

***LANDYNE* 蓝带软件**

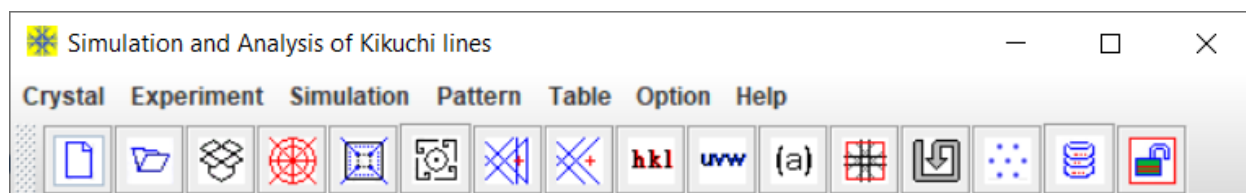
# 用户手册

菊池衍射图的模拟与分析

+ 包含二次衍射效应的选区电子衍射图

蓝带版权 2011-2024 ©

保留所有权利



## 目录

要点概述 .....	4
1. 引言 .....	4
2. 理论背景 .....	5
2.1 菊池衍射图的模拟.....	5
2.2 从三条菊池线对确定精确取向.....	6
2.3 从两条菊池线对确定精确取向.....	8
2.4 菊池衍射图和菊池图.....	11
2.5 二次衍射效应.....	11
3. SAKI 的图形用户界面.....	11
3.1 图形用户界面.....	11
3.2 工具和选项.....	11
4. SAKI 的用法.....	11
4.1 准备新晶体数据.....	12
4.2 菊池衍射图模拟.....	13
4.3 输出做好标签的衍射图.....	13
4.4 加载实验图谱.....	14
4.5 晶体取向的分析.....	15
5. 应用示例 .....	15
5.1 SAED 和菊池衍射图的模拟.....	16
5.2 由三个菊池线对精确测定晶体取向.....	18
5.3 由二个菊池线对精确测定晶体取向.....	19
6. 蓝带软件包中相关软件 .....	19

6.1 SVAT 软件.....	19
6.2 SAED 软件.....	19
6.3 SPICA 软件.....	19
参考文献 .....	20

## 要点概述

- 提供了创建新晶体结构的模板。
- SAKI 可用于模拟菊池衍射图和具有二次衍射效应的 SAED 图。
- 具有用户友好的菊池衍射图和 SAED 图指数标定系统。
- 六角晶系中米勒和米勒-布拉维指数之间进行转换。
- 可直接拖放操作方式加载实验衍射图 (.jpg 和.tif)。
- 对实验衍射图进行对齐/调整大小/旋转/反转。
- 利用三个菊池衍射线对（三个菊池极）或两个菊池衍射线对（单个菊池极）确定晶体相的精确取向。
- 与实验 SAED 图进行比较，以揭示对应二次衍射效应的衍射点。
- 保存模拟衍射图为.tif、.jpg、.png 和.gif 格式。
- 为模拟衍射图添加标签。
- 提供具有分子质量计算功能的元素周期表。
- 提供 230 个空间群的符号和顺序号的表格。

## 1. 引言

选区电子衍射（SAED）分析在材料科学中被广泛应用于相位识别、孪晶解释、共存多相等方面。电子衍射图的模拟在解释实验结果方面起着至关重要的作用。

透射电子显微镜中的选区模式可以产生三种类型的电子衍射图，如表 1 所示。

表 1. 具有平行入射束的透射电子显微镜中的衍射图。

	衍射图	TEM 样品	蓝带软件包
(a)	圆环状 SAED 衍射图	多晶样品	PCED 和 QPCED
(b)	点状 SAED 衍射图	单晶样品	SAED 和 QSAED
(c)	菊池衍射图		SAKI 和 SPICA

表中(b)和(c)情况下的衍射图样通常会在同一衍射图样中出现。菊池衍射图由成对的平行明暗线组成。菊池衍射图来自样品的单晶区域，这个区域较厚（约为最大可用穿透深度的一半），并且缺陷密度较低。

菊池衍射图之所以重要，有以下几个原因[Edington, 1975]:

- (i) 菊池衍射图与 SAED 图相比，可调整晶带轴更准确沿入射电子束方向。
- (ii) 多张菊池衍射图构成了一个菊池图，描述了在立体投影图中一个单位三角形内菊池线的分布情况。可以利用 SPICA 进行模拟菊池图，在显微镜中工作时，指导样品倾斜方法。
- (iii) 它们确定了偏离精确布拉格位置的偏差  $s_g$  的符号和大小。使用了明亮的菊池线及其相关的衍射斑的关系。

- (iv) 它们定义了倾斜的方向，因为菊池衍射图的行为就好像它被固定在晶体底部一样。因此，它的运动方向与晶体相同；也就是说，线条沿着垂直于倾斜轴的方向移动，并朝着向上倾斜的样品的边缘移动。
- (v) 可以估计小角度的倾斜，其中  $\delta = m/L$ ， $m$  是菊池衍射图沿着倾斜轴正常的线性位移； $L$  是相机长度。
- (vi) 可以通过准确识别特定的  $B = g_1 \cdot g_2$  来测量大角度的倾斜。
- (vii) 它们确定了晶体的对称性，因为与点图样不同，菊池衍射图展示了真实的晶体对称性。

SAKI 软件是专为模拟和分析菊池衍射图以及具有二次衍射效应 SAED 而设计的。当前版本是 5x。它是蓝带（Landyne）软件包中用于电子衍射模拟和晶体学分析的关键计算机程序之一。

## 2. 理论背景

当透射电子显微镜（TEM）样品相对较厚但仍主要对电子透明时，非相干散射会对衍射图样产生一个漫射背景。在这个漫射背景上会出现交叉的一组直线。这些就是菊池线，它们可能是明亮的或暗淡的，但非常直并且排列整齐。它们提供了有关样品的重要晶体学信息。在 CBED 图中，菊池线可能比在 SAED 图中更为明显，原因如下：i) CBED 图源自比 SAED 图更小、因此更均匀的样品区域；ii) CBED 中的相干和弹性散射增强。

菊池在 1928 年首次提出简化处理的解释，可以理解菊池衍射图的几何特征的主要特点：这些线是由于电子的衍射产生的，这些电子之前曾被样品非弹性散射过。这些非弹性散射的电子存在于 SAED 图中，既作为传输和强烈的衍射斑周围的漫射光晕，也作为总体的微弱背景强度。由于发生小能量变化的电子比发生大能量变化的电子要多得多，所以漫射光晕的强度随着距离传输光束的增加而减弱。可以用图 1 中的坐标图来描述强度分布。

### 2.1 菊池衍射图的模拟

菊池线在透射电子显微实验中对于精确确定样品取向具有重要作用。菊池线的位置与衍射斑的偏移参数  $s_g$  与矢量  $g$  相关，其关系由以下公式表示：

$$x = \frac{sR}{g^2\lambda}$$

在此公式中：

$x$  代表了从位置  $R$  处的衍射斑到其对应的亮菊池线的距离。 $s$  是一个常数。

$g$  是与衍射斑相关的矢量。 $\lambda$  表示入射电子束的波长。

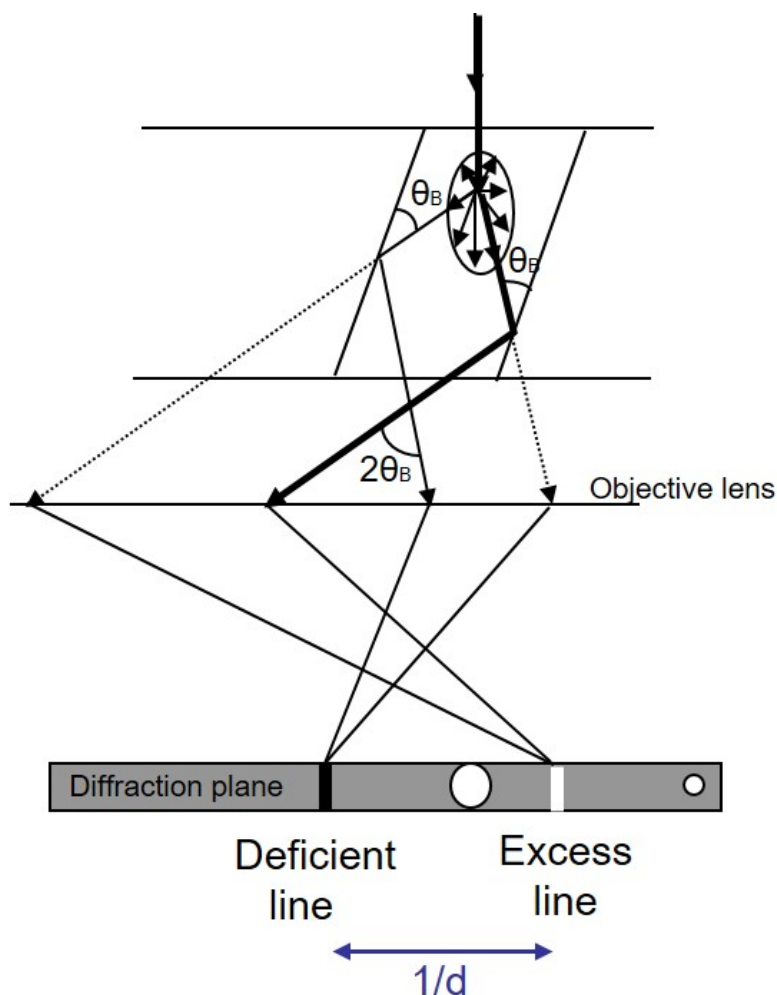


图 1. 单晶电子衍射中菊池线的几何关系。

## 2.2 从三条菊池线对确定精确取向

对晶体取向的分析明确要求在选择区电子衍射 (SAED) 图中存在三对非平行的菊池线对。入射电子束的方向 (OO') 需在图 2 中的菊池极 (A、B 和 C) 的晶带轴，

$$\phi \approx R/L$$

其中，R 为 OA、OB 和 OC 的距离，L 为相机长度。

由于 Ewald 球的内曲率，定指数和晶带轴满足以下条件，

$$(hkl) * [uvw] > 0$$

这里的 (hkl) 指的是每对菊池线对的外线，而 [uvw] 指的是另一菊池极，位于菊池线对的一侧。SAKI 提供了一种逐步分析的方法，晶体的精确取向可以从入射电子束的位置和三个菊池极推导出来。SAKI 分析适用于所有七个晶体系。

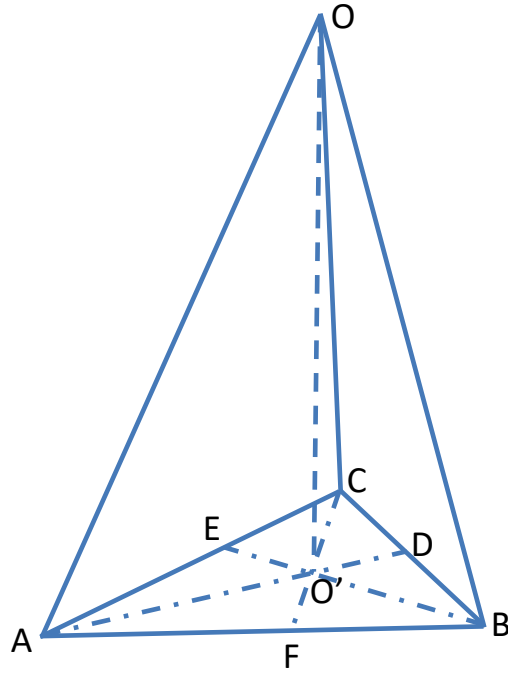


图 2. 入射束 (OO') 和菊池极 (OA、OB、OC) 之间的关系。

方法 1. 分析方程

$$\cos(\Phi_i) = \frac{\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{r}}{|\mathbf{u}_i| |\mathbf{r}|}$$

我们可假设  $|\mathbf{r}| = 1$ , 从三个线性方程可解出,  $\mathbf{r} = [u, v, w]$ .

方法 2. 矢量分析

$$f_1 = \frac{1}{\cos \varphi_1} = \sqrt{1 + \left(\frac{AO'}{OO'}\right)^2}$$

$$f_2 = \frac{1}{\cos \varphi_2} = \sqrt{1 + \left(\frac{BO'}{OO'}\right)^2}$$

$$f_3 = \frac{1}{\cos \varphi_3} = \sqrt{1 + \left(\frac{CO'}{OO'}\right)^2}$$

$$\overrightarrow{OA} = f_1 \frac{OO'}{|u_1 v_1 w_1|} [u_1 v_1 w_1]$$

$$\overrightarrow{OB} = f_2 \frac{OO'}{|u_2 v_2 w_2|} [u_2 v_2 w_2]$$

$$\overrightarrow{OC} = f_3 \frac{OO'}{|u_3 v_3 w_3|} [u_3 v_3 w_3]$$

$$[uvw] = \overrightarrow{OO'} = \frac{O'D}{AD} \overrightarrow{OA} + \frac{O'E}{BE} \overrightarrow{OB} + \frac{O'F}{CF} \overrightarrow{OC}$$

我可以看到, 
$$1 = \frac{O'D}{AD} + \frac{O'E}{BE} + \frac{O'F}{CF}$$

### 2.3 从两条菊池线对确定精确取向

在这里, 我们采用了 Otte、Dash 和 Schaak (1964) 的 ODS 方法以及 Helfmeier 和 Feller-Kniepmeer (1977) 的 HF-K 方法, 用于通过两组独立的菊池线对来确定入射束相对晶体的取向。

在这两种方法中, 假设菊池线对已经标定, 并且已确定了入射束和菊池线对的位置。

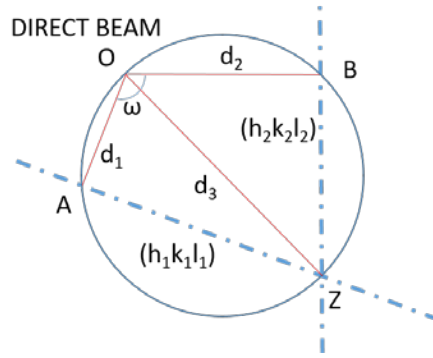


图 3.展示了 ODS 方法菊池线对的分析过程。其中虚线画出衍射平面  $(h_1k_1l_1)$  和  $(h_2k_2l_2)$  的迹线。

首先介绍 ODS 方法: 如图 3 所示, 分别绘制了来自平面  $(h_1k_1l_1)$  和  $(h_2k_2l_2)$  的两条迹线, 分别标记为 AZ 和 BZ, 它们交汇于 Z 点, 即为取向轴。现在, 点 OAZB 位于一个圆上, 因此有以下结论:

$$OI = d_3 = (d_1^2 + d_2^2 - 2 d_1 d_2 \cos \omega)^{1/2} / \sin \omega \quad (1)$$

其中,  $d_1$ ,  $d_2$ , 和  $\omega$  是 OA, OB 和  $\angle AOB$ , 该图已经被重新绘制并重新标记, 以便更容易比较这两种方法。原始论文中公式 [1] 的小错误已经得到了纠正。

如果有效的相机长度为  $L$ ,  $d_1$ ,  $d_2$ , 和  $d_3$ , 对应于小角度 (因为  $L \gg d$ , 一般小于  $5^\circ$ )  $\sin \chi_1 \approx \chi_1 = d_1/L$ ,  $\sin \chi_2 \approx \chi_2 = d_2/L$ ,  $\sin \chi_3 \approx \chi_3 = d_3/L$ . 这是分别对应以下两方向的角度, OA 和  $\hat{p} = [h_1k_1l_1]$ , OB 和  $\hat{q} = [h_2k_2l_2]$ ,  $\hat{k}$  和  $\pm (\hat{p} \times \hat{q}) \parallel \hat{r} = [h_3k_3l_3]$  这里  $\hat{k}$  是衍射图的法线。 $\hat{p}$ ,  $\hat{q}$ ,  $\hat{r}$  和  $\hat{k}$  都单位矢量。



我们有

$$\hat{\mathbf{k}} = e_1 \hat{\mathbf{p}} + e_2 \hat{\mathbf{q}} + e_3 \hat{\mathbf{r}} \quad (2)$$

其中

$$e_1 = \frac{\sin \chi_1 - \sin \chi_2 \cos \delta}{\sin^2 \delta}, \quad (3)$$

$$e_2 = \frac{\sin \chi_2 - \sin \chi_1 \cos \delta}{\sin^2 \delta}, \quad (4)$$

$$e_3 = (\sin^2 \delta - \sin^2 \chi_1 - \sin^2 \chi_2 + 2 \cos \delta \sin \chi_1 \sin \chi_2)^{1/2} / \sin \delta, \quad (5)$$

$$\cos \delta = \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{q}}, \quad \sin \delta = |\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{q}}| \quad (6)$$

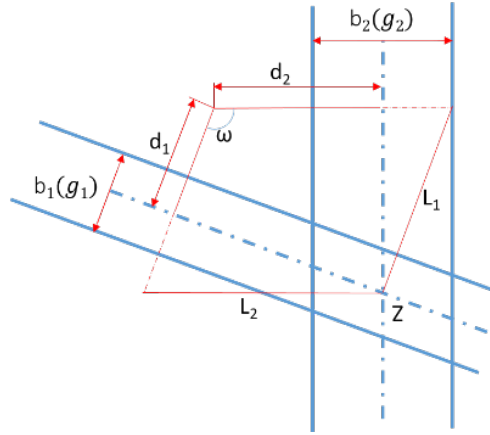


图 4. 展示了 HF-K 方法菊池线对的分析过程。

下面介绍 HF-K 方法: 从  $\mathbf{g}_1$ ,  $\mathbf{g}_2$ , and  $\mathbf{Z} = \mathbf{g}_1 \times \mathbf{g}_2$  构成的三角锥做出如下推导. 为与 ODS 方法比较, 我们定义  $\hat{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{g}_1}{|\mathbf{g}_1|}$ ,  $\hat{\mathbf{q}} = \frac{\mathbf{g}_2}{|\mathbf{g}_2|}$  和  $\hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{Z}}{|\mathbf{Z}|}$ . 入射束的反向  $\hat{\mathbf{k}}$  可在(7)式中给出

$$\hat{\mathbf{k}} = \hat{\mathbf{r}} - L_1 f_1 \hat{\mathbf{p}} - L_2 f_2 \hat{\mathbf{q}} \quad (7)$$

其中,  $L_1$  和  $L_2$  是图 4 中平行四边形的边长,  $f_i$  ( $i = 1, 2$ ) 是将测得的距离转化为角度的因子。该图已经被重新绘制并重新标记, 以便更容易比较这两种方法。从图中测量的唯一数据是两对菊池线的间距,  $b_1$  和  $b_2$ , 以及它们之间的角度 ( $\omega$ )。对于  $L_1$  和  $L_2$  的解析解为

$$L_1 = \frac{d_1 - d_2 \cos \omega}{\sin^2 \omega} \quad (8)$$

$$L_2 = \frac{d_2 - d_1 \cos \omega}{\sin^2 \omega} \quad (9)$$

转换因子可以用如下公式计算

$$f_i = \tan \left[ 2 \arcsin \left( \frac{g_i}{2k} \right) \right] / b_i, \quad (10)$$

这里  $g_i$  是倒易点阵矢量的长度,  $k = 1/\lambda$ ,  $\lambda$  是入射束的波长。

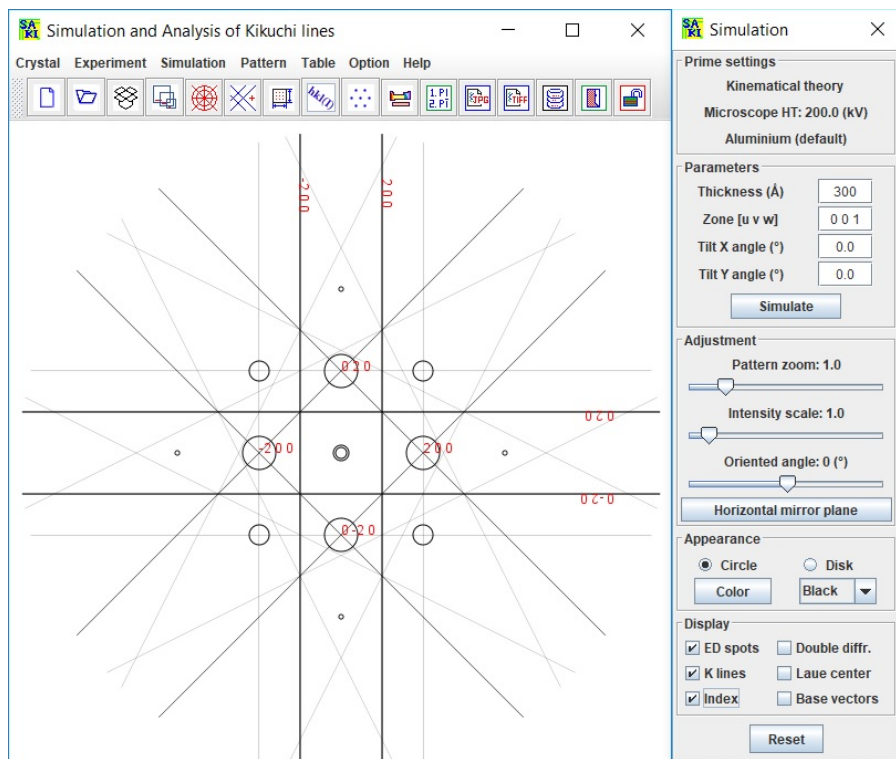


图 5. SAKI 主要面板的快照。其中显示了铝[001]的模拟菊池衍射图。

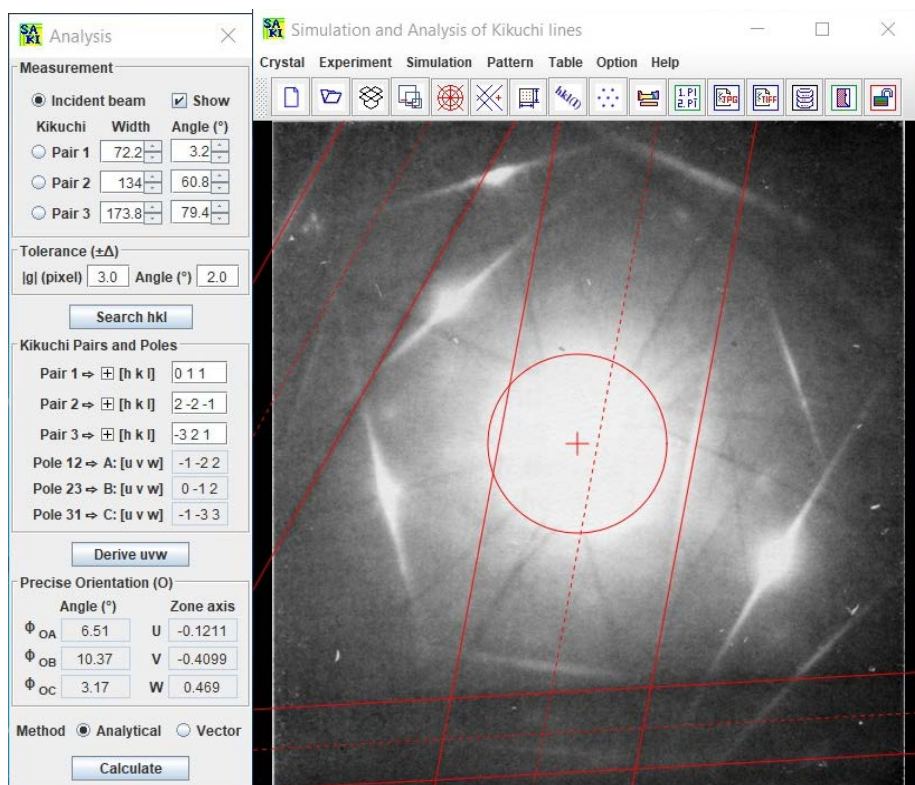


图 6. SAKI 主要面板的快照，其中镁的实验菊池衍射图为例。

## 2.4 菊池衍射图和菊池图

菊池图是由不同入射电子束位置下获取的菊池衍射图拼接而成，这些位置对应于立体投影图的单位三角形相应的位置。所有菊池线相连接，形成单位三角形的“道路”图。我们可利用 SPICA 软件模拟菊池图。

## 2.5 二次衍射效应

当透射电子显微镜（TEM）样品足够薄时，只需考虑单次散射就足以解释实验结果。否则，需要使用多次散射动力学来分析实验结果。二次衍射是一个简化的模型，电子在离开样品之前经历了两次衍射。它要求第一次衍射的电子束作为第二次衍射的入射束。大多数 TEM 样品足够厚，使电子可以经历多次衍射，特别是当  $s \approx 0$  时。详细计算时，动力学理论是不可避免的。然而，一些多次衍射的方面可以通过简单的几何考虑和运动学理论来理解 - 例如，禁衍射斑的发生以及两个晶体颗粒之间的相互作用。SAKI 处理了第一种情况。其核心思想是，经过衍射的电子会作为第二次衍射的入射束。

## 3. SAKI 的图形用户界面

### 3.1 图形用户界面

SAKI 的主界面是一个包含菜单、工具栏和计算对话框面板的框架，如图 5 所示。SAKI 的第二个主界面是一个包括一个实验选区电子衍射（SAED）图和一个分析对话框面板，如图 6 所示。菜单提供了更多的文本描述，并且以组的形式组织，而工具栏以图形形式显示，易于访问。菜单和工具栏的大部分功能是相同的；只有一些功能仅在工具栏中提供。

### 3.2 工具和选项

除了上面展示的主界面之外，还提供了各种工具和选项，以协助模拟和分析过程。可以使用模板准备新的晶体数据文件，如图 7 所示。实验衍射图可以进行调整大小、旋转和对齐处理。精确的取向可以用区轴的角度和合理的指数来表示。可以使用强度作为阈值显示斑点和菊池图的标定指数。米勒指数和米勒-布拉维指数可以相互转化。可以设置输出区域并以 .jpg 或 .tif 格式保存。还提供了元素周期表和空间群列表。

## 4. SAKI 的用法

SAKI 是使用 Java 编写的，但部分代码仅适用于安装了 Microsoft Windows 的个人电脑。因此，Landyne 套件需要在 JRE 1.8.0 以上的 Java 运行环境。SAKI 是 Landyne 软件套件的一个关键组件，可以从 Landyne 网站下载：

<https://landyne.com>

在选定的目录中解压安装文件 landyne5.z7，然后双击执行 landyne.exe。按以下步骤使用 SAKI，首先加载结构数据并设置输入参数，然后在模拟控制面板中单击“模拟”按钮。

- i) 可以在显示屏上隐藏图形工具栏。
- ii) 可以使用模板创建新的晶体数据文件。
- iii) 可以在菜单文件系统中加载晶体数据文件。
- iv) 可以在菜单文件系统中加载 JPEG 或 TIFF 格式的实验衍射图，也可以直接使用鼠标拖放加载。
- v) 可以使用实验衍射图中的三个菊池线对推导出晶体精确的取向。提供两种方法：解析方程和矢量分析。
- vi) 在模拟对话面板中单击“模拟”按钮以选区电子衍射图和菊池衍射图，进行调整大小和旋转，选择外观以及其他显示选项。
- vii) 可以分别对选区电子衍射图和菊池衍射图进行指数标定。
- viii) 可以使用六角晶系对话面板转换米勒和米勒-布拉维指数。
- ix) 最终结果可以以 JPEG 或 TIFF 格式的图像保存。

#### 4.1 准备新晶体数据

新结构数据文件可以使用图 7 中对话框准备。该对话框为用户提供了自动助手，并确保满足文件格式的要求。模板内嵌有 Hermann-Mauguin 符号的 230 个空间群，这些空间群列在国际晶体学表中。然而，在单斜晶系中只会使用 b 唯一轴。两种原点选择可以作为输入参数，但选择 2 将被转换为选择 1。要保存数据结构，请单击“保存”按钮；要创建新的数据结构，请单击“新建”按钮。

图 7. 晶体数据录入模板的快照，包括标准和非标准形式空间群。

晶体文件还可以从以前的数据进行修改或从晶体学信息文件（CIF）进行转换。如果使用的是三斜晶系、单斜晶系和正交晶系空间群的另一种设置的数据文件，请单击“备用设置（1~74）”。提供了一个工具，用于将非传统符号的文件转换为标准符号。

## 4.2 菊池衍射图模拟

在模拟中使用了运动学衍射理论。可以在“模拟”菜单中调整模拟的基本参数，例如高电压、图案缩放和强度比例。在加载了用于模拟的结构数据并设置了厚度、晶带轴和倾斜角度之后，通过点击“模拟”按钮生成一个新的衍射图。可以通过改变其他参数来调整图。使用取向和镜像操作来将模拟图定向以匹配实验图并生成各种孪晶。可以以开放或实心圆圈以及各种颜色查看衍射图。可以显示动力学或二次衍射图。可以为基本倒易矢量和按强度级别选择的衍射斑标上标定指数。基本矢量和劳埃中心可以显示和隐藏。

## 4.3 输出做好标签的衍射图

这些模拟图与实验图一起做为输出图保存，同时做好标签。图 8 显示了（a）感兴趣区域、（b）指数标定、（c）晶带轴和（d）标签工具。图 9 显示了一个准备保存为.tif、.jpg、.png 或.gif 格式的模拟图区域内的图像。

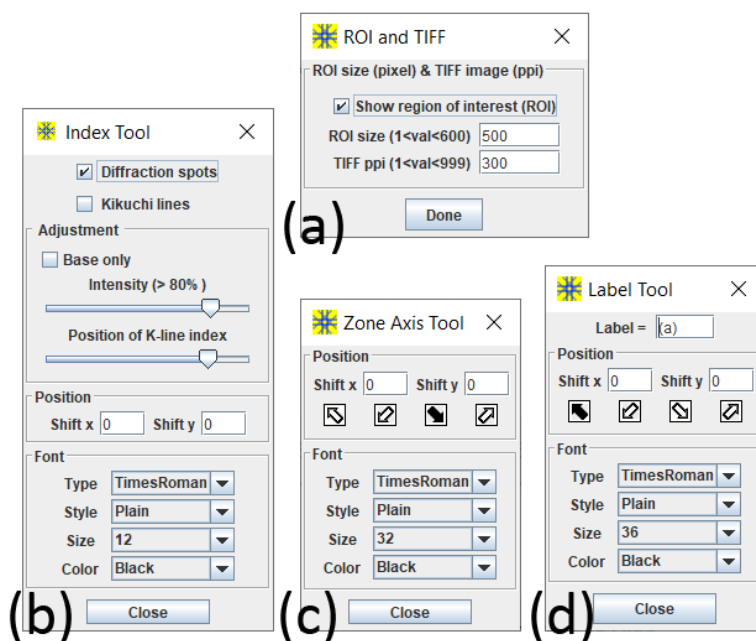


图 8. 标记模拟衍射图的调整工具快照。

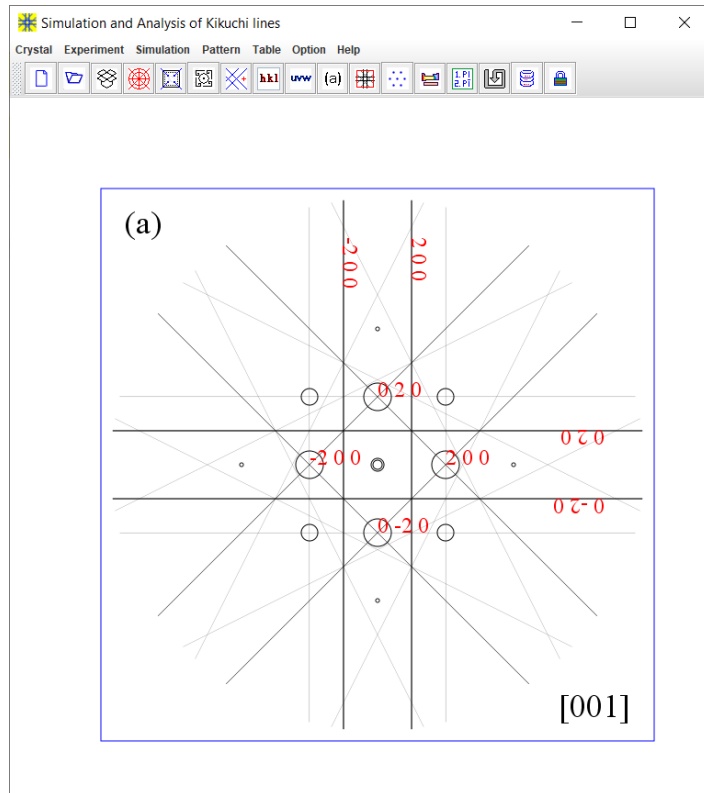


图 9. 带有标签的模拟衍射图的快照。

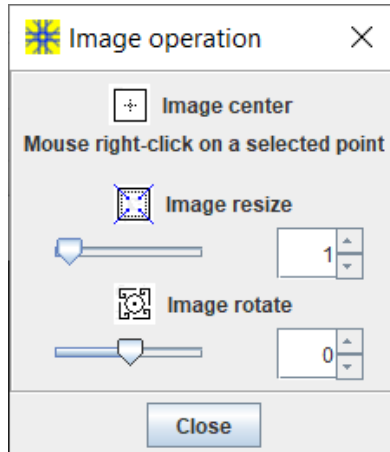


图 10. 图像操作的窗口快照，包括校准、调整大小和旋转。

#### 4.4 加载实验图谱

可以通过 MS-Windows 文件系统或拖放操作加载实验衍射图。图 10 显示了对衍射图的三种调整操作。对于校准，让我们通过鼠标指针在图像上选择一个点，并右键单击将选择的点带到屏幕中心。调整大小和旋转操作会改变图像，但保持选择的点不变。可以在调整大小和旋转后的图像上进行新的校准。



#### 4.5 晶体取向的分析

SAKI [Li, 2020a] 可以用于确定实验衍射图案的标定指数和晶带轴，以及使用三个菊池线对确定晶体精确取向，前提是它属于已知的晶体结构。图 6 显示了分析对话框面板。

步骤 1. 利用倒空间标尺测量实验图上的比例尺：使用衍射图缩放调整校准圆，然后将其锁定。

步骤 2. 在分析对话框面板中，选择入射束（默认）或菊池线对 1、对 2、对 3，并勾选显示框。使用鼠标调整宽度、方向和位置。

步骤 3. 定义宽度容差值（默认 3 像素）和角度容差值（ $2^\circ$ ），将可能的指数保存到文件中，然后搜索适当的标定指数。

步骤 4. 晶带轴由菊池线对的输入指数生成的。

步骤 5. 可以通过角度表示精确的取向，或者以有理数表示晶带轴。六角晶系的米勒-布拉维指数可以使用可选工具进行转换。

步骤 6. 可以通过简单选择选项来在模拟 SAED 衍射图上添加二次衍射效应。

### 5. 应用示例

菊池衍射分析在导论部分列举了各种应用。以下提供了一些应用示例。

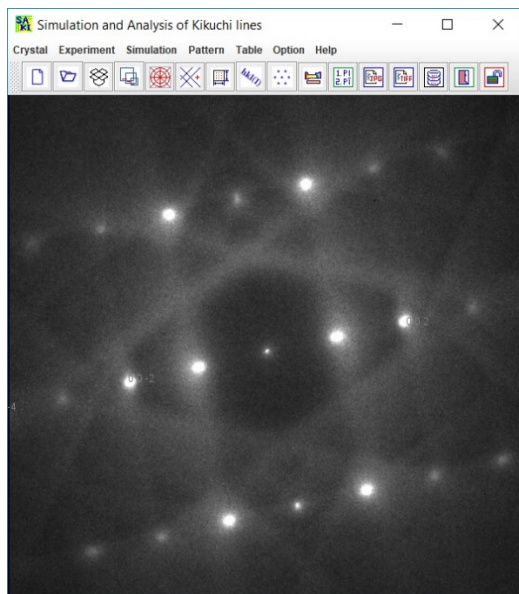


图 11. 在 SAKI 的显示面板中显示的  $\text{Cr}_3\text{Ge}$  相的实验 SAED 图。

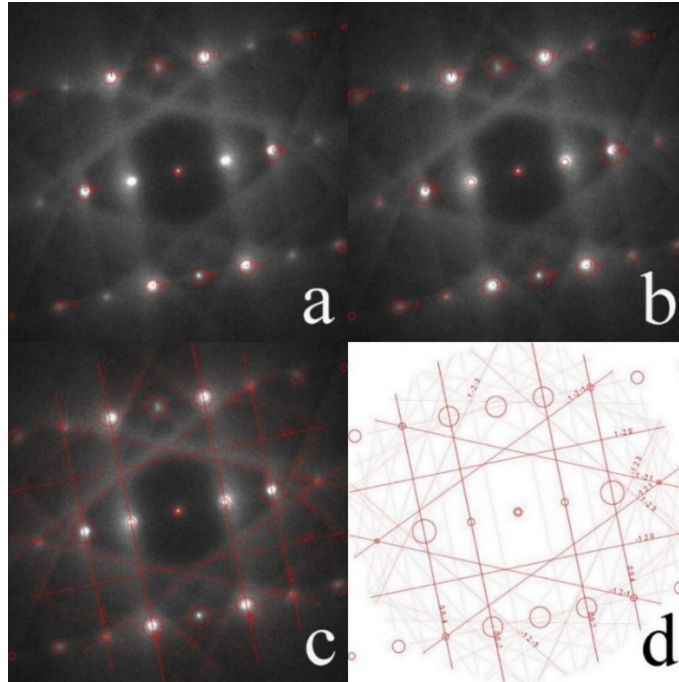


图 12. (a) 用运动学衍射理论模拟 SAED 图，(b) 模拟具有二次衍射效应的 SAED 图。(c) 在实验图上的模拟菊池图，(d) 仅为了清晰度而显示的模拟图。

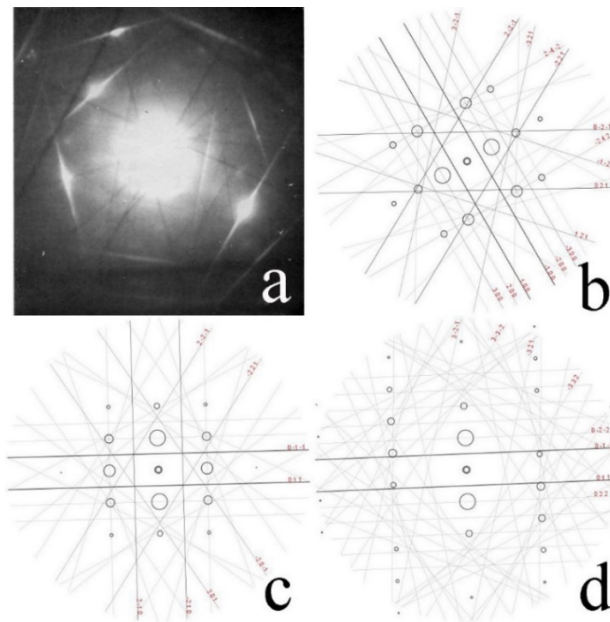


图 13. (a) Edington 书中的复杂 Mg 实验衍射图。(b-d) 沿着晶带轴 $[0 -1 2]$ ， $[-1 -2 2]$ 和 $[1 3 -3]$ 的三个模拟菊池衍射图。

### 5.1 SAED 和菊池衍射图的模拟



在 CoFeCrGe Heusler 合金中发现了  $\text{Cr}_3\text{Ge}$  相[Jin, Li, Sellmyer 2018]。图 11 展示了  $\text{Cr}_3\text{Ge}$  相的实验衍射图。确定了其晶带轴为  $[210]$ 。图 12 展示了(a)在运动学衍射中的模拟 SAED 图, (b) 具有二次衍射效应的 SAED 图, (c) 加在实验图上的模拟菊池衍射图, (d) 仅用于清晰度而显示的模拟图。

另一个示例取自 Edington 的书（1975 年）第 23 页图 2.28(a)，显示了 Mg 样品的复杂菊池衍射图。分别沿着所有三个菊池极进行了模拟图的计算，其中显示了晶带轴和菊池线对如何与实验图匹配，如图 13 所示。在计算中，假设显微镜的高压为 100 千伏，使用了 Mg 相的晶体结构，为 hcp,  $P6_3/mmc$ ,  $a = 3.1094 \text{ \AA}$ ,  $c = 5.2108 \text{ \AA}$ 。

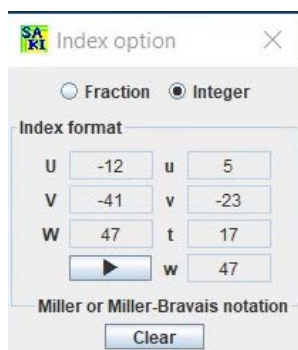


图 14. 用于选择分数和整数指数以及将米勒指数转换为米勒-布拉维指数的选项。

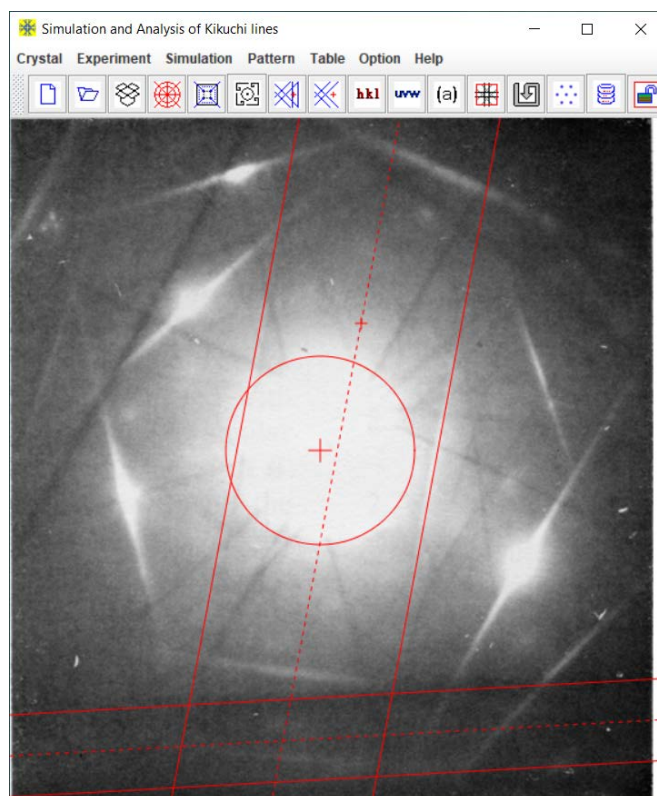


图 15. SAKI5 的主面板上显示了一个实验菊池衍射图。已经定义了入射束的位置，以及两对独立菊池线的位置、宽度和方向。

## 5.2 由三个菊池线对精确测定晶体取向

从 Edington 的书（1975）中取得的 Mg 菊池衍射图的分析如图 6 所示，包括参数和结果。结果列在表 2 中，以与 SAKI 进行比较。图 14 显示了六角晶系的分数和整数指数选项，以及将米勒指数转换为米勒-布拉维指数的选项。由于在 Edington 的书和 SAKI 中菊池线对测量的准确性，结果略有不同。

图 16. SAKI5 中用于测量菊池衍射图并精确确定晶体取向的操作对话框。分别展示了(a) ODS 方法和(b) HF-K 方法的应用选项。

表 2. Edington 的书和 SAKI 软件的测定结果比较

Analysis	$\Phi_1$	$\Phi_2$	$\Phi_3$	[u v t w]
Edington's book	3.1°	11.1°	6.5°	[1, -6.024, 5.04, 13.98]
SAKI (measured values)	3.17°	10.37°	6.51°	See next two rows
SAKI (analytical method)	3.11°	10.36°	6.48°	[-0.1211, -0.4099, 0.4690]
SAKI (vector method)	3.15°	10.32°	6.57°	[-0.1197, -0.4104, 0.4699]

### 5.3 由二个菊池线对精确测定晶体取向

晶体取向的确定也使用了 ODS 方法和 HF-K 方法。图 15 展示了 SAKI5 的主图形界面，包括一个实验性的衍射图。图 16 展示了分析对话框，包括了 ODS 方法(a)和 HF-K 方法(b)的选项。结果显示在图 16 对话框的下部。计算出的角度也与相应的测量角度一并列出。如表 3 所示，两种方法得到的结果与使用三个菊池线对获得的先前结果一致，从而确认了这两种方法的实用性。

表 3. ODS 和 HF-K 方法的测定结果和平均值

Method	U	V	W	$\Phi_c (^{\circ})$	$\Delta\Phi (^{\circ})$
ODS	-0.1213	-0.4117	0.467	2.94	0.13
HF-K	-0.1376	-0.3995	0.4628	3.45	0.38
Average	-0.1295	-0.4056	0.4649	3.11	0.04

由于在每次测量中，入射束和菊池线对的位置存在测量误差，所以在两种测量中，入射束和吉口极之间存在轻微的角度差异。比较两种方法，ODS 方法计算的角度 ( $2.94^{\circ}$ ) 略小于测量的角度 ( $3.07^{\circ}$ )。HF-K 方法计算的角度 ( $3.45^{\circ}$ ) 略大于测量的角度 ( $3.07^{\circ}$ )。然而，当将两种方法得到的区轴[U V W]进行平均时，计算得到的角度 ( $3.11^{\circ}$ ) 非常接近测量得到的角度 ( $3.07^{\circ}$ )，如表 3 所示。

## 6. 蓝带软件包中相关软件

蓝带软件包中的所有软件组件都使用相同格式的输入结构数据。以下列出了其中的一些，可以与SAKI结合使用。用户可以查看每个软件的用户手册以获取详细信息。

### 6.1 SVAT 软件

SVAT [2020b] 是一个晶体结构显示和分析工具。

### 6.2 SAED 软件

SAED [Li, 2019] 可以从多个晶体文件中模拟斑点SAED图，以便进行比较或模拟具有固定取向的各种孪生体和共存结构。SAKI用于精确定向的分析，而SAED用于确定晶带轴。可以将SAKI和SAED视为彼此的扩展。

### 6.3 SPICA 软件

SPICA [Li, 2016] 是立体投影分析工具，并具有用于使用TEM台进行样品定向调整的应用程序。SPICA可用于生成菊池图。

## 参考文献

- Edington, J. W., Practical Electron Microscopy in Materials Science, Monograph Two: Electron Diffraction in the Electron Microscope. Philips, 1975.
- Helfmeier H. and Feller-Kniepmeer M., Analytical Determination of the Exact Primary Beam Direction from Kikuchi Patterns. J. Appl. Phys. 48 (1977) 3997.
- Jin, Y.L., Li, X.Z. and Sellmyer, D.J., A new tetragonal phase in CoFeCrGe Heusler alloy, Mater. Charter. 136 (2018) 302-309.
- Kuo, K.H., Ye, H.Q. and Wu, Y.K., Application of Electron Diffraction Pattern in Crystallography (in Chinese), Science Press, Beijing, 1983.
- Li. X.Z., SPICA - Stereographic Projection for Interactive Crystallographic Analysis. J. Appl. Cryst. 49 (2016) 1818-1826.
- Li. X.Z., On precise determination of crystal orientation with Kikuchi pattern, Journal of Materials Education, 42:1-2 (2020a) 97-104.
- Li. X.Z., SVAT4 – a computer program for crystal structure visualization and analysis J. Appl. Cryst. 53(2020b) 848-853.
- Li. X.Z., SAED3: simulation and analysis of electron diffraction patterns. Microscopy and Analysis, May issue (2019) 16-19.
- Liu, W.X., Huang, X.Y. and Chen, Y.R., Electron Microscopy Analysis on Material Structures (in Chinese), Tianjin University press, 1989.
- Otte, H.M., Dash, J. and Schaak, H.F., Electron Microscopy and Diffraction of Thin Films : Interpretation and Correlation of Images and Diffraction Patterns. Phys. Stat. Sol. 5 (1964) 527-549.
- Thomas, G. and Goringe, M.J., Transmission Electron Microscopy of Materials, John Wiley & Sons, 1979.