



Java Electron Crystallography Package

JECPは、電子線回折解析と結晶学における教育研究用に開発されたプログラムのセットです。このプログラムは、下記のwebsiteからダウンロードすることができます。ぜひ、ご利用下さい。

PCED v2.0は、結晶構造解析における位相同定、微小構造集合組織の解析および相片の決定のために開発されたプログラムです。本シミュレーションでは、動力学的理論とブラックマンの動的補正が使用されています。さらに、Marchモデルが面外および面内の集合組織のシミュレーションに用いられています。

PCEDdata	File name	k-factor	Gran (size/%)	Texture type	Zone axis	March param.
phase 1	Al (defa.k)	1.0	20.04, 20.08	out-of-plane	(001)	1.0
phase 2	Ag (defa.k)	1.0	20.04, 20.08	out-of-plane	(001)	1.0

QPCED v2.5は、以下の機能を持ったプログラムです。

- 楕円率補正機能。
- 回折パターンの増強とリングをハイライトする機能。
- 回折パターンと選択したリングから2つのタイプのプロファイルを求める機能。
- pseudo-Voigtまたは Pearson VII関数を用いてピークフィッティングすることでプロファイルを解析する機能。

多結晶の電子線回折パターンの実験データから処理されたパターンと作成されたプロファイルデータはPCED v.2.0で使用することができます。

JECP/SVATは、ユニットセルの結晶構造をリアルタイムで三次元表示する機能を提供するプログラムです。その結晶構造は、(i)ユーザーが選定した [uvw]方向または層ごととして、(ii)中心の原子とその周囲の球面の範囲を指定した局所的な構造(多面体構造)として解析することができます。この同じ入力ファイルは全てのJECPプログラムで使用されています。

オプションのソフト一覧

JECP/SPは、結晶のステレオ投影のために使われています。JECP/EDは、単結晶の電子結晶パターンの計算のために使われています。JECP/HOLZは、動力学的補正をしたHOLZラインの計算のために使われています。

本ソフトのライセンスについてのお問い合わせは以下のアドレスへどうぞ。

LANDYNE: computer software.

Website: <http://landyne.ueuo.com> E-mail: xli2@unl.edu