

TEM/STEM 像シミュレーションソフトウェア

BesTEM 取り扱い説明書

1. 起動画面.....	1
2. 起動時の各種計算条件のデフォルト設定.....	2
3. データ読み込み	6
4. CRYSTAL/CLUSTER/SUPER CELL データ 3D 表示.....	9
5. TEM 像計算	12
6. 電子ビーム強度、RONCHIGRAM、STEM 像、CBD の計算.....	17
7. 結晶データ作成方法	23
8. SUPER CELL 作成方法	39
9. CLUSTER の TEM 像計算 / STEM 像計算.....	44

作成日 2021 年 10 月 29 日

* 改良等のため、予告なく変更されることがあります。

制作/販売

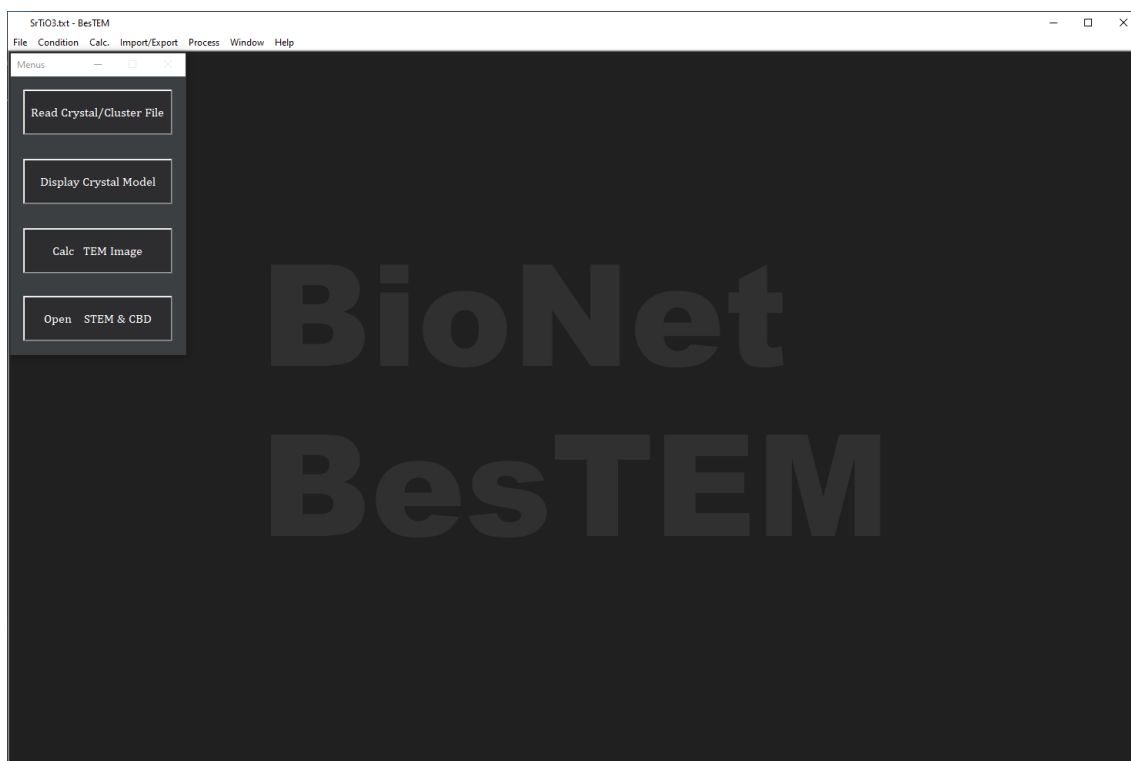
株式会社バイオネット研究所

〒190-0011 東京都立川市高松町 3-19-1 森田堂ビル 2F

TEL : 042-512-9021 FAX : 042-512-9022

<http://bio-net.co.jp>

1. 起動画面



ソフト起動時に、メニューダイアログボックスが表示されます。

起動時に、前回のソフト終了時に使用していた結晶データまたは、クラスター・スーパーセルデータが読み込まれます。また、光学系の計算条件も前回から継承されます。

メニューダイアログボックスの **Calc TEM Image** ボタンで、TEM 像が計算されます。

メニューダイアログボックスの **Open STEM CBD** ボタンで電子ビーム強度、Ronchigram、STEM 像、CBD 等を計算するダイアログボックス類が開きます。

メニューダイアログボックスの **Read Crystal/Cluster File** で、結晶データ、またはクラスター・スーパーセルデータを新たに読み込みます。

メニューダイアログボックスの **Display Crystal Model** で現在読み込まれている結晶データ、またはクラスター・スーパーセルデータが 3D 表示されます。

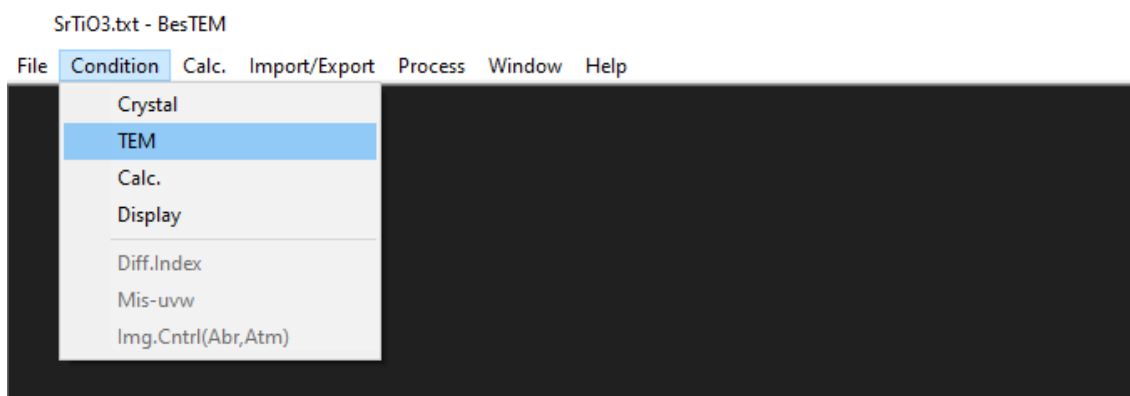
2. 起動時の各種計算条件のデフォルト設定

本ソフトは起動時に、前回に用いられていた幾つかの条件を引き継いで起動します。
試料データは、初回起動時または前回用いられていたデータファイルが存在しない場合は、
Si の結晶データが自動作成され読み込まれます。

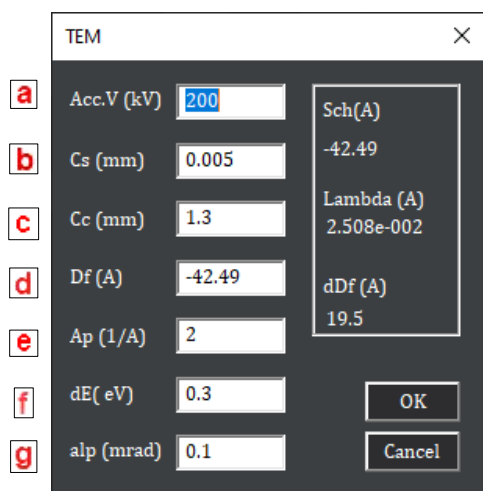
初回起動時において、または次回起動時のデフォルト（光学条件、計算条件、表示条件）
を設定する場合においては、以下の操作を行ってください。

2.1. 光学条件設定（デフォルト値として設定する。加速電圧以外は像計算後においても 変更可能です。）

メニューから Condition / TEM を選択します。



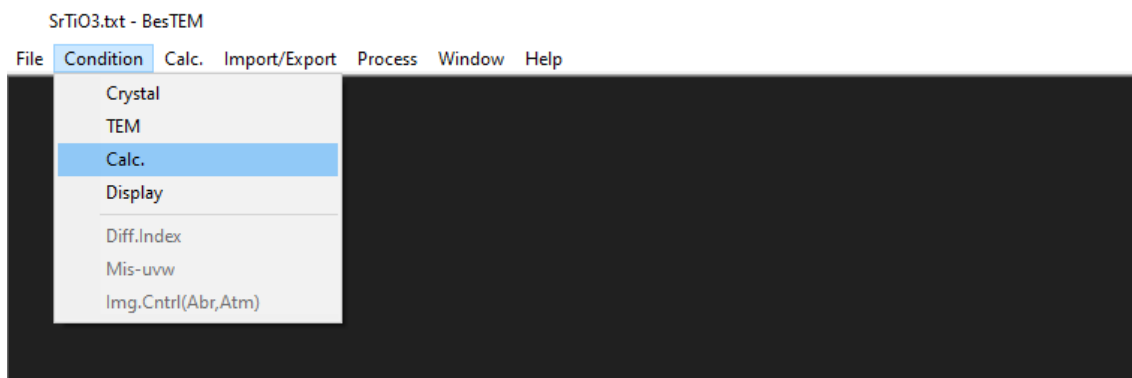
デフォルトの TEM 光学条件を設定するダイアログボックスが開くので、各値を入力し
OK ボタンで保存します。



- (a) 加速電圧
- (b) 球面収差係数
- (c) 色収差係数
- (d) デフォーカス量
- (e) 対物絞り半径
- (f) エネルギースプレッド
- (g) 逆空間光源サイズ

2.2. 計算条件設定

メニューから Condition/calc. を選択します。



各種計算条件を設定するダイアログボックスが開くので、値を入力して OK ボタンで設定を保存します。

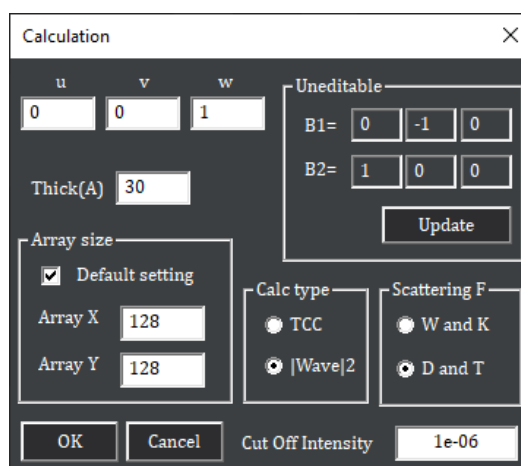
(*1) 計算入射方位

(*2) 試料の厚さ

(*3) 計算配列のサイズ

(*4) 結像計算の手法

(*5) 原子散乱因子の計算方法



*1,*2: これらの設定は、計算にユニットセルデータが用いられるときのみ参照されます。ユニットセルデータからは厚さや方位を変更して TEM 像を計算できますが、STEM 像や CBD の計算はできません。STEM/CBD の計算をするときはクラスター・スーパーセルデータを Display Crystal model でデータを作成・保存し、データを読み直してから計算を行ってください。クラスター・スーパーセルデータからは TEM 像も計算できます。

計算にクラスター・スーパーセルが用いられるときは、計算は常に C 軸にそっておこなわれ、厚みはクラスター・スーパーセルの厚みとなります。

*3: 計算配列サイズは、Default setting がチェックされていると、結晶サイズに合わせて自動で設定されます。チェックされていない場合は、結晶サイズに合わせて、毎度入力する必要があります。

*4: TCC の参考文献 :

K.Ishizuka, Ultramicroscopy 5 (1980) 55-65

F.Hosokawa et.al, Ultramicroscopy 167 (2016) 11-20

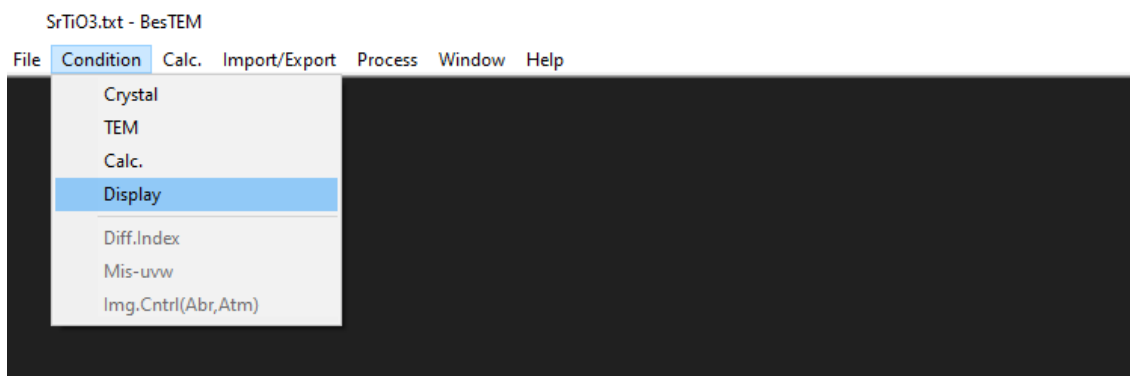
*5: 原子散乱因子についての参考文献 :

A.Weickenmeier and H. Kohl, Acta Cryst. A 47 (1991) 590

P.A.Doyle and P.S.Turner, Acta Cryst. A24 (1968) 390

2.3 像、回折の表示に関する設定

メニューから Condition/Display を選択します。



条件設定のダイアログボックスが開きます。各値を設定し、OK ボタンで保存します。

回折の表示倍率

回折の表示 window のサイズ

表示強度の下限值

像の表示倍率（1Å に対応するピクセル数）

像の表示 window サイズ

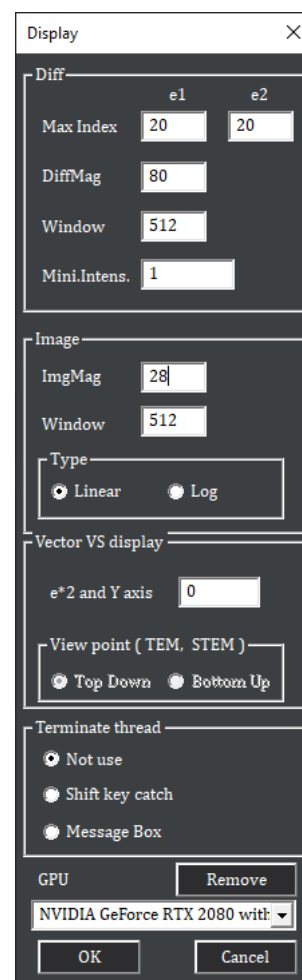
表示方式

表示回転角度（逆空間ベクトル e_2 と表示 Y 軸のなす角度）

これ等の値は、表示 window サイズ以外、像、回折の計算後にリアルタイムで変更できます。

ここで設定される値がデフォルトの設定となります。

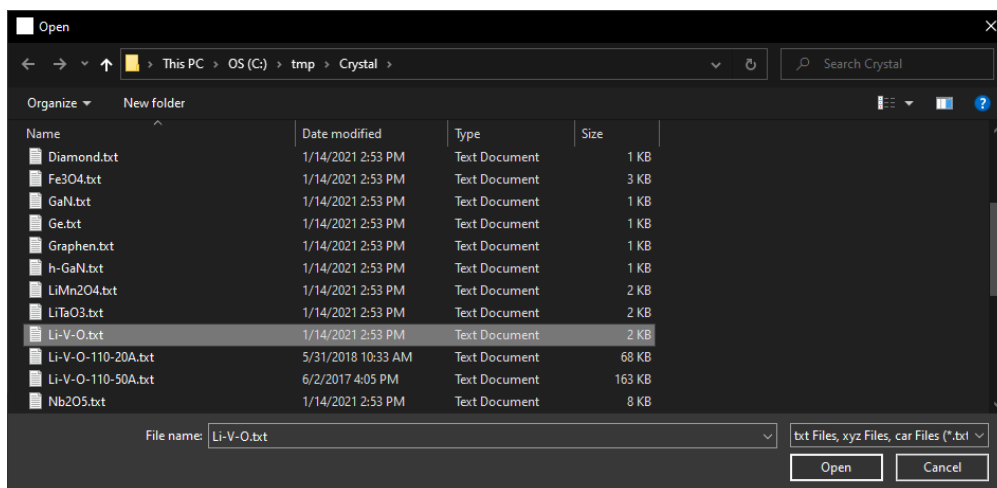
GPU コンボボックスより、使用する GPU の選択ができます。



3. データ読み込み

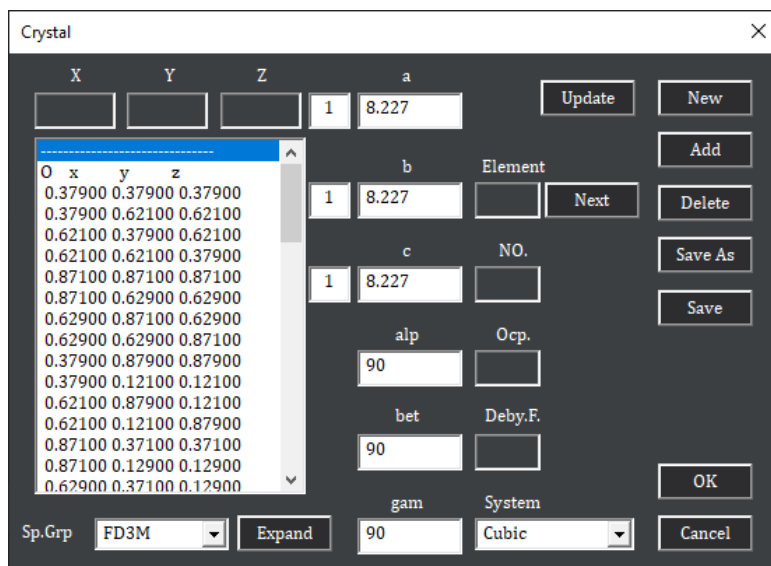
メニューダイアログの Read Crystal/Cluster File

または、メニューから File/Open crystal file を選択すると、データ読み込みのダイアログボックスが開きます。データを選択してファイルを読み込みます。



3.1. 読み込まれているデータの表示

メニューから Condition/Crystal を選択すると、読み込まれているデータファイルの表示・編集ダイアログボックスが開きます。



計算に使用するセルの情報（a, b, c, α, β, γ 空間群、結晶系）がここで編集できます。

マウスでリストボックスの元素記号をクリックすると、その原子の計算セルに含まれる数、サイト占有率、デバイ因子（B-factor）が表示されます。サイト占有率、デバイ因子はここで各元素に対して編集することができます。

Crystal

X: Y: Z: 1 8.227

O	x	y	z
0.37900	0.37900	0.37900	
0.37900	0.62100	0.62100	
0.62100	0.37900	0.62100	
0.62100	0.62100	0.37900	
0.87100	0.87100	0.87100	
0.87100	0.62900	0.62900	
0.62900	0.87100	0.62900	
0.62900	0.62900	0.87100	
0.37900	0.87900	0.87900	
0.37900	0.12100	0.12100	
0.62100	0.87900	0.12100	
0.62100	0.12100	0.87900	
0.87100	0.37100	0.37100	
0.87100	0.12900	0.12900	
0.62900	0.37100	0.12900	

1 8.227 Element O

1 8.227 NO. 32

alp Ocp. 90 1

bet Deby.F. 90 0.5

gam System 90 Cubic

Sp.Grp FD3M

Crystal

X: Y: Z: 1 8.227

O	x	y	z
0.37900	0.37900	0.37900	
0.37900	0.62100	0.62100	
0.62100	0.37900	0.62100	
0.62100	0.62100	0.37900	
0.87100	0.87100	0.87100	
0.87100	0.62900	0.62900	
0.62900	0.87100	0.62900	
0.62900	0.62900	0.87100	
0.37900	0.87900	0.87900	
0.37900	0.12100	0.12100	
0.62100	0.87900	0.12100	
0.62100	0.12100	0.87900	
0.87100	0.37100	0.37100	
0.87100	0.12900	0.12900	
0.62900	0.37100	0.12900	

1 8.227 Element

1 8.227 NO.

alp Ocp. 90

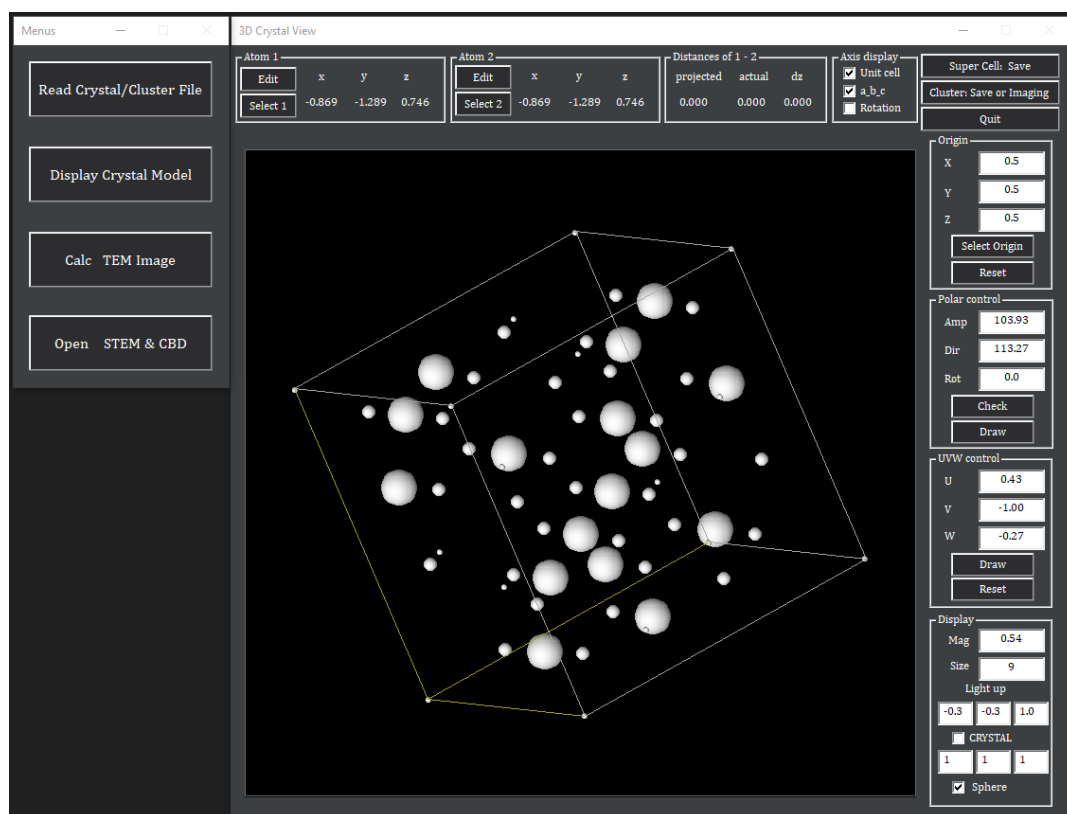
bet Deby.F. 90

gam System 90 Cubic

Sp.Grp FD3M

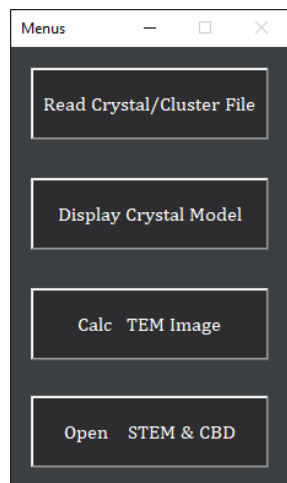
リストボックス内には、元素ごとにセル内での相対座標が記述されています。各座標をマウスでハイライトさせると、座標が編集用のエディットボックスにも表示されます。編集用のエディットボックスで座標の編集ができます。リストボックスはスクロールボタンが有効となっています。Next ボタンで、次の元素の先頭まで自動でスクロールされます。

読み込まれているデータは、3D 表示で視覚的にも確認できます。メニューダイアログボックスの Display Crystal Model またはメニューの Calc/Crystal 3D Viewing で 3D 表示ダイアログボックスが開きます。



4. Crystal/Cluster/Super cell データ 3D 表示

メニューダイアログの Display Crystal Model ボタンを押します。

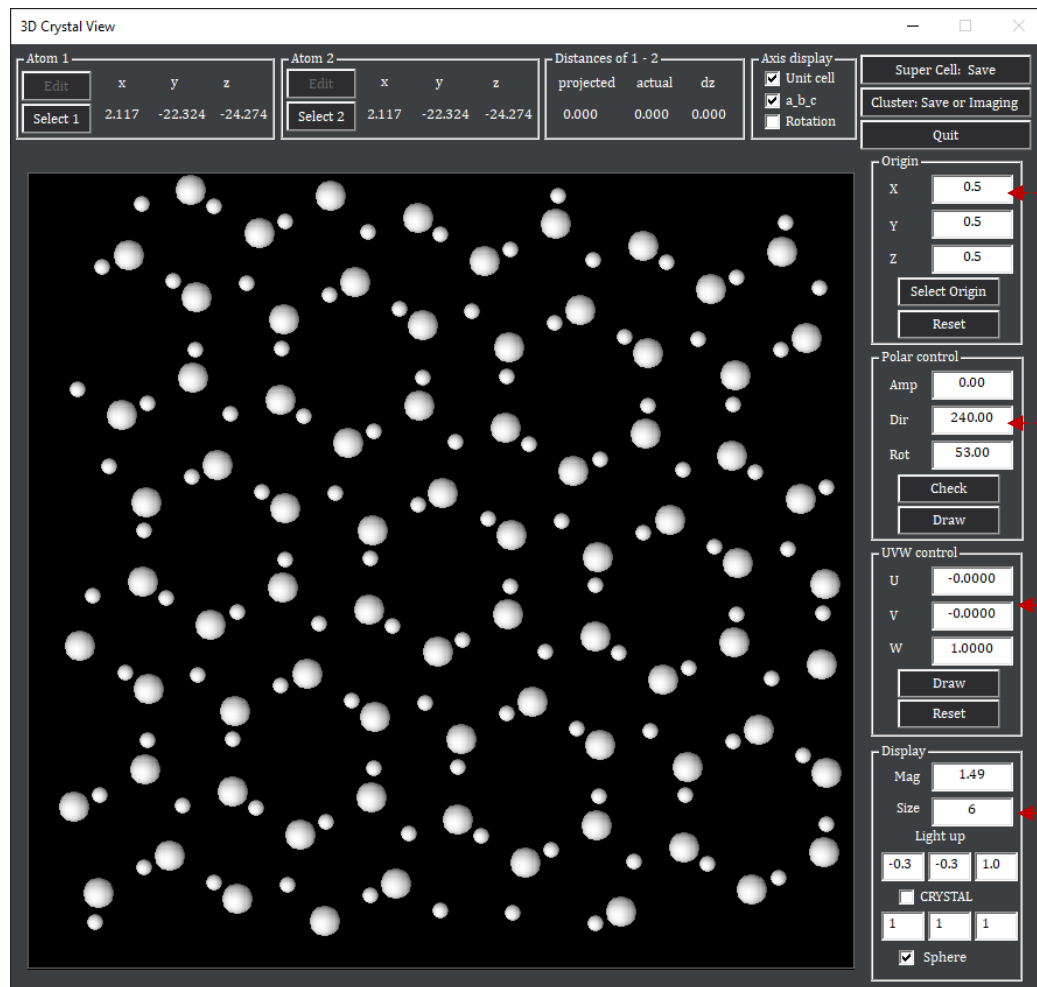


試料構造の 3D 表示画面をもった、ダイアログボックスが開きます（次項）。

現在読み込まれているデータ（Crystal データ、または、Cluster/Super cell データ）の 3D モデルが表示されます。3D 表示ダイアログボックスにより以下の操作が行えます。

- ・マウス左ドラッグ（任意方向）、マウス右ドラッグ(上下方向)による、モデルの回転操作。
- ・回転角（極座標）または方位ベクトル（視線と逆＝画面から垂直方向に向く）入力による回転操作
- ・現在の視線方向から電子入射した TEM 像計算。
- ・現在の方位ベクトルを[001]方位とした、新たな Cluster データの作成
- ・任意の 2 原子間の投影距離、および、実空間での距離の表示
- ・Crystal データから Super cell データの作成

3D モデル表示上でのマウスの左ドラッグ（任意方向）で、3D 回転操作が、右ドラッグ（上下方向）で **xy** 平面の回転がそれぞれ行えます
 ダイアログボックスの、各エディットボックスのパラメータは、マウスホイール操作で値の変更ができます。



3D 回転操作の不動点

デフォルト (0.5、0.5、0.5) は cell の中心に対応しています。

Select origin ボタンを押して次いで任意の原子でマウス左ボタンを押すと、その原子が、回転中心になります。

3D 表示を回転角(極座標)で入力

3D 表示を方位ベクトル (逆視線) で入力
 逆視線は紙面に垂直に向かってくる方向

表示倍率 (単位なし)

原子表示サイズ (単位なし)

原子表示陰影

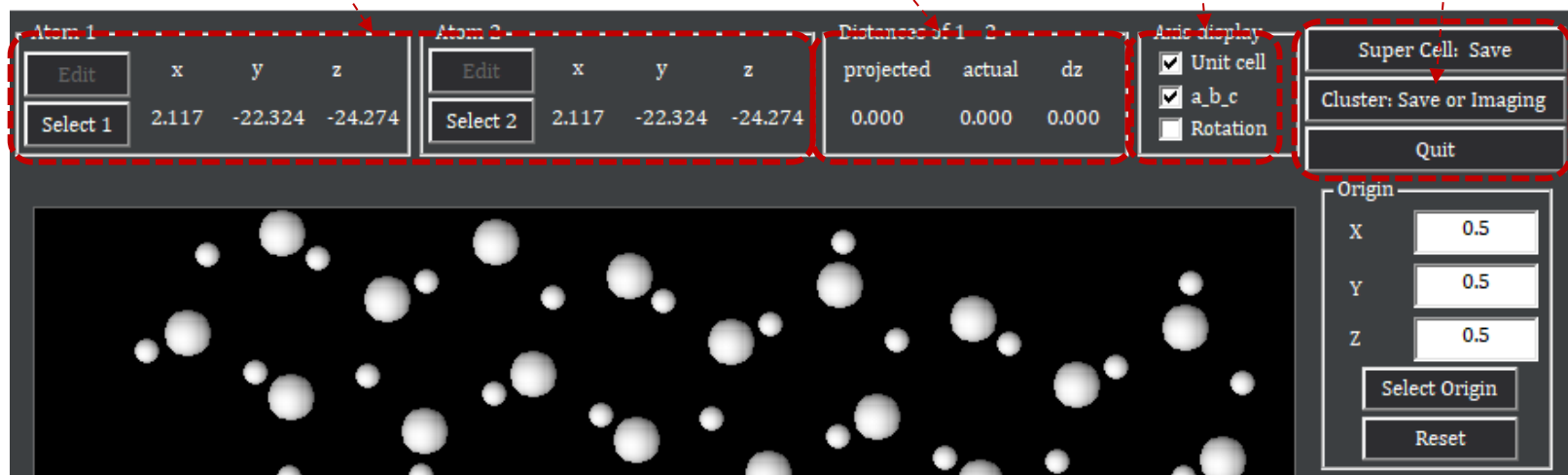
繰り返し表示 on/off, 繰り返し回数

Select 1 ボタンを押して、そのあと 3D 表示上で
任意の原子をクリックすると、Atom にその原子
が指定され、Atom の x,y,z 座標が表示される。
Edit ボタンで、Crystal ファイル編集ダイアログ
ボックスが開き、Atom の原子座標等を編集できる。

Super Cell : Save ボタンで、Super Cell 作成ダイアログが開く
Cluster: Save or Imaging ボタンで、Cluster 作成および、
Cluster TEM 像計算のダイアログボックスが開く
Quit ボタンで、3D 表示ダイアログボックス終了

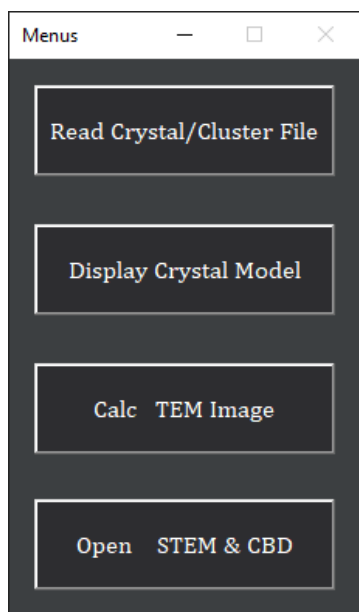
Atom1 と Atom2 の
3D 表示上の投影距離
実空間での距離
3D 表示上の、Z 軸での距離

3D 表示上での unit cell 表示
a,b,c 軸表示
3D 回転座標表示



5. TEM 像計算

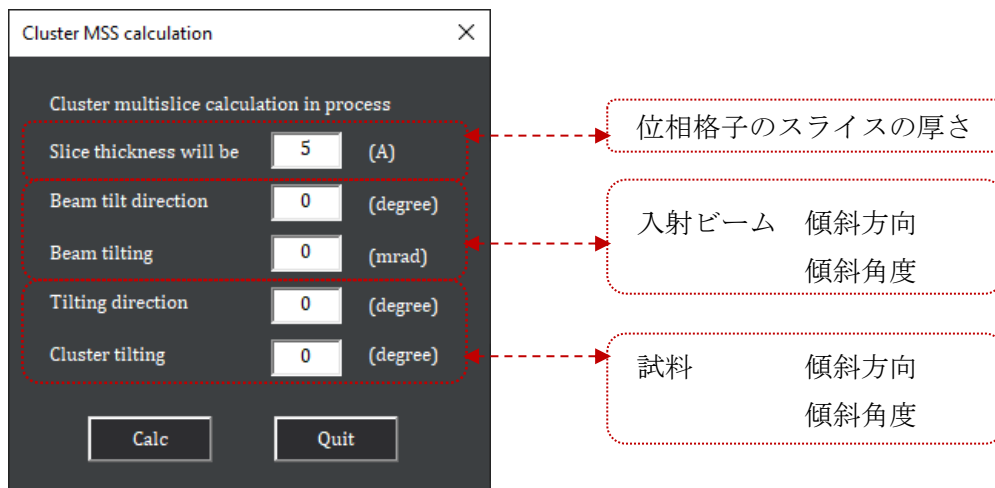
メニューダイアログの Calc TEM Image ボタンを押します。

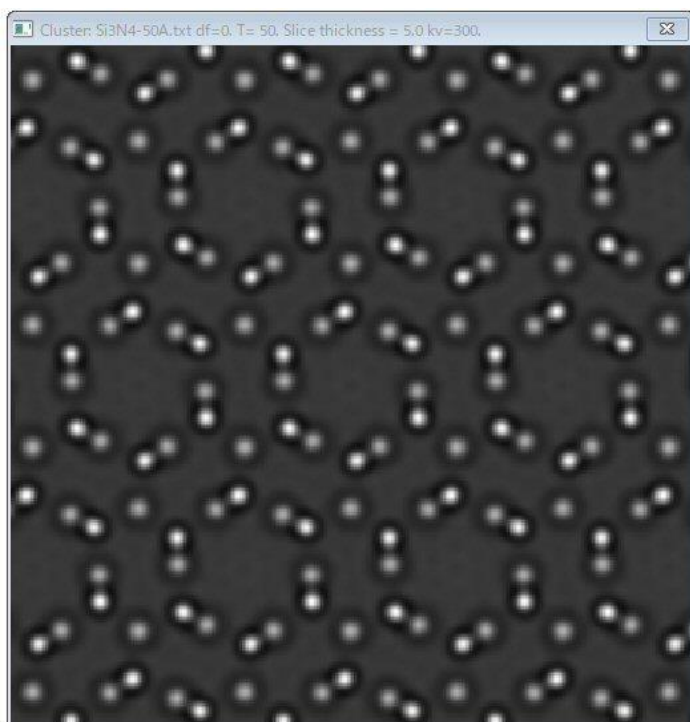


Crystal データが読み込まれている場合は、デフォルト条件に入力されている、結晶方位、結晶厚さによって、TEM 像が計算されます。位相格子のスライスの厚みは投影方向の結晶の等価点間の距離となります。

Cluster/Super cell データが読み込まれている場合は、位相格子のスライスの厚みを入力するダイアログボックスが開くので、スライス厚みを入力し OK ボタンを押すと TEM 像が計算されます。(入射ビームの傾斜角度/傾斜方向、試料の傾斜角度/傾斜方向を入力することができます)。

(Cluster/Super cell データが読み込まれている場合、ダイアログボックスが表示される)





上図は、 β -Si₃N₄ の[001]方位から作成した super cell データ ($x \times y \times z = 37.98(\text{\AA}) \times 39.465(\text{\AA}) \times 50.0(\text{\AA})$)から計算した TEM 像です。

super cell データは通常、CBD や STEM 像を計算する場合に、Crystal データから作成しますが、スライス厚みを任意にとって TEM 像を計算したい場合にも利用できます。また、super cell 内の任意の座標への原子の挿入や削除や、任意の原子を他の原子と置換して TEM 像計算を行うことができます。

TEM 像が計算されると、光学系パラメータの制御ダイアログが自動で開きます。

これらのパラメータは、直接入力、マウスホイール操作等で変更できます。パラメータが変更されると、その結果は計算された TEM 像にただちに反映されます。

Coarse チェックボタン：ホイール操作の、感度切り替え設定ボタン

デフォーカス	逆空間での光源サイズ(半角)
エネルギースプレッド(半値全幅)、	表示倍率(pixels/Å)
球面収差係数	色収差係数
5 次球面収差係数	対物絞り半径(1/Å)

試料厚さ (試料厚さ変更ボタン)

Superimpose の条件設定ボタン

原子位置 Superimpose の on/off

表示強度の linear / log 切り替え

位相版効果の on/off

位相版の位相シフト量 ϕ

位相版の形状効果 (Radius 以内：位相変化なし、Radius 以上： ϕ の位相変化)

The screenshot shows the 'Image Control' dialog box. A red dashed box at the top highlights the 'COARSE CONTROL for Button and Mouse Wheel' checkbox. Another red dashed box on the left side of the dialog highlights the 'Basic parameters' section, which includes controls for df (A), alp (mrad), de (eV), Mag, Cs (mm), Cc (mm), C5 (mm), OL Ap (1/Å), and Sample thickness (Å). A third red dashed box at the bottom highlights the 'Center Phase Shift (at g = 0) by phase plate' section, which includes a 'Utilise' checkbox, a phase shift value (0.5), and a table for Radius, Fringe, and Fringe factor. Red dashed arrows point from the text on the left to these specific areas in the dialog box.

Image Control

☐ COARSE CONTROL for Button and Mouse Wheel

Basic parameters

df (Å) 0

alp (mrad) 0.1

de (eV) 0.4

Mag 21

Cs (mm) 0

Cc (mm) 1.33

C5 (mm) 0

OL Ap (1/Å) 1.33
0.7519 [Å]

Sample thickness (Å)
50.00 < >

Edit Atoms

☐ Superimpose Atoms

Display
☒ linear ☐ log

Center Phase Shift (at $g = 0$) by phase plate

☐ Utilise

0.5 pai

p/p R, F(mrad)

Radius	Fringe	Fringe factor
0.1	0	1

+ for carbon hole

2 fold Astigmatism

dir (deg) 0

amp (Å) 0

Optical mis-alignment

dir (deg) 0

amp (mrad) 0

OL Ap mis-alignment

dir (deg) 0

amp (mrad) 0

Image rot / shift

Rotation 0

Shift x y

0 0

Show other aberrations

Close

2 回非点

2 回非点方向

2 回非点量

ビームの光軸からのズレ

ずれの方向

ずれの量

対物絞りの光軸からのズレ

ずれの方向

ずれの量

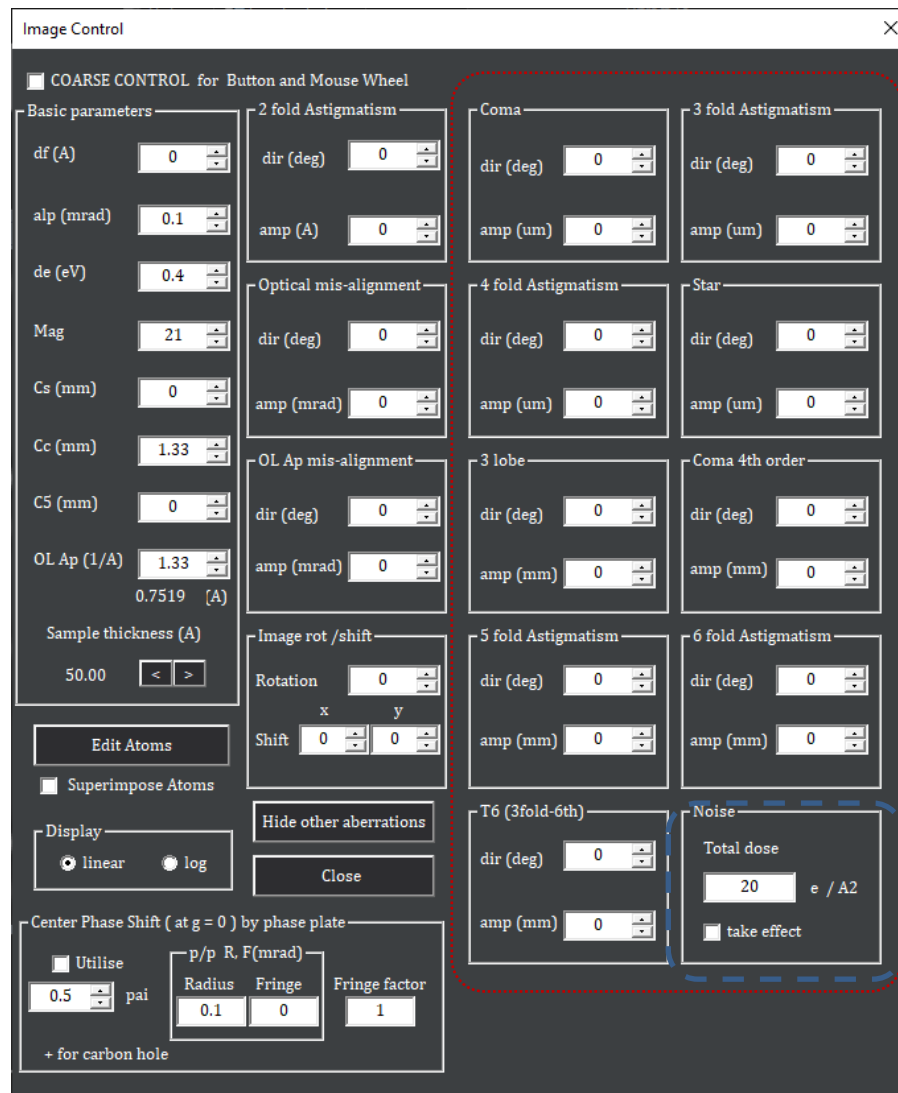
像の回転

像のシフト

→ (高次収差を計算に取り入れるダため、ダイアログボックスを拡張します)

(次項)

Close (ダイアログを Close します。)



Other aberrations ボタンでダイアログボックスが拡張し、高次収差のシミュレーションが可能になります。

コマ収差 3 回非点

4 回非点 スター

(dir: 収差の向き)
(amp: 収差量)

3 lobe 4 次コマ

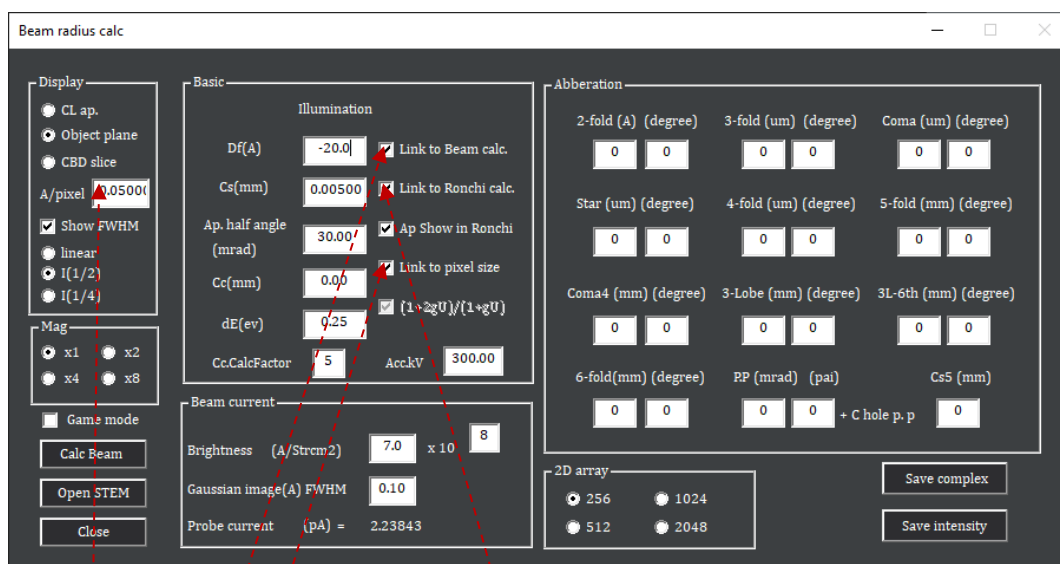
5 回非点 6 回非点

6 次 3 回対称収差

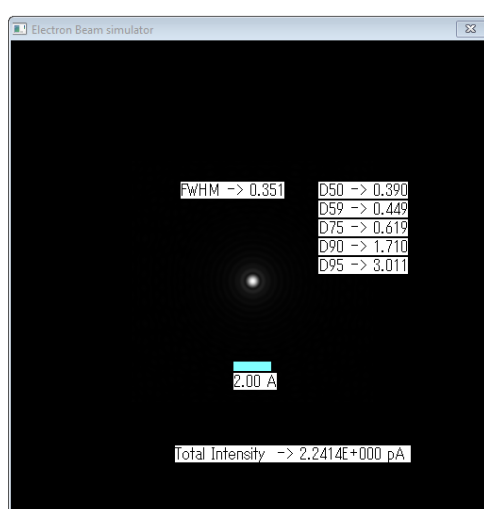
電子ビームのドーズ量を入力し、チェックを On にするとショットノイズ (ポアソンノイズ) が像に与えられます。

6. 電子ビーム強度、Ronchigram、STEM 像、CBD の計算

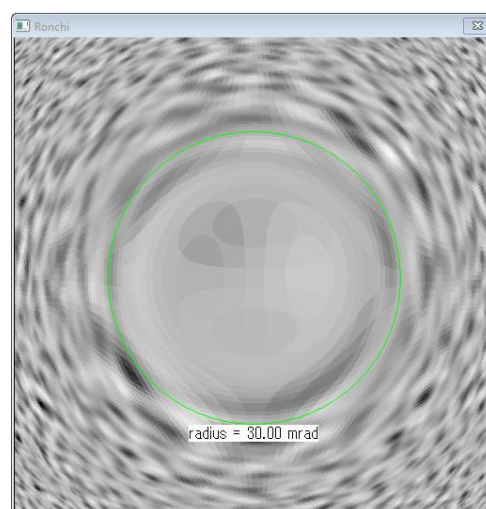
Process / Probe Forming and STEM にて、ビーム形状計算ダイアログボックスが開きます(ビーム形状、Ronchigram も同時に開く)。



各値の表示 window にマウスカーソルをいれて、ホイール操作により値が変更可能。このとき、Link to Beam calc.、Link to Ronchi calc. がチェックオンになっていると、値変化に連動して、Beam 形状、Ronchigram が計算更新されます。また、Link to pixel size がチェックオンになっていると、Cs と加速電圧に対して、pixel size (A/pixel) が自動で選択されます。



ビーム形状

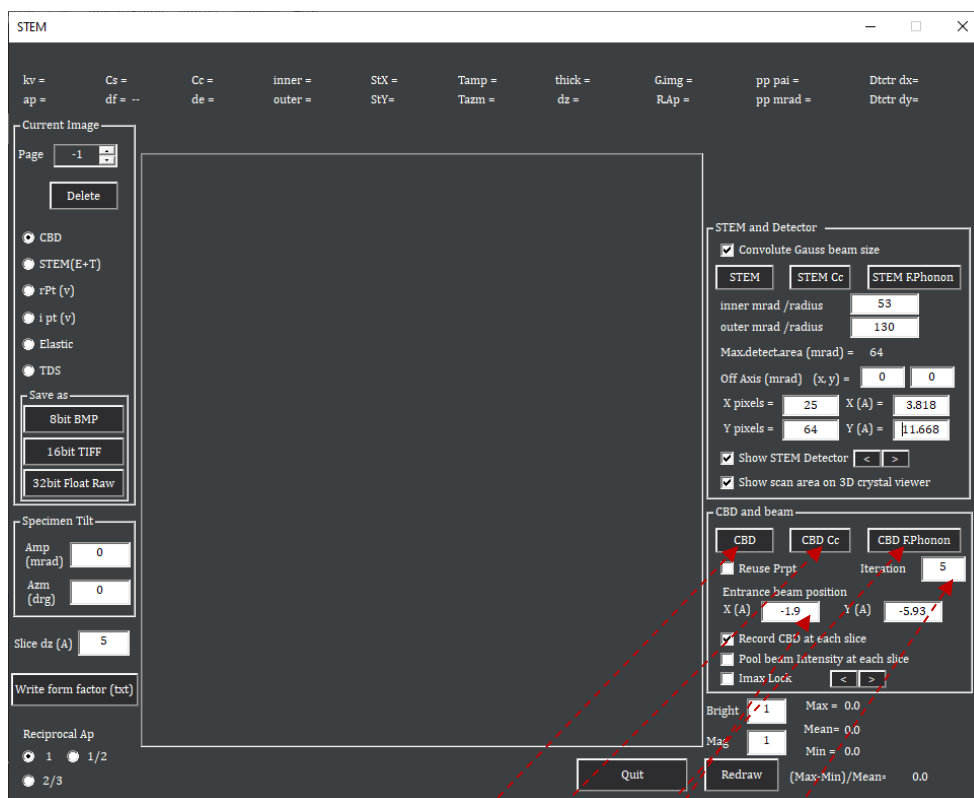


Ronchigram

6.1. STEM, CBD 計算

ビーム形状計算ダイアログボックスの **Open STEM** ボタンで STEM/CBD 計算のダイアログボックスが開きます。STEM/CBD の計算を進めるには Cluster/Super cell データが読み込まれている必要があります。

STEM/CBD 計算 ダイアログボックス



6.1.1. CBD 計算

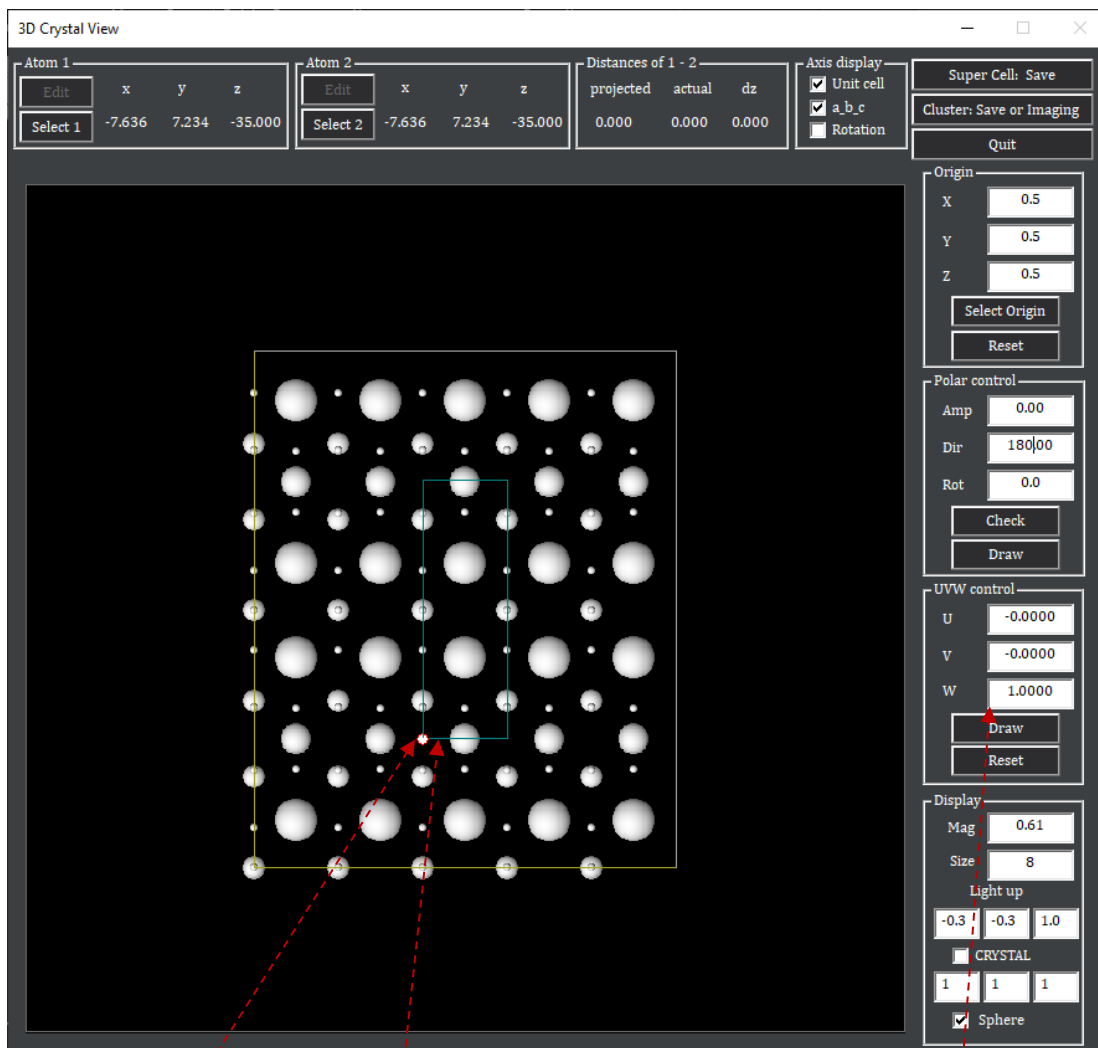
ビーム形状計算ダイアログボックスのパラメータ(kv,Cs,df,CL 絞り、その他収差等)を確認します。ビーム形状 **window** でビーム形状を確認します。

3D 表示ダイアログボックスが開かれている場合は、ビームの入射位置が確認できます(次ページ参照)。ビーム入射位置(x,y)は、入力枠から設定できます。

CBD ボタンで、**CBD** が計算されます。1 回目の計算は位相格子の計算を行うため数十秒の時間を要しますが、同じ位相格子が使用できる 2 回目以降は数秒で計算できます。

CBD Cc ボタンで、色収差の影響を考慮した **CBD** が計算されます。

CBD F.Phonon ボタンで、**frozen phonon** による CBD 計算（原子位置をずらしながら繰り返し計算）を行います。繰り返し回数を入力します。



3D 表示ダイアログボックスが開かれていると、STEM/CBD ダイアログが開くときに、CBD のビーム入射点、STEM 計算のスキャン領域が表示されます。STEM/CBD 計算を進めるには、Cluste/Super Cell データが読み込まれていることが必要です。計算方位は [001]に限定されています。

6.1.2. STEM 計算

ビーム形状計算ダイアログボックスのパラメータ(kv,Cs,df,CL 絞り、その他収差等)を確認します。ビーム形状 window でビーム形状を確認します。

3D 表示ダイアログボックスが開かれている場合は、ビームのスキャン領域が確認できます(結晶の場合はユニットセルとなるようにする)。ビームスキャン領域(x,y)は、入力枠から設定できます(Å単位)。

ビームスキャン領域(x,y)を何分割するかを設定します。これにより STEM 像のピクセル解像度が決まります。とりあえず初回は、粗い計算(0.2(Å/ピクセル)程度)で計算することをお勧めします。精度を上げると計算時間を要します。

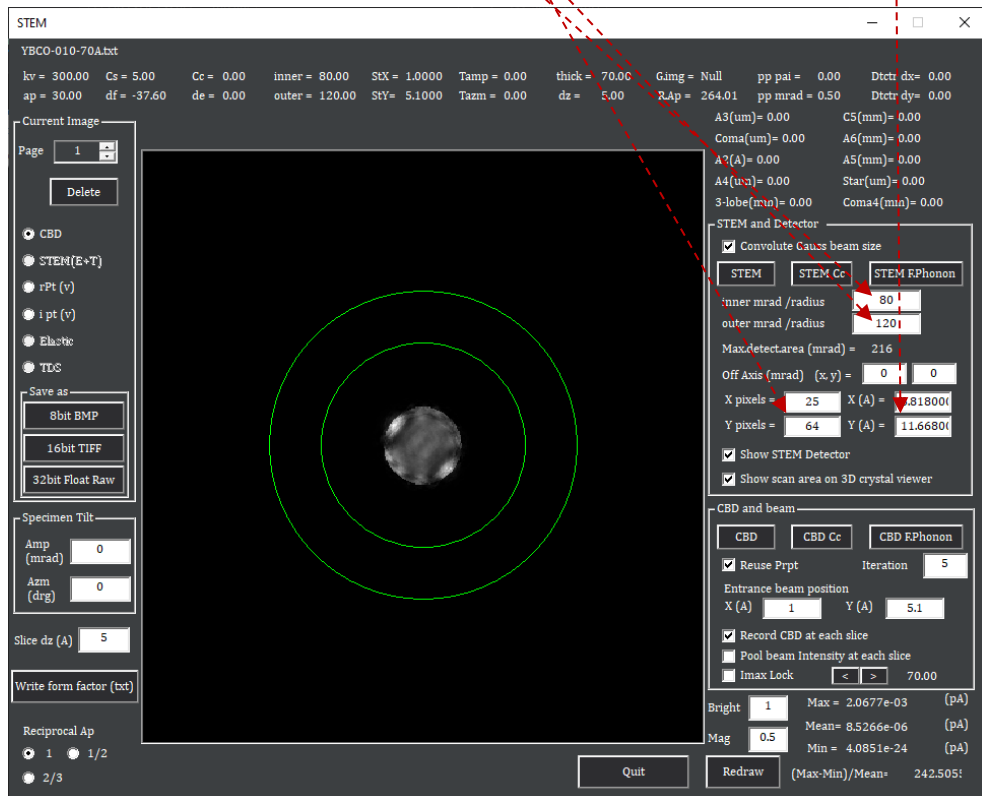
検出器サイズを、inner, outerにて mrad 単位で設定します。(inner と outer の間が検出帯)。

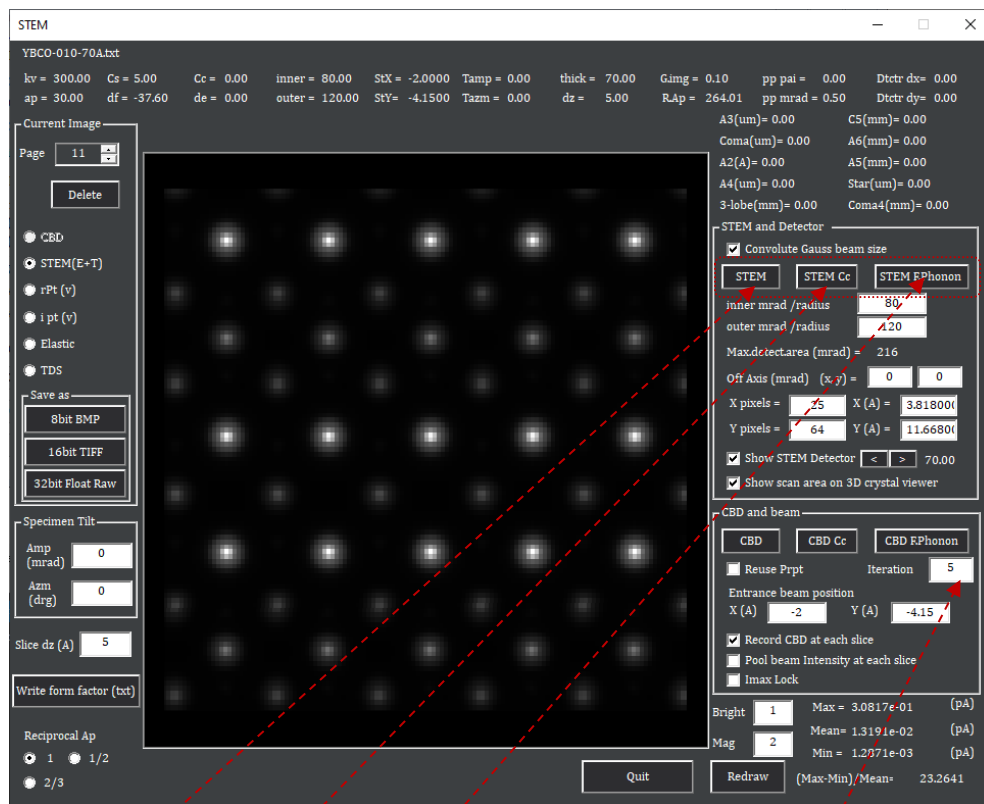
HAADF 設定: inner >70, outer > 100

BF 設定: inner=0, outer 1~0.2 程度

ABF 設定: inner =20mrad 程度、CL 絞り=outer =30mrad 程度

検出器位置は、CBD の計算表示にて確認できます。



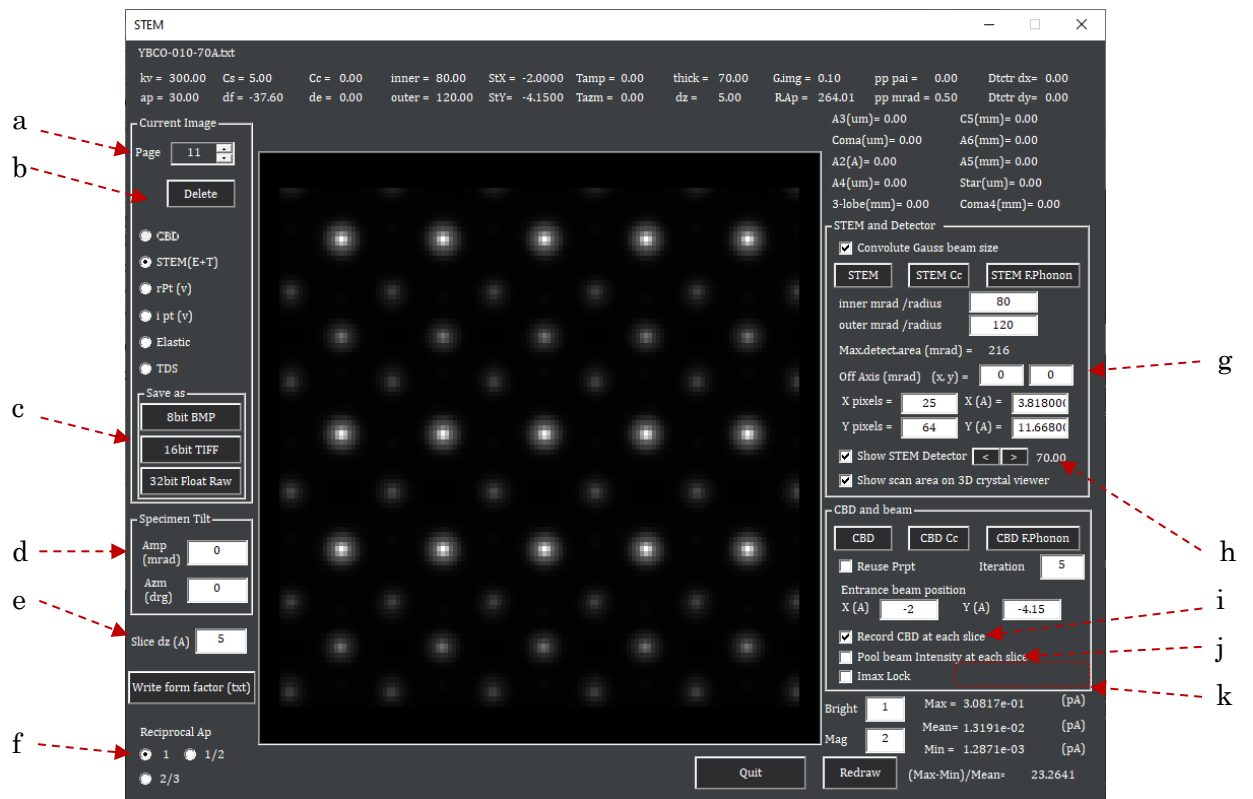


HAADF

STEM ボタンで、STEM 像計算が計算され、結果が表示されます。熱散漫散乱の像成分は、イマジナリーポテンシャルを用いて計算します。

STEM Cc ボタンで、色収差の影響を考慮した STEM 像が計算され、結果が表示されます。STEM ボタンでの計算の場合と比べて約 10 倍の計算時間を要します。熱散漫散乱の像成分は、イマジナリーポテンシャルを用いて計算します。

STEM F.Phonon ボタンで、熱散漫散乱の影響を frozen phonon を用いて計算します。Frozen phonon の繰り返し回数は、CBD F.Phonon の繰り返し回数と同じとなります。イマジナリーポテンシャルの計算と比べて、繰り返し回数分の計算時間を要します。



ABF

STEM ダイアログの他の機能

- 累積計算結果（過去 20 例まで保持）切り替えボタン
- 現在表示結果のデータ消去ボタン
- 現在表示の TIFF、BMP、32bit Float Raw ファイル保存
- Cluster/Super cell の計算における[001]からの傾斜値
- スライスの厚み
- 逆空間での伝播関数に対する絞りの大きさ（1:配列のとれる最大絞り、1/2、 2/3）
- 検出器の軸からのずれ
- スライス毎に記録された STEM 像の切り替え
- CBD をスライス毎に記録する。
- ビーム強度の変化をスライス毎に記録する。
- スライス毎に記録された CBD,ビーム強度の切り替え。切り替え操作が可能な場合、切り替えボタンが現れる。（ビーム強度は）ビーム形状計算ダイアログボックスに付随する、ビーム形状表示 window に表示される。

7. 結晶データ作成方法

以下 AlAs 結晶の作成を例に Crystal データ作成方法を説明します。

AlAs :

結晶系 Cubic

空間群 F-43m

格子定数 $a=b=c=5.662 \text{ \AA}$ 、 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Fractional 座標

	x	y	z
Al:	0.0,	0.0,	0.0
As:	0.25,	0.25,	0.25

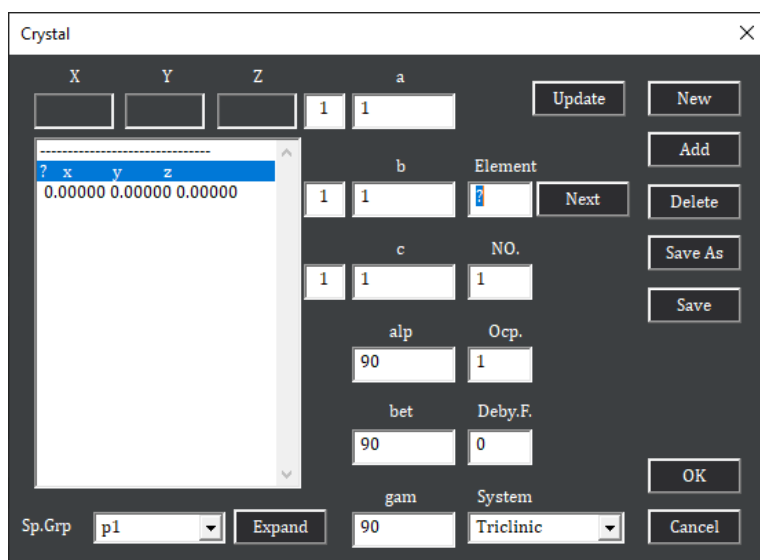
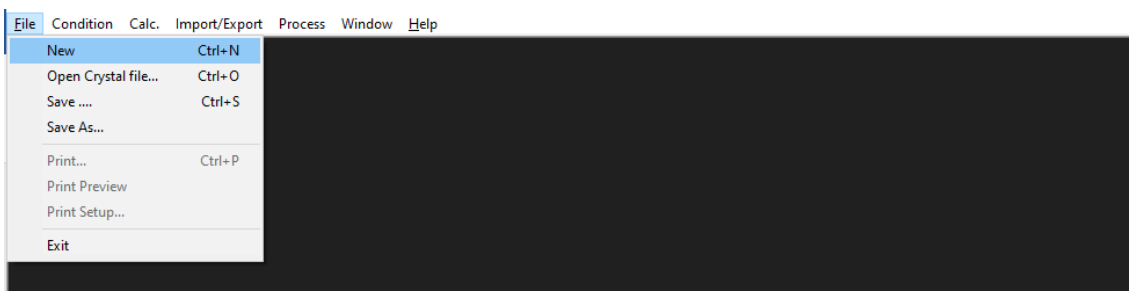
全座標

Al:	0.0,	0.0,	0.0
	0.0,	0.5,	0.5
	0.5,	0.0,	0.5
	0.5,	0.5,	0.0
As:	0.25,	0.25,	0.25
	0.25,	0.75,	0.75
	0.75,	0.25,	0.75
	0.75,	0.75,	0.25

デバイ因子(20°C) Al 0.72, As 0.58

Crystal データは、TEM 像を計算するのに用いられるデータで、通常の結晶のユニットセルの情報（結晶系、空間群、原子位置、温度因子、サイト占有率等）により構成されます。STEM 像や、Cluster の TEM 像を計算する場合は、Cluster/Super cell データを用います。Cluster/Super cell データは、擬似的な大きいユニットセルを持ち、その中の原子の位置情報、温度因子等が記載されたデータです。結晶の繰り返しよりなる Cluster/Super cell データは、Crystal データをもとに作成することができます。

File / New を選択し、Crystal ファイル編集ダイアログボックスを開きます。



次項以下、座標入力において、空間群を利用する場合、または、空間群を利用しない場合に分けて説明します。空間群の表記は、国際記号および **first setting** で記載されています。また、一部の文字が記号と完全に対応しておらず、見た目に近い文字で代用されています。

空間群のデータは、spg ディレクトリのなかに結晶系ごとにファイルされています。これらはテキストエディターで、名称、番号、対称操作等の内容が確認できますが、上書保存しないように十分注意して確認ください。万一、誤記と思われる表記が見つかった場合は、販売元に御連絡いただけますようお願いいたします。

A 座標入力において空間群を利用する場合

- a1. System プルダウンリストより Cubic を選択し、結晶系を指定します。
 α 、 β 、 γ の値が自動的に 90 にセットされます。
- a2. Sp.Grp プルダウンリストより F-43M を選択し、空間群を指定します。
- a3. エディットボックス a に格子定数 5.662 を入力し、Update ボタンを押します。
b,c の値が自動的に a と同じ値にセットされます。

Crystal dialog box showing the initial state. The System is set to Cubic, Sp.Grp to F-43M. The lattice parameters a, b, and c are all set to 5.662. The angles alpha, beta, and gamma are all set to 90. The origin is at (0,0,0).

- a4. 座標表示ボックスの ? 行をマウスクリックでハイライトさせます。
Element エディットボックスに Al と入力し、Update ボタンを押すと、
座標表示ボックスに Al が表示されます。

Crystal dialog box showing the state after adding Aluminum (Al). The origin is now at (Al, 0,0,0). The lattice parameters a, b, and c are still 5.662, and the angles alpha, beta, and gamma are still 90. The System is still Cubic and Sp.Grp is still F-43M.

- a5. 座標表示ボックスの Al 行がハイライトされた状態で、Ocp.エディットボックス、Deby.F エディットボックスに、それぞれ、Al のサイト占有率（欠陥がない場合は 1）およびデバイ因子（Al: 0.72）を入力し、Update ボタンを押します。

Crystal dialog box showing the initial state for Al. The 'Al' row in the coordinate table is highlighted. The 'Ocp.' field is set to 1 and the 'Deby.F.' field is set to 0.72. Red dashed arrows point from the text in step a5 to the 'Al' row, the 'Ocp.' field, the 'Deby.F.' field, and the 'Update' button.

- a6. 座標表示ボックスの Al の原子座標の行をハイライトします。
座標編集ボックスに、ハイライトした座標値 x、y、z が表示されるので、Al の fractional 座標値(0.0,0.0,0.0)を入力し、Update ボタンを押します。

Crystal dialog box showing the state after step a6. The 'Al' row in the coordinate table is highlighted, and the 'x', 'y', and 'z' columns are now empty. Red dashed arrows point from the text in step a6 to the 'Al' row, the 'x', 'y', and 'z' columns, and the 'Update' button.

- a7. 座標表示ボックスの Al 原子座標(0.0,0.0,0.0)行がハイライトされている状態で、Expand ボタンを押します。

Al	x	y	z
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.00000	0.50000	0.50000	0.50000
0.50000	0.00000	0.50000	0.50000
0.50000	0.50000	0.00000	0.00000

Sp.Grp: F-43M

空間群 F-43M の fractional 座標(0.0,0.0,0.0)の等価座標が生成されます。

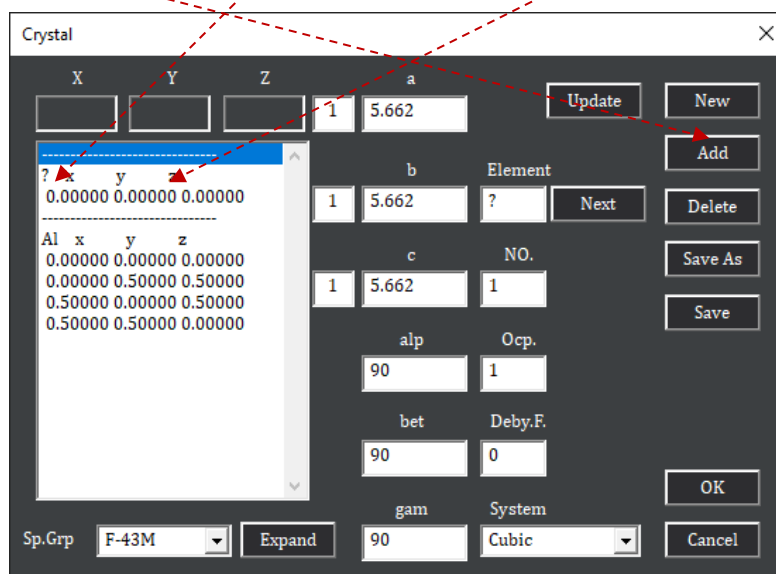
- a8. 座標表示ボックスのセパレート行 (-----) をマウスクリックしハイライトします。

Al	x	y	z

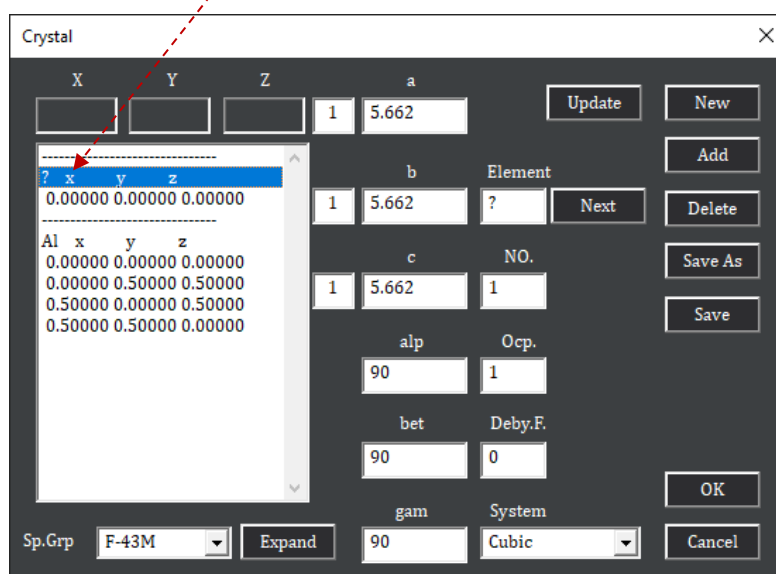
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.00000	0.50000	0.50000	0.50000
0.50000	0.00000	0.50000	0.50000
0.50000	0.50000	0.00000	0.00000

Element: Al

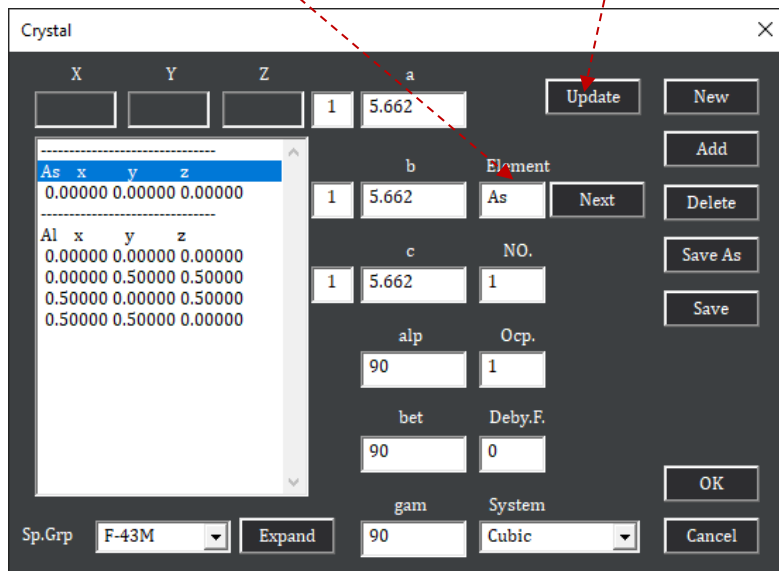
a9. Add ボタンを押す。新たな原子とデフォルト座標 (0.0,0.0,0.0) が 1 個生成されます。



a10. 新たに生成された原子の ? 行 をマウスでクリックしてハイライトします。



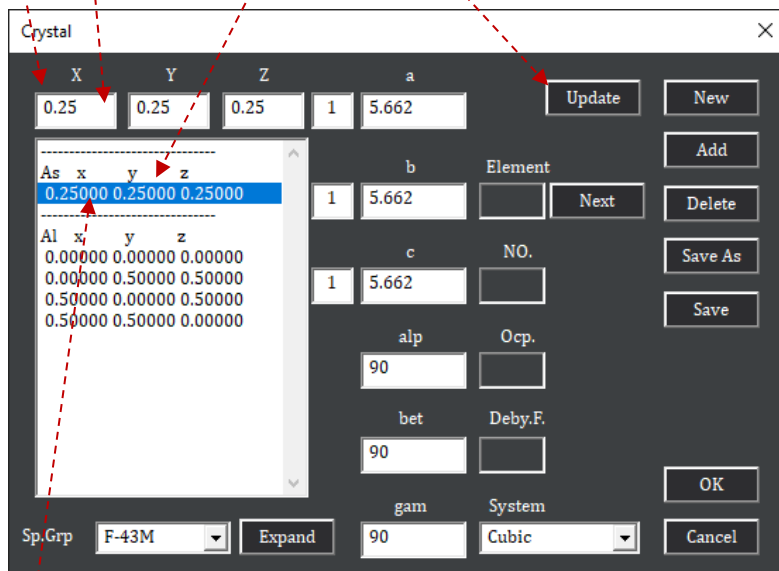
a11. Element エディットボックスに、As と入力し、Update ボタンを押すと、座標表示ボックスに As が表示されます。



	X	Y	Z	a	b	c	alp	bet	gam	System
1	0.00000	0.00000	0.00000	5.662	5.662	5.662	90	90	90	Cubic

Element	NO.	Ocp.	Deby.F.
As	1	1	0

a12. 座標表示ボックスの As の原子座標の行(0.0,0.0,0.0)をハイライトします。
座標編集ボックスに、ハイライトした座標値 x、y、z が表示されるので、As の fractional
座標値(0.25,0.25,0.25)を入力し、Update ボタンを押します。



	X	Y	Z	a	b	c	alp	bet	gam	System
1	0.25	0.25	0.25	5.662	5.662	5.662	90	90	90	Cubic

Element	NO.	Ocp.	Deby.F.
As	1	1	0

As の座標 (0.25,0.25,0.25) が生成されます。

- a13. 座標表示ボックスに表示されている As の行をマウスでクリックしハイライトします。
 As 行がハイライトされた状態で、Ocp.エディットボックス、Deby.F エディットボックス
 に、それぞれ、As のサイト占有率（欠陥がない場合は 1）およびデバイ因子（As: 0.58）
 を入力し、Update ボタンを押します。

Crystal

X Y Z a

0.25 0.25 0.25 1 5.662

Update New

As x y z

0.25000 0.25000 0.25000

Al x y z

0.00000 0.00000 0.00000

0.00000 0.50000 0.50000

0.50000 0.00000 0.50000

0.50000 0.50000 0.00000

b Element

1 5.662 As Next Delete

c NO.

1 5.662 1 Save As Save

alp Ocp.

90 1

bet Deby.F

90 0.58

gam System

90 Cubic OK Cancel

Sp.Grp F-43M Expand

- a14. 座標表示ボックスに表示されている As 座標(0.25,0.25,0.25)をマウスでクリックしハイ
 ライトします。

Crystal

X Y Z a

0.25 0.25 0.25 1 5.662

Update New

As x y z

0.25000 0.25000 0.25000

Al x y z

0.00000 0.00000 0.00000

0.00000 0.50000 0.50000

0.50000 0.00000 0.50000

0.50000 0.50000 0.00000

b Element

1 5.662 Next Delete

c NO.

1 5.662 Save As Save

alp Ocp.

90

bet Deby.F

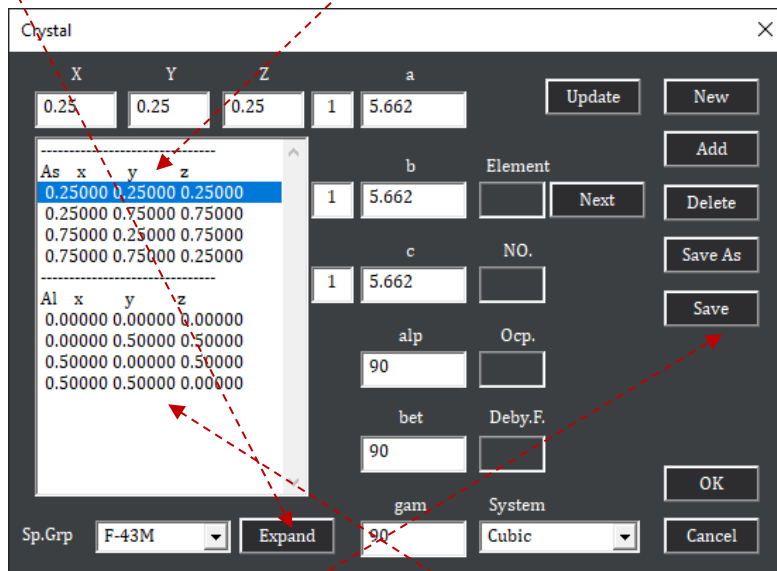
90

gam System

90 Cubic OK Cancel

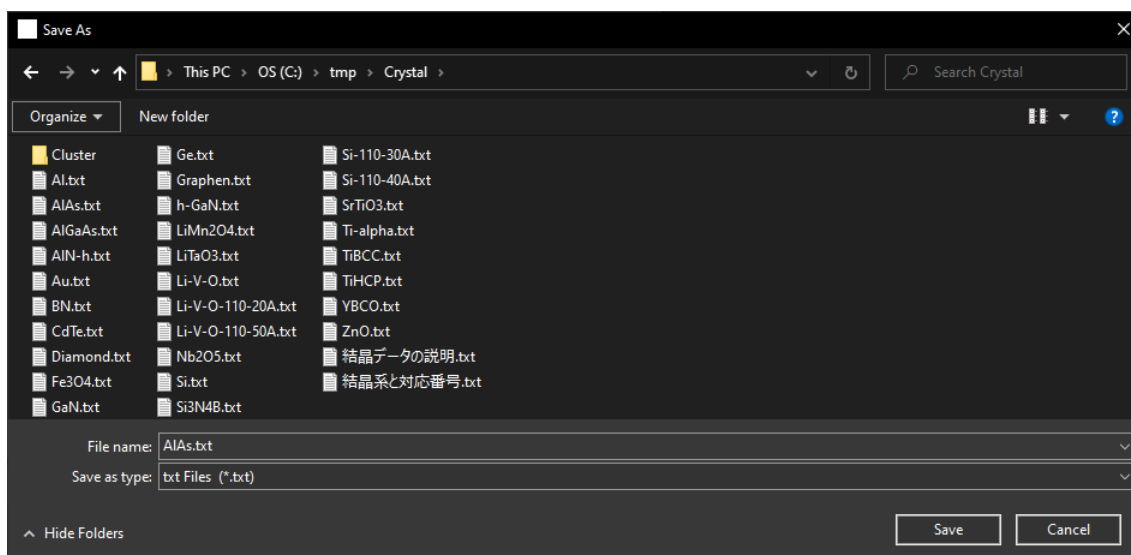
Sp.Grp F-43M Expand

a15. 座標表示ボックスの As 原子座標(0.25,0.25,0.25)行がハイライトされている状態で、Expand ボタンを押すと、



空間群 F-43M の fractional 座標(0.25,0.25,0.25)の等価座標が生成されます。

a16. Save ボタンを押すと、ファイル Save のダイアログボックスが表示されます。



B. 座標入力において空間群を利用しない場合

b1. System プルダウンリストより Triclinic を選択します。

α 、 β 、 γ の値に、すべて 90 を入力し、Update ボタンを押します。

b2. Sp.Grp プルダウンリストより P1 を選択します。

b3. エディットボックス a、b、c、全てに格子定数 5.662 を入力し、Update ボタンを押します。

Crystal dialog box showing the initial state. The 'System' dropdown is set to 'Triclinic'. The 'Sp.Grp' dropdown is set to 'p1'. The 'a', 'b', and 'c' input fields are set to 5.662. The 'alp', 'bet', and 'gam' input fields are set to 90. The 'Update' button is highlighted. The 'Element' dropdown is set to '?'. The 'Next' button is highlighted. The 'Save As' and 'Save' buttons are also visible. The 'OK' and 'Cancel' buttons are at the bottom right. The 'X', 'Y', and 'Z' input fields are empty. The 'Expand' button is next to 'Sp.Grp'. The 'Element' dropdown is set to '?'. The 'Next' button is highlighted. The 'Save As' and 'Save' buttons are also visible. The 'OK' and 'Cancel' buttons are at the bottom right. The 'X', 'Y', and 'Z' input fields are empty. The 'Expand' button is next to 'Sp.Grp'.

b4. 座標表示ボックスの ? 行 をマウスクリックでハイライトさせます。

Element エディットボックスに、Al と入力し、Update ボタンを押すと、座標表示ボックスに Al が表示されます。

Crystal dialog box showing the state after step b4. The 'Element' dropdown is set to 'Al'. The 'Update' button is highlighted. The 'X', 'Y', and 'Z' input fields are empty. The 'Expand' button is next to 'Sp.Grp'. The 'Element' dropdown is set to 'Al'. The 'Next' button is highlighted. The 'Save As' and 'Save' buttons are also visible. The 'OK' and 'Cancel' buttons are at the bottom right. The 'X', 'Y', and 'Z' input fields are empty. The 'Expand' button is next to 'Sp.Grp'.

- b5. 座標表示ボックスの Al 行がハイライトされた状態で、Ocp.エディットボックス、Deby.F エディットボックスは、それぞれ、Al のサイト占有率（欠陥がない場合は 1）およびデバイ因子（Al: 0.72）を入力し、Update ボタンを押します。

Crystal dialog box showing the 'Al' row highlighted in the coordinate table. The 'Update' button is visible. The 'Ocp.' field is set to 1, and the 'Deby.F.' field is set to 0.72.

Al	x	y	z
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

Parameters:

- a: 5.662
- b: 5.662
- c: 5.662
- alp: 90
- bet: 90
- gam: 90
- Element: Al
- NO.: 1
- Ocp.: 1
- Deby.F.: 0.72
- System: Triclinic

Buttons: Update, New, Add, Delete, Save As, Save, OK, Cancel.

- b6. 座標表示ボックスの Al の原子座標(0.0,0.0,0.0)の行をマウスでクリックしてハイライトします。

Crystal dialog box showing the 'Al' row highlighted in the coordinate table. The 'Al' row is highlighted in blue.

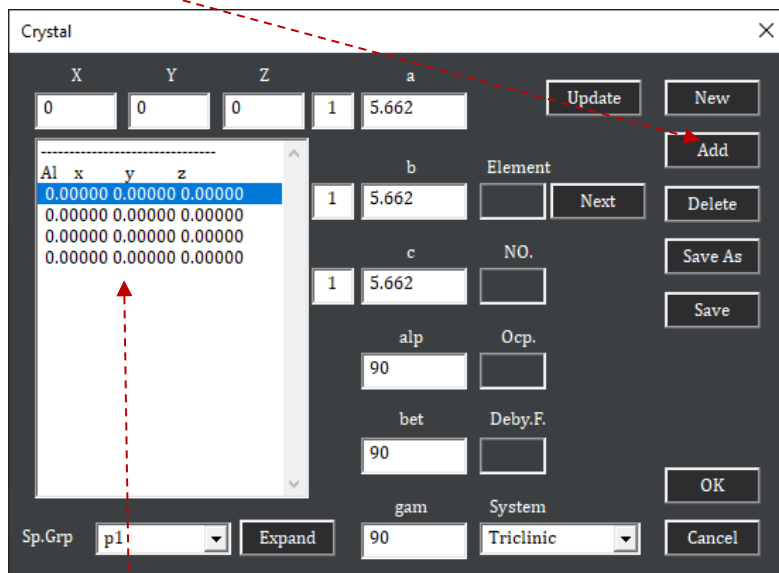
Al	x	y	z
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

Parameters:

- a: 5.662
- b: 5.662
- c: 5.662
- alp: 90
- bet: 90
- gam: 90
- Element: Al
- NO.: 1
- Ocp.: 1
- Deby.F.: 0.72
- System: Triclinic

Buttons: Update, New, Add, Delete, Save As, Save, OK, Cancel.

b7. Add ボタンを 3 回連続して押すと、

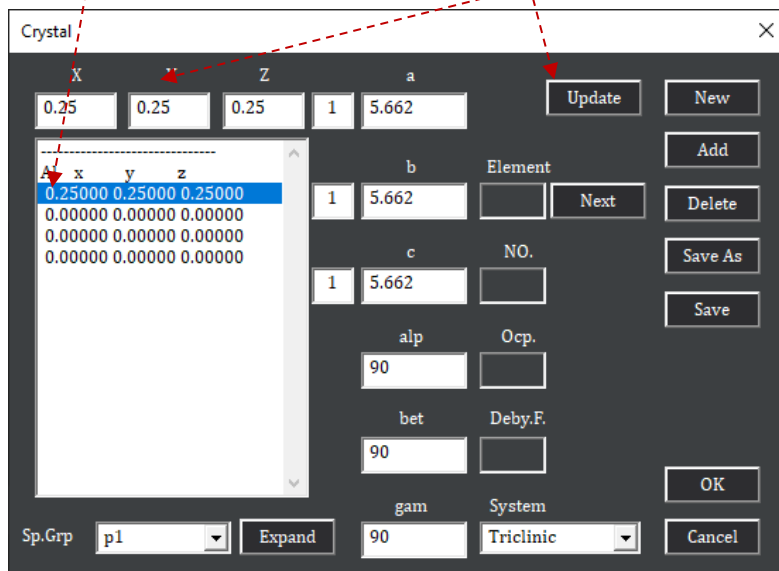


Crystal dialog box showing the initial state. The 'Add' button is highlighted with a red dashed arrow. The 'Al' column in the table is highlighted with a blue selection bar.

Al	x	y	z
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

Al の座標が新たに 3 つ生成されます。

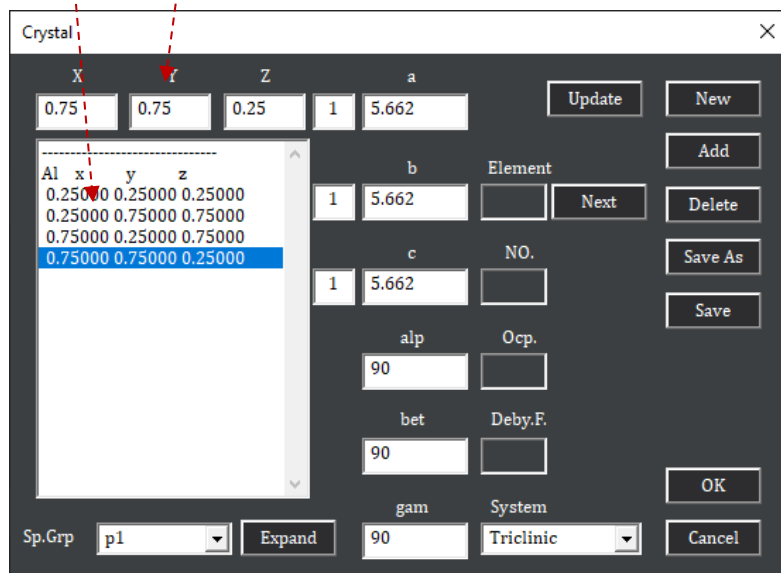
b8. Al 座標の行の一つをマウスクリックでハイライトし、座標編集ボックスから、x,y,z の座標（例えば、0.25,0.25,0.25）を入力し、Update ボタンを押します。



Crystal dialog box showing the state after editing. The 'x', 'y', and 'z' input fields are highlighted with red dashed arrows. The 'Update' button is also highlighted with a red dashed arrow. The 'Al' column in the table is highlighted with a blue selection bar.

Al	x	y	z
0.25000	0.25000	0.25000	0.25000
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0.00000	0.00000	0.00000	0.00000

b9. 同様に、4つすべての Al 座標を入力します。



Crystal

X: 0.75 Y: 0.75 Z: 0.25 a: 1 5.662

Al x y z

0.25000	0.25000	0.25000
0.25000	0.75000	0.75000
0.75000	0.25000	0.75000
0.75000	0.75000	0.25000

b: 1 5.662 Element: [] Next: [] Delete: []

c: 1 5.662 NO.: [] Save As: [] Save: []

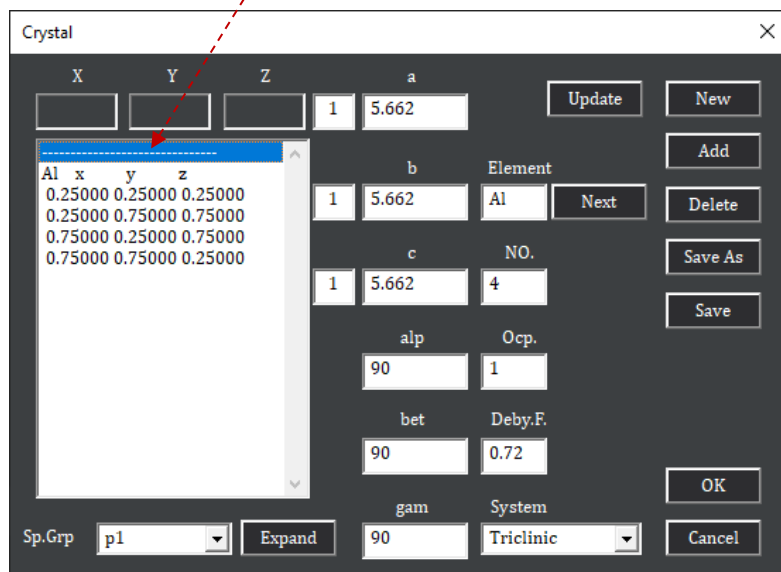
alp: 90 Ocp.: []

bet: 90 Deby.F.: []

gam: 90 System: Triclinic

Sp.Grp: p1 Expand: [] OK: [] Cancel: []

b10. 座標表示ボックスのセパレート行 (-----) をマウスクリックしハイライトします。



Crystal

X: [] Y: [] Z: [] a: 1 5.662

Al x y z

Al	x	y	z

0.25000	0.25000	0.25000	
0.25000	0.75000	0.75000	
0.75000	0.25000	0.75000	
0.75000	0.75000	0.25000	

b: 1 5.662 Element: Al Next: [] Delete: []

c: 1 5.662 NO.: 4 Save As: [] Save: []

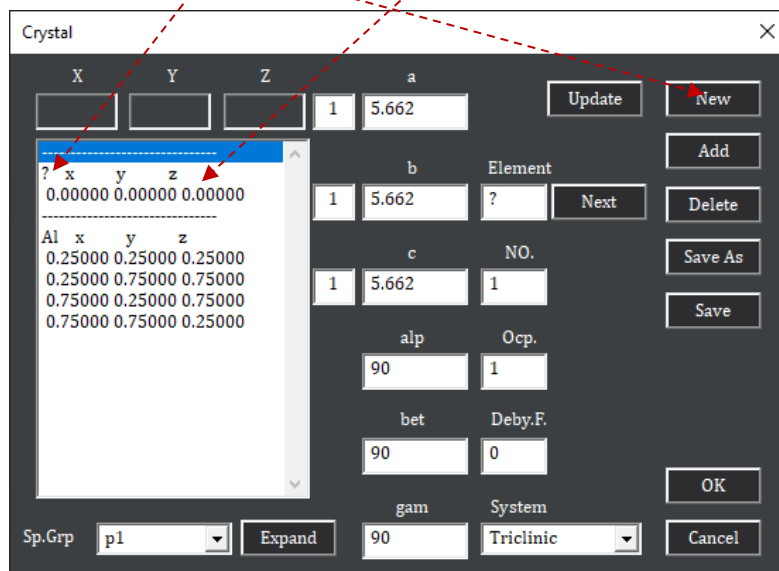
alp: 90 Ocp.: 1

bet: 90 Deby.F.: 0.72

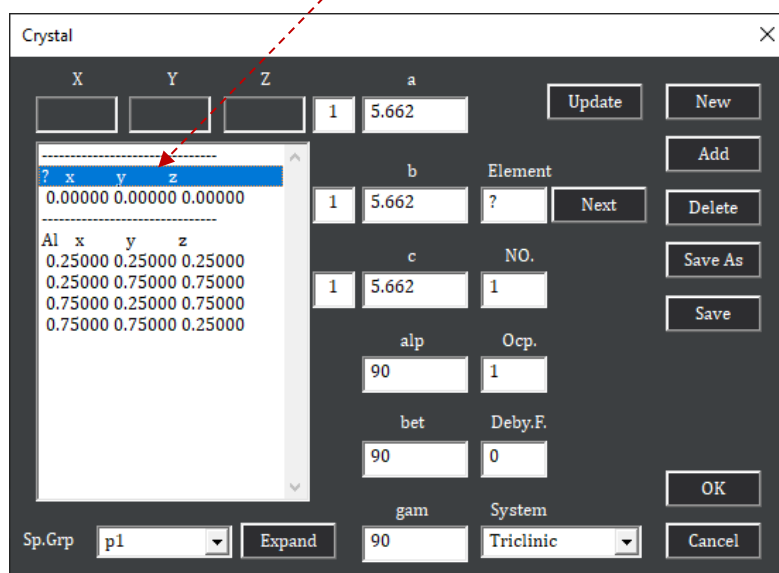
gam: 90 System: Triclinic

Sp.Grp: p1 Expand: [] OK: [] Cancel: []

b11. Add ボタンを押と、新たな原子とデフォルト座標 (0.0,0.0,0.0) が 1 個生成されます。



b12. 新たに生成された原子の ? 行をマウスでクリックしてハイライトします。



- b13. Element エディットボックスに、As と入力し、Update ボタンを押します。
座標表示ボックスに As が表示されます。

Crystal

X Y Z 1 5.662

Update New

As x y z

0.00000 0.00000 0.00000

Al x y z

0.25000 0.25000 0.25000

0.25000 0.75000 0.75000

0.75000 0.25000 0.75000

0.75000 0.75000 0.25000

Sp.Grp p1 Expand

a b c

1 5.662 1 5.662 1 5.662

alp 90 bet 90 gam 90

Element As NO. 1

Ocp. 1

Deby.F. 0

System Triclinic

OK Cancel

Save As Save

Add Delete

- b14 b5～b9 と同様の操作で、As に対する、サイト占有率、デバイ因子、座標値を入力します。

Crystal

X Y Z 1 5.662

Update New

As x y z

0.00000 0.00000 0.00000

0.00000 0.50000 0.50000

0.50000 0.00000 0.50000

0.50000 0.50000 0.00000

Al x y z

0.25000 0.25000 0.25000

0.25000 0.75000 0.75000

0.75000 0.25000 0.75000

0.75000 0.75000 0.25000

Sp.Grp p1 Expand

a b c

1 5.662 1 5.662 1 5.662

alp 90 bet 90 gam 90

Element NO.

Ocp.

Deby.F.

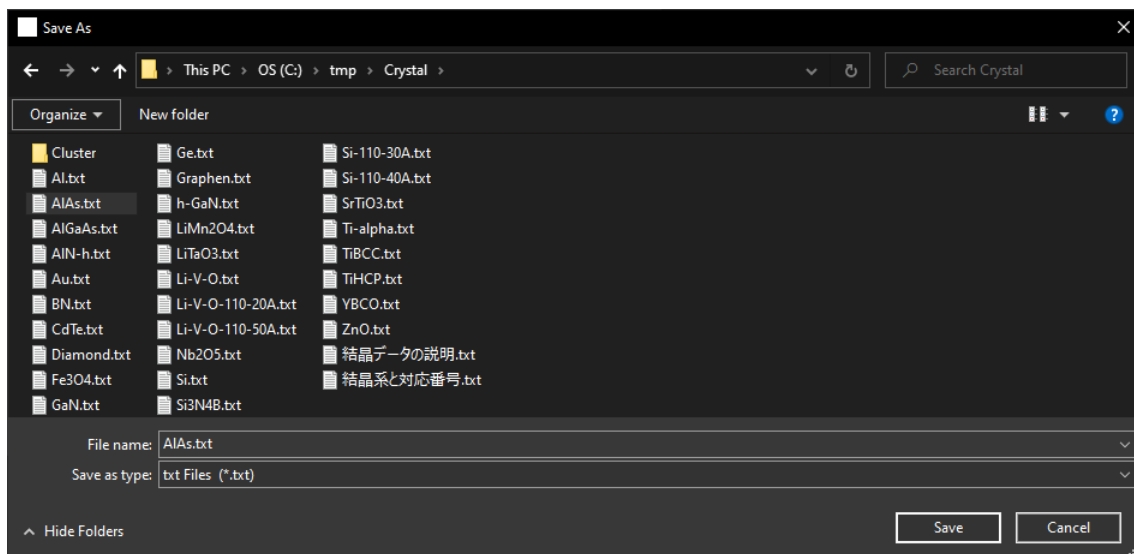
System Triclinic

OK Cancel

Save As Save

Add Delete

b15. Save ボタンを押すと、ファイル Save のダイアログボックスが表示されます。



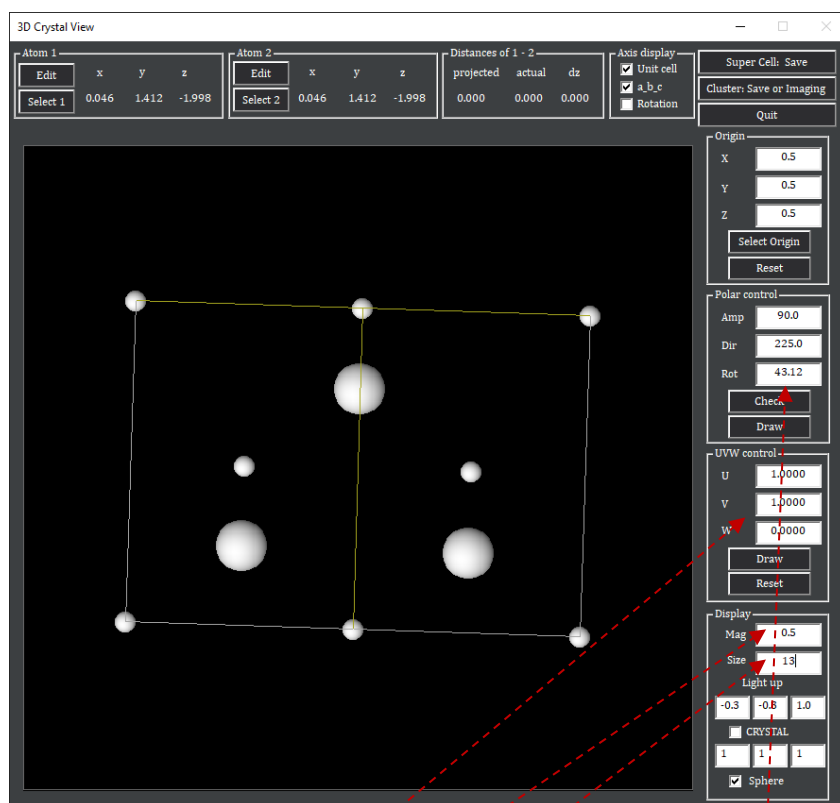
注 1. 空間群が不明の場合は、結晶系を **triclinic**、空間群を **p1** と、それぞれ指定する
この場合、**Eexpand** ボタンを押しても等価座標は生成されない。

注 2. デバイ因子が不明の場合は **0** を入力する。
この場合、**Imaginary potential** が **0** として計算が進められ、特に、**HAADF** 像
の計算結果が異なってくる。

8. Super Cell 作成方法

Super Cell (主に STEM/CBD 計算用のデータ)作成

以下 AlAs 結晶データが既に作成されているとして、AlAs の[110]方位が電子入射方位となるスーパーセルを作成する方法を説明します。

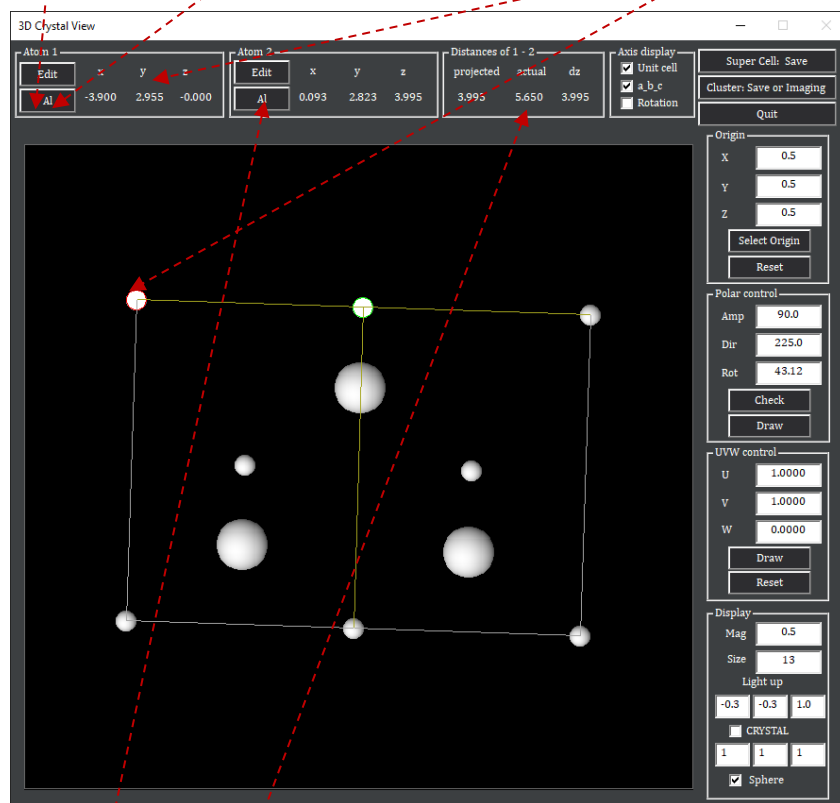


1. 結晶データ (AlAs) を File/Open Crystal file で読み込み、Calc/Crystal 3D Viewing で結晶データの 3D イメージを表示させます。

必要に応じて、Mag、Size の値を変更して、見やすさを整えます。

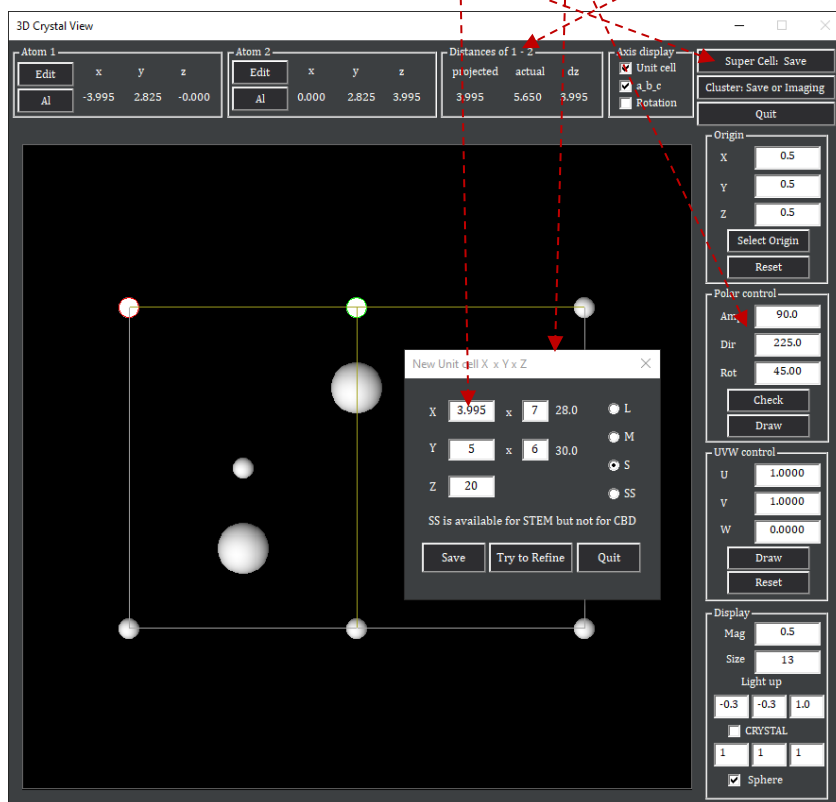
2. UVW から、AlAs に対する電子入射方位 [1 1 0] を入力します。これから作成するスーパーセルは、表示画面の水平および垂直方向が、それぞれ、セルの x 方向および y 方向に相当します。また画面に対する視線が、z 方向に相当するので、AlAs の[110]方位が、作成するスーパーセルの[001]方位に相当することになります。
3. 画面の x 方向と y 方向、ともに、等価点が最短で並ぶように、Rot の値を入力します。この場合 45、または 135 で等価点が、x 方向、および y 方向にならびますが、図では Rot の値を少しずらして 43.12 と入力しています。

4. Atom1 枠の 2 つ目のボタンをマウスクリックし、続いて適当な原子座標をマウスクリックします。ボタンに原子名が表示され、枠内に原子座標(x,y,z)が表示されます。

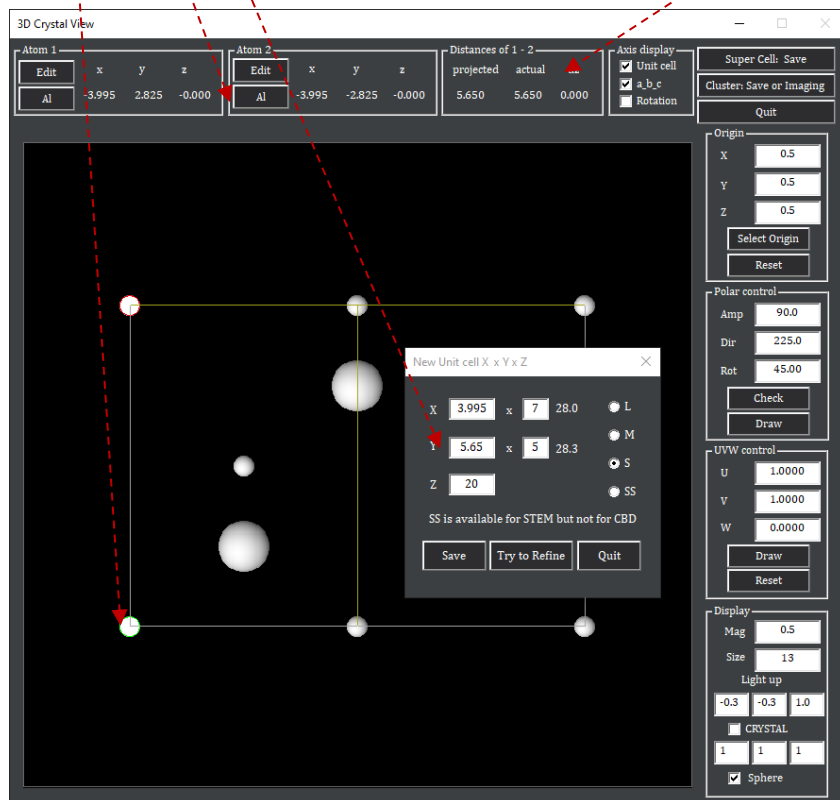


5. 同様の操作で、Atom1 枠で指定した原子と x 方向（画面水平方向）の等価点にある原子を、Atom2 枠に指定します。Atom1,Atom2 に原子が指定されるとそれぞれの原子の投影距離、原子間距離、z 座標値の差（視線方向の高低差）が表示されます。

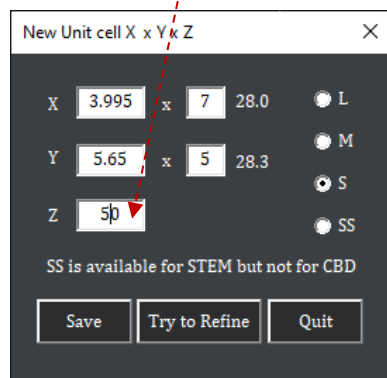
6. 上記 (8.1.4, 8.1.5) で指定した 2 つの等価点がほぼ、水平になっているのを確認し、Super Cell Save ボタンを押すと、Cluster サイズを指定するためのダイアログボックスが表れます。2 つの等価点が完全に水平に並ぶように、Rot の値が refine され、等価点の投影距離が default として、サイズ指定ダイアログボックスの X の値として表示されます。



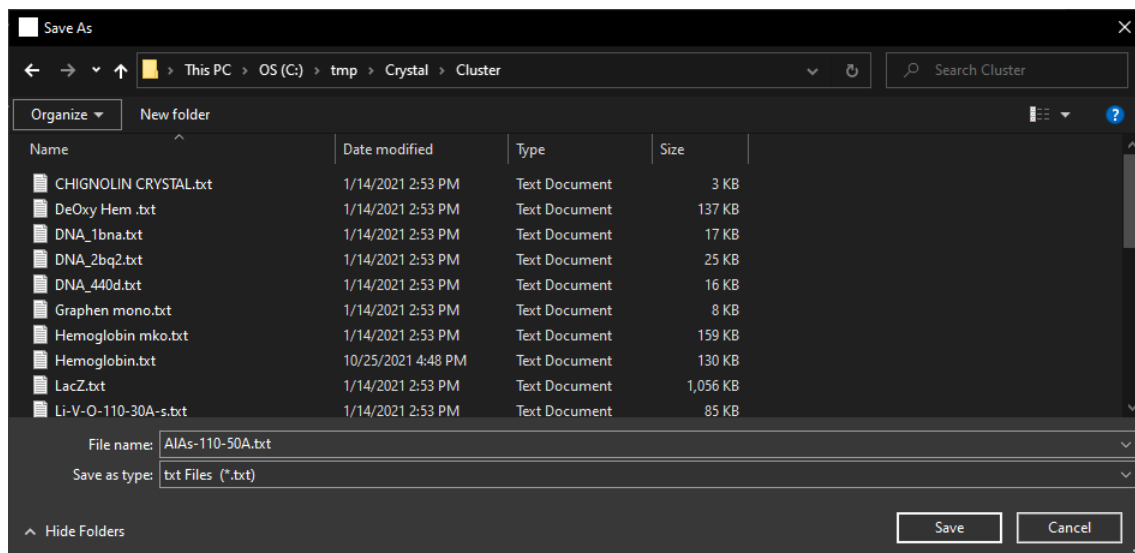
7. Atom2 枠の 2 回目のボタンをクリックし、Atom1 枠で指定されている原子に対して、y 方向の等価な点にある原子をクリックします。それぞれの原子の投影距離、原子間距離、z 座標値の差（視線方向の高低差）が表示更新されます。また、投影距離がサイズ指定ダイアログボックスの Y の値として表示されます。



作成するスーパーセルの z 方向の大きさを入力します。

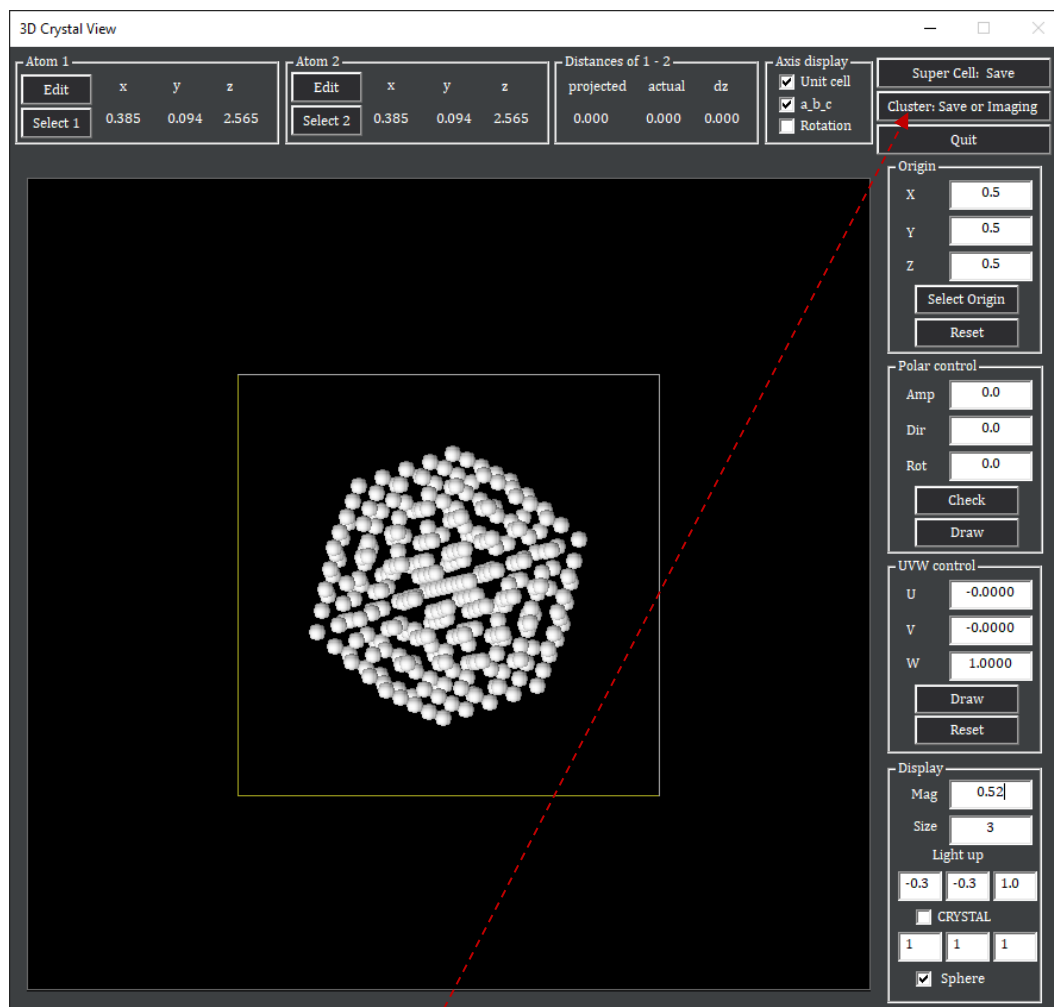


8. サイズ指定ダイアログボックスの **Save** ボタンを押すと、ファイル **Save** のダイアログボックスが表れるので、名前を付けて保存します。



9. Cluster の TEM 像計算 / STEM 像計算

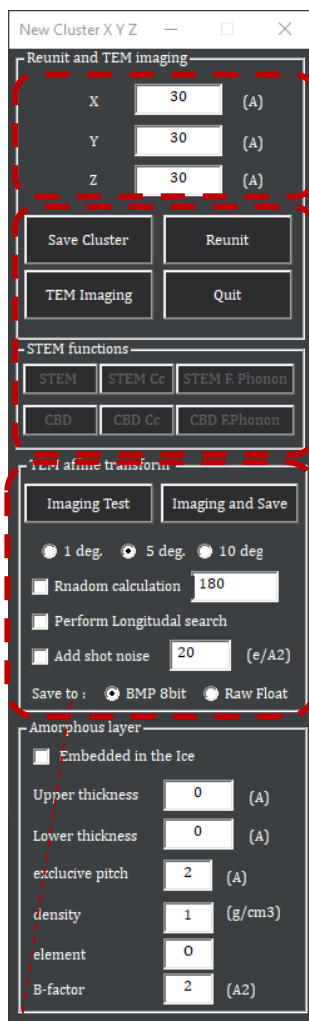
他の専用ソフト等で作成された Cluster データから任意の方向からみた TEM 像、STEM 像を計算することができます。まず Cluster データを（結晶データでも可能）File/Open Crystal file で読み込み、Calc/Crystal 3D Viewing で 3D 表示します。Cluster データは、xyz ファイルフォーマットおよび car ファイルフォーマット等も読み込み可能です。



9.1. 任意方向からの TEM 像の計算

Super Cell データを任意の方位にマウストラッグ等で回転させ、TEM 観察を想定した方位等に設定し、Cluster Save or Imaging ボタンを押します。

現在表示されている方向からの、super cell の再保存 / TEM 像計算 / 自動傾斜と複数の TEM 像計算 / STEM 像計算、等々のボタンを持ったダイアログボックスが現れます。



Cluster の疑似ユニットセルの大きさを指定します。

Reunit ボタンで、現在表示されている Cluster を表示座標(x: 水平方向、y:垂直方向、逆視線方向)に変換した座標が内部的に生成されます。

Save Cluster で、Reunit にて生成された Cluster を保存できます (保存ダイアログが開く)。

TEM Imaging ボタンで (中間ダイアログが現れますが Calc button で) 現在表示されている Cluster の視線方向から見た TEM 像が計算できます。

Quit ボタンでダイアログボックスを閉じます。

STEM 計算 ダイアログボックス (6.2 参照) が開かれているときは、STEM 関連のボタンが有効になります (後述)。

9.2. 試料を自動回転しつつの TEM 像計算

Test start ボタンで、現在表示されている Cluster を自動で傾斜しつつ、各々の傾斜条件で TEM 像が計算されます。その際、Cluster の傾斜間隔(dt: 1°、5°、10°) が設定できます。Perform Longitudinal search が off の場合は、水平方向 (Dir は常に 0.0) の傾斜のみ行います。Perform Longitudinal search が on の場合は、水平方向(Dir=0.0)から傾斜値 mp を 0° ~360° まで傾斜し、続いて傾斜方向を dt だけ半時計周りに変更して、以下、同様に傾斜を繰り返します。

Imaging and save ボタンで、Test start と同様に傾斜 TEM 像を自動計算し、それらの TEM が保存されます。保存の際、各 TEM 像は次項の例のようにファイル名が自動で与えられます。

自動傾斜シリーズとして保存された計算像は、下記のソフトが生成するファイル名にて保存されます。

***_Amp_30.00_Dir_0.00_Rot_0.00.BMP

ここで、

***は保存ダイアログに操作者が設定する任意の名称

Amp_30.00_Dir_0.00_Rot_0.00 は、cluster の初期表示状態から、

傾斜振幅は 30° (Amp を 30.0 にセット)

傾斜方向は 0° つまり、水平方向 (Dir に 0 をセット)

回転方向は 0°

これらの条件で計算された像であることを意味します。

9.3. 試料がアモルファス包埋状態での TEM 像計算

TEM affine transform

Imaging Test Imaging and Save

☐ 1 deg. ☒ 5 deg. ☐ 10 deg

☐ Random calculation 180

☐ Perform Longitudinal search

☐ Add shot noise 20 (e/A2)

Save to : ☒ BMP 8bit ☐ Raw Float

Amorphous layer

☒ Embedded in the Ice

Upper thickness 0 (A)

Lower thickness 0 (A)

exclusive pitch 2 (A)

density 1 (g/cm3)

element 0

B-factor 2 (A2)

Upper Ice に試料上のアモルファス層の厚さを入力します。

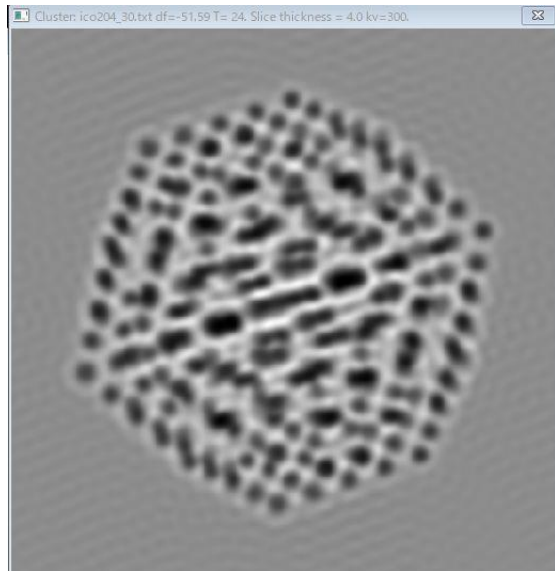
Lower Ice に試料下のアモルファス層の厚さを入力します。

Embedded in the ice をチェックすることで、試料がアモルファスに包埋されている状態となります。

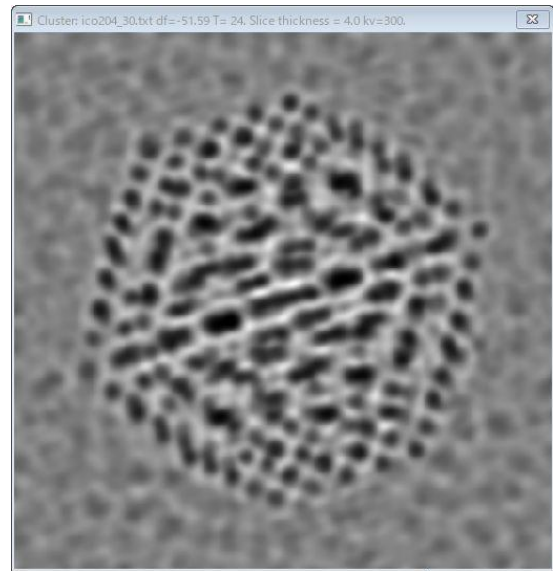
density と element に、アモルファスの密度と元素を指定します。

試料がアモルファスに包埋された状態での TEM 像を計算できます。単粒子解析等の TEM 像のシミュレーションが可能です。アモルファス内の電子波の伝播もマルチスライス計算を行います。密度と元素をもとに乱数で座標位置を生成することで、アモルファス構造を近似的に生成します。

9.4. Au cluster TEM 像の計算例



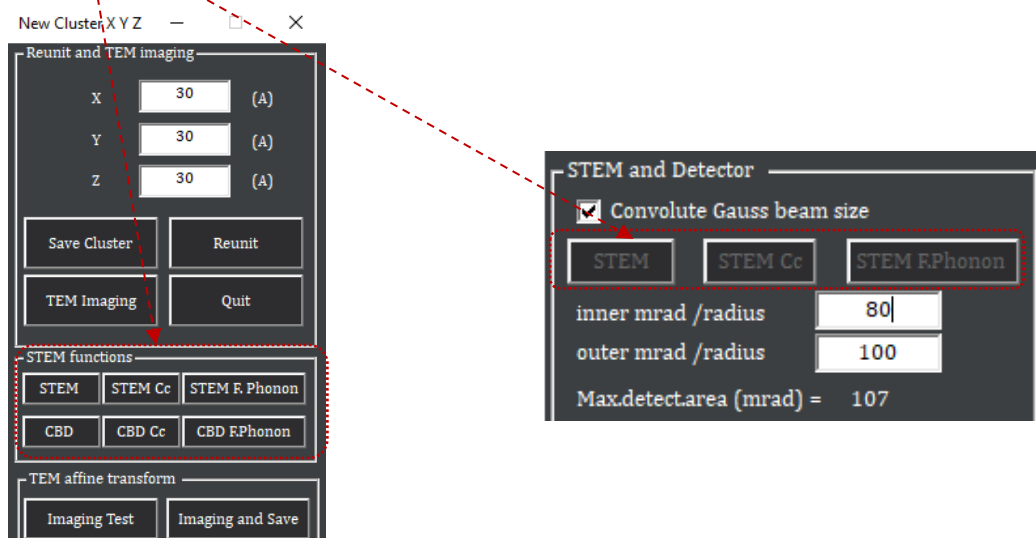
Au cluster



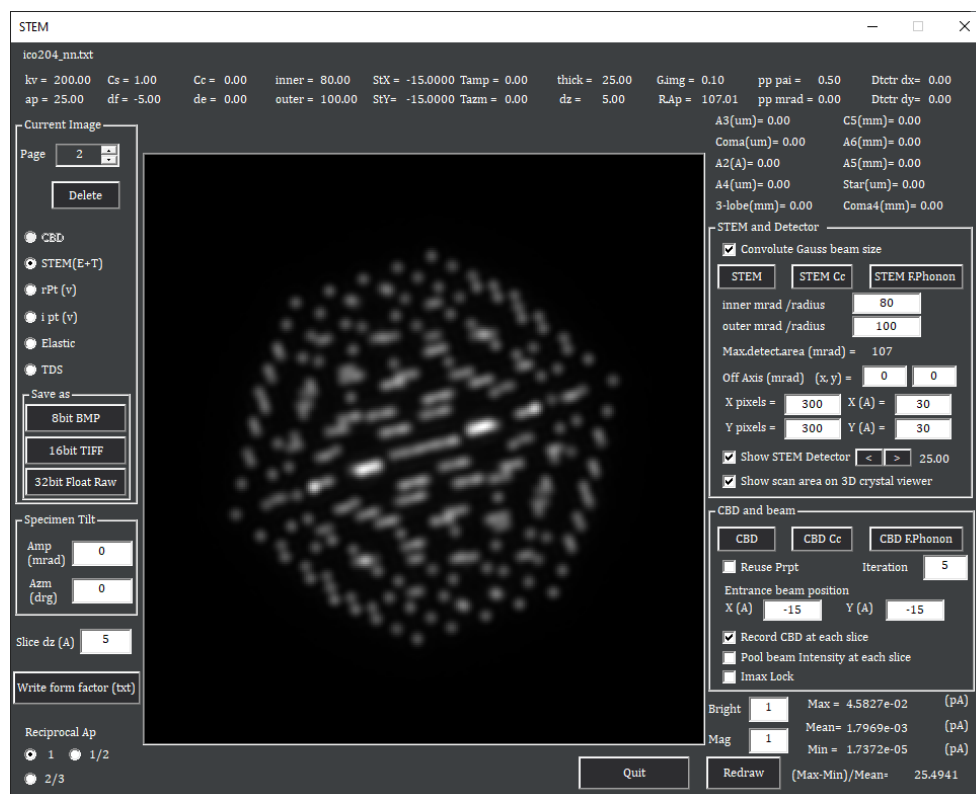
Au cluster + アモルファス（元素 C、密度 2.0、upper 層 20 Å、lower 層 20 Å、包埋状態）

9.5. 任意の方向からの STEM 像計算

STEM 計算のダイアログボックス（参照：6.1 STEM, CBD 計算）が開かれていると、STEM 関連のボタンが有効となります。STEM 計算のダイアログボックスの方は、STEM 計算に関する 3 つのボタンが無効になります。



前項の STEM 関連のボタンにより、STEM 計算のダイアログボックス等で設定されている STEM 計算条件に従って、3D モデルが表示している観察方向からの STEM 像が計算されます (STEM 計算のダイアログボックスの STEM ボタンと同等の操作となります)。



Au cluster の STEM (HAADF) 像の計算例