

V5.0

CBED

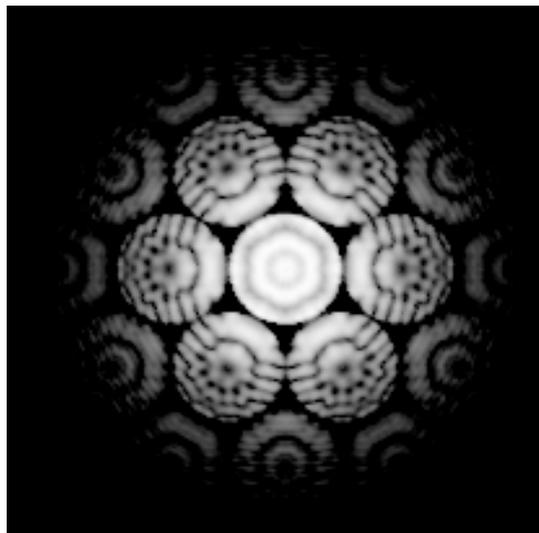
For

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™/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 32bit 版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 64bit 版の場合は xHREM の Programs フォルダにコピーして下さい (CBEDxx.exe はインストーラではありません)。

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。

試用版としての使用 (v4.1 以降)

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。この場合には入力データの保存や MULTIGUI による散乱計算はできませんが、提供されるサンプルデータの計算結果を使用して、シミュレーションの道筋を体験することができます。

■ 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 GaAs のサンプルデータ（GaAs011c.WS1）がプログラムとともに供給されています。

試用版として使用する場合には入力データの保存や実際の計算はできませんが、提供されるサンプルデータの計算結果を使用して、シミュレーションの道筋を体験することができます

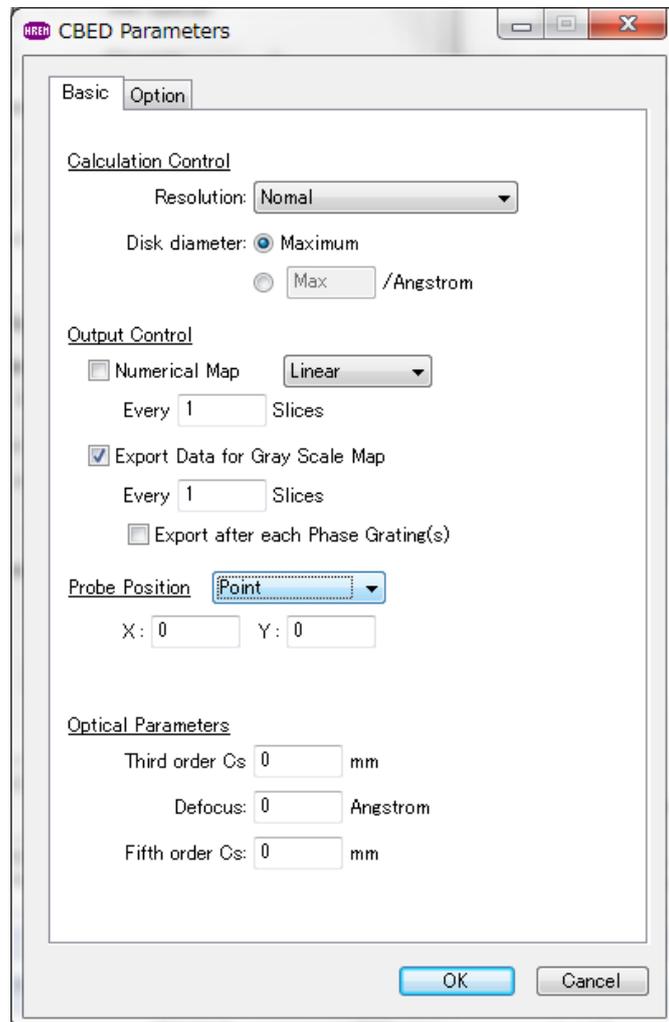
CBED に必要な追加データを入力するには MultiGUI ウィンドウの下にある Option の中から CBED を選択します。



すると次のようなウィンドウが現れます：

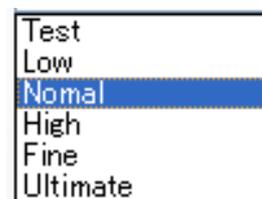
Basic Tab

- 1 →
- 2 →
- 3 →
- 4 →
- 5 →
- 6 →



1. 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: 高解像度での 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 (Δd^*) と必要とされる計算点数

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

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。($d^*=5.0/A$ にしても 2 の冪乗の計算点は変わりません)

スーパーセル = $1/\text{計算間隔} (\Delta d^*)$

実空間計算間隔 = $1/2d^*$

計算点数 (2 の冪乗) > $(2d^*/\Delta d^*)$

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。

2. 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。

3. 数値マップ (Numerical Map)

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。

4. 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。

CBED for xHREM

5. プローブ位置 (Probe Position) : Point/Line

単位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。

Point: 指定されたプローブ位置で CBED 計算を行います。

Line: 複数の直線上のプローブ位置での CBED 計算を順次行います。各計算結果は別ファイルに保存されます。以下のように開始点、終了点と走査点を指定します：

6. 光学パラメータ (Optical Parameters)

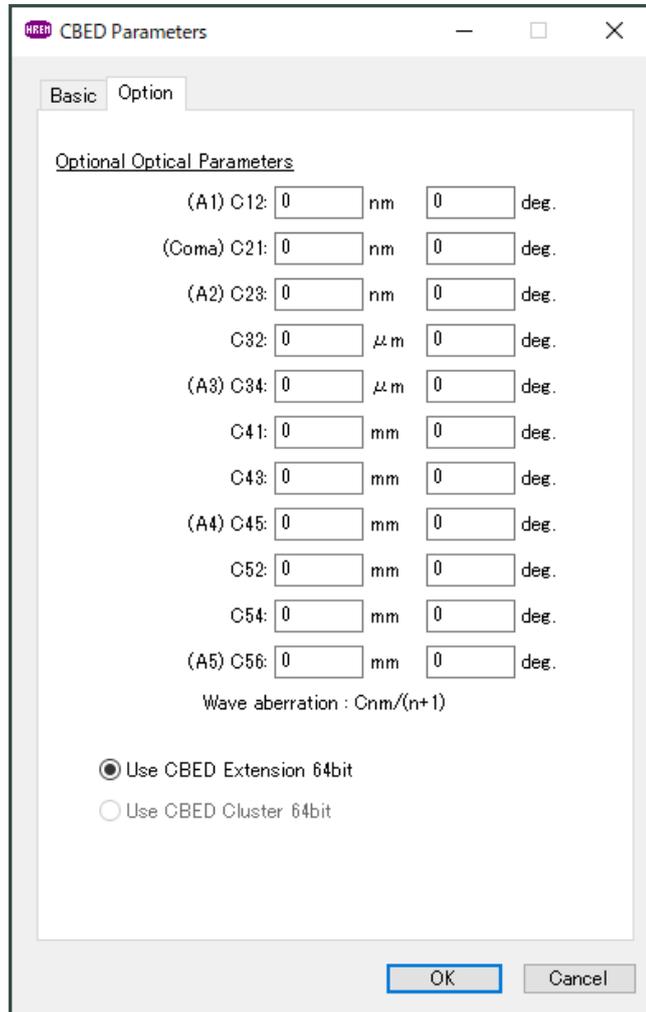
球面収差係数 (3 次)、デフォーカス、および 5 次の球面収差係数の指定が可能です。

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。

Option Tab

1 →

2 →



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. 計算モジュールの選択

CBED では通常の 64-bit モジュールしか選択できません。

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とき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

1. 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。

2. CBED の追加データを作成します。
3. MultiGUI の File メニューから Save または Save As によりデータを保存します。（保存しないと Execute は選択出来ません）

試用版として使用している場合には実際の計算は実行できませんので、このステップ以降は飛ばして終了します。

4. 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。
5. 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。
6. 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。

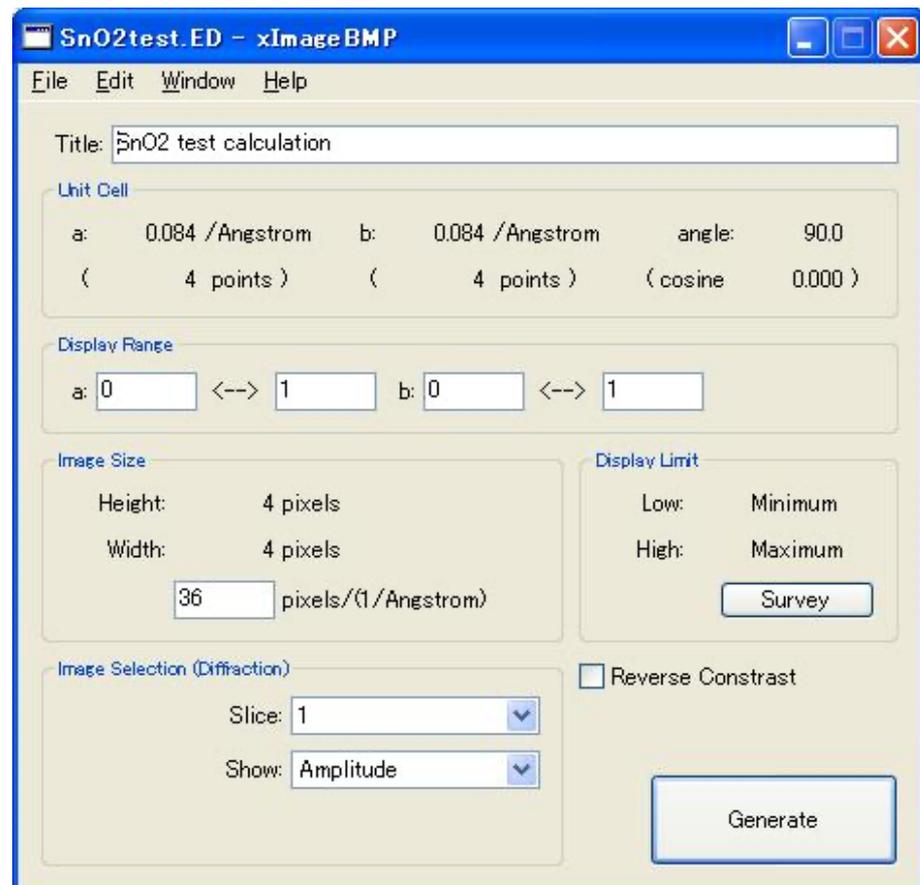
CBED 像の表示には :

1. ImageBMP を起動します。
2. 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。

試用版として使用する場合には、提供されるサンプルデータの計算結果 (GaAs011c.ED) を利用します

次のようなウィンドウが現れます。



3. CBED 像を計算したいスライスを Slice により選択します。
4. 表示の形式を Show プルダウンから選択します。
5. 他の条件が設定されたら、Generate をクリックします。

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。

CBED 機能拡張に関して

Q301: 高角領域が出力されません

Q302: 投影近似でも HOLZ ラインは現れますか？

Q303: Large-angle CBED (LACBED, Tanaka pattern)は計算できますか？

Q304: HOLZ ラインを精度良く計算するには？

CBED 機能拡張に関して

Q301 高角領域が出力されません。

A CBED の出力範囲は「Output Control」の「Dynamical Structure Factor」->「Range」で指定します。指定の単位 (s か d^*) を調べ、指定されている値が十分な大きさであるか調べて下さい。

Q302 投影近似でも HOLZ ラインは現れますか？

A 投影近似でも殆ど正しい位置に HOLZ ラインは現れます。しかし、HOLZ ラインの強度は信頼できません。

Q303 Large-angle CBED (LACBED, Tanaka pattern)は計算できますか？

A LACBED では、試料は電子線の収束点から外れた位置に置かれます。そして、透過波だけが絞りにより選択されて記録されます。

xHREM では、収束プローブを試料入射面に作成し、CBED パターンを計算していますので、LACBED は計算できません。

Q304 HOLZ ラインを精度良く計算するには？

A 繊細な HOLZ ラインを計算するには CBED 設定ダイアログの「Calculation Control」の「Resolution」を高くします。各 Resolution の計算間隔については CBED のマニュアルを参照して下さい。

HOLZ ラインの位置と強度をより正しく計算するには3次元効果(Q019 を参照)を正しく取り入れる必要があります。このためには単位胞を複数のスライスに分割します。