

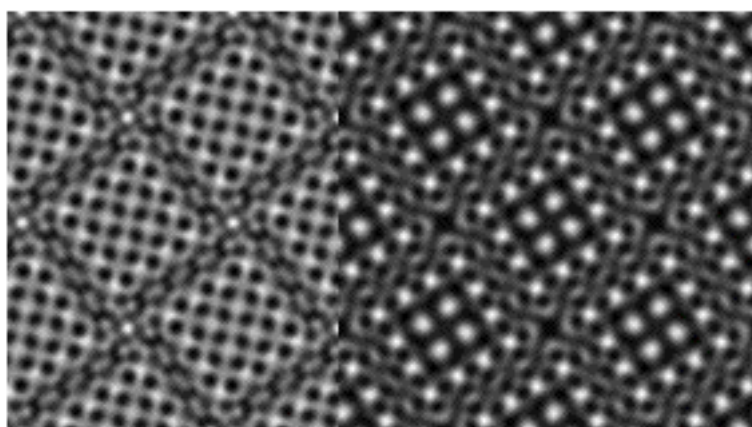
WinHREMTM

V2.5

MachHREMTM

Windows/ PowerMacintosh 用
高分解能電子顕微鏡像
シミュレーションプログラム

ユーザーガイド



目次

導入編

- はじめに
- Win/MacHREM を使う前に
- インストール
 - Win/MacHREM のインストール
 - ユーザキードライバのインストール
 - ユーザキーの設置
- さあ例題をやってみましょう
 - 散乱強度の計算
 - 電顕像の計算
 - 電顕像の濃淡表示
 - 回折像の濃淡表示
- トピックス
 - モデルポテンシャル、波動関数の表示
 - 回折強度のチェック
 - 画像強度のチェック
 - モデルの 3 次元表示
 - TDS 吸収の取り扱い
 - CIF ファイルによるデータ共有
 - 結晶軸の交換
 - 静的散漫散乱の計算

応用編

- さあ自分の問題にとりかかろう
 - 新規データの作成手順
 - 環境設定 (Preferences)
 - デフォルト (テンプレート) の作成
- MultiGUI の使用法
- ImageGUI の使用法
- DFOutGUI の使用法
- ImageBMP の使用法
- SpotBMP の使用法

付録

- ブランク・ワークシート

FAQ

- 動力学的散乱計算に対して (MultiGUI)
- 電顕像の計算に関して (ImageGUI)
- 散乱強度出力に関して (DFOutGUI)

Support/Update

Email: support@hremresearch.com

WEB: www.hremresearch.com

導入編

この章では
Win/MacHREM™の特徴、
インストール方法について説明します。
また、Win/MacHREM™の使い方について
添付の例題データを用いて練習します。

■ はじめに

近年、新素材の開発・研究がさかんとなり、高分解能電子顕微鏡は原子レベルの材料評価に必要不可欠な研究手段となってきました。これにともない、高分解能電子顕微鏡像のシミュレーションも以前にまして重要となってきています。

Win/MacHREM™は Windows/PowerMacintosh 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、以下のような特徴を備えています。

Win/MacHREM™の主な特徴

1. 使いやすいユーザインターフェイス

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

Win/MacHREM™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

電子顕微鏡像は電子の試料内での相互作用や電子レンズの収差等に大きく左右されるため、動力学理論に基づいた散乱の取り扱いおよび波動光学に基づいた収差の取り扱いが必要とされています。

Win/MacHREM™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（文献を参照下さい）。

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 Windows の標準画像フォーマット（ビットマップ）あるいは Macintosh の標準画像フォーマット（PICT）に変換され高品位な画像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。特に、高精細プリンターを用いれば写真に近い画質の画像として出力することが可能です。

Win/MacHREM™の主な機能

- 高速フーリエ変換（FFT）による高速演算
- 任意の結晶系、対称要素、入射方向に適応
- 欠陥、界面、人工超格子等の取り扱いが可能
- 相互透過係数による部分干渉性の取り扱い
- 干渉性収束電子線回折像の計算（Option）
- 高分解能 STEM 像の計算（Option）

Win/MacHREM™による電顕像の計算

Win/MacHREM™には散乱強度の計算、電顕像の数値計算、散乱強度の出力のための3つのグラフィカルユーザインターフェイス（GUI）ユーティリティがあります。また、濃淡画像の出力のためのユーティリティがあります。これらのグラフィカルユーザインターフェイス（GUI）を使って計算プログラムで必要とする所定の形式を満足するデータを容易に作成し、計算を実行することができます。また、濃淡画像の出力ユーティリティを用いて高品質の電顕像の濃淡画像を得ることができます。

各 GUI ではそれぞれ1つのウインドウ（WORKSHEET と呼ぶ）を利用して必要なデータを入力します。入力されたデータは保存（Save または Save As...）により計算プログラムに必要なデータに変換されたものが生成されます。これらのデータをもちいてメニュー（Execute）から容易に計算を実行することができます。

例えば、電顕像の濃淡出力は次のようにして得られます：

1. MultiGUI というグラフィカルユーザインターフェイス（GUI）をもちいて散乱強度の計算のためのデータを作成し、File の Execute Multislice により計算を実行します。

2. ImageGUI というグラフィカルユーザインターフェイス (GUI) をもちいて電顕像の数値計算のためのデータを作成し、File の Execute により計算を実行します。
3. ImageBMP というユーティリティをもちいて電顕像の濃淡図を計算します。試料厚さとデフォーカスの一覧表 (Image Tableau) に並べることもできます。

文献

K. Ishizuka and N. Uyeda: A New Theoretical and Practical Approach to the Multislice Method: Acta Cryst. A33 (1977) 740-749.

K. Ishizuka: Contrast Transfer of Crystal Images in TEM: Ultramicroscopy 5 (1980) 55-65.

K. Ishizuka: Multislice Formula for Inclined Illumination: Acta Cryst. A38 (1982) 773-779.

石塚和夫: 高分解能電子顕微鏡における結像理論の研究: 電子顕微鏡 22 (1987) 86-94.

K. Ishizuka: A practical approach for STEM image simulation based on the FFT multislice method, Ultramicroscopy 90 (2001) 71-83.

■ Win/MacHREM を使う前に

マウスのクリック、ダブルクリック、ドラッグ、メニューの選択方法、ファイル選択ダイアログでのフォルダ (ディレクトリ) の移動等の通常の Windows/Macintosh の操作について習熟されていない場合は、コンピュータ付属の操作手引書で、まず Window GUI の操作法に慣れてください。

■ インストール

WinHREM のインストール

WinHREM™は CD-ROM またはオンラインで供給されます。コントロールパネルの「アプリケーションの追加と削除」によりハードディスクにインストールして使用します。

WinHREM 2.5 フォルダ内の「Setup.exe」を実行し、メッセージに従ってインストールを続けて下さい。インストールするディレクトリ名(フォルダ名)は「WinHREM 2.5」として下さい。

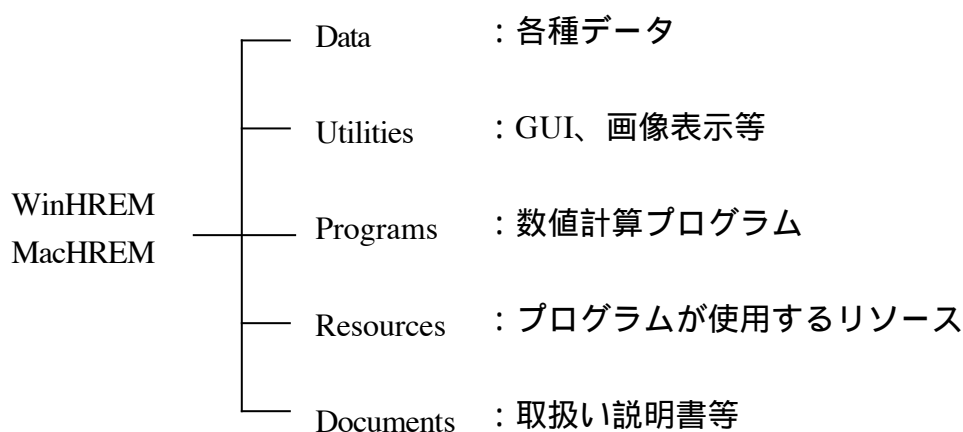
ハードディスクの WinHREM 2.5 フォルダ(通常は Windows\Program Files の中に作られています)は下のようになっているでしょう。

セットアッププログラムにより WinHREM のアプリケーションが「スタート」メニューの「WinHREM 2.5」に登録されています。

MacHREM のインストール

MacHREM™は CD-ROM またはオンラインで供給されます。MacHREM 2.5 フォルダ全体をハードディスクにドラッグコピーします。OS X では MacHREM 2.5 フォルダの「情報を見る」ダイアログで内包するものも含めて「所有権とアクセス権」を「読み/書き」に設定します。

Win/MacHREM のフォルダ構造



(Windows) ユーザキードライバのインストール

NOTE USB キーの場合は USB キーをはずした状態で行なって下さい。

ユーザキードライバのインストール

1. CD-ROM をドライブに挿入します。
2. HASP4Driver フォルダ内の「hdd32.exe」を実行します。
3. Setup type で「Typical」を選択し、インストールを続行します。

各 OS に対応したドライバがインストールされます。

ユーザキーの設置

添付のユーザキーを USB ポートに設置して下さい。コンピュータの再起動の必要はありません。

ユーザキーが認識できない場合には、評価版として動作します。

(Macintosh) ユーザキードライバのインストール

ユーザキードライバのインストール

1. HASP_Driver_Unified_Installer フォルダ内にある aksusb Installer 1.1.4 を実行します。Mac OS X, Mac Classic に対応して必要なものがロードされます。
2. コンピュータを再起動する

ユーザキーの設置

添付のユーザキーを USB ポートに設置して下さい。コンピュータの再起動の必要はありません。

ユーザキーが認識できない場合には、評価版として動作します。

■ さあ例題をやってみましょう

入力プログラムの使い方

3つのグラフィックユーザインターフェイス (GUI) では、データはワークシート (WorkSheet) と呼ばれるウィンドウに入力します。各プログラムは「File」「Edit」「Help」のメニューを持っています (各メニューの詳細については各ユーティリティのメニュー項目を参照ください)。

例題

2つの例題が Data フォルダの中に入っています。酸化錫 (SnO_2) とタングステンとニオブの複合酸化物 ($\text{W}_8\text{Nb}_{18}\text{O}_{89}$) でそれぞれの試料名は SnO2、WNbO となっています。ここでは SnO2 を用いて説明しますが、WNbO の場合も同様に実行できますので各自で試してみてください。

まず散乱強度を計算し、その後で電顕像を計算します。そして、電顕像の濃淡表示を行います。

散乱強度の計算

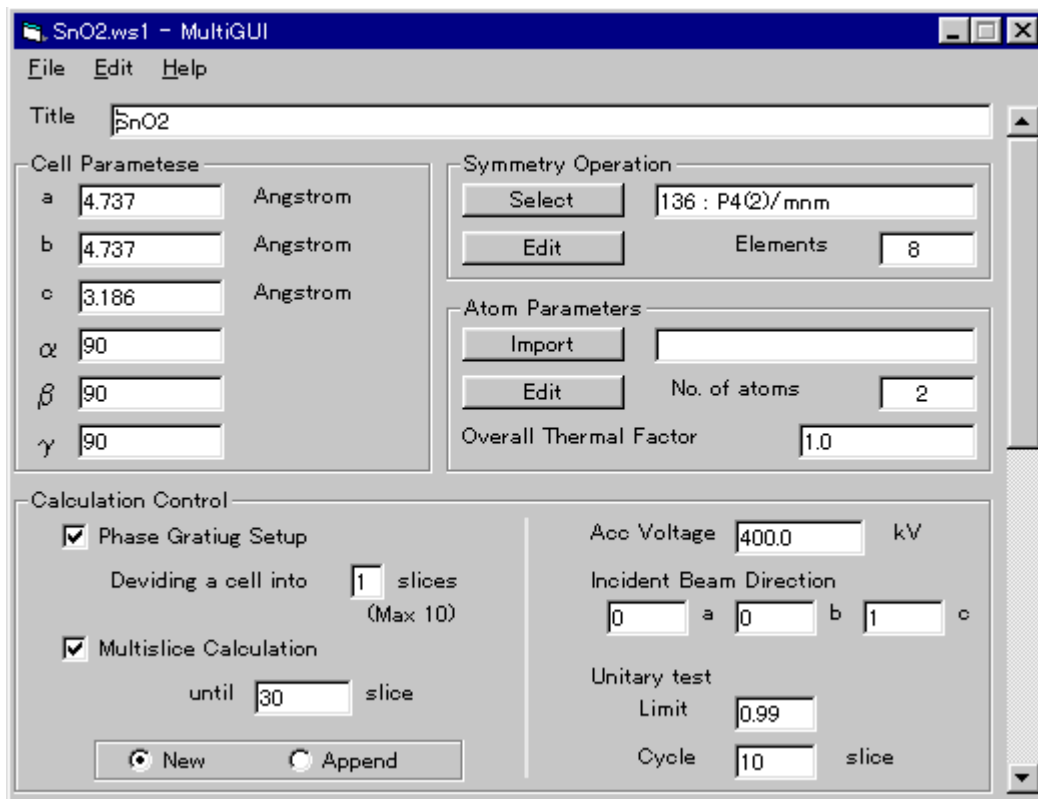
まず、散乱強度を計算するためのデータを以下のように作成しましょう：

1. MultiGUI を起動します。
プログラムの起動方法はコンピュータのマニュアルを参照して下さい。
2. データを選択するダイアログが現れますので、Data フォルダ内の SnO2.WS1 を選択します。

ファイルの選択方法はコンピュータのマニュアルを参照して下さい。

データを入力するワークシートが現れます。

TIPS ワークシートの下の方への入力はスライドバーで移動するか、表示範囲を広げることにより可能となります。



ワークシートには既に適切なデータが入力されています。ここではデータのタイトルを変更したデータを作成しましょう：

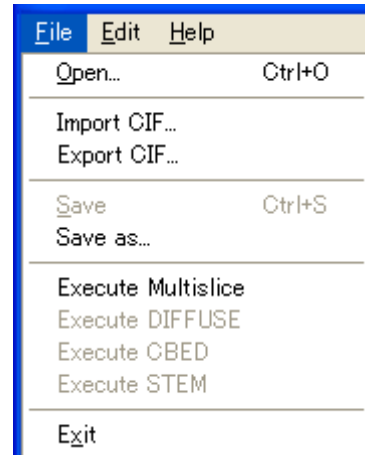
3. Title フィールドに新しいタイトル「SnO2 test calculation」を入力します
4. File メニューの「Save As...」を選択します
5. 現れたダイアログでファイル名を「SnO2test」として保存します

ファイルの保存方法はコンピュータのマニュアルを参照して下さい。

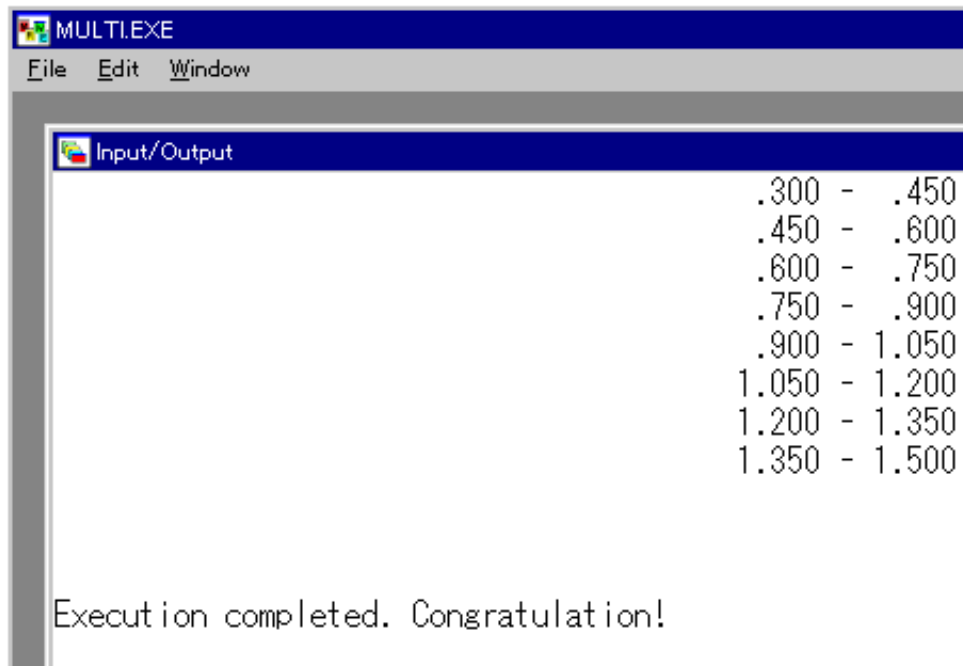
TIPS ファイル名には「.WS1」を指定する必要はありません。指定する場合には「半角英数」で入力して下さい。

次に、このデータを使用して散乱強度を計算します：

6. File メニューから「Execute Multislice」を選択します



散乱強度を計算するプログラム (MULTI.EXE) が起動され、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。そして、計算が正常に終了すると「Execution completed. Congratulations!」と表示されます。



NOTE WinHREM では結果は「Input/Output」ウィンドウに、MacHREM では「MacHREM」ウィンドウに表示されます。このウィンドウには File、Edit などのメニューがあり、基本的なウィンドウの機能が備わっています。例えば、「File」メニューから保存 (Save)、印刷 (Print) 等をおこなうことが可能です。

TIPS プログラムは、「File」メニューの終了 (Exit) またはウィンドウのク

ローズボタン (Windows)、または「Command + .」 (Mac OS) により終了することが出来ます。

計算結果のウィンドウを閉じるには「File」の「Exit」を選択します。(NOTE MacHREM ではウィンドウ「MacHREM」の出力の最後にカーソルのあることを確認して、リターンキーを押してウィンドウを閉じます。)

7. MultiGUI を終了するには File メニューから「Exit (Quit)」を選択します

電顕像の計算

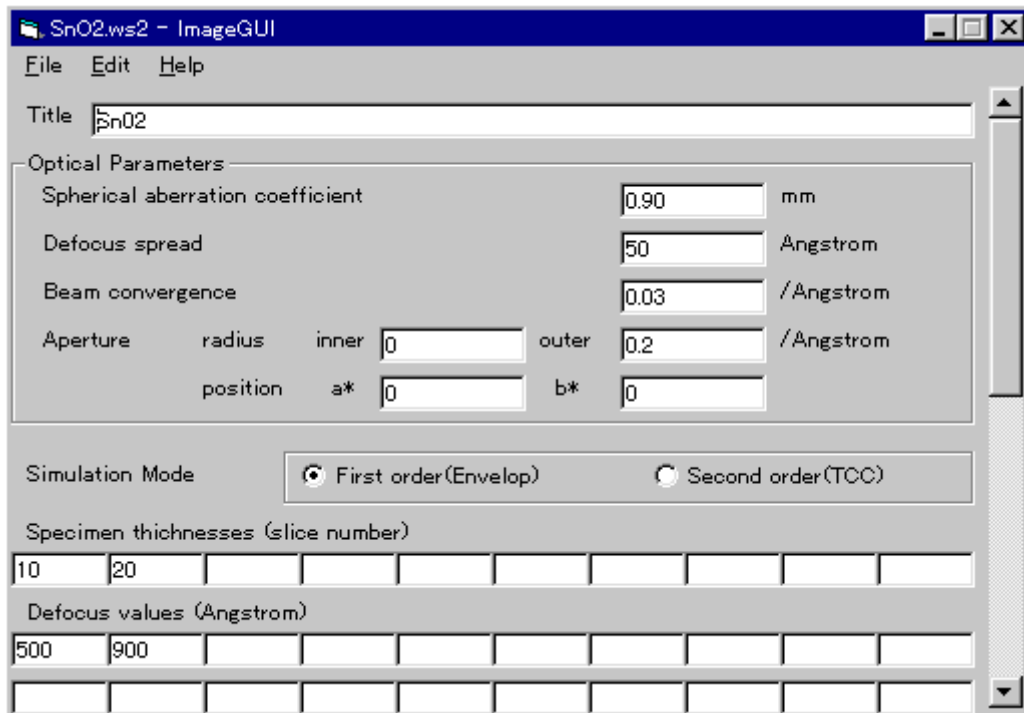
電顕像の数値計算の仕方も散乱強度の計算の仕方とよく似ています。

1. ImageGUI を起動します。
2. データを選択するダイアログが現れますので、Data フォルダ内の SnO2.WS2 を選択します。

NOTE MultiGUI で作成した SnO2test に対する WS2 ファイルは存在しませんので、今から既存のデータを使って作成します。Default.WS2 を開いて、データを最初から作成することも可能です。

データを入力するワークシートが現れます。

TIPS ワークシートの下の方への入力はスライダーで移動するか、表示範囲を広げることにより可能となります。



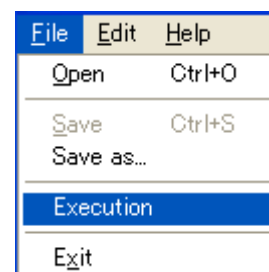
ワークシートには既に適切なデータが入力されています。ここではデータのタイトルを変更したデータを作成しましょう：

3. Title フィールドに新しいタイトル「SnO2 test calculation」を入力します
4. File メニューの「Save As...」を選択します
5. 現れたダイアログでファイル名を「SnO2test」として保存します

TIPS ファイル名には「.WS2」を指定する必要はありません。指定する場合には「半角英数」で入力して下さい。

次に、このデータを使用して電顕像を数値計算します：

6. File メニューから「Execute」を選択します



電顕像を数値計算するプログラム (IMAGE.EXE) が起動され、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。そして、計算が正常に終了す

ると「Execution completed. Congratulations!」と表示されます。

NOTE WinHREM では結果は「Input/Output」ウィンドウに、MacHREM では「MacHREM」ウィンドウに表示されます。このウィンドウには File、Edit などのメニューがあり、基本的なウィンドウの機能が備わっています。例えば、「File」メニューから保存 (Save)、印刷 (Print) 等をおこなうことが可能です。

TIPS プログラムは、「File」メニューの終了 (Exit) またはウィンドウのクローズボタン (Windows)、または「Command + .」(Mac OS) により終了することができます。

計算結果のウィンドウを閉じるには「File」の「Exit」を選択します。(NOTE MacHREM ではウィンドウ「MacHREM」の最後でリターンキーを押してウィンドウを閉じます。)

7. ImageGUI を終了するには File メニューから「Exit (Quit)」を選択します

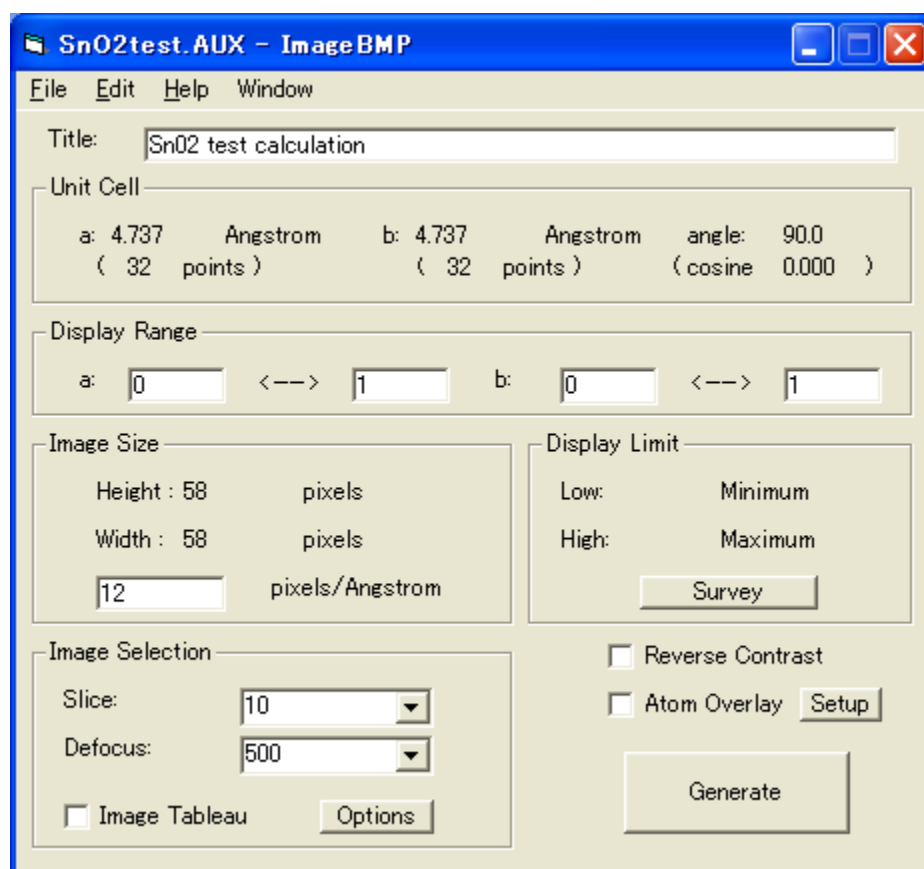
電顕像の濃淡表示

では、数値計算された SnO₂ の電顕像を濃淡表示してみましょう。

まず、ユーティリティを起動して、電顕像の計算データを選びます：

1. ImageBMP を起動します。
2. 表示用データを選択するダイアログが現れますので、Data フォルダ内の SnO₂test.AUX を選択します（表示用データ名には「.AUX」が付いています）。

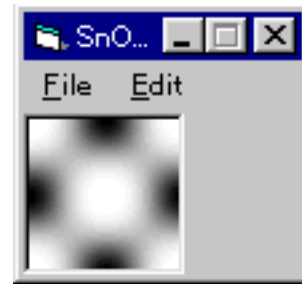
次のようなウィンドウが現れます。



では、電顕像を幾つか計算してみましょう。

3. ウィンドウの右下の「Generate」をマウスでクリックして下さい。

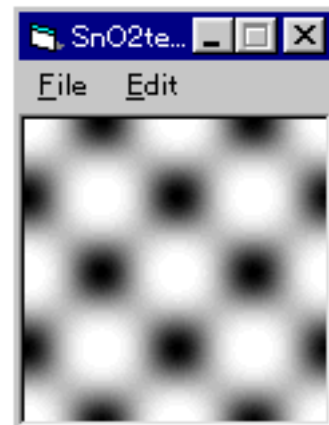
数秒すれば下図のような濃淡図が現れます。これは現在のウィンドウ内で設定条件されているスライス、デフォーカスでの電顕像です。すなわち、スライス厚さ（Slice）：10、デフォーカス（Defocus）：500 A (under)、表示領域（Diaply Range）：(0<->1) x (0<->1)。



次に、表示領域を広げた濃淡図を描いてみましょう。

4. 「Display Range」の a と b の終点（左の入力ボックス）の値をともに 2 にします。
5. 「Generate」をマウスでクリックします。

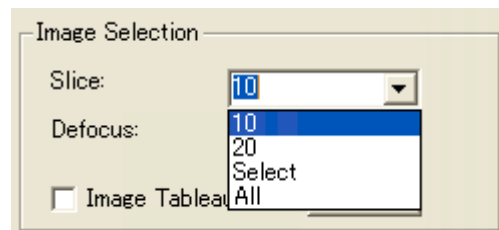
下図のような 2×2 の領域の濃淡図が現れます。



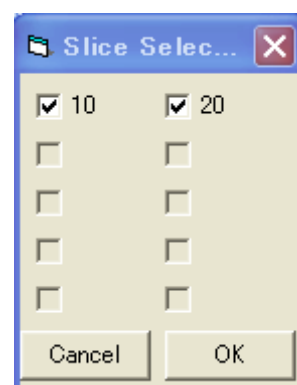
6. 必要であれば画像を各ビットマップウィンドウの「File」メニューの「Save」により保存します。
印刷も各ビットマップウィンドウの「File」メニューの「Print」から行います。
7. 各ビットマップウィンドウを「File」メニューの「Close」によりクローズします。
画像が保存されていない場合には保存を問い合わせるダイアログが現れます。
TIPS このダイアログを表示せずに画像を閉じるには「Shift」キーを押しながらクローズします。
8. ImageBMP プログラムを終了するには、File メニューから「Exit (Quit)」を選択します。

他のスライス、デフォーカスでの計算には「Slice」および「Defocus」のプルダウン

メニューから計算されているスライス数、デフォーカス値を選択します（右の三角をマウスで押して、どれかの値を選択します）。



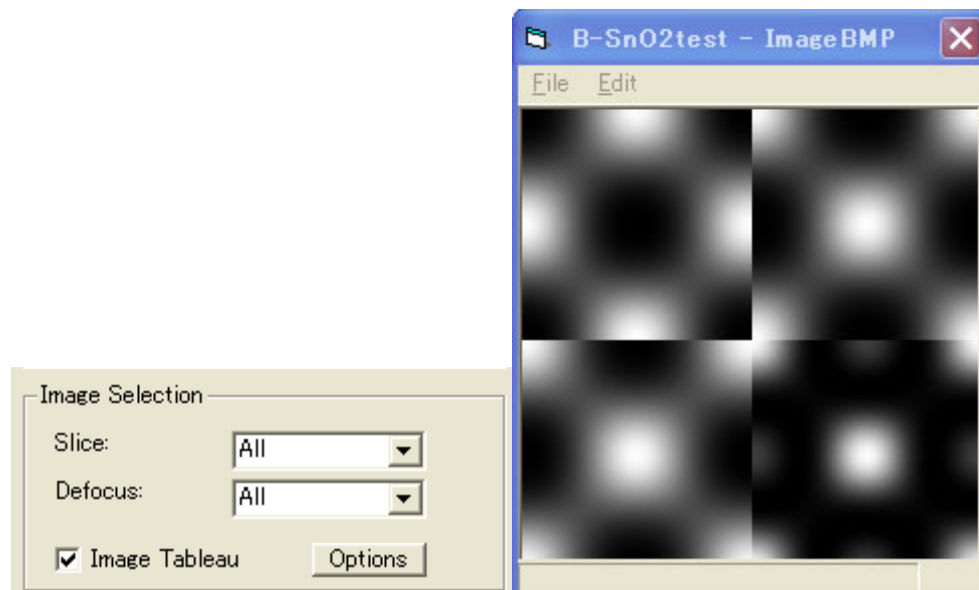
スライス数あるいはデフォーカス値で「Select」を選択しますと、次のようなスライス数あるいはデフォーカス値を選択するダイアログが現れます。そして、表示したい項目をチェックして下さい。



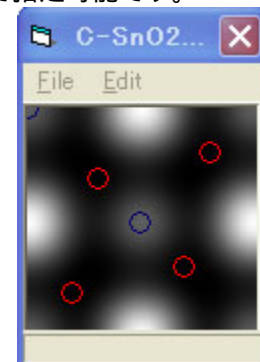
TIPS スライス数あるいはデフォーカス値で「All」または「Select」を選択しますと、全ての、あるいは選択されたスライスあるいはデフォーカスに対する電顕像が順次計算されます。

TIPS スライス数およびデフォーカス値の両方で「All」または「Select」を選択しますと、全ての、あるいは選択されたスライスおよびデフォーカスの組み合わせに対する電顕像が順次計算されます。

TIPS Image Tableau のチェックを選択すると指定された画像が Slice, Defocus のテーブル形式で表示されます。以下の例では全ての計算されている画像が表示されています。Slice, Defocus の配列の方法、各画像の間隔は「Option」で指定可能です（応用編をご参照下さい）。



TIPS Atom Overlay のチェックを選択すると以下のように原子位置に元素毎に色の異なる丸印が描かれます。丸印の大きさ、色は「Setup」で指定可能です。



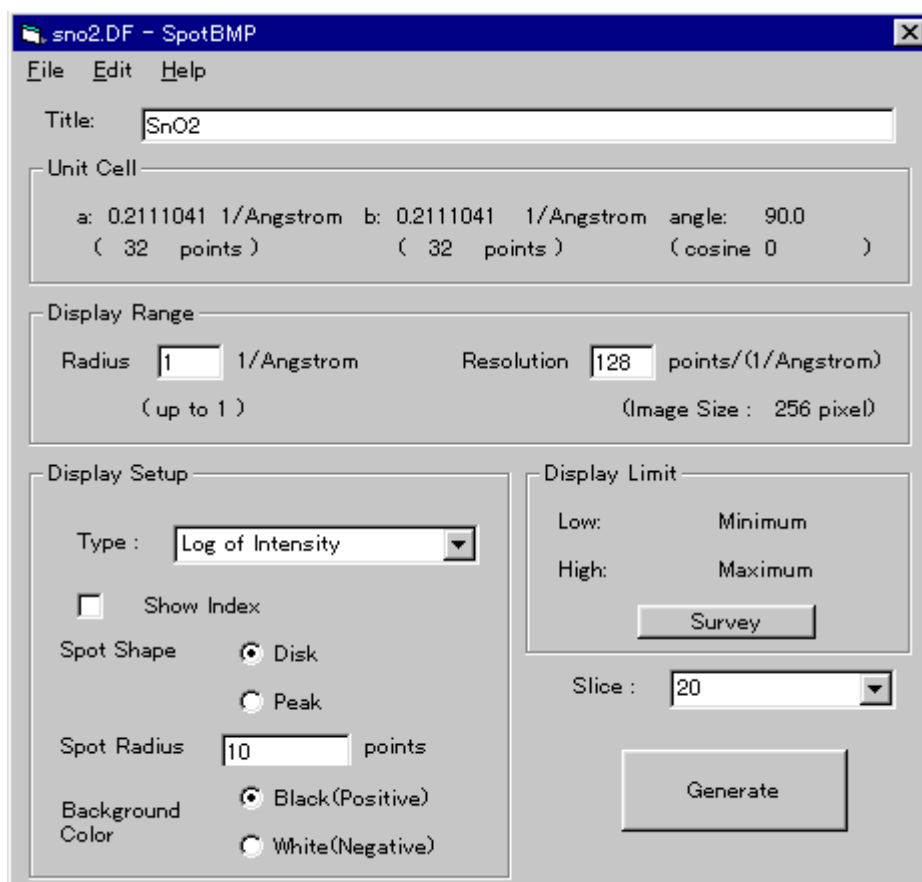
NOTE ここで表示された画像は File メニューの「Print」により印刷することができます。表示される濃淡レベルは階調表示のできるプリンタの性能に依存します。もし、昇華型のカラープリンタなどがあれば高品位な出力が得られます。インクジェット、レーザープリンタでも新聞印刷程度の画像が出力できます。

回折像の濃淡表示

では、数値計算された SnO₂ の電子線回折像を濃淡表示してみましょう。

まず、ユーティリティを起動して、散乱振幅の計算データを選びます：

1. SpotBMP を起動します。

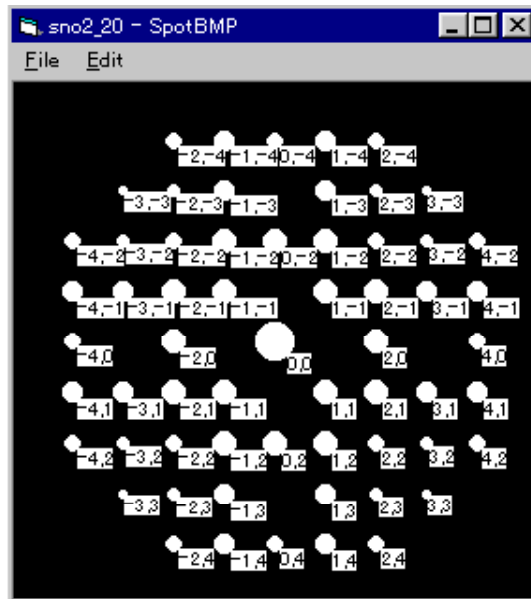


2. 表示用データを選択するダイアログが現れますので、Data フォルダ内の SnO₂test.DF を選択します(散乱振幅のデータ名には「.DF」が付いています)。計算条件を設定するワークシートが現れます

では、回折像を幾つか計算してみましょう。

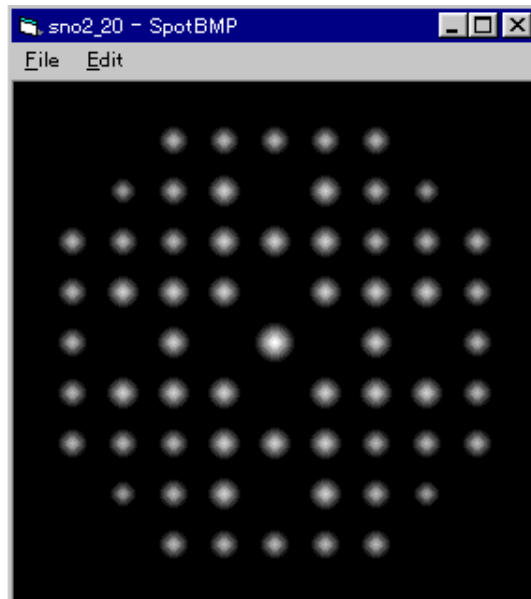
3. 条件を上のように設定して、ウィンドウの右下の「Generate」をマウスでクリックして下さい。

数秒すれば下図のような濃淡図が現れるでしょう。



- 次に、「Show Index」のチェックをはずし、「Spot Shape」で Peak を選択して、「Generate」をマウスでクリックして下さい。

数秒すれば下図のような濃淡図が現れるでしょう。



- SpotBMP プログラムを終了するには、File メニューから「Exit (Quit)」を選択します。

■ トピックス

ここでは知っておくと便利な機能やアドバンスドなトピックスなどを解説しています。最初から全てのトピックスに目を通す必要はありません。必要なときに該当する項目を参照されると良いでしょう。

モデルポテンシャル、波動関数の表示

MultiGUI で計算されたモデルのポテンシャル分布あるいは結晶内の波動関数は ImageBMP で濃淡像として表示することが可能です。

これらを表示したい場合には：

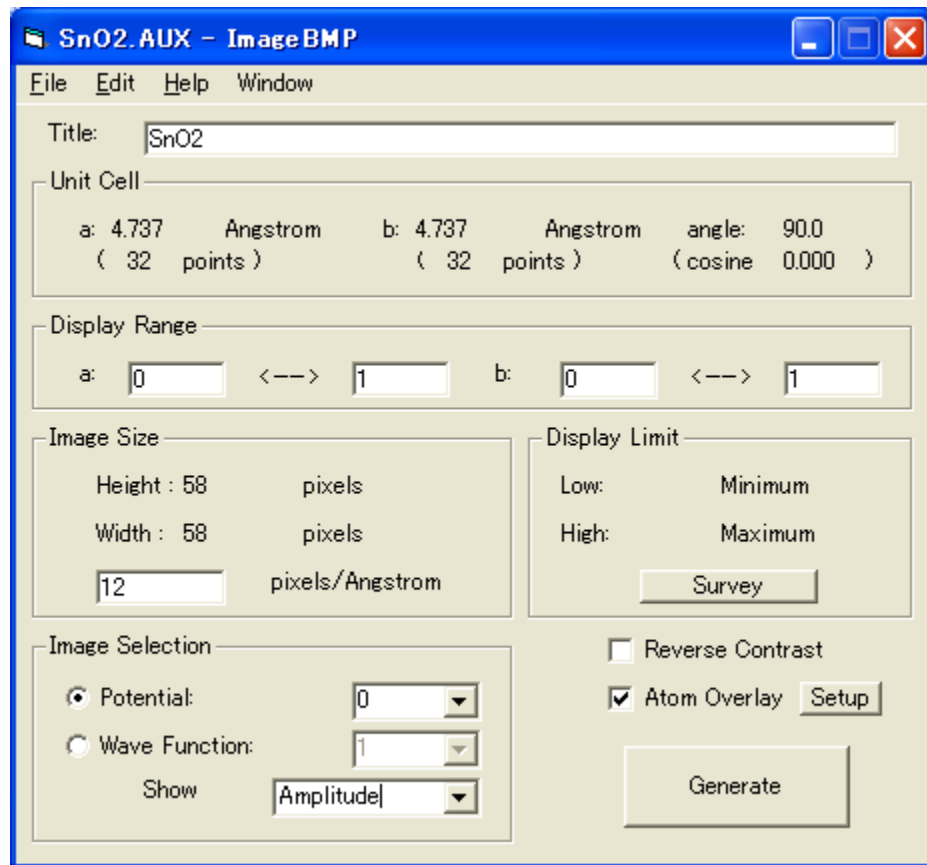
- 1 . MultiGUI の「Output Control」で表示したい項目の「Export Data for Gray Scale Map」のチェックボックスにチェックをして、計算を実行する。

表示データは「.AUX」の拡張子のファイルに保存されます。

NOTE ImageGUI でも電顕像の出力に同じ拡張子のファイルを使用します。このため、濃淡像データを後日使用するために保存しておきたい場合には、「.AUX」のファイルの名前を別のものに変更しておく必要があります。

- 2 . ImageBMP を起動し、対応するサンプル名の AUX ファイルを開く。

次のような電顕像の表示のときにみたウィンドウが開きます。しかし、ポテンシャル分布あるいは結晶内の波動関数を保存したデータの場合には、「Image Selection」のところが異なります。

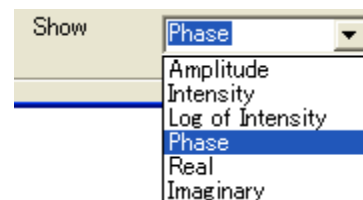


3 . 表示条件、表示するものを設定する

Potential : ユニットセルを複数のスライスに分割した場合には、表示したいスライス番号 (0 から 9 まで) を選択します。

Wave Function : 表示したい試料の厚さをスライス数で指定します。

Show : ポテンシャル分布あるいは波動関数は複素数で保存されていますので、複素数データを表示する形式を選択します。以下のような表示が可能です :



4 . 「Generate」をマウスでクリックすれば、濃淡像が描画されます。

回折強度のチェック

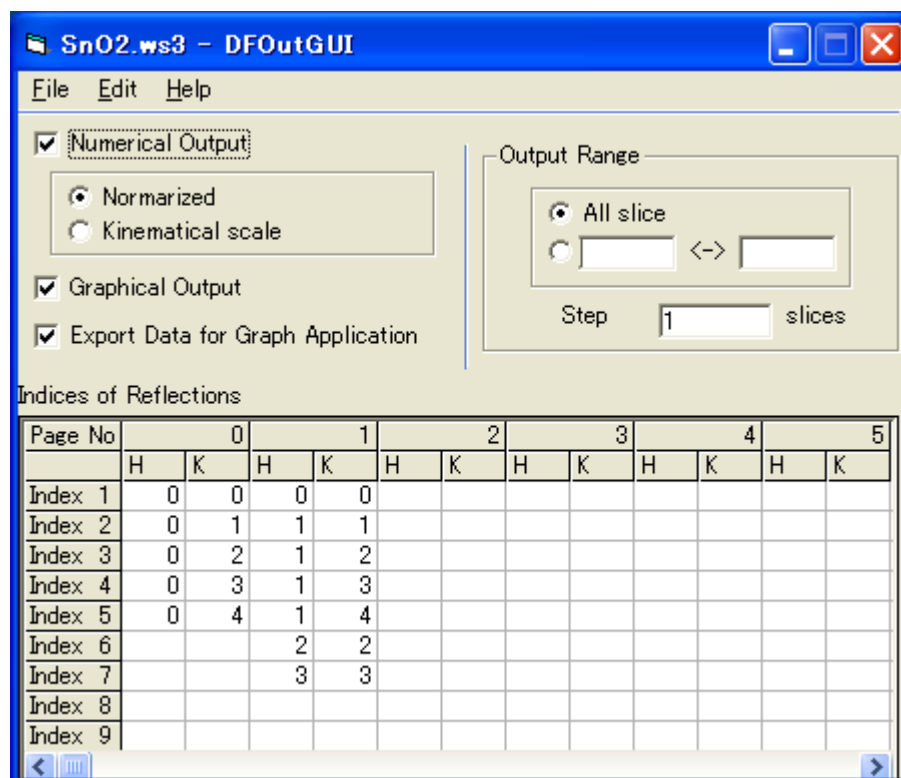
計算された動力学的回折強度は SpotBMP による回折像の濃淡表示で定性的に比較できます。しかし、定量的に調べるには以下のように「DFOutGUI」を利用します。

まず、回折強度（振幅）を表示するためのデータを以下のように作成します：

1. DFOutGUI を起動します。
2. データを選択するダイアログが現れますので、Data フォルダ内の SnO2.WS3 を選択します。

NOTE MultiGUI で作成した SnO2test に対する WS3 ファイルは存在しませんので、今から既存のデータを使って作成します。Default.WS3 を開いて、データを最初から作成することも可能です。

データを入力するワークシートが現れます。



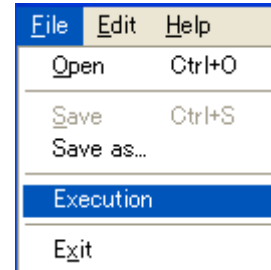
ワークシートには既に適切なデータが入力されています。各ページに指定された指数の反射の強度が示されます。ここでは、このままのデータを使用します。

3. File メニューの「Save As...」を選択します
4. 現れたダイアログでファイル名を「SnO2test」として保存します

TIPS ファイル名には「.WS3」を指定する必要はありません。指定する場合には「半角英数」で入力して下さい。

次に、このデータを使用して回折強度を表示させます：

5. File メニューから「Execute」を選択します。



回折強度を表示するプログラム (DFOUT.EXE) が起動され、計算結果を表示するウィンドウが現れ、指定された指数の反射の振幅の数値、グラフが表示されます。そして、表示が終了すると「Execution completed. Congratulations!」と表示されます。

振幅の数値データは入射波を 1 として規格化された値 (Normalized)、あるいは運動学的な散乱振幅に一致させた値 (Kinematical scale) で表示されます。

```

1 DYNAMICAL STRUCTURE FACTORS BASED ON MULTISLICE METHOD
#####SnO2#####
WAVE LENGTH= 0.03701 MAX INDEX= 16 16
OUT-PUT SLICES ARE FROM 1 TO 9999 BY 1
NORMALIZED AMPLITUDE AND PHASE OUTPUT SCALE TO ABSOLUTE ..... 0.60623E+03

      0 0      0 1      0 2      0 3      0 4
1 0.99536 -1.51 0.00000 0.00 0.01307 0.33 0.00000 0.00 0.00982 0.34
2 0.98189 -1.46 0.00000 0.00 0.02634 0.62 0.00000 0.00 0.01941 0.55
3 0.96086 -1.41 0.00000 0.00 0.03998 0.90 0.00000 0.00 0.02845 0.76
4 0.93429 -1.36 0.00000 0.00 0.05412 1.18 0.00000 0.00 0.03656 0.97
5 0.90484 -1.33 0.00000 0.00 0.06881 1.45 0.00000 0.00 0.04343 1.17

6 0.87557 -1.30 0.00000 0.00 0.08393 1.71 0.00000 0.00 0.04878 1.38
7 0.84965 -1.29 0.00000 0.00 0.09920 1.95 0.00000 0.00 0.05245 1.59
8 0.82992 -1.28 0.00000 0.00 0.11414 2.18 0.00000 0.00 0.05444 1.81
9 0.81833 -1.28 0.00000 0.00 0.12815 2.40 0.00000 0.00 0.05481 2.03
10 0.81558 -1.27 0.00000 0.00 0.14053 2.61 0.00000 0.00 0.05371 2.26

11 0.82089 -1.26 0.00000 0.00 0.15057 2.80 0.00000 0.00 0.05130 2.49
12 0.83222 -1.25 0.00000 0.00 0.15757 2.98 0.00000 0.00 0.04773 2.73
13 0.84674 -1.22 0.00000 0.00 0.16100 -3.13 0.00000 0.00 0.04313 2.97
14 0.86134 -1.18 0.00000 0.00 0.16047 -2.99 0.00000 0.00 0.03758 -3.07
15 0.87312 -1.13 0.00000 0.00 0.15589 -2.86 0.00000 0.00 0.03115 -2.83

16 0.87964 -1.08 0.00000 0.00 0.14757 -2.76 0.00000 0.00 0.02390 -2.58
17 0.87915 -1.01 0.00000 0.00 0.13635 -2.69 0.00000 0.00 0.01587 -2.31
18 0.87062 -0.95 0.00000 0.00 0.12388 -2.68 0.00000 0.00 0.00722 -1.94
19 0.85377 -0.88 0.00000 0.00 0.11292 -2.73 0.00000 0.00 0.00302 0.50
20 0.82907 -0.81 0.00000 0.00 0.10737 -2.85 0.00000 0.00 0.01224 1.21

```

TIPS: ポテンシャル計算に使用された運動学的構造因子 (Kinematical Structure Factor) の値は「Output Range」で開始スライスゼロにすれば表示されます。

グラフ表示では表示の範囲を広げるために振幅の大きさは対数で表示されま
す。また、位相は $[-\pi, +\pi]$ の範囲で表示されます。この位相は運動学的構造因
子の位相と一致させるために $\pi/2$ だけずらされています。

```

1 DYNAMICAL STRUCTURE FACTORS BASED ON MULTISLICE METHOD

#####SnO2#####
      WAVE LENGTH= 0.03701  MAX INDEX= 16 16
      OUT-PUT SLICES ARE FROM 0 TO 9999 BY 1
SYMBOL 1 ----> INDEX 0 0
SYMBOL 2 ----> INDEX 0 1
SYMBOL 3 ----> INDEX 0 2
SYMBOL 4 ----> INDEX 0 3
SYMBOL 5 ----> INDEX 0 4

              AMPLITUDE (LOG)                                PHASE
              -3          -2          -1          0          -PI          0          PI
1! |-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
2! |          |          |          |          |          |          |          |
3! |          |          |          |          |          |          |          |
4! |          |          |          |          |          |          |          |
5! |          |          |          |          |          |          |          |
6! |          |          |          |          |          |          |          |
7! |          |          |          |          |          |          |          |
8! |          |          |          |          |          |          |          |
9! |          |          |          |          |          |          |          |
10! |         |         |         |         |         |         |         |
11! |         |         |         |         |         |         |         |
12! |         |         |         |         |         |         |         |
13! |         |         |         |         |         |         |         |
14! |         |         |         |         |         |         |         |
15! |         |         |         |         |         |         |         |
16! |         |         |         |         |         |         |         |
17! |         |         |         |         |         |         |         |
18! |         |         |         |         |         |         |         |
19! |         |         |         |         |         |         |         |
20! |         |         |         |         |         |         |         |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
##### FILE OUTPUT FOR THE PAGE 0
      INDEXES: 0: 0; 0: 1; 0: 2; 0: 3; 0: 4;

```

NOTE WinHREM では結果は「Input/Output」ウィンドウに、MacHREM では「MacHREM」ウィンドウに表示されます。このウィンドウには File、Edit などのメニューがあり、基本的なウィンドウの機能が備わっています。例えば、「File」メニューから保存 (Save)、印刷 (Print) 等をおこなうことが可能です。

TIPS プログラムは、「File」メニューの終了 (Exit) またはウィンドウのクローズボタン (Windows)、または「Command + .」(Mac OS) により終了することが出来ます。

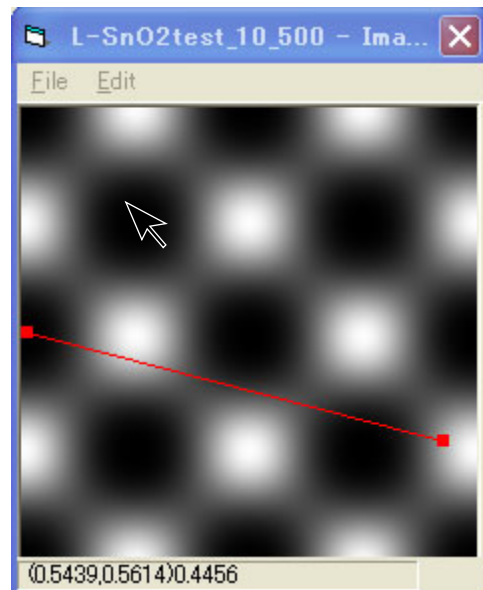
計算結果のウィンドウを閉じるには「File」の「Exit」を選択します。(NOTE MacHREM ではウィンドウ「MacHREM」の最後でリターンキーを押してウィンドウを閉じます。)

- 6. DFOutGUI を終了するには File メニューから「Exit (Quit)」を選択します

画像強度のチェック

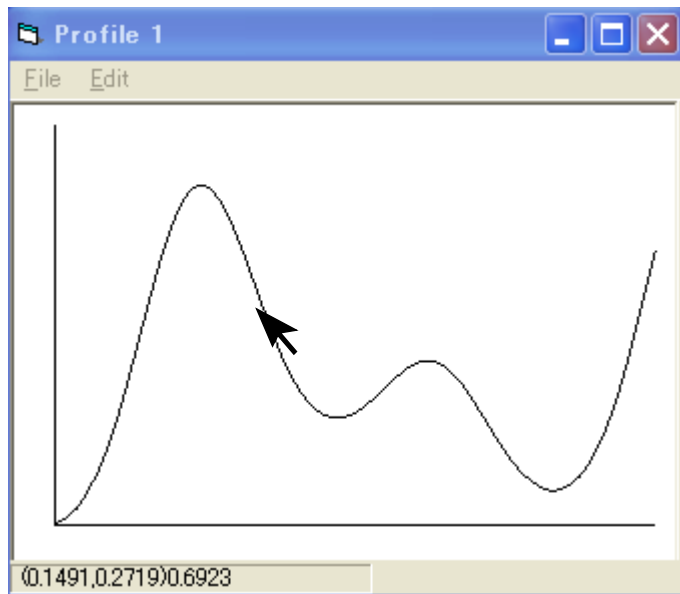
ImageBMP で表示された電顕像や波動関数の強度、また指定された方向のプロファイルを以下のように表示して画像強度を定量的に調べることが出来ます。

濃淡像の各点の強度 : ImageBMP で表示された濃淡像の上にマウスを持っていくと、その下の強度が画像ウィンドウの下部にその時の座標位置とともに表示されます。



NOTE 電顕像で「Image Tableau」を選択して表示された濃淡像では各点の強度は表示されません。

プロファイルの表示 : プロファイルを表示したい先頭位置にマウスを持っていき、Shift キーを押しながら、マウスをドラッグするとラインが描かれ、そのライン下の強度がプロファイルとして別ウィンドウに表示されます。



マウスをライン上に持ってゆくと、その座標と共に強度が表示されます。

NOTE 電顕像で「Image Tableau」を選択して表示された濃淡像ではプロファイルを表示することはできません。

モデルの3次元表示

MultiGUI で使用するモデルを3次元表示で確認することが可能です。ここでは、サンプルデータの SnO₂ の表示を例に説明します。

モデルを表示するには：

1. MultiGUI を起動します。
2. データを選択するダイアログが現れますので、Data フォルダ内のデータを選択します。ここでは、例題として SnO₂.WS1 を選択します。

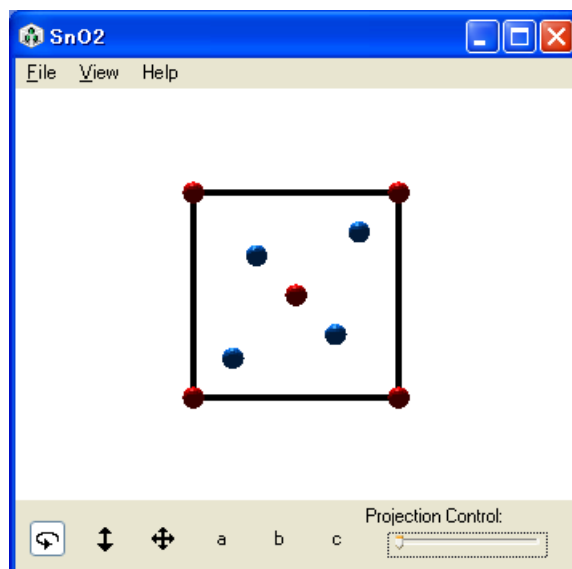
SnO₂ のワークシートが現れます。

3. ワークシートの最下部にある「Options」の「ModelView」をクリックします



TIPS ワークシートの下の方への入力はスライダーで移動するか、表示範囲を広げることにより可能となります。

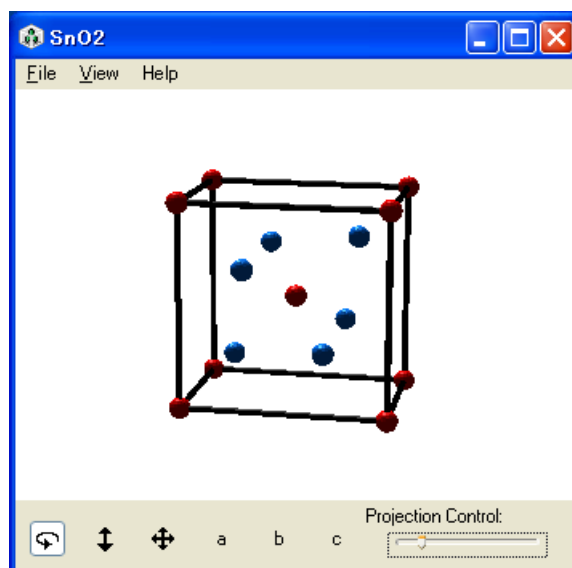
次のようなモデルの3次元表示が現れるでしょう。



既定の設定ではc軸投影で表示されます。投影方向はツールバーの「a, b, c」を選択することにより容易に変更可能です。

TIPS ツールの説明：左から回転、前後移動、面内移動。投影方向の選択、遠近法コントロール。

また、遠近法で表示したい場合には「Projection Control」のスライダーで調整します。次にそのような例を示します。

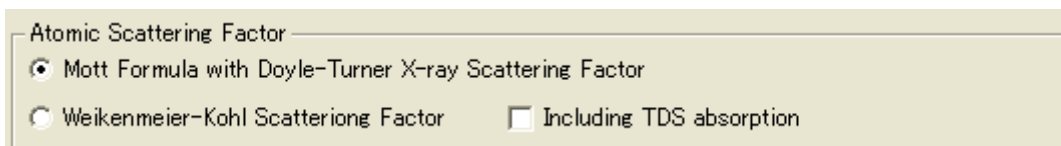


TDS 吸収の取り扱い

熱散漫散乱 (TDS) による弾性散乱波の吸収を取り入れた計算を行うことが可能です。しかし、このためにはモデル原子の温度因子 (Debye-Waller factor) を設定する必要があります。温度因子が既知でない場合には、推定値を指定する必要があります。

TDS による弾性散乱波の吸収を取り入れた計算を行うには：

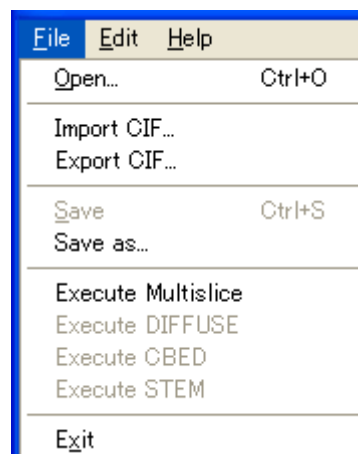
- 1 . MultiGUI を起動し、
- 2 . Edit メニューから Preferences を選びます。
- 3 . Preferences ウィンドウの中の「Atomic Scattering factor」から「Weikenmeier-Kohl Factor」を選択し、「Include TDS absorption」にチェックを付けます。



- 4 . 他のパラメータを設定し、計算を実行します。

CIF ファイルによるデータ共有

MacHREM/WinHREM では CIF (Crystallographic Information File) フォーマットのデータの読み書き (Import/Export) が可能ですので、結晶データ (結晶格子、空間群 (対称操作)、原子位置データ等) を他のソフトウェアと共有することが出来ます



NOTE MacHREM/WinHREM では CIF データとして、格子定数、空間群（対称要素）、各原子の原子種、座標、温度因子、占有率を取り扱っています。

MacHREM と WinHREM では原子位置データ等のモデルデータを固有のデータベース形式で保存しています。このため、他方のデータを直接そのまま利用することは出来ません。しかし、この CIF データの読み書き（Import/Export）機能を使えば MacHREM と WinHREM との間で容易に原子位置データ等を結晶データも含めて共有することが出来ます。

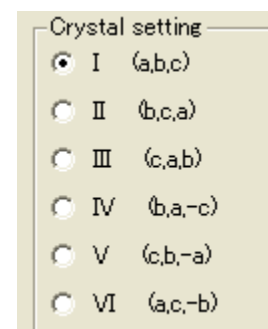
NOTE MultiGUI の「Atom Parameters」の「Edit」ウィンドウで「Export」を選択して、テキストデータとして保存し、そのデータを「Atom Parameters」の「Import」機能により読み込めば、MacHREM と WinHREM とで原子位置データ等を共有することも可能です。

結晶軸の交換

MacHREM/WinHREM では入射面の効果が計算に取り入れられています（参考文献：K. Ishizuka: Multislice Formula for Inclined Illumination: Acta Cryst. A38 (1982) 773-779）。このため、入射表面に平行となる $\langle hk0 \rangle$ の入射方向は許されません。

しかし、入射面の効果を見捨てる場合（多くのプログラムでは入射面の効果は計算には取り入れられていません）には、結晶軸の交換機能を利用すれば、設定したモデルデータで $\langle hk0 \rangle$ の入射方向の計算を容易に行うことが出来ます。

結晶軸を計算機内で交換するには MultiGUI で Edit メニューから Preferences を選択します。すると、Preferences ウィンドウの右上部に以下のような「Crystal Setting」が現れます：



例えば、 $\langle 110 \rangle$ 入射では第3軸（c軸）の指数がゼロですので、I (a,b,c) 系では計算が実行できません。しかし、a軸、b軸の指数はどちらでもゼロではありませんので、a軸、b軸のどちらでも第3軸に選ぶことが出来ます。すなわち、II, III, V または VI のどれでも使用することが出来ます。一方、 $\langle 100 \rangle$ 入射では、b軸、c軸がゼロですので、これらは第3軸には選べません。この場合は a軸が第3軸である II または V を使用することが出来ます。

NOTE MultiGUI のワークシートでは結晶軸の交換は行われません。また、対称操作も変化しません。しかし、計算では選択された結晶軸が利用されます。対称操作も必要に応じて変換されます。実際に計算に利用された結晶格子、原子座標、対称操作等は計算時に出力されますリストに反映されています。

静的散漫散乱の計算

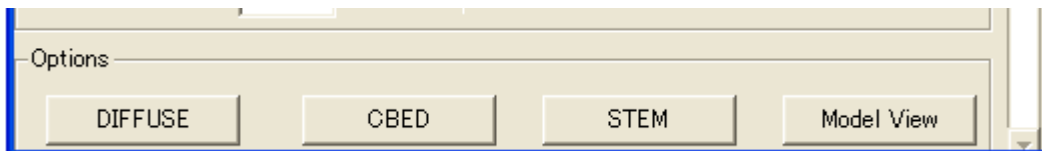
MacHREM/WinHREM では 10 万個の原子を取り扱うことが出来ますので、静的な原子位置のずれを含んだ大きなモデルを作成し、原子位置の乱れによる散漫散乱を計算することが可能です。

散漫散乱を計算するには：

1. MultiGUI を起動します。
2. 通常のようにデータを入力します。

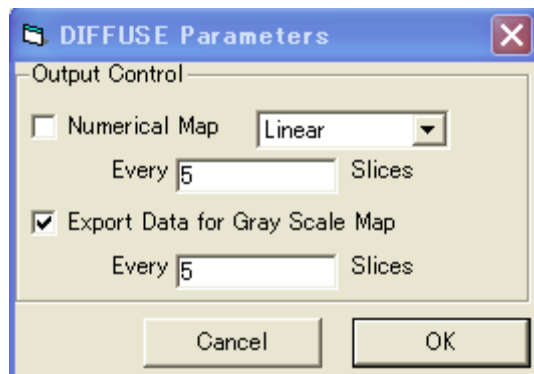
静的な原子位置のずれを含んだ大きなモデルを MultiGUI の「Atom Parameters」の「Edit」ウィンドウで入力するのは困難でしょう。このため、テキスト形式で別途作成したデータを「Import」機能により読み込むのが便利です。

3. ワークシートの最下部にある「Options」の「DIFFUSE」をクリックします

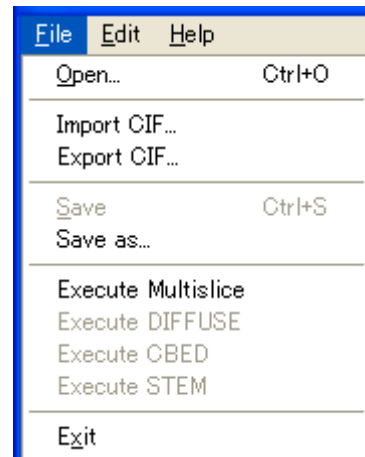


TIPS ワークシートの下の方への入力はスライダーで移動するか、表示範囲を広げることにより可能となります。

以下のような散漫散乱パターンの出力を制御するパラメータを入力するウィンドウが現れます。データ入力後「OK」を押します。



- 4 . File メニューからデータを保存します。
- 5 . File メニューから「Execute DIFFUSE」を選択します。



散漫散乱を計算するプログラム (DIFFUSE.EXE) が起動され、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。そして、計算が正常に終了すると「Execution completed. Congratulations!」と表示されます。

NOTE WinHREM では結果は「Input/Output」ウィンドウに、MacHREM では「MacHREM」ウィンドウに表示されます。このウィンドウには File、Edit などのメニューがあり、基本的なウィンドウの機能が備わっています。例えば、「File」メニューから保存 (Save)、印刷 (Print) 等をおこなうことが可能です。

TIPS プログラムは、「File」メニューの終了 (Exit) またはウィンドウのクローズボタン (Windows)、または「Command + .」 (Mac OS) により終了することができます。

ウィンドウを閉じるには「File」の「Exit」を選択します。(NOTE MacHREM ではウィンドウ「MacHREM」の最後でリターンキーを押してウィンドウを閉じます。)

- 6 . MultiGUI を終了するには File メニューから「Exit (Quit)」を選択します

散漫散乱図形の表示

散漫散乱のパターンを表示するには「ImageBMP」を使用します。散漫散乱のパターンのデータは「.ED」の拡張子を持ったものです。

散漫散乱図形を表示するには：

- 1 . ImageBMP を起動します。
- 2 . 指定したサンプル名の「.ED」ファイルを選択します。

3 . 表示の設定を行います

通常の「ImageBMP」の使用法に従い表示領域、解像度等を設定し、表示したい試料厚さをスライス数で選択します。

散漫散乱データは複素数で保存されていますので、表示するデータ形式を「Show」より選択します。

4 . 「Generate」をクリックして濃淡像を表示します

応用編

この章では
新規データの作成方法
環境設定
テンプレートによるカスタマイズ
について説明します。
その後、
個々のユーティリティの詳しい説明が続きます。

■ さあ自分の問題にとりかかろう

まず、例題を利用して Win/MacHREM の利用法に習熟して下さい。十分利用法が判ったら自分の問題に取りかかりましょう。ここでは、新規データの作成について説明した後、計算結果の印刷等についてさらに詳しく説明します。

新規データの作成手順

自分の試料にあったデータを新しく作成するには次の2通りの方法があります：

- 既存のデータを修正する
- 新規にデータを作成する

既存のデータを修正して新しくデータを作成するには：

1. 対応するグラフィカルユーザインターフェイス (GUI) を起動します。
2. 現れたデータ選択ダイアログで既存データを選択します。
データをを入力するワークシートが現れます。
3. File メニューの「Save As...」により新しいデータ名を付けて一旦保存します。

NOTE これは既存のデータを上書きして紛失するのを防ぐために行います。必ず実行されることをお勧めします。

4. 次に、データを必要に応じて変更します。
5. 必要なデータが入力できたら File メニューの「Save」により再度保存します。

新規にデータを作成するには：

1. 対応するグラフィカルユーザインターフェイス（GUI）を起動します。
2. 現れたデータ選択ダイアログで Default を選択します。
「Untitled」と書かれたワークシートが現れます。
3. ワークシートにデータを入力します。
4. 必要なデータが入力できたら File メニューの「Save As...」により保存します

環境設定（Preferences）

計算プログラムには特定の単位でデータを供給する必要がありますが、ユーザがグラフィカルユーザインターフェイス（GUI）で使用するデータ入力の単位は Preferences で選択できます。また、試料に依存しない計算コントロールは個々のデータに入力する煩雑さを避けるために Preferences で設定するようになっています。

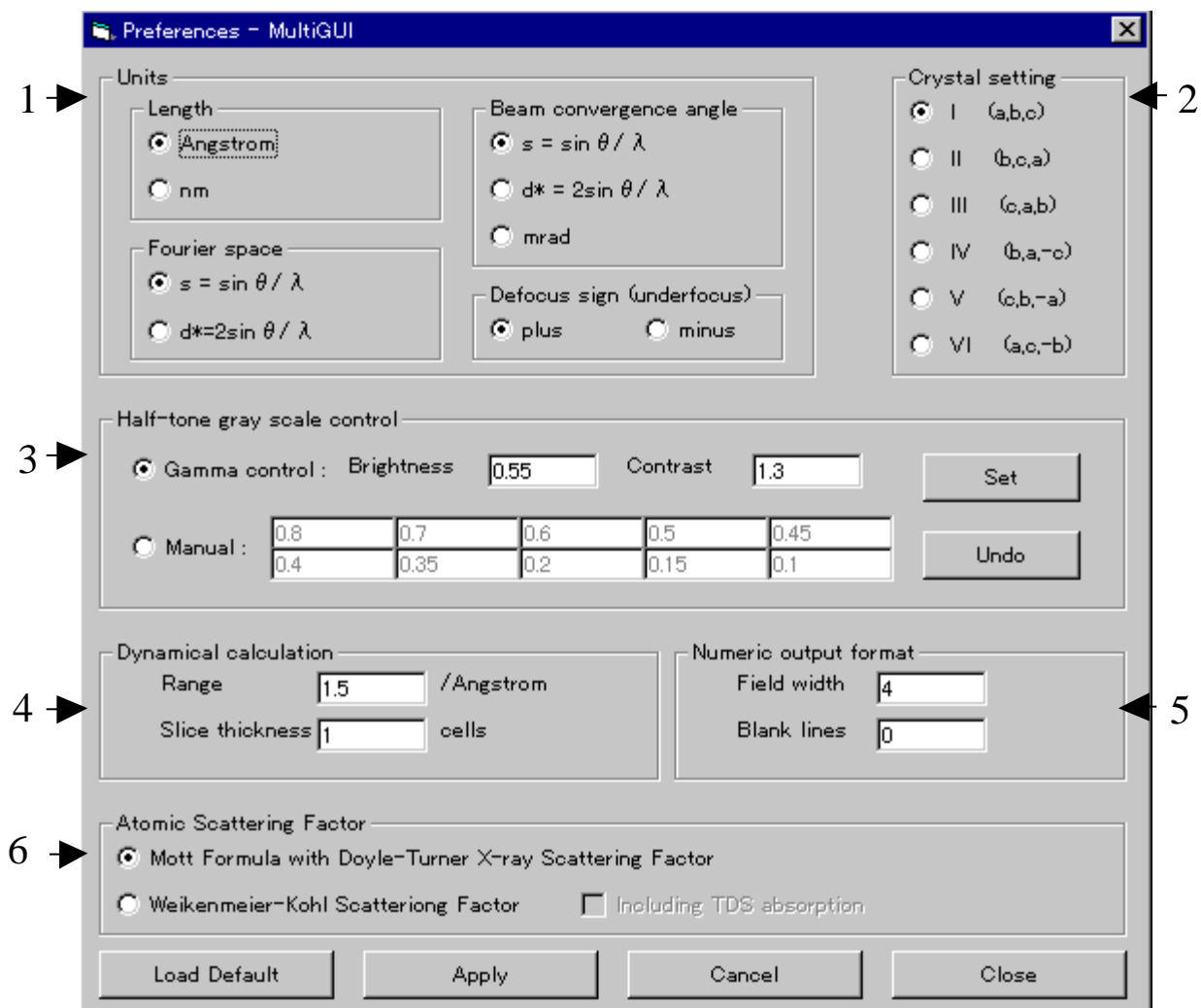
Units, Defocus sign 等は Preferences で最初に示されている単位が計算プログラムの中で使用されています。他の形式で入力されたものはグラフィカルユーザインターフェイス（GUI）がデータ変換を行います。

環境設定を行うためには：

1. MultiGUI あるいは ImageGUI の Edit メニューから「Preferences」を選択します。
次のような環境設定のウィンドウが開きます。
2. それぞれの好みに合うように設定を変更します。
「Apply」をクリックすると変更がワークシートに反映されます。
3. 「Close」または「Cancel」をクリックして Preferences ウィンドウを閉じます。
「Close」をクリックすると Preferences 上の現在の設定がワークシートに反映されます。
「Cancel」をクリックすると「Apply」後の Preferences 上の変更は破棄され、ワークシートにも反映されません。

NOTE 「Apply」によりワークシートに反映された変更は「Cancel」では元に戻りません。ワークシート上の変更をもとに戻すためには、Preferences 上の設定を元に直して「Apply」をクリックして下さい。

TIPS 「Close」をクリックする前に、「Apply」をクリックしてワークシート上の変更を確認されることをお勧めします。



Units, Defocus sign は最初にあるものが計算プログラムの中で使用されています。他の形式で入力されたものはグラフィカルユーザインターフェイス (GUI) がデータ変換を行います。

1. 単位

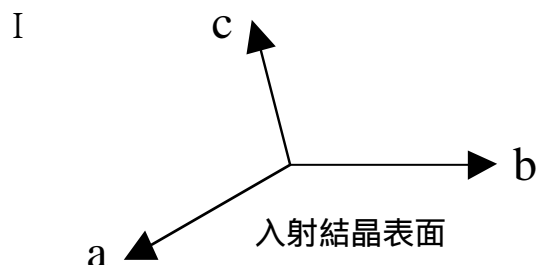
長さ : Angstrom、nm

フーリエ空間 (逆空間) : s、d*

入射ビーム収束角 : s、d*、mrad

デフォーカスの符号 (アンダーフォーカス) : 正、負

2. 結晶セッティング



II 以降は軸を取り換えたものである。

3. ハーフトーンレベル設定

文字印字によるハーフトーンのレベル設定

4. 動力学散乱計算

範囲 (Range) : 動力学散乱計算に取り込むフーリエ空間の範囲 (半径)

スライス厚さ (Slice thickness) : 投影近似のときのスライスの厚さ

5. 数値出力フォーマット

出力幅 (Field width) : 各数値データの文字数

行間 (Blank lines) : 行送りの数

6. 散乱能の選択

Weikenmeier-Kohl の散乱能を用いて、TDS 吸収を取り入れるには各原子の温度因子 (Debye-Waller Factor) を原子パラメータとして指定が必要になります。

テンプレート (デフォルトデータ) の作成

グラフィカルユーザインターフェイス (GUI) ではデータの入力にワークシートを利用します。WinHREM/MacHREM には標準の既定値を持つワークシート (Default.ws1 など) が添付されています。このような既定値を設定したワークシートをデフォルトデータ (テンプレート) と呼ぶことにします。新規にデータを作成する場合、これらをテンプレートとして使用するとデータ入力を一部省略できます。

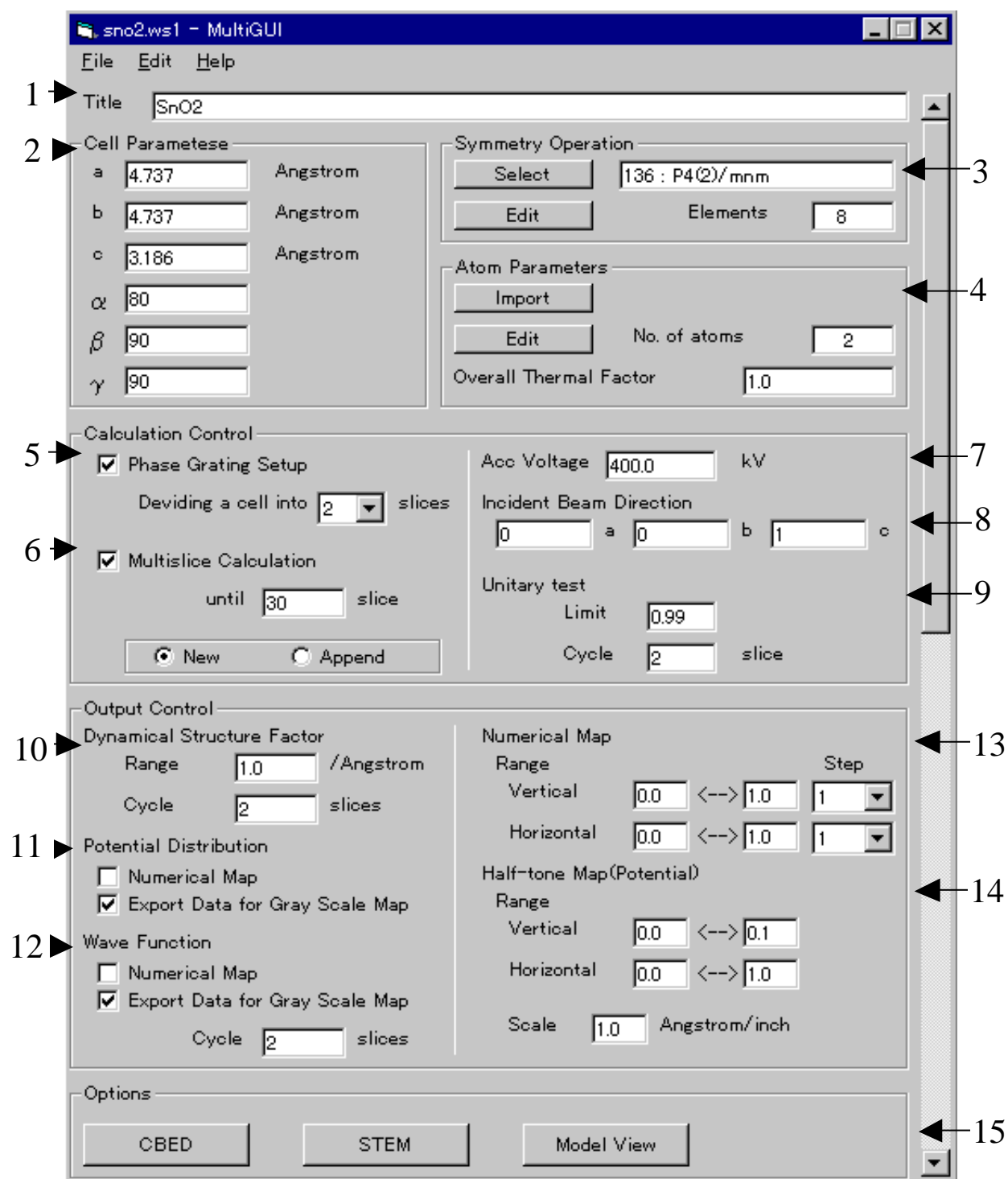
しかし、個々の実験条件に対応したワークシートがあればデータ入力をさらに省略することができます。例えば、散乱計算では加速電圧、散乱振幅の出力範囲等、また電顕像計算では球面収差係数、デフォーカス幅、ビームの開き角、絞りの大きさ等があります。また、他の設定にも自分の好みを反映したデフォルトデータを作成することができます。

デフォルトデータの作成はデータの新規作成と殆ど同じです。ただ、全てのデータを記入するのではなく、既定値として設定したいデータのみを指定します。

1. 既定値を設定したいグラフィカルユーザインターフェイス (GUI) を起動します
2. Default ファイルを選択します
3. 既定値として設定したいデータを指定します
4. 既定値のデータであることがよく判る名前をつけて保存します
次回からここで保存したデータをテンプレートとして使用することによりデータ入力を一部省略することができます。

■ MultiGUI の使用法

ワークシート



1. タイトル (Title)

試料名、組成など自由に入力してください。

2. 格子定数 (Cell Parameters)

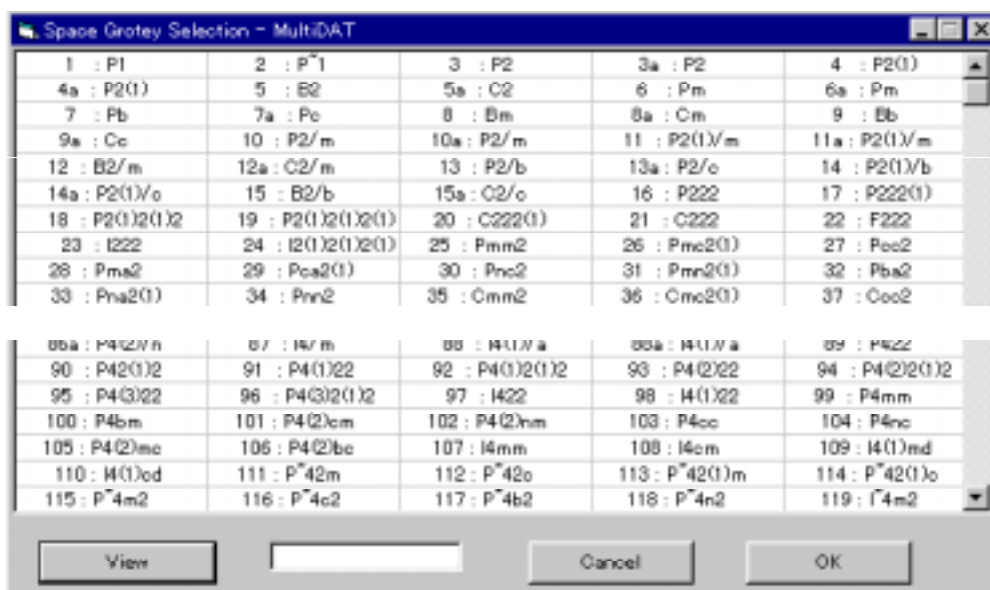
格子定数はセルの長さや角度を入力します。長さは選択している単位 (Angstrom あるいは nm) で入力して下さい。角度は度数または cosine 値で入力します。度数と cosine 値の混合は許されません (度数で入力することを推奨します)。

3. 対称操作 (Symmetry Operation)

対称操作は「Select」により空間群を選択するか、あるいは対称要素を「Edit」により編集します。

「Select」ボタン：

「Select」ボタンをクリックすると次の空間群 (Space Group) を選択するためのウィンドウが現れます。表の中から対応する空間群を選択します。選択された空間群は下のボックスに表示されます。

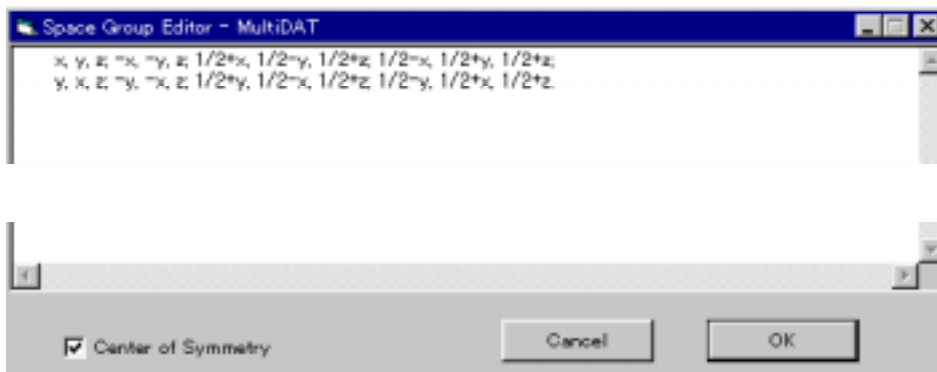


「View」をクリックしますと、次の「Edit」で現れるウィンドウに選択した空間群の対称操作が現れます。念のため、必ず対称操作を確認して下さい。

「Elements」：対称要素の数が表示されます。

「Edit」ボタン：

「Edit」ボタンをクリックすると任意の対称操作を入力するためのウィンドウが現れます。



対称操作の指定方法は International Tables for Crystallography の表記に準じます。

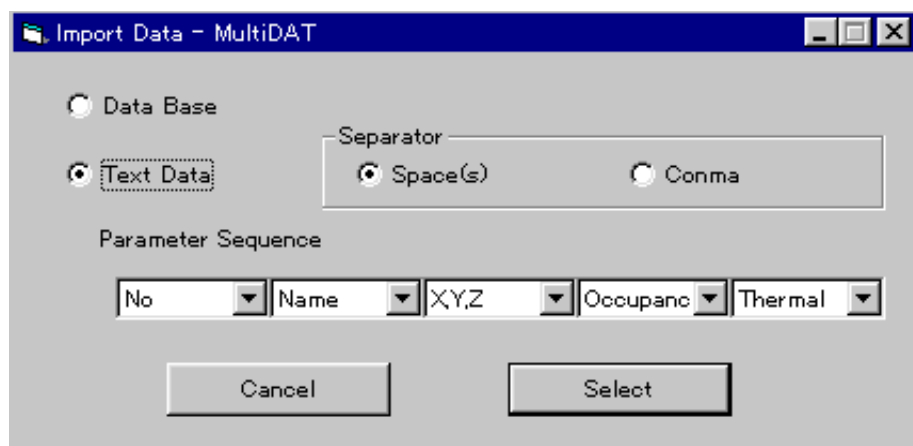
- 各対称操作の x y z 成分の区切りはコンマ (,)。
- 各対称操作の区切りはセミコロン (;)。
- 入力の終了はピリオド (.)。

4. 原子パラメータ (Atom Parameters)

原子パラメータは「Import」により原子パラメータをファイルから入力するか、あるいは個々のデータを「Edit」により編集します。

「Import」ボタン：

「Import」ボタンをクリックすると既存の原子パラメータファイルを選択するためのウィンドウが現れます。



- 「Data Base」：MultiGUI で保存された原子パラメータデータを再利用する場合に指定します。
- 「Text Data」：テキスト形式で作成されている原子パラメータデータを利用する場合に指定します。この場合には、さらにデータ区切り (Separator)、デ

ータ項目の順序 (Parameter Sequence) を指定します。対応するデータ項目がない場合には「None」を指定してデータを省略することができます。

実際のファイルは「Select」ボタンをクリックして現れるファイル選択ダイアログで指定します。

データ入力が行われると、次の「Edit」で現れるウィンドウに原子パラメータが表示されます。

「No of Atoms」：原子数が表示されます。

「Edit」ボタン：

「Edit」ボタンをクリックすると原子パラメータを入力するためのウィンドウが現れます

No	Name	X	Y	Z	Occupancy	Thermal
1	Sn	0	0	0	1	0
2	O	0.307	0.307	0	1	0

- 番号 (No)：自動的に振り付けられます。
- 名前 (Name)：原子に名前を付けます。名前には必ず元素名を含めて下さい。例：Ag、C(1)、O-2
- 座標 (x, y, z)：格子内の位置を小数で入力します。
- 占有率 (Occupancy)：原子の占有確率を入力します。通常は1で、省略可能です。
- 温度因子 (Thermal)：等方性温度因子を入力します。ゼロを入力した場合(あるいは省略した場合)には次の全温度因子 (Overall Thermal Factor) が適用されます。

全温度因子 (Overall Thermal Factor)：

結晶全体の等方性温度因子を入力します。各原子の温度因子にゼロが入力されている場合にはこの温度因子が適用されます。

5. 位相格子 (Phase Grating Setup)

位相格子計算の有無

分割スライス数 (Dividing a cell into)：ユニットセルを最大 10 分割することができます

6. マルチスライス計算 (multislice Calculation)

マルチスライス計算の有無

最終スライス数：計算の最後のスライス数を指定します

新規、継続の選択：最初の計算では新規を選びます。最終スライス数を増加させて、以前の計算を継続することも可能です

7. 加速電圧 (Acc Voltage)

8. 電子線の入射方向 (Incident Beam Direction)

入射方向を実格子座標で指定する。例：[001]入射

9. ユニタリーテスト (Unitary Test)：散乱強度の総和に関するテスト

許容限界 (Limit)：1に近い程制限が厳しくなる

テスト頻度 (Cycle)：チェックを行うスライス間隔

出力の制御

10. 動力学的散乱振幅 (Dynamical Structure Factor)

出力範囲 (Range)：散乱振幅をファイル出力する範囲 (半径)

出力頻度 (Cycle)：ファイル出力を行うスライス間隔

11. ポテンシャル分布 (Potential Distribution)

数値マップ出力の有無

濃淡図用データのファイル出力の有無

12. 波動関数 (Wave Function)

数値マップ出力の有無

濃淡図用データのファイル出力の有無

出力頻度 (Cycle)：ファイル出力を行うスライス間隔

13. 数値マップ (Numerical Map)

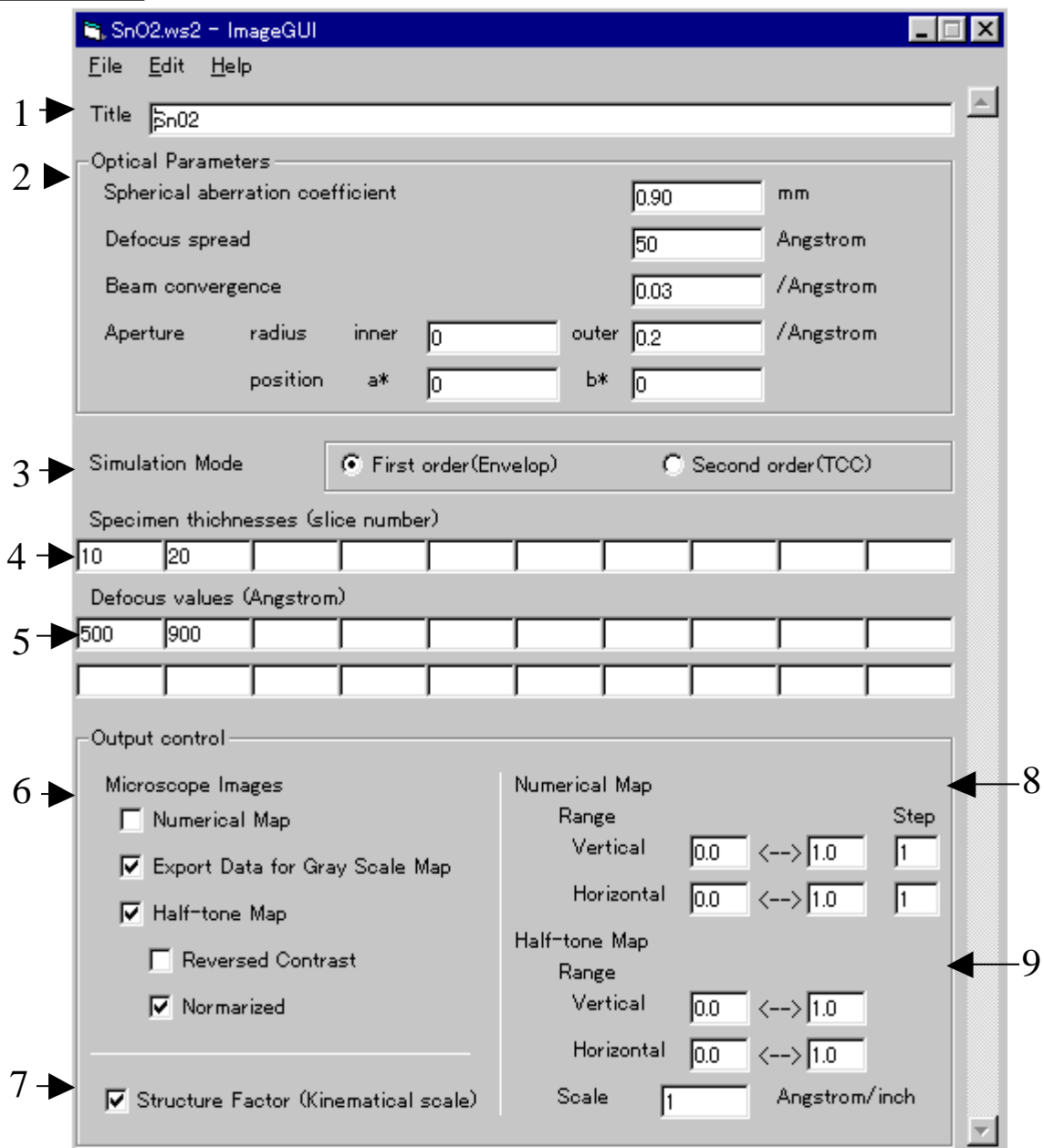
数値マップ出力の垂直、水平方向の範囲、ステップ

14. ハーフトーンマップ (Half-tone Map)

ハーフトーンマップの垂直、水平方向の範囲、縮尺

■ ImageGUI の使用法

ワークシート



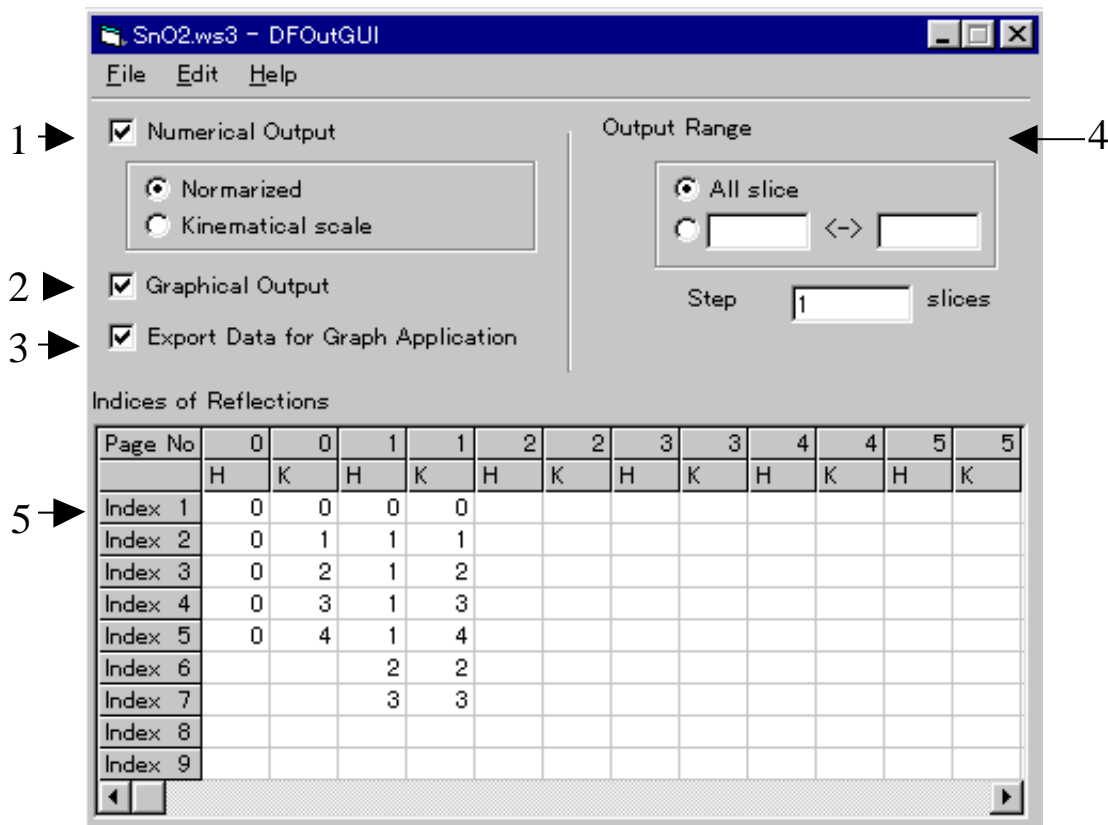
1. タイトル (Title)
試料名、組成など自由に入力してください。
2. 光学パラメータ (Optical Parameters)
 - 球面収差係数 (Spherical aberration coeff.)
 - デフォーカスの幅 (Defocus spread)
 - ビームの開き角 (Beam convergence)
 - 絞り (Aperture) の大きさ (radius)
 - 位置 (position)
3. 部分干渉性の取扱いの指定 (Simulation Mode)
1 次近似 (First order/Envelope) か 2 次近似 (Second order/TCC) かを選択します。
4. スライス厚さ (Slice thicknesses)
電顕像を計算する試料の厚さをスライス数で指定します。一度に最大 10 個指定できます。
5. デフォーカス値 (Defocus values)
電顕像を計算するデフォーカス値を指定します。一度に最大 20 個指定できます。単位とデフォーカスの符号は Preference に従って入力して下さい。

出力の制御

6. 顕微鏡像 (Microscope Images)
 - 数値マップ出力の有無
 - 濃淡図用データのファイル出力の有無
 - ハーフトーンマップ出力の有無
 - コントラストの反転の有無
 - 正規化の有無
7. 構造因子 (Structure Factor) リスト出力の有無
指定すれば各スライスの計算に先立ち出力されます
8. 数値マップ (Numerical Map)
数値マップ出力の垂直、水平方向の範囲、ステップ
9. ハーフトーンマップ (Half-tine Map)
ハーフトーンマップの垂直、水平方向の範囲、縮尺

■ DFOutGUI の使用法

ワークシート



1. 数値出力 (Numerical Output) の有無
指定された反射の振幅、位相が出力されます。
振幅の正規化 (Normalized) あるいは運動学的スケール (Kinematical scale) を選択します。
2. グラフ出力 (Graphical Output) の有無
文字位置でグラフ化したリスト出力の制御。
振幅は対数スケールで表示されます。
3. データのファイル出力 (Export Data for Graphical Application)

グラフアプリケーション用データ（スペース区切りデータ）のファイル出力の制御。

4. 出力範囲（Output Range）

数値およびグラフ出力の場合の範囲、間隔をスライス数で指定します。

5. 出力反射の指数（Indices of Reflections）

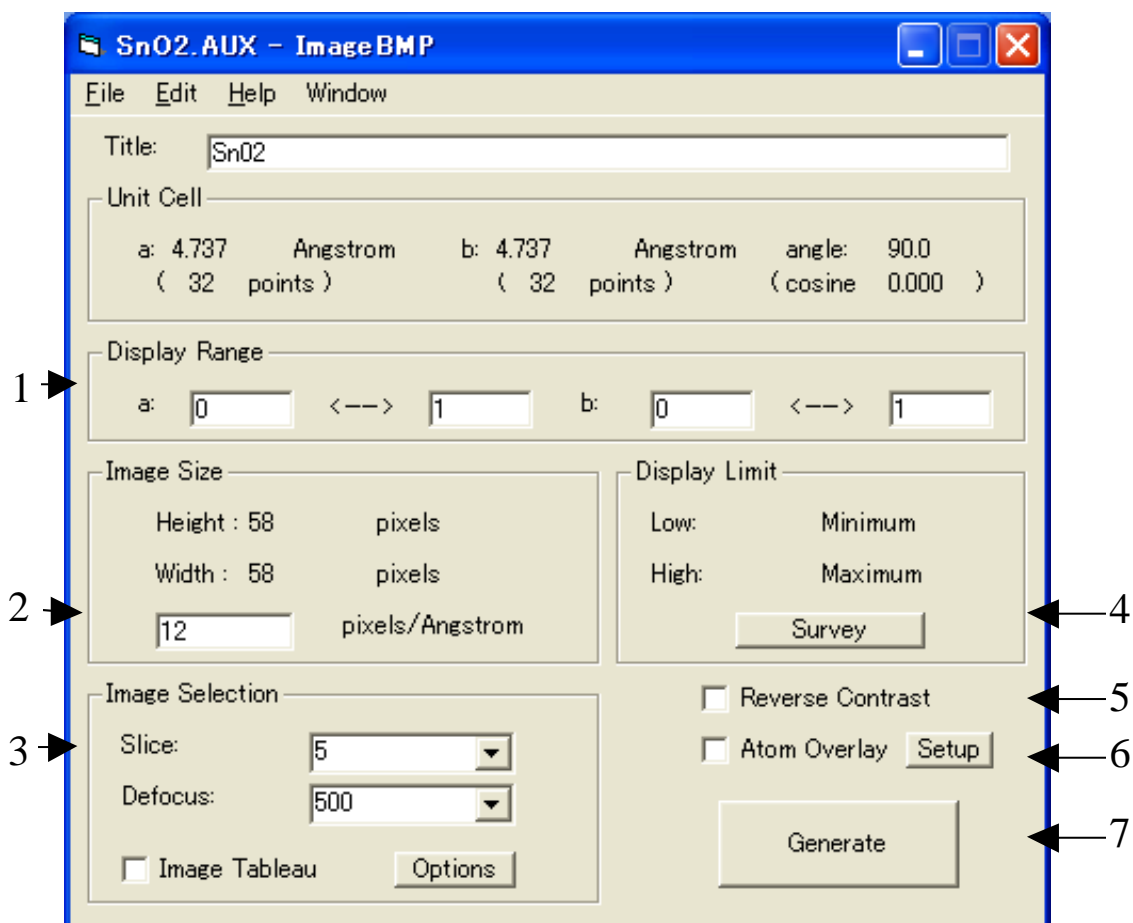
強度変化を出力したい反射の指数を指定します。各ページには最大 9 個の反射を指定できます。また、一度に 10 ページ分の出力の指定が可能です。

指数は回折図形上の 2 次元指数で指定します。

■ ImageBMP の使用法

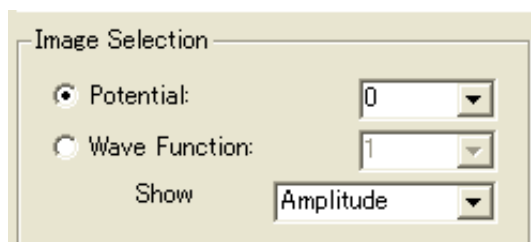
ワークシート

電頭像データの場合



データのタイトルと2次元セルの大きさ（および計算点）が上部に表示されます。

動力学散乱計算データの場合の Image Selection :



電顕像データの場合

1. 表示範囲 (Display Range)

表示する範囲をセルを基本に指定します。

2. 表示スケール (pixel/Angstrom)

1 Angstrom 当たりのピクセル数を指定します。表示される図形の大きさ (高さ
と幅) がスケールに合わせて表示されます。

3. 画像の選択 (Image Selection)

- スライス数 (Slice)

濃淡像を表示する試料の厚さ (スライス数) を選択します。「All」を選択すると表示されている全てのスライスについて順次計算されます。「Select」を選択するとスライスの選択ダイアログが現れます。

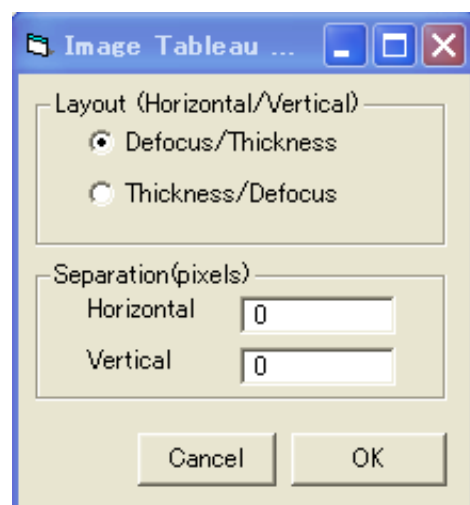
- デフォーカス (Defocus)

濃淡像を表示するデフォーカス値を選択します。「All」を選択すると表示されている全てのデフォーカス値について順次計算されます。「Select」を選択するとデフォーカス値の選択ダイアログが現れます。

NOTE 「Preferences」でのユーザの選択に拘わらず計算では Under-focus が正になっています。

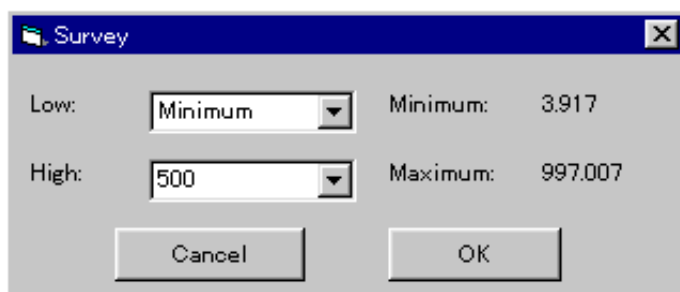
- Image Tableau

選択された画像の表示形式を指定します。チェックを付けると表 (テーブル) の形式で並べて表示されます。「Options」をクリックすると画像を並べる方向、各画像間の間隔を指定する次のダイアログが現れます。



4 . 強度範囲の検査 (Survey)

「Survey」をクリックすると強度の範囲（最大値、最小値）が調べられ、次のダイアログに表示されます。



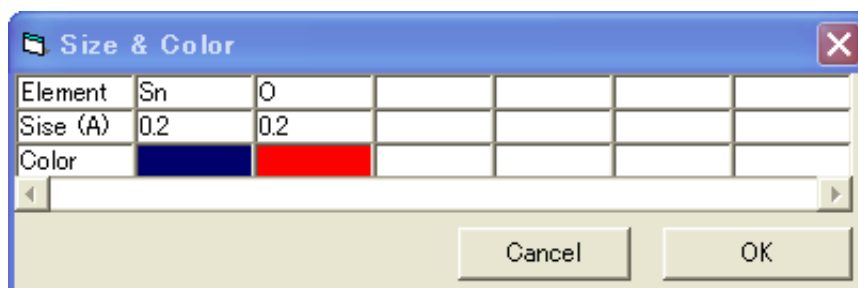
ボックスに数値を書き入れることにより、強度範囲を変更することができます。

5 . 濃淡の変転 (Reverse Contrast)

チェックされると濃淡が反転して表示されます。

6 . 原子位置の表示 (Atom Overlay)

チェックされると原子位置に指定された色の丸印が描かれます。「Setup」をクリックすると各元素の表示色、丸印の大きさを指定する次のダイアログが現れます。



表示色は変更したい元素のカラーボックスをクリックすると、カラーパレットが現れますので、任意の色を選択してください。

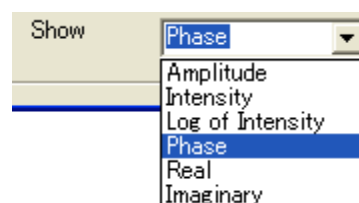
7 . 濃淡像の生成 (Generate)

「Generate」をクリックすると濃淡像が計算されます。

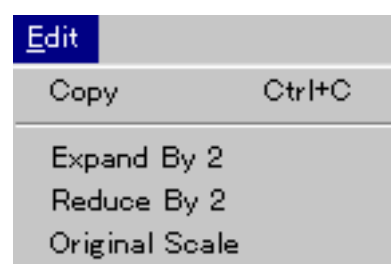
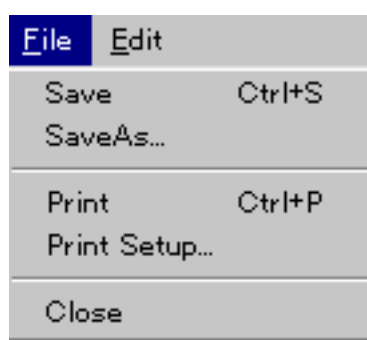
動力学散乱計算データの場合

上の画像の選択 (Image Selection) において、表示対象をポテンシャルあるいは波動関数から選択します。

- ポテンシャルの表示 (Potential)
濃淡像を表示する位相格子 (スライス) を選択します。「All」を選択すると全ての位相格子について順次計算されます。「Projection」を選択すると全てのポテンシャルを総和したものが表示されます。
- 波動関数の表示 (Wave Function)
濃淡像を表示する試料の厚さ (スライス数) を選択します。「All」を選択すると表示されている全てのスライスについて順次計算されます。
- 複素数データを表示する形式の選択 (Show)
ポテンシャルあるいは波動関数は複素数データとして保存されていますので、複素数データを表示する形式を選択します。

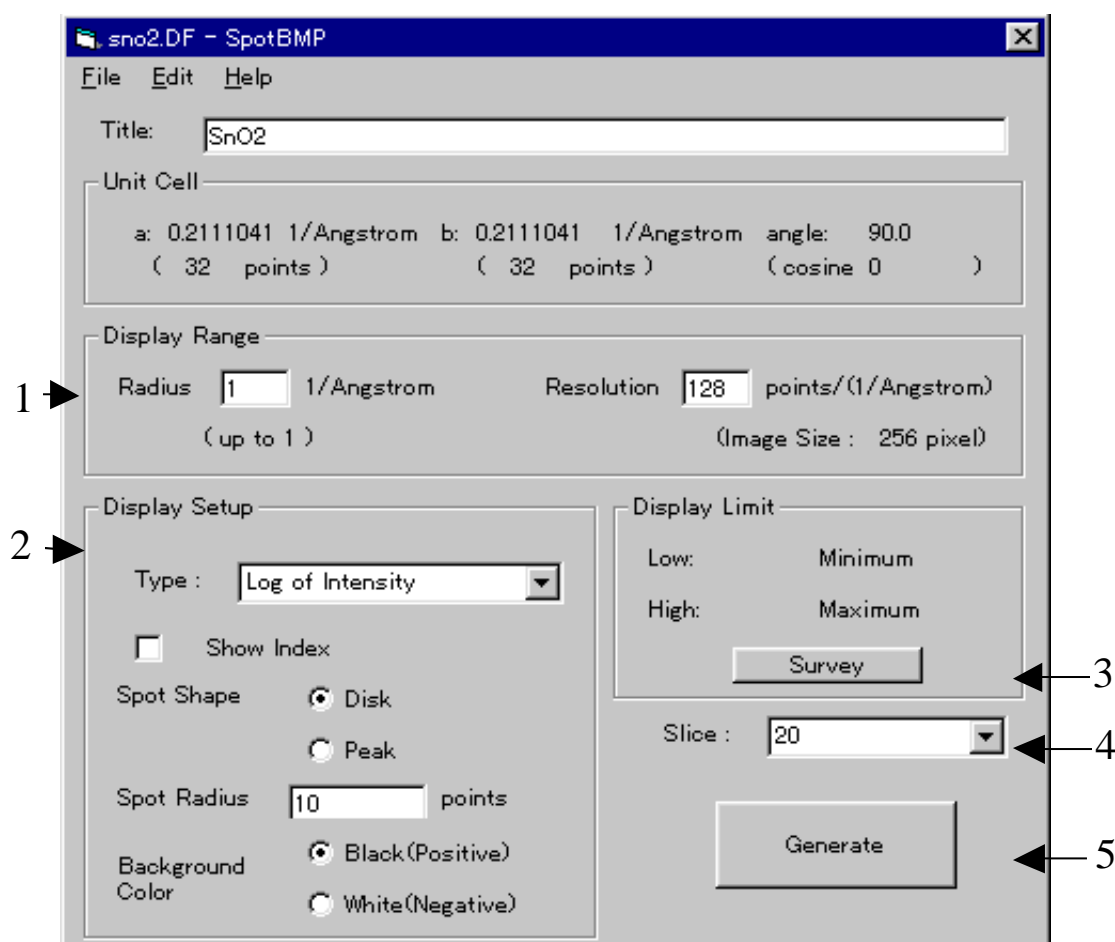


ビットマップイメージ・メニュー



■ SpotBMP の使用法

ワークシート



データのタイトルと 2 次元セルの大きさ（および計算点）が上部に表示されます。

1. 表示範囲（Display Range）

- 表示半径（Radius）
表示する回折領域の半径を指定します。計算で出力されている範囲が下に示されています。
- 表示スケール（Resolution）

1/Angstrom 当たりのピクセル数を指定します。表示される図形の大きさがスケールに合わせて表示されます。

2. 表示形式の設定 (Display setup)

- 表示データ形式 (Type)

表示するデータの形式を以下の中から選択します：

Log of Intensity
Intensity
Amplitude

- 指数の表示 / 非表示 (Show Index)

チェックボックスにより制御します。

- スポットの形 (Spot shape)

ディスク (円盤状) で表示するか、ピーク形状を示すかを選択します。

- スポット径 (Spot radius)

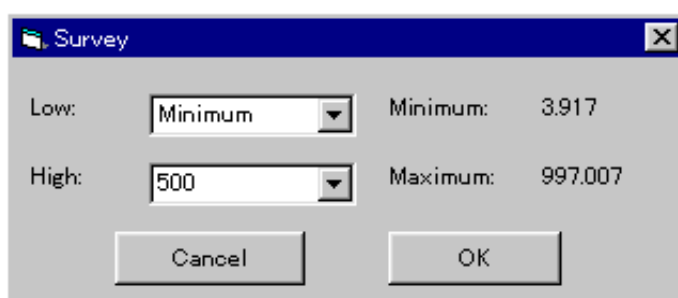
各スポットの大きさをピクセル単位で指定します。

- 背景色 (Background Color)

背景を指定します。白はネガフィルム、黒は印画紙のように表示されます。

3. 強度範囲の検査 (Survey)

「Survey」をクリックすると強度の範囲 (最大値、最小値) が調べられ、次のダイアログに表示されます。



ボックスに数値を書き入れることにより、強度範囲を変更することができます。

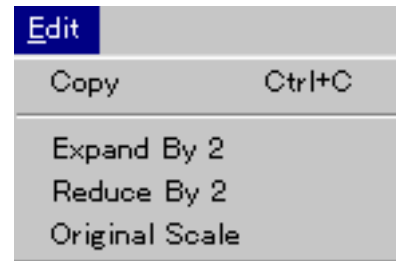
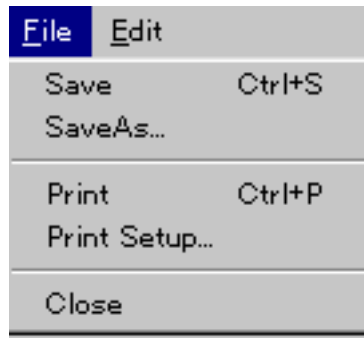
4. 表示データの選択 (Slice)

回折像を表示する試料の厚さ (スライス数) を選択します。「All」を選択すると表示されている全てのスライスについて順次計算されます。

5. 回折像の生成 (Generate)

「Generate」をクリックすると回折像が計算されます。

ビットマップイメージ・メニュー



MultiGUI

File Edit Help

Title

Cell Parametese

a Angstrom

b Angstrom

c Angstrom

α

β

γ

Symmetry Operation

Select

Edit Elements

Atom Parameters

Import

Edit No. of atoms

Overall Thermal Factor

Calculation Control

Phase Grating Setup

Deviding a cell into slices (Max 10)

Multislice Calculation

until slice

New Append

Acc Voltage kV

Incident Beam Direction a b c

Unitary test

Limit

Cycle slice

Output Control

Dynamical Structure Factor

Range /Angstrom

Cycle slices

Potential Distribution

Numerical Map

Export Data for Gray Scale Map

Wave Function

Numerical Map

Export Data for Gray Scale Map

Cycle slices

Numerical Map

Range Step

Vertical <-->

Horizontal <-->

Half-tone Map(Potential)

Range

Vertical <-->

Horizontal <-->

Scale Angstrom/inch

ImageGUI

File Edit Help

Title

Optical Parameters

Spherical aberration coefficient mm

Defocus spread Angstrom

Beam convergence /Angstrom

Aperture radius inner outer /Angstrom

position a* b*

Simulation Mode First order(Envelop) Second order(TCC)

Specimen thicknesses (slice number)

<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
----------------------	----------------------	----------------------	----------------------	----------------------	----------------------	----------------------	----------------------	----------------------	----------------------

Defocus values (Angstrom)

<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

Output control

Microscope Images

Numerical Map

Export Data for Gray Scale Map

Half-tone Map

Reversed Contrast

Normarized

Structure Factor (Kinematical scale)

Numerical Map

Range

Vertical <--> Step

Horizontal <-->

Half-tone Map

Range

Vertical <-->

Horizontal <-->

Scale Angstrom/inch

DFOutGUI

File Edit Help

Numerical Output

Normalized
 Kinematical scale

Graphical Output

Export Data for Graph Application

Output Range

All slice
 [] <-> []

Step [] slices

Indices of Reflections

Page No	0	0	1	1	2	2	3	3	4	4	5	5
	H	K	H	K	H	K	H	K	H	K	H	K
Index 1												
Index 2												
Index 3												
Index 4												
Index 5												
Index 6												
Index 7												
Index 8												
Index 9												

◀ ▶

FAQ

Frequently asked Questions

この章ではよく聞かれる質問について Q and A 形式で説明しています。

動力的散乱計算に対して (MultiGUI)

Q 原子パラメータエディタの使用方法について

A 1. Atom Parameters の「Edit」をクリックします
すると下のような原子パラメータ編集ウィンドウが現れます。(ここでは、2個の原子座標データを既に入力したものを示しています。)

No	Name	X	Y	Z	Occupancy	Thermal
1	Sn	0	0	0	1	0
2	O	0.307	0.307	0	1	0

- 各行に、原子名、座標 (x,y,z)、占有率、温度因子を入力します。
 - 「Name」欄には元素記号を含んだ原子名を入れます。識別のための番号を追加することもできます。
 - 「X」「Y」「Z」欄には原子のセル内の座標を入力します。
 - 「Occupancy」欄には原子の存在確立を入力します。通常は1です。
 - 「Thermal」欄には各原子の温度因子を入力します。「0」の場合には「Overall Thermal Factor」が適用されます。
- 入力が済めば「OK」をクリックしてウィンドウを閉じます ^{NOTE}。

NOTE 「Export」を選択すると原子パラメータを独立のテキストファイルとして保存できます。しかし、データを必ずしも独立のテキストファイルとして保存する必要はありません。しかし、テキストファイルとして保存した場合はテキストエディ

ィタで大量のデータを容易に修正することができます。

Q Occupancy (占有率) の指定の仕方について

A Occupancy はその原子の占める実際の占有率を指定します。殆どの原子の場合は 1 となるでしょう。乱れた構造などでは特定の原子位置の占有確率は 1 以下になります。

対称操作による重複は自動的にプログラムで考慮されます。このため、Occupancy を 1 / 多重度にする必要はありません。

Q 格子定数の角度のところはゼロになっている例がありますが...

A 角度はコサインでの入力も可能です。このため、ゼロは 90 度を表しています。しかし、度数とコサインを同時に用いてはいけません。例えば、3 つの角に 0, 0, 120 等と指定することは間違いです。

TIPS 計算機内部ではコサインが使われています。

Q 位相格子は何種類使えますか？

A 位相格子は番号で区別されており、0 から 9 まで最大 10 種類のスライスを任意の順序で使用できます。

Q 単位胞は最大何スライスまで分割できますか？

A 位相格子の最大枚数は 10 ですので、10 スライスまで分割できます。

Q 位相格子 (透過関数) はどのように計算されていますか？

A 位相格子はスライスの投影ポテンシャルを複素指数関数に代入することにより求められています。ここで、ポテンシャルの投影方向は、スライスに垂直ではなく、入射電子線方向に取られています。

Q マルチスライス法で計算に取り込まれる散乱波の範囲について

A 本プログラムでは計算に取り込まれる散乱波の範囲は Preferences の「Dynamical Calculation」の「Range」で指定します。

Q [011] や [111] 入射の場合のスライスの厚さについて教えてください

A 通常、スライスの厚さとはスライスに垂直に測ります(スライス本来の厚みに相当します)。しかし、散乱の観点から重要なのは、スライスを入射方向に測った長さです。

同じ [011] に入射でも、(001) 面に対して [011] に入射する場合と、(011) 面に対して [011] 入射する場合とでは厳密には散乱条件が異なります。本プログラムではこの違いを取り扱うことが可能です。

本プログラムではスライスはいつも表面に平行にとります。しかし、ポテンシャルは入射方向に投影します。

興味があれば、K. Ishizuka, *Acta Cryst.* A38 (1982) 773-779 を参考にしてください

Q 電子線の入射方向の指定の仕方について。

A 電子線の入射方向は実格子をもとに実格子ベクトルで指定します。例えば、c 軸に平行に入射する場合は [0, 0, 1] となります。電子線の入射方向が実格子ベクトルで表現されない場合は電顕像を観察するのに適しません。

NOTE 電子線回折の実験では、電子線の入射方向を Laue 点 (Ewald 球の中心を逆格子平面上に投影した点) の位置として表現される場合があります。

TIPS 電子線の入射方向の実格子および逆格子での表現を

$$\begin{aligned} \mathbf{t} &= d_1\mathbf{a} + d_2\mathbf{b} + d_3\mathbf{c} \\ &= r_1\mathbf{a}^* + r_2\mathbf{b}^* + r_3\mathbf{c}^* \end{aligned}$$

とした場合、Laue 点の座標は (r_1, r_2) と表されますが、 r_1, r_2 は両辺に a, b を掛けることによって

$$\begin{aligned} r_1 &= d_1a^2 + d_2ba + d_3ca \\ r_2 &= d_1ab + d_2b^2 + d_3cb \end{aligned}$$

のように変換されます。

Q 入射方向の指定で $c = 0$ は許されないのは何故ですか？

A プログラム内では入力に指定された単位胞の a b 面を入射表面としています。このため、入射方向の指定で $c = 0$ というのは入射面の平行入射することを意味します。このような状況は実際にも起こりえません。

TIPS このプログラムでは電子線の試料への入射面が指定できます。これにより他のプログラムでは通常無視されている表面効果を取り入れることが可能となっています。

Q c 軸に垂直な入射は取り扱えますか？

A 入力された単位胞での入射方向の指定で $c = 0$ は許されません。このため、結晶の c 軸が入射面に来るように「Preferences」で座標の変換を指示します。

MultiGUI により原子座標、電子線入射方向等が変換され計算用データが作成されます。

Q 原子散乱能はどのように計算されているのでしょうか？

A x 線の原子散乱能をもとに以下の Mott の公式を用いて計算しています。

$$f_c(s) = 0.023934 \{Z - f_x(s)\} / s^2; \quad s = \sin \theta / \lambda$$

x 線の原子散乱能には International Tables for x-ray Crystallography, Vol. IV に記載のガウス関数を用いた近似式を利用しています。

Q イオンの原子散乱因子を使うことはできますか？

A 原理的には「イエス」です。しかし、高度な利用法となりますので直接お問い合わせ下さい。

Q 温度効果(熱振動)の計算への取り入れ方はどのようになっているのでしょうか？

A 温度変化による熱振動の効果は温度因子として計算に取り入れています。

- 各原子に異なる温度因子を作用させる場合には原子パラメータの「Thermal」のところにそれぞれの温度因子を指定します。

- 各原子の温度因子がゼロの場合には WORKSHEET の「Overall Thermal Factor」の値が使用されます。

TIPS 試料全体に同じ温度因子を作用させて近似したい場合には WORKSHEET の「Overall Thermal Factor」の欄に温度因子を入力します。この場合には、各原子の温度因子はゼロにしておきます。

Q 温度因子はどのように原子散乱能に作用しますか？

A 原子散乱能は散乱角によって以下のように減衰します。

$$\exp\left\{-B \left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2\right\}$$

ここで、B は温度因子、 θ は Bragg の散乱角です。この式で判りますように、散乱角が大きいくほど温度因子（熱振動）の影響は大きくなります。

Q Unitary test ではどのようなことが判りますか？

A 吸収が無いかぎり電子数の減少は起こりません。このため、電荷密度の総和はいつの一定です。フーリエ変換の性質より、電子密度の総和は散乱波の総和と等しくなります。しかし、散乱計算に十分な散乱波を用いない場合には、計算に取り入れている領域外に電子が移行しようとしてします。このため、散乱波の総和が試料の厚みとともに減衰します。

しかし、本プログラムのように高速フーリエ変換 (FFT) をもちいたマルチスライス法の場合にはいつも電子密度の総和と散乱波の総和は厳密に 1 に等しくなります。このため、通常の Unitary test は無意味となります。

本プログラムの Unitary test では散乱波の総和を取るときに、最外部に達した散乱波を取除いています。このため、散乱計算に十分な散乱波を用いない場合には、散乱波の総和が試料の厚みとともに減衰します。しかし、この効果はそれほど大きくありませんので Unitary test の限界 (Limit) は 1 に近い値を使用して下さい。

Q どのような伝播関数が計算に使用されていますか？

A 本プログラムでは球面波にもとづく伝播関数が使用されています。

Q 3次元効果とは何のことですか？

A 電子線の入射方向に関して原子位置の上下関係が散乱強度に影響することを 3次元効果と呼んでいます。

Q 3次元効果はどのように取り入れられますか？

A マルチスライス法では単位格子を幾つかのスライスに分割し、原子位置の上下関係を取込むことができます。

NOTE 3次元効果がマルチスライス法でどれほど正確に取入れられるかについてはまだ議論されているところです。

Q 対称性（対称操作）の指定の仕方は？

A 対称操作の指定方法は International Tables for Crystallography の表記に準じます。

- 各対称操作の x y z 成分の区切りはコンマ (,)。
- 各対称操作の区切りはセミコロン (;)。
- 入力の終了はピリオド (.)。

例：

x, y, z; y, x, z.

Q 原子パラメータがファイル（テキストデータ）から読み込み出来ません。

A 指定した原子パラメータの個数と順番がデータと一致しているか確認して下さい。

Q 原子パラメータファイル（テキストデータ）の作成法は？

A エディタ、ワープロなどで各原子の原子名、座標 (x,y,z)、占有率、温度因子を一行に入力します。各パラメータはスペース（空白）あるいはコンマ (,) で区切られていれば、位置を整列する必要はありません。各行に番号を付けることも可能です。

例

Type

X

Y

X

Occupation

Sn	0	0	0	0
0	0.307	0.307	0	0

1.0

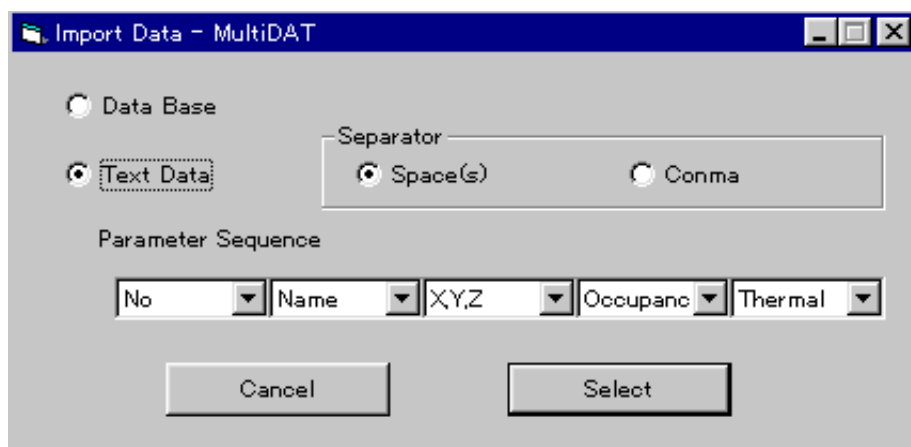
原子名には必ず元素記号を含めて下さい。同種の元素を区別するために原子名に番号を付加することも出来ます。

作成されたデータをサンプル名.atm として保存します。

Q 原子パラメータファイル（テキストデータ）の形式は？

A テキストデータで、各行に、原子名、座標 (x,y,z)、占有率、温度因子を入力します。各パラメータはスペース（空白）で区切られていれば、位置を整列する必要はありません。

パラメータの順序はデータ入力の際に指定できますので、任意に並べることができます。



電顕像の計算に関して (ImageGUI)

Q 格子像で何のコントラストも出てきません。

A 電顕像計算のときの絞りの大きさ (Aperture radius) を調べて下さい。結像に關与する最小面間隔は入力の子の指定の s と d^* により異なります。 ($2s = d^*$)

$$\text{最小面間隔} = 1 / 2s = 1 / d^*$$

特に、消滅する反射の有る場合には、絞りの中に十分な反射が入っているか調べて下さい。

Q Simulation Mode について違いを教えてください。

A Simulation Mode では部分干渉性の取扱いを指定します。

本プログラムでは通常よく使われる包絡関数 (Envelope) を用いる方法と相互透過係数 (TCC/Transmission Cross-coefficient) を用いる方法とを選択することができます。

TCC をもちいる方法は、特に小さなモデルでないかぎり、包絡関数 (Envelope) を用いる方法に較べて計算時間を必要とします。

Q Simulation Mode が「First Order(envelope)」では正常な像ができるが、「Second order(TCC)」にすると正常に計算されない。

A Second order(TCC)では計算に指定した絞りの2倍の範囲の空間周波数が計算に使われます。これは、絞りを通過する散乱波同士の干渉項も計算に取り入れられるためです。

このため、First Order(envelope)の計算だけを行う場合には計算領域は絞りの大きさと同じで構いませんが、Second order(TCC)の計算を行う場合には絞りの2倍の計算領域を用意する必要がある有ります。この計算領域は散乱波の計算領域により制限されています。

散乱波の計算領域は MultiGUI の Preferences の「Dynamical calculation/Range」で指定します。もし、計算領域が狭い場合には、MultiGUI で指定を変更し、散乱計算から再計算する必要があります。

散乱強度出力に関して (DFOutGUI)

Q 反射を指定するのに指数を2個しか使用しませんが、通常の反射指数とどのように対応するのでしょうか？

A マルチスライス法では入射方向にほぼ垂直な逆格子面での散乱振幅を求めます。この2次元逆格子面は入射平面(2次元格子)の逆格子に対応します。そして、2個の指数は2次元逆格子を表現しています

この2次元指数と通常の3次元指数との対応は、3次元逆格子内における2次元逆格子の関係を見いだすことにより求められます。高次層線(HOLZ/Higher Order Laue Zone)も同様に対応をつけることができます。

Q 位相はどのように表示されているのでしょうか？

A 対称心の有る場合の運動学的散乱振幅の位相は0あるいは π となります(対称心の有る場合の散乱波は実数で正または負となります)。本プログラムでは試料厚さの小さいときに散乱波の位相が運動学的散乱振幅の位相に一致するように設定しています。このため、入射波の位相は $-\pi/2$ としています。

Q

A