长 λ ，默认为 1.54184\AA ；-2t 指定衍射角 2θ 最小值和最大值，默认分别为 0° 和 180° ；-lp 指定洛伦兹-偏振因子计算类型，0 表示不计算洛伦兹-偏振因子，1 表示仅计算偏振因子，2 表示计算小晶体的洛伦兹-偏振因子，3 表示计算随机晶

粒取向的多晶的洛伦兹-偏振因子，默认洛伦兹-偏振因子计算类型为 3；-c 用于指定倒易空间内三轴方向上的倒易阵点间距，-auto 表示基于晶体模型三轴尺寸的倒数自动计算倒易阵点间距，此时 c_1 、 c_2 、 c_3 是缩放因子，默认为 1.0，-manu 表示手动设置倒易阵点间距，此时 c_1 、 c_2 、 c_3 是倒易阵点间距，默认为 0.1\AA^{-1} ，默认为自动模式；-thr 指定衍射强度阈值，默认为 0.001，表示忽略低于衍射强度最大值的 0.001 比例的衍射强度；-o 指定衍射数据文件，默认为 ./AAVDP.xrd，相应的衍射图片为 ./AAVDP.xrd.png。

若指定--scherrer，激活衍射线扩展操作。其中，参量标签-m 指定 pseudo-Voigt 公式混合参数，0 表示纯高斯曲线，1 表示纯洛伦兹曲线，0-1 之间表示高斯-洛伦兹混合曲线，默认为 0；-d 指定谢乐公式中的晶粒尺寸，默认为 500\AA ；-d2t 指定衍射角区间，默认为 0.01° 。

4.2 中子衍射（Neutron Diffraction）

Mode: ned

Syntax:

```
AAVDP --ned [inputfile] -e [type1] [type2] ... [typeN] -dw [DW1] [DW2] ... [DWN]
-l [lambda] -2t [2theta_min] [2theta_max] -lp [lorentz_type] -c [c1] [c2] [c3] -
auto/manu -thr [threshold] -o [outputfile] --scherrer -m [mixing_parameter] -d
[scherrer_diameter] -d2t [2theta_bin]
```

Description:

该模式用于模拟入射中子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 inputfile（LAMMPS Data 格式或者 VASP 格式），输出衍射

角、衍射强度、归一化衍射强度等信息和相应的衍射图片。其中，参量标签-e 和-dw 分别指定晶体模型文件里的 N 个原子类型（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 \(nist.gov\)](http://www.nist.gov/neutron-scattering-lengths-and-cross-sections)网站）和对应的特定温度的德拜-沃勒因子，前者无默认值，后者默认为 0.0\AA^2 ，即不计算温度因子；-l 指定入射波波长 λ ，默认为 1.54184\AA ；-2t 指定衍射角 2θ 最小值和最大值，默认为 0° 和 180° ；-lp 指定洛伦兹-偏振因子计算类型，0 表示不计算洛伦兹-偏振因子，1 表示仅计算偏振因子，2 表示计算小晶体的洛伦兹-偏振因子，3 表示计算随机晶粒取向的多晶的洛伦兹-偏振因子，默认洛伦兹-偏振因子计算类型为 3；-c 用于指定倒易空间内三轴方向上的倒易阵点间距，-auto 表示基于晶体模型三轴尺寸的倒数自动计算倒易阵点间距，此时 c_1 、 c_2 、 c_3 是缩放因子，默认为 1.0，-manu 表示手动设置倒易阵点间距，此时 c_1 、 c_2 、 c_3 是倒易阵点间距，默认为 0.1\AA^{-1} ，默认为自动模式；-thr 指定衍射强度阈值，默认为 0.001，表示忽略低于衍射强度最大值的 0.001 比例的衍射强度；-o 指定衍射数据文件，默认为./AAVDP.ned，相应的衍射图片为./AAVDP.ned.png。

若指定--scherrer，激活衍射线扩展操作。其中，参量标签-m 指定 pseudo-Voigt 公式混合参数，0 表示纯高斯曲线，1 表示纯洛伦兹曲线，0-1 之间表示高斯-洛伦兹混合曲线，默认为 0；-d 指定谢乐公式中的晶粒尺寸，默认为 500\AA ；-d2t 指定衍射角区间，默认为 0.01° 。

4.3 运动学电子衍射（Kinematic Electron Diffraction）

Mode: ked

Syntax:

```
AAVDP --ked [inputfile] -e [type1] [type2] ... [typeN] -dw [DW1] [DW2] ... [DWN]
-en [voltage] -q [Kmax] -z [z_1] [z_2] [z_3] -t [thickness] -c [c1] [c2] [c3] -auto/manu
-thr [threshold] -o [output_file] --gauss -sig [sigma] -dx [x_bin] --rotate -x [x_1] [x_2]
[x_3] -y [y_1] [y_2] [y_3]
```

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运动学衍射现象，要求输入晶体模型文件 `inputfile`（LAMMPS Data 格式或者 VASP 格式），输出二维衍射矢量、衍射强度、归一化衍射强度等信息和相应的衍射图片。其中，参量标签 `-e` 指定晶体模型文件里的 N 个原子类型（共 98 种，包含 H-Cf 多种元素）和对应的特定温度的德拜-沃勒因子，前者无默认值，后者默认为 0.0\AA^2 ，即不计算温度因子；`-en` 指定入射电子加速电压，默认为 200kV（等同于 0.0251\AA 波长）；`-q` 指定衍射矢量最大波矢值，默认为 1.0\AA^{-1} ；`-z` 指定入射电子束方向，即厄瓦尔德球截面法线方向，默认为 [001]；`-t` 指定厄瓦尔德球截面厚度，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，`-auto` 表示基于晶体模型三轴尺寸的倒数自动计算倒易阵点间距，此时 c_1 、 c_2 、 c_3 是倒易阵点间距的缩放因子，默认为 1.0，`-manu` 表示手动设置倒易阵点间距，此时 c_1 、 c_2 、 c_3 是倒易阵点间距，默认为 0.1\AA^{-1} ；`-thr` 指定衍射强度阈值，默认为 0.001，表示忽略低于衍射强度最大值的 0.001 比例的衍射强度；`-o` 指定衍射数据文件，默认为 `./AAVDP.ked`，相应的衍射图片为 `./AAVDP.ked.png`。

若指定 `--gauss`，激活衍射点模糊操作。其中，参量标签 `-sig` 指定高斯公式的标准差，默认为 0.01\AA^{-1} ；`-dx` 指定衍射图片的 x 轴区间，与 y 轴区间一致，默认为 0.005\AA^{-1} 。

若指定--rotate，激活衍射图片旋转操作。其中参量标签-x 和-y 分别指定衍射图片的 x 轴和 y 轴，默认分别为[100]和[010]。不指定时自动将 x 轴指定为最近邻衍射斑点方向，将 y 轴指定为 x 轴和 z 轴平面的法线方向。

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

Mode: kkd

Syntax:

```
AAVDP --kkd [inputfile] -e [type1] [type2] ... [typeN] -en [voltage] -q [Kmax] -c
[c1] [c2] [c3] -auto/manu -thr [threshold] -o [outputfile]
```

```
AAVDP --kkd [inputfile] -x [x_1] [x_2] [x_3] -y [y_1] [y_2] [y_3] -z [z_1] [z_2]
[z_3] -rx [ratiox] -ry [ratioy] -t [thickness] -px [numpx] -py [numpy] -thr [threshold] -
background [background_color] -o [outputfile] --scale -max [intensity_max] -min
[intensity_min]
```

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，模拟过程分为两步：第一步，要求输入晶体模型文件 inputfile（LAMMPS Data 格式或者 VASP 格式），输出三维衍射矢量、衍射强度、归一化衍射强度等信息。其中，参量标签-e 指定晶体模型文件里的 N 个原子类型（共 98 种，包含 H-Cf 多种元素）和对应的特定温度的德拜-沃勒因子，前者无默认值，后者默认为 0.0\AA^2 ，即不计算温度因子；-en 指定入射电子加速电压，默认为 200kV（等同于 0.0251\AA 波长）；-q 指定衍射矢量最大波矢值，默认为 1.0\AA^{-1} ；-c 用于指定

倒易空间内三轴方向上的倒易阵点间距，**-auto** 表示基于晶体模型三轴尺寸的倒数自动计算倒易阵点间距，此时 c_1 、 c_2 、 c_3 是倒易阵点间距的缩放因子，默认为 1.0，**-manu** 表示手动设置倒易阵点间距，此时 c_1 、 c_2 、 c_3 是倒易阵点间距，默认为 0.1\AA^{-1} ；**-thr** 指定衍射强度阈值，默认为 0.001，表示忽略低于衍射强度最大值的 0.001 比例的衍射强度；**-o** 指定三维衍射数据文件，默认为 ./AAVDP.ked3。第二步，要求输入三维衍射数据文件，其中参量标签 **-x**、**-y** 和 **-z** 指定菊池球三轴方向，分别默认为 [100]、[010] 和 [001]；**-rx** 和 **-ry** 分别指定输出菊池图片占整个菊池半球投影的比例，默认分别 1.0 和 1.0，表示输出整个菊池半球；**-t** 指定菊池线的宽度，默认为 0.2\AA^{-1} ；**-px** 和 **-py** 分别指定菊池图片横轴和纵轴的像素点个数，要求为奇数，默认分别为 501 和 501；**-thr** 指定贡献菊池球面的衍射强度阈值，默认为 0.001，表示忽略低于衍射强度最大值的 0.001 比例的衍射强度；**-background** 指定菊池图片背底颜色，有黑色 (b) 和白色 (w) 两个选项，默认为黑色；**-o** 指定菊池图片数据文件，默认为 ./AAVDP.kkd，和相应的菊池图片 ./AAVDP.kkd.png。

若指定 **--scale**，则激活菊池图片重染色操作，其中，参量标签 **-max** 和 **-min** 分别指定染色的菊池强度最大值和最小值，默认为 10000 和 0。若不指定，则自动采用菊池强度计算中的最大值和最小值。

4.5 动力学电子衍射 (Dynamical Electron Diffraction)

Mode: ded

Syntax:

```
AAVDP --ded [inputfile] -e [type1] [type2] ... [typeN] -dw [DW1] [DW2] ... -en
```

```
[voltage] -q [Kmax] -z [z_1] [z_2] [z_3] -fn [n_1] [n_2] [n_3] -ft [foil_thickness] -
bethe [rg_c1] [rg_c2] [rg_c3] [sg_c] -thr [threshold] -o [outputfile] --gauss -sig
[sigma] -dx [x_bin] --rotate -x [x_1] [x_2] [x_3] -y [y_1] [y_2] [y_3]
```

该模式用于模拟入射电子波与晶体样品相互作用产生的动力学衍射现象，要求输入晶体模型文件 `inputfile`（LAMMPS Data 格式或者 VASP 格式），输出二维衍射矢量、衍射强度、归一化衍射强度等信息和相应的衍射图片。其中，参量标签 `-e` 指定晶体模型文件里的 N 个原子类型（共 98 种，包含 H-Cf 多种元素）和对应的特定温度的德拜-沃勒因子，前者无默认值，后者默认为 0.0\AA^2 ，即不计算温度因子；`-en` 指定入射电子加速电压，默认为 200kV（等同于 0.0251\AA 波长）；`-q` 指定衍射矢量最大波矢值，默认为 1.0\AA^{-1} ；`-z` 指定入射电子束方向，即厄瓦尔德球截面法线方向，默认为 [001]；`-fn` 和 `-ft` 分别指定样品厚度方向和厚度，默认为 [001] 和 100.0\AA ；`-bethe` 指定 Bethe 参数，用于筛选衍射波和区分强弱衍射波，前两个是 $r_g = k_n |s_g| / |U_g|$ 的分区值， r_g 越小，衍射波越强， r_g 小于 `c1`，为强衍射波， r_g 在 `rg_c1` 和 `rg_c2` 之间时，为弱衍射波，大于 `rg_c2` 时，该衍射波被忽略，后两个 `rg_c3` 和 `sg_c` 分别指定 r_g 和 s_g 的截断值，具体详见 3.3.1，因此，`rg_c1 < rg_c2 < rg_c3`，默认值为 4.0、8.0、50.0、1.0；`-thr` 指定衍射强度阈值，默认为 0.001，表示忽略低于衍射强度最大值的 0.001 比例的衍射强度；`-o` 指定衍射数据文件，默认为 `./AAVDP.ded`，相应的衍射图片为 `./AAVDP.ded.png`。

若指定 `--gauss`，激活衍射点模糊操作。其中，参量标签 `-sig` 指定高斯公式的标准差，默认为 0.01\AA^{-1} ；`-dx` 指定衍射图片的 x 轴区间，与 y 轴区间一致，默认为 0.005\AA^{-1} 。

若指定--rotate，激活衍射图片旋转操作。其中参量标签-x 和-y 分别指定衍射图片的 x 轴和 y 轴，默认分别为[100]和[010]。不指定时自动将 x 轴指定为最近邻衍射斑点方向，将 y 轴指定为 x 轴和 z 轴平面的法线方向。

4.6 动力学菊池衍射（Dynamical Kikuchi Diffraction）

Mode: dkd

Syntax:

```
AAVDP --dkd [inputfile] -e [type1] [type2] ... [typeN] -dw [DW1] [DW2] ... [DWN]
-en [voltage] -q [Kmax] -ft [foil_thickness] -bethe [rg_c1] [rg_c2] [rg_c3] [sg_c] -x
[x_1] [x_2] [x_3] -y [y_1] [y_2] [y_3] -z [z_1] [z_2] [z_3] -rx [ratiox] -ry [ratioy] -px
[numpx] -py [numpy] -background [background_color] -o [outputfile] --monte -ome
[omega] -sig [sigma] -ex [Eexit] -dt [dthick] -ne [nume] -np [nump] -seedpath
[randomSeed_path] -o [outputfile] --scale -max [intensity_max] -min [intensity_min]
```

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动力学菊池衍射现象，要求输入晶体模型文件 inputfile（LAMMPS Data 格式或者 VASP 格式）。

其中，参量标签-e 指定晶体模型文件里的 N 个原子类型（共 98 种，包含 H-Cf 多种元素）和对应的特定温度的德拜-沃勒因子，前者无默认值，后者默认为 0.0\AA^2 ，即不计算温度因子；-en 指定入射电子加速电压，默认为 200kV（等同于 0.0251\AA 波长）；-q 指定衍射矢量最大波矢值，默认为 1.0\AA^{-1} ；-ft 分别指定样品厚度，默认 100.0\AA ；-bethe 指定 Bethe 参数，用于筛选衍射波和区分强弱衍

射波，前两个是 $r_g = k_n |s_g| / |U_g|$ 的分区值， r_g 越小，衍射波越强， r_g 小于 $c1$ ，为强衍射波， r_g 在 rg_c1 和 rg_c2 之间时，为弱衍射波，大于 rg_c2 时，该衍射波被忽略，后两个 rg_c3 和 sg_c 分别指定 r_g 和 s_g 的截断值，具体详见 3.3.1，因此， $rg_c1 < rg_c2 < rg_c3$ ，默认值为 4.0、8.0、50.0、1.0；-x、-y 和-z 指定菊池球三轴方向，分别默认为[100]、[010]和[001]；-rx 和-ry 分别指定输出菊池图片占整个菊池半球投影的比例，默认分别 1.0 和 1.0，表示输出整个菊池半球；-px 和-py 分别指定菊池图片横轴和纵轴的像素点个数，要求为奇数，默认分别为 501 和 501；-background 指定菊池图片背底颜色，有黑色（b）和白色（w）两个选项，默认为黑色；-o 指定菊池图片数据文件，默认为./AAVDP.dkd，和相应的菊池图片./AAVDP.dkd.png。

若指定--monte，获取入射电子束生成的背散射电子的能量、空间分布，参与菊池计算。其中参量标签-ome 和-sig 指定样品沿 RD 方向的旋转角和沿 TD 方向的倾斜角，即入射电子的初始方向，分别默认为 0.0°和 75.7°；-ex 指定背散射电子能量的最小值，该值比-en 指定的值要小，默认为 190kV，此时-en 指定的也是入射电子能量；-dt 指定电子入射样品深度步长，该值比-ft 指定的值要小，默认为 10 Å；-ne 指定入射电子数量，默认为 20000；-np 指定电子分布图片边长像素个数，默认为 501，要求为奇数；-o 指定输出电子分布数据文件路径，默认为./AAVDP.mc，相应的图片文件为./AAVDP.mc.png；-seedpath，指定随机数种子文件，默认是当前目录下的 RandomSeeds.data 文件，目前存储在 AAVDP 文件夹下。

若指定--scale，则激活菊池图片重染色操作，其中，参量标签-max 和-min 分别指定染色的菊池强度最大值和最小值，默认为 10000 和 0。若不指定，则

自动采用菊池强度计算中的最大值和最小值。

4.7 径向分布函数 (Radial Distribution Function)

Mode: rdf

Syntax:

```
AAVDP --rdf [inputfile] -r [rmax] -n [nbin] -partial -o [outputfile]
```

Description:

该模式用于计算径向分布函数，要求输入晶体模型文件（LAMMPS Data 格式或者 VASP 格式）。参量标签-r 指定径向分布函数径向半径最大值，默认为 5.0Å；-n 指定径向分布函数半径分区数，默认为 200；-partial 指定是否计算对径向分布函数；-o 指定函数数据文件，默认为./AAVDP.rdf，和相应的函数图片./AAVDP.rdf.i-j.png，其中 i 和 j 指原子类型或任意原子类型*。

4.8 静态结构因子 (Static Structure Factor)

Mode: ssf

Syntax:

```
AAVDP --ssf [inputfile] -q [qmax] -n [nbin] -partial -o [outputfile] --rdf -r [rmax] -n [nbin]
```

Description:

该模式用于计算静态结构因子，要求输入晶体模型文件（LAMMPS Data 格式或者 VASP 格式）。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 指定是否计算对静态结构因子；-o 指定函数数据文件，默认为./AAVDP.ssf，和相应的函数图片./AAVDP.ssf.i-j.png，其中 i 和 j 指原子类型或任意原子类型*。

若指定--rdf，则根据径向分布函数计算静态结构因子。-r 指定径向分布函数径向半径最大值，默认为 5.0\AA ；-n 指定径向分布函数半径分区数，默认为 200。

5 应用实例

5.1 立方 NaCl 和六方 ZnO 晶体 X 射线衍射

这里选取立方 NaCl 和六方 ZnO 作为演示，说明 AAVDP 程序的 X 射线衍射分析功能，衍射分析命令行如下：

```
>>AAVDP --xrd ./exp/xrd/NaCl/NaCl.lmp -e Na Cl -dw 1.72 1.41 -l 1.54056 -2t 20.0
90.0 -o ./exp/xrd/NaCl/NaCl1.xrd

>>AAVDP --xrd ./exp/xrd/NaCl/NaCl.lmp -e Na Cl -dw 1.72 1.41 -l 1.54439 -2t 20.0
90.0 -o ./exp/xrd/NaCl/NaCl2.xrd

>>AAVDP --xrd ./exp/xrd/ZnO/ZnO.vasp -2t 0 80 -o ./exp/xrd/ZnO/ZnO_line.xrd

>>AAVDP --xrd ./exp/xrd/ZnO/ZnO.vasp -2t 0 80 -o ./exp/xrd/ZnO/ZnO.xrd --
scherrer -m 0.5 -d 294 -d2t 0.02
```

选取的 NaCl 空间群为 $Fm\bar{3}m$ ，晶格常数为 5.6407\AA ，测试样品为约 $45\mu\text{m}$ 颗粒尺寸的粉末状晶体，测试条件为室温（290K），X 射线为铜靶的 $K\alpha_1$ 和 $K\alpha_2$ 射线，衍射角步长为 0.05° 。由于 $K\alpha_1$ 和 $K\alpha_2$ 射线波长不同（一般分别为 1.54056

Å和 1.54439Å)， $I - 2\theta$ 易在高角度出现明显双线分离现象，因此最终衍射强度由两者积分强度按照 2:1 计算得到。表 1 给出 NaCl 实验和计算衍射强度的对比情况，可看出 AAVDP 给出与实验基本一致的结果。

表 1 NaCl 实验和计算衍射强度

{hkl}	{111}	{200}	{220}	{311}	{222}	{400}	{331}	{420}	{422}
exp. ^[8]	9.50	100.0	59.57	2.06	17.27	7.05	0.90	17.68	11.18
AAVDP	8.63	100.0	59.74	1.95	17.48	6.97	0.87	16.90	11.42

选取的 ZnO 为六方纤锌矿结构，空间群为 $P6_3mc$ ，由于文献中并未列明晶格常数，因此选取环境条件同样为室温的六方 ZnO 结构^[13]，晶格常数为 3.2500 Å和 5.2600 Å，测试样品为约 294nm 晶粒尺寸的纳米晶，X 射线为铜靶的 $K\alpha$ 射线。由于测试条件为室温，温度影响较小，且氧元素室温的德拜-沃勒因子尚未有明确数值，因此，计算的衍射强度并未计入温度影响。如图 4 所示，可看出 AAVDP 给出与实验基本一致的结果，且晶粒尺寸导致衍射峰的宽化。

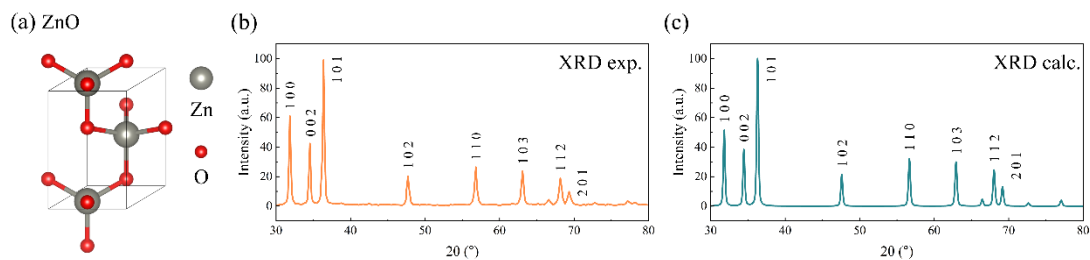


图 4 (a) ZnO 晶体结构；(b) ZnO 实验 X 射线衍射图谱^[14]；(c) ZnO 模拟 X 射线衍射图谱 (AAVDP)

5.2 立方 FeCo 和六方 LaCrGe₃ 晶体中子衍射

这里选取立方 FeCo 和六方 LaCrGe₃ 晶体作为示例，说明 AAVDP 程序的中子衍射分析功能，衍射分析命令行如下：

```
>>AAVDP --xrd ./exp/xrd/FeCo/FeCo.lmp -e Fe Co -dw 0.5500 0.5500 -2t 0 150 -l
1.5400 -o ./exp/xrd/FeCo/FeCo.xrd

>>AAVDP --ned ./exp/ned/FeCo/FeCo.lmp -e Fe Co -dw 0.5500 0.5500 -2t 0 150 -l
1.5400 -o ./exp/ned/FeCo/FeCo.ned

>>AAVDP --xrd ./exp/xrd/FeCo/FeCo_random.lmp -e Fe Co -dw 0.5500 0.5500 -2t 0
150 -l 1.5400 -c 10 10 10 -o ./exp/xrd/FeCo/FeCo_random.xrd

>>AAVDP --ned ./exp/ned/FeCo/FeCo_random.lmp -e Fe Co -dw 0.5500 0.5500 -2t 0
150 -l 1.5400 -c 10 10 10 -o ./exp/ned/FeCo/FeCo_random.ned

>>AAVDP --ned ./exp/ned/LaCrGe3/LaCrGe3.vasp -dw 0.7646 0.1028 0.2458 -2t 10
80 -l 2.43955 -o ./exp/ned/LaCrGe3/LaCrGe3_line.ned

>>AAVDP --ned ./exp/ned/LaCrGe3/LaCrGe3.vasp -dw 0.7646 0.1028 0.2458 -2t 10
80 -l 2.43955 -o ./exp/ned/LaCrGe3/LaCrGe3.ned --scherrer -d 400 -d2t 0.02
```

选取的 FeCo 空间群为 $Pm\bar{3}m$ ，晶格常数为 2.8571\AA ，Fe 和 Co 的德拜-沃勒因子均是 0.5500\AA^2 (290K)，X 射线和中子束波长均选择默认值 1.54184\AA ，以比较 X 射线和中子衍射模拟结果，如图 5。每条衍射线对应特定的晶面指数，中子衍射相比 X 射线衍射能识别更多 FeCo 有序合金的晶面，且晶面的区分度更高。为进一步比较两种衍射技术，基于 FeCo 有序合金生成 FeCo 无序合金，由于 Fe、Co 原子序数相近（分别为 26 和 27），X 射线衍射难以区分 FeCo 有序和无序合金，但是中子衍射可以区分 FeCo 有序和无序合金，可看出中子衍射在合金的化学有序研究上的优势。

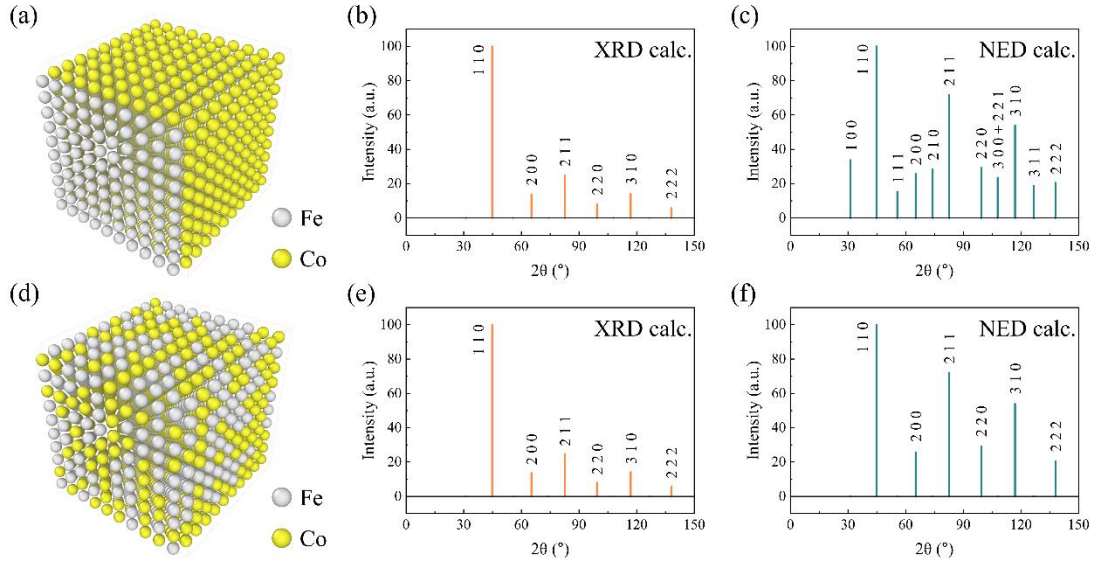


图 5 (a) FeCo 有序合金；(b) FeCo 有序合金模拟 X 射线衍射图谱 (AAVDP)；(c) FeCo 有序合金模拟中子衍射图谱 (AAVDP)；(d) FeCo 无序合金；(e) FeCo 无序合金模拟 X 射线衍射图谱 (AAVDP)；(f) FeCo 无序合金模拟中子衍射图谱 (AAVDP)

选取的 LaCrGe_3 空间群为 $P6_3/mmc$ ，晶格常数为 6.1721\AA 和 5.7421\AA ，测试样品为粉末状晶体，测试条件为低温 (120K)，中子束波长为 2.43955\AA 。 LaCrGe_3 的颗粒尺寸未知，但据图 6b 所示，各个晶面指数的衍射峰存在宽化现象，因此考虑选取一定的颗粒尺寸。如图 6c 所示，可看出 AAVDP 给出与实验基本一致的结果。

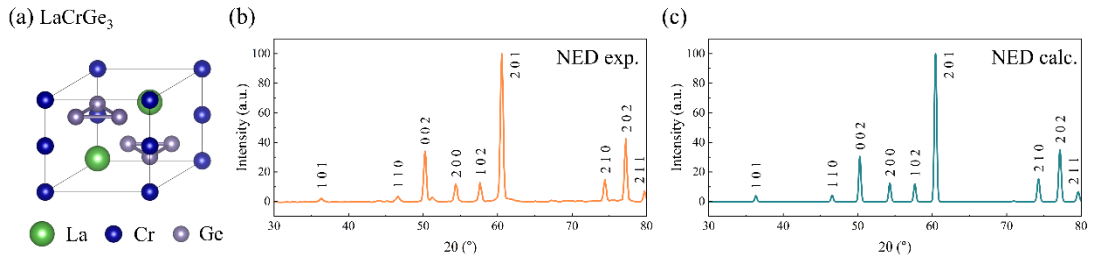


图 6 (a) LaCrGe_3 晶体结构；(b) LaCrGe_3 实验中子衍射图谱^[15]；(c) LaCrGe_3 模拟中子衍射图谱 (AAVDP)

5.3 α -Al₂O₃ 晶体运动学和动力学电子衍射

这里选取 α -Al₂O₃ 晶体材料作为演示，说明 AAVDP 程序的电子衍射分析功能，衍射分析命令行如下：

```
>>AAVDP --ked ./exp/ked/Al2O3/Al2O3.vasp -q 0.8 -
```

```
o ./exp/ked/Al2O3/Al2O3.001.ked --gauss
```

```
>>AAVDP --ked ./exp/ked/Al2O3/Al2O3.vasp -z 2 1 0 -q 0.8 -
```

```
o ./exp/ked/Al2O3/Al2O3.210.ked --gauss -dx 0.00375 -sig 0.0075 --rotate -x 0 0 1 -y
```

```
-0.44721360 0.89442719 0
```

```
>>AAVDP --ded ./exp/ded/Al2O3/Al2O3.vasp -q 0.8 -
```

```
o ./exp/ded/Al2O3/Al2O3.001.ded --gauss
```

```
>>AAVDP --ded ./exp/ded/Al2O3/Al2O3.vasp -z 2 1 0 -fn 2 1 0 -q 0.8 -
```

```
o ./exp/ded/Al2O3/Al2O3.210.ded --gauss -dx 0.00375 -sig 0.0075 --rotate -x 0 0 1 -y
```

```
-0.44721360 0.89442719 0
```

α -Al₂O₃ 俗称刚玉，空间群为 $R\bar{3}c$ ，晶格常数为 4.7589 Å 和 12.9910 Å，图 7 给出了并对比了两种晶带轴[0001]和[10 $\bar{1}$ 0]情况下 α -Al₂O₃ 的模拟和实验衍射花样，可以发现：晶带轴[0001]的模拟和实验衍射花样基本一致；晶带轴[10 $\bar{1}$ 0]模拟衍射花样相比实验衍射花样缺失(003)衍射斑点，(003)衍射斑点是由于二次衍射导致的，强度较小。而运动学和动力学的模拟衍射花样相比，动力学的模拟衍射花样的强度分布更符合实验结果。

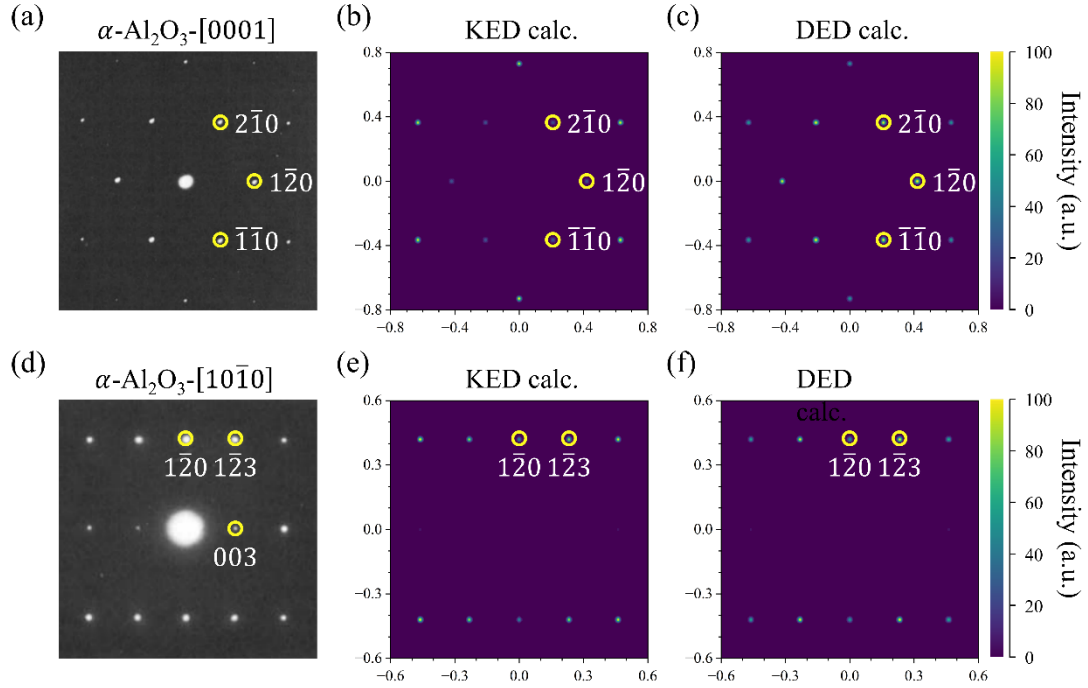


图 7 (a) α - Al_2O_3 实验电子衍射花样，晶带轴为 $[0001]$ ^[16]；(b) α - Al_2O_3 模拟运动学电子衍射花样，晶带轴为 $[0001]$ (AAVDP)；(c) α - Al_2O_3 模拟动力学电子衍射花样，晶带轴为 $[0001]$ (AAVDP)；(d) α - Al_2O_3 实验电子衍射花样，晶带轴为 $[10\bar{1}0]$ ^[16]；(e) α - Al_2O_3 模拟运动学电子衍射花样，晶带轴为 $[10\bar{1}0]$ (AAVDP)；(f) α - Al_2O_3 模拟动力学电子衍射花样，晶带轴为 $[10\bar{1}0]$ (AAVDP)

5.4 $\text{Cu}\{111\}\langle 112\rangle$ 和 $\text{Fe}\{112\}\langle 111\rangle$ 孪晶运动学电子衍射

这里选取 $\text{Cu}\{111\}\langle 112\rangle$ 和 $\text{Fe}\{112\}\langle 111\rangle$ 孪晶模型作为演示，说明 AAVDP 程序的孪晶电子衍射分析功能以及孪晶衍射斑点花样特点，衍射分析命令行如下：

```
>>AAVDP --ked ./exp/ked/Cu_twin/Cu111_twin.lmp -e Cu -z 0 1 0 -
o ./exp/ked/Cu_twin/Cu111_twin.ked --gauss -sig 0.02 --rotate -x 0 0 1 -y 1 0 0
```



```
>>AAVDP --ked ./exp/ked/Fe_twin/Fe112_twin.lmp -e Fe -z 0 1 0 -
o ./exp/ked/Fe_twin/Fe112_twin.ked --gauss -sig 0.02 --rotate -x 0 0 1 -y 1 0 0
```

孪晶衍射斑点花样实际上是由基体衍射斑点花样和绕晶带轴旋转 180° 后的基体衍射斑点花样重叠而成，因此，孪晶衍射斑点花样沿孪生面对应的倒易矢量对称。如图 8 所示， $\text{Cu}\{111\}\langle 112\rangle$ 孪晶衍射斑点花样是由基体晶带轴为 $[110]$ 的衍射斑点花样和绕晶带轴 $[110]$ 旋转 180° 后的斑点花样重叠而成，沿孪生面 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ 对称； $\text{Fe}\{112\}\langle 111\rangle$ 孪晶衍射斑点花样是由基体晶带轴为 $[011]$ 的衍射斑点花样和绕晶带轴 $[011]$ 旋转 180° 后的斑点花样重叠而成，沿孪生面 $(2\bar{1}\bar{1})$ 对称，与实验衍射花样基本一致。

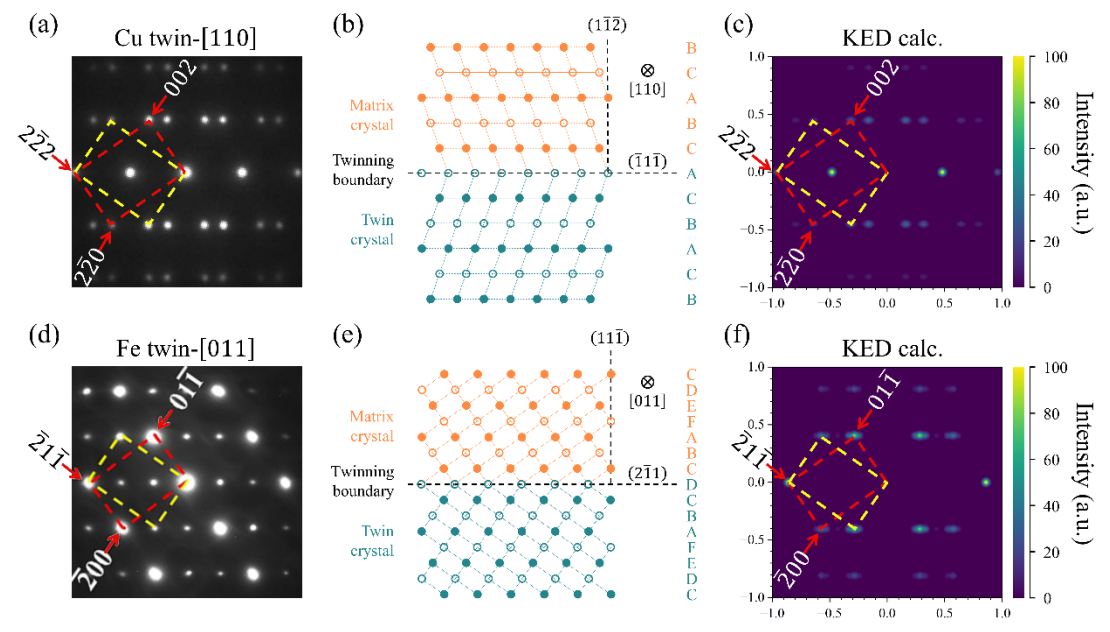


图 8 (a) $\text{Cu}\{111\}\langle 112\rangle$ 孪晶实验电子衍射花样，晶带轴为 $[110]$ ；(b) $\text{Cu}\{111\}\langle 112\rangle$ 孪晶结构；(c) $\text{Cu}\{111\}\langle 112\rangle$ 孪晶模拟电子衍射花样，晶带轴为 $[110]$ (AAVDP)；(d) $\text{Fe}\{112\}\langle 111\rangle$ 孪晶实验电子衍射花样，晶带轴为 $[011]$ ；(e) $\text{Fe}\{112\}\langle 111\rangle$ 孪晶结构；(f) $\text{Fe}\{112\}\langle 111\rangle$ 孪晶模拟电子衍射花样，晶带轴为 $[011]$ (AAVDP)。

5.5 BCC 和 HCP 晶体运动学和动力学菊池衍射

这里选取 BCC 结构（Fe）作为演示，说明 AAVDP 程序的运动学和动力学菊池衍射分析功能，衍射分析命令行如下：

```
>>AAVDP --kkd ./exp/kkd/bcc/bcc.vasp -q 1.5 -o ./exp/kkd/bcc/bcc.ked3

>>AAVDP --kkd ./exp/kkd/bcc/bcc.ked3 -x 0 3 -1 -y 10 -1 -3 -z 1 1 3 -rx 0.25 -ry
0.30 -t 0.4 -px 1000 -py 1200 -o ./exp/kkd/bcc/bcc.113.kkd

>>AAVDP --dkd ./exp/dkd/bcc/bcc.vasp -q 2.0 -x 0 3 -1 -y 10 -1 -3 -z 1 1 3 -rx 0.25 -
ry 0.30 -px 500 -py 600 -o ./exp/dkd/bcc/bcc.113.dkd --monte -
o ./exp/dkd/bcc/bcc.mc
```

菊池花样上每条菊池线对应一满足衍射条件的晶面，因此，菊池线的交点（菊池极）是对应两个晶面的相交线（晶带轴），菊池线的夹角是对应两个晶面的夹角，菊池带的间距是晶面间距的倒数。如图 9 所示，经标定，AAVDP 能给出与实验菊池花样^[17]完全一致的结果，其中，运动学菊池花样主要表现几何分布信息，而动力学菊池花样主要表现强度分布信息。

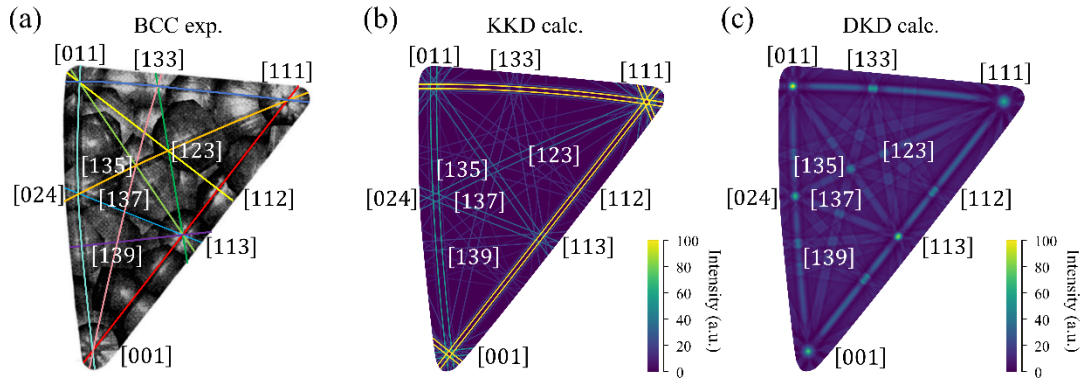


图 9 (a) BCC 实验电子菊池花样；(b) BCC 模拟运动学菊池花样（AAVDP）；(c) BCC 模拟动力学菊池花样（AAVDP）

除了局域的菊池花样，AAVDP 也能给出全局的菊池花样，这里选取 BCC 结构

(Fe) 和 HCP 结构 (Zr) 作为演示, 说明 AAVDP 程序的运动学和动力学全局菊池衍射分析功能, 衍射分析命令行如下:

```
>>AAVDP --kkd ./exp/kkd/bcc/bcc.vasp -q 1.5 -o ./exp/kkd/bcc/bcc.ked3
```

```
>>AAVDP --kkd ./exp/kkd/bcc/bcc.ked3 -t 0.3 -px 4000 -py 4000 -  
o ./exp/kkd/bcc/bcc.kkd
```

```
>>AAVDP --dkd ./exp/dkd/bcc/bcc.vasp -q 1.5 -px 600 -py 600 -o ./exp/dkd/bcc/bcc.  
dkd --monte -o ./exp/dkd/bcc/bcc.mc
```

```
>>AAVDP --kkd ./exp/kkd/hcp/hcp.vasp -q 1.5 -o ./exp/kkd/hcp/hcp.ked3
```

```
>>AAVDP --kkd ./exp/kkd/hcp/hcp.ked3 -t 0.3 -px 2000 -py 2000 -  
o ./exp/kkd/hcp/hcp.kkd
```

```
>>AAVDP --dkd ./exp/dkd/hcp/hcp.vasp -q 1.5 -px 600 -py 600 -  
o ./exp/dkd/hcp/hcp.dkd --monte -o ./exp/dkd/hcp/hcp.mc
```

如图 10 所示, 运动学和动力学全局菊池花样均能体现出 BCC 和 HCP 的对称性信息。

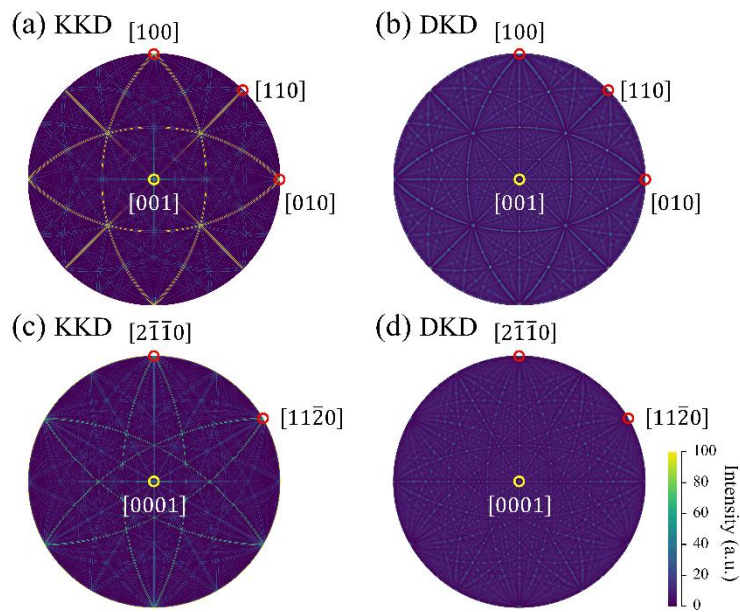


图 10 (a) BCC 结构模拟运动学菊池花样 (AAVDP); (b) BCC 结构模拟动

力学菊池花样（AAVDP）；（c）HCP 结构模拟运动学菊池花样（AAVDP）；
（d）HCP 结构模拟动力学菊池花样（AAVDP）

5.6 FCC 螺位错和刃位错模型运动学菊池衍射

为了揭示缺陷结构对菊池花样的影响，下面以嵌入螺位错（ $1/6[1\bar{1}2]$ ）和刃位错（ $1/2[110]$ ）的 FCC（Fe）晶体模型为例：

```
>>./AAVDP.exe --kkd ./exp/kkd/fcc/fcc.vasp -q 1.5 -o ./exp/kkd/fcc/fcc.ked3

>>./AAVDP.exe --kkd ./exp/kkd/fcc/fcc.ked3 -rx 0.075 -ry 0.075 -t 0.1 -px 1000 -py
1000 -o ./exp/kkd/fcc/fcc.001.kkd --scale -max 350

>>./AAVDP.exe --kkd ./exp/kkd/fcc/fcc.ked3 -x 0.00000000 0.47609129 -0.33664738
-y 0.00000000 0.33664738 0.47609129 -z 1 0 0 -rx 0.075 -ry 0.075 -t 0.1 -px 1000 -
py 1000 -o ./exp/kkd/fcc/fcc.100.kkd --scale -max 350

>>./AAVDP.exe --kkd ./exp/kkd/fcc/fcc.ked3 -x 0 0 1 -y 1 0 0 -z 0 1 0 -rx 0.075 -ry
0.075 -t 0.1 -px 1000 -py 1000 -o ./exp/kkd/fcc/fcc.010.kkd --scale -max 130

>>./AAVDP.exe --kkd ./exp/kkd/fcc_edge/edge.vasp -q 1.5 -
o ./exp/kkd/fcc_edge/edge.ked3

>>./AAVDP.exe --kkd ./exp/kkd/fcc_edge/edge.ked3 -rx 0.075 -ry 0.075 -t 0.1 -px
1000 -py 1000 -o ./exp/kkd/fcc_edge/edge.001.kkd --scale -max 350

>>./AAVDP.exe --kkd ./exp/kkd/fcc_edge/edge.ked3 -x 0.00000000 0.47609129 -
0.33664738 -y 0.00000000 0.33664738 0.47609129 -z 1 0 0 -rx 0.075 -ry 0.075 -t 0.1
```

```

-px 1000 -py 1000 -o ./exp/kkd/fcc_edge/edge.100.kkd --scale -max 350

>>./AAVDP.exe --kkd ./exp/kkd/fcc_edge/edge.ked3 -x 0 0 1 -y 1 0 0 -z 0 1 0 -rx
0.075 -ry 0.075 -t 0.1 -px 1000 -py 1000 -o ./exp/kkd/fcc_edge/edge.010.kkd --scale -
max 130

>>./AAVDP.exe --kkd ./exp/kkd/fcc_screw/screw.vasp -q 1.5 -
o ./exp/kkd/fcc_screw/screw.ked3

>>./AAVDP.exe --kkd ./exp/kkd/fcc_screw/screw.ked3 -rx 0.075 -ry 0.075 -t 0.1 -px
1000 -py 1000 -o ./exp/kkd/fcc_screw/screw.001.kkd --scale -max 350

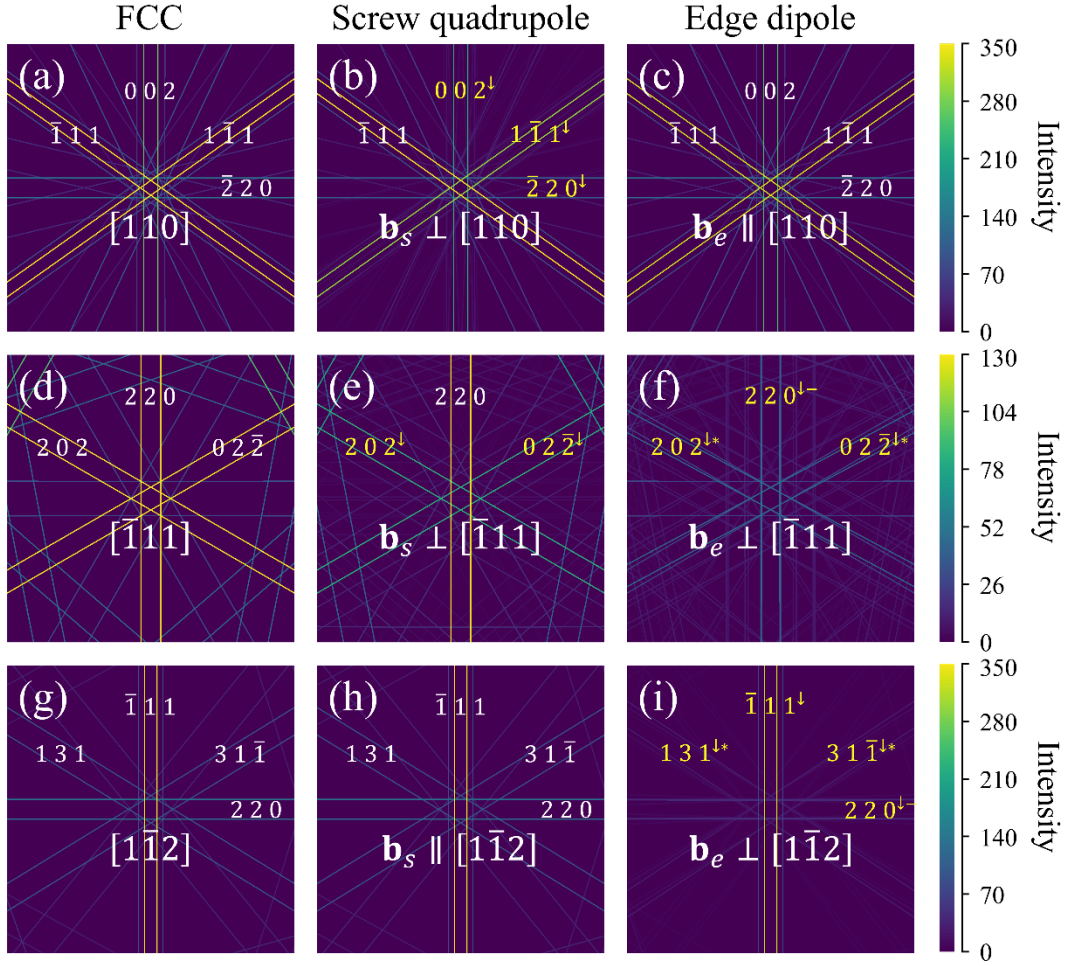
>>./AAVDP.exe --kkd ./exp/kkd/fcc_screw/screw.ked3 -x 0.00000000 0.47609129 -
0.33664738 -y 0.00000000 0.33664738 0.47609129 -z 1 0 0 -rx 0.075 -ry 0.075 -t 0.1
-px 1000 -py 1000 -o ./exp/kkd/fcc_screw/screw.100.kkd --scale -max 350

>>./AAVDP.exe --kkd ./exp/kkd/fcc_screw/screw.ked3 -x 0 0 1 -y 1 0 0 -z 0 1 0 -rx
0.075 -ry 0.075 -t 0.1 -px 1000 -py 1000 -o ./exp/kkd/fcc_screw/screw.010.kkd --scale
-max 130

```

如图 11 所示，与 FCC 模型的菊池花样相比，螺位错模型在与螺位错 $1/6[1\bar{1}2]$ 垂直的晶带轴 $[110]$ 和 $[\bar{1}11]$ 下的菊池花样有变化，其中，除了 $(\bar{1}11)$ 和 (220) 晶面的菊池带维持不变，其它晶面的菊池带存在强度下降的现象；刃位错模型在与刃位错 $1/2[110]$ 垂直的晶带轴 $[\bar{1}11]$ 和 $[1\bar{1}2]$ 下的菊池花样有变化且所有主要菊池带均存在强度下降的现象，其中，由于刃位错的插入实际上是一个 (110) 原子面的缺失，因此 (220) 晶面的菊池带存在间距的细微的缩小，除此之外，与 (110) 晶面不垂直亦不平行的晶面的菊池带则以菊池极为中心在一个小角

度范围内出现新的菊池带，造成远离菊池极的区域边界逐渐模糊。菊池花样的变化在一定程度上反映螺位错和刃位错对完美晶体造成的原子级影响。



↓表示菊池带强度下降，-表示菊池带间距下降，*表示菊池带远离菊池极的区域边界逐渐模糊

图 11 (a) FCC 模型模拟电子菊池花样，晶带轴为 $[110]$ (x 轴) (AAVDP)；
 (b) FCC 螺位错模型模拟电子菊池花样，晶带轴为 $[110]$ (x 轴) (AAVDP)；
 (c) FCC 刃位错模型模拟电子菊池花样，晶带轴为 $[110]$ (x 轴) (AAVDP)；
 (d) FCC 模型模拟电子菊池花样，晶带轴为 $[\bar{1}11]$ (y 轴) (AAVDP)； (e)
 FCC 螺位错模型模拟电子菊池花样，晶带轴为 $[\bar{1}11]$ (y 轴) (AAVDP)； (f)
 FCC 刃位错模型模拟电子菊池花样，晶带轴为 $[\bar{1}11]$ (y 轴) (AAVDP)； (g)

FCC 模型模拟电子菊池花样，晶带轴为 $[1\bar{1}2]$ （z 轴）（AAVDP）；（h）FCC

螺位错模型模拟电子菊池花样，晶带轴为 $[1\bar{1}2]$ （z 轴）（AAVDP）；（i）

FCC 刃位错模型模拟电子菊池花样，晶带轴为 $[1\bar{1}2]$ （z 轴）（AAVDP）

5.7 Cu 和 Cu50Zr50 熔液和非晶径向分布函数

这里选取 Cu 非晶和熔液以及 Cu50Zr50 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。

```
>>AAVDP --rdf ./exp/rdf/Cu_glass/Cu_glass.lammps -r 8 -n 160 -
```

```
o ./exp/rdf/Cu_glass/Cu_glass.rdf
```

```
>>AAVDP --rdf ./exp/rdf/Cu_liquid/Cu_liquid.lammps -r 8 -n 160 -
```

```
o ./exp/rdf/Cu_liquid/Cu_liquid.rdf
```

```
>>AAVDP --rdf ./exp/rdf/CuZr/Cu50Zr50.liquid.lammps -r 10 -n 100 -partial -
```

```
o ./exp/rdf/CuZr/Cu50Zr50.liquid.rdf
```

图 12 给出了 Cu 非晶和熔液的径向分布函数对比情况，可以看出，AAVDP 能够给出非晶和熔液的特征，Cu 非晶和熔液第一峰的位置基本一致，但前者相比后者峰更高更窄；Cu 非晶第二峰是劈裂峰，Cu 熔液第二峰是馒头峰。

图 13 给出了 Cu50Zr50 熔液由 OVITO 和 AAVDP 分别计算的 Cu-Zr 对分布函数，验证了 AAVDP 的计算结果的正确。

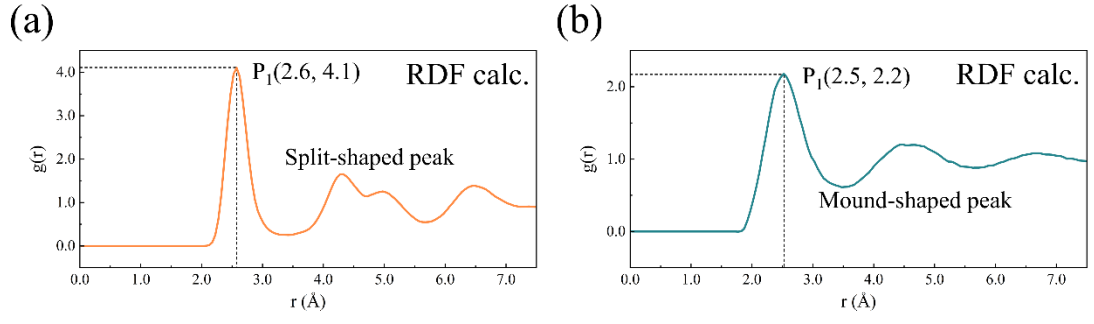


图 12 (a) Cu 非晶模拟径向分布函数 (AAVDP)； (b) Cu 熔液模拟径向分布函数 (AAVDP)

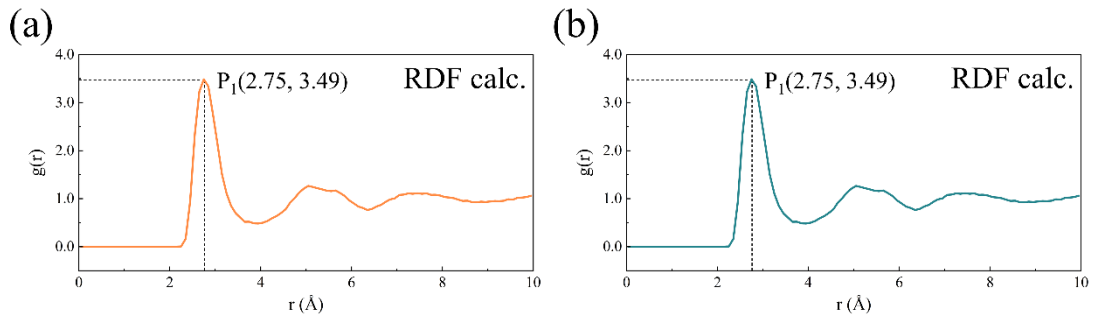


图 13 (a) Cu50Zr50 熔液模拟 Cu-Zr 对分布函数^[18] (OVITO)； (b) Cu50Zr50 熔液模拟 Cu-Zr 对分布函数 (AAVDP)

5.8 Cu 和 Cu50Zr50 熔液和非晶静态结构因子

这里选取 Cu 非晶和熔液以及 Cu50Zr50 熔液作为演示，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。

```
>>AAVDP --ssf ./exp/ssf/Cu_glass/Cu_glass.lammps -q 8 -n 160 -
o ./exp/ssf/Cu_glass/Cu_glass.ssf --rdf -r 7.5 -n 150

>>AAVDP --ssf ./exp/ssf/Cu_liquid/Cu_liquid.lammps -q 8 -n 160 -
o ./exp/ssf/Cu_liquid/Cu_liquid.ssf --rdf -r 7.5 -n 150
```



```
>>AAVDP --ssf ./exp/ssf/CuZr/Cu50Zr50.liquid.lammps -q 10 -n 100 -partial -
o ./exp/ssf/CuZr/Cu50Zr50.liquid.ssf
```

图 14 给出了 Cu 非晶和熔液的静态结构因子对比情况，可以看出，AAVDP 能够给出非晶和熔液的特征，Cu 非晶和熔液第一峰的位置基本一致，但前者相比后者峰更高更窄；Cu 非晶第二峰是劈裂峰，Cu 熔液第二峰是馒头峰。除此之外，静态结构因子在第一峰前存在预峰，该特征在非晶中更明显。

图 15 给出了 Cu50Zr50 熔液由前人和 AAVDP 分别计算的 Cu-Zr 对静态结构因子，总体趋势和特征点基本一致，验证了 AAVDP 的计算结果的正确。

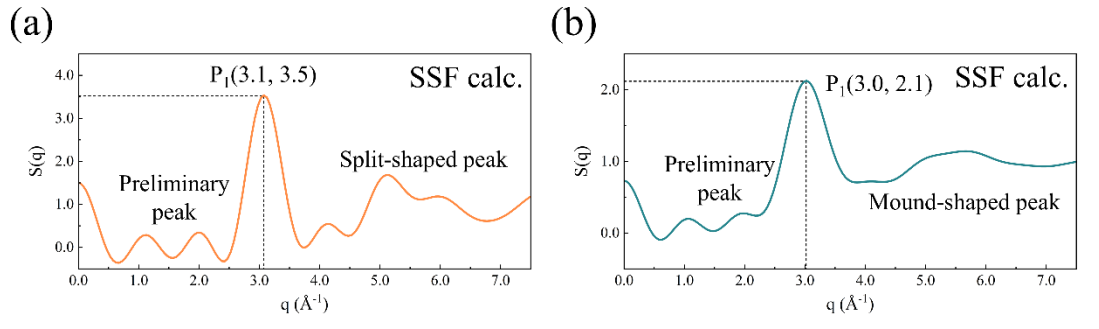


图 14 (a) Cu 非晶模拟静态结构因子 (AAVDP)； (b) Cu 熔液模拟静态结构因子 (AAVDP)

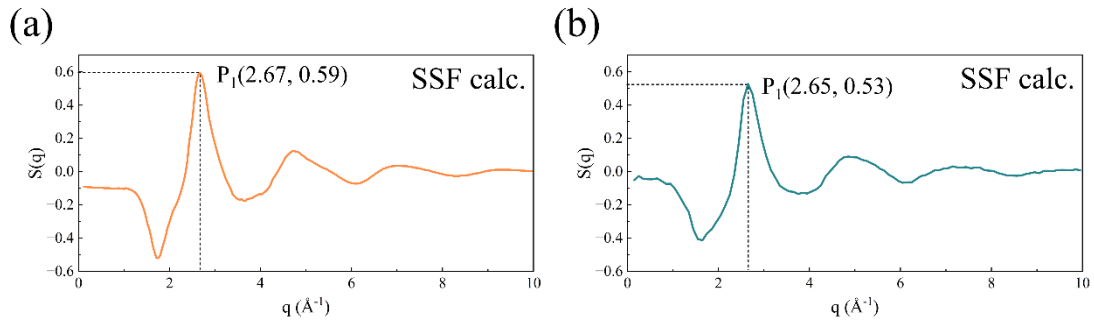


图 15 (a) Cu-Zr 熔液模拟 Cu-Zr 对静态结构因子^[12] (武振伟、汪卫华等人)；
(b) Cu-Zr 熔液模拟 Cu-Zr 静态结构因子 (AAVDP)

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] Graef M D, McHenry M E. Structure of Materials: An Introduction to Crystallography, Diffraction and Symmetry[A]. 2004.
- [5] Coleman S P, Spearot D E, Capolungo L. Virtual diffraction analysis of Ni [010] symmetric tilt grain boundaries[J]. MODELLING AND SIMULATION IN MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING, Bristol: IoP Publishing Ltd, 2013, 21(5): 055020.
- [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] Weickenmeier A, Kohl H. Computation of absorptive form factors for high-energy electron diffraction[J]. Acta Crystallographica Section A Foundations of Crystallography, INTERNATIONAL UNION OF CRYSTALLOGRAPHY, 1991, 47(5): 590–597.
- [11] 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.
- [12] 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.
- [13] Akyol M, Ekicibil A, Firat T, Kiymac 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, New York: Springer, 2013, 26(7): 2439–2445.
- [14] Angelin M D, Rajkumar S, Merlin J P, Xavier A R, Franklin M, Ravichandran A T. Electrochemical investigation of Zr-doped ZnO nanostructured electrode material for high-performance supercapacitor[J]. Ionics, 2020, 26(11): 5757–5772.
- [15] Cadogan J M, Lemoine P, Slater B R, Mar A, Avdeev M. Neutron Diffraction Study of the Hexagonal Perovskite-Type Compound LaCrGe_3 [J]. Solid State Phenomena, Trans Tech Publications Ltd, 2013, 194: 71–74.
- [16] 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.

[17]杨成超, 陈亮维, 骆婉君, 梁琦, 宋宏远, 刘斌, 虞澜. 电子背散衍射花样的数学特征[J]. 人工晶体学报, 2022, 51(8): 1437–1444.

[18]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).