

***LANDYNE* 蓝带软件**

用户手册

CTFscope

常规和球差校正透射电子显微镜衬度传递函数的动态显示

Copyright 2011-2023 LANDYNE ©

All Right Reserved

1. 引言

用于陶瓷材料、金属合金、半导体系统、高温超导体和生物材料结构研究等新型材料表征，需要具备解释性分辨率达到原子水平的高分辨透射电子显微镜（HRTEM）图像。透射电子显微镜（TEM）应用于获得高分辨率信息涉及物镜像差问题。如果 TEM 得到适当的校准，波动像差主要由物镜的球差引起。为了获得高分辨率图像，必须将由镜头像差引起的不规则相位延迟最小化。

相位对比传递函数或对比传递函数（CTF）描述了 TEM 中的像差如何修改样品的图像 [1~5]。通过将记录的图像视为经过 CTF 降解的对象，描述 CTF 允许对对象进行逆向工程。对于电子显微镜中的高分辨率图像分析，全面理解 CTF 至关重要。在进行球差校正（AC-TEM）研究时，自动校正功能并不总是表现出最佳性能。因此，分析 CTF 对于通过手动控制模式实现最佳分辨率特别重要。除了显微镜操作人员，还涉及 TEM 的研究人员和学生也将极大受益于理解有关 CTF 的内容。

在公共网络中可以下载用于常规 TEM [6~8]和 AC-TEM [9]的 CTF 软件程序。两个程序在近二十年前发布 [6,7]，指令码小程序（script）在 2017 年更新 [8]。然后，Lee 等人[9]开发了扩展 CTF（exCTF）模拟器，用于执行主要和广泛的 CTF 计算，旨在获得比早期报告的软件更多的信息。受先前 CTF 软件的启发，我们开发了 CTFscope，作为常规 TEM 和 AC-TEM 的 CTF 动态显示工具，并具有用户友好的界面。CTFscope 是 Landyne 套件 [10]中的一个组件，可以从参考中列出的网站下载。预计 CTFscope 将通过 CTF 动态模拟显示帮助读者更好地理解仪器性能信息，以及像差参数对 TEM 图像形成的影响。

2. 理论背景与公式

这一部分简要描述了CTFscope中使用的理论背景和计算所采用的公式。作者建议读者参考原始论文和相关书籍以获取更详细的信息[1-5, 11-15]。让我们考虑一个电子透射波穿过样品薄片的情况，

$$q(x, y) = \exp [i\sigma\phi_p(x, y)\Delta z] \quad (1)$$

在这个方程中， σ 代表显微镜加速电压下的相互作用系数。 $\phi_p(x, y)$ 表示样品电势在入射电子束方向上的投影， Δz 表示进行投影的样品厚度。在运用动力学散射近似并考虑“弱相位对象”的情况下，衍射图强度可以表示为：

$$I(u, v) = \delta(u, v) + 2\sigma V(u, v) \Delta z \sin\chi(u, v) \quad (2)$$

其中 $V(u, v)$ 是 $\phi_p(x, y)$ 的傅里叶系数， $\sin\chi(u, v)$ 是 CTF。方程（2）的第一项和第二项分别对应于透射和散射光束。

显微镜特征传递函数包括四个函数的乘积形式，即物镜孔径函数、CTF、部分空间相干函数和部分时间相干函数。考虑一个半径为 R 的圆形孔径。孔径函数可以简单表示为：

$$w(u, v) = \begin{cases} 1, & \sqrt{u^2 + v^2} \leq R \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

其他三个函数将在下面详细说明。

2.1 基本参数下的衬度传递函数[11]

对于常规透射电子显微镜，具备基本参数的 $\chi(u,v)$ 如下所示：

$$\chi(u, v) = \pi[\Delta f \lambda (u^2 + v^2) - 0.5 C_s \lambda^3 (u^2 + v^2)^2] \quad (4)$$

在方程（4）中， Δf 和 C_s 分别对应于物镜的偏焦值和球差系数， λ 是初级电子的波长。散光和其他像差在下一个公式中考虑进去。

2.2 包括高阶像差参数的衬度传递函数 [12]

对于球差校正透射电子显微镜（AC-TEM）， $\chi(u,v)$ 涉及到更高阶的像差因素。复杂坐标 $g=(u,v)$ 可以用复散射角 ω 简单表示，关系如下：

$$\omega = \lambda g \quad (5)$$

λ 在公式（4）中出现。下面的公式+

$$\chi(g) = \frac{2\pi}{\lambda} \chi'(\omega) \quad (6)$$

是一个实函数，因为相空间体积的守恒。使用常见的符号表示法，可以将 χ 关于 $\omega = \lambda g$ 及其复共轭 $\bar{\omega}$ 的幂级数表示为：

$$\begin{aligned} \chi'(\omega) = Re \left\{ \frac{1}{2} \omega \bar{\omega} C_1 + \frac{1}{2} \bar{\omega}^2 A_1 + \omega^2 \bar{\omega} B_2 + \frac{1}{3} \bar{\omega}^3 A_2 + \frac{1}{4} (\omega \bar{\omega})^2 C_3 \right. \\ \left. + \omega^3 \bar{\omega} S_3 + \frac{1}{4} \bar{\omega}^4 A_3 + \omega^3 \bar{\omega}^2 B_4 + \omega^4 \bar{\omega} D_4 + \frac{1}{5} \bar{\omega}^5 A_4 \right. \\ \left. + \frac{1}{6} (\omega \bar{\omega})^3 C_5 + \frac{1}{6} \bar{\omega}^6 A_5 + \dots \right\} \end{aligned} \quad (7)$$

遵循非常古老的惯例，每个系数的指数都是对应光线像差的阶数，而不是波动像差的阶数。因此，例如，偏焦 Δf 和三阶球差 C_s 分别被表示为 C_1 和 C_3 。很明显，方程（4），即常规 TEM 的公式，是上述公式的简化版本。文献中使用了各种标签系统来表示像差系数 [12,13]。

2.3 衬度传递函数的包络函数[14]

入射电子的能量波动以及它们在样品上的聚焦不良会降低电子显微镜的分辨率。由于入射电子能量波动而引起的像差被称为色差，这会导致高分辨率图像中焦点的波动。加速电压和物镜电流的波动都会影响焦点的波动程度，即：

$$\Delta = C_c \left[\left(\frac{\Delta V_r}{V_r} \right)^2 + \left(2 \frac{\Delta I}{I} \right)^2 + \left(\frac{\Delta E}{E} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (8)$$

其中， C_c 是物镜的色差系数。 $\frac{\Delta V_r}{V_r}$ 表示图像获取时间尺度上电压的分数变化， V_r 是考虑了相对论效应对电子质量影响的校正加速电压。 $\frac{\Delta I}{I}$ 是透镜电流的分数变化， $\frac{\Delta E}{E}$ 是电子束能量

展宽与总能量的关系。由于色差引起的散射振幅的衰减效应，即部分时间相干函数，可以表示为：

$$D = \exp\left(-\frac{1}{2}\pi^2\lambda^2\Delta^2(u^2 + v^2)\right) \quad (9)$$

而由于束流聚焦引起的效应，即部分空间相干函数，可以表示为：

$$S = \exp\left(-\pi^2\left(\frac{\alpha}{\lambda}\right)^2\left(C_s\lambda^3(u^2 + v^2)^{3/2} - \Delta f\lambda(u^2 + v^2)^{1/2}\right)^2\right) \quad (10)$$

其中， α 表示束流的聚焦，由有效源在样品上形成的半角度定义。这两个函数被认为是包络函数，限制了散射电子对高分辨率图像的贡献。

2.4 由于漂移引起的衰减包络函数[15]

这里仅考虑连续漂移情况。由于稳定的漂移，在曝光时间T内，假设物体以恒定速度v移动。

$$x_D(t) = vt \quad (11)$$

根据公式（11），可以推导出衰减包络函数如下：

$$M(u, v) = \frac{1}{T} \int_0^T e^{2\pi i(uV_x + vV_y)t} dt = \frac{\sin[\pi(uV_x + vV_y)T]}{\pi(uV_x + vV_y)T} \quad (12)$$

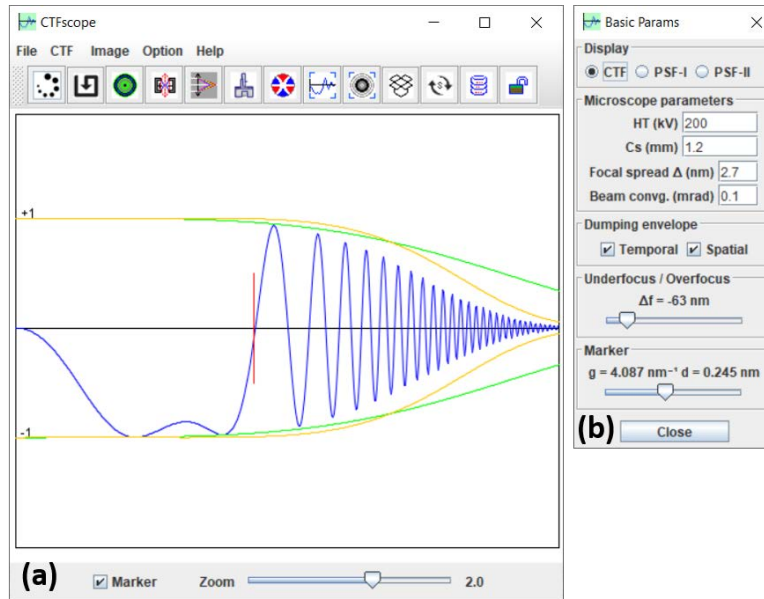


图1. CTFscope的主界面，包括图形面板（a）和用于显微镜设置和光学参数的对话框（b）。

3. CTFscope 的设计与特点

CTFscope是使用Java编程语言开发的。该软件的目的是为不同厂家多种TEM的模拟和动态显示CTF图，这些规格可以在接近特定TEM的实验条件下进行指定。CTFscope为用户提

供了不同仪器和光学参数的即时直观模拟结果。根据这些可编辑的参数值，CTF的一维和二维图形都会立即计算出来。所有参数和模拟结果都使用图形用户界面（GUI）进行显示。

3.1 用户图形界面

图1显示了（a）CTFscope的主要图形界面和（b）基本参数的对话框。用户可以为特定的显微镜设置仪器参数，这可以是商业型号或新的定制型号。这些参数可以保存到或从ASCII文本文件中加载。基本参数包括高压、球差系数 C_s 、焦点展宽值和束流聚焦半角。焦点值可以通过滑块进行调整，还有一个标记可用于方便测量。色差系数 C_c 和计算焦点展宽值的相关参数在图2(a)中的单独对话框中给出。孔径的位置和半径以及连续漂移的参数在图2(b)中给出。除了S5和R5之外的散光和其他高阶像差系数（高达五阶）在图2(c)的附加对话框中提供。每个像差系数（除了实系数 C_5 ）都可以通过两个因素进行控制，即像差的幅度和方位角。参数的标签可以在两套众所周知的标签系统之间切换[12, 13]。

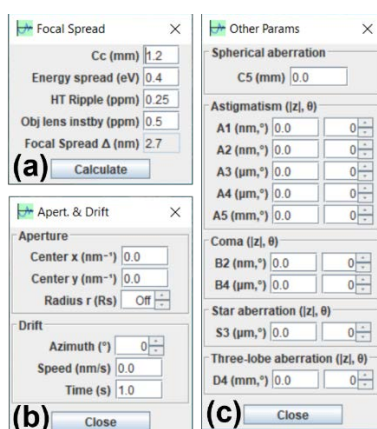


图2. 对话框示例：（a）焦点展宽系数，（b）孔径和连续漂移的参数，（c）散光系数和其他高阶像差系数。

3.2 衬度传递函数模拟

从默认参数计算得到的CTF 1D和2D图形显示在图1(a)和图3中。计算包括了时空相干函数的包络函数。2D图可以以伪彩色和三组灰度方式显示：伪彩色（从0黑到-1绿和1蓝）、灰度I（从0黑到 $|\pm 1|$ 白）、灰度II（从0白到 $|\pm 1|$ 黑）以及灰度III（从-1黑到1白）。圆形标记在图3(b ~ d)中。

计算得到的CTF 1D和2D图形可以保存为各种格式的图像，例如TIFF、JPEG、PNG和GIF。此外，之前计算得到的结果或实验衍射图也可以加载到一个单独的图像框中，与当前的CTF 2D图进行比较。

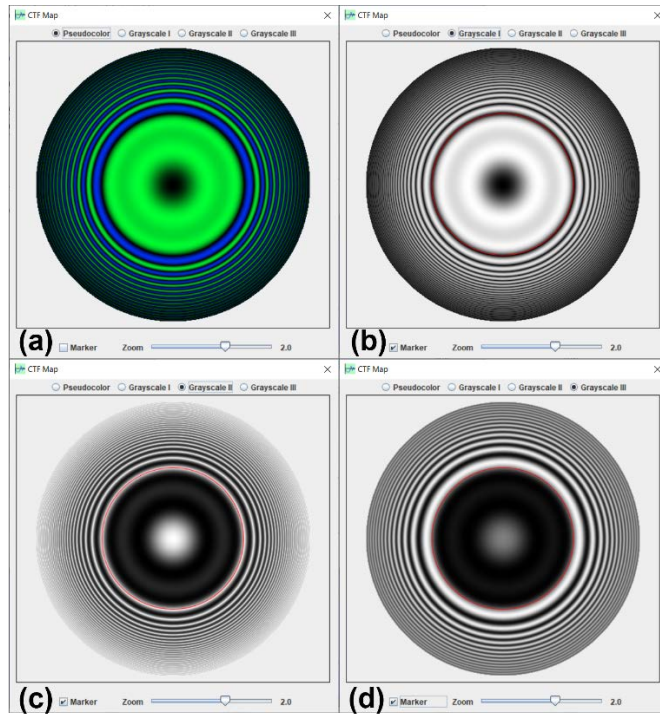


图3. 计算得到的CTF显示面板，包括（a）伪彩色，（b）灰度I（从0黑到 $|\pm 1|$ 白），灰度II（从0白到 $|\pm 1|$ 黑）和（d）灰度III（从-1黑到1白）。圆形标记位于（b~d）之间。

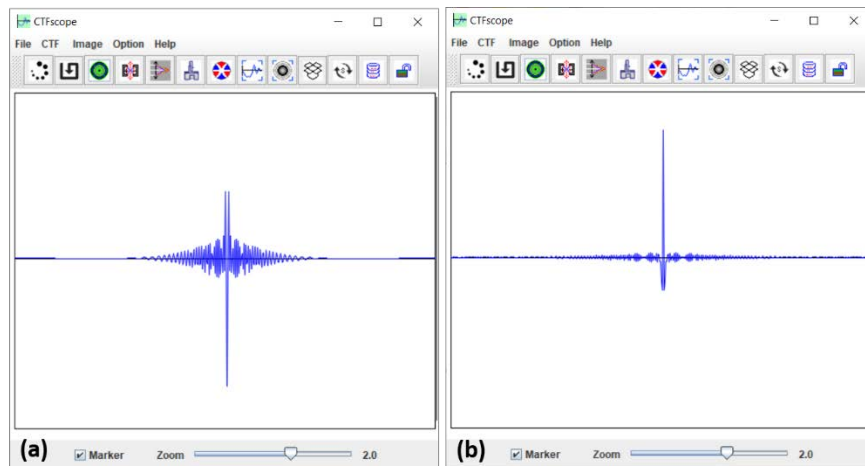


图4. 点扩散函数，是（a）CTF的傅里叶变换和（b） $|CTF|$ 。

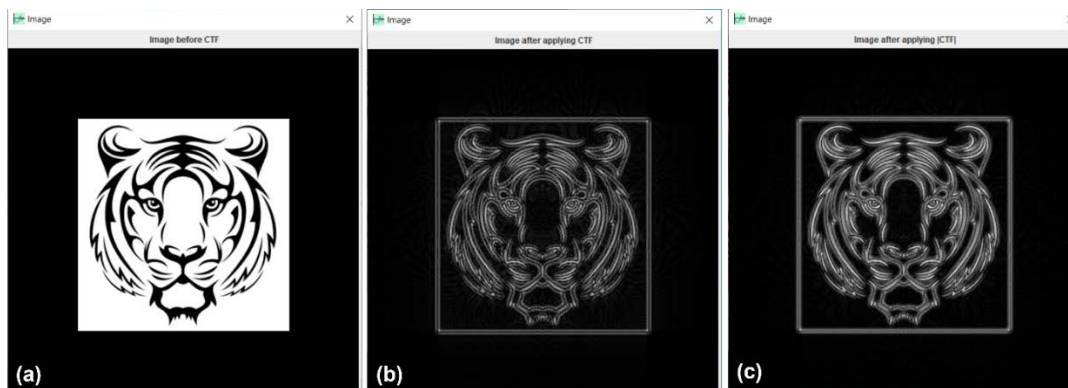


图5. (a) 处理前的原始图像，(b) 使用CTF处理的图像，以及(c) 使用|CTF|处理的图像。

3.3 图像变换

为了教程目的，点扩散函数作为CTF和|CTF|的傅里叶变换提供，如图4所示；可以使用这两种点扩散函数之一在二维模式下加载图像进行处理。示例图像显示在图5中。图4(b)中的点扩散函数相对比图4(a)中的更锐利，而图5(c)中的图像比图5(b)中的更清晰。当CTF参数从无定形区域或层中提取时，可以使用相同的方法增强晶体的实验HRTEM图像，然后再进行晶体学处理。这种策略在Landyne套件中的EMIPAS软件中实现了[7]。

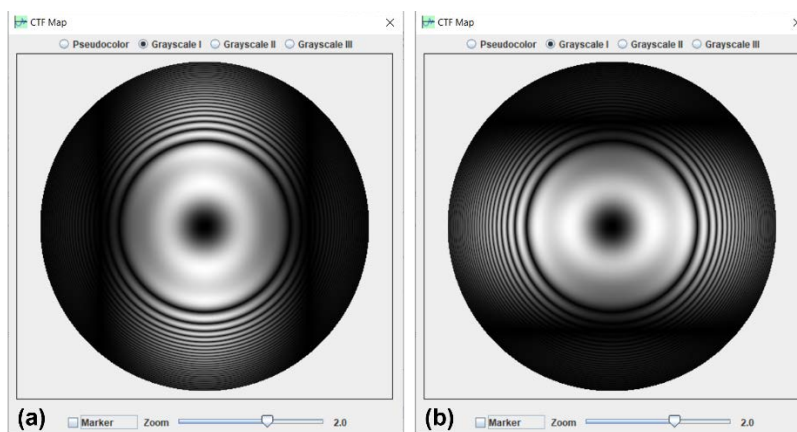


图6. 两个带有连续漂移衰减效应的CTF 2D图，(a) $v = 0.2 \text{ nm/s}$, $t = 1 \text{ s}$ 和方位角 $= 0^\circ$ ，以及 (b) $v = 0.2 \text{ nm/s}$, $t = 1 \text{ s}$ 和方位角 $= 90^\circ$ ；

3.4 连续漂移的影响

现在让我们考虑连续漂移作为一种衰减包络的效应。图6显示了两个带有连续漂移的CTF 2D图，参数分别为 (a) $v = 0.2 \text{ nm/s}$, $t = 1 \text{ s}$ 和方位角 $= 0^\circ$ ，以及 (b) $v = 0.2 \text{ nm/s}$, $t = 1 \text{ s}$ 和方位角 $= 90^\circ$ 。当样品存在漂移时，在TEM实验中的无定形区域可以看到类似的衍射图样。图像上的漂移效应也可以通过在加载图像上应用CTF来进行模拟（未显示）。

孔径对图像的影响如图7所示。当使用小孔径时，例如半径为Scherzer分辨率的一半时，图7(a)的图像会模糊。当使用大孔径，例如Scherzer分辨率的半径时，图7(b)的图像与图4(c)中的图像相似。

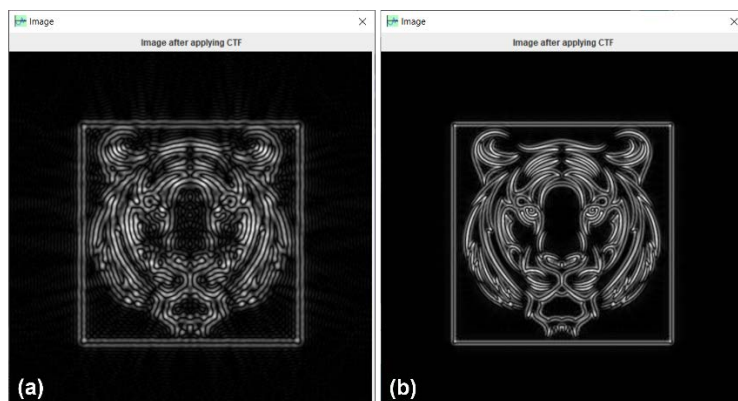


图7. 使用带孔径的CTF处理的图像，（a）孔径半径为Scherzer分辨率的一半，（b）孔径半径为Scherzer分辨率之一。

4. CTFscope 的使用

CTFscope的使用非常简单。如图1(b)和图2所示，参数被分为四个对话框，分别是：(i) 用于CTF计算的主要数据；(ii) 用于补充第一个对话框的数据；(iii) 用于描述孔径和漂移效应的参数；(iv) 用于球差校正透射电子显微镜的高阶像差系数。当参数更新时，CTF、PSF-I和PSF-II曲线会自动更新。衰减包络曲线可以选择显示。孔径和漂移效应也可以视为衰减包络。CTF 1D和2D图形可以分别进行缩放。CTF曲线上有一个标记可供测量。当1D图中进行相同的缩放时，标记也可以仅应用于2D图中。可以加载图像进行比较，或将图像作为样本图像进行CTF和|CTF|转换。所有参数都可以保存到文件中并重新加载。Scherzer焦点可以直接从下拉菜单中计算并应用于焦点滑块。CTF 1D和2D图形可以以各种格式保存到文件中，例如TIFF、JPEG、PNG和GIF。在前面的部分中给出了示例，其中使用了默认值进行计算。这些示例可以视为CTFscope的简要指南。以下两个应用与已发表论文中的图表[9, 12]相关。

5. 应用示例

5.1 示例一

第一个示例是将计算得到的2D图形与参考文献[9]中图1中的实验衍射图进行比较。这些衍射图是从一台标准的200 kV Philips CM200ST显微镜中获取的，该显微镜配备了一个 $C_s = 1290 \mu\text{m}$ 的场发射电子枪。

图 8 展示了使用与参考文献[9]中图 1 相同的参数计算得到的 CTF 2D 图形，分别为（a） $C_1 = -633 \text{ nm}$ ， $A_1 = 0$ ；（b） $C_1 = 0$ ， $A_1 = 308 \text{ nm} / -144^\circ$ ；（c） $C_1 = 0$ ， $A_1 = 85 \text{ nm} / -88^\circ$ ；

(d) $C_1 = -404 \text{ nm}$, $A_1 = 400 \text{ nm} / -53^\circ$ 。计算得到的图像与实验衍射图很好地匹配，但在中央区域存在差异，计算图中较暗，而衍射图中较亮。

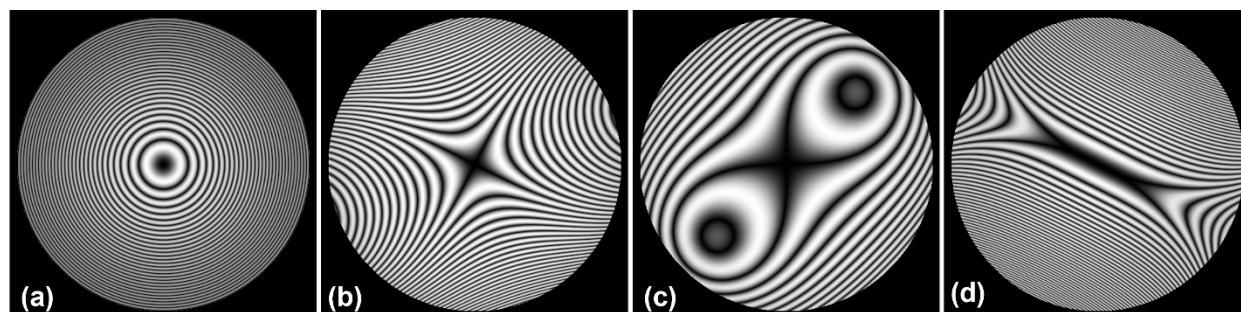
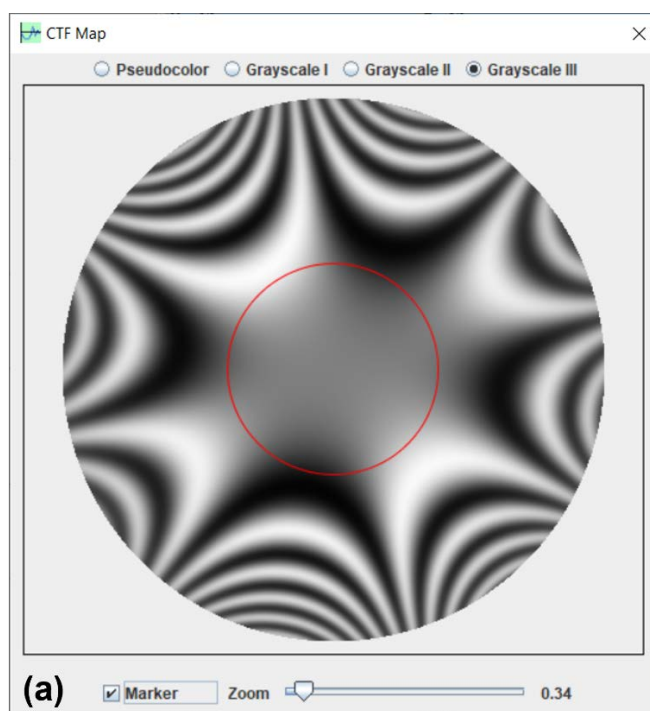


图8. 使用参考文献[9]中图1中相同的参数计算得到的图像。

5.2 示例二

第二个示例是将CTFscope计算的结果与其他软件（例如exCTF）进行比较。参考文献[12]中的图4是基于从AC-TEM设备获得的实验数据进行计算的，与商业GUI程序（CETCOR, CEOS）计算的图像进行了比较。图9（a）显示了使用CTFscope计算的CTF 2D图，使用（b）参考文献[12]图4中的相同像差参数。需要指出的一点是，CTF 2D图中使用了不同的灰度。大多数使用灰度I（0 = 黑色；1和-1都为白色）的CTF 2D图，图9(a)和exCTF使用灰度III（-1 = 黑色，1 = 白色）的CTF图。这些CTF 2D图之间的一致性证实了CTFscope可以为各种TEM设备提供准确的计算和可视化结果。



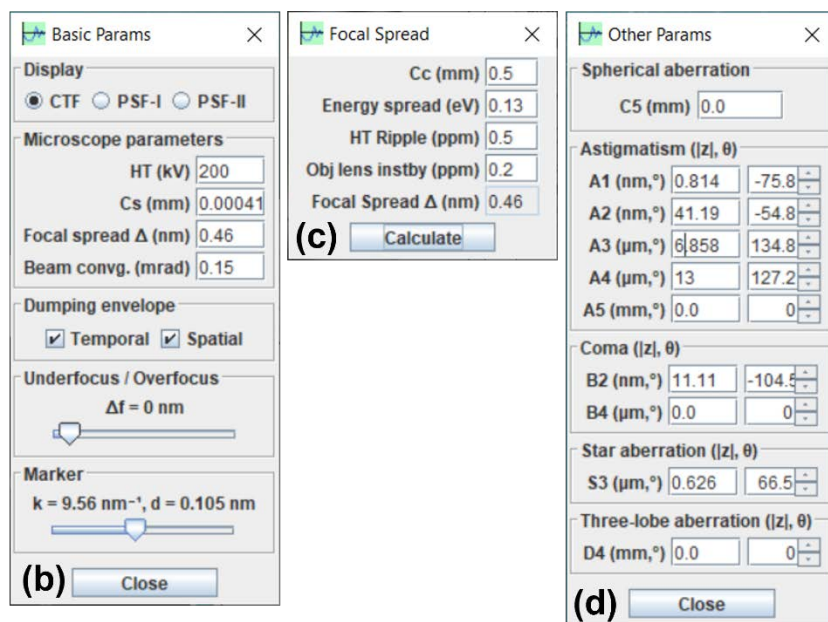


图9. (a) 不带孔径和漂移的CTF 2D图，使用CTFscope计算，使用 (b-d) 与参考文献[12]图4相同的参数。

6. 蓝带软件包的安装

CTFscope是Landyne软件套件的关键组成部分之一，可以从Landyne网站下载：

<https://landyne.com>

在一个文件夹中解压安装文件landyne.z7，例如c:\landyne5\。它包括一组子文件夹，文档文件夹中包含所有软件的用户手册，包括这个软件，而程序文件夹包含可执行文件。为了方便起见，建议创建一个指向landyne.exe的快捷方式并将其移动到桌面上。通过双击landyne.exe启动启动器。

Landyne套件要求Java Runtime Environment版本在JRE 1.8.0以上。图像TIFF格式需要Java Advance Image的支持，例如JAI-1_1_3-LIB.zip，可以在线下载，例如：

<https://www.unl.edu/ncmn-enif/xzli/download/>.

解压后，将jai_core.jar和jai_codec.jar复制到微型计算机的Java系统的JRE文件夹中，例如c:\program files\java\jre1.8.0_31\lib\ext\。

† 在公式 (6) 和 (7) 中，使用的字母与参考文献[12]略有不同，为了与公式 (2) 和 (4) 保持一致。

7. 参考文献

- [1] DB Williams, CB Carter, *High-resolution TEM. In: Transmission electron microscopy*. 2nd ed. New York: Springer, 2009. p. 483 –506.
- [2] JCH Spence, *Experimental high-resolution electron microscopy*, 2nd ed. Oxford U. Press, NY, 1988.
- [3] EJ Kirkland, *Advanced computing in electron microscopy*, Plenum Press, New York, 1998.
- [4] AF De Jong, D Van Dyck, *Ultimate resolution and information in electron microscopy II. The information limit of transmission electron microscopes*. Ultramicroscopy 49 (1993) 66–80.
- [5] R Erni, *High-resolution TEM. In: Aberration-corrected imaging in transmission electron microscopy-An introduction*, 2nd ed. Imperial College Press, London, 2015.
- [6] W Jiang and W Chiu, Web-based Simulation for Contrast Transfer Function and Envelope Functions, Microsc. Microanal. 7 (2001) 329–334. <https://share.streamlit.io/wjiang/ctfsimulation>.
- [7] MV Sidorov, ctfExplorer: Interactive software for 1d and 2d calculation and visualization of TEM phase contrast transfer function. Microsc. Microanal. 8s2 (2002)1572 –1573CD. <http://www.maxsidorov.com/ctfexplorer/>
- [8] DRG Mitchell, Contrast transfer function script (2017). http://www.dmscripting.com/contrast_transfer_function.html
- [9] S. Uhlemann, M. Haider, Residual wave aberrations in the first spherical aberration corrected transmission electron microscope, Ultramicroscopy 72 (1998) 109-119.
- [10] X-Z Li, Landyne: a software suite for electron diffraction simulation and crystallographic analysis (2022). <https://landyne.com>
- [11] D Shindo and K Hiraga, *High-Resolution Electron Microscopy for Materials Science*, Springer (1998).
- [12] S-C Lee, J-M Jeung, S-G Lee and J-G Kim, exCTF simulator: Simulation tool for phase contrast transfer function for aberration corrected transmission electron microscopy, Journal of Analytical Science and Technology 11 (2020) 31.
- [13] M Lentzen Progress in Aberration-Corrected High-Resolution Transmission Electron Microscopy Using Hardware Aberration Correction, Microsc. Microanal. 12 (2006) 191–205.
- [14] M. O’Keefe, “Resolution” in high-resolution electron microscopy, Ultramicroscopy 47 (1992) 282-297.
- [15] Joachim Frank, Detection of Object Movement in the Optical Diffractograms of Electron Micrographs, Optik 30 (1969) 171-178.

附录

Microscope parameters					
Microscope	HT (kV)	Cs (mm)	Cc(mm)	Energy Spread (eV)	Convergence (mrad)
Tecnai 20 ST	200	1.2	1.2	1	1
Tecnai 20 T	200	2	2	1	1
Tecnai 20 UT	200	0.5	1	1	1
Tecnai 30 ST	300	1.2	1.5	1	1
Tecnai 30 T	300	2	2	1	1
Tecnai 30 UT	300	0.7	1.5	1	1
Tecnai F20 ST	200	1.2	1.2	0.7	0.1
Tecnai F20 T	200	2	2	0.7	0.1
Tecnai F20 UT	200	0.5	1	0.7	0.1
Tecnai F30 ST	300	1.2	1.5	0.7	0.1
Tecnai F30 T	300	2	2	0.7	0.1
Tecnai F30 Ut	300	0.7	1.5	0.7	0.1
JEOL 2000EX	200	1	1.2	1	1
JEOL 2010-HR	200	1	1.4	1	1
JEOL 2010-HT	200	1.4	1.8	1	1
JEOL 2010-UHR	200	0.5	1.1	1	1
JEOL 2010F-HR	200	1	1.4	0.7	0.1
JEOL 2010F-HT	200	1.4	1.8	0.7	0.1
JEOL 2010F-UHR	200	0.5	1.1	0.7	0.1
JEOL 3010-HT	300	1.4	2.2	1	1
JEOL 3010-UHR	300	0.6	1.5	1	1
JEOL 3010F-HT	300	1.4	2.2	0.7	0.1
JEOL 3010F-UHR	300	0.6	1.5	0.7	0.1
JEOL 4000EX	400	0.9	1.65	1	1
JEOL ARM-1250	1250	1.6	4	5	2
JEOL HAREM	500	1	1.4	1	1
H8100	200	0.7	1.1	1	1
H9000-UHR	300	0.9	1.5	1	1
HF2000	200	1.2	1.5	1	0.3
Quoted from CtfExplorer Overview by by Maxim V. Sidorov					