

V3.6

CBED

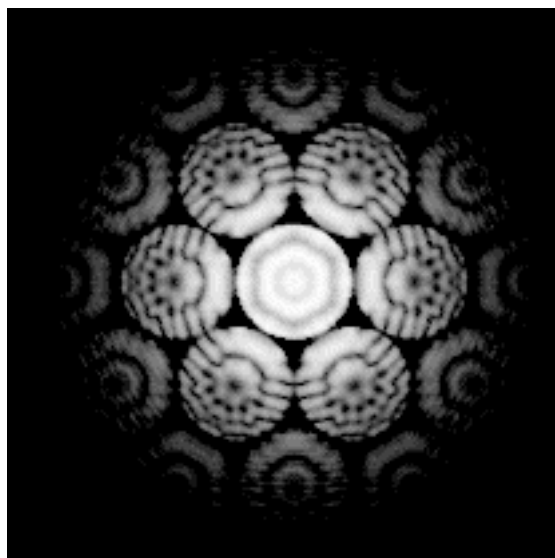
For

xHREMTM

(WinHREMTM / MacHREMTM)

収束電子線回折
シミュレーションプログラム

ユーザーガイド



収束電子線回折
シミュレーションプログラム
取扱い説明書

構成

- はじめに
- インストール
- さあ例題をやってみましょう
 - データの入力
 - 散乱の計算
 - CBED 像の濃淡表示

■ はじめに

このプログラムは収束電子線回折像 (CBED 像) を計算するもので、Windows/Mac OS 用の高分解能電子顕微鏡像のシミュレーションのためのプログラムである *xHREM™* (*WinHREM™* / *MachHREM™*) の新しい機能として追加されたものです。

xHREM™ は以下のような特徴を備えています。

xHREM™ の主な特徴

1. 使いやすいユーザーインターフェイス

xHREM™ では Windows/Mac OS の操作性の利点を活かしたグラフィカルユーザーインターフェイス (GUI) をもちいて入力データを対話形式で作成します。

xHREM™ は任意の結晶および欠陥構造、界面等をも取り扱える汎用プログラムであります。このような汎用プログラムは一般に入力データが複雑になる傾向がありますが、このグラフィカルユーザーインターフェイス (GUI) をもちいれば、専門的な知識を必要とせず初心者にも複雑なモデルのデータ入力を容易に行うことができます。

2. 信頼のおけるアルゴリズム

xHREM™ は米国アリゾナ州立大学において開発されたマルチスライス法による高分解能電子顕微鏡像のシミュレーションプログラムを基本としています。この基本となるプログラムは、現在、最も信頼のおける電子顕微鏡像シミュレーションプログラムの 1 つであります。

3. 高品位な出力画像

投影ポテンシャル、試料下面の電子波動関数、シミュレーション像、電子線回折パターン等の数値データは専用のユーティリティにより高品位な濃淡像 (ビットマップ) としてレーザープリンター等に出力することができます。また、濃淡像を数値データ出力し、他のソフトにより解析することが可能です。

■ インストール

CBED プログラムおよびサンプルデータは xHREM のインストール時に既にインストールされています。

CBED プログラムを追加購入された場合にはキーの更新が必要となります。キーの更新は Remote Update が可能です。現在のキーの情報を送って頂ければ、折り返し更新データをお送りします。

■ さあ例題をやってみましょう

データの入力

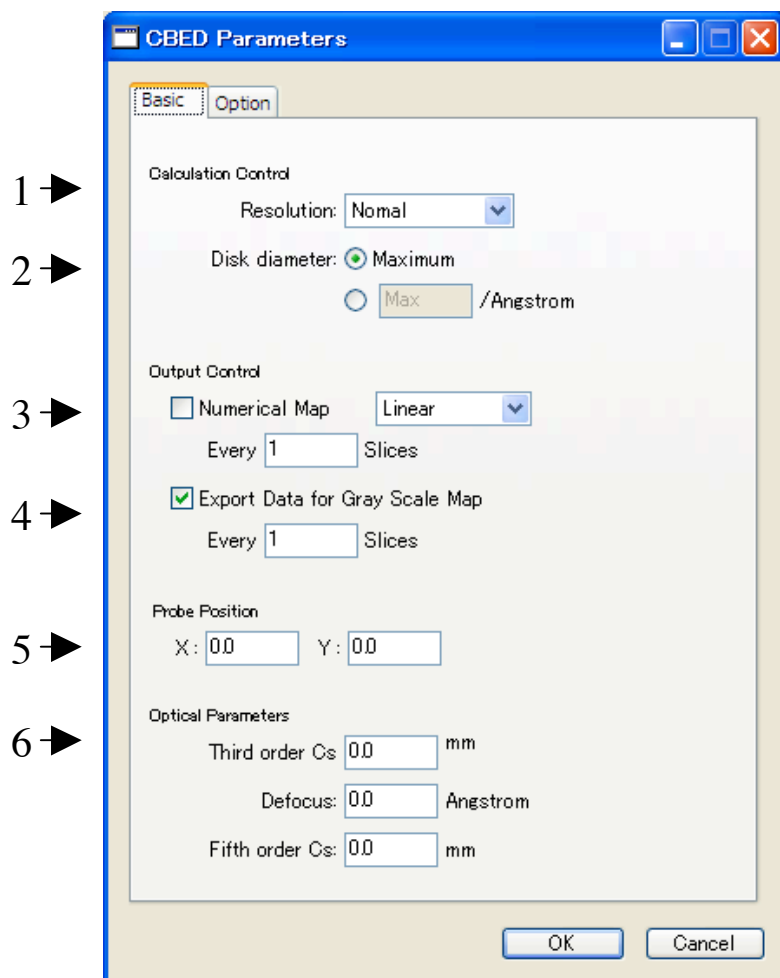
CBED 用のデータ作成には散乱強度計算のデータ作成用の入力プログラム MultiGUI が使われます。CBED に必要な追加データはオプション機能で入力します。MultiGUI で入力する通常のデータの説明は xHREM 入力プログラム (ユーティリティ) の使い方を参照下さい。

例題として SnO₂ のサンプルデータがプログラムとともに供給されています。

CBED に必要な追加データを入力するには MultiGUI ウィンドウの下にある Option の中から CBED を選択します。

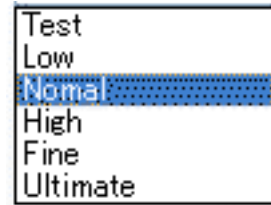


すると次のようなウィンドウが現れます：



解像度 (Resolution)

解像度とは回折図形の計算間隔で、次のプルダウンリストから選択します：



通常は、“Normal”以上の解像度を使用します。（“Test”および“Low”はデータのチェック用です。）

回折図形の計算間隔（解像度）は計算のモデルサイズ（スーパーセル）を決定します。回折図形の計算間隔が狭いほど（解像度解像度が高いほど）スーパーセルサイズが大きくなり、計算点数が増えます。

TIPS: 高解像での CBED では計算点が多くなり、計算時間がかかります。このため、最終解像度で計算するまえに、低解像度の計算を行ない、入力データの確認を行なうことを勧めます。

各解像度での計算間隔 (d*) と必要とされる計算点数

n	Resolution	計算間隔 (近似値)	計算点数*	スーパーセル (近似値)
1	Test	0.08 /A	100 (128)	12.5 A
2	Low	0.04	200 (256)	25
3	Normal	0.02	400 (512)	50
4	High	0.01	800 (1k)	100
5	Fine	0.005	1600 (2k)	200
6	Ultimate	0.0025	3200 (4k)	400

この計算点数は最大計算範囲 Range (d) を 4.0 / A までに設定した直交系の場合です。計算点数の近似値は最大計算範囲 Range の 2 倍を計算間隔で割った値となります。

TIPS: 最大計算範囲は Preferences/Dynamical calculation の Range で設定します。最大計算範囲を大きくすると計算点数が比例して増加します。斜交系の場合には必要とされる計算点数はこの値よりも大きくなります。

TIPS: スーパーセルサイズはフーリエ空間の計算間隔の逆数となります。このスーパーセルに近くなるように入力されたモデルが繰返されて並べられます。このため、実際の計算モデルサイズは入力モデルの整数倍となります。そして、実際のフーリエ空間の計算間隔はこの値の逆数として決定されます。

CBED ディスク径 (Disk diameter)

CBED の各ディスクの直径を指定します。ディスクが重ならない最大径を指定したい場合には「Max」を選択します。

数値マップ (Numerical Map)

CBED for xHREM

CBED 図形の数値出力の有無を指定します。出力は線形 (Linear)、常用対数 (Log) の指定が可能です。また、出力間隔を「Cycle」で指定します。出力のフォーマットは MultiGUI の Preferences で指定された形式です。

濃淡図形用データ出力 (Export Data for Gray Scale Map)

CBED の濃淡図形用データのファイル出力の有無を指定します。また、出力間隔を「Cycle」で指定します。

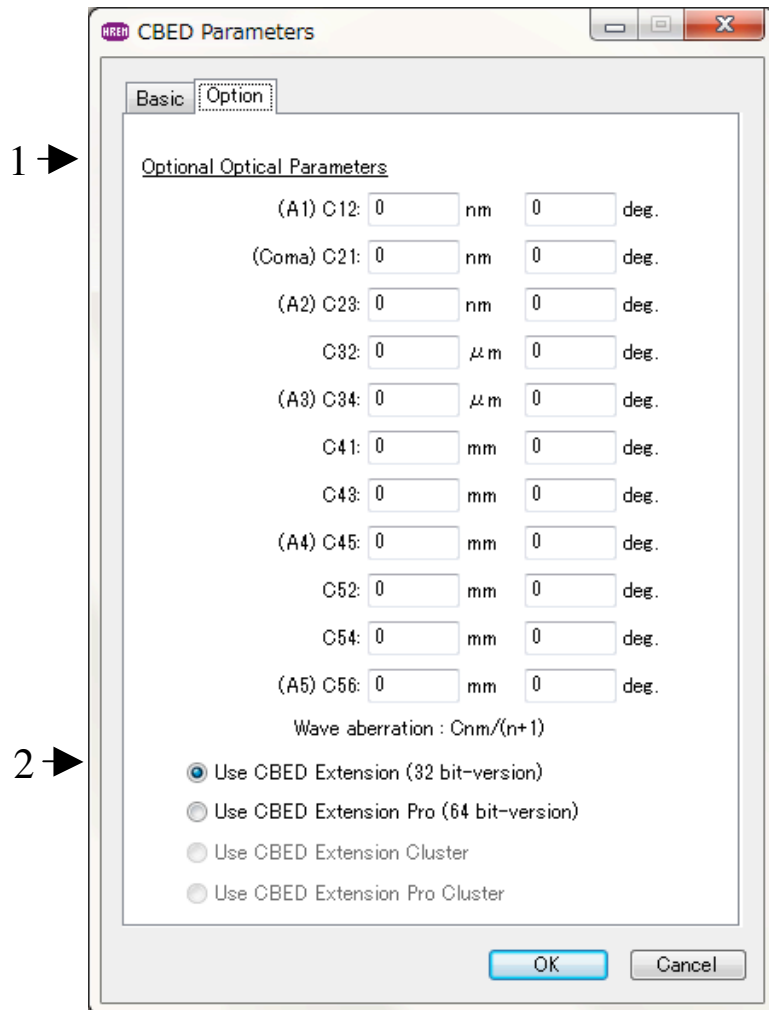
プローブ位置 (Probe Position)

単体格子内のプローブ位置の指定が可能です。CBED ディスクの重なり部分を議論しない場合には無関係のパラメータです。

光学パラメータ (Optical Parameters)

球面収差係数 (3 次)、デフォーカス、および 5 次の球面収差係数の指定が可能です。

CBED ディスクの重なり部分を議論しない場合には無関係のパラメータです。



1. 高次収差係数

幾何収差で5次までの高次収差係数の入力が可能です。収差係数の定義は各様ですが、ここでは各波面収差が $\frac{C_{nm}}{(n+1)} \alpha^{(n+1)} \cos m(\phi - \phi_{nm})$ となるように定義されています。

2. 32bit/64bit モジュールの選択

64bit モジュールが Programs フォルダにないと選択はできません。(CBED に Cluster 版はありません)

注意：CBED のシミュレーションでは計算点が非常に大きくなります。このため、全領域のポテンシャル分布や回折強度をリスト出力しようとする大量のデータが出力されることとなりますのでご注意ください。

散乱の計算

MultiGUI で基本データを作成します。

TIPS: 高角までの弾性散乱を計算する為に Preferences/Dynamical calculation の Range で弾性散乱の計算範囲を $s=1.5-2.0/A$ ($d^*=3.0-4.0/A$)、または、それ以上に設定します。ただし、Doyle-Turner では $S=2.0/A$ 以上は使用出来ません。 $S=2.0/A$ 以上を計算するには Weikenmeier-Kohl を選択します。

CBED の追加データを作成します。

MultiGUI の File メニューから Execute CBED を選択して CBED プログラムを起動します。

計算結果を表示するウィンドウが現れ、計算が実行されます。

計算が正常に終了すると「Congratulation」がウィンドウに表示されます。

出力リストを保存したい場合には File メニューから保存「Save As...」を選択します。

CBED 像の濃淡表示

CBED 像の表示には ImageBMP を用います。ImageBMP の一般的な使用方法は xHREM のマニュアルを参照してください。

CBED データは、ED ファイルに出力されています。

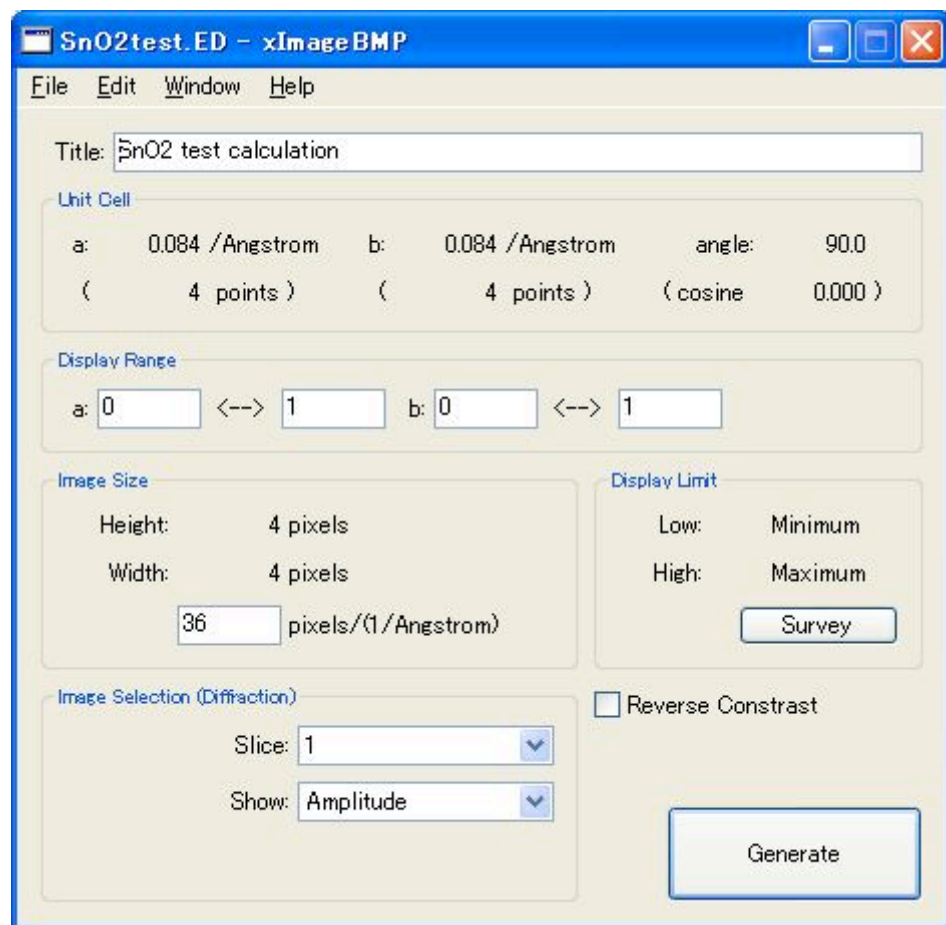
CBED 像の表示には：

ImageBMP を起動します。

ファイル選択のダイアログで「.ED」ファイルを選択します。

ED ファイルが表示されていない場合には、ファイルの種類が「ED Data (*.ED)」になっているか確認してください。

次のようなウィンドウが現れます。



CBED 像を計算したいスライスを Slice により選択します。

表示の形式を Show プルダウンから選択します。

他の条件が設定されたら、Generate をクリックします。