

EIBis 仕様書

2022 7/27

FH electron optics

概要

EIBis (electron beam and image simulator) は GPU (graphic processing unit) を搭載した Windows PC 専用開発された、透過電子顕微鏡 (TEM および STEM) の、像シミュレーションソフトウェアです。GPU の並列処理演算を利用することで、一般に負荷が高いとされる TEM 像および STEM 像シミュレーション計算が、通常の CPU (中央演算装置) の計算に対して、数十倍~数百倍の速度で計算されます [1]。

EIBis のもう一つの特徴は、TEM 像の干渉性の計算において、収差補正顕微鏡用に拡張された TCC (相互透過係数) [2] を用いていることです。拡張された TCC においては、収差補正された電子顕微鏡の像計算に不可欠な高次収差の影響を、正しく計算に取り込むことが可能です。これにより、超高分解能像に現れる収差によるアーティファクトを試料構造と区別して理解することが可能となります。

仕様

EIBis 動作環境

Windows (7, 8, 10), NVIDIA GPU compute capability 3.0 以上 (RTX シリーズ推奨),
RAM 8GB 以上 (16GB 以上推奨)、モニター (14 インチ以上)
ホイール機能付きマウス (パラメータ制御に使用)

入力パラメータ

試料情報

単結晶試料の場合

ユニットセルサイズ (格子定数)
結晶系指定 (任意)
空間群指定 (任意)

構成原子の種類と位置座標

デバイ因子(B 因子)

サイト占有率

試料厚み

結晶方位

スーパーセルの場合 / 特殊な構造、アモルファス構造、クラスター等

スーパーセルサイズ (ただし、 $\alpha=\beta=\gamma=90.0^\circ$, 空間群は p1 指定)

構成原子の種類と位置座標

デバイ因子(B 因子)

サイト占有率

試料厚みはスーパーセルの z 方向サイズ

計算方位は GUI (グラフィックインターフェース) 上で任意に指定できます。

装置情報

加速電圧

球面収差係数

色収差係数

焦点はずれ量 (不足方向がマイナス符号)

収差補正後の残収差 (非点 (2, 3, 4, 5, 6)、コマ (2 次, 4 次), star, 3-lobe)

光源の角度成分強度分布

光源のエネルギー分布

対物絞りサイズ

照射絞りサイズ

光源の輝度

STEM 検出器配置 (内径、外形、位置)

TEM 像計算

TEM 像計算は、単結晶およびスーパーセル、どちらのタイプも計算できます。単結晶の場合、スライス厚みは Z 方向の等価点間隔となり、スーパーセルの場合は任意のスライス厚みを指定できます。計算の内部手順は以下のようになっています。下記の項目は全て、GPU の並列計算により実行されます。

原子散乱因子
構造因子
投影ポテンシャル（ユニットセルの体積分）
動力的電子回折（FFT マルチスライス計算）
相互透過係数または envelope 関数を利用した結像計算（envelope 計算においても
高次収差を考慮可能）

STEM (CBD 含む) 像計算

STEM 像計算は、スーパーセルに対してのみ適用されます。HAADF（高角度暗視野）像の計算方法は、imaginary potential と frozen phonon の 2 種類から選択できます。
計算の内部手順は以下のようになっています。下記の項目は全て、GPU の並列計算により実行されます。

absorptive form factor
構造因子
投影ポテンシャル
imaginary potential

ビームスキャン領域での以下の計算の繰り返し

frozen phonon を想定した原子位置の揺らぎ配置 / frozen phonon が
指示された場合
ビームの新規入射点配置
動力的電子回折（各スライス層において、ビーム形状および imaginary
potential による散乱強度記録 / imaginary
potential が指示された場合）
検出信号強度記録（各スライス層における弾性散乱成分記録）

出力画像フォーマット

BMP 8Bit グレyscale
Tiff 8bit/16bit グレyscale
Raw 32 bit 浮動小数点データ

その他の項目

Ronchigram の計算

コントラスト伝達関数の計算（奇数対称性収差により発生する虚数部の表示が可能）

単結晶試料の方位ずれを考慮した結像計算

光学系の軸ズレの影響を考慮した結像計算

対物絞りのズレの影響を考慮した結像計算

位相版の効果を取り入れた結像計算

電子ドーズ量を考慮した結像計算

クラスター（スーパーセル）の方位を、自動変化させての連続像計算

緯度、経度マップによるシーケンシャル計算

乱数を利用したランダム方位による計算

アモルファス包埋状態（密度、B factor、原子種類等指定）の計算

4D STEM 機能（ビーム位置に対応した CBD シリーズ保存、任意検出器での STEM 像構成）

4D TEM 機能（ホローコーン照射 TEM 像計算、傾斜ビームに対応した TEM 像シリーズ保存）

CIF ファイル（結晶データ）、および、xyz ファイル(Cluster データ)の読み込みが可能

構成

ソフトウェアおよび関連ファイル類	1 式
ライセンス USB ドングル	1 式

本仕様は、改良等のため予告なく変更される場合があります。

[1] F. Hosokawa, T. Shinkawa, Y. Arai and T. Sannomiya, Benchmark test of accelerated multi-slice simulation by GPGPU, Ultramicroscopy 158, 56-64 (2015).

[2] F. Hosokawa, H. Sawada, T. Shinkawa, T. Sannomiya, Image transfer with partial coherence for aberration corrected transmission electron microscopes, Ultramicroscopy 167, 11-20 (2016).

END

