

***LANDYNE*** <sup>+</sup>

**蓝带软件** <sup>+</sup>

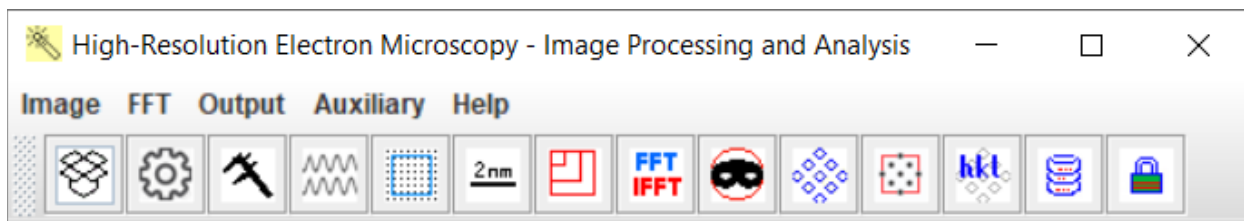
# 用户手册

高分辨率透射电子显微镜图像处理与分析

第一部分：普通应用

Copyright 2011-2024 LANDYNE ©

All Right Reserved



## 目录

要点概述 .....	3
1. 引言.....	3
1.1 蓝带软件包.....	3
1.2 图像处理与分析.....	3
2. 图形用户设计与特点.....	4
2.1 图形用户设计.....	4
2.2 功能特点.....	4
3. 使用介绍.....	6
3.1 HRTEM 像加载 .....	6
3.2 选择部分图像输出.....	7
3.3 系列强度轮廓线.....	7
3.4 FFT and IFFT 处理.....	8
3.5 衍射指数标定与添加标尺.....	11
3.6 高分辨透射电子显微镜图像的结晶相识别.....	11
3.7 色谱图与衬度调整.....	11
3.8 处理后图像输出.....	12
4. 示例.....	12
4.1 Fe <sub>5</sub> CoTi 合金的 HRTEM 像 .....	12
4.2 CoSi 纳米颗粒 FFT 图 .....	13
4.3 碳纤维的 HRTEM 观察.....	14
5. 安装.....	15
5.1 计算机系统要求.....	15
5.2 软件安装和许可文件.....	15

## 要点概述

- 选择实验 HRTEM 图的区域、调整大小和旋转的便捷工具。
- 测量比例尺并应用于所选图像、FFT 图和逆 FFT 图。
- 可检索并比较 HRTEM 图上的一系列强度轮廓线。
- 任意长度的正方形和内接圆，用于 FFT。
- 用于逆 FFT 图像的各种滤波工具。
- 为处理后的图像和 FFT 图添加比例尺和指数标定的工具。

## 1. 引言

### 1.1 蓝带软件包

蓝带软件包是由李兴中博士于 2010 年开发的软件包，用于电子衍射模拟和晶体学分析。这个软件包可以作为研究工具和教学辅助工具使用。当前版本包括十五个独立的软件组件 [1-13]。每个组件都设计用于模拟、分析或数据处理中的一个应用主题。软件包提供了一个启动器，用于方便地访问所有软件组件。可执行代码、用户手册和一组晶体结构数据可在作者的网页 <https://landyne.com> 和 <https://www.unl.edu/ncmn-enif/xzli/computer-programs> 上获得。表格 1 显示了蓝带和蓝带+软件包中的组件。

表格 1：蓝带 Landyne 和蓝带 Landyne+软件包中的组件

Software	Description of components in the Landyne suite	Reference
PTELS	Periodic table of the elements for the Landyne suite	[2]
SVAT	Structural viewer and analytical tool including atom cluster and layer.	[3]
SPICA	Stereographic projection for interactive crystallographic analysis.	[4]
SAED	Simulation and analysis of electron diffraction (spot) patterns.	[5]
PCED	Simulation of PCED (ring) patterns and phase identification.	[6]
QSAED	Processing, quantification, and analysis of SAED (spot) patterns.	[7]
QPCED	Processing, quantification, and analysis of SAED (ring) patterns.	[8]
HOLZ	Simulation of HOLZ pattern including dynamical correction.	[9]
SMART	Simulation and measurement of rocking curve for crystal thickness.	[10]
SAKI	Simulation and analysis of Kikuchi lines and double diffraction effect.	[11]
TEMUC	Lattice determination of unknown structure in TEM/ED experiments.	[12]
ESPOT <sup>+</sup>	Electrostatic potential maps derived from electron diffraction patterns.	[10]
CTFscope <sup>+</sup>	CTF simulation and visualization for conventional and AC-TEM.	[13]
EMIPA <sup>+</sup>	HRTEM image processing and analysis	[10]
EMCIP <sup>+</sup>	HRTEM image crystallographic image processing	[10]

### 1.2 图像处理与分析

电子显微镜图像处理与分析分为两部分，一部分用于常规图像处理，另一部分侧重于晶体学图像处理。图像处理的核心是快速傅里叶变换（FFT）技术。

FFT是一种算法，用于计算序列的离散傅里叶变换（DFT）及其逆变换（IDFT）。詹姆斯·库利（James Cooley）和约翰·图基（John Tukey）独立重新发现了早期的这些算法。他们在1965年发表了一个更通用的FFT，适用于N是复合数而不一定是2的幂次方。布卢斯坦（Bluestein）在1968年给出的FFT算法，通常称为 chirp z 算法，是通过将DFT重新表达为线性卷积来计算任意大小（包括素数大小）的离散傅里叶变换（DFT）。布卢斯坦的FFT算法在电子显微镜图像处理与分析中被用于离散傅里叶变换（DFT）。

在EMIPA中，实验图像可以调整大小和旋转。可以选择图像的一部分并以新的比例尺保存。可以得到系列线段的强度轮廓线，并可扫描图像中强度峰值的位置数据。多种用于FFT和IFFT处理的滤波器。可以使用辅助工具为FFT图添加标定指数。在EMCIP中，可以使用晶体学图像处理来增强实验图像。包括一个对比度传递函数，用于校正FFT数据中的晶体学相位。实验电子衍射强度可以用来替换FFT数据中的衍射强度。图像可以使用预构建的17个平面对称群进行处理，并以赝彩色图像和等值线图显示。

本手册是关于EMIPA部分的。

## 2. 图形用户设计与特点

### 2.1 图形用户设计

EMIPA 的图形用户界面（GUI）是使用 Java Swing 编写的。图 1 显示了带有下拉菜单和图形工具栏菜单的主面板。菜单包括：i）图像（加载图像、调整大小/旋转图像、卡尺、FFT 区域和退出）；ii）工具（线剖面 and 图像峰值的位置）；iii）FFT（FFT、滤波器和逆FFT）；iv）输出（ROI、FFT 指标、比例尺和保存）；v）选项（显示选项和像素每英寸）；vi）辅助（隐藏工具栏、外观设置）；vii）帮助（当前驱动序列号和版本）。工具栏菜单包括下拉菜单中最常用的操作。

### 2.2 功能特点

EMIPA 简化了准备电子显微图像的过程，

- i) 图像可以用鼠标移动，所选点位于面板中心，并在保持图像点位于面板中心的情况下调整大小和旋转。

- ii) 可以测量原始图像中的比例尺，然后重新设置新比例尺的长度，并将其重新定位到图像的选定区域。图像可以保存为 JPG, PNG 和 TIFF 格式的文件。

- iii) 可以从图像上的选定线段生成一系列强度轮廓线。可以扫描图像上的强度峰分布数据。

EMIPA 提供了常规的 FFT/IFFT 处理过程，以增强电子显微图像，

i) 可以选择任意长度（不限于各种 2 的幂次方）的正方形区域与正方形区域内接的圆形区域。使用圆形区域可以用于改善 FFT 图，防止由于边界效应产生的长条纹。圆形区域还可用于纳米颗粒的电子显微镜图像。

ii) 在校准原始图像中的比例尺之后，可以将比例尺添加到 FFT 图中。可以使用辅助工具添加索引。FFT 图案可以保存为 TIFF 格式的文件。

iii) 为逆 FFT 变换提供了各种滤波器。这些滤波器包括类似孔径的内圆、外圆、圆形带、穿过入射光的条带、镜像对称的一对圆盘以及一系列圆盘。逆 FFT 图像可以以赭彩色显示，并可以贴回到原始图的所选位置。

iv) 圆盘阵列滤波器与 FFT 图案的两个基本矢量相关，这对矢量可用于在 FFT 图上添加衍射指数标定，并可添加单胞到逆 FFT 图上。图 2 显示了带有一个类似孔径的圆形滤波器的 FFT/IFFT 面板示例图。提供了各种输入、输出和操作的对话框。我们将在下一部分中说明如何使用这些对话框。

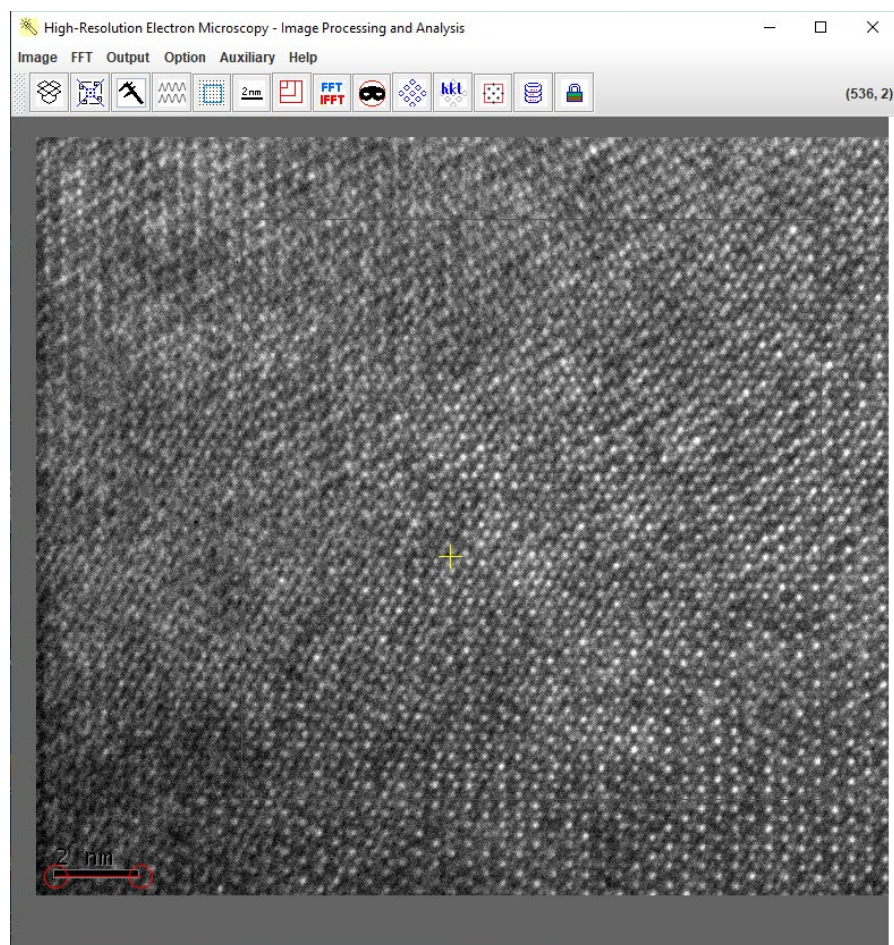


图 1：EMIPA 的图形用户界面（GUI），带有下拉菜单和工具栏菜单。  
面板显示了一个电子显微镜图示例。

### 3. 使用介绍

对于未获得许可的 EMIPA 用户，将显示许可证文件对话框，如图 2 所示。点击"Explore"以使用演示文件进行评估，或者点击"Volveré"，在西班牙语中表示"我会回来"。

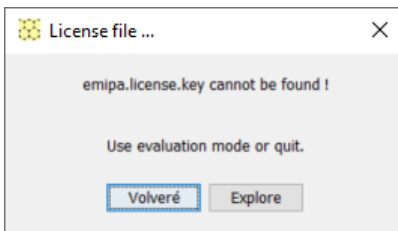


图 2：当许可证文件丢失时，许可证对话框会出现。在这种情况下，用户可以使用软件包中的 IPA\_demo.tif 文件进行评估。

#### 3.1 HRTEM 像加载

HRTEM 图像可以通过拖放方法或下拉式文件系统加载。如果图位于实验文件夹中，用户可以直接使用文件系统加载图像；否则，拖放方法更加方便。

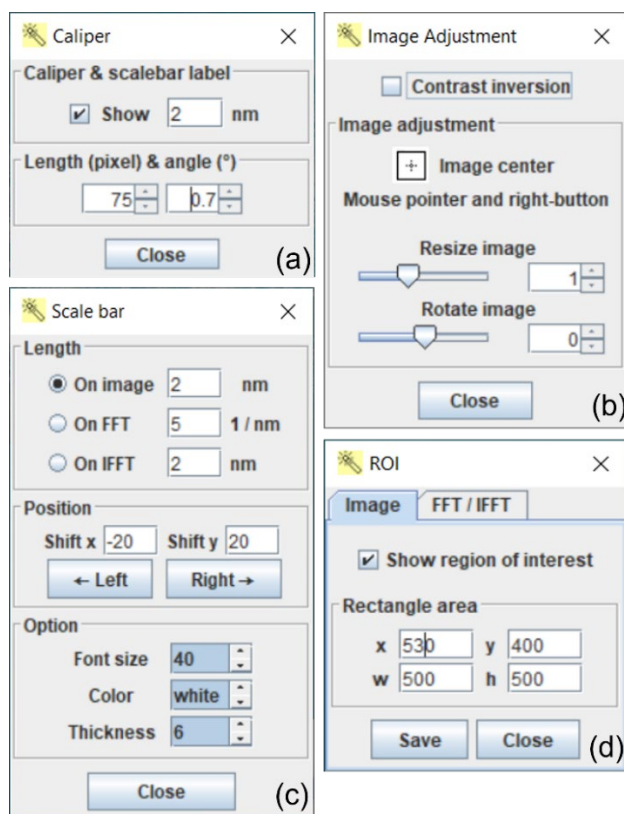


图 3：图像操作工具（a）卡尺，（b）调整工具，（c）比例尺和（d）兴趣区域（ROI）。



图 3 显示了图像操作工具，（a）卡尺，（b）调整工具，（c）比例尺和（d）兴趣区域（ROI）。图像的比例尺需要通过卡尺测量，以便校准图像的长度。图像调整对话框可用于对图像进行对比度反转、平移、调整大小和旋转。

EMIPA 可用于从实验 HRTEM 图像中准备用于 EMCIP 的图像。EMCIP 专注于晶体图像处理，但不包括这些基本处理功能。

### 3.2 选择部分图像输出

图像的对比度可以反转，图像上的所选点可以通过鼠标指针和右键单击轻松地移动到面板中心。当调整图像大小和旋转时，图像面板中心的点位置将保持不变。

作为示例，图 1 中的图像被旋转，使得图像中的线状图像点与垂直边缘平行，并在图像上标记了一个兴趣区域（ROI）。对比度反转对话框被用于增强图像的对比度。比例尺被测量以校准图像长度，并且一个新的比例尺被添加到 ROI 中。所选的区域被保存为 TIFF 图像，如图 5 所示。

### 3.3 系列强度轮廓线

图 6 和图 7 中的实验 HRTEM 图是在  $\text{Mn}_2\text{RuSn}$  Heusler 合金中拍摄的[14]。可以比较或测量图像的一系列强度轮廓线。图 6（a）显示了线剖面对话框，图像上标有蓝色、绿色和红色的三条线，相应的线扫描剖面显示在图 6（b）和（c）中。

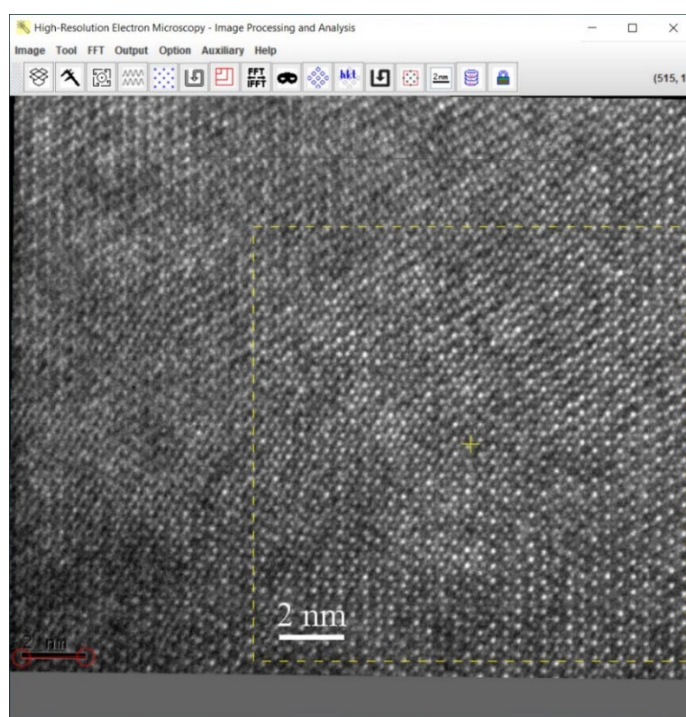


图 4：图像稍微旋转以进行对齐和校准比例尺。一个区域被选择并准备输出。

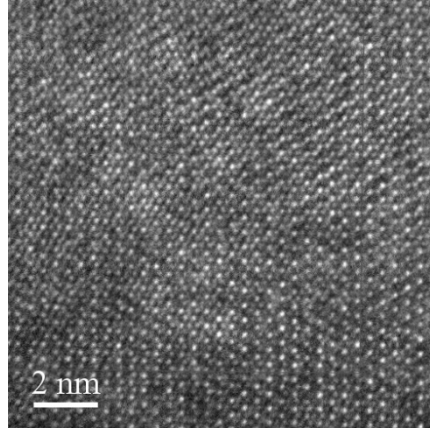


图 5：从图 4 中取出一个区域，并将其保存为 TIFF 图像。

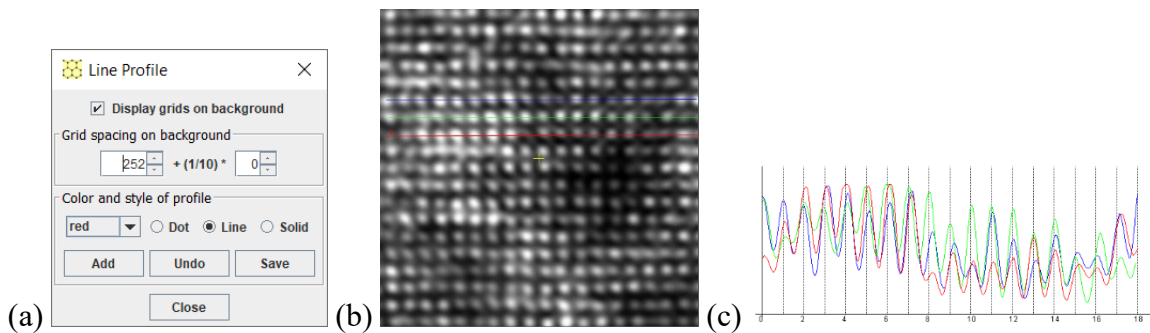


图 6：（a）图像上的轮廓线分析工具，（b） $\text{Mn}_2\text{RuSn}$  Heusler 合金 HRTEM 图和（c）线扫描强度轮廓线。

从图中可以扫描出一组图点，如图 7（b）所示。周期性的圆阵列被分配到图像上，圆内的峰值位置被定位，并在图 7（b）中显示为蓝色点。

### 3.4 FFT and IFFT 处理

一个边长任意长度（不限于 2 的幂次方）的正方形区域将用于 FFT 变换。可以通过按住鼠标的左键并拖动鼠标指针来确定长度。区域的位置可以通过点击鼠标的左键来替换。在正方形区域内的一个圆形区域是进行 FFT 变换的选项。图 8 显示了 FFT 区域对话框。

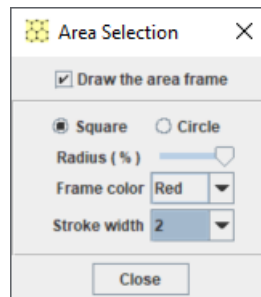


图 7：FFT 区域选择对话框。



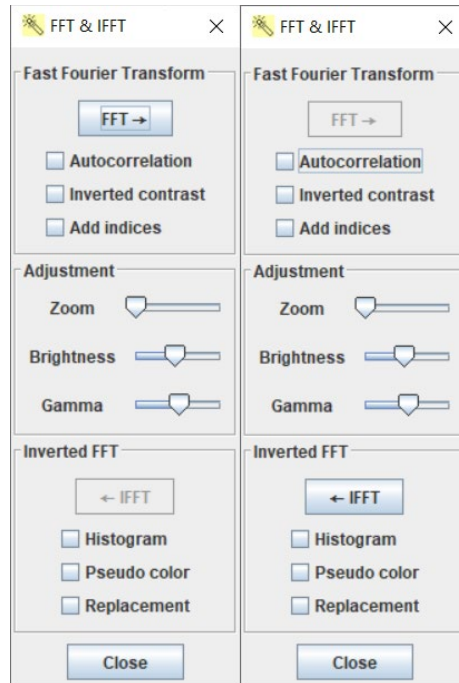


图 8：FFT 和 IFFT 对话框。可以进行调整操作。

图 8 显示了 FFT 和 IFFT 对话框。FFT 面板上实现了自相关、对比度反转和指标；IFFT 面板上实现了晶胞显示、伪彩色和替代。缩放、亮度和伽马调整操作在 FFT 和 IFFT 面板上都可用。显然，FFT 操作必须在 IFFT 操作之前进行。在执行 IFFT 操作之后，可以重新执行 FFT 操作。所选区域位于原始 HRTEM 图中的区域。图 9 是从图 1 的 HRTEM 图像中获得的 FFT 图，以及 FFT 图上的圆形滤波器。

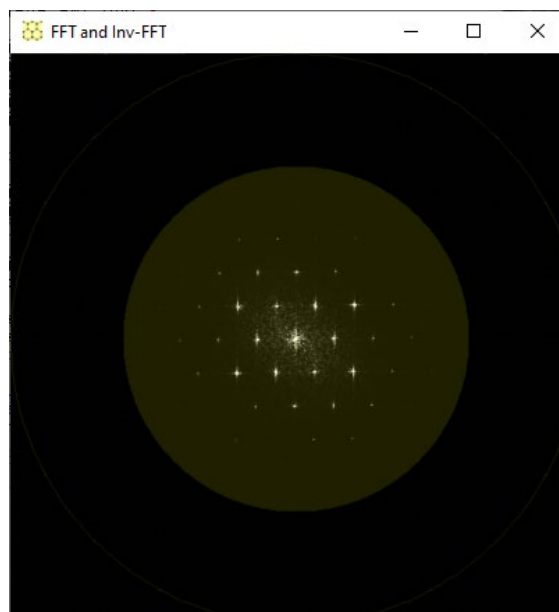


图 9：来自图 1 的 HRTEM 图的 FFT 图和一个圆形选区。

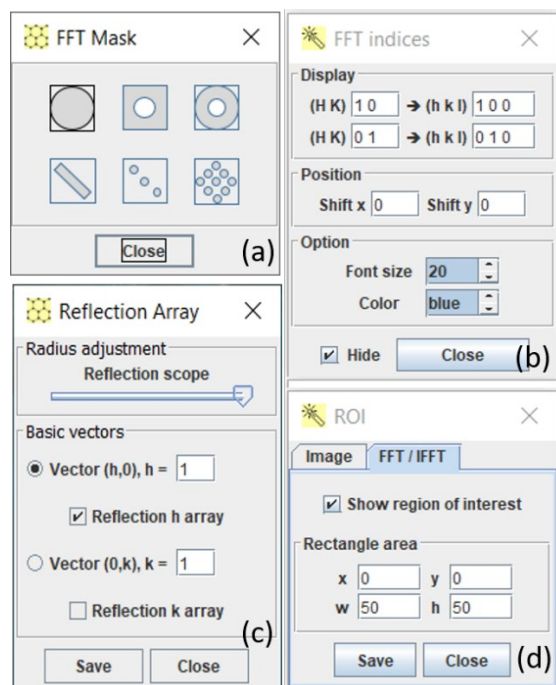


图 10: (a) 用于 IFFT 操作的各种 FFT 滤波器和用于衍射图的两个基本矢量, (b) FFT 图的指标, (c) 滤波孔径组的构建, 以及 (d) 图像和 FFT/IFFT 面板的感兴趣区域对话框。

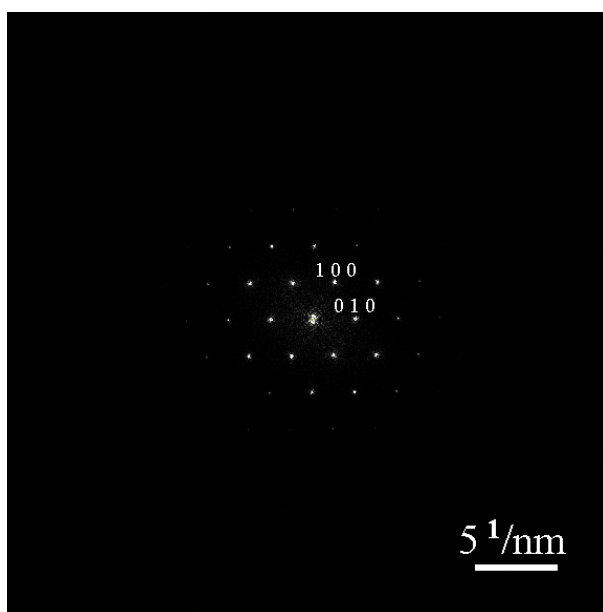


图 11: 带有两个基本指数和比例尺的 FFT 图案的输出。

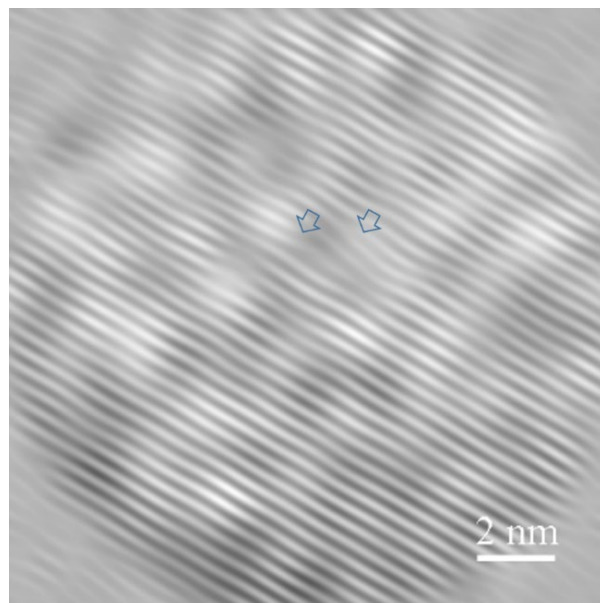


图 12：使用具有一对反射的掩模的 IFFT 图。箭头指出了两个位错核心。

IFFT 操作需要在 FFT 操作之后应用 FFT 滤波器。图 10 (a) 中显示了六种 FFT 滤波器。可以使用鼠标滚轮或箭头键调整大小，可以使用鼠标指针定义标记的位置。默认选择是第一个圆形孔径。最后一个是由两个基本矢量定义的滤波孔径组，如图 10 (c) 所示。可以通过放大 FFT 面板并使用具有较高指数的反射位置来更精确地定义这两个基本矢量。它们还为图 10 (b) 中的指数位置提供了基础。

### 3.5 衍射指数标定与添加标尺

图 3 (d) 和图 10 (d) 显示了感兴趣区域 (ROI) 的对话框。用户可以在原始图像、FFT 图和 IFFT 图上定义 ROI 的大小和位置。当选择 ROI 时，可以添加比例尺。在将更新后的比例尺添加到图像或 FFT 图以进行输出之前，必须使用卡尺校准原始图的比例尺。ROI 内的图或 FFT 图可以保存为 TIFF、PNG、JPEG 和 GIF 格式。

图 11 显示了带有指标和比例尺的 FFT 输出的示例。图 12 显示了使用一对反射的 IFFT 图的示例。输出中清楚地显示了两个位错，并在其上标有箭头。

### 3.6 高分辨透射电子显微镜图像的结晶相识别

假设从一个晶态相中拍摄了一张高分辨透射电子显微镜图像，该相是多个可能相中的一种。

1. 使用卡尺工具校准比例尺条;
2. 选择一个区域进行快速傅里叶变换 (FFT) 并获取 FFT 图案;
3. 在 FFT 图案上添加比例尺条;
4. 使用 SAED6 找到晶轴和结晶相。

### 3.7 色谱图与衬度调整

一个色谱图工具可用于处理 IFFT 图像。可以使用均衡化算法进行对比度调整。图 13 显示了色谱图工具的界面。图 14 显示了 IFFT 图像和经过对比度增强处理的图像。

### 3.8 处理后图像输出

感兴趣区域（ROI）的对话框显示在图 3(d)和图 10(d)中。用户可以在原始图像、FFT 图和 IFFT 图像上定义 ROI 的大小和位置。当选择 ROI 时，可以添加比例尺。在将更新后的比例尺添加到图像或 FFT 图案以进行输出之前，必须使用卡尺对原始图像的比例尺进行校准。ROI 内的图像或 FFT 图可以保存为 TIFF、PNG、JPEG 和 GIF 格式。

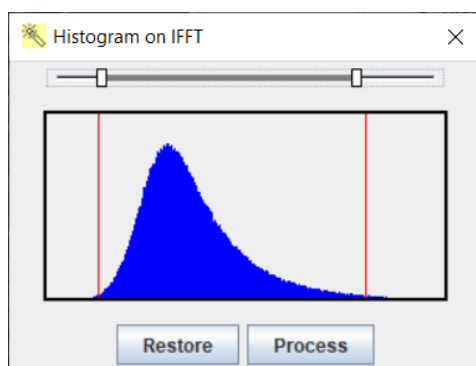


图 13. IFFT 图像的色谱图和使用均衡化算法进行对比度调整。

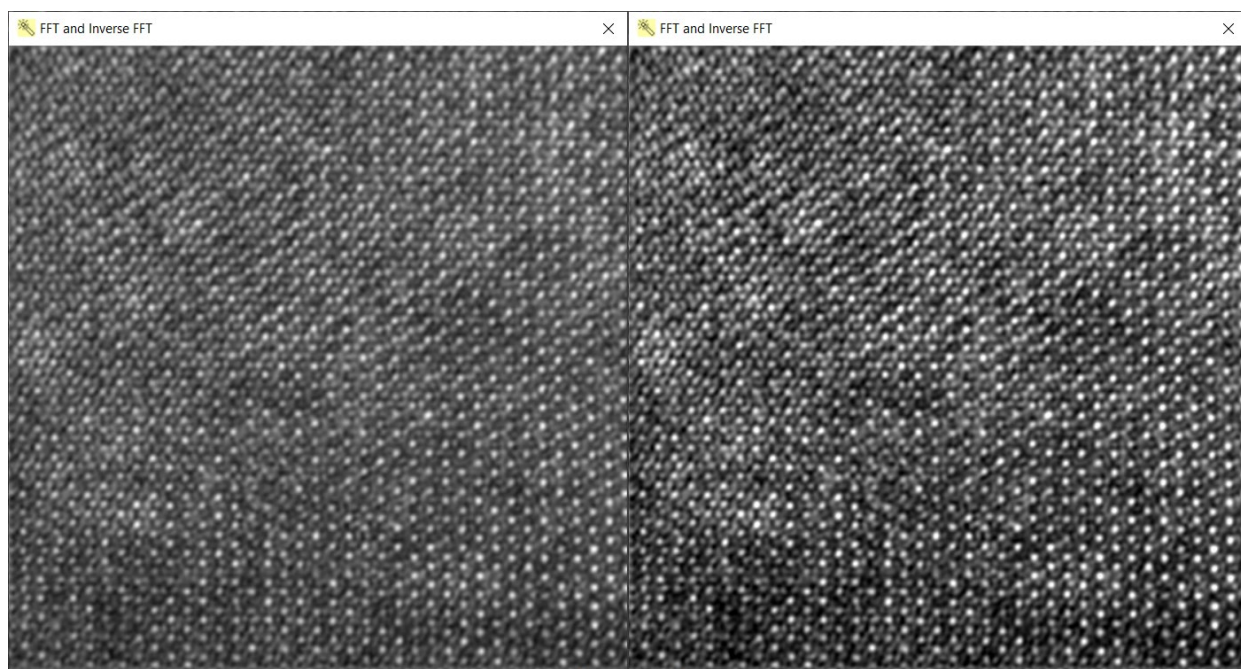


图 14. IFFT 图像和经过对比度增强处理的图像。

## 4. 示例

### 4.1 $Fe_5CoTi$ 合金的 HRTEM 像



金属间化合物合金  $\text{Fe}_{3+x}\text{Co}_{3-x}\text{Ti}_2$  ( $x = 0, 1, 2, 3$ ) 已经被证明具有潜在的高磁各向异性。在这些合金中，主要的金属间化合物最近被报道为具有  $\text{P}\bar{6}\text{m}2$  空间群的新的六方相。透射电子显微镜研究 [15] 揭示了主要的化合物属于 Laves C14 变种，周围环绕着  $\alpha$ -Fe 型晶体，作为  $\text{Fe}_{3+x}\text{Co}_{3-x}\text{Ti}_2$  ( $x = 0, 1, 2, 3$ ) 合金中的次生相，与 Fe-Ti 和 Fe-Co-Ti 相图一致。为了表征  $\text{Fe}_{3+x}\text{Co}_{3-x}\text{Ti}_2$  ( $x = 0, 1, 2, 3$ ) 合金中的金属间化合物，使用了选区电子衍射、能量色散 X 射线光谱、高分辨率透射电子显微镜和 X 射线衍射等技术。

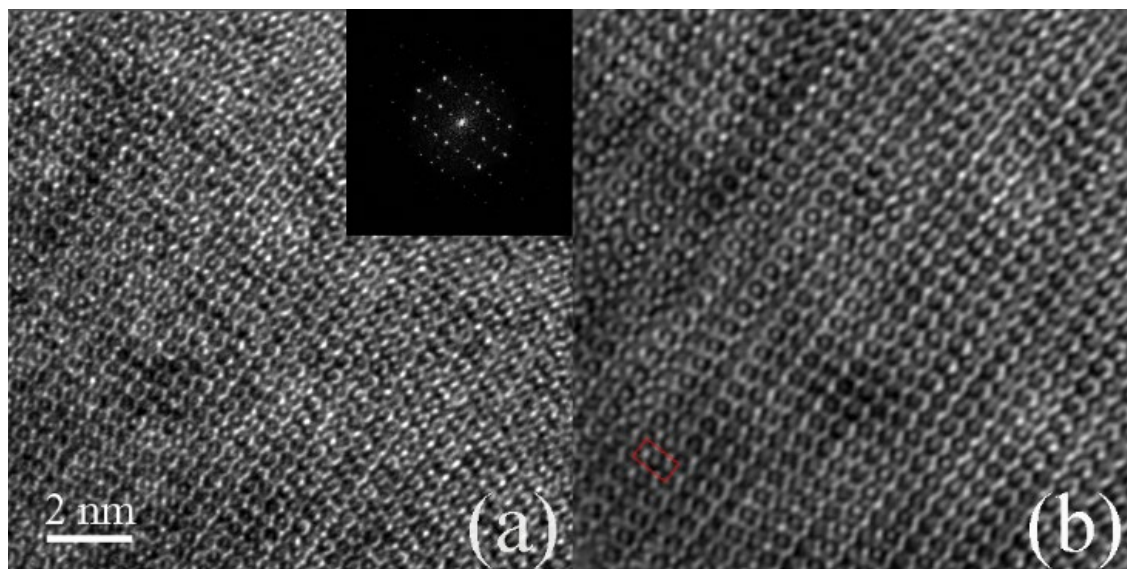


图 15: (a)  $\text{Fe}_3\text{Co}_3\text{Ti}_2$  合金中主要化合物的 HRTEM 图，(b) 经过 IFFT 处理的图。

图 15 显示了 (a)  $\text{Fe}_3\text{Co}_3\text{Ti}_2$  合金中主要化合物的实验 HRTEM 图，嵌入一个 FFT 图，以及 (b) 经过逆 FFT 处理的图，在其中勾画了一个单位胞。如果晶体较厚，HRTEM 图与投影晶体电势之间的关系可能会相当复杂。为了获得一个可以直接解释为投影电势的图像，晶体应该被良好地对准，足够薄以接近弱相位物体，并且目标透镜的离焦值应该是最佳的，即在 Scherzer 离焦下。图 15 (b) 中的 HRTEM 图可以直接与 Laves C14 变种的结构投影和静电势图进行解释。

#### 4.2 CoSi 纳米颗粒 FFT 图

这些纳米颗粒是由内布拉斯加大学林肯分校 (University of Nebraska, Lincoln) 的 Sellmyer 教授小组使用团簇沉积方法制备的。使用直流等离子溅射产生的原子 CoSi 蒸汽在冷却的惰性气体气氛中冷凝，以在气聚合室中形成纳米颗粒。在透射电子显微镜测量中，使用具有低纳米颗粒覆盖率的碳包覆的铜网格。图 16 显示了一个 CoSi 颗粒的 HRTEM 图。晶体几乎是六边形的，晶体的大小约为 10 纳米。通过使用 EMIPA，使用一组反射的选区，在 IFFT 图像中增强了 HRTEM 图像，如图 17 所示。



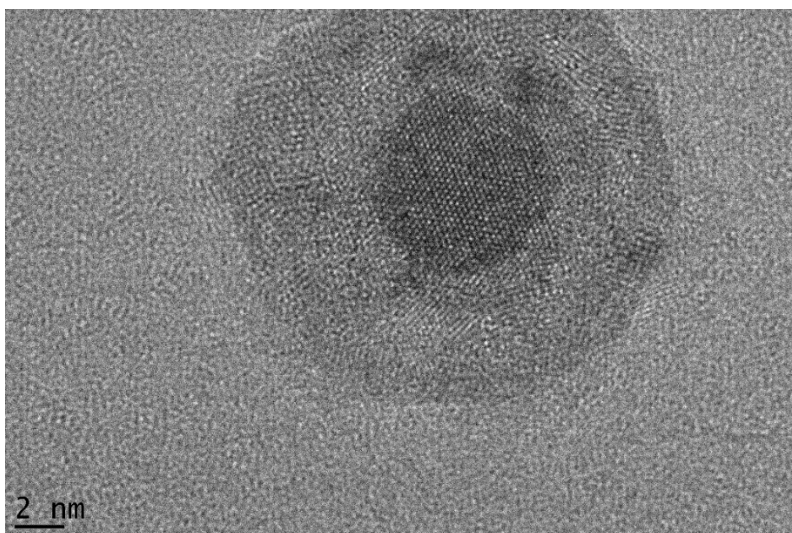


图 16: CoSi 颗粒的高分辨率电子显微镜图像。晶体几乎是六边形的，晶体的大小约为 10 纳米。

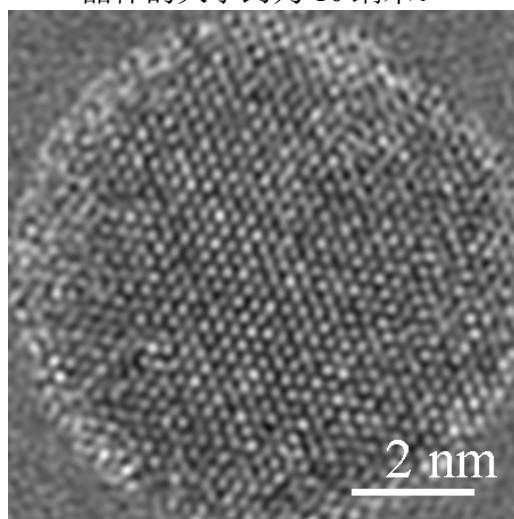


图 17: CoSi 颗粒的逆 FFT 图像。晶体几乎是六边形的，晶体的大小约为 10 纳米。

### 4.3 碳纤维的 HRTEM 观察

碳纤维是当今最强的商业可用结构材料，是一种轻质增强材料，用于增强聚合物复合材料的强度。科学家们正在寻求使用异常强大且抗疲劳的碳纳米管来增强先进的高性能纤维，这些碳纳米管是由一层厚度仅为一个碳原子的碳分子形成的中空圆柱体。

图 18 显示了沿其长边的碳纤维的横截面图像，由内布拉斯加大学林肯分校（University of Nebraska, Lincoln）的 Dzenis 教授小组制备。使用 EMIPA 研究了石墨片的分布。碳纤维中的石墨片间距平均为 0.387 纳米。图 19 显示了图 17 中实验图像的 FFT 图和 IFFT 图。

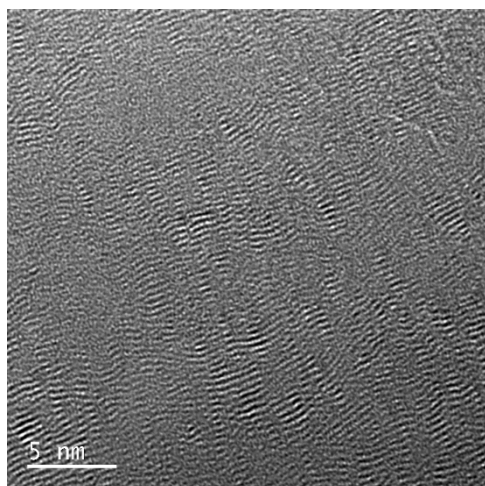


图 18：沿其长边的碳纤维的横截面图像。

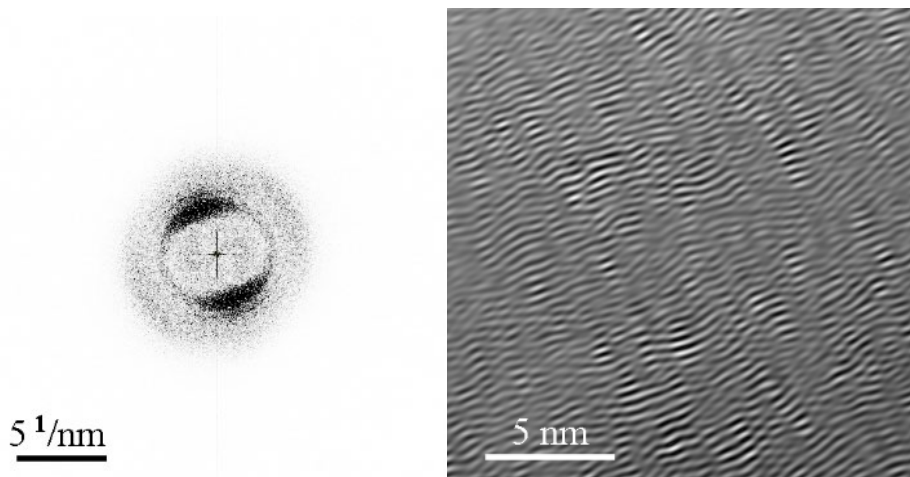


图 19：图 18 中实验 HRTEM 图的 FFT 图和 IFFT 图。

## 5. 安装

### 5.1 计算机系统要求

为了运行 Landyne+, 包括 EMIPA, 必须安装 Java 虚拟机, 即 J2RE。还需要 Java 高级图像 (Java Advanced Image, JAI) 用于处理 TIFF 文件。请将 jai\_codec.jar 和 jai\_core.jar 文件复制到例如 java\jre\lib\ext\文件夹中。

### 5.2 软件安装和许可文件

可执行的字节码, 测试所需的数据文件以及用户手册均以压缩形式提供 (landyne+.zip) 在以下链接上: <https://landyne.com>。您可以在 LANDYNE (jlandyne@gmail.com) 获取短期和永久许可证。欢迎提供建议和评论。

## 6. 参考文献

- [1] X.-Z. Li, <https://landyne.com>
- [2] X.-Z. Li, *Microsc. Microanal.* 26 (2020) 258-259.
- [3] X.-Z. Li, *J. Appl. Cryst.* 53 (2020) 848-853.
- [4] X.-Z. Li, *J. Appl. Cryst.* 49 (2016) 1818-1826.
- [5] X.-Z. Li, *Microsc. & Anal.* May issue (2019) 16-19.
- [6] X.-Z. Li, *Ultramicroscopy* 110 (2010) 297-304.
- [7] X.-Z. Li, *Microsc. Microanal.* 20 (2014) 1486-1487.
- [8] X.-Z. Li, *J. Appl. Cryst.* 45 (2012) 862-868.
- [9] X.-Z. Li, *J. Appl. Cryst.* 38 (2005) 576.
- [10] X.-Z. Li, *Microsc. Microanal.* 29 (2023) in print.
- [11] X.-Z. Li, *J. Mater. Edu.* 42 (2020) 97-104.
- [12] X.-Z. Li, *Micron* 117 (2019) 1-7.
- [13] X.-Z. Li, *Microscopy Today*, Nov.-Dec. issue (2022) 20-27.
- [14] X.-Z. Li, W.-Y. Zhang, R. Skomski, and D.J. Sellmyer, *Acta Crystal. B*78 (2022) 485-489.
- [15] X.-Z. Li, A. Sarella, and B. Balasubramanian, S.R. Valloppilly, *Material Characterization*, 194 (2022) 112366.