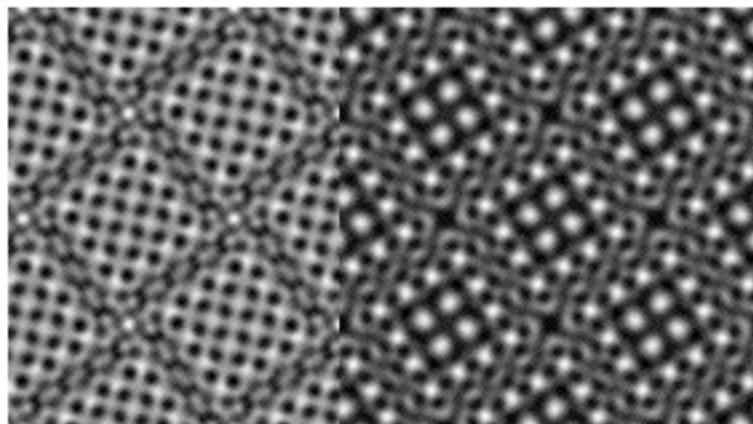


V5.3

xHREMTM
(WinHREMTM/MacHREMTM)

Windows/Mac OS 用
高分解能電子顕微鏡
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
- xHREM™ を使う前に
- インストール
 - xHREM™ 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
 - 非周期(非結晶)モデルの取扱い
 - 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
 - ImageBMP による数値データ出力
 - ビットマップ(BMP)ウィンドウの一括クローズ

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
xHREM™ の特徴、
インストール方法について説明します。
また、xHREM™ 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。

xHREM™ (WinHREM™ / MachHREM™) は 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、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があります。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

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。

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 (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。

4. 拡張機能と最適化された計算プログラム

収束電子線回折(Convergent Beam Electron Diffraction: CBED)や走査型高分解能電子顕微鏡(Scanning Transmission Electron Microscope: STEM)のシミュレーションのための拡張機能が用意されています。

xHREM および CBED, STEM 拡張機能の計算プログラムは multi-core CPU をサポートしており、Intel 社の MKL (Math Kernel Library) を使用して演算スピードの向上が図られています。

特に、STEM 拡張機能では GPGPU (General-purpose computing on Graphic Processing Unit) に対応し、CPU 処理に比べ 10 倍以上の演算の高速化が可能です。詳しくは FAQ および STEM 拡張機能のマニュアルをご参照ください。

xHREM™ 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: CBED 拡張機能)
- 高分解能 STEM 像 (ADF, ABF, DPC) の計算 (Option: STEM 拡張機能)

xHREM™ による電顕像の計算

*xHREM™*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.

K. Ishizuka: Prospects of atomic resolution imaging with an aberration-corrected STEM, J. Electron Microsc. 50 (2001) 291-305.

■ xHREMTM 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/Mac OS 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

Windows 版のインストール

xHREM (WinHREM™)はオンラインで供給されます。ソフトウェアを以下に示す通常の手順に従ってハードディスクにインストールして下さい。

ダウンロードしたファイルを解凍して、「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。通常、プログラムは¥Program Files¥HREM Research の中に作成される xHREM フォルダの中に、サンプルデータはマイドキュメント内に作成される xHREM Data フォルダの中にコピーされます。ハードディスクの xHREM プログラムフォルダ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 xHREM のアプリケーションが「スタート」メニューの「xHREM」に登録されています。

Mac OS X 版のインストール

xHREM (MacHREM™)はオンラインで供給されます。ソフトウェアを以下に示す通常の手順に従ってハードディスクにインストールして下さい。

ダウンロードしたディスクイメージファイル(.dmg)を開きます。プログラムは xHREM.pkg を開いて xHREM(Japanese)または xHREM(English)を選択してインストールして下さい。また、データは Data.pkg を開いて、インストールして下さい。ハードディスクの xHREM プログラムフォルダは下のようになっているでしょう。

xHREM のプログラムフォルダ構造

- Utilities : GUI、画像表示等
- Programs : 数値計算プログラム
- Resources : プログラムが使用するリソース
- Documents : 取扱い説明書等

(Windows) 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

NOTE USB キーをはずした状態で行なって下さい。

HASPUserSetup.exe を実行して、指示に従ってユーザキードライバをインストールして下さい。

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。

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。

(Mac OS) 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

NOTE USB キーをはずした状態で行なって下さい。

ディスクイメージファイル(.dmg)を開いて、指示に従ってユーザキードライバをインストールして下さい。

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。

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。

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 MULTIGUI による散乱計算や ImageGUI による電顕像の計算はできません。しかし、入力データの作成のためのユーザーインターフェース(GUI)を経験し、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

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 (サンプルデータ)

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。

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

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 (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、シミュレーションの道筋を体験することができます) :

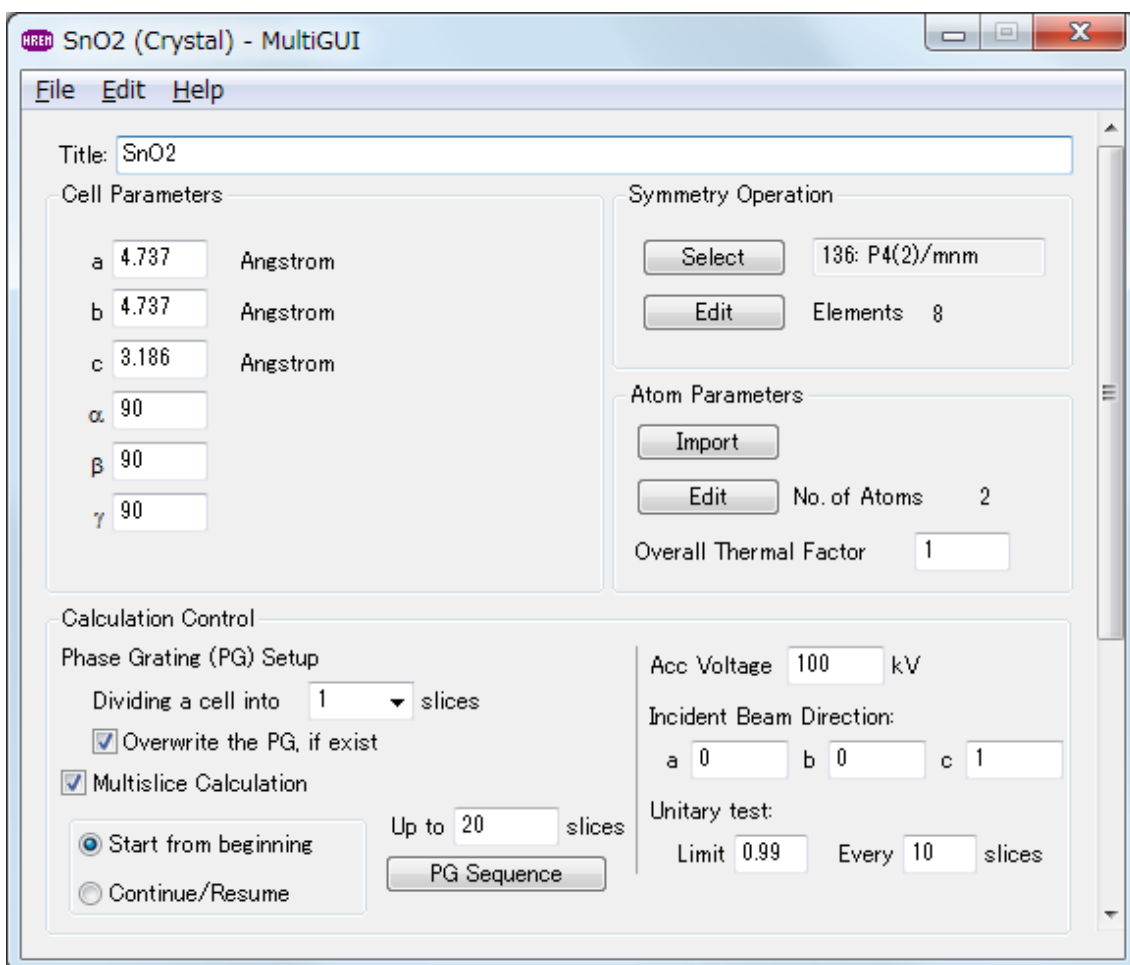
1. **MultiGUI を起動します。**

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. **サンプルデータを開くため、File メニューの Open... を選択し、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。

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

試用版として使用している場合には、データの保存、計算ができませんので、このステップ以降を飛ばして終了します。

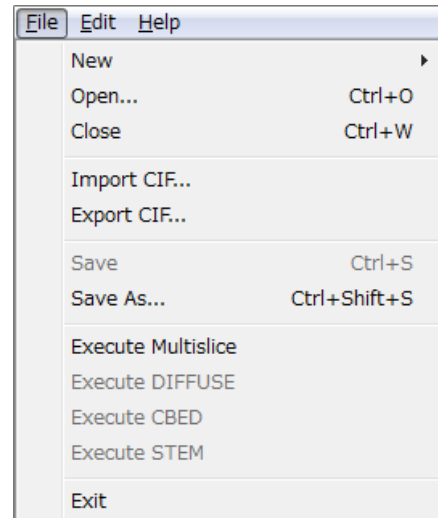
5. 現れたダイアログでファイル名を「SnO2test」として保存します

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。

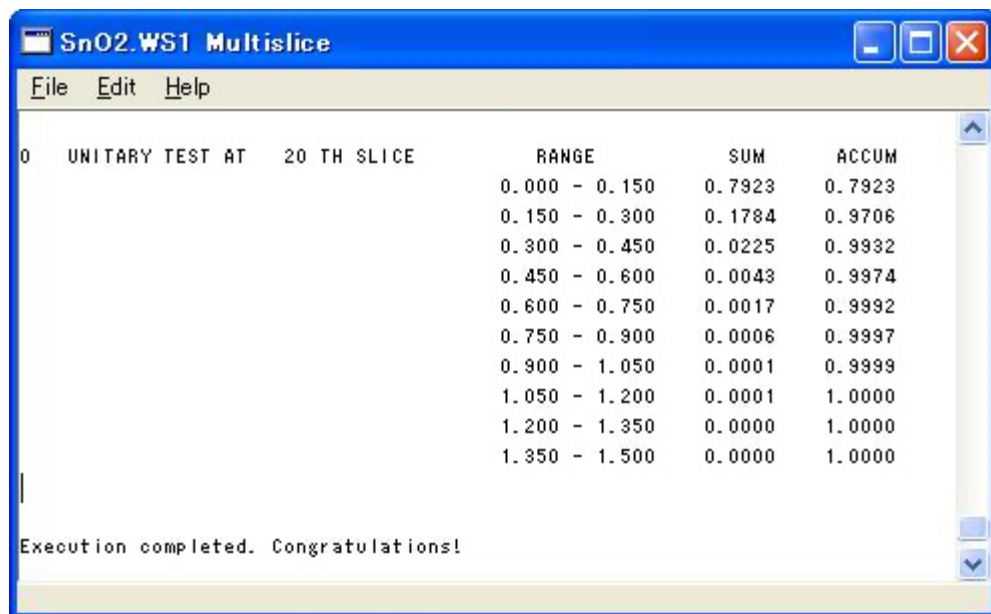
TIPS ファイル名には「.WS1」を指定する必要はありません。指定する場合には「半角英数」で入力して下さい。

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 計算結果のウィンドウには 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」メニューから計算結果を保存することが可能です。

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により計算途中で終了することが出来ます。

計算結果のウィンドウはクローズボタン、または「File」の「Exit」によりクローズすることが出来ます。

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

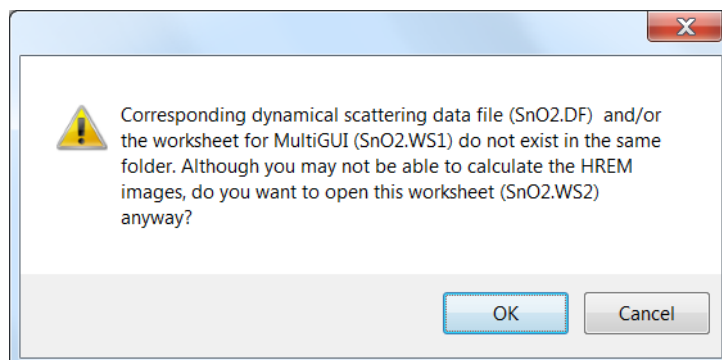
電顕像の数値計算の仕方も散乱強度の計算の仕方とよく似ています。電顕像の計算を行う前に、MultiGUI により散乱データ(.DF)を計算しておいて下さい。(試用版として使用する場合には、入力データの保存や実際の計算はできませんが、提供されるサンプルデータの計算結果を利用してシミュレーションの道筋を体験することができます) :

1. ImageGUI を起動します。

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 (SnO2.WS2) 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。

2. File メニューの Open...から Data フォルダ内の「SnO2.WS2」を選択します。

NOTE MultiGUI で SnO2 に対する散乱計算を行っていない場合には、以下のような警告メッセージが表示されます。その場合には、「OK」を選択します。



次ページのような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に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 Dynamical Scattering Data を変更したデータを作成しましょう :

3. 右上の”Browse”ボタンをクリックし、「SnO2test.DF」を選択します

試用版として使用する場合には、SnO2test.DF を選択する必要はありません。提供されるサンプルデータの計算結果 (SnO2.DF) を利用します。(SNO2.WS2 を使用すれば、SnO2.DF が自動的に選ばれています)

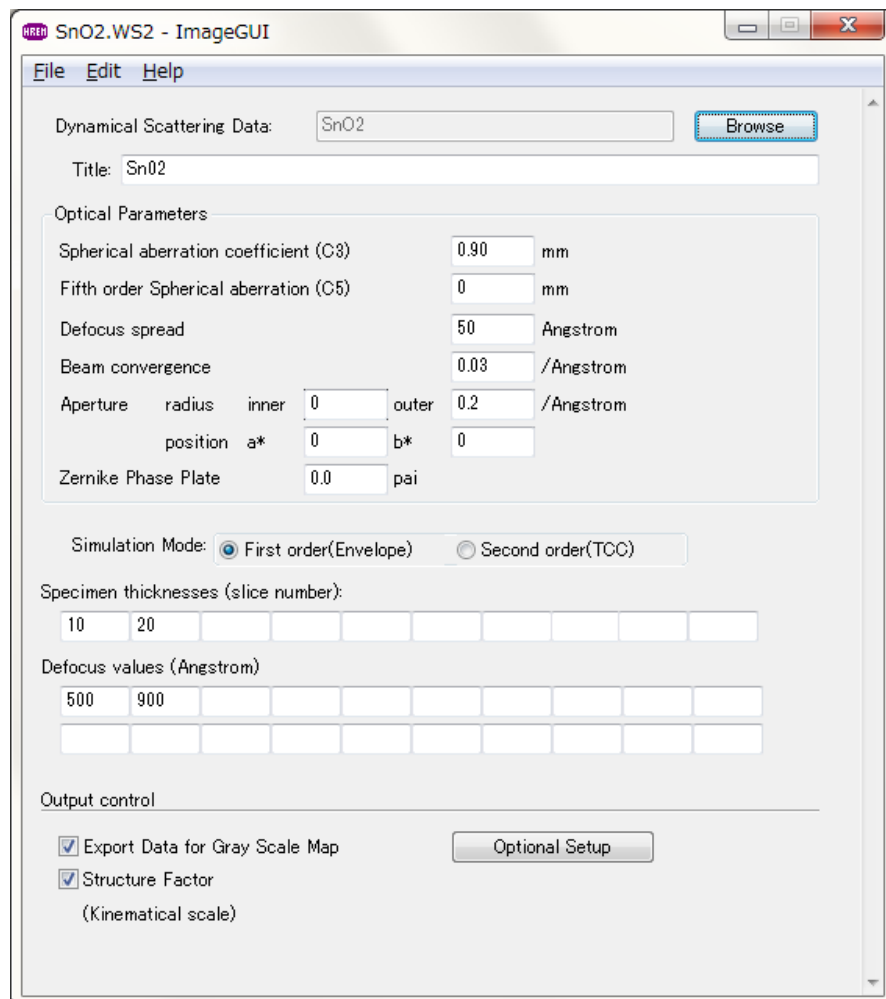
4. Title フィールドに新しいタイトル「SnO2 test calculation」を入力します

5. File メニューの「Save As...」を選択します

試用版として使用している場合には、データの保存、計算ができませんので、このステップ以降を飛ばして終了します。

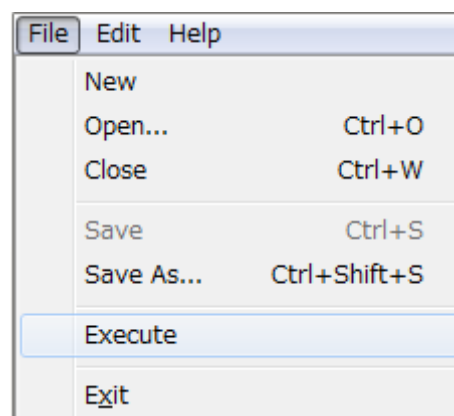
6. 現れたダイアログでファイル名を「SnO2test」として保存します

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：

7. 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 計算結果のウィンドウには **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**」メニューから計算結果を保存することが可能です。

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により計算途中で終了することが出来ます。

計算結果のウィンドウはクローズボタン、または「**File**」の「**Exit**」によりクローズすることが出来ます。

8. 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

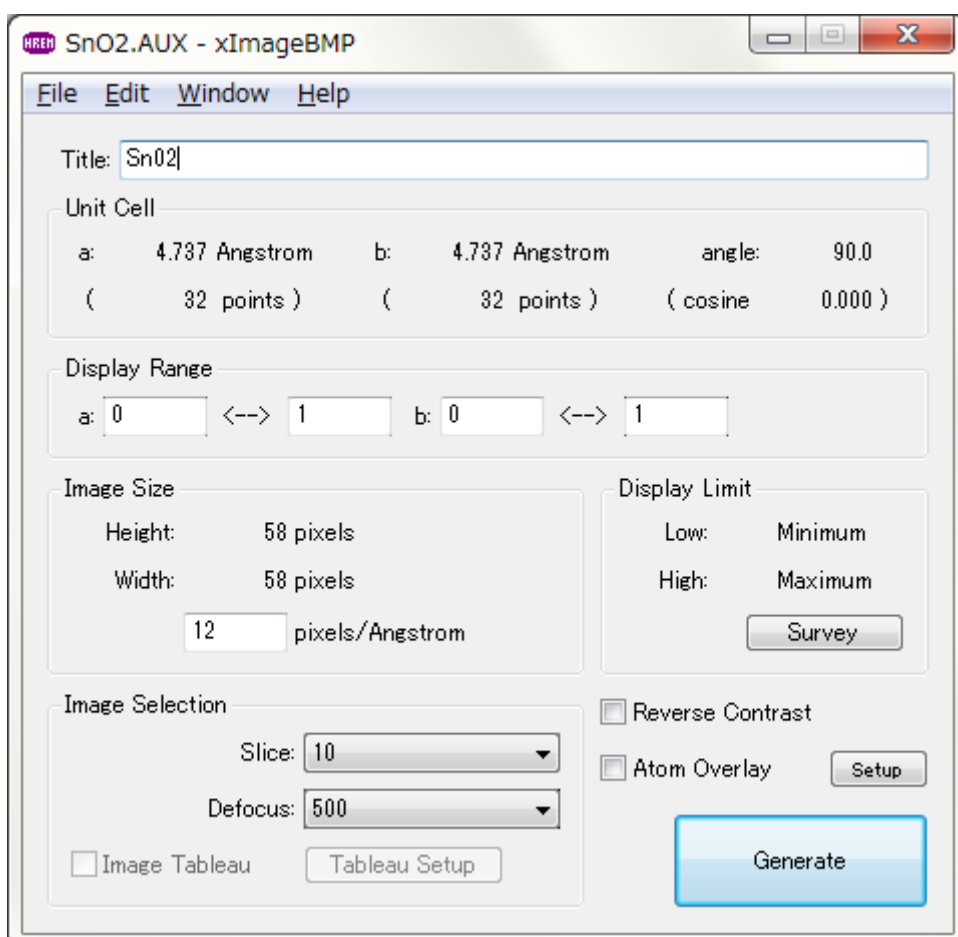
では、数値計算された SnO₂ の電顕像を濃淡表示してみましょう。

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.AUX2 を選択します（ImageGUI で計算される表示用データ名には「.AUX2」が付いています）。

試用版として使用する場合には、SnO₂test.AUX2 ではなく、提供されるサンプルデータの計算結果（SnO₂.AUX2）を選択します。

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 (Display Range) : (0<->1) x (0<->1)。

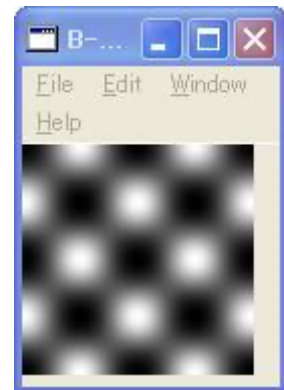


次に、表示領域を広げた濃淡図を描いてみましょう。

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 x 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」または「Save As...」により保存します。

画像のフォーマットは現れるダイアログで選択することが出来ます。

表示されている画像の定量的なデータ（数値データ）を保存したい場合には、「File」メニューの「Export Data...」から行います。（詳細に付きましては、トピックス：ImageBMP による数値データ出力を参照して下さい）

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。

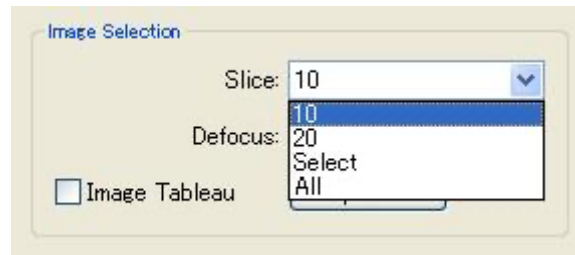
画像が保存されていない場合には保存を問い合わせるダイアログが現れます。

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。多数のビットマップ(BMP)ウィンドウを一括してクローズする方法についてはトピックスの「ビットマップウィンドウの一括クローズ」を見て下さい。

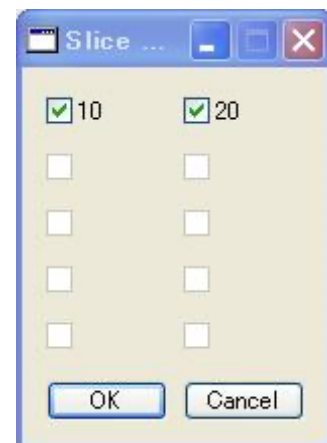
8. ImageBMP プログラムを終了するには、File メニューから「Exit (Quit)」を選択します。

NOTE: デフォルトで付与されるファイル名は「サンプル名_スライス番号_デフォーカス値.bmp」となります。

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）。



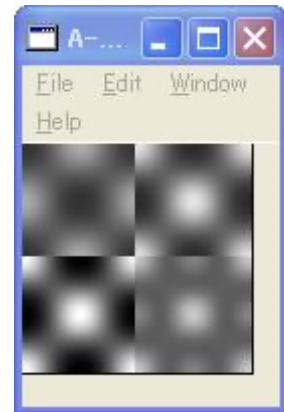
スライス数あるいはデフォーカス値で「Select」を選択しますと、次のようなスライス数あるいはデフォーカス値を選択するダイアログが現れます。そして、表示したい項目をチェックして下さい。



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頭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頭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「Tableau Setup」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。

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）。

試用版として使用する場合には、SnO₂test.DF ではなく、提供されるサンプルデータの計算結果（SnO₂.DF）を選択します

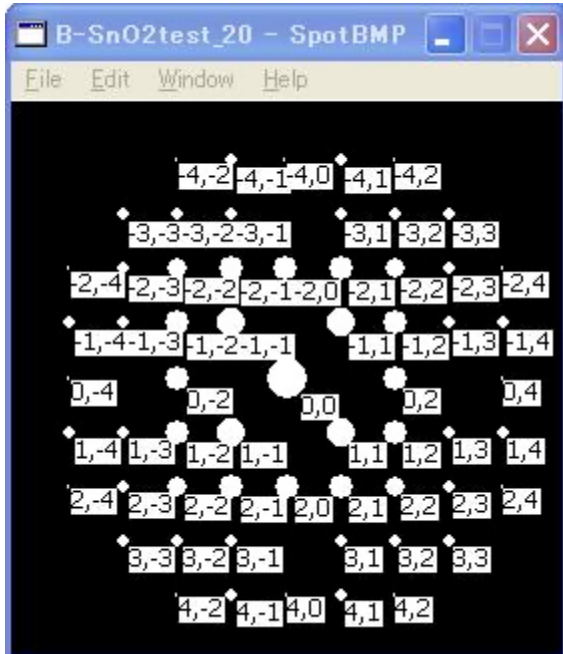
計算条件を設定するワークシートが現れます

The screenshot shows a software window titled "SnO₂test.DF - SpotBMP". The window has a menu bar with "File", "Edit", "Window", and "Help". Below the menu bar, there is a "Title" field containing "SnO₂ test". The "Unit Cell" section displays parameters: a: 0.2111041 1/Angstrom, b: 0.2111041 1/Angstrom, angle: 90.0, and (32 points). The "Display Range" section shows Radius: 1 1/Angstrom (up to 1) and Resolution: 128 points/(1/Angstrom) (Image Size: 256 pixel). The "Display Setup" section includes Spot Shape: Disk (selected), Spot Radius: 10 points, and a checked "Show Index" checkbox. The "Display Limit" section has Low: Minimum, High: Maximum, and a "Slice: Survey" button. The "Image Selection" section features a "Slice: 0" dropdown menu, a "Type: Log of Intensity" dropdown menu, and a "Reverse Contrast" checkbox. A "Generate" button is located at the bottom right of the window.

では、回折像を幾つか計算してみましょう。

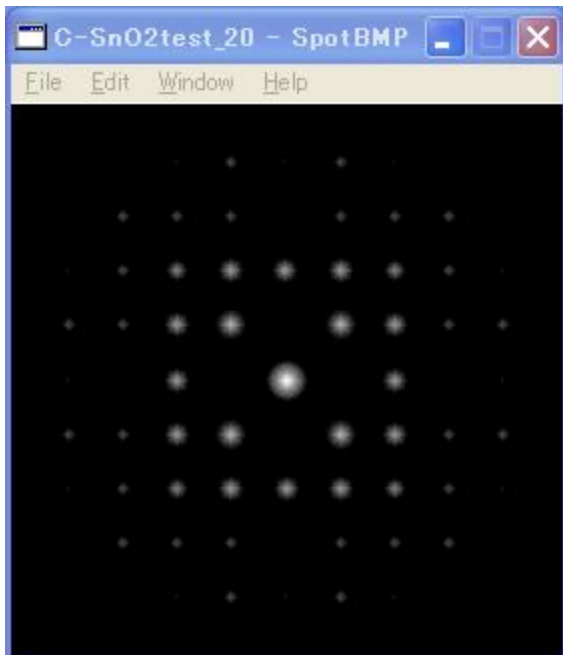
3. 条件を上のように設定して、ウィンドウの右下の「Generate」をマウスでクリックして下さい。

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。



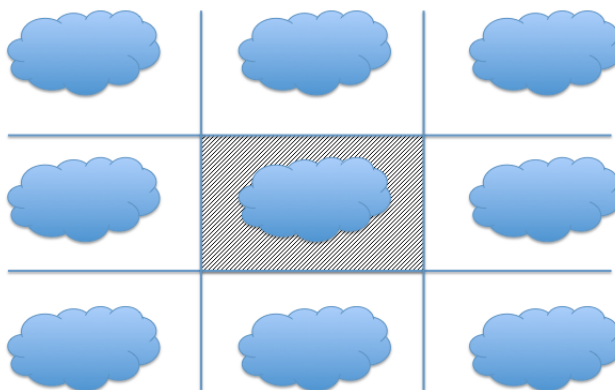
- SpotBMP プログラムを終了するには、File メニューから「Exit (Quit)」を選択します。

■ 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。

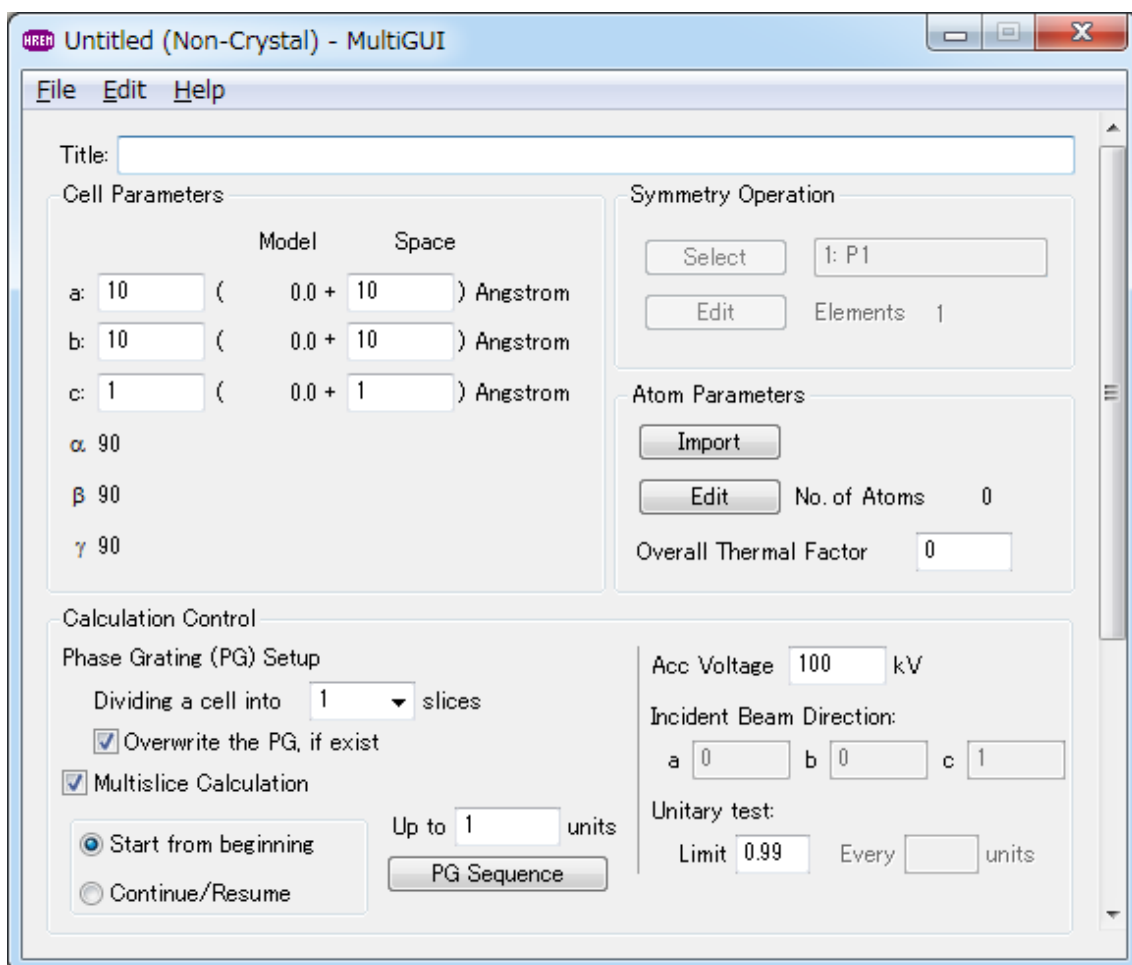
非周期(非結晶)モデルの取扱い

xHREM は周期性を仮定する高速フーリエ変換を多用するソフトウェアです。このため、Nano-particle のような周期性を持たないモデル(非周期(非結晶)のモデル)のシミュレーションを行うには工夫が必要です。xHREM では非周期モデルのシミュレーションは、モデルを含む仮想的な大きなセル (super-cell) を利用して行います。非結晶モデルでは super-cell が以下のように2次元結晶のように並んでいると仮定します。



モデルのサイズは原子座標をもとにユーザインターフェイスにより自動計算されます。また、モデルを xModelView で任意の方向に回転し、その方向でのシミュレーションを行うことが可能です。この場合には、回転された方向でのモデルのサイズが xModelView により自動計算されます。

このために、xHREM では非周期モデルを容易に扱えるような以下のようなユーザインターフェイスが用意されています。



super-cell の大きさはモデルの大きさにスペースを追加して定義出来ます。あるいは、モデルよりも大きな super-cell の大きさを指定すれば、スペースが計算されず、このスペースは隣にある仮想的なモデルがシミュレーション結果に影響を与えないような大きさに設定します。

非周期モデルの場合には、結晶モデルの場合のような、空間群あるいは対称操作は指定しません。また、格子は直交系に限定され、格子の角度はすべて 90° で固定です。

非周期モデルが super-cell を用いて作成されれば、その後のシミュレーションは結晶の場合と同じです。しかし、非周期モデルの super-cell は結晶のセルに比べて大きく、また、電子線の通過方向 (z 方向) に対して周期がないので、すべて異なる位相格子を使うことになり、必要な位相格子の数が多くなります。

また、非周期モデルでは z 方向には周期性がないので、1セル(1 unit)分の計算を行います。z 方向にどのような数のスライスに分けた場合でも、環境設定 (Preferences) で厚さ(Thickness)を Units にすれば、厚さ(Up to)はいつも 1 unit となります。

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：

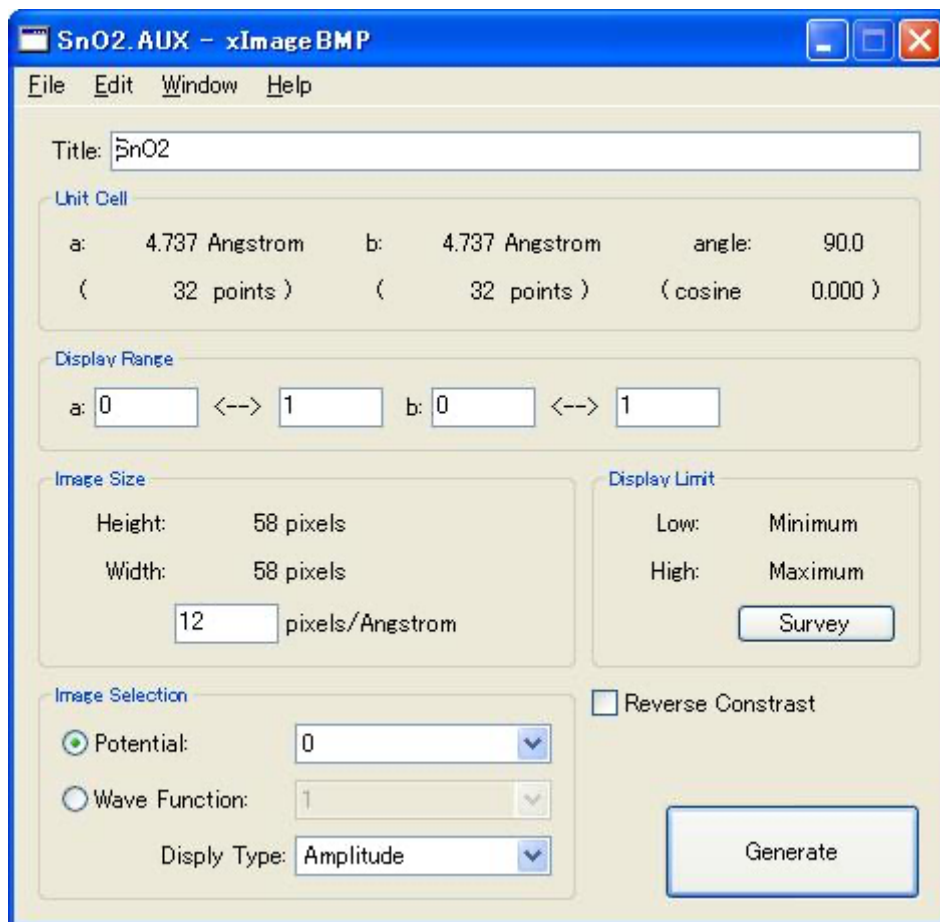
1. MultiGUI の「Output Control」で表示したい項目の「Export Data for Gray Scale Map」のチェックボックスにチェックをして、計算を実行する。

MultiGUI で計算される表示データは「.AUX1」の拡張子のファイルに保存されます。

2. ImageBMP を起動し、対応するサンプル名の AUX1 ファイルを開く。

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 SnO2.AUX1 を開きます。

次のような電頭像の表示のときに似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」のところが異なっています。



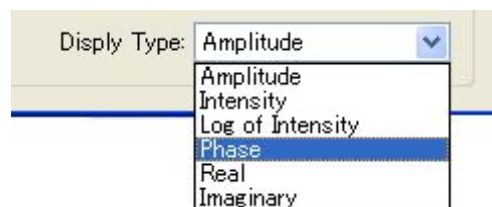
3. 表示条件、表示するものを設定する

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。

(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)

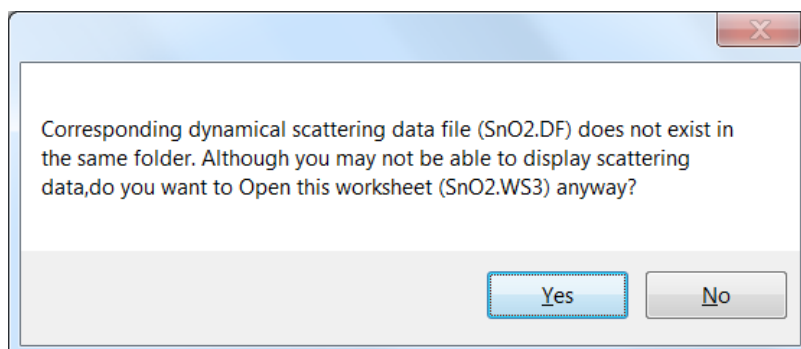
まず、回折強度（振幅）を表示するためのデータを以下のように作成します：

1. DFOutGUI を起動します。

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。

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 SnO2 に対する散乱計算を行っていない場合には、以下のような警告メッセージが表示されます。その場合には、「OK」を選択します。



次ページのような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、Dynamical Scattering Data を変更したデータを作成しましょう。

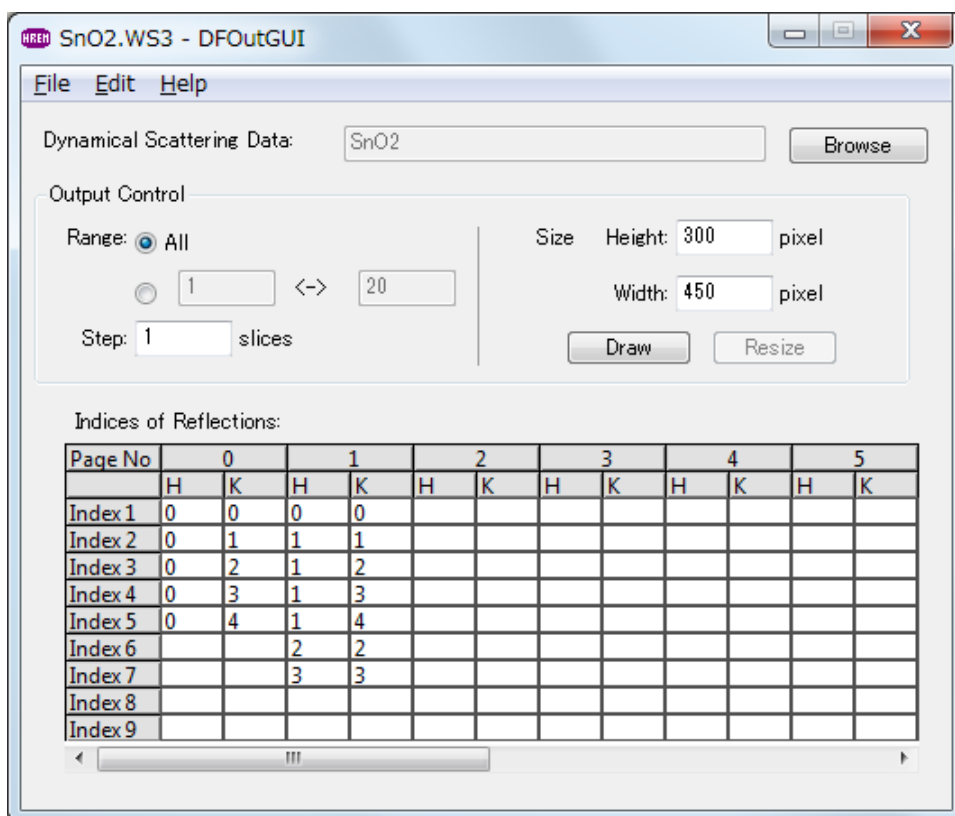
3. 右上の「Browse」ボタンをクリックし、「SnO2test.DF」を開きます

試用版として使用する場合には、SnO2test.DF を選択する必要はありません。提供されるサンプルデータの計算結果 (SnO2.DF) を利用します。(SnO2.WS3 を使用すれば、SnO2.DF が自動的に選ばれています)

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「.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。

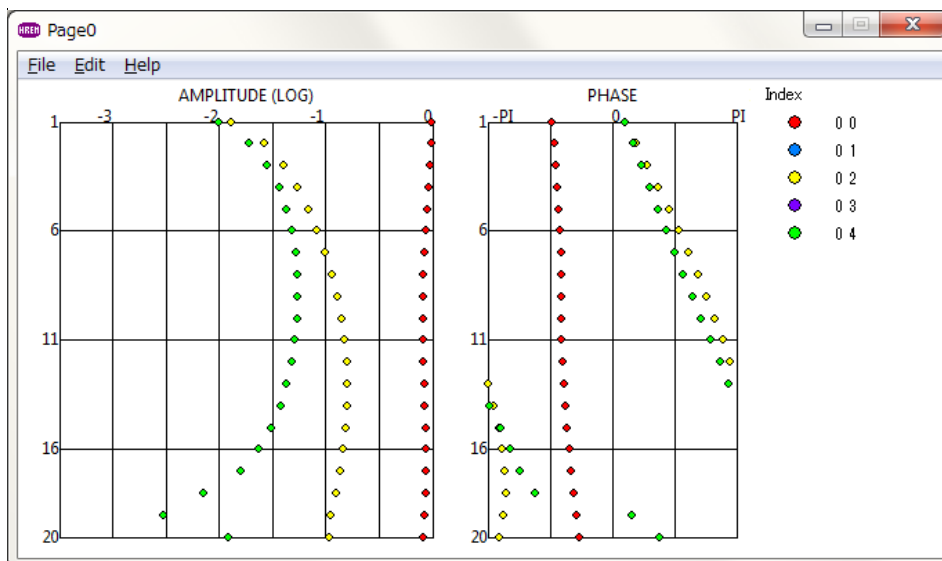


次に、このデータを使用して回折強度を表示させます：

6. 「Draw」 ボタンをクリックします。

グラフ表示のウィンドウが表示されます。グラフの大きさを変更したい場合には Size の Height および Width を変更して「Resize」をクリックします。

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。



画像強度のチェック

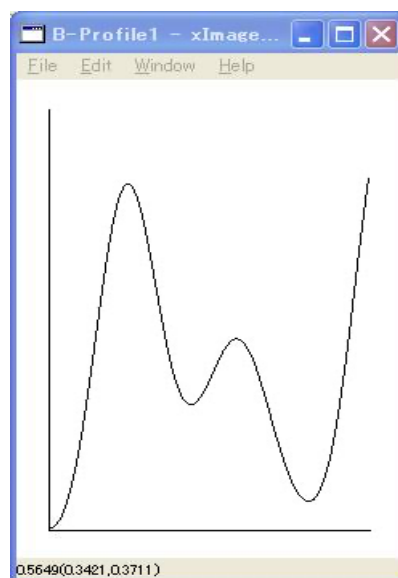
ImageBMP で表示された電頭像や波動関数の強度、また指定された方向のプロファイルを以下のように表示して画像強度を定量的に調べることが出来ます。

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 電頭像で「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、強度が対応する元画像の座標と共に表示されます。

NOTE 電頭像で「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。

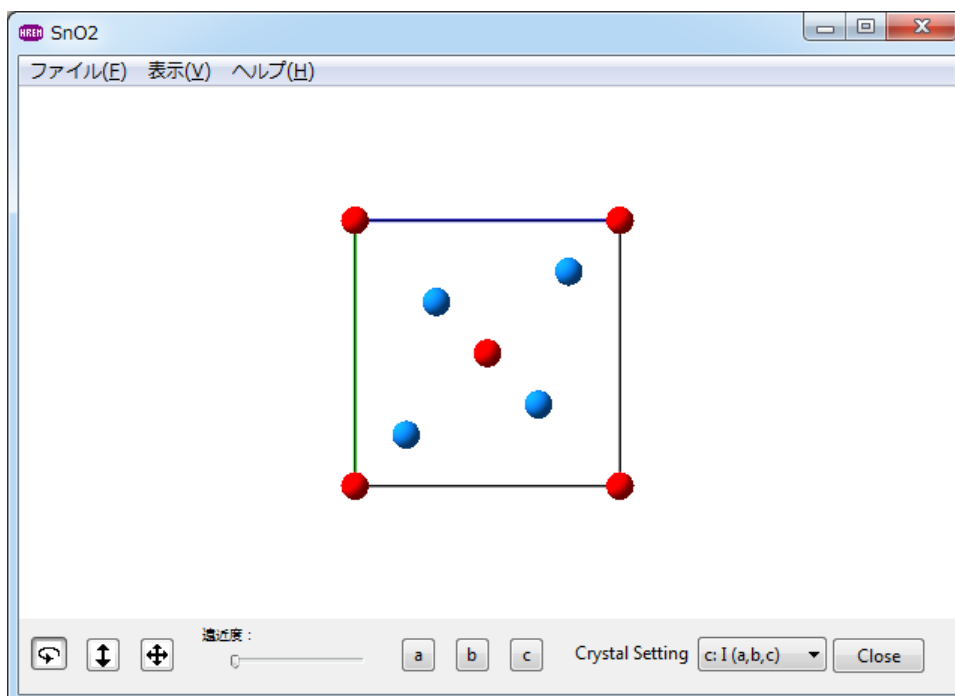
モデルを表示するには：

1. MultiGUI を起動します。
2. サンプルデータを開くため、File メニューの Open... を選択し、Data フォルダ内の 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。

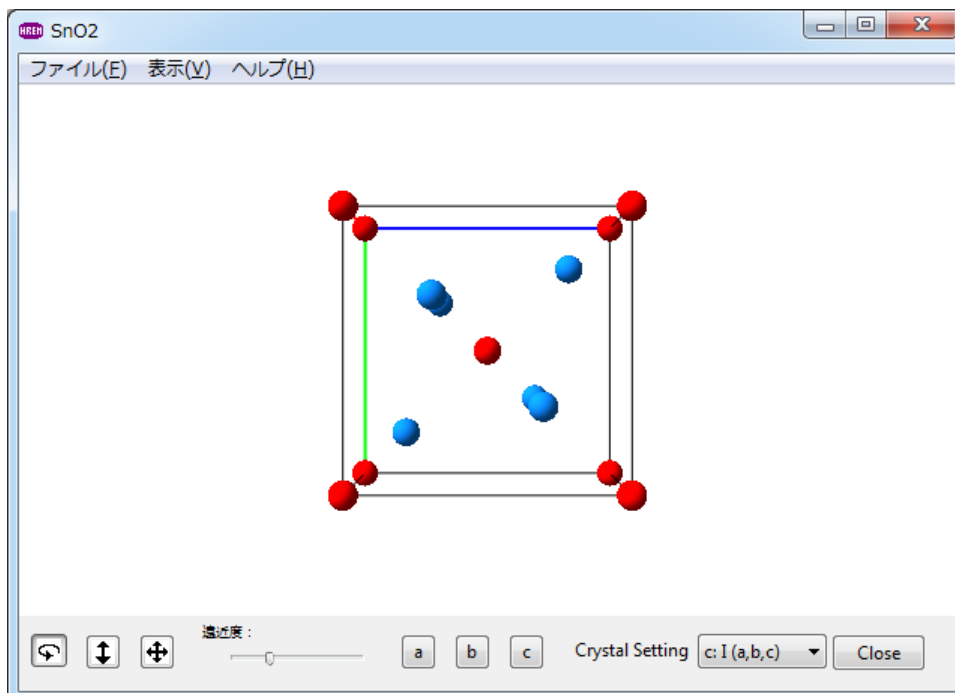


既定の設定では c 軸投影で表示されます。投影方向はツールバーの「a, b, c」を選択することにより容易に変更可能です。

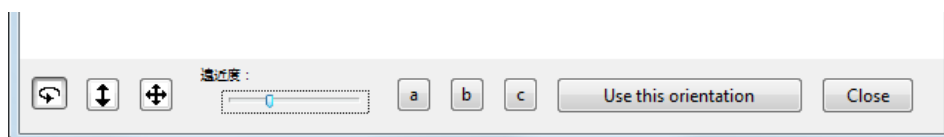
TIPS ツールの説明(左から): 回転、前後移動、面内移動、遠近法コントロール、投影方向の選択。

また、遠近法で表示したい場合には「遠近度」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。

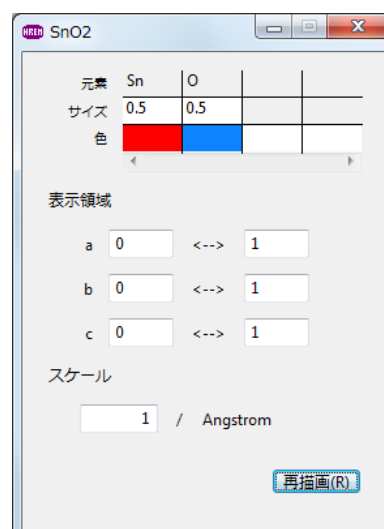


Crystal Setting (モデルが結晶の場合): 環境設定(Preferences)の結晶セッティング(Crystal setting)をここから変更することが可能です。



Use this orientation (モデルが非周期構造の場合): モデルを任意の方向に回転した後で、「Use this orientation」をクリックすれば、任意の方向に回転したモデルのシミュレーションを実行することが可能です。

TIPS 原子のサイズおよび表示色、モデルの表示範囲、表示のスケールは View メニューの View Options で現れるダイアログで変更可能です。

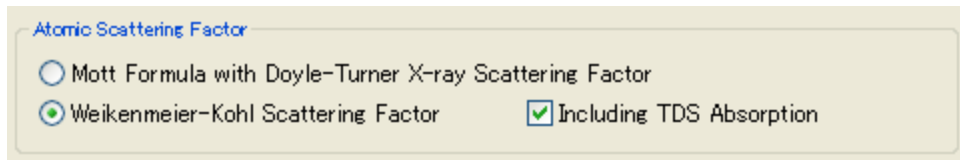


TDS 吸収の取り扱い

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：

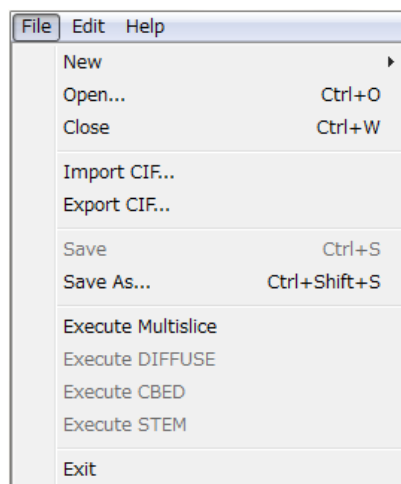
1. MultiGUI を起動し、
2. Edit メニューから Preferences を選びます。
3. Preferences ウィンドウの中の「Atomic Scattering factor」から「Weikenmeier-Kohl Scattering Factor」を選択し、「Include TDS absorption」にチェックを付けます。



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

xHREM™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できます



NOTE xHREM™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。

xHREM では原子位置データ等のモデルデータは Windows と Mac OS とともに同じデータベース形式で保存していますので、相互に利用することが可能です。

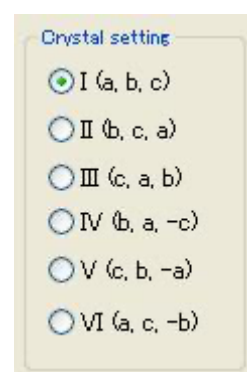
NOTE MultiGUI の「Atom Parameters」の「Edit」ウィンドウで「Export」を選択して、テキストデータとして保存し、他のソフトウェアと原子位置データ等を共有することも可能です。

結晶軸の交換

xHREM™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軸に選ぶことが可能です。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

xHREM™では 100 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。

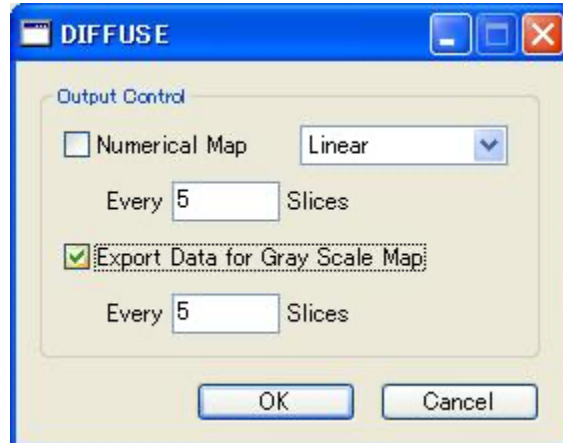
静的な原子位置のずれを含んだ大きなモデルを MultiGUI の「Atom Parameters」の「Edit」ウィンドウで入力するのは困難でしょう。このため、テキスト形式で別途作成したデータを「Import」機能により読み込むのが便利です。

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

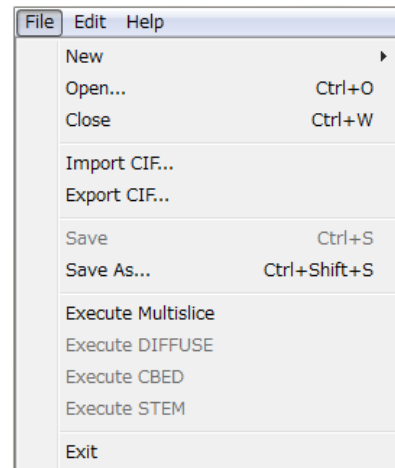


TIPS ワークシートの下の方への入力スライダーはスライダーで移動するか、表示範囲を広げることにより可能となります。

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。
試用版として使用している場合には、データの保存、計算ができませんので、このステップ以降を飛ばして終了します。
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 計算結果のウィンドウには 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」メニューから計算結果を保存することが可能です。

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により計算途中で終了することが出来ます。

計算結果のウィンドウはクローズボタン、または「File」の「Exit」によりクローズすることが出来ます。

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。（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を利用します）

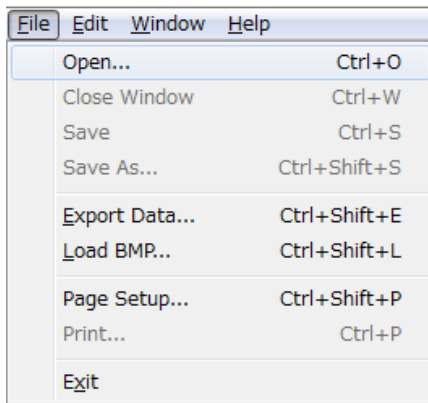
散漫散乱図形を表示するには：

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。**
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を利用します
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**

ImageBMP による数値データ出力

ImageBMP は種々のデータの濃淡像を Bitmap として表示します。他のアプリケーション(Gatan 社の DigitalMicrograph など)でさらに解析する為に、この濃淡像の各表示のピクセルの数値データを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。

ImageBMP および表示画像のファイルメニューは以下のような Export Data... コマンドを持っています。



描画に使用した元データの数値出力は ImageBMP のファイルメニューの Export Data... コマンドにより行います。

描画した濃淡像の各ピクセルの数値出力は各表示画像のファイルメニューの Export Data... コマンドにより行います。

数値データの出力形式：

以下の出力フォーマットが保存ダイアログのファイルの種類に表れます。

実数データ	TIFF 出力 (.tif)
	Binary 出力 (.pfm: Potable Floatmap File)
	テキスト出力 (.csv: Comma Separated Values File)
複素数データ	Gatan 形式 (.gfx)
	TIFF 出力 (.tif)
	Binary 出力 (.pcm: Potable Complexmap File)
Gatan 形式 (.gfx)	

描画データの出力形式：

実数データ	TIFF 出力 (.tif)
	Binary 出力 (.pfm: Potable Floatmap File)
	テキスト出力 (.csv: Comma Separated Values File)
	Gatan 形式 (.gfx)

NOTE Potable Floatmap/Complexmap File (.pfm/.pfm)はテキストヘッダーを持っています。xHREM ではヘッダーは 192 バイトです。このヘッダーには画素数の情報を含んでいます。

ビットマップ(BMP) ウィンドウの一括クローズ

個々のビットマップウィンドウは「File」メニューの「Close」（または、ビットマップウィンドウのクローズボタン）によりクローズできます。また、「Shift」キーを押しながらこのクローズ処理を行うと、保存ダイアログを表示せずにウィンドウをクローズできます。

ImageBMP で複数のビットマップウィンドウを表示している場合、それらを一括してクローズしたいことがあるでしょう。ビットマップウィンドウを一括してクローズするには以下のようにして下さい：

1) ビットマップウィンドウの File メニュー（または、クローズボタン）

「Alt (Windows)/Option (Mac)」キーを押しながら、「File」メニューの「Close」（または、ウィンドウのクローズボタン）でクローズ処理を行うと、保存ダイアログを表示しながらすべてのビットマップウィンドウを順次クローズすることができます。

保存ダイアログで **Cancel** が選択されると、それ以降のクローズ処置は中断されません。

「Shift」キーを押しながら、上記のクローズ処理を行うと、保存ダイアログを表示せずにすべてのウィンドウをクローズできます。

2) ImageBMP ウィンドウの Exit (Windows)/Quit (Mac)（または、クローズボタン）

ImageBMP を終了する前に、保存ダイアログを表示しながら、すべてのビットマップウィンドウを順次クローズすることができます。保存ダイアログで **Cancel** が選択されると、それ以降のクローズ処置は中断されます。

「Shift」キーを押しておく、保存ダイアログを表示せずにすべてのウィンドウをクローズできます。

このビットマップウィンドウの一括クローズ処理は **STEMimage** の場合にも有効です。

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 xHREM 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. File メニューの「Open...」から既存のデータを選択します。
データ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。

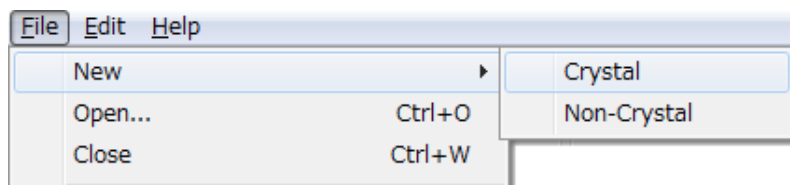
4. 次に、データを必要に応じて変更します。
5. 必要なデータが入力できたら File メニューの「Save」により再度保存します。

別の既存データを使用したい場合には、「Open...」コマンドで使用したいデータを選択します。

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. 結晶データ用のブランクワークシートがオープンします。
非結晶データ用のブランクシートを開く場合は File メニューの New コマンド内にある Non-Crystal を選択します。
「Default (Crystal)」または「Default_NonCrystal (Non-Crystal)」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

別の新規データを使用したい場合には、「New」コマンドで Crystal または Non-Crystal を選択します。



「Default (Crystal)」または「Default_NonCrystal (Non-Crystal)」と書かれたワークシートが現れます。

環境設定 (Preferences)

試料に依存しない計算コントロールは Preferences で設定することができます。

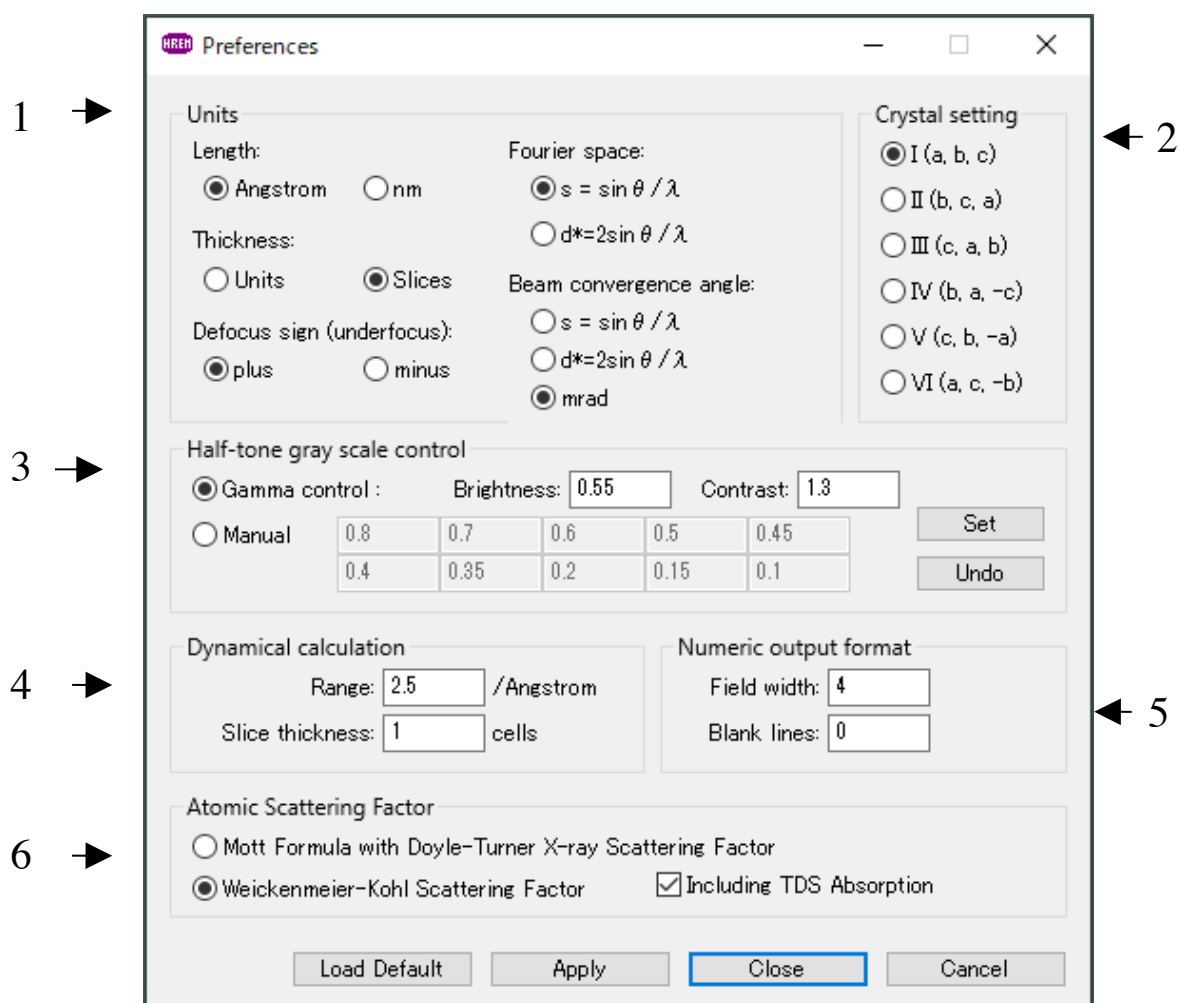
また、計算プログラムには特定の単位でデータを供給する必要があります。しかし、ユーザがグラフィカルユーザインターフェイス (GUI) で使用するデータ入力の単位は Preferences で選択できます。

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 上の変更を元に戻して「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。



1. 単位

長さ (Length) : Angstrom、nm

厚さ (Thickness) : unit cells, slices

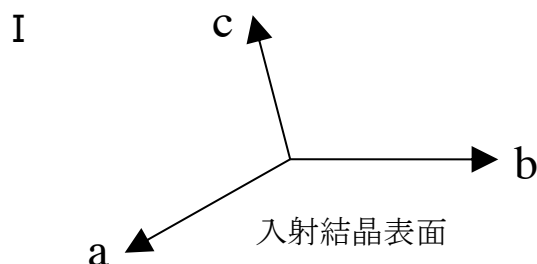
デフォーカスの符号 (Defocus sign) (アンダーフォーカス) : 正、負

フーリエ空間 (Fourier space) (逆空間) : s、d*

入射ビーム収束角 (Beam convergence angle) : s、d*、mrad

TIPS それぞれの単位は選択肢の最初のもが計算プログラムの中で使用されています。このため、他の単位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) が計算に必要な基本単位への変換を行います。

2. 結晶セッティング (Crystal setting)



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

Weickenmeier-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。

Doyle-Turner の散乱能では $S=2.0$ ($d^*=4.0$) 以上の計算は出来ません。

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。xHREM 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。

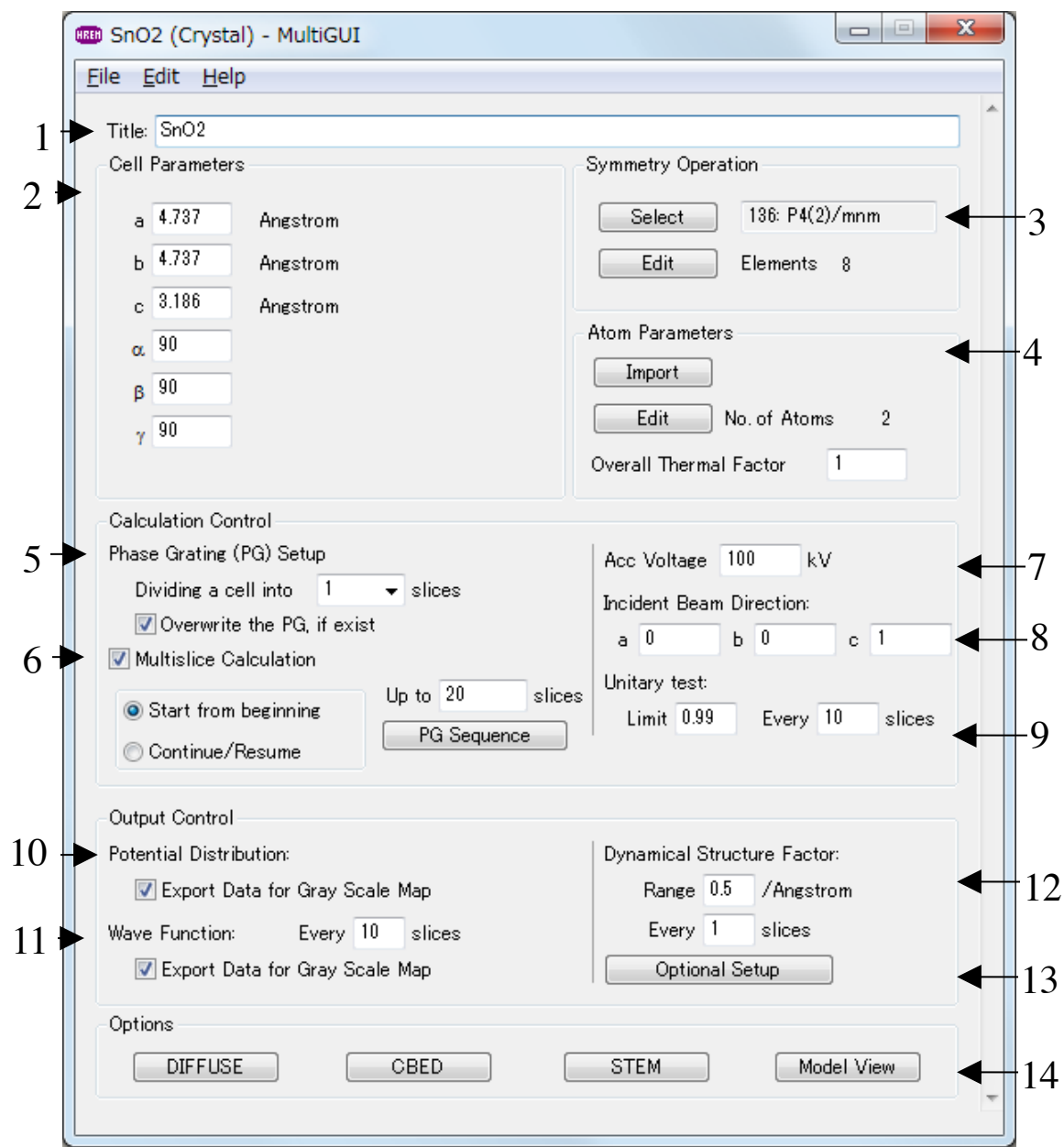
デフォルトデータの作成はデータの新規作成と殆ど同じです。ただ、全てのデータを記入するのではなく、既定値として設定したいデータのみを指定します。

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

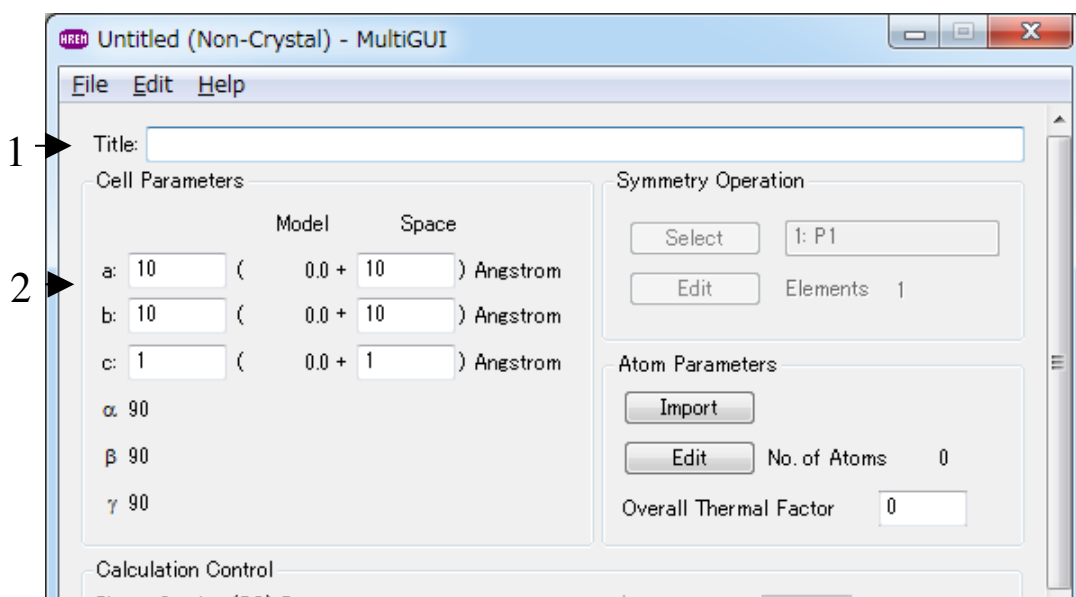
次回からここで保存したデータをテンプレートとして使用することによりデータ入力を一部省略することができます。

■ MultiGUI の使用法

ワークシート (Crystal)



ワークシート (Non-Crystal)



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)。

非周期モデル (Non-periodic/Non-crystal) の場合には、モデルサイズにスペースを追加した super-cell のサイズが使用されます。

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。

Note: Non-Crystal の場合には対称操作は選択できません。いつも、空間群 P1 に設定されています。

「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。

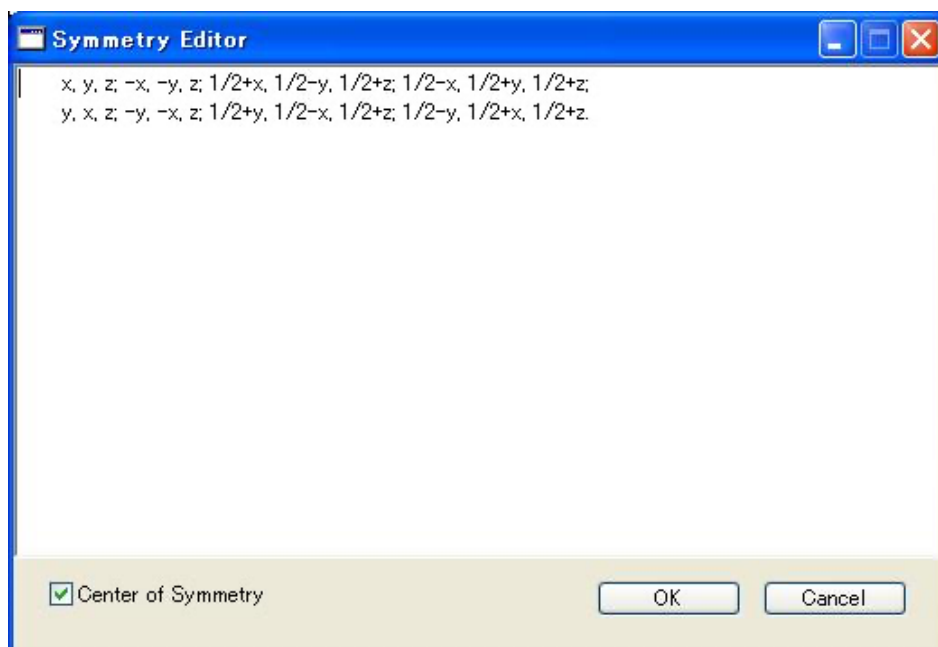


「View」をクリックしますと、次の「Edit」で現れるウィンドウに選択した空間群の対称操作が現れます。念のため、必ず対称操作を確認して下さい。

「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 (,)。

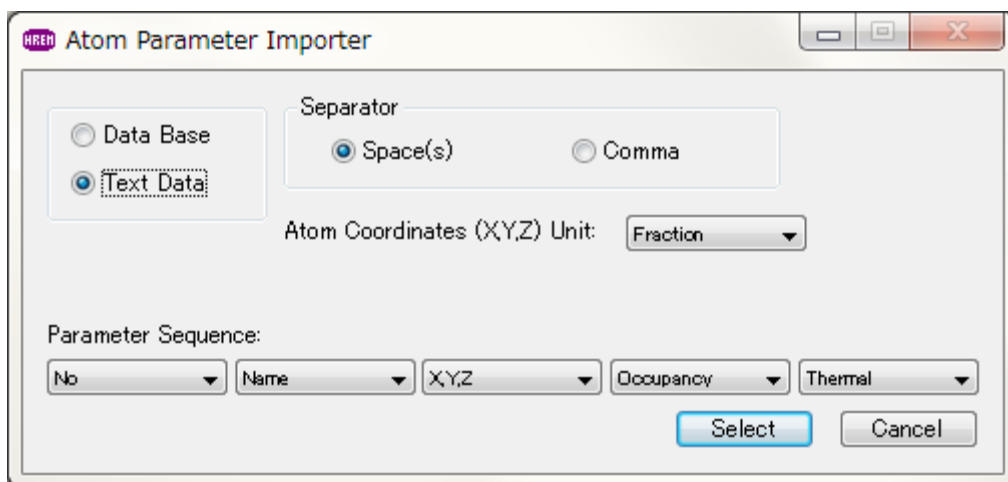
- 各対称操作の区切りはセミコロン (;)。
- 入力の終了はピリオド (.)。

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。
データ区切り (Separator)：空白 (space) またはコンマが利用可能です。
データ項目の順序 (Parameter Sequence)：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。

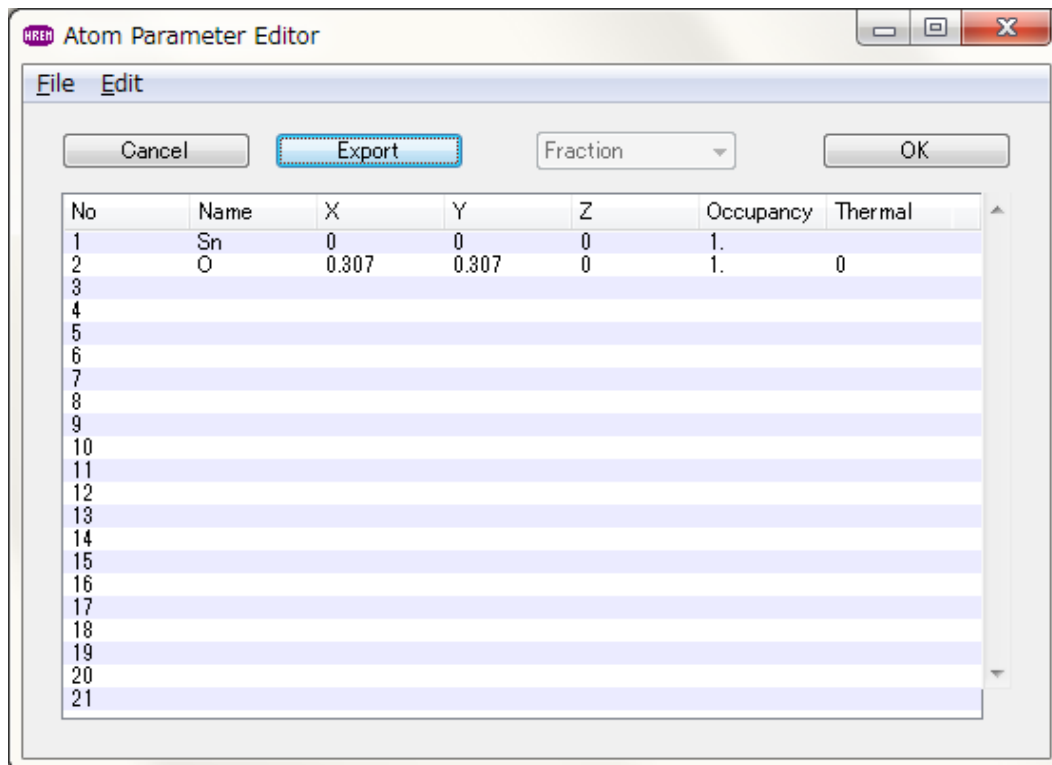
実際のファイルは「Select」ボタンをクリックして現れるファイル選択ダイアログで指定します。

原子座標の入力単位：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。

データ入力が正常に行われると、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。

「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。



- 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。

Export: 原子座標データがテキスト形式(固定長データ)として出力されます。ファイルには.atmの拡張子がつきます。

原子座標の単位: 非周期モデルを手入力する場合には、単位をAngstrom/nmより選択可能です。

「No of Atoms」: 原子数が表示されます。

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。

計算の制御

5. 位相格子 (Phase Grating (PG) Setup)

分割スライス数 (Deviding a cell into) : ユニットセルを最大 1000 分割することができます。10 分割スライスまではプルダウンから選択可能です。それ以上の分割スライス数は、プルダウンの上の入力欄に整数 (1000 まで) を直接入力して下さい。

PG が存在した場合の上書き指定

位相格子の計算は必要に応じて自動的に行われます。この指示は、同じデータ名の PG ファイルが存在する場合に、上書きして新規計算するか、既存の PG ファイルを使用するかを指定します。

6. マルチスライス計算 (multislice Calculation)

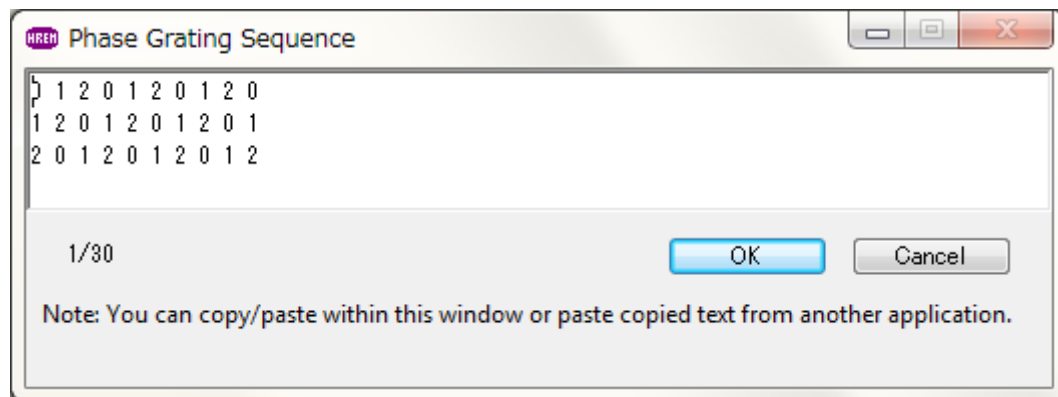
マルチスライス計算の有無

最終試料厚さ: 計算の最後のユニット数またはスライス数を指定します (最高 9,999 スライス)

新規、継続ボタン: 新規の計算では「Start from beginning」を選びます。最終試料厚さを増加させて以前の計算を続行する場合には「Continue/Resume」を選びます。STEM の計算で走査を中断した場合で、「Continue/Resume」を選べば、次の点から計算を再開することができます。

NOTE: STEM の場合には最終試料厚さを増加させて、以前の計算を継続することはできません。

PG Sequence (位相格子の順序): 通常、すべての位相格子が昇順に繰返して使用されます。この順序を編集することにより、欠陥層などの計算が可能になります。このボタンをクリックすると次のような位相格子順序編集ダイアログが開きます:



使用する位相格子の番号をスペースで区切って入力します。

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

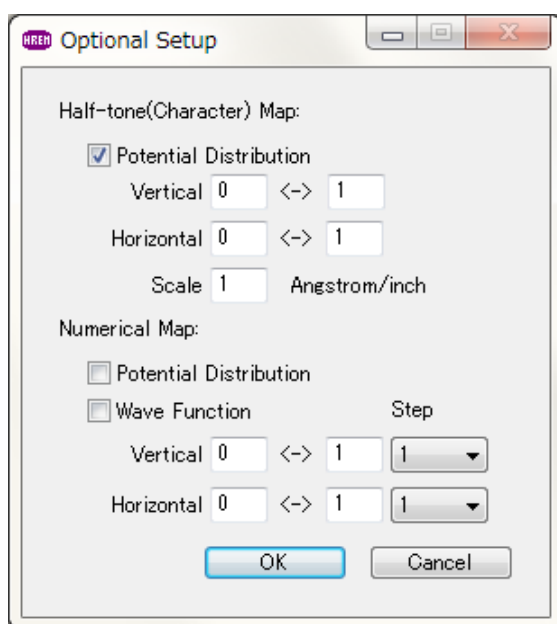
9. ユニタリーテスト (Unitary Test): 散乱強度の総和に関するテスト

許容限界 (Limit): 1 に近い程制限が厳しくなる

テスト頻度 (Cycle): チェックを行う試料厚さ間隔

出力の制御

10. ポテンシャル分布 (Potential Distribution)
 - 濃淡図用データのファイル出力の有無
11. 波動関数 (Wave Function)
 - 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試料厚さ間隔
12. 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試料厚さ間隔
13. 追加リスト出力設定



ハーフトーンマップ (Half-tone Map)

- ポテンシャル分布出力の有無

ハーフトーンマップの垂直、水平方向の範囲、縮尺

数値マップ (Numerical Map)

- ポテンシャル分布出力の有無
- 波動関数出力の有無

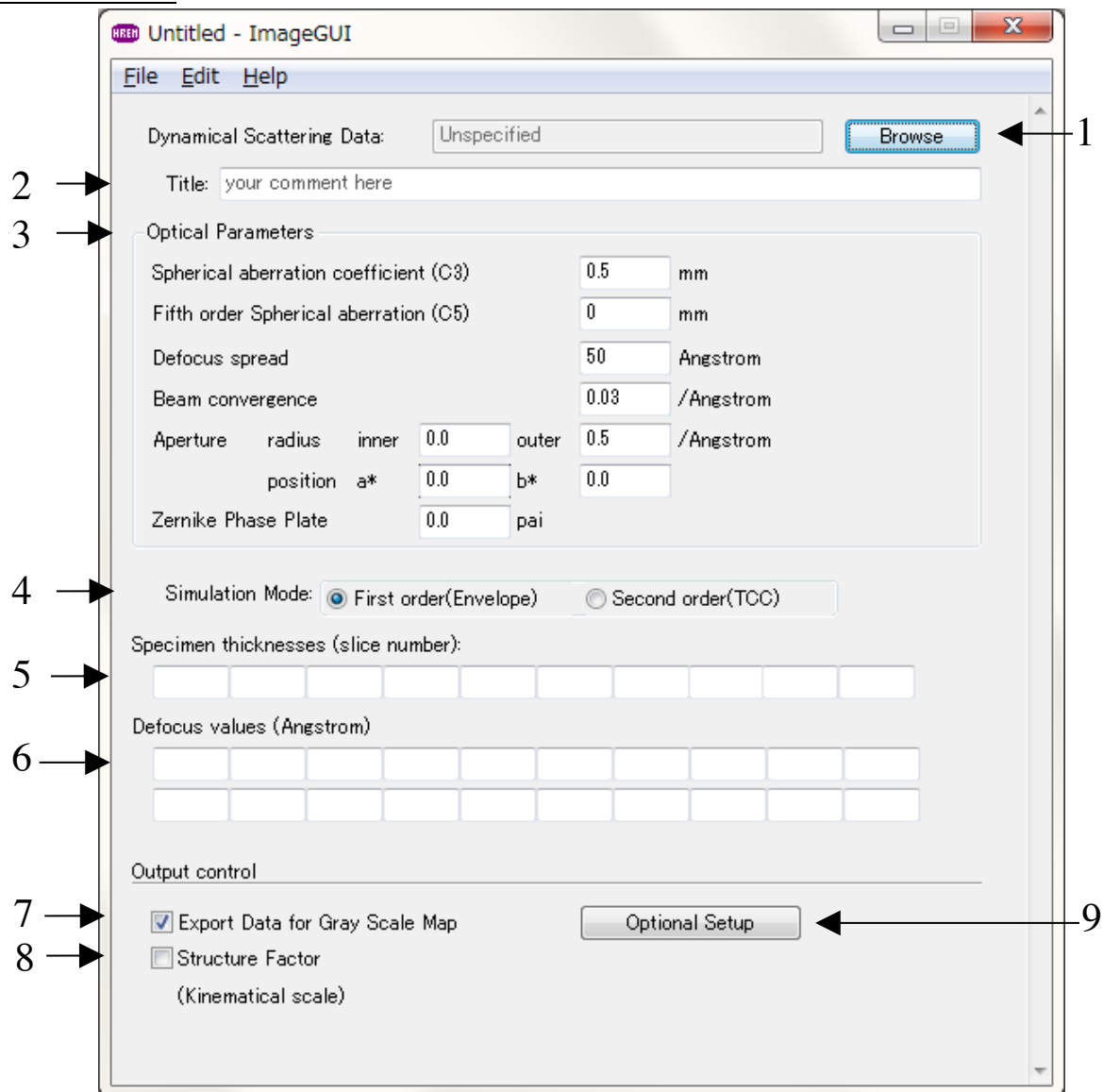
数値マップ出力の垂直、水平方向の範囲、ステップ

追加機能

14. 追加機能設定および Model View 起動
 - 追加機能に対する設定ダイアログ、および xModelView の起動。
 - CBED および STEM は xHREM の拡張機能で、別途ライセンスが必要です。

■ ImageGUI の使用法

ワークシート



1. 散乱データ (Dynamical Scattering Data)
MultiGUI で算出した散乱データを選択します。
2. タイトル (Title)
試料名、組成など自由に入力してください。
3. 光学パラメータ (Optical Parameters)
 - 球面収差係数 C3 (Spherical aberration coefficient.)
 - 5次球面収差係数 C5 (Fifth order spherical aberration)
 - 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) : inner, outer
位置 (position)
- Zernike 位相板 (Zernike Phase Plate)

位相板が絞りの内角までの領域に作用されます。位相変化量 (Phase shift) がゼロの場合は、inner aperture 内のビームはブロックされます。

4. 部分干渉性の取扱の指定 (Simulation Mode)

1 次近似 (First order/Envelope) または 2 次近似 (Second order/TCC) を選択します。

5. スライス厚さ (Slice thicknesses)

電頭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。

6. デフォーカス値 (Defocus values)

電頭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

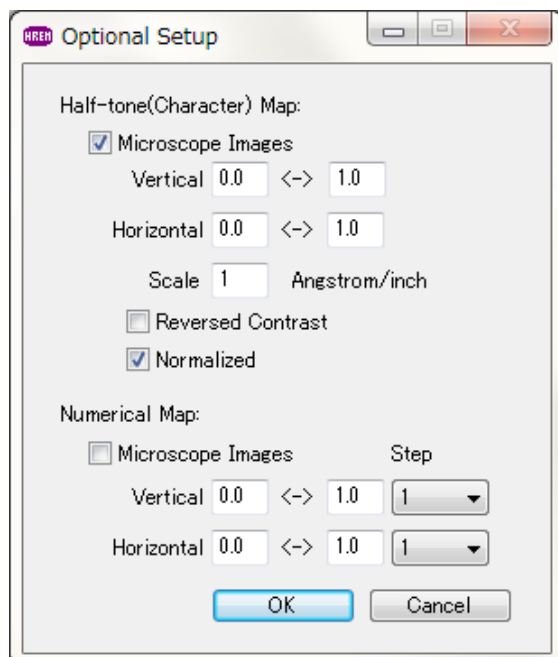
7. 顕微鏡像 (Microscope Images) データファイル出力の有無

指定すれば濃淡図用データがファイルに出力されます

8. 構造因子 (Structure Factor) リスト出力の有無

指定すれば運動学的構造因子が各スライスの計算に先立ち出力されます

9. 追加リスト出力設定



ハーフトーンマップ (Half-tone Map)

- 顕微鏡像 (Microscope Images) 出力の有無

ハーフトーンマップの垂直、水平方向の範囲、縮尺

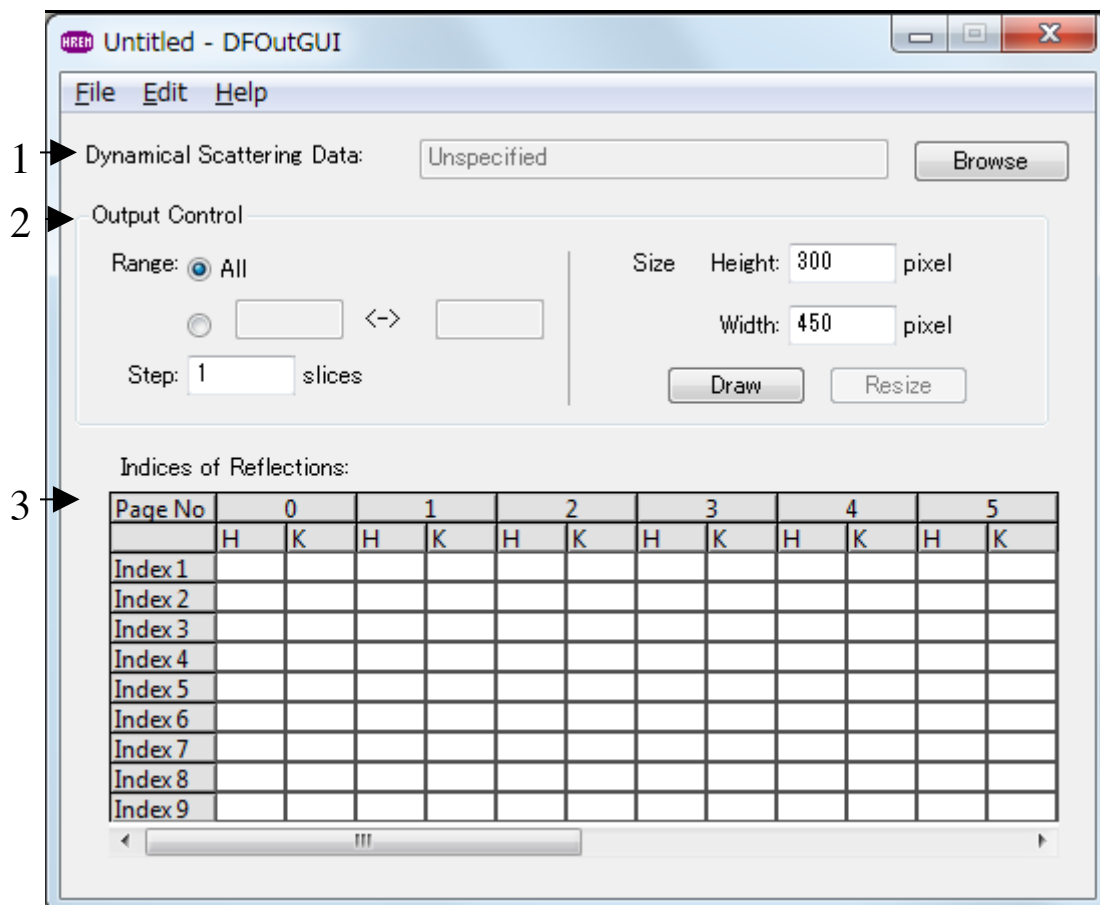
- コントラストの反転の有無
- 正規化の有無

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

■ DFOutGUI の使用法

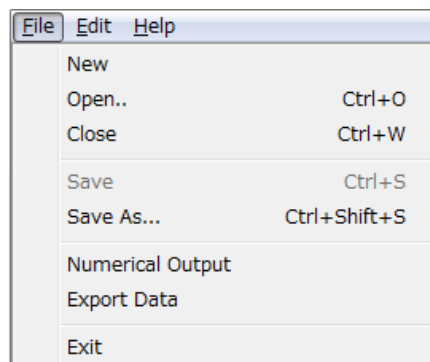
ワークシート



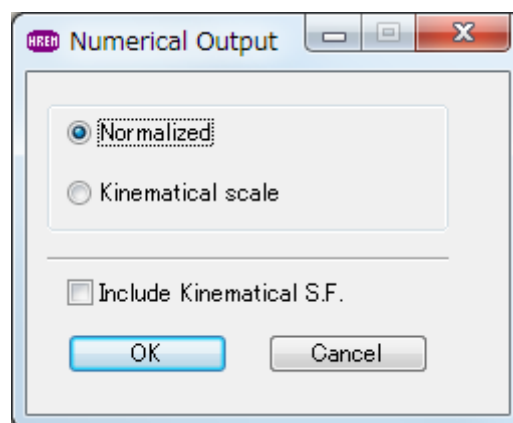
1. 散乱データ (Dynamical Scattering Data)
MultiGUI で算出した散乱データを選択します。
2. 出力制御
出力範囲 (Range) : 数値およびグラフ出力の場合の範囲、間隔をスライス数で指定します。
Size : グラフ表示ウィンドウのサイズを指定します。
Draw : グラフウィンドウを表示します
Resize : 表示中のグラフウィンドウを指定したサイズで再描画します。
3. 出力反射の指数 (Indices of Reflections)
強度変化を出力したい反射の指数を指定します。各ページには最大9個の反射を指定できます。また、一度に10ページ分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。

数値データの出力

回析強度を数値で確認するには、File メニューから「Numerical Output」を実行します。



Numerical Output を選択すると出力データの制御ウィンドウが表示されます。



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) で表示することができます。

Include Kinematical S.F. のチェックボックスは運動学的構造因子の出力の要否を表します。

OK ボタンをクリックすると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と位相が数値で表示されます。そして、表示が終了すると「Execution completed. Congratulations!」と表示されます。

```

#####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 ..... 6.0623e+2

0 0 0 1 0 2 0 3 0 4

1 0.39536 -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「Include Kinematical S.F.」のチェックを入れる以外に「Output Range」で開始スライスをゼロにしても表示されます。

NOTE: 計算結果のウィンドウには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」メニューから計算結果を保存することが可能です。

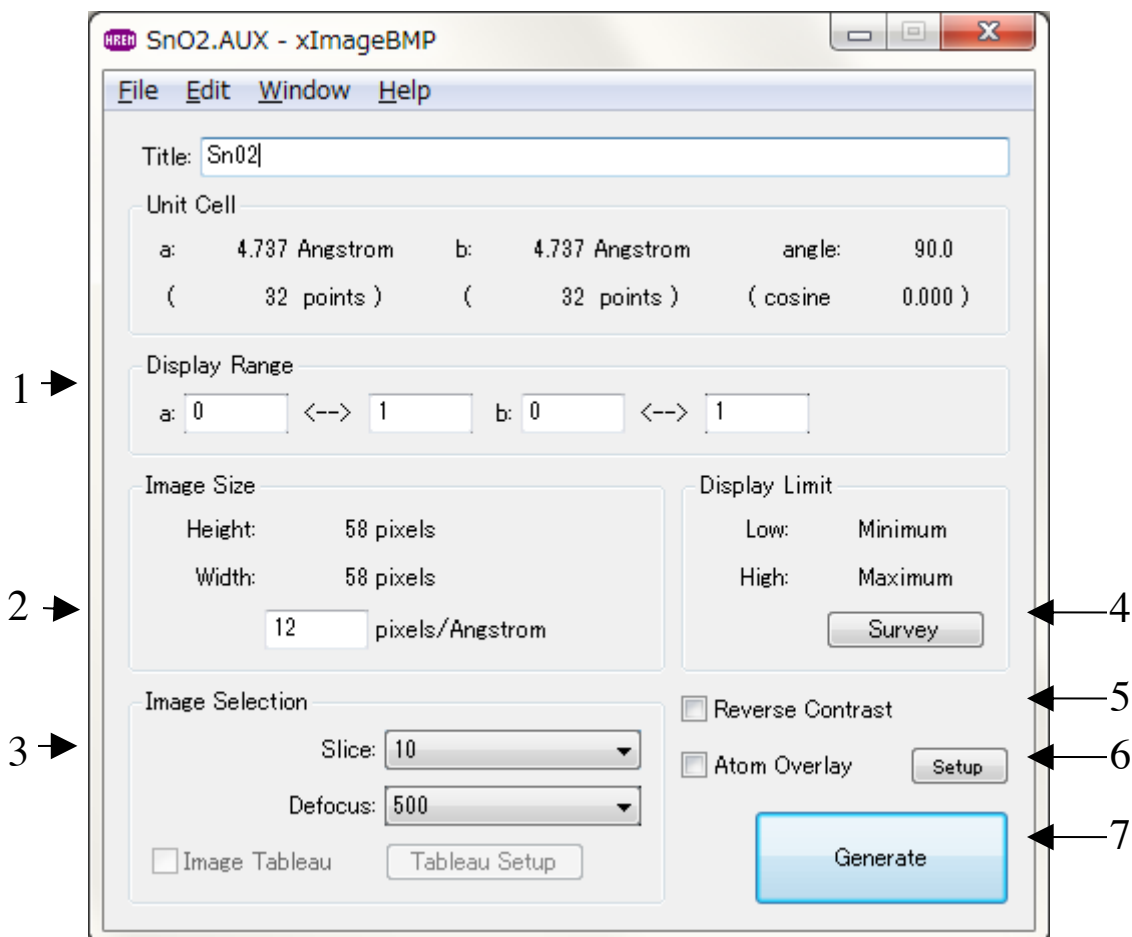
TIPS: プログラムは、「File」メニューの終了 (Exit) またはウィンドウのクローズボタンにより計算途中で終了することが出来ます。

計算結果のウィンドウはクローズボタン、または「File」の「Exit」によりクローズすることが出来ます。

■ ImageBMP の使用法

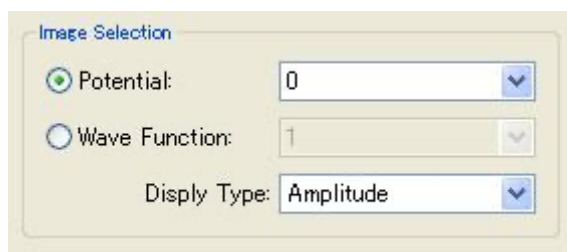
ワークシート

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。

動力学計算データ（複素数データ）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 & 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。

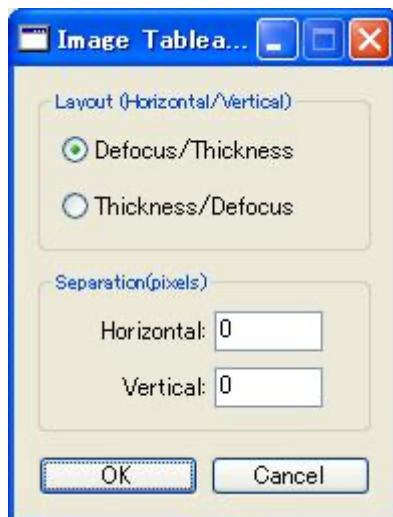
● デフォーカス (Defocus)

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。

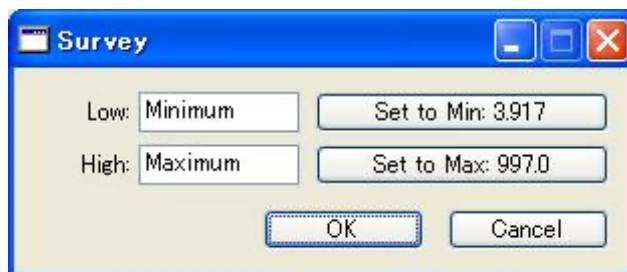
● Image Tableau

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。「Tableau Setup」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。



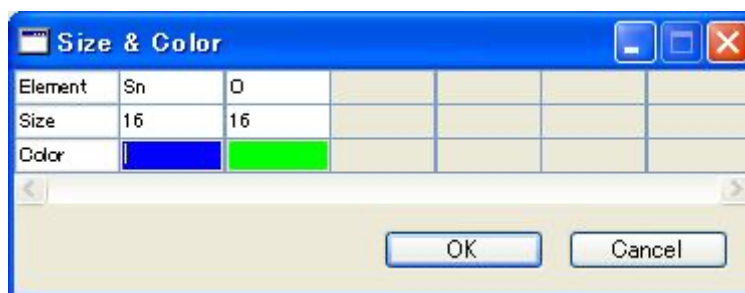
ボックスに数値を書き入れることにより、強度範囲を変更することができます。

5. 濃淡の反転 (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)**

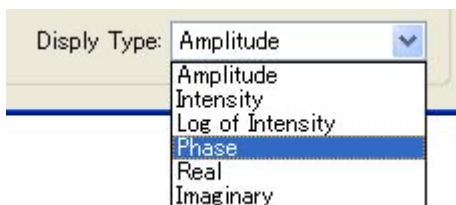
濃淡像を表示する位相格子 (スライス) を選択します。「All」を選択すると全ての位相格子について順次計算されます。「Projection」を選択すると全てのポテンシャルを総和したものが表示されます。

- **波動関数の表示 (Wave Function)**

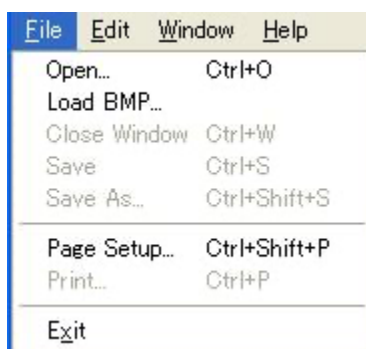
濃淡像を表示する試料の厚さ (スライス数) を選択します。「All」を選択すると表示されている全てのスライスについて順次計算されます。

- **複素数データを表示する形式の選択 (Display Type)**

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。

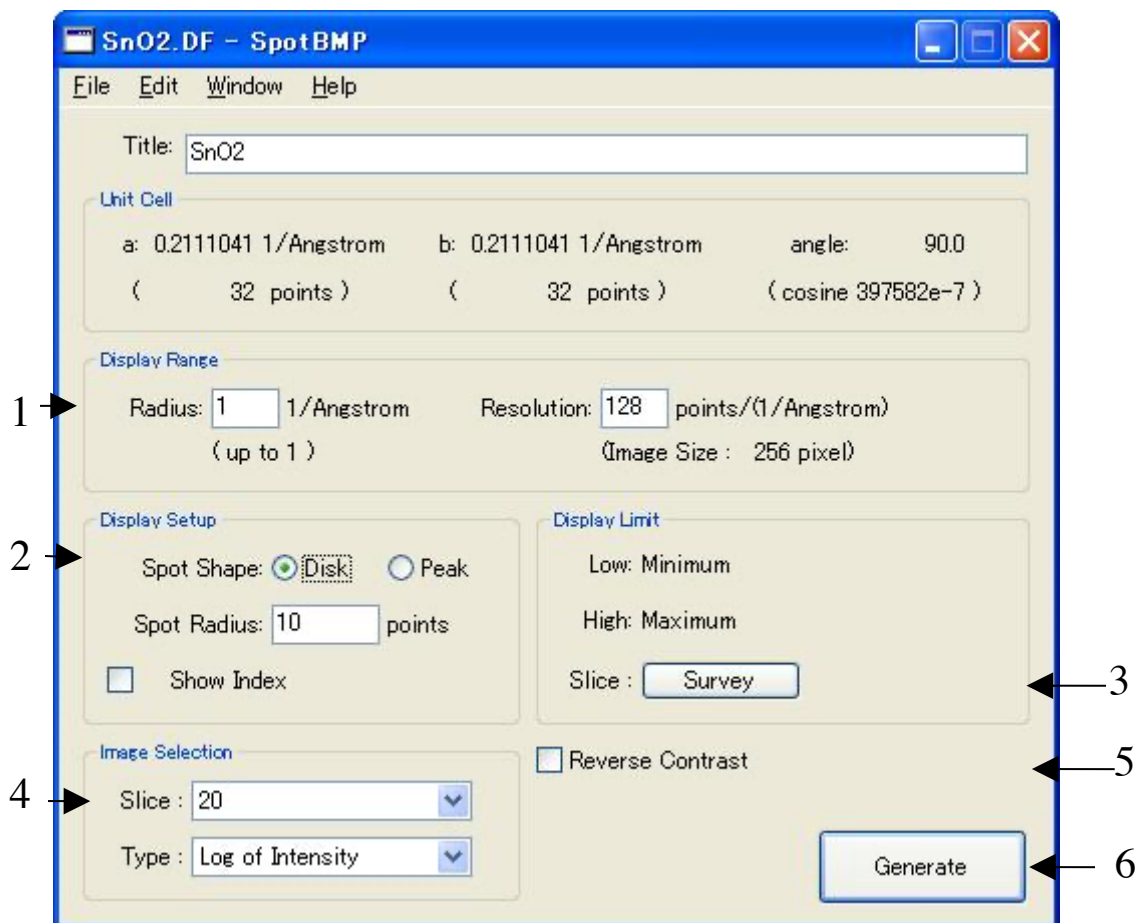


ImageBMP メニュー



■ 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。

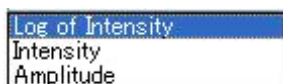
- 表示スケール (Resolution)

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：



- 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)

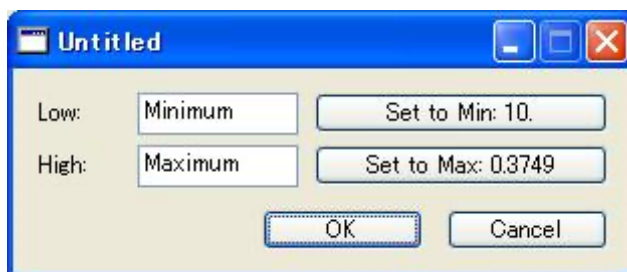
ディスク (円盤状) で表示するか、ピーク形状を示すかを選択します。

- 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。

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。「A11」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. 濃淡の反転 (Reverse Contrast)

チェックされると濃淡が反転して表示されます。

6. 回折像の生成 (Generate)

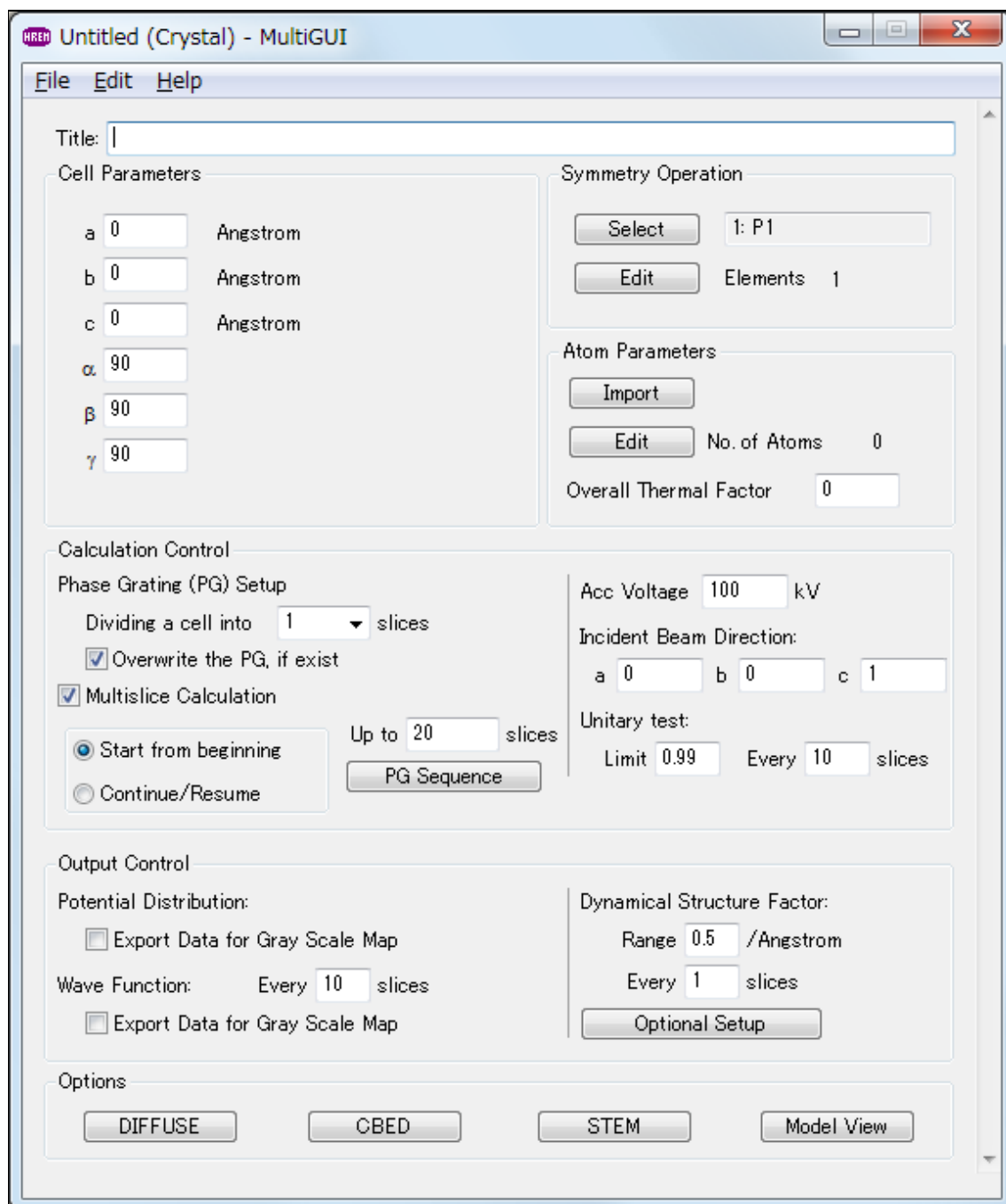
「Generate」をクリックすると回折像が計算されます。

SpotBMP メニュー

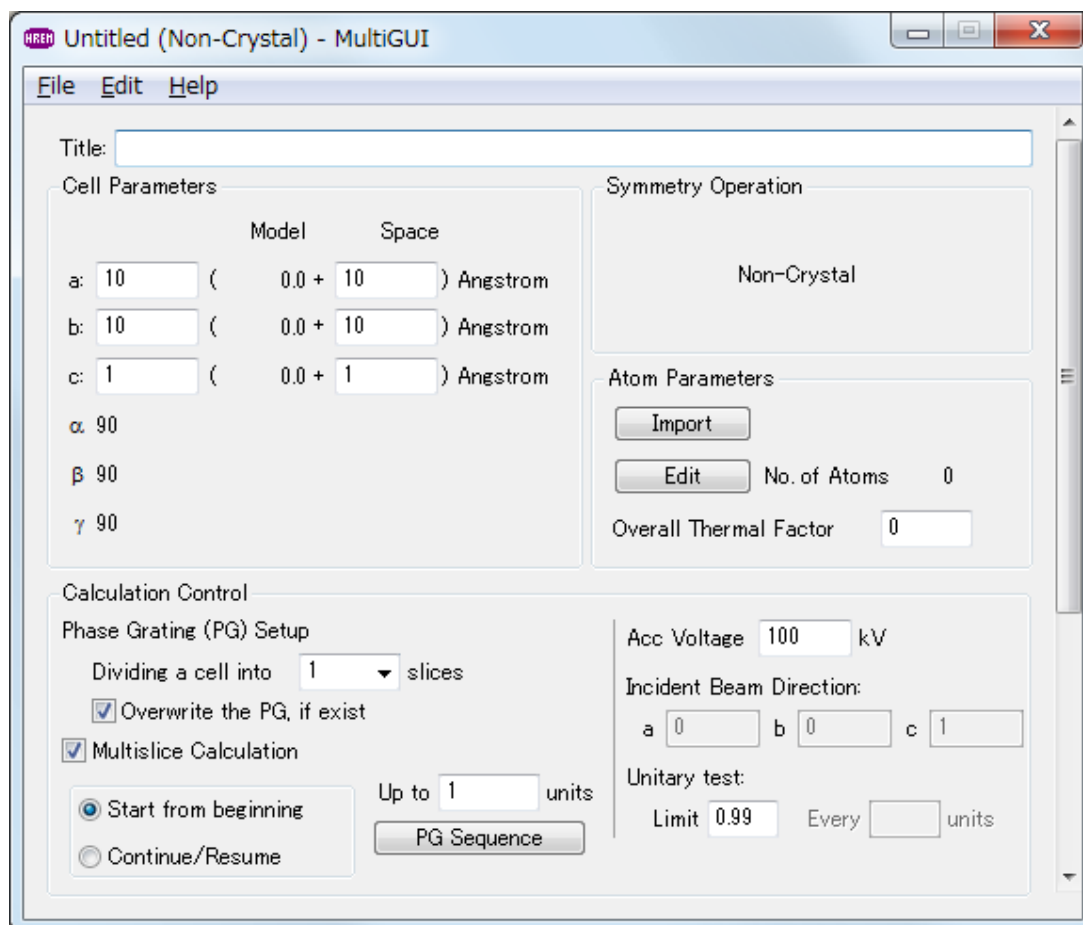
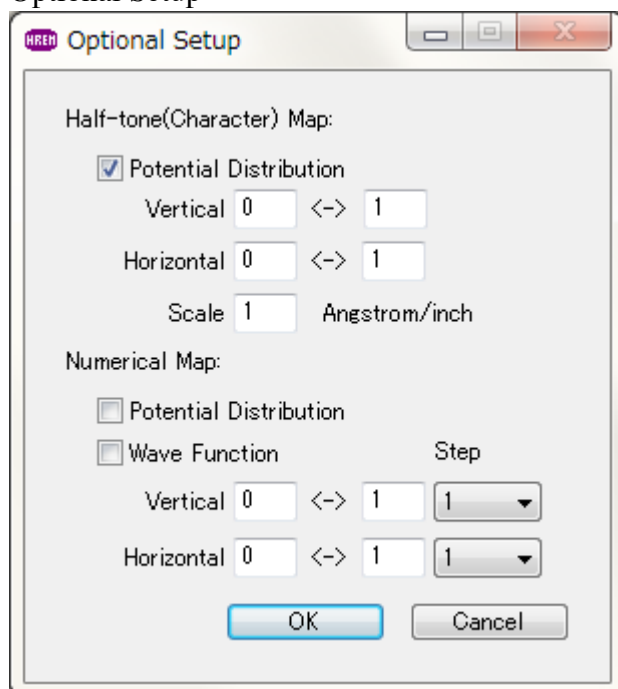
<u>F</u> ile	<u>E</u> dit	<u>W</u> indow	<u>H</u> elp
Open...		Ctrl+O	
Load BMP...			
Close		Ctrl+W	
Save		Ctrl+S	
SaveAs...			
Print setup...			
Print		Ctrl+P	
Exit			

<u>E</u> dit	<u>W</u> indow	<u>H</u> elp
Cut		Ctrl+X
Copy		Ctrl+C
Paste		Ctrl+V
Delete		
Expand		Ctrl+E
Reduce		Ctrl+R
Original Scale		

MultiGUI



Optional Setup



ImageGUI

The screenshot shows the 'ImageGUI' application window with the following components:

- Title Bar:** 'Untitled - ImageGUI' with standard window controls (minimize, maximize, close).
- Menu Bar:** 'File Edit Help'.
- Dynamical Scattering Data:** A text field containing 'Unspecified' and a 'Browse' button.
- Title:** A text field containing 'your comment here'.
- Optical Parameters:** A group box containing several input fields:
 - Spherical aberration coefficient (C3): 0.5 mm
 - Fifth order Spherical aberration (C5): 0 mm
 - Defocus spread: 50 Angstrom
 - Beam convergence: 0.03 /Angstrom
 - Aperture: radius inner (0.0), outer (0.5) /Angstrom; position a* (0.0), b* (0.0)
 - Zernike Phase Plate: 0.0, pai
- Simulation Mode:** Radio buttons for 'First order(Envelope)' (selected) and 'Second order(TCC)'.
- Specimen thicknesses (slice number):** A row of 10 empty input fields.
- Defocus values (Angstrom):** Two rows of 10 empty input fields.
- Output control:** A section with checkboxes for 'Export Data for Gray Scale Map' (checked) and 'Structure Factor (Kinematical scale)' (unchecked), and an 'Optional Setup' button.

Optional Setup

Optional Setup

Half-tone(Character) Map:

Microscope Images

Vertical 0.0 <-> 1.0

Horizontal 0.0 <-> 1.0

Scale 1 Angstrom/inch

Reversed Contrast

Normalized

Numerical Map:

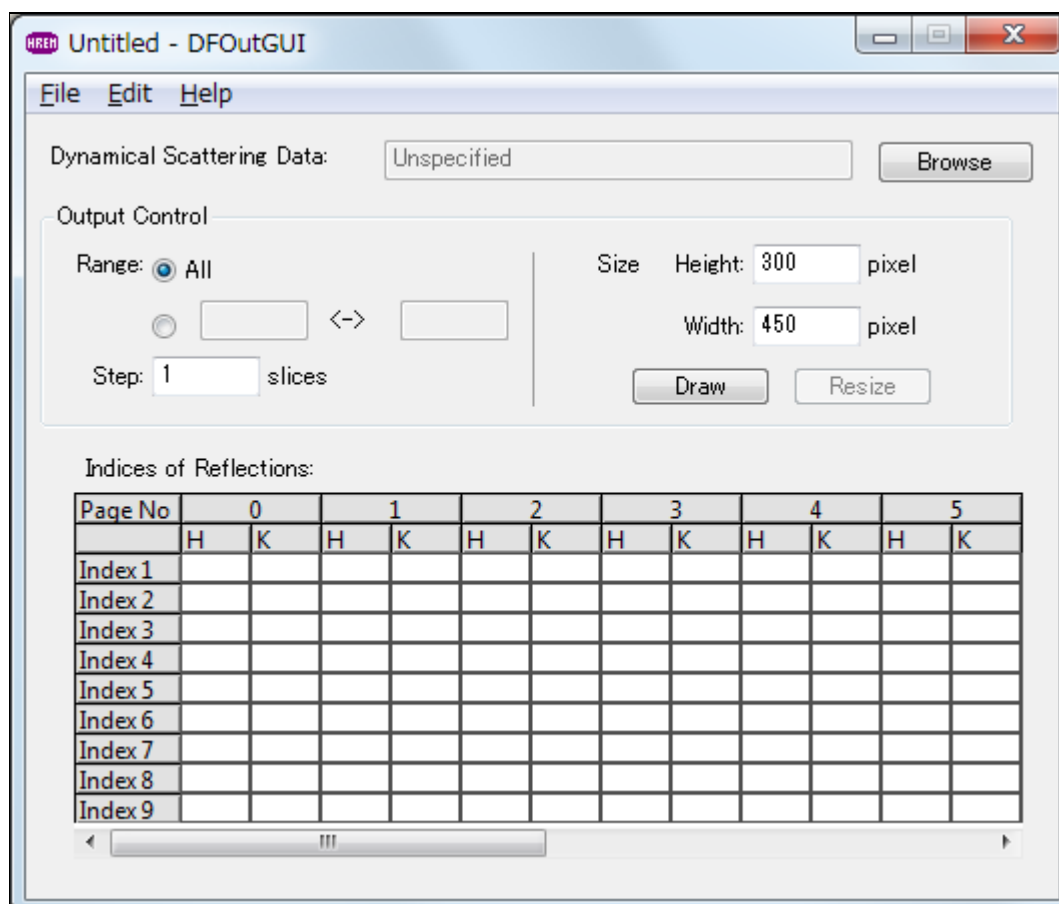
Microscope Images Step

Vertical 0.0 <-> 1.0 1

Horizontal 0.0 <-> 1.0 1

OK Cancel

DFOutGUI



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)

- 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

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のでしょうか

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

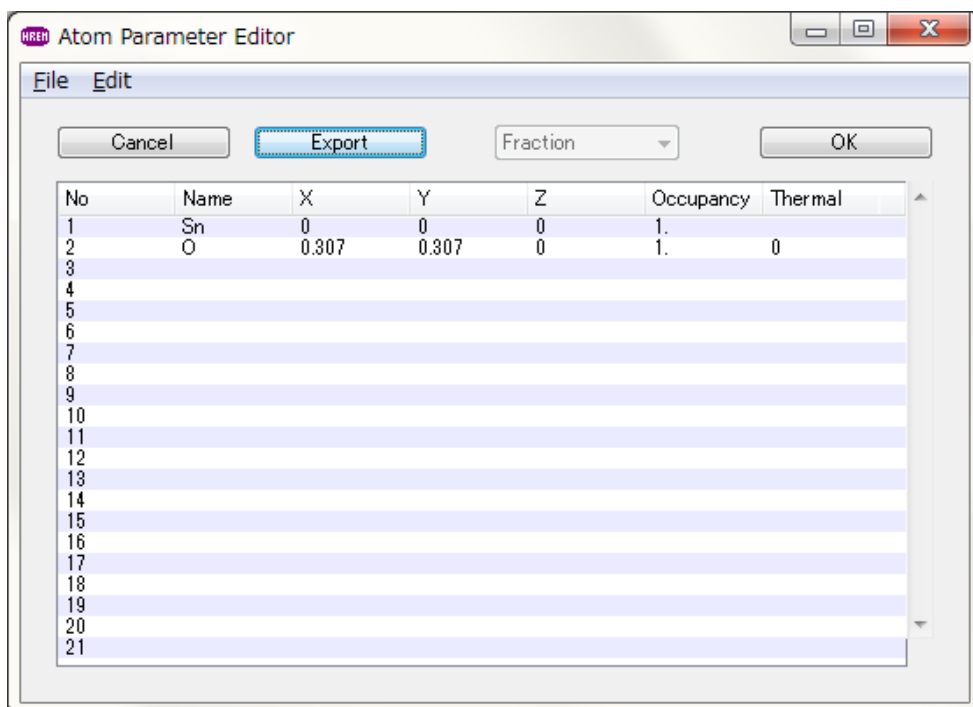
Q404: 散乱計算にはどこまで含めればいいですか。この範囲はモデルサイズに依存しますか

Q405: 計算の所要時間を短くするにはどうすればいいのでしょうか

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」の値が使用されません。

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、 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

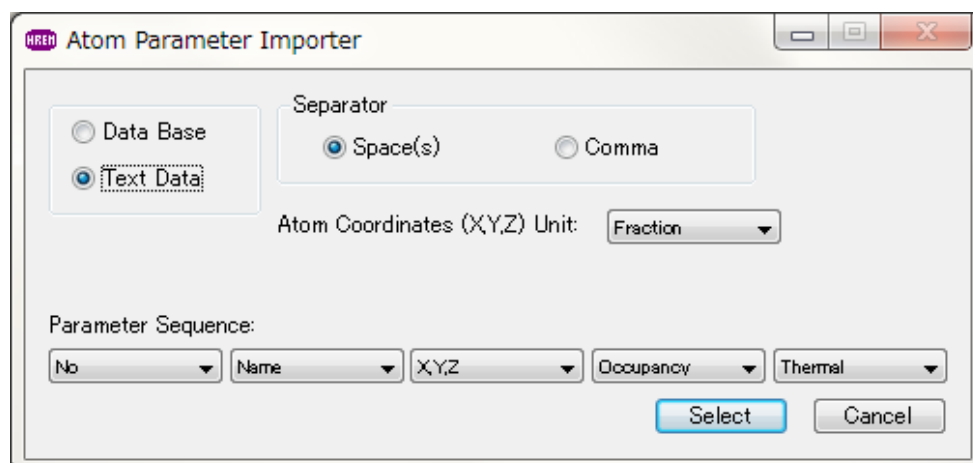
NOTE 原子名には必ず元素記号を含めて下さい。同種の元素原子を区別するために原子名に番号を付加することも出来ます。

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できます。



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 π 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 GPGPU (General-purpose computing on Graphic Processing Unit)が STEM 計算に使用可能になりました。

Windows では NVIDIA CUDA (Compute Unified Device Architecture)を用いて NVIDIA GPU を利用できます。最新の NVIDIA 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。また、v5.2 より OpenCL (Open Computing Language) 対応となり NVIDIA 以外の GPGPU が利用できるようになりました。

macOS では OpenCL を用いて Apple Silicon GPU および他社の GPGPU を利用できます (v5.3 より)。