

# 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。

### 動力学的散乱計算に対して (MultiGUI)

- Q001: 原子パラメータエディタの使用方法について
- Q002: Occupancy (占有率) はどのように使うのですか
- Q003: 格子定数の角度のところがゼロになっている例がありますが...
- Q004: 位相格子は何種類使えますか?
- Q005: 単位胞 (またはスーパーセル) は最大何スライスまで分割できますか?
- Q006: 位相格子 (透過関数) はどのように計算されていますか?
- Q007: 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
- Q008: [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
- Q009: 電子線の入射方向の指定の仕方について
- Q010: 入射方向の指定で  $c=0$  は許されないのは何故ですか?
- Q011:  $c$  軸に垂直な入射は取り扱えますか?
- Q012: 原子散乱能はどのように計算されているのでしょうか?
- Q013: イオンの原子散乱因子を使うことはできますか?
- Q014: 温度因子 (熱振動の効果) はどのように指定しますか?
- Q015: 温度因子はどのように原子散乱能に作用しますか?
- Q016: Unitary Test ではどのようなことが判りますか?
- Q017: どのような伝播関数が計算に使用されていますか?
- Q018: 3次元効果とは何のことですか?
- Q019: マルチスライス法では3次元効果はどのように取り入れられますか?
- Q020: 対称性 (対称操作) の指定の仕方は?
- Q021: 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
- Q022: 原子パラメータファイル (テキストデータ) の作成法は?
- Q023: 原子パラメータファイル (テキストデータ) の形式は?
- Q024: 原子ポテンシャルは投影ポテンシャルにどのように寄与していますか?

### 電頭像の計算に関して(ImageGUI)

Q101: 格子像で何のコントラストも出てきません

Q102: Simulation Mode について違いを教えてください

Q103: Simulation Mode が「First Order (Envelope)」では正常な像がでるが、「Second order (TCC)」にすると正常に計算されない

### 散乱強度出力に関して(DFOutGUI)

Q201: 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？

Q202: 位相はどのように表示されているのでしょうか？

### 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？

### STEM 機能拡張に関して

Q401: STEMimage の出力がモデル構造を反映しているようには思われません

Q402: スーパーセルサイズはどのように選べばいいでしょうか

Q403: モデルサイズが大きくなると、計算が極端に遅くなります

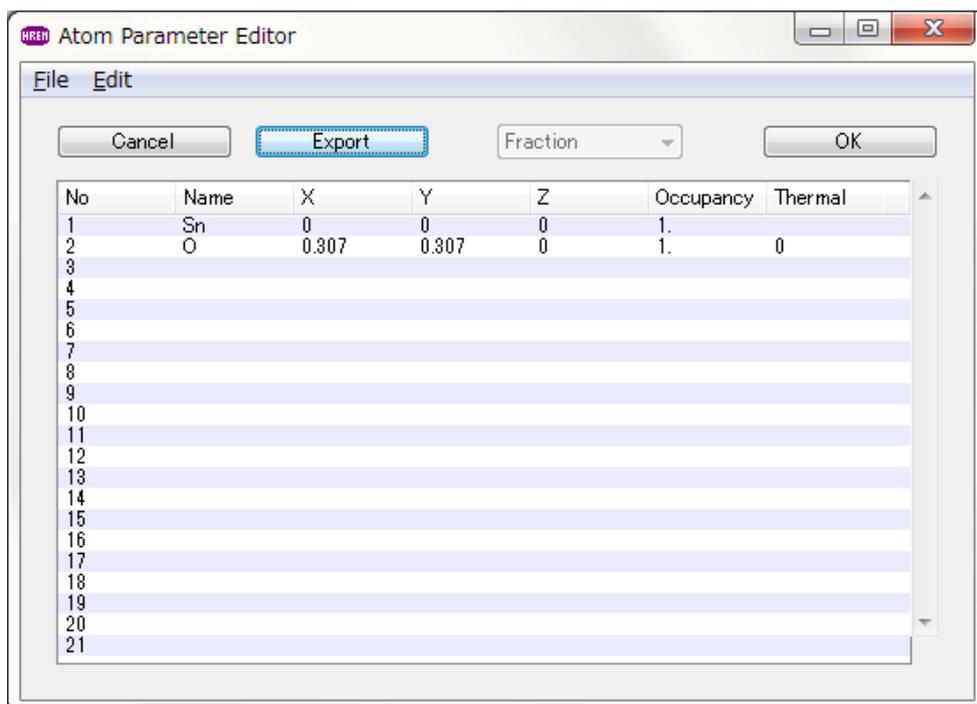
Q404: 散乱計算にはどこまで含めればいいですか。この範囲はモデルサイズに依存しますか

Q405: 計算の所要時間を短くするにはどうすればいいでしょうか

## 動力学的散乱計算に対して (MultiGUI)

### Q001 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。)



2. 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。
3. 入力が済めば「OK」をクリックしてデータを保存して、ウィンドウを閉じます。データ入力はいつでも「Cancel」により中断することが可能です。

**NOTE** 「Export」を選択すると原子パラメータをテキストファイルとして保存できます。テキストファイルとして保存されたデータはテキストエディタで容易に修正することができます。また、テキストファイルの原子パラメータは MultiGUI の「Atom Parameters」/Import を用いて取り込むことが可能です。Q023 を参照下さい。

**Q002** Occupancy (占有率)はどのように使うのですか

**A** Occupancy はその原子の占めるそのサイトの平均的な占有率を指定します。個々の原子はサイトを部分的に占有することは出来ませんので、Occupancy は通常1となるでしょう。しかし、乱れた構造などでは特定の原子位置が平均として複数の元素により占有され、個々の元素の占有確率は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。

**Q003** 格子定数の角度のところが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 計算機内部では角度のコサインが使われています。

**Q004** 位相格子は何種類使えますか？

**A** 最大 1000 の異なる位相格子を使用できます。位相格子の使用される順序は「PG Sequence Editor」で容易に指定することができます。

**Q005** 単位胞(またはスーパーセル)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 1000 ですので、1000 スライスまで分割できます。

**Q006** 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、入射電子線の方向に取られています。

**Q007** 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。

**Q008** [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(これはスライス本来の厚みに相当します)。しかし、電子線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] に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

## Q009 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  $t$  は以下のように実格子ベクトルで指定します:

$$t = d_1 a + d_2 b + d_3 c$$

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の単純な和で表現されない場合は電頭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 球の中心を観測回折面上に投影した点) 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

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

とした場合、各係数は以下のように容易に求めることができます:

$$\begin{aligned} d_1 &= t a^* = r_1 a^{*2} + r_2 b^* a^* + r_3 c^* a^* \\ r_1 &= t a = d_1 a^2 + d_2 b a + d_3 c a \end{aligned}$$

## Q010 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射面を (001) 面 (入力に指定された単位胞の  $c$  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、電子線が入射面に平行であ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。

## Q011 $c$ 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、元の結晶の  $c$  軸が入射面に来るように Edit メニューの「Preferences」ダイアログで座標の変換を指示します。

MultiGUI により原子座標、対称操作、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。

## Q012 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 原子散乱能は「Preferences」から、Doyle-Turner と Weikenmeier-Kohl の2つの形式が選べます。

Doyle-Turner の場合は、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。

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

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。Doyle-Turner 原子散乱能の有効範囲は  $s=2.0$  までです。

Weikenmeier-Kohl の場合は、 $s=2.0$  以上の高角の散乱まで近似するための工夫がなされています。このために、熱散漫散乱 (TDS) による吸収ポテンシャルの計算を行うことが可能です。

## Q013 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、MultiGUI が作成したデータ (.DA1) を編集するなど高度な利用法となりますので直接お問い合わせ下さい。

## Q014 温度因子(熱振動の効果)はどのように指定しますか？

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「Overall Thermal Factor」の値が使用されます。

TIPS 簡単のために、試料全体に同じ温度因子を作用させたい場合には「Overall Thermal Factor」の欄に温度因子を入力し、各原子の温度因子は空白またはゼロにしておきます。

## Q015 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、 $\theta$ 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  
いほど温度因子(熱振動)の影響は大きくなります。

## Q016 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、あるいは散  
乱波の総和はいつも一定です。しかし、散乱計算に十分な散乱領域を用いない場合  
には、この散乱領域外に電子が移行しようとしています。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。このために、逆空間マルチスライス法の計算条件のテストとしてオー  
ストラリアー派により Unitary Test が導入されました。

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 を有効にするためには、Unitary Test の限界(Limit)は1に近い値を使用  
して下さい。

Weikenmeier-Kohl 原子散乱能を用いて、熱散漫散乱(TDS)による吸収を取り入れた場  
合には、吸収により電子数の減少が起こります。このために、Unitary Test の限界(Limit)  
を小さくしないと Unitary Test により計算が途中で終了してしまうことがありますので、注  
意して下さい。

## Q017 どのような伝播関数が計算に使用されていますか？

**A** 本プログラムでは放物面近似ではなく、球面波にもとづく伝播関数が使用されています。  
興味があれば、K. Ishizuka, Acta Cryst. A38 (1982) 773-779 を参考にして下さい

## Q018 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。

## Q019 マルチスライス法では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(モデル構造)を幾つかのスライスに分割し、電子線の入  
射方向に関する原子位置の上下関係を表現することにより、3次元効果を取込むことが  
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。

## Q020 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xyz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+1/2.

## Q021 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。

## Q022 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。各行の先頭に番号を追加することも可能です。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。

例

	Name	X	Y	Z	Occupancy	Thermal
1	Sn	0	0	0	1.0	0
2		0.307	0.307	0	1.0	0

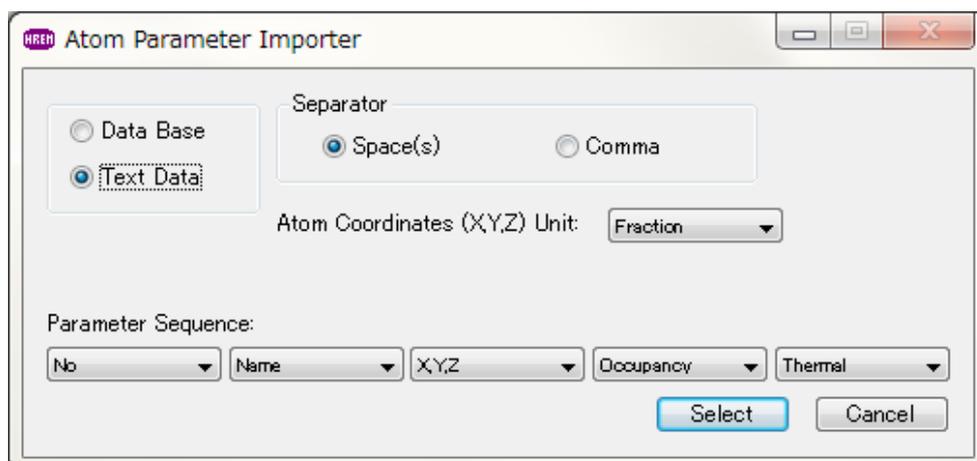
**NOTE** 原子名には必ず元素記号を含めて下さい。同種の元素原子を区別するために原子名に番号を付加することも出来ます。

作成されたデータをサンプル名.atmとして保存します。

## Q023 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。各行の先頭に番号を追加することも可能です。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出来ます。



読み込まれる原子座標の単位(Atom Coordinates Unit)をプルダウンで選択することができます。この機能は原子モデル作成プログラムにより作成したモデルを読み込むときに便利です。

## Q024 原子ポテンシャルは投影ポテンシャルにどのように寄与していますか？

**A** 単位胞全体を1つのスライスとして取り扱う(投影近似)場合には、原子の全ポテンシャルが投影されます。

単位胞全体を複数のスライスとして取り扱う場合には、原理的には原子のポテンシャルのスライスに含まれている部分だけを投影することになります。しかし、xHREMでは、原子の中心(原子座標)を含むスライスに原子の全ポテンシャルを投影しています。これにより、フーリエ変換の投影の定理がポテンシャルの投影に利用できます。

## 電顕像の計算に関して(ImageGUI)

**Q101** 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単位の指定の  $s$  と  $d^*$  により異なります。(註:  $2s = d^*$ )

$$\text{最小面間隔} = 1/2s = 1/d^*$$

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

**Q102** 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。

**Q103** 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。

計算領域が狭い場合には、MultiGUI の Preferences の「Dynamical calculation/Range」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。ImageGUI の Preferences で「Range」を変更しても電顕像計算の領域は変化しません。

**NOTE** 散乱計算の領域を極端に小さくしない限り、このようなケースは生じません。

## 散乱強度出力に関して (DFOutGUI)

**Q201** 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2次元のスライス(位相格子)を用いて散乱振幅を求めます。このため、計算される波動関数は2次元であり、そのフーリエ変換は2次元となります。2個の指数は2次元逆空間における反射を表現しています。

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。

**Q202** 位相はどのように表示されているのでしょうか？

**A** すべての位相は  $-\pi/2$  だけシフトされています。このため、散乱波の位相は試料厚さの小さいときには結晶学的構造因子の位相に一致します(入射波の位相は  $-\pi/2$  になります)。

結晶学における構造因子の位相は、対称心の有る場合には 0 あるいは  $\pi$  となります(すなわち、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結晶学的構造因子の位相に一致するように設定しています。

## CBED 機能拡張に関して

**Q301** 高角領域が出力されません。

**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。

## STEM 機能拡張に関して

**Q401** STEMImage の出力がモデル構造を反映しているようには思われません。

**A** まず、Model Viewer(MultiGUI の Model View)で投影モデル構造を確認して下さい。投影モデル構造が正しく表示されれば、走査(スキャン)のステップを確認して下さい。ステップサイズが 0.3 Å 以上ではスムーズな原子構造にはなりません。

NOTE: もし、入力座標、指定された空間群が正しく、投影モデル構造が正しくない場合には、指定された空間群の対称操作に誤りのあることが考えられます。表示される対称操作を確認の上、誤りがあればサポートまでご連絡下さい。

**Q402** スーパーセルサイズはどのように選べばいいでしょうか。

**A** スーパーセルサイズはフーリエ空間の計算間隔を決定します(スーパーセルサイズの逆数が散乱分布の計算間隔になります)。このため、良好な計算結果を得るためには、スーパーセルサイズは 5 nm 以上(散乱分布の計算間隔は 0.2 /nm 以下)にします。

1. 結晶モデル

5 nm 以下の単位胞の結晶の場合は、スーパーセルサイズから「Standard」を選択します。プログラムが単位胞を繰返して、5 nm に近いスーパーセルを作成します。単位胞が 5 nm 以上の場合には、単位胞が含まれるサイズのスーパーセルを指定します。

2. 界面、欠陥を含むモデル

モデルの長い方向がスーパーセルに含まれるようにサイズを指定します。短い方向はスーパーセルに近くなるようにモデルが繰返されます。

3. ナノ粒子など、周期がまったくないモデル

モデル全体がスーパーセルに含まれるようにサイズを指定します。

**Q403** モデルサイズが大きくなると、計算が極端に遅くなります。

**A** STEM の計算では各走査点で全ての位相格子が使用されます。このため、モデルが大きくなり全位相格子がメインメモリ(RAM)に収まらなくなると、各走査点で全位相格子を外部メモリから読み込まなければならなくなります。最近の計算機の計算速度は十分に速いので、このデータアクセスのために計算全体が極端に遅くなります。

これを避けるためには、RAM サイズを大きくする必要があります。位相格子全体が約 2GB 以上になると、64-bit OS をサポートする 64-bit 版(STEM Extension Pro)を使用しなければなりません。

**Q404** 散乱計算にはどこまで含めればいいですか。この範囲はモデルサイズに依存しますか。

**A** 通常、弾性散乱による入射プローブの伝播を計算するには、 $S=2.5/A$  ( $d^*=5.0/A$ )までを含めれば十分です。この範囲はモデルサイズに依存しません。

**Q405** 計算の所要時間を短くするにはどうすればいいでしょうか。

**A** STEM では各走査点で散乱計算が必要となりますので、全体の計算時間が長くなります。STEM Extension の現バージョンでは Multi-CPU (Core)がサポートされています。このため、Multi-CPU の PC を用いれば CPU(core)数に比例して計算時間を短縮することが可能です。

さらに所要時間を短くするには、計算機を複数同時に使用するクラスター版 (STEM Extension Cluster)を使用することをお勧めします。

また、v.5.0 より NVIDIA GPU が STEM 計算に使用可能になりました。最新の GPU では Multi-Core CPU の 10-20 倍の計算能力があり、10-20 台のクラスターの性能を 1 台の GPU で安価に達成することができます。古い GPU でも Multi-Core CPU の数倍の計算能力があり、数台のクラスターに匹敵します。さらに、GPU module では複数台の GPU を使用することが可能です。