

# Electron Beam Diffraction Simulator

## (電子線回折シミュレーションソフト)

### 概要:

結晶格子の形態から電子線回折パターンを計算するソフト  
ブラベ格子に基づく消滅則に対応  
電子線の加速電圧、入射方向、カメラ長を任意に設定可能  
回折条件から外れた逆格子点についても、ズレの許容範囲を設定することで表示が可能  
ミラー指数の表示/非表示の切り替えが可能

### 計算方法:

- 1 格子ベクトル  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$  から、以下の式で逆格子ベクトル  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$ ,  $\mathbf{c}^*$  を求める
$$\mathbf{a}^* = \lambda(\mathbf{b} \times \mathbf{c}) / V$$
$$\mathbf{b}^* = \lambda(\mathbf{c} \times \mathbf{a}) / V$$
$$\mathbf{c}^* = \lambda(\mathbf{a} \times \mathbf{b}) / V$$
 $\lambda$ : 電子線の波長、 $V$ : 単位格子の体積 ( $V = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})$ )
- 2 得られた逆格子ベクトルから、 $\mathbf{S} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$  により逆格子点の位置ベクトル $\mathbf{S}$ を求め、逆格子点の座標を決定する
- 3 電子線の入射方向が $z$ 軸方向になるように逆格子を回転させる  
 $xy$ 平面上にきた逆格子点が回折スポットを与える。  
(逆格子点が厳密に $xy$ 平面上になくても、ズレが許容範囲内ならば回折スポットを表示)

### 使用方法:

- 1 初めに結晶系の選択画面が表示されるので、ラジオボタンで選択して“OK?”をクリック
- 2 結晶系に応じてブラベ格子が表示されるので、ラジオボタンで選択して“OK?”をクリック
- 3 各種パラメーターを入力し、“RUN”をクリック (一部はデフォルト値が設定されている)

#### 入力項目

Lattice Constant(格子定数) :  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$   
結晶系で決まる値については既に入力済み(青枠で表示, 変更不可)

Incident Beam Direction(電子線の入射方向) :  $h$ ,  $k$ ,  $l$  で指定

Acceleration Voltage(加速電圧) : デフォルトは 100 kV

Camera Constant(カメラ長) : デフォルトは 1 m

**Allowable Deviation(許容範囲)：** 逆格子定数(3軸の平均)に対する相対値で指定  
回折条件を満たす位置から逆格子点がズレても、許容範囲内なら観測される  
(厳密な位置からズレるほど、回折スポットは小さく表示される)

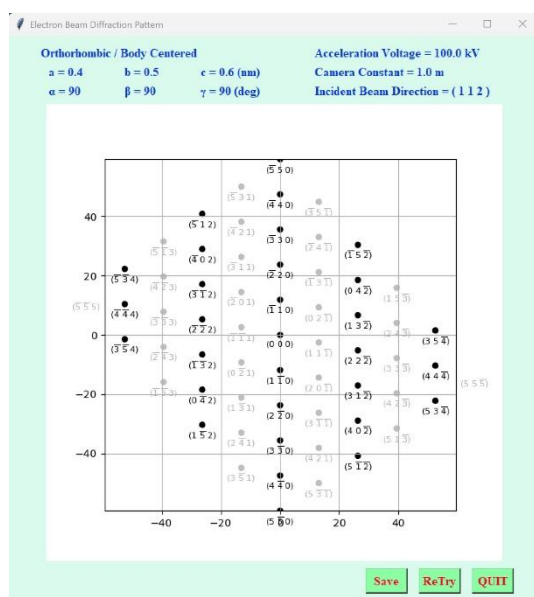
**Diffraction Order(回折次数)：** デフォルトは 5、最大値は 10

**Miller Indices(ミラー指数)：** ラジオボタンで表示/非表示を切替え

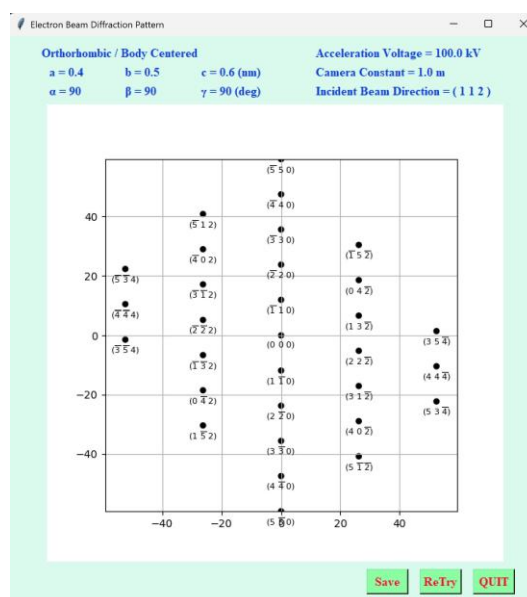
**Grid Line(グリッドライン)：** ラジオボタンで表示/非表示を切替え

**Extinct Spot(消滅則の対象スポット)：** ラジオボタンで表示/非表示を切替え  
ブラベ格子で決まる消滅スポットが、“On”で薄色表示、“Off”で非表示

#### 4 結果表示の例



全表示の例



消滅スポット 非表示の例

回折パターンを目盛りの単位は **mm**

“Save”ボタン：回折パターンを png 形式等で保存

“ReTry”ボタン：プログラム再実行

“QUIT”ボタン：プログラム終了