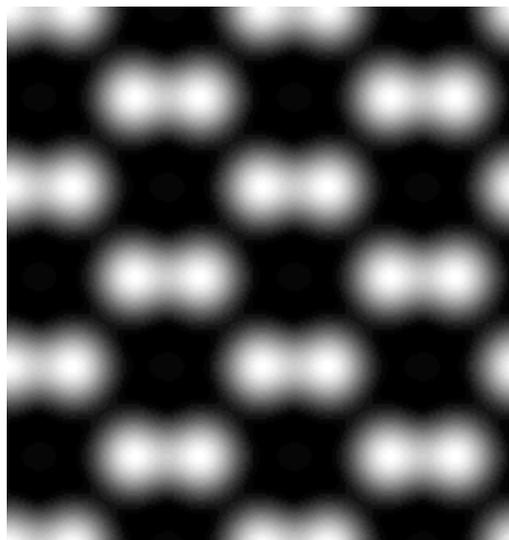


V5.0

*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
  - STEM-DPC (Differential Phase Contrast)
  - GPU による高速演算(Windows Only)

## 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。

### STEM 拡張機能の特徴

#### 1. 使いやすいユーザーインターフェイス

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ーインターフェイス（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:

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-core CPU に対応しています。

また、離散的な計算値の高精度補間により STEM 像を表示することにより以前のものに較べて計算時間を約 1/20 に短縮可能です。

## 4. GPGPU のサポート (Windows のみ)

STEM 計算をさらに高速化するために NVIDIA GPU の使用が可能です。これにより 1 台の GPU で multi-core CPU に比べ 10-20 倍早く計算が可能です。さらに、複数の GPU を同時に使用することが可能です。

## ■ インストール

---

STEM 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。

STEM 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 (STEMxx.exe はインストーラではありません)。

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。

### GPU 版の使用について (Windows のみ) (Ver. 5.0 より)

STEM の散乱計算には NVIDIA 製の GPU を使用することができます。この GPU 版の計算モジュールはすでにインストールされています。ご使用中の PC に NVIDIA GPU が検出された場合には STEM のダイアログの Option Tab で GPU を選択できるようになります。

### **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

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。

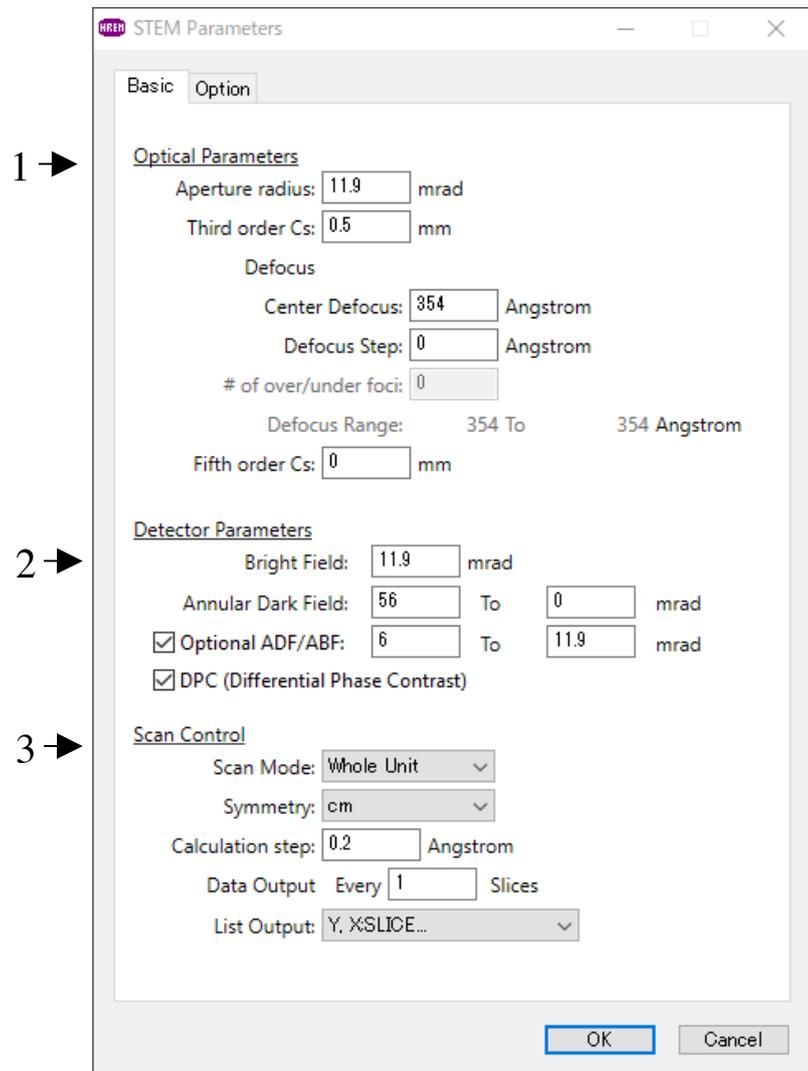
例題として GaAs のサンプルデータ(GaAs001s.WS1)がプログラムとともに供給されています。

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

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：

Basic Tab

## 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。その場合、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

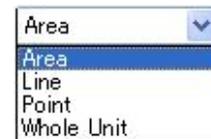
明視野、暗視野の検出器の大きさを指定します。mrad での入力も可能です (Preferences で mrad を前もって選択して下さい)。

(v4.4 以降) 2つめの環状検出器も指定可能です。これにより、HAADF と同時に ABF あるいは LA-ADF, MA-ADF などの計算を同時に行うことが可能です。

(v4.6 以降) DPC (Differential Phase Contrast)信号の計算の指定が可能です。DPC信号は散乱強度の重心 (Center of Mass: CoM) として計算されます。

### 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：



走査範囲：走査モードに応じて範囲の指定が変わります。

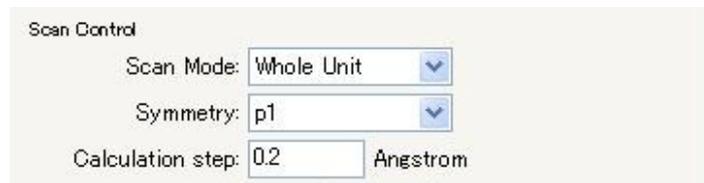
「Area」：走査する領域の top, left, bottom, right の座標、x, y 方向のサンプル点数を指定します。

「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。

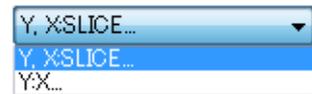
「Whole Unit」：全ユニットセルが対称操作を考慮して計算されます。このため、適用する対称操作（2次元）と近似的な走査間隔を指定します。実際の走査点数は指定された近似的な走査間隔をもとに内部で決定されます。

サポートされている対称性は以下の通りです：p1, p2, pm, pg, cm, pmm, pmg, pgg, cmm and p4.



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は生じる。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。



Option タブで GPU が選択された場合には、リスト出力は Y:X...に制限されません。

Option Tab

1 →

2 →

3 →

STEM Parameters

Basic Option

Optional Optical Parameters

(A1) C12: 0 nm 0 deg.

(Coma) C21: 0 nm 0 deg.

(A2) C23: 0 nm 0 deg.

C32: 0 μm 0 deg.

(A3) C34: 0 μm 0 deg.

C41: 0 mm 0 deg.

C43: 0 mm 0 deg.

(A4) C45: 0 mm 0 deg.

C52: 0 mm 0 deg.

C54: 0 mm 0 deg.

(A5) C56: 0 mm 0 deg.

Wave aberration :  $C_{nm}/(n+1)$

Super-cell Size: Standard

Use STEM Extension 64 bit

Use STEM Extension NVIDIA

Use STEM Cluster 64bit

All GPU's

Single GPU 0

Cluster Setup

OK Cancel

## 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. 計算モジュールの選択

NVIDIA GPU が見つからない場合、あるいはクラスターモジュールが Programs フォルダにないと対応する計算モジュールの選択はできません。

モデル（計算点数）とスーパーセルサイズ

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

\*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。この場合、実空間計算間隔=0.1 A (1/2d\*) になります。

FT 空間計算間隔 = 1 / スーパーセル; 実空間計算間隔 = 1 / 2d\*

計算点数(2 の冪乗) > (2d\* / FT 空間計算間隔)

**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 (実空間計算間隔=1/2d\*=0.1A) で十分です。

TDS 吸収ポテンシャルを用いないで、Frozen Phonon モデルで熱散漫散乱 (Thermal Diffuse Scattering) を計算する場合には、原子散乱能が十分に減衰するところまで計算に取り込む必要があります。このため、最大計算範囲 Range (d\*) は 30.0/A 程度となります。また、Frozen Phonon モデルで TDS を計算するためには多くの原子配置 (configuration) を計算して、強度の平均を取る必要があります。実用的な手法ではありません。

## ***STEM for xHREM***

**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** シミュレーションではスーパーセルを使用するので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

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。

**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)が必要であることに注意して下さい。

2. STEM 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 STEM を選択して STEM 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。

**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。

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。

## STEM 像の濃淡表示

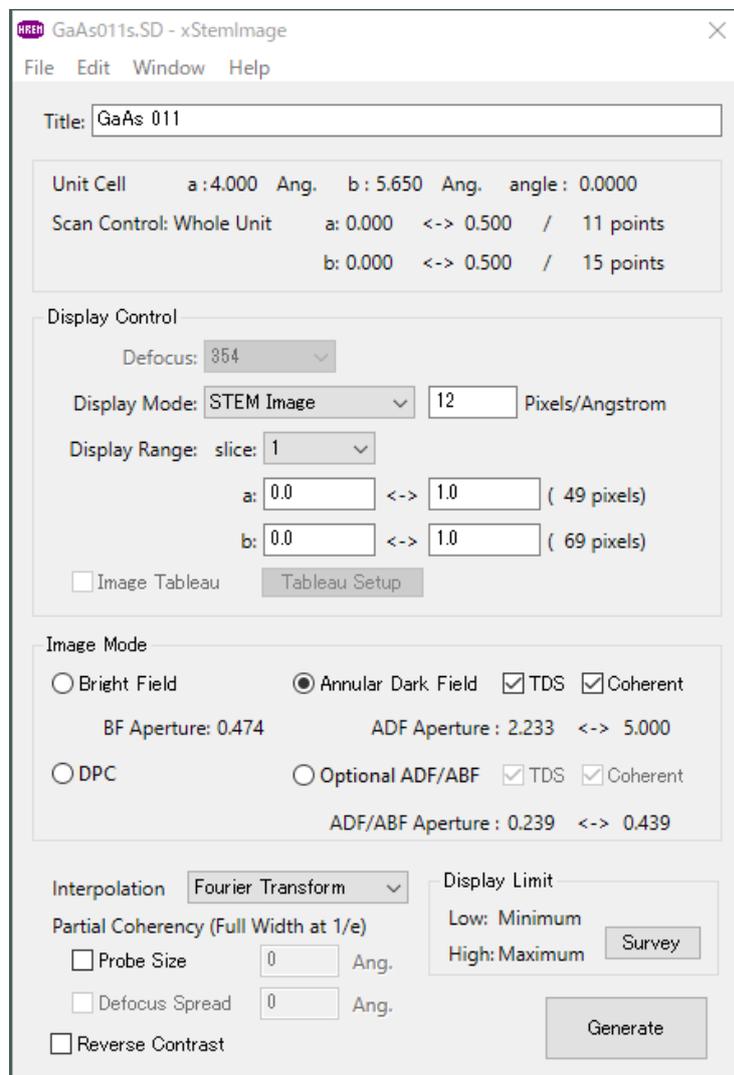
STEM 像の表示には STEMImage を用います。STEM データは出力信号の選択により複数のファイルに出力されています。しかし、これらの複数のファイルは .SD ファイルの選択によりアクセス可能になっています。

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：



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 (GaAs011s.SD) を利用します

### 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」を選択する。

Bright Field (BF)、Annular Dark Field (ADF)、Optional ADF/ABF (v4.4 より) または DPC (v4.6 より) を選択します。環状検出器 (ADF, ADF/ABF) 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。

Optional ADF/ABF は追加の STEM 信号が計算されている場合にのみ選択可能になります。また、DPC は STEM-DPC 信号が計算されている場合にのみ選択可能になります。

### 5. Generate をクリックすれば画像が計算されます。

計算像の信号源を明らかにするために、"BF", "ADF", "ADT" (Optional Annular Detector) あるいは "Dh", "Dv" (DPC signals) がデータ名に追加して表示されます。

**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 (Bilinear 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らなくなります。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になります。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) が必要になります。

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

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

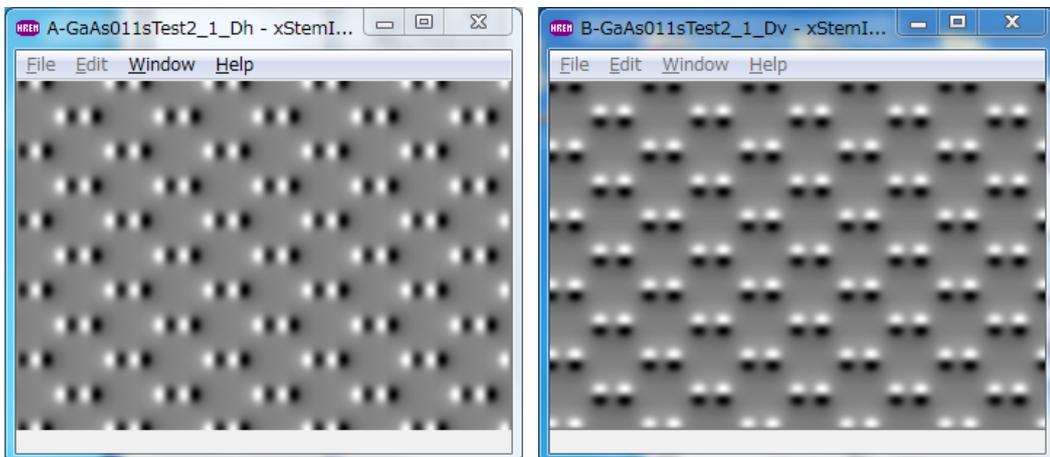
となります。大きなモデルでは位相格子数も大きくなりますので、2GB 以上になることもあり得ます。

## STEM-DPC (Differential Phase Contrast)

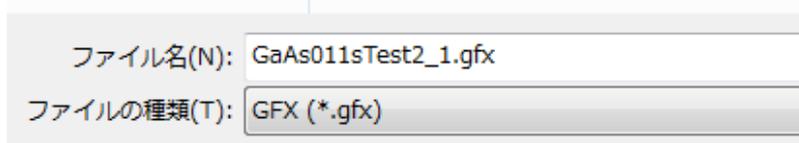
STEM-DPC は (厚い) 位相物体近似のもとで STEM を用いて位相物体の位相分布を得る方法です。ここで、DPC 信号は回折強度分布の重心を表すベクトルで、このベクトルは試料の投影ポテンシャルに比例する位相分布の勾配 (変化率) に対応します。

STEM 拡張機能で計算される DPC 像 ( $D_h$  と  $D_v$ ) は回折強度分布の重心 (Center of Mass: CoM) であり、それらは **ピクセル型検出器** を用いて得られる DPC 信号に対応します。しかし、実験データに対応する DPC 像を得るには他の STEM 像と同じように xSTEMimage の Display Control で出力解像度 (pixels/angstrom) や出力領域を指示する必要があります。

GaAs からの DPC 像を下に示します。これらは GaAs のポテンシャル分布の 011 投影の水平 ( $D_h$ ) および垂直 ( $D_v$ ) 微分に当たります。



DigitalMicrograph のプラグインである qDPC を使って DPC 信号を積分するには DPC 像を DigitalMicrograph に読み込む必要があります。DPC 像は xSTEMimage の「File → Export Data」コマンドを使って以下のように「gfx」フォーマットで保存すれば容易に DigitalMicrograph に取り込むことができます：



**NOTE:** xSTEMimage GUI の **Export** コマンドを使って DPC データを書き出す場合には、 $D_h$  と  $D_v$  像が生成され、同時に保存されますので、DPC 像を前もって作成する必要はありません。一方、DPC 像を image window から書き出す場合にはその画像 ( $D_h$  または  $D_v$ ) のみが保存されます。

書き出された gfx ファイルは DigitalMicrograph の File メニューの **Open** コマンドで容易に開くことができます。gfx ファイルを表示するにはファイルタイプで **"All file"** を選択する必要があるでしょう。あるいは、gfx ファイルを DigitalMicrograph にドラッグして開くこともできます。

次に示す位相像は上の DPC 像を qDPC の DCT...コマンドで積分することで得られたものです。



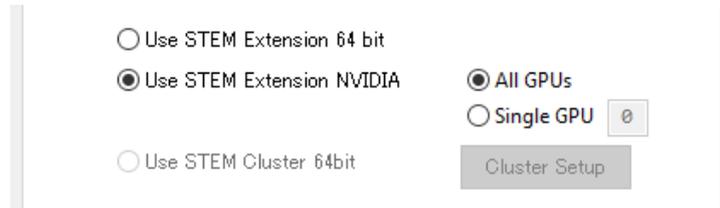
**Segmented Detector (分割型検出器)** : 実時間で DPC 像を表示する 4 分割または 2 重 4 分割の DPC 検出器が市販されています。この場合、DPC 信号はピクセル型検出器で得られる CoM そのものではありませんが、CoM を十分に近似しています。このため、STEM 拡張機能で得られる DPC 信号を用いて、分割型検出器で得られる位相像を推定することが可能です。

### **References**

- [1] qDPC, DigitalMicrograph plug-in: <https://www.hremresearch.com/Eng/plugin/qDPCEng.html> (Microscopy Today 2018 Innovation Award product)
- [2] Ishizuka A., Oka M., Seki T., Shibata N., and Ishizuka K. (2017) Boundary-artifact-free determination of potential distribution from differential phase contrast signals. *Microscopy* 66, 397-405 (The Japanese Society of Microscopy Award in 2019 paper)
- [3] Ishizuka A. and Ishizuka K. (2020) Observation of Phase Objects using STEM - Differential Phase Contrast (DPC) microscopy, *JEOL News* 55, 24-31.

## GPUによる高速演算(Windows Only)

NVIDIA GPU を使って STEM 信号の計算を加速したい場合には計算モジュールで “Use STEM Extension NVIDIA” と “All GPU” を選びます。もし、どれか特定の GPU を使用したいのであれば “Single GPU” を選んで GPU 番号を指定して下さい。



**NOTE:** 見つかった NVIDIA GPU の名前とそのメモリーは以下のように MultiGUI の出力リストに表示されます：

```
0 GPU INFORMATION
Number of NVIDIA GPU: 2
GPU 0: Quadro P620 / Memory 2048 MB
GPU 1: Quadro K2200 / Memory 4096 MB
GPU to be used: All
```

Program で使用される GPU の番号はここで確認できます。上の例はすべての GPU (ALL GPUs)を使用する場合です。

**NOTE:** 現在のところ、同じ（あるいは、計算能力の等しい）GPU が複数ある場合を想定して、全 GPU に同じ走査点数の計算を与えています。このため、計算能力の異なる GPU に対して “All GPU” を選択すると、計算能力の低い GPU が全体の計算時間を決定してしまいます。その場合は、高速の GPU のみを使用する方が効率的な場合があります。（この問題は将来のリリースで解決される予定です）

以下の出力例は全単位胞（ユニット）(x = 0.0 から 1.0; y = 0.0 から 1.0)を 100 x 100 点でスキャンした場合の計算点の進捗状況を示しています。計算を最適化するために 16 のスキャン点をそれぞれの GPU に与えています。この場合のように 2 つの GPU を使用する場合には、最初の 16 点 (1 から 16) は GPU 0 が計算し(1:0)、次の 16 点 (17 から 32) は GPU 1 が計算します(17:1)。その後、GPU 0 は 3 番目の 16 点 (33 から 48) (33:0)、そして GPU 1 は 4 番目の 16 点 (49 から 64) (49:1) と順次計算します。もし、走査線上に残る点が 16 点未満であれば、次の走査線上の走査点と合わせて 16 点として一つの GPU に計算させます：例えば、最初の走査線では 4 点 (97 から 100) が残りますので、次の走査線の 12 点とともに 16 点として GPU 0 で計算されます(97:0)。そして、2 番目の走査線の次の 16 点 (13 から 28) は GPU 1 により計算されます(13:1)。

**NOTE:** コロン(:)の前後の数値は各走査線上の開始点と使用される GPU の番号をそれぞれ表しています。

## *STEM for xHREM*

```
0 STEM PROBE LOOP FOR DEFOCUS: 50.000
  Y --> X
0.0000 --> 1:0 17:1 33:0 49:1 65:0 81:1 97:0
0.0101 --> 13:1 29:0 45:1 61:0 77:1 93:0
0.0202 --> 9:1 25:0 41:1 57:0 73:1 89:0
0.0303 --> 5:1 21:0 37:1 53:0 69:1 85:0
0.0404 --> 1:1 17:0 33:1 49:0 65:1 81:0 97:1
0.0505 --> 13:0 29:1 45:0 61:1 77:0 93:1
0.0606 --> 9:0 25:1 41:0 57:1 73:0 89:1
0.0707 --> 5:0 21:1 37:0 53:1 69:0 85:1
0.0808 --> 1:0 17:1 33:0 49:1 65:0 81:1 97:0
0.0909 --> 13:1 29:0 45:1 61:0 77:1 93:0
0.1010 --> 9:1 25:0 41:1 57:0 73:1 89:0
0.1111 --> 5:1 21:0 37:1 53:0 69:1 85:0
0.1212 --> 1:1 17:0 33:1 49:0 65:1 81:0 97:1
0.1313 --> 13:0 29:1 45:0 61:1 77:0 93:1
0.1414 --> 9:0 25:1 41:0 57:1 73:0 89:1
```

**NOTE:** 上に示した例では走査線の全域 (0.0 から 1.0) を 100 点で計算しますので、走査の間隔は  $1.0/99 = 0.01010\dots$  となります。このため、Y の値は 0.01010 の倍数になっています。もし、全域 (0.0 から 1.0) を 101 点で走査すれば走査の間隔は  $1.0/100 = 0.01$  となり、Y の値は単純な数値 0.01 の倍数となります。

# 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。

### 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

### 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。