

V3.6

*STEM*  
*for*  
*xHREM<sup>TM</sup>*  
*(WinHREM<sup>TM</sup> / MacHREM<sup>TM</sup>)*

走査型透過電子顕微鏡像  
シミュレーションプログラム

ユーザーガイド



走査型透過電子顕微鏡像  
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
  - STEM 像の濃淡表示
- トピックス
  - TDS 吸収の取り扱い
  - 必要な RAM サイズ

## はじめに

---

このプログラムは走査型透過電子顕微鏡像（STEM 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™/MachREM™*) 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。

### STEM 拡張機能の特徴

#### 1. 使いやすいユーザインターフェイス

STEM 拡張機能では Windows/Mac OS の操作性の利点を活かしたグラフィカルユーザインターフェイス (GUI) をもちいて入力データを作成します。

#### 2. 信頼のおけるアルゴリズム

STEM-HAADF 像では熱散漫散乱 (TDS) が主要な信号源です。STEM 拡張機能では熱散漫散乱 (TDS) を吸収ポテンシャルにより効率的に取り扱うことが可能です。詳細については以下の論文を参照して下さい。

K. Ishizuka: A practical approach for STEM image simulation based on the FFT

multislice method, Ultramicroscopy 90 (2001) 71-83.

### 3. 演算の効率化 (multi-CPU 対応)

STEM 像の計算では各走査点で散乱計算を行う必要があり、計算量が膨大になります。このため、STEM 拡張機能では演算を高速化するため multi-CPU (Core)に対応しています。

**Note:** 次期バージョン (v3.6) からは、新たにクラスター対応版 (STEM Extension Cluster)、64-bit 対応版 (STEM Extension Pro) がリリースされます。

## ■ インストール

---

STEM 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。

STEM 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

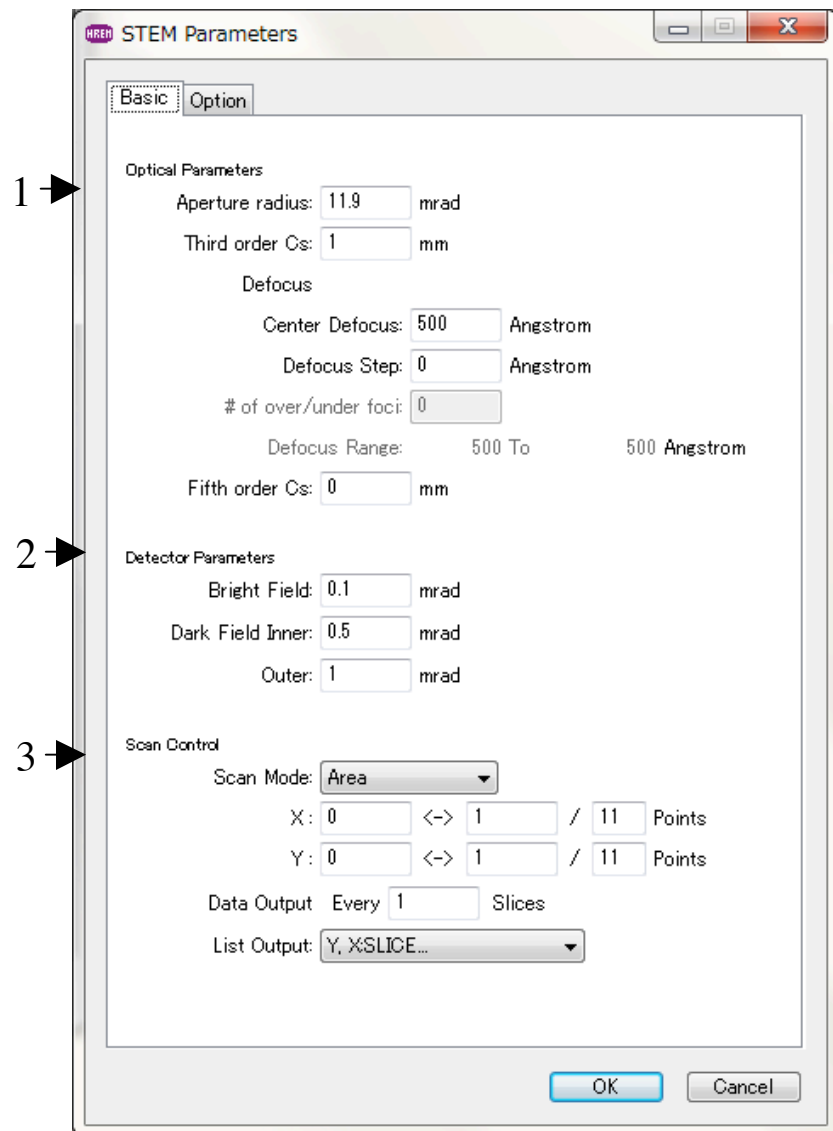
STEM 用のデータ作成には散乱強度計算のデータ作成用の入力プログラム MultiGUI が使われます。STEMに必要な追加データはオプション機能で入力します。MultiGUI で入力する通常のデータの説明は xHREM 入力プログラム (ユーティリティ) の使い方を参照下さい。

例題として SnO<sub>2</sub> 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。

STEM 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 STEM を選択します。



すると次のようなウィンドウが現れます：



### 1. 光学条件の設定

対物絞りの半径、収差係数を入力します。絞りの大きさは mrad での入力も可能です (Preferences で mrad を前もって選択して下さい)。

複数デフォーカスの計算を行うことも可能です。中心デフォーカス、デフォーカス間隔、オーバーおよびアンダーの枚数を指定します。

### 2. 検出器の領域の設定

明視野、暗視野の検出器の大きさを指定します。mrad での入力も可能です (Preferences で mrad を前もって選択して下さい)。

### 3. 走査のモードと範囲、および出力間隔の設定

走査のモード：次のプルダウンリストから選択します：

## STEM for xHREM



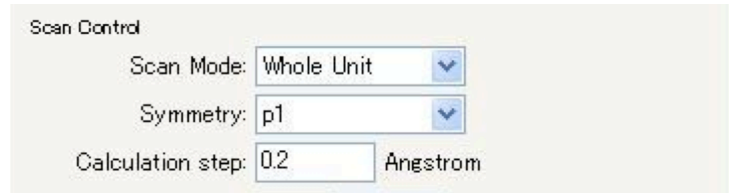
走査範囲：走査モードに応じて範囲の指定が変わります。

「Area」：走査する領域の (top, left)、(bottom, right)、x, y 方向のサンプル点数を指定します

「Line」：走査するラインの始点、終点の座標とサンプル点数を指定します

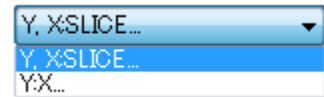
「Point」：一点の座標を指定します

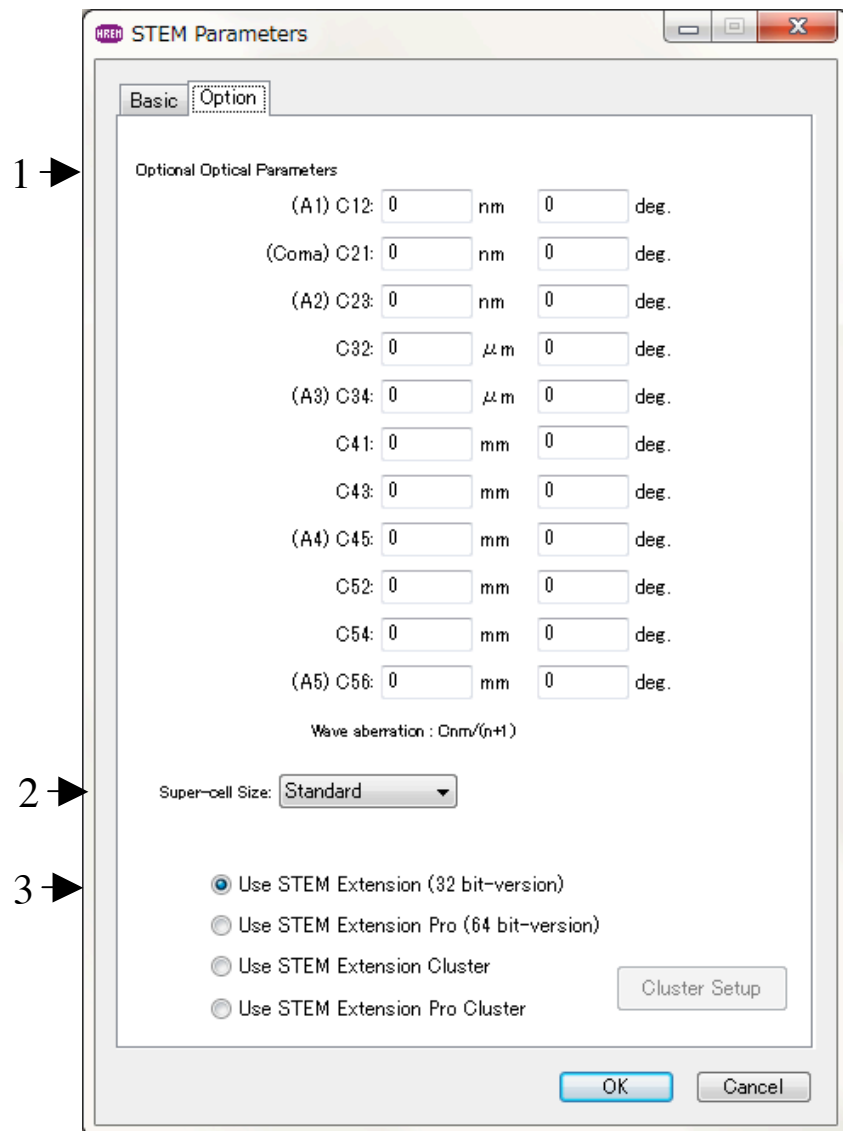
「Whole Unit」：全ユニットセルが対称操作を考慮して計算されます。このため、適用する対称操作（2次元）と近似的な走査間隔を指定します。実際の走査点数は指定された近似的な走査間隔をもとに内部で決定されます。



出力間隔：STEM 像強度の出力される試料厚みをスライス数で指定します

リスト出力：走査の進行を表すリスト出力。各スライスでの計算が高速に行われる場合にはリスト出力が全体の計算時間を制御する場合が生じる。そのような場合には、リスト出力を簡素にすると有効である。





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. スーパーセルサイズ

計算でのスーパーセルサイズを次のプルダウンリストから選択します。通常は Standard を使用します：



スーパーセルサイズは入力された構造モデルよりも大きいものを選択すべきです。構造モデルがスーパーセルサイズよりも小さい場合には、モデルサイズに近くなるように入力された構造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。

3. 32bit/64bit モジュール、クラスターの選択

64bit モジュール、クラスターモジュールが Programs フォルダにないと選択はできません。

スーパーセルサイズと計算点数\*

n	モデル	スーパーセル (近似値)	計算点数*	FT 空間間隔 (近似値)
1	Test	12.5 A	128	0.08 / A
2	Small	25	256	0.04
3	Standard	50	512	0.02
4	Large	100	1024	0.01
5	Huge	200	2048	0.005
6	Ultimate	400	4096	0.0025

\*この計算点数は最大計算範囲 Range (d\*) を 5.0 / 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:** HAADF TDS 吸収ポテンシャルを用いる場合には、最大計算範囲 Range (d\*) は通常 5.0 / A で十分です。

**TIPS:** STEM 像の計算のためには散乱強度の分布を求める必要があります。このため、Standard よりも小さなスーパーセルは推奨されません。

**注意** STEM 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

4. 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  $s=1.5-2.0/\text{Å}$  ( $d^*=3.0-4.0/\text{Å}$ )、または、それ以上に設定します。ただし、Doyle-Turner では  $S=2.0/\text{Å}$  以上は使用出来ません。 $S=2.0/\text{Å}$  以上を計算するには Weikenmeier-Kohl を選択します。

**TIPS:** Preferences/Atomic Scattering Factor で散乱能を Weikenmier-Kohl Scattering Factor を選択し、「Including TDS Absorption」を選択します。ただし、TDS 吸収を無視して、弾性散乱のみで STEM 像を計算する場合はこの選択は必要ありません。TDS を計算する為には各原子の温度因子(Debye-Waller factor)が必要であることを注意して下さい。

5. STEM の追加データを作成します。
6. MultiGUI の File メニューから Execute STEM を選択して STEM プログラムを起動します。
7. 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。

**TIPS:** 多くの点を走査する STEM 像の計算には時間が掛ります。このため、STEM 走査を中断し、後で継続することが可能です。計算を継続するには、MultiGUI の制御で、Multislice Calculation → Append を選択します。計算が中断された場合には、再開時には計算が完了している次の走査点から計算されます。

8. 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。

### STEM 像の濃淡表示

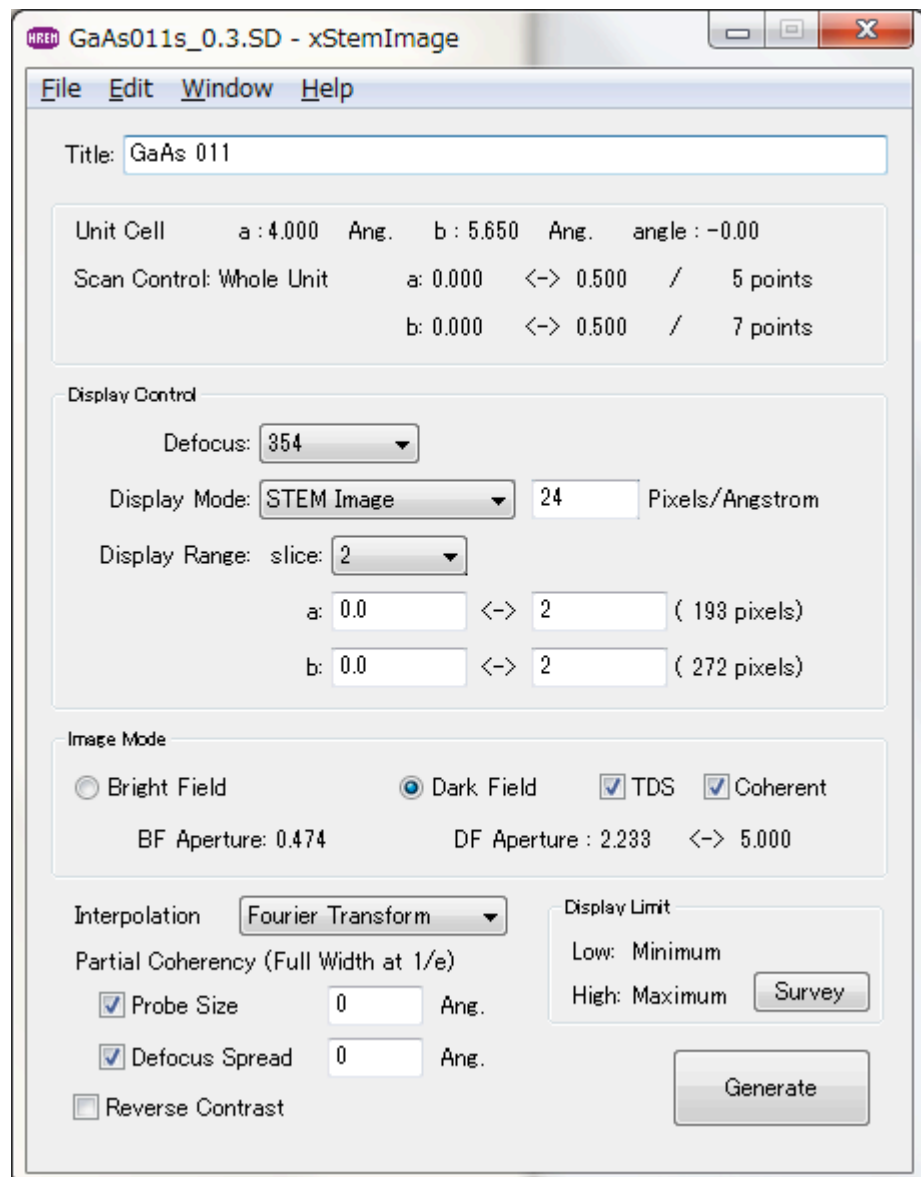
STEM 像の表示には STEMimage を用います。STEM データは、SD ファイルに出力されています。

STEM 像を表示するには：

1. STEMimage を起動します。
2. ファイル選択のダイアログで「.SD」ファイルを選択します。

SD 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「SD Data (\*.SD)」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：



3. 「Display Mode」を選択します。  
選択できる Display Mode はデータの Scan Mode に依存します。この例のよう

な 2 次元走査像のばあいには、試料厚さ (Slice)、表示領域、解像度 (Pixels/length) を指定します。

複数デフォーカスが計算されている場合には、デフォーカス値 (Defocus Spread の中心デフォーカス値) を指定できます。

「Scan Mode」が「Whole Unit」の場合は表示領域を複数ユニットに設定することが可能です。

4. 「Image Mode」を選択します。暗視野像のばあいは画像信号を TDS 非弾性散乱、弾性散乱計から選択します。
5. Generate をクリックすれば画像が計算されます。

**TIPS:** 計算点の強度の補間方法として Fourier 変換 (Fourier Transform) と線形補間 (Bi-linear Interpolation) を選択出来ます。通常、Fourier 変換による補間がよりスムーズな画像を与えます。このため、より大きな計算間隔を使用することができ、計算時間を短縮できます。

**TIPS:** Probe Size および Defocus Spread による部分干渉性 (Partial Coherency) の影響を取り入れることが可能です。Probe Size および Defocus Spread の分布は Gauss 関数を仮定しています。そして、 $1/e$  となる全幅を指定します。

**註:** Defocus Spread の効果は必要なデフォーカス範囲が計算されている必要があります。

**TIPS:** STEMimage の表示した濃淡像の各表示のピクセルの数値データを ImageBMP の場合と同様に「Save As...」により出力することが可能です。また、描画に使用した元データの数値出力も可能です。詳しくは「ImageBMP による数値データ出力」を参照して下さい。

## トピックス

---

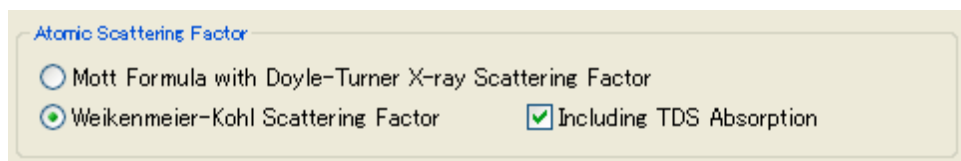
ここでは知っておくと便利な機能やアドバンスドなトピックスなどを解説しています。最初から全てのトピックスに目を通す必要はありません。必要なときに該当する項目を参照されると良いでしょう。

### 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 Scattering Factor」を選択し、「Include TDS absorption」にチェックを付けます。



### 必要な RAM サイズ

STEM 像の計算では各走査点で散乱計算を行う必要があります。このためには、各走査点に対する計算で、すべての位相格子 (Phase Grating) を必要となります。近年の OS では外部メモリを利用した仮想メモリ機能により多くの位相格子を使用することが可能です。

しかし、一つの位相格子でもメインメモリ (RAM) に入りきらない場合には、roll-in/roll-out により、結果的にすべての位相格子を外部メモリからメインメモリに読み込まなければなりません。このとき、外部メモリがハードディスクの場合には位相格子のメインメモリへの読み込みに多くの時間が掛かることとなります。すなわち、計算を高速化するためには、すべての位相格子を読み込むだけのメインメモリ (RAM) が必要となります。

通常、32-bit OS では、各プログラムは 2GB 程度しか使用できません。全体の位相格子がそれ以上のメモリを必要とする場合には 64-bit OS に対応した STEM Extension Pro を使用する必要があります。

**TIPS:** Standard モデルで 512x512 画素を使用する場合には、各位相格子は

$$(512 \times 512) \times 8 \text{ (complex)} \times 2 = 4\text{MB}$$

となります。大きなモデルでは位相格子数も大きくなりますので、2GB 以上になることもあり得ます。