

## 目次

1. Overview.....	2	9. Spot ID.....	21
1.1. License.....	2	7.1. Main area.....	21
1.2. 必要/推奨動作環境.....	2	7.2. Optics.....	21
1.3. ReciPro の特徴.....	2	7.3. Spot.....	21
2. Main window.....	3	7.4. Index.....	22
2.1. File menu.....	3	10. Powder diffraction.....	23
2.2. Rotation control.....	4	11. Crystal database.....	24
2.3. Crystal List.....	4	11.1. Table.....	24
2.4. Crystal Information.....	5	11.2. Search options.....	24
2.5. Functions.....	5	Appendix.....	25
3. Rotation geometry.....	6	A.1. ReciPro における座標系の定義.....	25
3.1. ReciPro coordinate system (ZXZ).....	6	A.2. Crystal diffraction における座標系の定義.....	25
3.2. Experimental coordinate system.....	7	A.3. Principle of Bethe method.....	27
3.3. Link.....	7	A.4. Principle of HRTEM simulation.....	27
4. Structure Viewer.....	8		
4.1. Main area.....	8		
4.2. File menu.....	8		
4.3. Tab menu.....	8		
4.4. Toolbar.....	11		
5. Stereonet.....	12		
5.1. Main area.....	12		
5.2. File menu.....	12		
5.3. Mode.....	12		
5.4. Indices.....	12		
5.5. タブメニュー.....	12		
6. Crystal diffraction.....	13		
6.1. Main area.....	13		
6.2. File menu.....	13		
6.3. Monitor / Detector geometry/ Reset center.....	13		
6.3. Tab menu.....	13		
6.4. Spot property.....	14		
6.5. Toolbar.....	16		
6.6. Detector geometry.....	16		
6.7. CBED setting.....	16		
6.8. Diffraction spot information.....	17		
7. HRTEM simulation.....	18		
7.1. Main area.....	18		
7.2. File menu.....	18		
7.3. Image mode.....	18		
7.4. Sample property.....	18		
7.5. Optical property.....	18		
7.6. Simulation property.....	19		
7.7. Appearance.....	19		
8. TEM ID.....	20		
8.1. TEM condition.....	20		
8.2. Photo1, 2, 3.....	20		

## 1. Overview

ReciPro は、結晶構造の情報から、様々な結晶学的計算や電子回折、X 線回折、高分解能像などをシミュレーションしたり解析したりするソフトウェアです。

ご意見やご要望はメール ([seto@crystal.kobe-u.ac.jp](mailto:seto@crystal.kobe-u.ac.jp))あるいは GitHub の Issue (<https://github.com/seto77/ReciPro/issues>)でお知らせ下さい。

### 1.1. License

本ソフトウェアは MIT ライセンスの下で配布しています (<https://github.com/seto77/ReciPro/blob/master/LICENSE.md>)。下記の条件を受け入れていただけるのであれば、誰でも自由に無料で、このソフトウェアを使っていただくことができます。

- このソフトウェアをコピーして使ったり、配布したり、変更を加えたり、変更を加えたものを配布したり、商用利用したり、有料で販売したり、なんにでも自由につかってください。
- 再配布する場合は、このソフトウェアの著作権とこのライセンスの全文を、ソースコードの中やソースコードに同梱したライセンス表示用の別ファイルなどに掲載してください。
- このソフトウェアにはなんの保証もついていません。たとえば、このソフトウェアを利用したことで何か問題が起きたとしても、作者はなんの責任も負いません。

### 1.2. 必要/推奨動作環境

ReciPro が動作するための必要環境は、

- .Net Desktop Runtime 6 以上が動作する Windows OS
- OpenGL 1.3 以上に対応したグラフィックス<sup>1</sup>

です。.Net Desktop Runtime 6 は、[こちら](#)のページからインストールすることが出来ます。

また、ReciPro の機能の中には、大きな計算リソースを必要とするものがあります。速度向上のために、できる限りマルチスレッド化や GPU 利用を行っています。快適な使用のためには、以下のスペックを持つような計算能力の高いコンピュータの使用を推奨します。

- Windows 11
- 16GB 以上のメモリ
- 8 コア以上の CPU (特に電子回折動力学計算を行う時)
- OpenGL 1.3 に対応した外付け GPU (特に Structure Viewer を使う時)

### 1.3. ReciPro の特徴

#### Full GUI

ReciPro の全ての操作はグラフィカルなインターフェースを通じて行われます。ファイルの入出力のほとんどはマウスによるドラッグドロップに対応しています。

## 結晶リスト

ReciPro では複数の結晶をまとめて取り扱うことが出来ます。結晶毎にファイルを作ったたくさんのウィンドウを立ち上げるような必要はありません。

また、同一作者が開発しているソフトウェア "CSManager"<sup>2</sup>を使えば、膨大な数の結晶構造を簡単にインポートすることができます。

## 空間群

ReciPro は空間群データベースを内蔵しており、International Tables for Crystallography Volume A (以降、この文書では ITA と略します)に含まれる 230 個の空間群に加えて、軸の変換を考慮したサブセット(530 個)の空間群(Hall symbol)の対称要素、ワイコフ位置、消滅測などが利用できます<sup>3</sup>。

## 原子情報

ReciPro は原子番号 1(H)から 98 (Cf)までの全ての元素に関する原子価や半径、特性 X 線のエネルギー、同位体比に関する情報などを内蔵しています。また、X 線と電子線に対する原子散乱因子の近似計算に必要なパラメータや、中性子に対する原子の散乱長に関するパラメータも内蔵しています。

## フレキシブルな結晶方位の設定

ReciPro では、結晶の方位を晶体軸指数や結晶面指数で設定することもできますし、マウスで任意の方位に回転することもできます。また、結晶の回転状態は結晶構造やステレオネット、あるいは単結晶回折のシミュレーションの際に、同期的に使用されます。

<sup>1</sup> OpenGL は、グラフィックスハードウェア向けのライブラリです。現在利用されているほとんどの PC は OpenGL 1.3 に対応していますが、残念ながら以下のケースでは OpenGL 1.3 を利用できない場合があります。

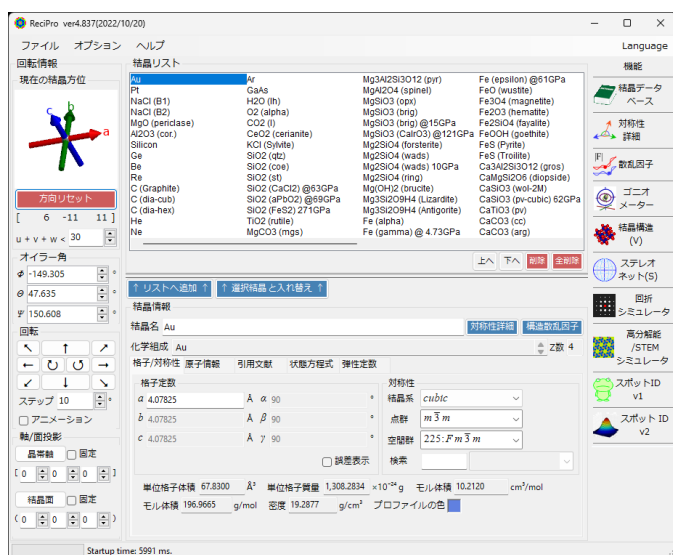
- Mac OS から Parallel desktop 環境で Windows を起動している場合
- Remote Desktop で Windows を利用している場合

なお、OpenGL 1.3 が利用できない場合でも ReciPro は利用できますが、OpenGL 描画関連の機能は無効となります。

<sup>2</sup> CSManager は <https://github.com/seto77/CSManager/releases/latest> からダウンロードできます。

<sup>3</sup> 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。

## 2. Main window



ReciPro が正常に起動する<sup>4</sup>と、上のようなウィンドウが表示されます。このウィンドウで計算対象の結晶を選択し、その結晶を回転させ、さらに様々な機能呼び出します。

このウィンドウは大きく分けて

- File menu (最上部)
- Rotation control (左部)
- Crystal List (中央上部)
- Crystal Information (中央下部)
- Functions (右部)

から構成されています。以下に詳細を説明します。

### 2.1. File menu

#### File

File	Option	Help
Read crystal list (as a new list)		
Read crystal list (and add to the present data)		
Read initial crystal list		
Save crystal list		
Export selected crystal to CIF format		
Clear crystal list		
Exit		

#### Read crystal list (as new list)

結晶リストファイル(拡張子 xml)を新たに読み込みます。すでに読み込まれていた結晶リストは削除されます。

#### Read crystal list (and add to the present data)

結晶リストファイル(拡張子 xml)を読み込みます。読み込んだ結晶リストは現在のリストの後に付け加えられます。

#### Read initial crystal list

起動時に読み込んだ結晶リストを再度読み込みます。

#### Save crystal list

結晶リストを保存します。

#### Export the selected crystal to CIF format

現在選択している結晶を CIF フォーマットとして保存します。

#### Clear crystal list

現在の結晶リストを全て削除します。

#### Exit

アプリケーションを終了します。

### Option

Option	Help
<input checked="" type="checkbox"/> Tool Tip	
Reset registry (after restart of ReciPro)	
ngen compile	
Disable OpenGL (needs restart)	

#### Tool tip

チェックするとツールチップを表示します。

#### Reset registry (after restart of ReciPro)

再起動時にレジストリをリセットします。レジストリには、ウィンドウサイズや波長、カメラ長などの情報が格納されています。何らかの原因によってソフトウェアの動作が不安定になった場合は、レジストリのリセットが有効かもしれません。

#### ngen compile

プログラムをあらかじめコンパイルすることによって、起動時間が速くなります。ただし、その効果はあまり大きくありません。

#### Disable OpenGL (needs restart)

チェックすると、OpenGL 機能をオフにします。ReciPro は OpenGL 1.3 以降の機能を使用して、三次元的な描画を行っています。ただし古い PC をお使いの場合や、リモートデスクトップ環境、あるいは Mac 上での Windows エミュレーション環境の場合は、OpenGL のバージョンが 1.3 未満かもしれません。そのような場合は、この項目をチェックしてください。

### Help

Help
About Me
Program Updates
Hint
Help (web)

#### About me

コピーライトやバージョンアップ履歴、マニュアル(このページ)を表示します。

#### Program updates

新しいバージョンがリリースされているかをチェックし、リリースされている場合はアップデートを行います。

#### Hint

Deprecated.

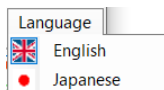
#### Help (PDF)

このページを表示します。

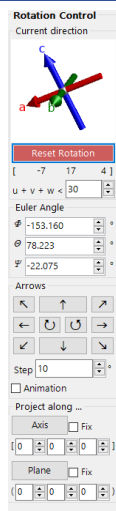
<sup>4</sup> 起動時に空間群や原子に関する情報をロードするため、起動には若干の時間がかかります。。

## Language

言語を切り替えます。現在は英語と日本語のみ対応しています。切り替え後は、再起動が必要です。



## 2.2. Rotation control

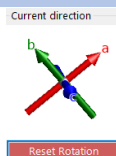


このコントロールは、選択している結晶の回転状態を表示/設定します。

### 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<sup>5</sup>。

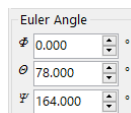
### Zone axis

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<sup>6</sup>。

### 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

- $\Psi$ : Z 軸回転
  - $\theta$ : X 軸回転
  - $\Phi$ : Z 軸回転
- と定義し、 $\Psi$ ,  $\theta$ ,  $\Phi$  の順に回転操作を施します。座標系

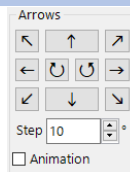


についての詳しい説明は [3. Rotation geometry](#) や [Appendix](#) をご覧ください。

### Arrows

矢印ボタンをおすと、矢印の方向に角度 Step 分だけ回転します。

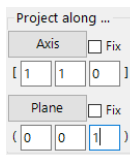
また、“Animation”をチェックした場合は、指定した回転速度で結晶が連続的に回転します。



### Project along...

晶帯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、指定した晶帯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。<sup>7</sup>



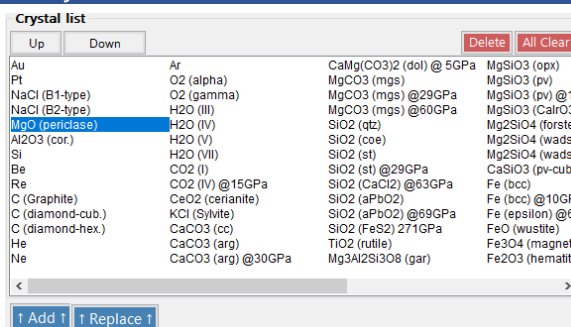
#### Axis

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<sup>8</sup>。

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。

<sup>5</sup> 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。

<sup>6</sup> 例えば、[0 0 1] 晶帯軸からほんのわずかに結晶が回転した場合、その晶帯軸は[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。

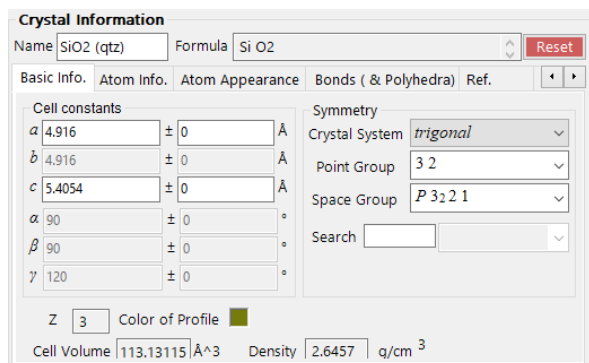
<sup>7</sup> この機能は、撮影した写真中の回折スポットの一つが明確に指数付けできたとき、威力を発揮します。なお、Fix をチェックして晶帯軸/結晶面の方向が固定されるのは、マウスや矢印による回転操作の場合のみです。オイラー角が直接入力された場合はその方位は固定されません。

<sup>8</sup> 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。

## 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できます。

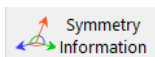
結晶に何らかの変更を加えた場合は、必ず“Add”あるいは“Replace”ボタンを押してください。押さなかった場合その情報は Crystal list 中に保存されず、変更内容は失われてしまいます。

この項目の説明は長いので、[別のページ](#)で詳しく説明します。

## 2.5. Functions

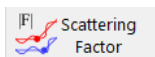
### Symmetry information

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](#)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](#)で説明します。



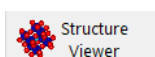
### Rotation geometry

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](#) 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](#) の項を参照してください。



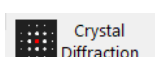
### Stereonet

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](#) の項を参照してください。



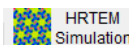
### Crystal diffraction

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](#) の項を参照してください。



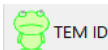
## HRTEM simulation

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](#) の項を参照してください。



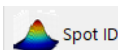
## TEM ID

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](#) の項を参照してください。



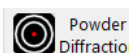
## Spot ID

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](#) の項を参照してください。



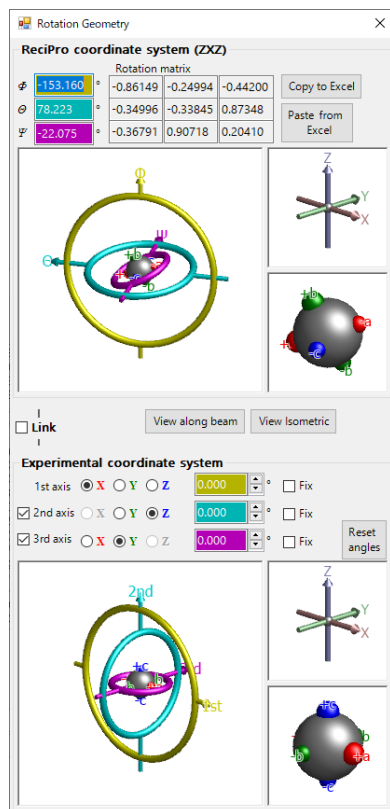
## Powder diffraction

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](#) の項を参照してください。





### 3. Rotation geometry

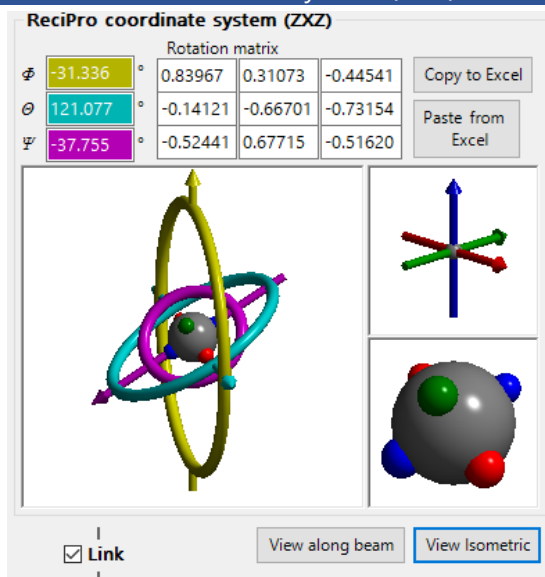


このウィンドウは、結晶の回転状態を  $3 \times 3$  行列で表現したり、異なるオイラー座標系に変換したりする機能を提供します。

Reciprocal では  $\Psi$ ,  $\theta$ ,  $\Phi$  の三つのオイラー角を Z-X-Z の順に作用させて、結晶の回転状態を表現します。ただしこの表現は、必ずしも実際の光学系におけるゴニオメーターの回転軸と一致しません。

Reciprocal におけるオイラー角を任意の定義のオイラー角に変換することによって、実験室でのゴニオメーターの調整をサポートします。

#### 3.1. Reciprocal coordinate system (ZXZ)



“Rotation geometry” 画面の上半分は、“Reciprocal 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  $\Phi$ ,  $\theta$ ,  $\Psi$  の値は Main window で設定されたオイラー角と同期しています。 $\Psi$ ,  $\theta$ ,  $\Phi$  の値を変更したい場合は Main Window 側からおこなってください。

“Rotation matrix” の部分には、現在の回転状態に対応する  $3 \times 3$  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  $\Phi$  の回転軸に対応しており、ゴニオメーターにおける上位(1<sup>st</sup>)の回転軸になります。水色の矢印は  $\theta$  に対応する中位(2<sup>nd</sup>)の回転軸で、ピンク色の矢印は  $\Psi$  に対応する下位(3<sup>rd</sup>)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<sup>9</sup>。 $\Phi$ ,  $\theta$ ,  $\Psi$  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ください。Reciprocal 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

$3 \times 3$  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  $3 \times 3$  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。

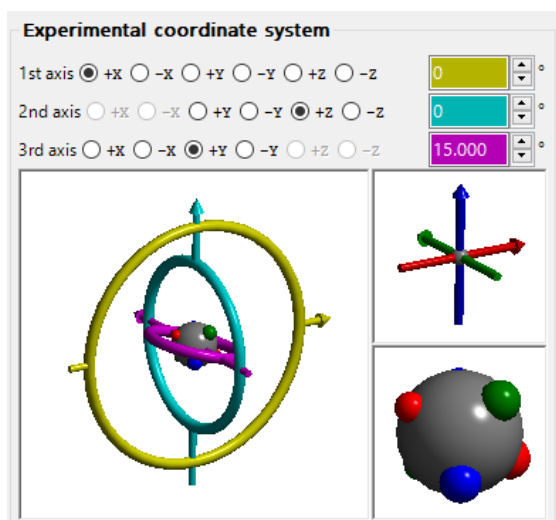
#### View along beam / isometric

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<sup>10</sup>。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うことにご注意ください。

<sup>9</sup> 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。

<sup>10</sup> Reciprocal 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。

### 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。

#### 1<sup>st</sup>, 2<sup>nd</sup>, 3<sup>rd</sup> axes

ゴニオメーターの回転軸は、上位(1<sup>st</sup>)、中位(2<sup>nd</sup>)、下位(3<sup>rd</sup>) についてそれぞれ  $\pm X$ ,  $\pm Y$ ,  $\pm Z$  の中から選択してください<sup>11</sup>。選択を切り替えると、OpenGL window のグラフィクスもそれに応じて変化します。

それぞれの回転軸に対するオイラー角は、黄色、水色、ピンク色のテキストボックスに表示されます。また、値を直接入力することも出来ます。

### 3.3. Link

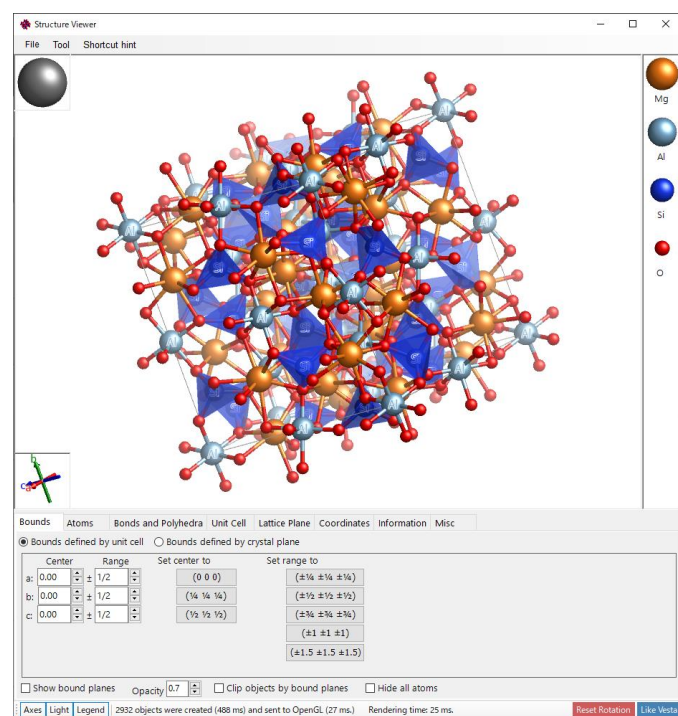
これは、“Rotation geometry”の大きな機能です。“Link”をチェックすると、“ReciPro coordinate system”と “Experimental coordinate system”の間で、物体の方位が一致するように互いのオイラー角を調整します。すなわち、ReciPro とは異なる定義の回転軸で表現されるゴニオメーターに対して、そのオイラー角の情報を提供します。



例えば実験室のゴニオメーターを調整し、ある結晶の **a** 軸を **X** 線入射方向、**b** 軸を水平方向に一致させたとします。そして Experimental coordinate system でその実験室のゴニオメーターのオイラー角を入力して下さい。さらに(Link のチェックを外した状態で、) ReciPro の Main window で結晶を適当に回転させ、スクリーン垂直方向(ビーム方向)を **a** 軸、横方向を **b** 軸と一致させてください。この状態で Link をチェックすると、それ以降 Main window で結晶を別の方位に向けたとき、その方位を実現するゴニオメーターの角度が表示されるということになります。

<sup>11</sup> ReciPro で採用しているゴニオメーターは、1<sup>st</sup>: +Z, 2<sup>nd</sup>: +X, 3<sup>rd</sup>: +Z に対応しています。

## 4. Structure Viewer



Structure viewer は、Main window で選択した結晶の構造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。

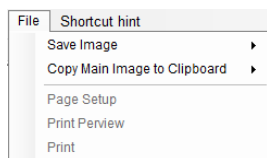
#### マウス操作

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できます。

#### Bounds defined by cell

☒ Bounds defined by unit cell ☐ Bounds defined by crystal plane

	Center	Range	Set center to	Set range to
a:	0.00	± 0.50	(0 0 0)	(±1/2 ±1/2 ±1/2)
b:	0.00	± 0.50	(1/4 1/4 1/4)	(±3/4 ±3/4 ±3/4)
c:	0.00	± 0.50	(1/2 1/2 1/2)	(±1 ±1 ±1)

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

☐ Bounds defined by unit cell ☒ Bounds defined by crystal plane

	h	k	l	Equivalency	Multiples of d	Distance (Å)	Color
<input checked="" type="checkbox"/>	1	1	1	<input checked="" type="checkbox"/>	1.000	0.663	Green

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 

h	k	l
1	1	1

☒ Equivalency

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<sup>12</sup>。

<sup>12</sup> 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。



## 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、 $d \times 1.5 = 9.949 \text{ Å}$ )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 ☐ Show bound planes Opacity 0.7  
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 ☐ Clip objects by bound planes 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, ☐ Hide all atoms bonds, polyhedra を非表示にします<sup>13</sup>。

## 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

Label	Element	X	Y	Z	Occ.	Multi.	Wyck. Let.	Site Sym.
MgX1	12: Mg	1/2	1/2	1/4	1	8	b	2.22
MgX2	12: Mg	5/8	1/4	3/8	1	32	g	1
MgY	12: Mg	1/2	1/4	1/8	0.26	16	c	-1

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

Element & Position

Origin shift

Appearance

Label: MgX1

Element: 12: Mg

X: 1/2

Y: 1/2

Z: 1/4

Occ: 1

Show error

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

Element & Position

Origin shift

Appearance

Shift coordinates of all atoms by:

☒ + ☐ -

(1/8 1/8 1/8)

(1/4 1/4 1/4)

(1/4 -1/4 1/4)

(1/4 -1/4 0)

(1/4 1/4 0)

(0 1/4 1/4)

(1/4 0 1/4)

(0 1/4 1/4)

(0 1/4 -1/4)

(0 1/4 -1/4)

0.0000

0.0000

0.0000

Apply custom 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

Element & Position

Origin shift

Appearance

Radius: 0.445 Å

Color:

Ambient: 0.1

Diffusion: 0.8

Specular: 0.7

Shininess: 20.0

Emission: 0.2

Alpha: 1.0

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バンドとバンドで構成される多面体の情報を入力します。

### Bond list

	Center	Vertex	Max len.	Min len.	Bond color	Polyhedron
<input checked="" type="checkbox"/>	14: Si	8: O	2.2	0		
<input checked="" type="checkbox"/>	13: Al	8: O	2.2	0		

バ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。バ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。

<sup>13</sup> “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。

## 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稜(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。

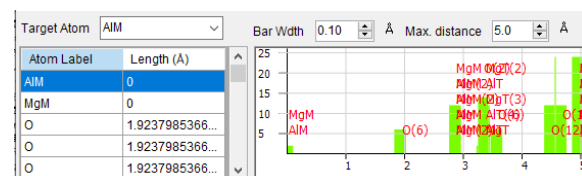
### H k l indices

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)

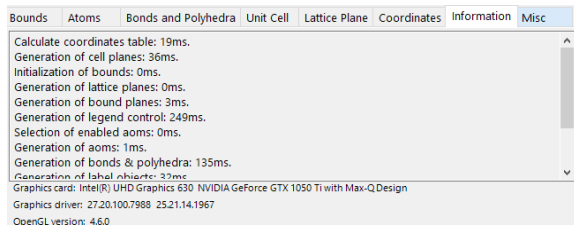
左側のテーブルには、Target atom として指定した原

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)

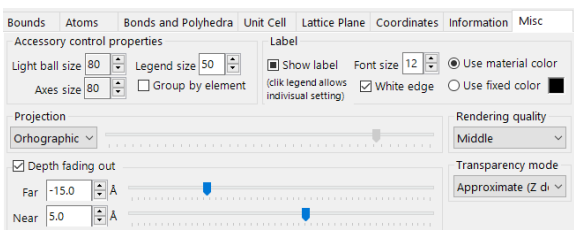
左のテーブルの情報をグラフ化したものです。“Bar width” を適当な太さに調整することによって、“Target atom”の配位数が推定できます。

#### 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。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

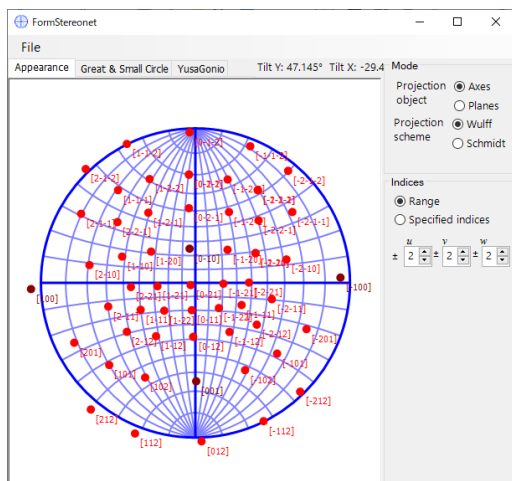


原子の凡例を表示します。表示される文字をラベルにするか、Misc タブから元素名にするか、選択できます。

#### 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。

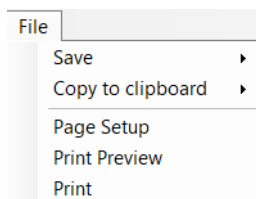
### 5.1. Main area

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。

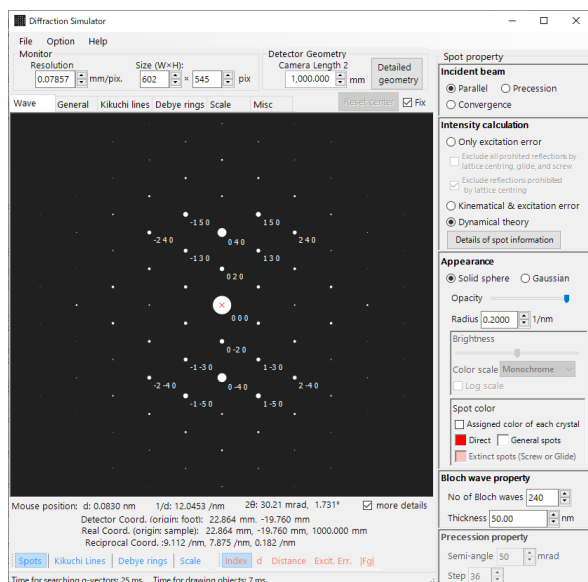
#### Outline

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

画面の中央に表示されているエリアに、diffraction をシミュレーションします。

#### マウス操作

以下のようなマウス操作に対応します。

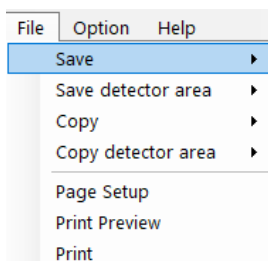
- Left drag: 回転
- Center drag: 平行移動
- Right drag: 拡大
- Right click: 縮小
- Left double click: 選択したスポットの詳細情報を表示

#### Mouse position

Mouse position: d: 0.1025 nm, 1/d: 9.7598 /nm, 2θ: 24.48 mrad, 1.402° ☒ more details  
Detector Coord. (origin: foot): 13.671 mm, 20.310 mm  
Real Coord. (origin: sample): 13.671 mm, 20.310 mm, 1000.000 mm  
Reciprocal Coord.: 5.449 /nm, -8.096 /nm, 0.119 /nm

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

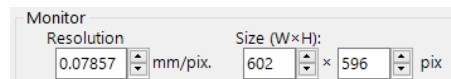
表示されている画像を保存します。後者は detector area を設定している場合に表示されます。

#### 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



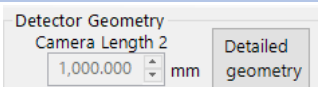
#### Resolution

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

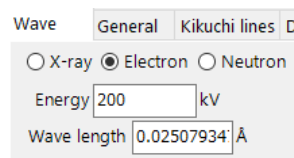
試料から検出器までの距離が表示されます。

#### 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](#) 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、エネルギーが波長を直接入力してください。

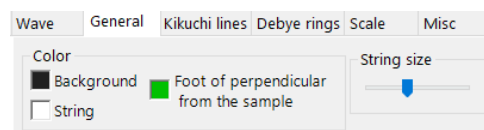
#### Electron

エネルギーが波長を入力します。

#### Neutron

エネルギーが波長を入力します。

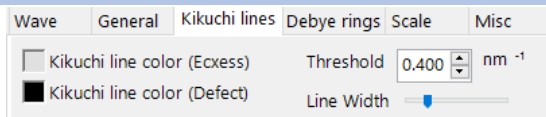
#### General



スポット、文字、菊池線などの色の設定を行います。



## Kikuchi lines

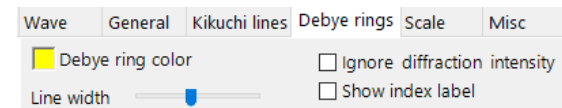


Kikuchi lines に関する設定を行います。[Tool bar](#) で Kikuchi lines を選択しているときにアクティブになります。

### 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](#) で Debye rings を選択しているときにアクティブになります。

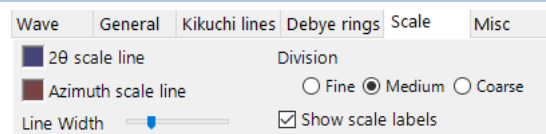
### Ignore diffraction intensity

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](#) 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。

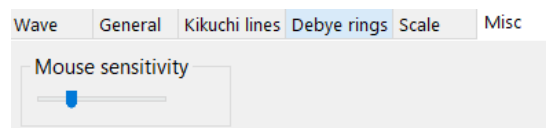
### Division

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



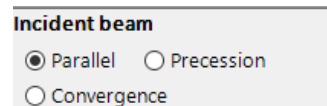
### Mouse sensitivity

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](#) 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。

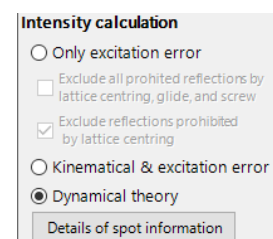
### Precession

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](#)”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。

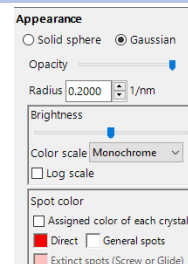
### Kinematical & excitation error

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、逆格子点を中心にある半径をもった  $R$  の球体を仮定し、その球体とエwald球との断面(すなわち円)を回折スポットとして表示します。円の面積が回折強度に対応します。

**Gaussian** の場合、逆格子点を中心にある半値幅(下で説明)とある積分強度をもった 3 次元ガウス関数<sup>14</sup>を仮定し、その 3 次元ガウス関数とエwald球との断面に現れる強度分布(2 次元ガウス関数)を回折スポットとして表示します。2 次元ガウス関数の積分強度が、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

逆格子点の半径に相当する量を指定します。ここで指定した値(以下、 $R$  とする)は、次のように回折スポットの表示に影響します。

### 1. Gaussian を選択している場合

#### A) "Only excitation error" を選択している場合

逆格子点を中心として  $\sigma$  が  $R$  で積分値が "Brightness" 値で定義される 3 次元ガウス関数を仮定し、その 3 次元ガウス関数とエwald球との断面に現れる強度分布(2 次元ガウス関数)を回折スポットとして表示します。構造因子は考慮しません。

#### B) "Kinematical & excitation error" を選択している場合

$\sigma$  が  $R$  で積分値が "Brightness" 値  $\times$  (運動学的な相対回折強度) で定義される 3 次元ガウス関数を仮定します。

#### C) "Dynamical theory" を選択している場合

$\sigma$  が  $R$  であり積分強度が "Brightness" 値  $\times$  (動力学的な相対回折強度) である 2 次元ガウス関数を回折スポットとして表示します。

### 2. Solid sphere を選択している場合

#### A) "Only excitation error" を選択している場合

逆格子点を中心に半径が  $R$  の球体を仮定し、その球体とエwald球との断面を回折スポットとして表示します。スポットの大きさに構造因子は考慮されません。

#### B) "Kinematical & excitation error" を選択している場合

半径が  $R \times$  (運動学的な相対回折強度)<sup>15</sup> の球体を仮定<sup>15</sup>し、その球体とエwald球との断面を回折スポットとして表示します。

#### C) "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、 $\text{Radius} \times$  (動

力学的な相対回折強度)<sup>16</sup> になります。すなわち表示される回折スポットの面積が動力学的な相対回折強度に比例します。<sup>16</sup>

## 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

<b>Bloch wave property</b>	
No of Bloch waves	240
Thickness	50.00 nm

"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

<b>Precession property</b>	
Semi-angle	50 mrad
Step	36

"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。

<sup>14</sup> 原点を中心とする 3 次元ガウス関数は、

$$f(x, y, z) = \frac{1}{\sigma^3 (2\pi)^{3/2}} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2\sigma^2}\right)$$

のような表式になります。積分値は 1 となります。

この 3 次元ガウス関数を  $z = Z$  で切り取った断面は

$$f'(x, y, z = Z) = \frac{1}{\sigma^3 (2\pi)^{3/2}} \exp\left(-\frac{Z^2}{2\sigma^2}\right) \exp\left(-\frac{y^2 + x^2}{2\sigma^2}\right)$$

という形になります。積分値は  $\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{Z^2}{2\sigma^2}\right)$  となります。

<sup>15</sup> 球体の体積を運動学的な相対回折強度に比例させるために、 $1/3$  乗しています。

<sup>16</sup> 当然、動力学計算の際に excitation error の影響は考慮されています。

## 6.5. Toolbar

Spots | Kikuchi Lines | Debye rings | Scale | Index | d | Distance | Excit. Err. | Fg |

### 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<sup>17</sup>。

### 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。

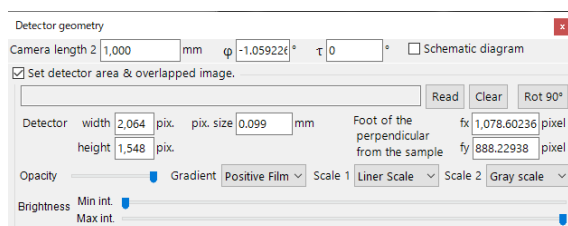
## 6.6. Detector geometry

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](#) を参照してください。

### Set detector area & overlapped image



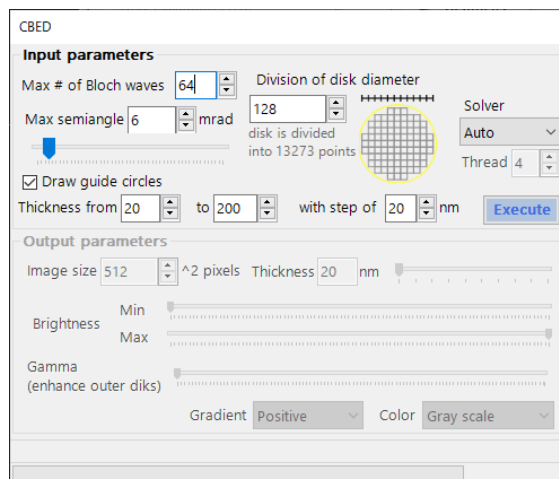
検出器のピクセル数やピクセルサイズを設定することで、シミュレーションした Diffraction pattern に検出器画像を重ね合わせたり、検出器画像の枠線だけを表示することが出来ます。検出器の領域は緑色の矩形として表示されます。

画像を重ね合わせる場合は、Read ボタンを押して画像を読み込みます。その後、ピクセルサイズや Foot を正しい値に設定してください。画像の透明度、色スケール、輝度なども調整することが出来ます。

検出器の枠線だけを表示したい場合は、画像を読み込まず、ピクセルサイズやピクセル数、Foot を設定してください。

## 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  $\pi/4$  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、厚みが変わっても計算量はほとんど変化しません。

#### Solver

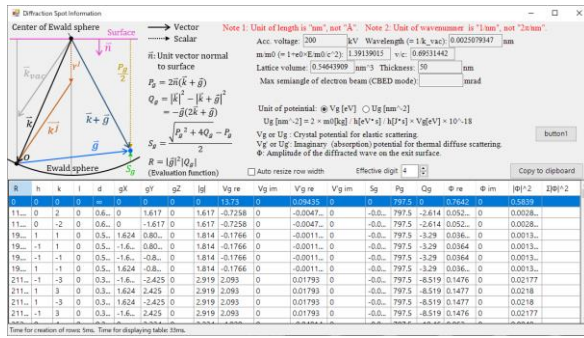
Bethe 法では固有値・固有ベクトルの計算に大きなリソースが消費されます。固有値問題のソルバーとして、

- 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。

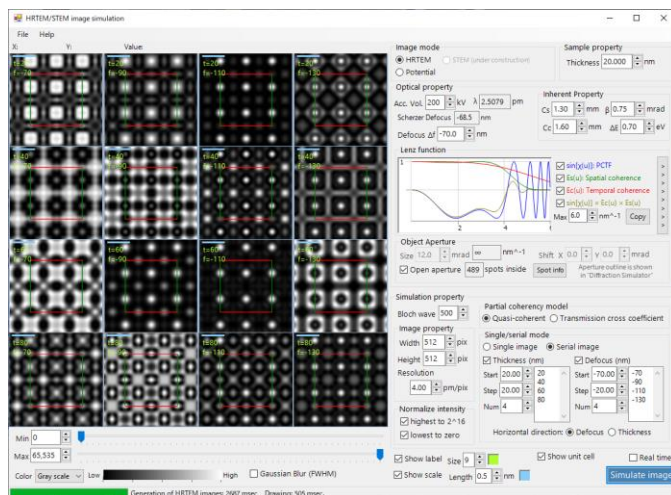
<sup>17</sup> Debye rings とは、本来試料が多結晶体であるときに現れる回折スポットの集合体です。

## 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”では、Main window で指定した任意の結晶および任意の方位に対して、TEM による格子像をシミュレーションします。ポテンシャルをシミュレーションすることもできます。

右下の“Simulate image”ボタンを押すことで、シミュレーションを実行します。

### 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

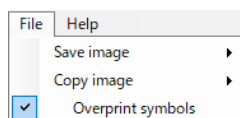
Gray scale か Cold-Warm scale のどちらかを選択します。

#### 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

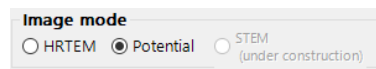
##### Basic concept of HRTEM simulation

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

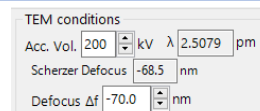
#### Thickness

試料の厚さを設定します。

### 7.5. Optical property

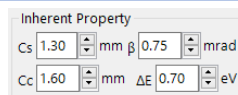
電子顕微鏡の観察条件を設定します。

#### 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。

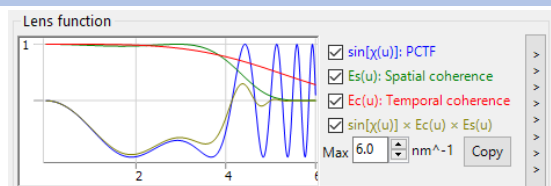
#### Inherent Property



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)
- ・  $\beta$ : Illumination semi angle due to the finite source size effect (照射半頂角)
- ・  $\Delta E$ :  $1/e$  width of electron energy fluctuations (エネルギー幅)

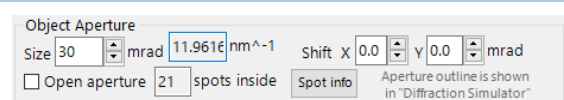
#### Lens function



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。

- ・  $\text{Sin}[\chi(u)]$ : Phase contrast transfer function (PCTF)
- ・  $E_s(u)$ : Spatial coherence envelope function
- ・  $E_c(u)$ : 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増減します。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

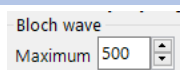
対物レンズ絞りの水平方向の位置を **mrاد** 単位で設定します。

#### Spot info.

詳細なスポット情報を表示します。

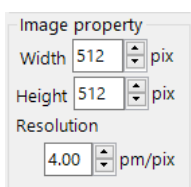
## 7.6. Simulation property

### Bloch Wave

A control panel for Bloch wave simulation. It has a label "Bloch wave" and a "Maximum" value of 500, which is displayed in a text box next to a small up/down arrow icon.

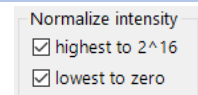
計算に取り込む最大の Bloch 波の数を設定します。

### Image Property

A control panel for image properties. It includes fields for "Width" (512 pix), "Height" (512 pix), and "Resolution" (4.00 pm/pix). Each field has a text box and a small up/down arrow icon.

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

A control panel for normalizing intensity. It has a label "Normalize intensity" and two checked checkboxes: "highest to 2^16" and "lowest to zero".

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

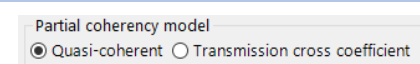
A control panel for the partial coherent model. It has a label "Partial coherency model" and two radio buttons: "Quasi-coherent" (selected) and "Transmission cross coefficient".

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

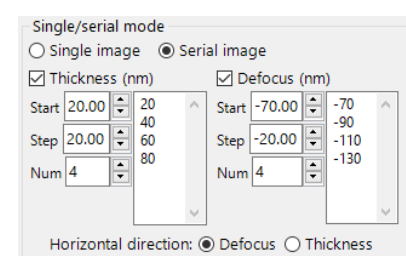
A control panel for single/serial mode. It has two radio buttons: "Single image" and "Serial image" (selected). Below are two sets of controls for "Thickness (nm)" and "Defocus (nm)". Each set includes "Start", "Step", and "Num" fields with up/down arrows. At the bottom, there are two radio buttons for "Horizontal direction": "Defocus" (selected) and "Thickness".

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

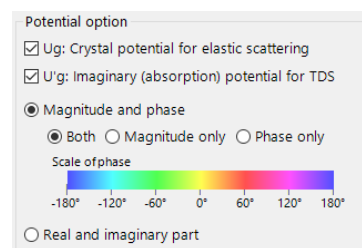
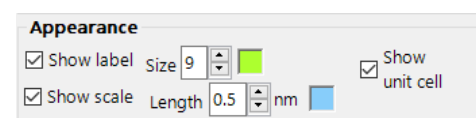
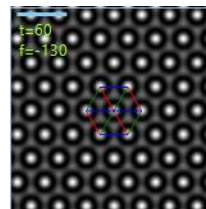
A control panel for potential options. It has two checked checkboxes: "Ug: Crystal potential for elastic scattering" and "U'g: Imaginary (absorption) potential for TDS". Below are three radio buttons: "Magnitude and phase" (selected), "Both", "Magnitude only", and "Phase only". A "Scale of phase" color bar is shown with values from -180° to 180°. At the bottom, there is a radio button for "Real and imaginary part".

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

A control panel for appearance. It has two checked checkboxes: "Show label" and "Show scale". The "Show label" section includes a "Size" field (9) and a color selection box. The "Show scale" section includes a "Length" field (0.5 nm) and a color selection box. There is also a "Show unit cell" checkbox.

### Label

ラベル (t: thickness [nm], f: defocus [nm]) を表示するかどうか、およびラベルのサイズと色を設定します。

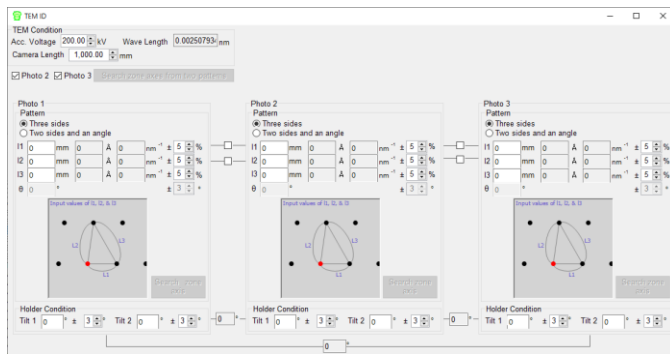
### Scale

スケールバーを表示するかどうか、およびスケールの長さや色を設定します。

### Unit cell

単位格子を表示するか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 の観測条件を入力します。

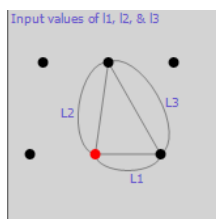
### 8.2. Photo1, 2, 3

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。

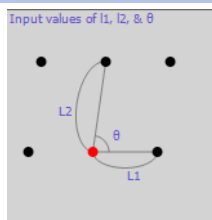
d 値が分かっている場合は、Å 単位あるいは nm<sup>-1</sup> のボックスに値を入力します。

#### 8.2.1. Three sides



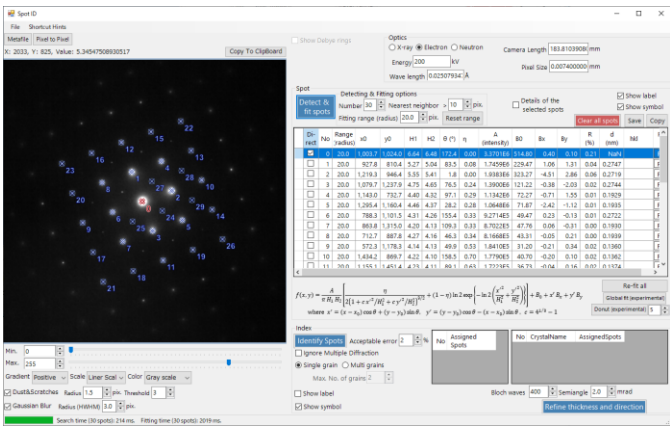
ダイレクトスポットを頂点に含む三角形の 3 辺の長さを入力します。

#### 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

Optics  
☐ X-ray ☒ Electron ☐ Neutron  
Energy 200 kV Camera Length 183.8103908 mm  
Wave length 0.02507934 Å Pixel Size 0.007400000 mm

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

Spot  
Detecting & Fitting options  
Number 30 Nearest neighbor > 10 pix.  
Fitting range (radius) 20.0 pix. Reset range  
Details of the selected spots  
Clear all spots Save Copy

Dir-rect	No	Range (radius)	x0	y0	H1	H2	θ (°)	η	A (intensity)	B0	Bx	By	R (%)	d (nm)	hkl	Fit
<input checked="" type="checkbox"/>	0	20.0	1.0037	1.0240	6.64	6.46	172.4	0.00	3.3701E6	514.80	0.40	0.10	0.21	NuH		Fit
<input type="checkbox"/>	1	20.0	927.8	810.4	5.27	5.04	83.5	0.08	1.7459E6	229.47	1.06	1.31	0.04	0.2747		Fit
<input type="checkbox"/>	2	20.0	1.219.3	946.4	5.55	5.41	1.8	0.00	1.9383E6	323.27	-4.51	2.86	0.06	0.2719		Fit
<input type="checkbox"/>	3	20.0	1.079.7	1.237.9	4.75	4.65	76.5	0.24	1.3900E6	121.22	-0.38	-2.03	0.02	0.2744		Fit
<input type="checkbox"/>	4	20.0	1.143.0	732.7	4.40	4.32	97.1	0.29	1.1342E6	72.27	-0.71	1.55	0.01	0.1929		Fit
<input type="checkbox"/>	5	20.0	1.295.4	1.160.4	4.46	4.37	28.2	0.28	1.0648E6	71.87	-2.42	-1.12	0.01	0.1935		Fit
<input type="checkbox"/>	6	20.0	788.3	1.101.5	4.31	4.26	155.4	0.33	9.2714E5	49.47	0.23	-0.13	0.01	0.2722		Fit
<input type="checkbox"/>	7	20.0	863.8	1.315.0	4.20	4.13	109.3	0.33	8.7022E5	47.76	0.06	-0.31	0.00	0.1930		Fit
<input type="checkbox"/>	8	20.0	712.7	887.8	4.27	4.16	46.3	0.34	8.1668E5	43.31	-0.05	0.21	0.00	0.1939		Fit
<input type="checkbox"/>	9	20.0	572.3	1.178.3	4.14	4.13	49.9	0.53	1.8410E5	31.20	-0.21	0.34	0.02	0.1360		Fit
<input type="checkbox"/>	10	20.0	1.434.2	869.7	4.22	4.10	158.5	0.70	1.7790E5	40.70	-0.20	0.10	0.02	0.1362		Fit
<input type="checkbox"/>	11	20.0	1.155.1	1.451.4	4.23	4.11	89.1	0.63	1.7223E5	36.73	-0.04	0.16	0.02	0.1374		Fit

Re-fit all  
Global fit (experimental)  
Donut (experimental) S

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<sup>18</sup>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。

<sup>18</sup> 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。

$$f(x, y) = \frac{A}{\pi H_1 H_2} \left[ \frac{\eta}{2 \left[ 1 + c x'^2 / H_1^2 + c y'^2 / H_2^2 \right]^{3/2}} + (1 - \eta) \ln 2 \exp \left\{ -\ln 2 \left( \frac{x'^2}{H_1^2} + \frac{y'^2}{H_2^2} \right) \right\} \right] + B_0 + x' B_x + y' B_y$$

ただし、 $x' = (x - x_0) \cos \theta + (y - y_0) \sin \theta$ ,  $y' = (y - y_0) \cos \theta - (x - x_0) \sin \theta$ ,  $c = 4^{1/3} - 1$

角括弧[]内の第 1 項  $\eta / 2 \{ 1 + c x'^2 / H_1^2 + c y'^2 / H_2^2 \}^{3/2}$  は 2 次元コーシー分布関数です。また、第 2 項  $(1 - \eta) \ln 2 \exp \{ -\ln 2 (x'^2 / H_1^2 + y'^2 / H_2^2) \}$  は 2 次元ガウス関数です。

$x_0, y_0$  はスポットの中心座標、 $\theta$  は  $x, y$  軸を  $x', y'$  軸に回転する角度、 $H_1, H_2$  は  $x', y'$  軸に対する半幅、 $\eta$  はコーシー分布関数とガウス関数の比率を意味します。 $A$  はこの関数の積分強度に対応します。また、後半の  $B_0 + x' B_x + y' B_y$  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。

## Save/Copy

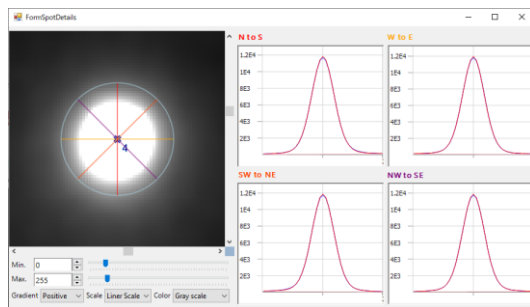
テーブルの情報をエクセル形式で保存あるいはクリップボードにコピーします。

## 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。

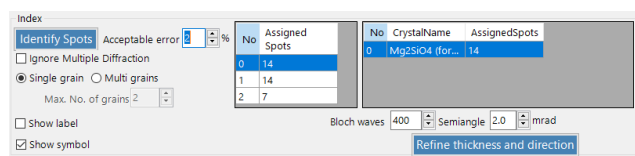
## Details of the selected spots

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

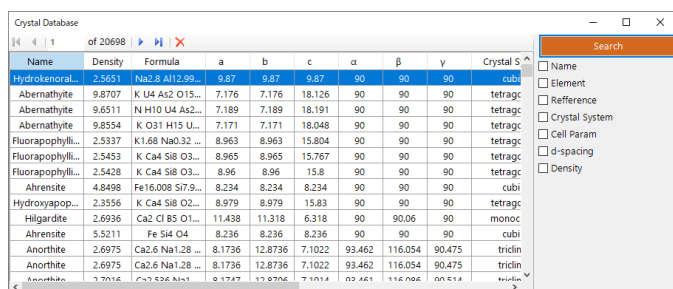
Bethe 法による動力学回折効果を考慮して、検出された回折強度に最もよく一致する試料厚みおよび結晶方位を求めます。

## 10. Powder diffraction

Under construction



## 11. Crystal database



Name	Density	Formula	a	b	c	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	Crystal system
Hydroxynor...	2.5651	Na <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>9</sub> ...	9.87	9.87	9.87	90	90	90	cubic
Abernathyite	9.8707	K <sub>2</sub> U <sub>4</sub> As <sub>2</sub> O <sub>15</sub> ...	7.176	7.176	18.126	90	90	90	tetragonal
Abernathyite	9.6511	NH <sub>10</sub> U <sub>4</sub> As <sub>2</sub> ...	7.189	7.189	18.191	90	90	90	tetragonal
Abernathyite	9.8554	K <sub>2</sub> O <sub>3</sub> H <sub>15</sub> U...	7.171	7.171	18.048	90	90	90	tetragonal
Fluorapophyllite	2.5337	K <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> Na <sub>2</sub> O <sub>32</sub> ...	8.963	8.963	15.804	90	90	90	tetragonal
Fluorapophyllite	2.5453	K <sub>2</sub> Ca <sub>4</sub> Si <sub>8</sub> O <sub>32</sub> ...	8.965	8.965	15.767	90	90	90	tetragonal
Fluorapophyllite	2.5428	K <sub>2</sub> Ca <sub>4</sub> Si <sub>8</sub> O <sub>32</sub> ...	8.96	8.96	15.8	90	90	90	tetragonal
Ahrensite	4.8498	Fe <sub>16</sub> O <sub>8</sub> Si <sub>7</sub> O <sub>9</sub> ...	8.234	8.234	8.234	90	90	90	cubic
Hydroxynor...	2.3556	K <sub>2</sub> Ca <sub>4</sub> Si <sub>8</sub> O <sub>32</sub> ...	8.979	8.979	15.83	90	90	90	tetragonal
Hillgardite	2.6936	Ca <sub>2</sub> Cl <sub>8</sub> Si <sub>5</sub> O <sub>11</sub> ...	11.438	11.318	6.318	90	90.06	90	monoclinic
Ahrensite	5.5211	Fe <sub>2</sub> Si <sub>4</sub> O <sub>4</sub> ...	8.236	8.236	8.236	90	90	90	cubic
Anorthite	2.6975	Ca <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>8</sub> ...	8.1736	12.8736	7.1022	93.462	116.054	90.475	triclinic
Anorthite	2.6975	Ca <sub>2</sub> Si <sub>2</sub> Al <sub>2</sub> O <sub>8</sub> ...	8.1736	12.8736	7.1022	93.462	116.054	90.475	triclinic

“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://ruff.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.

### 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。

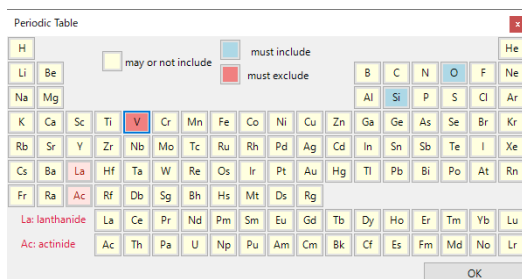
### 11.2. Search options

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。

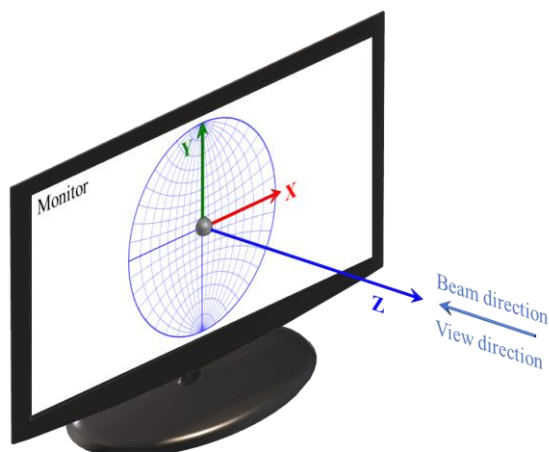
#### Density

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



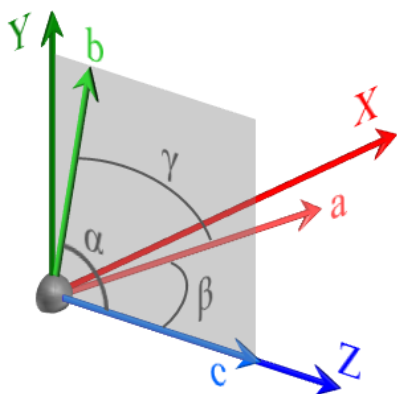
ReciPro では、様々な“方向”を取り扱いますので、その定義を説明します。ReciPro は上の図のように、

- ・ X 軸はモニター面の右方向
- ・ Y 軸はモニター面の上方向
- ・ Z 軸はモニター面の垂直手前方向

という右手系座標系を採用しています。ビーム方向はモニターを見つめる視線の方向と一致しており、上の座標系では-Z軸方向に相当します。

ReciPro で行う演算のほとんどは、方向(すなわち  $3 \times 3$  の回転行列)だけが意味を持ち、原点の位置を意識する必要はありません。ただし、“Crystal diffraction” function では、原点位置を明確に考慮する必要があります。これについては A.2.をご覧ください。

#### Initial crystal direction



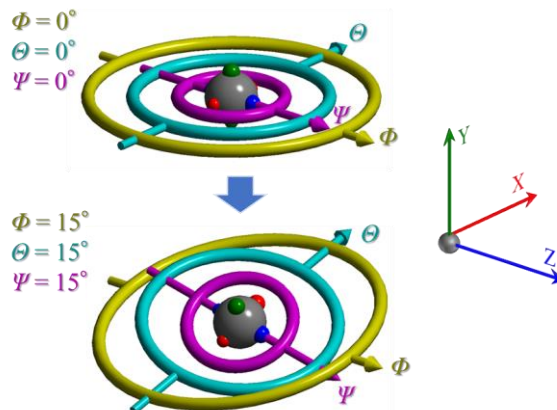
ReciPro は、結晶の初期状態 (初回起動時あるいは [Reset rotation](#) を押した後の状態)の方位を、上の図のように定義します<sup>19</sup>。すなわち、

- ・ 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] 結晶軸に一致し、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 Z 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<sup>20</sup>。

#### 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  $\phi$ ,  $\theta$ ,  $\psi$  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  $\phi$ ,  $\theta$ ,  $\psi$  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<sup>21</sup>。

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。  $\phi$  は最も上位(1<sup>st</sup>)の回転であり、 $\theta$  がそれに続きます(2<sup>nd</sup>)。  $\psi$  は最も下位(3<sup>rd</sup>)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<sup>22</sup>。例として、上の図の下の方に、  $\phi$ ,  $\theta$ ,  $\psi$  を全て 15° にした状態を示しました。角度  $\phi$  に相当する回転軸は常に Z 軸と一致しますが、角度  $\theta$  と角度  $\psi$  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を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。

<sup>19</sup> 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。

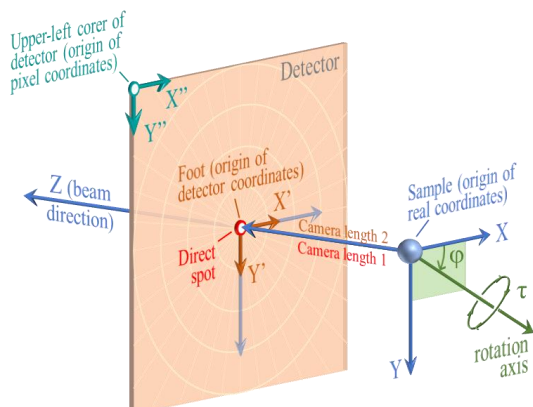
<sup>20</sup> cubic, tetragonal, or orthogonal の時、a, b, c 軸の初期方位はそれぞれ X, Y, Z 軸と一致します。hexagonal, trigonal, or monoclinic の時、b, c 軸はそれぞれ Y, Z 軸と一致しますが、a 軸は X 軸と一致しません。triclinic の時、c 軸は Z 軸と一致しますが、a, b 軸は X, Y 軸と一致しません。

<sup>21</sup> 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。

<sup>22</sup> 線形代数的な表現では、最終的な回転状態を R ( $3 \times 3$  行列)としたとき、R は以下のように計算できます。

$$R = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \psi & -\sin \psi & 0 \\ \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

## Before rotation



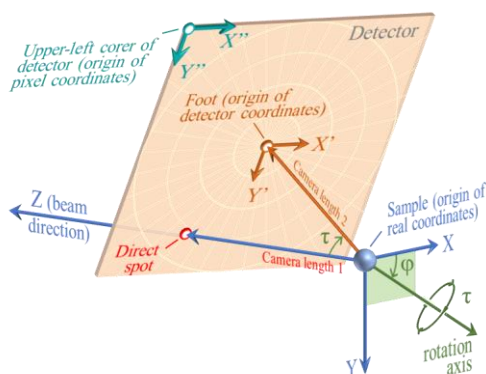
まず、上の図のように、detector が傾いていない(入射ビームと detector 平面の法線が一致する)状態を考えます。

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<sup>23</sup>)。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 ( $\phi$ )と回転量( $\tau$ )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  $\phi$  とします。そして、 $\phi$  によって定義される回転軸の周りに、右ネジの方向で  $\tau$  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<sup>24</sup>。ReciPro では、前者と sample の距離を Camera length 1 ( $C_1$ ) と呼び、後者と sample の距離は Camera length 2 ( $C_2$ ) <sup>25</sup>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).

## $\Phi$

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

## $\tau$

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 ( $C_2$ )

Distance from the sample to the foot. The value is defined in millimeter.

<sup>23</sup> 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。

<sup>24</sup> Foot の座標 ( $F_x, F_y$ )と Direct spot の座標 ( $D_x, D_y$ )は、次の関係があります。

$$D_x = F_x - C_2 \times \sin(\Phi) \times \tan(\tau)$$

$$D_y = F_y + C_2 \times \cos(\Phi) \times \tan(\tau)$$

<sup>25</sup> Camera length 1 ( $C_1$ )と Camera length 2 ( $C_2$ )の関係は  $C_1 \times \cos(\tau) = C_2$  です。

#### Direct spot

Intersection of the incident beam and the detector.

#### Camera length 1 ( $C_1$ )

Distance from the sample to direct spot.

#### Pixel coordinates ( $X''$ , $Y''$ )

Two dimensional coordinates on the detector plane with pixel unit.  $X''$  and  $Y''$  directions correspond to pixel arrays of the detector. The origin is always upper-left corner of the detector.

#### Pixel size

Length of one side of the pixel. The value is defined in millimeter. A square pixel is only acceptable.

#### Detector width/height

Pixel numbers horizontally/vertically.

### A.3. Principle of Bethe method

### A.4. Principle of HRTEM simulation