

透過電子顕微鏡(TEM)のためのマルチスライス

オリジナルプログラム (DOS版) は、Dr. Earl J. Kirklandによって作成されました (*).

(*): Advanced Computing in ELECTRON MICROSCOPY, Plenum Press (1998).

本アプリケーションは、それを元にして、使い易いようにWindowsプログラムに書き換えたものです。

本アプリケーションの使用に当たっては、上記の書籍を購入し、内容を十分に理解されることを望みます。

第1章 コンベンショナルTEM像

\$1. コンベンショナル TEM 像のシミュレーションの手順

- 1) 試料の atomic potential に対する複数の入力データファイル (WWWi.DAT) を作成します。
注: 通常、 $i = a, b, c, \dots$ です。
- 2) それぞれの入力データファイル (WWWi.DAT) [注: $i = a, b, c, \dots$] に対し Atomic Potential function を実行し、それぞれ atomic potential ファイル (WWWiPOT.TIF) [注: $i = a, b, c, \dots$] を得ます。
- 3) 全 atomic potential ファイル (WWWiPOT.TIF) [注: $i = a, b, c, \dots$] を対象に Multislice function を実行し、1個の multislice ファイル (WWWMUL.TIF) を得ます。
- 4) この multislice ファイル (WWWMUL.TIF) に対し Image function を実行し、image ファイル (WWWIMG.TIF) を得ます。

\$2. atomic potential に対する入力データファイルのフォーマット

下記のフォーマットを有することが必要です。

ax	by	cz	
Ns			
Sxa(1)	Sxb(1)	Sya(1)	Syb(1)
Sxa(2)	Sxb(2)	Sya(2)	Syb(2)
....
Sxa(Ns)	Sxb(Ns)	Sya(Ns)	Syb(Ns)
<one blank line>			
Z(atom-1)			
Occ(1)	xpos(1)	ypos(1)	wobble(1)
....
Occ(n1)	xpos(n1)	ypos(n1)	wobble(n1)
<one blank line>			
Z(atom-2)			
Occ(1)	xpos(1)	ypos(1)	wobble(1)
....
Occ(n2)	xpos(n2)	ypos(n2)	wobble(n2)
<one blank line>			
....
....
Z(atom-j)			
Occ(1)	xpos(1)	ypos(1)	wobble(1)
....
Occ(nj)	xpos(nj)	ypos(nj)	wobble(nj)
<one blank line>			
<one blank line>			

注:

- 1) Super Cell Group

* ax, by は試料のスライス面での Super Cell の値で、cz はスライス面間の距離です (単位: オングストローム).

- 2) Symmetry Operation Group

* Ns は夫々の座標に対する Symmetry Operation の数です。

- * Ns に引き続く Sxa(1)...、Sxa(2)...、...、Sxa(Ns)...、のラインの数は、Ns の値と一致する必要があります。
- * なお、Symmetry Operation の詳細については、原書を参照してください。
- * もし、Ns の値が 0 ならば、Sxa(1)...、Sxa(2)...、...、Sxa(Ns)...、に相当するラインは存在せず、しかも、次の1行のブランクラインを省略できます。

3) Atomic Coordinates Group

- * 1つ、或いはそれ以上、の Atomic Coordinates Group が存在する必要があります。
- * Z(atom-i) は、スライス面の i 番目 原子の原子番号 (Z) です。
- * Occ(i) は、原子の占有率 (occupancy) です。これは、通常、1.0 ですが、1.0未満で 0.0 超 の値にも設定できます (詳細については、原書を参照してください)。
- * xpos(i), ypos(i) は、原子の座標 (reduced coordinates) です。
- * wobble(i) は、Thermal Phonon をシミュレーションするための各方向へのランダム変位の root mean square (rms) 値です (単位: オングストローム)。
なお、wobble(i) を使わない場合には、これを省略できます。
- * 夫々の Atomic Coordinates Group は、1行のブランクラインで終了する必要があります。

4) End of Data File

- * 入力データファイルの最後は、1行のブランクラインで終了する必要があります。
直前の Atomic Coordinates Group が1行のブランクラインで終了しているので、結果的には、入力データファイルの最後は、2行のブランクラインで終了することになります。

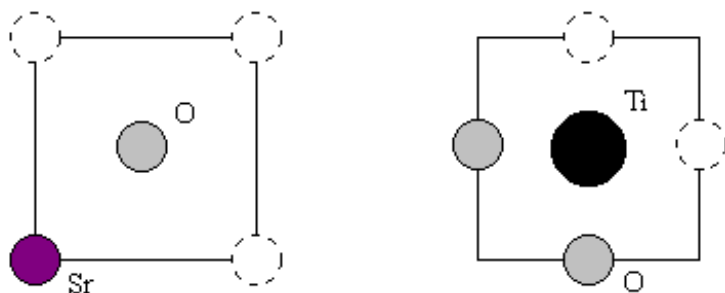
\$3. atomic potential に対する入力データファイルの例

cubic perovskite 構造を持つ Strontium Titanate (SrTiO₃) を例に採ります。

これは、cubic unit cell の大きさが 3.905 (オングストローム) です。

Strontium [Sr; Z=38] 原子は cubic の全コーナーに存在し、Oxygen [O; Z=8] 原子は cubic の全フェース面に存在し、Titanate [Ti; Z=22] 原子は cubic のセンターに存在します。

なお、wobble(i) は無いとし、またスライス面は方位 <001> に鉛直な面とします。



atomic potential に対する第1の入力データファイル (SRTA.DAT):
左上図から次のようになります。

```
3.905      3.905      1.9525
0
38
1.0        0.0        0.0

8
1.0        0.5        0.5
```

← one blank line

← one blank line
← one blank line

atomic potential に対する第2の入力データファイル (SRTB.DAT):
右上図から次のようになります。

```
3.905      3.905      1.9525
0
```

22

1.0 0.5 0.5

← one blank line

8

1.0 0.5 0.0

1.0 0.0 0.5

← one blank line

← one blank line

\$3. Stacking Sequence

- * Multislice function を使うときには、"Stacking Sequence" を入力する必要があります。
- * Stacking Sequence は試料のスライスのペアで、p(xyz) の形式で入力しなければいけません。
- * p は Sequence xyz (x, y, z スライスのペア) の繰り返し数を示す正の整数です。
- * x, y, z は夫々のスライスのシンボルを示し、abcd...xyzABCD...XYZ の順序で使用する約束となっています。
- * Sequence xyz は丸括弧で囲む必要があります。
例えば、12(ab) は、Sequence ab (a, b スライスのペア) の繰り返しを12回行うことを意味します。
- * 最初のスライスの名前は a で、次のスライスの名前は b で、.....、で、abcd...xyzABCD...XYZ の順序で使います。
- * Stacking Sequence の丸括弧は 100 までネスト (nest) することができます。
例えば、5(2(ab)3(ca)) のような具合です。

第2章 コンバージェントビームTEM像

&1. コンバージェントビーム TEM 像のシミュレーションの手順

- 1) autoslice 計算に対する入力データファイル (WWW.XYZ) を作成します。
- 2) 入力データファイル (WWW.XYZ) に対し Probe function を実行し、probeファイル (WWWPRB.TIF) を得ます。
注: Probe function の実行に際しては、データファイル (WWW.XYZ) だけが参照されます。
- 3) 入力データファイル (WWW.XYZ) と probeファイル (WWWPRB.TIF) とに対し Autoslice function を実行し、autosliceファイル (WWWUL.TIF) を得ます。
注: Autoslice function の実行には、数分から数十分かかります。
- 4) autosliceファイル (WWWUL.TIF) に対し Image function を実行し、image ファイル (WWWIMG.TIF) を得ます。

\$2. autoslice に対する入力データファイルのフォーマット

下記のフォーマットを有することが必要です。

One comment line

ax	by	cz			
Z(atom-1)	xpos(1)	ypos(1)	zpos(1)	Occ(1)	wobble(1)
Z(atom-2)	xpos(2)	ypos(2)	zpos(2)	Occ(2)	wobble(2)
Z(atom-3)	xpos(3)	ypos(3)	zpos(3)	Occ(3)	wobble(3)
....
....
Z(atom-j)	xpos(j)	ypos(j)	zpos(j)	Occ(j)	wobble(j)
-1					
Z(atom-1')	xpos(1')	ypos(1')	zpos(1')	Occ(1')	wobble(1')

注:

- 1) Comment lineは1行でなければいけません。
- 2) ユニットセル (unit cell)
 - * ax, by, cz は 試料のユニットセルの値です (単位: オングストローム)。
- 3) Atomic Coordinates Group
 - * 1つ、或いはそれ以上、の Atomic Coordinates Line が存在する必要があります。
 - * Z(atom-i) は、i番目のスライス面の原子の原子番号です。

- * $xpos(i), ypos(i), zpos(i)$ は、夫々、 i 番目のスライス面の原子の X, Y, Z 位置です (単位: オングストローム)。
注: X, Y, Z 位置の値は実値で、reduced coordinate 値ではありません。
- * $Occ(i)$ は、原子の占有率 (occupancy) です。これは、通常、1.0 ですが、1.0未満で 0.0超 の値にも設定できます (詳細については、原書を参照してください)。
- * $wobble(i)$ は、Thermal Phonon をシミュレーションするためのランダム変位の root mean square (rms) 値です (単位: オングストローム)。
- * Atomic Coordinates Group の終わりは、-1 を記述したラインで終了する必要があります。

4) 最後のライン

- * -1 を記述したラインの次にくる $Z(atom-1')$ のラインは、 $Z(atom-1)$ のラインと、 $zpos(1')$ の値を除いて、同じです。
- * $zpos(1')$ の値は、 $zpos(1)$ の値ではなくて、(0,0,0) 原子と (u,v,w) 原子との実距離 (単位: オングストローム) を入れます。
注: スライス面は方位 $\langle uvw \rangle$ に鉛直とします。

\$3. autoslice に対する入力データファイルの例

ダイヤモンド構造を持つ Silicon [Si; Z=14] を例に採ります。
cubic unit cell の大きさは 5.43 (オングストローム) です。
 $wobble(i)$ は 0.076 (オングストローム) とし、またスライス面は方位 $\langle 100 \rangle$ に鉛直な面とします。

入力データファイル (Si100.XYZ):
次のようになります。

```
one unit cell of silicon <100>
5.43  5.43  5.43
14  0.0000  0.0000  0.0000  1.0  0.076
14  2.7150  2.7150  0.0000  1.0  0.076
14  1.3575  4.0725  1.3575  1.0  0.076
14  4.0725  1.3575  1.3575  1.0  0.076
14  2.7150  0.0000  2.7150  1.0  0.076
14  0.0000  2.7150  2.7150  1.0  0.076
14  1.3575  1.3575  4.0725  1.0  0.076
14  4.0725  4.0725  4.0725  1.0  0.076
-1
14  0.0000  0.0000  5.4300  1.0  0.076
```

第3章 共通

\$1. TIFF から Bitmap への変換

本アプリケーションは TIFF から Bitmap への変換の機能を有しています。変換されたビットマップファイルは、本アプリケーションで閲覧することができます。

注:バージョン6 の形式の TIFF ファイルだけが Bitmap へ変換できます。

\$2. その他

指定した方位 $\langle uvw \rangle$ に鉛直なスライス面を作り、それを元にして入力データファイルの作成をする場合、同梱の "マルチスライス・アシスタンス" を使うと便利でしょう。

マルチスライス・アシスタンス を使ったスライス面の原子配列の一例を下記に示します (注: atomic potential と autoslice に対する入力データファイルは示していません)。

Planes perpendicular to $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$

