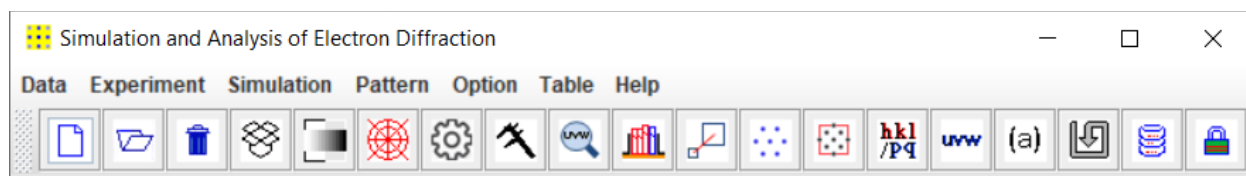


***LANDYNE* 蓝带软件**

# 用户手册

SAED 单晶电子衍射图的模拟与分析

Copyright 2011-2024 LANDYNE ©  
All Right Reserved



## 目录

要点概述 .....	4
1. 引言 .....	4
2. 理论背景.....	5
2.1 电子衍射空间分布与强度.....	5
2.2 孪晶、多相共生与析出相的电子衍射分析.....	5
2.3 实验电子衍射图的晶带轴确定与衍射指数标定.....	6
3. SAED 图形用户界面.....	7
3.1 主界面.....	7
3.2 下拉式菜单和图形工具栏.....	7
4. SAED 的使用.....	9
4.1 准备新晶体数据文件.....	9
4.2 模拟计算.....	10
4.4 计算结果输出.....	12
4.5 实验电子衍射图的晶带轴的确定和衍射点指数标定.....	12
5. SAED 中的一些处理方法.....	13
5.1 部分占有率因子和全同温度因子.....	13
5.2 载入和调整实验电子衍射图.....	13
5.3 多相系统的重量比的确定.....	14
5.4 孪晶，多相共生和析出相的电子衍射模拟.....	14
6. 应用举例.....	14
6.1 Pt-Bi 薄膜.....	14
6.2 Cu <sub>2</sub> S 微米纤维束.....	16
7. 蓝带软件包中的相关软件.....	18
7.1 SVAT.....	18

7.2 <i>SPICA</i> .....	18
7.3 <i>PCED</i> .....	19
7.4 <i>SAKI</i> .....	19
7.5 <i>ESPOT</i> .....	19
参考文献 .....	19

## 要点概述

- 使用窗口框架和面板显示模拟图样，或匹配预加载的实验衍射图样。
- 可通过操作面板和多个对话框初始化计算的输入参数。
- 可以使用计算机助手轻松准备输入结构数据文件。
- 可以同时加载和计算多个相，以模拟孪晶、共存固定取向的相，以及比较来自不同相的类似图样。
- 可以对实验图样进行对齐、调整大小和旋转。
- 提供标签工具，用于准备出版的图例。

## 1. 引言

选区电子衍射分析在材料科学中被广泛用于晶体相结构鉴定、生长方式和生长方向的确定，例如孪晶关系和共存多相的固定取向。

由于电子与物质的相互作用比 X 射线更强，与 X 射线衍射相比，电子衍射具有明显的优势和劣势。一方面，传统 X 射线衍射实验所不能涵盖的纳米物体，通过电子衍射可以在实验室中研究，无需前往同步辐射光源。此外，电子衍射图样可以展现对于轻元素的分辨率超越 X 射线的反射。另一方面，电子与物质的相互作用强烈，以及非常小的衍射角度也会导致强烈的动态衍射效应，如多重衍射，这些因素阻碍了电子衍射图样的结构解释。

电子衍射图样的模拟在解释实验结果中起着至关重要的作用。单晶颗粒和多晶样品的电子衍射图样在本质上是相同的，但在许多方面是不同的，因此我们针对单晶样品和多晶样品的选区电子衍射图样的高级模拟和分析进行了分开处理。PCED 适用于多晶样品的选区电子衍射图样。SAED 适用于单晶样品的选区电子衍射图样。

目前可用于电子衍射模拟的软件主要设计用于单相模拟。对于选区电子衍射图样的高级模拟和分析，这类软件中的功能还不足够，例如孪晶分析、具有固定取向的共存多相以及来自不同相的两个类似衍射图样的比较。在电子衍射分析中的一个实际任务是找到衍射图样的区轴和索引；这样的分析可以用于相态鉴定、晶粒的取向等。投影的原子势（差异）图可以用来解释 HREM 结构图像并改进结构模型；这些任务被视为 PAPM 的扩展。因此，我们开发了 SAED；当前版本是 6。

JECPE/ED: Journal of Applied Crystallography, 36 (2003) 956

SAED2: Proceedings of Microscopy & Microanalysis, 18 S2 (2012) 1262.

SAED3: Microscopy and Analysis, 2019 (May issue 16-19).

SAED4: 增加 ESPOT 数据。增加 [uvw] (hkl) 以及图编号。

SAED5: 增强新数据方法：非正规空间群。增加新软件快捷搜索。

SAED6: 增强新数据方法：菱方系统，增强带轴搜索方法。

SAED 是使用 Java 8 编写和编译的。已对编译的类文件进行了进一步的代码优化。需要一个许可文件来解锁程序（SAED6.jar），以加载输入数据文件。许可可以从 LANDYNE（计算机软件）公司获取。

## 2. 理论背景

### 2.1 电子衍射空间分布与强度

高能电子衍射的运动学与动力学理论已在教材中得到充分记录（例如，彭等，2004年，以及其他关于电子衍射理论的书籍），并在文献引用中有所提及（例如，Metherell，1975年）。

电子原子散射因子可以通过使用Mott-Bethe关系从X射线原子散射因子推导出来，或者可以直接从参数化的电子原子散射因子表中获取（彭等，1996年）。在这里，我们采用第二种方法。

根据电子衍射几何，衍射图样中反射的倒数长度（ $R$ ）可以与倒数矢量 $g(hkl)$ 的长度相关联，如下：

$$R = \frac{L\lambda}{d} \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{\lambda}{2d}\right)^2}}{1 - 2\left(\frac{\lambda}{2d}\right)^2} \quad (1)$$

其中， $L$  是相机长度， $d=1/|g(hkl)|$ ， $\lambda$ 是入射电子束的波长。

对于高能电子衍射，爱瓦尔德（Ewald）球的半径相对较大；因此，薄样品的电子衍射图显示了倒格点的二维分布。

在运动学理论中，电子衍射强度为：

$$I_g \propto |F_g|^2 \quad (2)$$

这里， $F_g$  被称为结构因子。

在 SAED 中，使用布洛赫波方法（Metherell，1975）计算动力学电子衍射强度。读者应该在原始研究论文中查阅相关公式。

### 2.2 孪晶、多相共生与析出相的电子衍射分析

根据它们的衍射图，孪晶晶体可以分为三个常见类别。*Non-merohedral* 孪晶具有两个或多个晶体领域，其倒易格子要么不重叠，要么只部分重叠。相比之下，*Merohedral* 孪晶的晶体领域具有完全重叠的衍射图。对于 *Merohedral* 孪晶，将孪晶领域之间的对称操作与样

品的劳厄群相关联，但它们不是空间群的一部分。*Pseudo-merohedral* 孪晶也具有完全重叠的衍射图，但与领域相关的对称操作不属于样品的劳厄群。

在复杂的合金体系中，可能会存在两个或更多的相，它们之间具有固定的取向关系。电子衍射分析可用于确定取向关系。析出物可能与基体具有固定的取向关系。为了研究析出物，通常会倾斜基体以获得析出物的特定取向，因为析出物是小颗粒。

对于孪晶和多个共存相以及析出相分析，电子衍射图的模拟需要基于同一框架中的多个结构进行计算。SAED 的设计是依次计算来自多个晶体结构的图，并轻松调整衍射图，以模拟具有固定取向的孪晶和多个晶体结构共存的图。

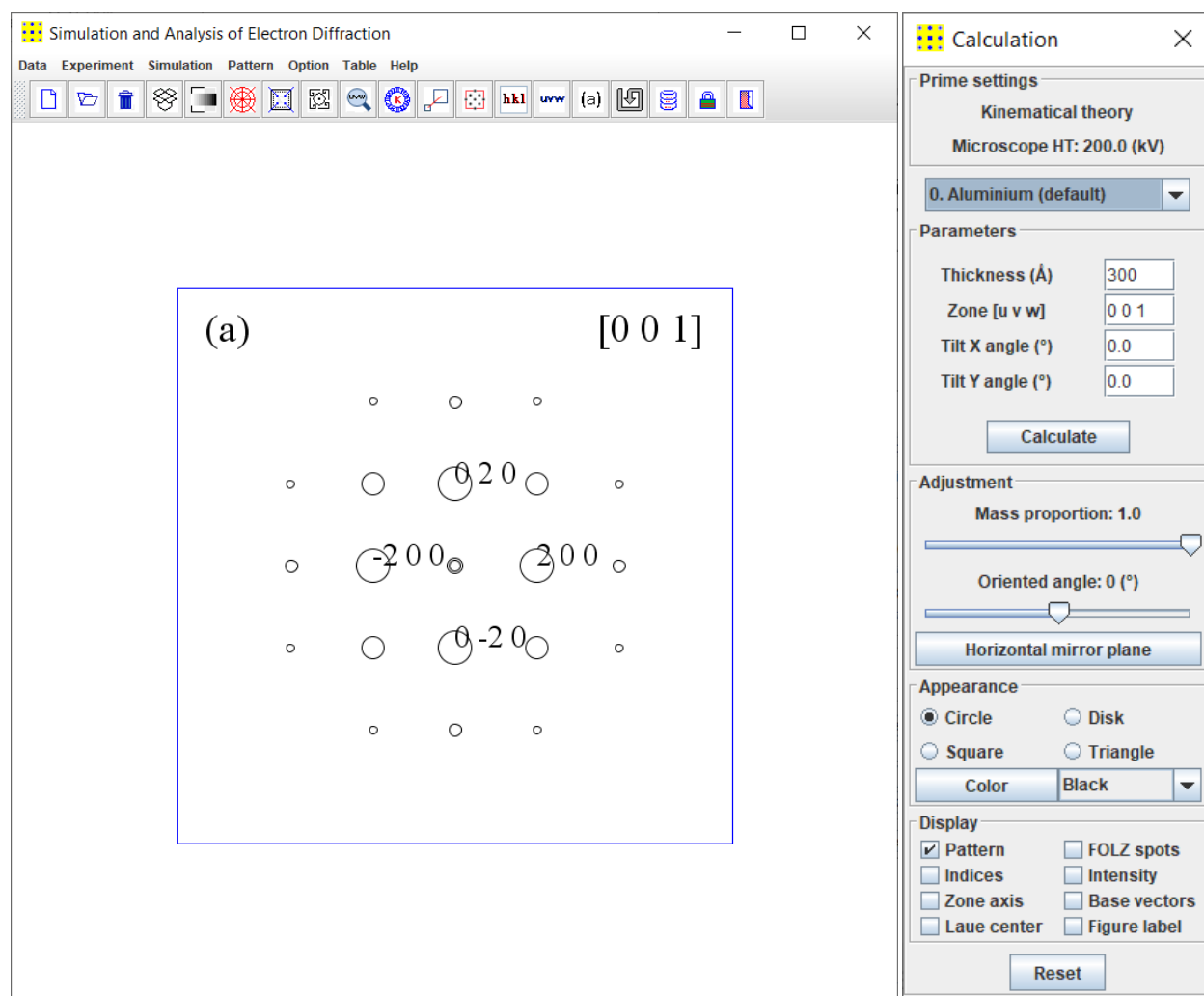


图 1: SAED 主界面快照，铝的沿[001]晶带轴模拟电子衍射图。

### 2.3 实验电子衍射图的晶带轴确定与衍射指数标定

电子衍射分析中的一个实际任务是找到衍射图的晶带轴并进行指数标定；这种分析可用于晶体相识别、晶体颗粒的取向等。

SAED 提供了测量比例尺和测量在 jpeg、png 或 tiff 格式的衍射图上的两个基本倒易矢量长度及其之间角度的工具。

这两个基本倒易矢量的长度与所有可能的 (hkl) 进行匹配，给定一个容差。然后检查两个基本倒易矢量之间的角度，列出与最小不匹配值相关的晶带轴之一，并可以将可能的晶带轴保存到文件中。

由于“查找晶带轴”对话框中仅定义了倒易长度的容差，所以角度是通过由两个基本倒易矢量形成的三角形的第三条边的倒易长度来检查的。

### 3. SAED 图形用户界面

#### 3.1 主界面

SAED 的主界面如图 1 所示。使用 SAED 进行模拟需要加载结构数据并设置输入参数，然后，在计算控制面板中点击 **Calculate** 按钮。使用 SAED 进行晶带轴搜索或相位识别需要先加载实验衍射图，然后找到晶带轴，然后通过选择的结构数据和输入参数匹配计算得到的图。多个结构数据可以同时加载，用于比较或模拟各种带有固定取向的孪晶和共存结构。

#### 3.2 下拉式菜单和图形工具栏

菜单和工具栏可用于弹出加载数据或更改参数的对话框。菜单提供了更多的文本描述，并按组织形式分组，工具栏中列出了最常用的菜单和子菜单，可以切换开启/关闭。拖放框仅出现在工具栏中，允许拖放操作快速加载 JPEG、PNG 或 TIFF 格式的图像。

**晶体菜单**提供了创建新结构数据、加载输入结构（同一结构可重新加载用于孪晶）、清除除默认（铝）结构外的所有加载结构的界面。

**实验菜单**提供了加载实验电子衍射图（EDP）的界面，支持 JPEG 和 TIFF 格式。加载的 SAED 图（图像）可以设置为反色或清除。图像可以通过拖放操作进行调整大小、旋转和移动/居中，参考一组同心圆和线条。通过拖放方式加载图像：使用鼠标指针选择图像文件，按下鼠标左键，拖放到菜单栏上的放置框图标上，释放鼠标左键。倒数间距标记提供了使用 SAED 图中的比例尺进行标定的工具。图像操作对话框（图 2）可调解图像位置大小取向。卡尺（图 3）可用于校准匹配因子。晶带轴查询工具可搜寻具有最小不匹配残差的晶带轴，并可将所有可能的晶带轴的详细信息保存到文本文件中。

**模拟菜单**提供了在运动学和动力学衍射理论之间进行选择的子菜单，其中默认选择是运动学衍射理论。对于具有大单元胞的晶体，动力学计算可能不适用，因为在布洛赫(Bloch)波方法中将需要很长时间。可以设置显微镜的高压和计算衍射点的最大指标值。用于调整图缩放和强度比例的对话框模拟了摄像机长度和曝光时间，用于选择衍射斑点（反射）的标签的对话框，衍射斑点（反

射) 的标签可以用于选择指数和强度的方案。可以将弱衍射斑点重新缩放为常数, 也可以选择仅显示倒易晶格。

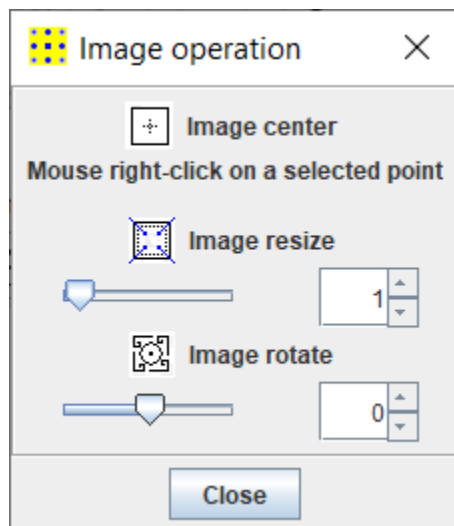


图 2: SAED 中支持实验 SAED 图分析的辅助面板截图。

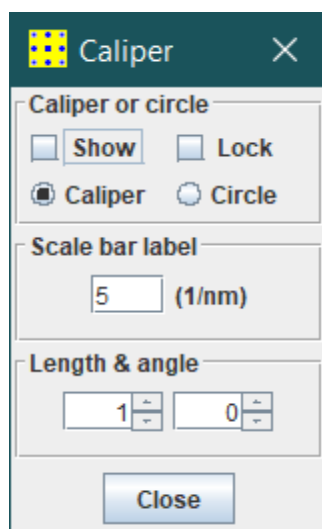


图 3: SAED 中用于模拟计算 SAED 图的调整面板截图。

**图菜单**提供了 ROI 和 PPI 的对话框; 可以将模拟的图保存为 JPEG、PNG 或 TIFF 格式的输出文件。

**表格菜单**提供了元素的周期表和空间群的表格。

**选项菜单**提供了自定义 SAED 外观 (外观和感觉皮肤) 的自由, 切换以显示或隐藏图形菜单栏, 并设置面板的默认位置和大小。

**帮助菜单**可用于查找当前驱动器和序列号 (SN), 序列号在许可文件中是必需的, 以及版本和许可信息。



## 4. SAED 的使用

要运行 SAED，用户可以使用以下三种方法之一：（1）使用 Landyne 启动器，（2）双击 SAED.jar 图标，或（3）在命令行中输入：`java -jar (-Xmx512m) SAED.jar`。-Xmx512m 是一个选项，用于将 Java 虚拟机的内存分配最高提升到 512MB。主窗口和程序的控制界面，类似于图 1，将显示出来。

接下来，我们将逐步介绍从准备结构数据文件，常规模拟使用，到保存和打印结果的步骤。关于特定主题的更多详细信息将在下一部分中讨论。

### 4.1 准备新晶体数据文件

可以使用图 4 中的 **New Crystal Structure File** 对话框来准备一个结构数据文件。该对话框为用户提供了助手，并确保满足文件格式的要求。模板内嵌了 Hermann-Mauguin 符号表示法中的 230 个空间群，在国际晶体学表中列出。然而，在单斜系统中，只会使用 b 唯一轴。两种起点选择可以作为输入参数，但选择-2 将由 SAED 转换为选择-1。要保存数据结构，点击 **Save** 按钮；要创建新的结构，点击 **New** 按钮。

**New Crystal Structure File**

**Description**  
New crystal structure

**Space group**  
☒ The standard settings (1~230) ☐ The alternative settings (1~74)  
Number: 1~230 Symbol: ? Origin: [dropdown]

**Lattice parameters**  
a = [ ] (Å) b = [ ] (Å) c = [ ] (Å) α = [ ] (°) β = [ ] (°) γ = [ ] (°)

**Coordinates of Atoms**

atom	elem #	x	y	z	occ.
		0.0	0.0	0.0	1.0

Add Remove Clear View

Number of atom in the list: 0 Global isotropic temperature factor: 0.0

**Notes**  
References etc.

New Load Save Close

图 4：准备新晶体结构文件的快照。

晶体文件也可以从以前的数据中转换或修改，或者从晶体学信息文件（CIF）中转换。如果使用三斜、单斜和正交系统的替代空间群设置的数据文件，请点击替代设置（1~74）。还提供了将非传统符号转换为标准符号的文件转换工具。

## 4.2 模拟计算

在模拟中使用了运动学衍射理论（默认选择）和布洛赫（Bloch）波理论的动力学衍射。可以在 **Simulation** 菜单中调整计算的基本参数，例如高压、图缩放和强度比例。

布洛赫（Bloch）波理论的计算可能需要较大晶格参数的晶体结构时间。为了节省时间，（i）软件提供了一个选项，用户可以在结果足够好时终止计算过程，或者继续计算，如图 5 所示；（ii）当只改变厚度时，软件将使用先前计算得出的参数来模拟衍射图。

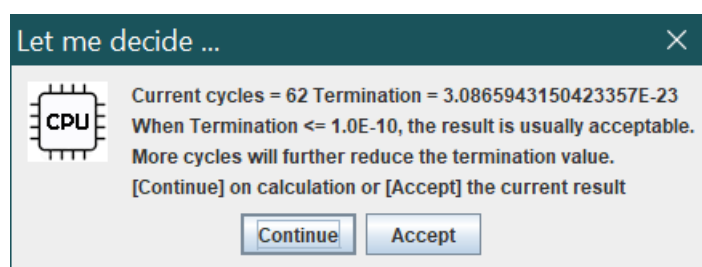


图 5：用户终止或继续计算的选项截图。

选择用于计算的结构数据应在加载的结构数据列表中选择。在选择厚度、取向轴和倾斜角以生成新的衍射图后，需要点击 **Calculate** 按钮。模式可以通过改变其他参数进行调整。

**Mass proportion** 定义了所有加载的结构的不同单位权重，作为默认值。质量比仅在两个或多个结构数据以复合衍射图计算时才有意义。

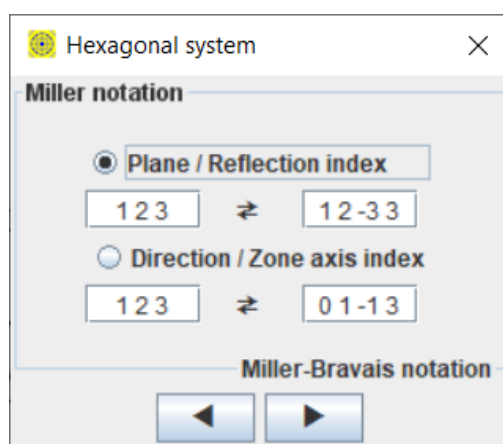


图 6：Miller-Bravais and Miller 标定指数转换器。

**Orientation and mirror operation** 操作用于使模拟图与实验图匹配，并生成各种孪晶。

**Diffraction Patterns** 可以使用四种预定义形状以及各种颜色查看。可以显示或隐藏图（ZOLZ 和 FOLZ）。可以为基本倒易向量和通过强度级别选择的衍射斑点标记索引和强度。基本矢量和劳厄中心可以显示和隐藏。

#### 4.3 Miller 与 Miller-Bravais 标定指数

六边形系统可以通过 4 个基向量（米勒-布拉维指数表示法）更方便地描述，其中 3 个基向量共面，因此不是线性无关的。因此，倾向于使用 Miller-Bravais 系统 (hkil) 来描述六方晶体中的平面，其中  $i = -(h+k)$  并且在书写时可以省略 (hk.l)；区域轴在 Miller-Bravais 系统中为 [uvtw]，在 Miller 系统中为 [UVW]，其中

$$\begin{aligned} U &= u-t; u = (2U-V)/3 \\ V &= v-t; v = (2V-V)/3 \\ W &= w; t = -(U+V) \end{aligned}$$

该转换器用于在 Miller 指数和 Miller-Bravais 指数之间进行转换，如图 6 所示。

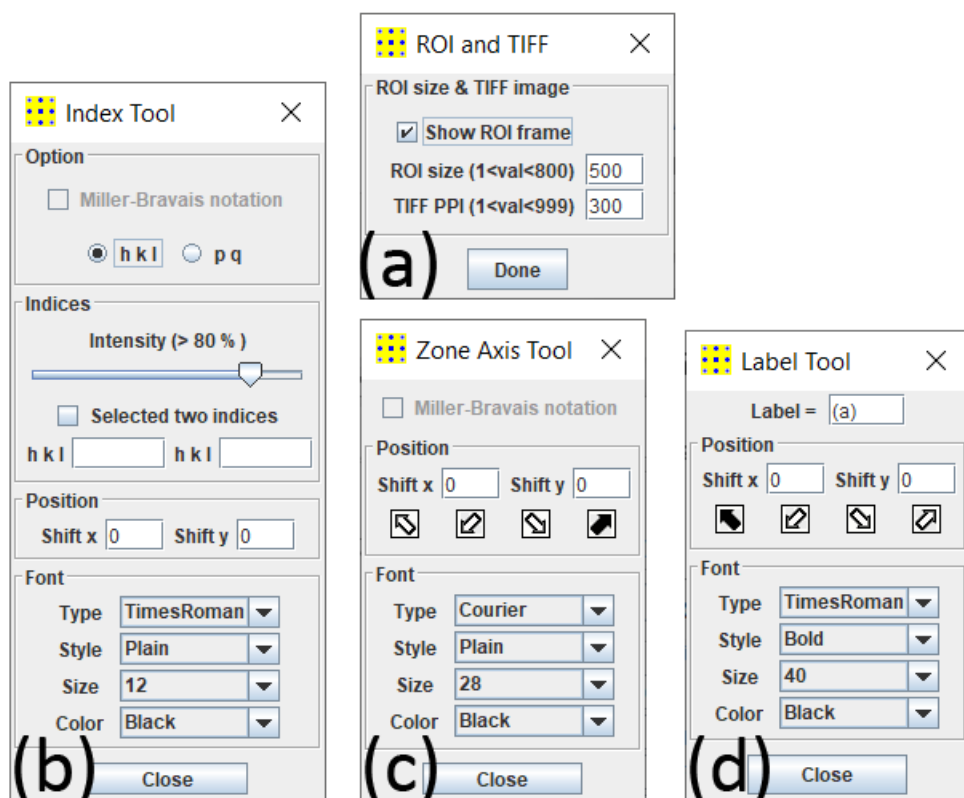


图 7：标记模拟图的工具截图。

#### 4.4 计算结果输出

与实验图像一起，这些模拟图可以保存为图像，以便用于出版。图 7 显示了 (a) 感兴趣区域，(b) 指数标定，(c) 取向轴和 (d) 图标的工具。hkl 选项是基于倒易晶格的矢量的指数，pq 选项是基于这个衍射图的矢量的指数（用于 ESPOT）。图 1 中的示例显示了一个在区域内准备好保存为.tif、.png、.jpg 或.gif 格式的的模拟图像。

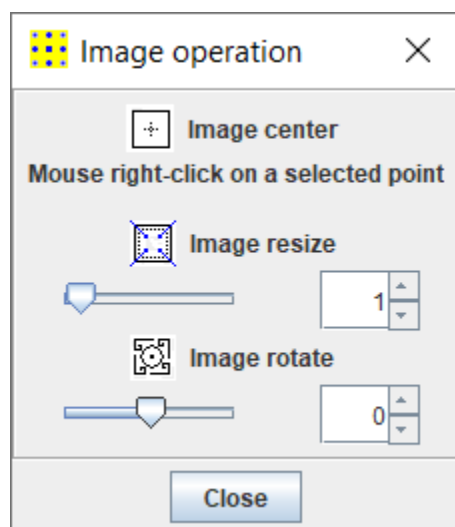


图 8：调整 JPEG、PNG 或 TIFF 格式实验衍射图。

#### 4.5 实验电子衍射图的晶带轴的确定和衍射点指数标定

SAED 可以用于确定实验衍射图的晶带轴，前提是它属于已加载到结构列表中的已知结构之一。

可以通过在图 8 中进行调整实验衍射图（以 JPEG、PNG 或 TIFF 格式）。如果需要，可以进行灰度对比度转换。图 9 显示了[uvw]查找对话框。

**步骤 1：更新匹配因子。**使用 **Scale marker** 校准模拟图，使其与实验图（或单个衍射斑点/环）匹配。匹配因子可以保存，因此只要使用相同的实验条件，就不需要每次都重新校准。

**步骤 2：找到基本倒易矢量 g1 和 g2；**长度可以标记为（1/Å）。

**步骤 3：定义容差值（默认为 5%），**然后找到可能的晶带轴。显示具有最小不匹配残差的晶带轴，并且整个列表可以保存到文本文件中。

容差值被定义为最大的百分比误差： $V_e$  = 实验值， $V_k$  = 已知值，

$$\text{百分比误差} = (V_e - V_k) / V_k * 100\%。$$

步骤 4：通过匹配倒易长度和它们之间的角度来获取晶带轴。应通过将模拟图与实验图进行比较来确认晶带轴。

步骤 5：所有在容差范围内的可能晶带轴的列表可以保存到 ASCII 文本文件中。文件中列出了晶带轴、测量的  $g_1$  和  $g_2$  以及角度，以及它们的百分比误差。

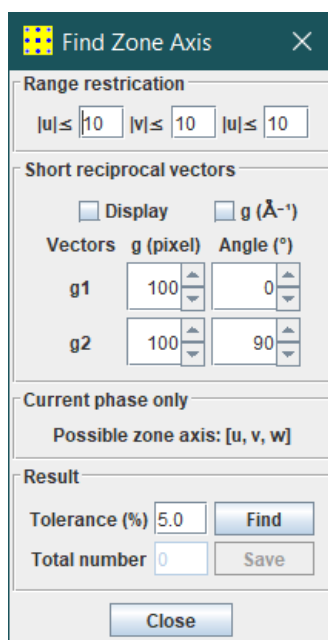


图 9: [uvw]查找工具的快照。

## 5. SAED 中的一些处理方法

### 5.1 部分占有率因子和全同温度因子

在晶体结构中，某些原子坐标可能不是完全占据的。在这种情况下，占据因子（默认值为 1.0）应根据晶体结构的情况进行更改，以便为电子衍射模拟准备结构数据文件。

部分占据因子还可以用于模拟结构中的一定程度的化学有序性。例如，化学有序的 FePt L10 相，参见第 6 节。在这种情况下，不同类型的原子可以分配到相同的原子坐标，并根据化学比例具有不同的占据因子，但两个原子的占据因子之和为 1.0。

在这里，各向同性温度因子用于模拟晶格振动的效应（德拜模型）。尽管各向同性温度因子是一个粗略的模型，但可以用于模拟随着  $|g|$  值的变化而衍射强度的降低。 $|g|$  值越大，衍射强度降低越多。

### 5.2 载入和调整实验电子衍射图

实验电子衍射图可以加载并调节居中，以便与模拟衍射图进行分析比较。实验图可以以 jpeg (.jpg)、png 和 tiff (.tif) 格式加载，使用窗口文件系统或图形菜单栏中的拖放框。实验图可以例如反转、调整大小和旋转进行处理，然后通过实验菜单中使用 **Center** 来居中。一旦点击了 **Center**，主面板上将出现多个同心圆。可以通过在按住鼠标左键的同

时选择图的中心来将图调整到面板的中心；点击实验菜单中的 **Center**，图将被锁定在该位置，并且同心圆会消失。可能需要通过小步骤的更多调整来找到准确的位置。可以使用选项菜单中的 **Number of Reference Circle** 更改同心圆的数量。

### 5.3 多相系统的重量比的确定

SAED 提供了一种从多相复合衍射图粗略估计重量比的方法。调整每个相的质量比例  $mp(i)$  以使其衍射图的相对强度与实验图相匹配，然后相  $i$  的最终质量比为：

$$\frac{mp(i)}{\sum_i mp(i)}$$

### 5.4 孪晶，多相共生和析出相的电子衍射模拟

可以使用 SAED 来模拟孪晶的电子衍射图。为了生成孪晶的衍射图，需要根据孪晶组分的数量多次加载相同的结构数据。在倒易空间中，孪晶图可以通过旋转、镜像或反向操作来生成。对于旋转孪晶，可以在计算控制面板中将孪晶组分进行旋转。对于反射孪晶，可以将孪晶组分在水平镜像处反射，然后将其旋转所需角度。对于反演孪晶，可以使用  $[uvw]$  和  $[-u,-v,-w]$  的晶带轴来计算孪晶组分。当加载共生相的结构数据，或是析出相和母相的结构数据，分别计算衍射图并调整合成与实验可比的电子衍射图。

## 6. 应用举例

### 6.1 Pt-Bi 薄膜

由于铂-铋化合物在甲酸 ( $\text{HCOOH}$ ) 或甲醇 ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ) 氧化反应中作为燃料电池阳极催化剂表现出高活性，因此人们对了解这些化合物的各种性质产生了相当大的兴趣。尽管铂被认为是最有效的催化剂材料之一，但这种传统的催化剂的主要问题是，它容易被反应的副产物一氧化碳 ( $\text{CO}$ ) 中毒。 $\text{CO}$  中毒降低了催化活性和电池效率，因为  $\text{CO}$  会牢固地吸附在电极表面。然而，一些最近的报告显示，使用有序的金属间化合物，如  $\text{PtBi}$ ，作为电极材料表现出改善的电池效率，并且  $\text{CO}$  吸附大大降低。

基于铂和铋的三种常见金属间化合物是  $\text{PtBi}$ 、 $\text{PtBi}_2$  和  $\text{Pt}_2\text{Bi}_3$ 。等原子比例的  $\text{PtBi}$  相位于相图的低温一侧，可能偏向富含铂的一侧。 $\text{PtBi}_2$  在平衡相图中从低温到高温有四个晶型，分别为  $\alpha$ - $\text{PtBi}_2$ （正交晶系， $a = 6.732$ 、 $b = 6.794$  和  $c = 13.346 \text{ \AA}$ ）、 $\beta$ - $\text{PtBi}_2$ （立方晶系， $a = 6.701 \text{ \AA}$ ）、 $\gamma$ - $\text{PtBi}_2$ （三角晶系， $a = 6.57$ ， $c = 6.16 \text{ \AA}$ ）和  $\delta$ - $\text{PtBi}_2$ （正交晶系， $a = 4.3240$ 、 $c = 5.501 \text{ \AA}$ ）。 $\text{PtBi}$  和  $\text{Pt}_2\text{Bi}_3$  采用六方  $\text{NiAs}$  结构（ $\text{PtBi}$ ： $a = 4.3240$ ， $c = 5.501 \text{ \AA}$ ； $\text{Pt}_2\text{Bi}_3$ ： $a = 4.13$ ， $c = 5.58 \text{ \AA}$ ），而  $\text{PtBi}_2$  的三个多形态晶体结构分别为  $\text{AuSn}_2$  型的正交晶系、 $\text{FeS}_2$  立方方晶（ $\alpha$ - $\text{PtBi}_2$ ）、以及三角晶系（ $\gamma$ - $\text{PtBi}_2$ ）。

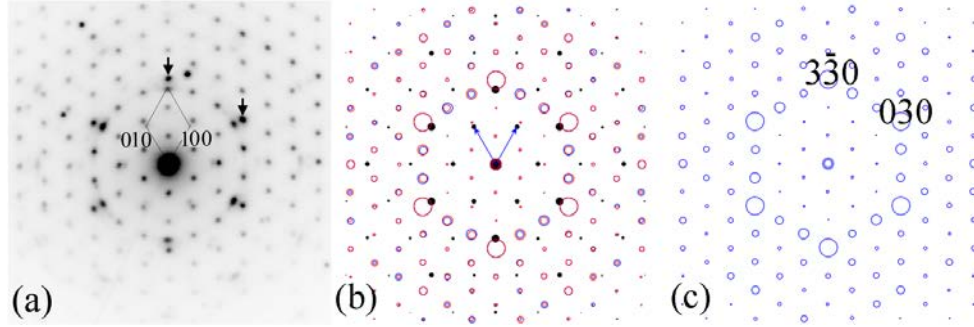


图 10: 铂-铋薄膜的 SAED 图, 由  $\gamma$ -PtBi<sub>2</sub> 双晶和共存的六方 PtBi 相组成, (a) 实验电子衍射图 (EDP), (b) 模拟 EDP, 以及(c) 单一相  $\gamma$ -PtBi<sub>2</sub> 的模拟 EDP。

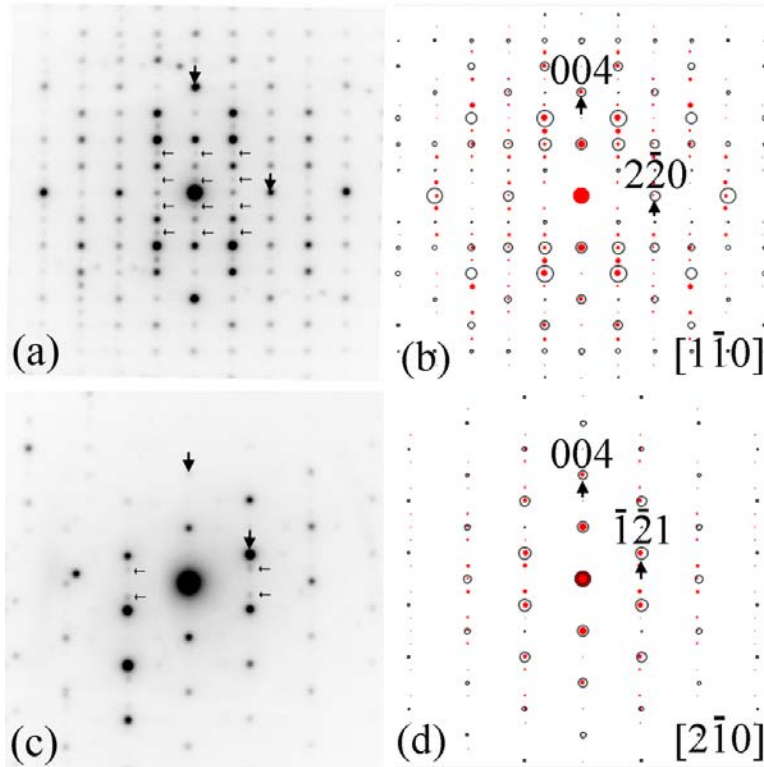


图 11: (a, c) 包含  $\gamma$ -PtBi<sub>2</sub> 和  $\beta$ -PtBi<sub>2</sub> 的 Pt-Bi 薄膜的实验电子衍射图, (b, d) 模拟的 EDP。

PtBi 和 PtBi<sub>2</sub> 薄膜通过电子束蒸发和退火在玻璃和热氧化硅衬底上合成。透射电子显微镜分析显示, 经过 300° C 和 400° C 的沉积后退火制备的薄膜主要是多态的 PtBi<sub>2</sub>, 仅有少量的 PtBi 痕迹。尽管透射电子显微镜分析显示出  $\beta$  相 PtBi<sub>2</sub> 的特征, 但  $\gamma$  相是这些样品中的主要相。PtBi 和 PtBi<sub>2</sub> 样品有晶粒取向, 而  $\gamma$ -PtBi<sub>2</sub> 薄膜具有高度的  $c$  轴取向, 其中  $c$  轴垂直于薄膜平面。图 10 显示了 (a) 包含  $\gamma$ -PtBi<sub>2</sub> 孪晶和共存六角 PtBi 相的实验电子衍射图, 与 (b) 与单相  $\gamma$ -PtBi<sub>2</sub> 的模拟 EDP 进行比较的模拟 EDP (c)。  $\gamma$ -PtBi<sub>2</sub> 与 PtBi 相之间的取向关系是:

$$\begin{aligned} [001] \quad \gamma\text{-PtBi}_2 & // [001] \quad \text{PtBi} \\ (100) \quad \gamma\text{-PtBi}_2 & // (110) \quad \text{PtBi} \end{aligned}$$



图 11 显示了(a, c) 包含  $\beta$ -PtBi<sub>2</sub> 和  $\alpha$ -PtBi<sub>2</sub> 的 Pt-Bi 薄膜的实验电子衍射图, 以及(b, d) 模拟的电子衍射图。

## 6.2 Cu<sub>2</sub>S 微米纤维束

分层纳米结构在光学、电子、传感等领域中越来越受到关注。具体来说, 核-分支异质结构 (即在中心纳米线或纳米纤维核心上具有纳米线或纳米棒分支), 核心和分支由不同材料组成, 可以调控纳米线和基底的特定性质, 提供高表面积-体积比和纳米线-基底比, 并带来新型功能膜的前景。

在我们的最近研究中, 我们通过将电纺技术与室温气固扩散辅助化学生长相结合, 制备出了一种新型的分层体系, 即无机 Cu<sub>2</sub>S 纳米线站在有机聚丙烯腈 (PAN) 纳米纤维上。

制备出的纳米线长约 1.5~1.8 微米, 直径均匀, 约为 80 纳米 (图 12a)。单个纳米线的实验电子衍射图与单斜晶 Cu<sub>2</sub>S 晶体相相匹配。它们表明纳米线的生长方向垂直于 (2, 0, -4) 晶面, 即与单晶 c 轴平行 (图 12b、12c)。纳米线的生长似乎在纳米纤维表面形成 Cu<sub>2</sub>S 外套之前就已经开始了。

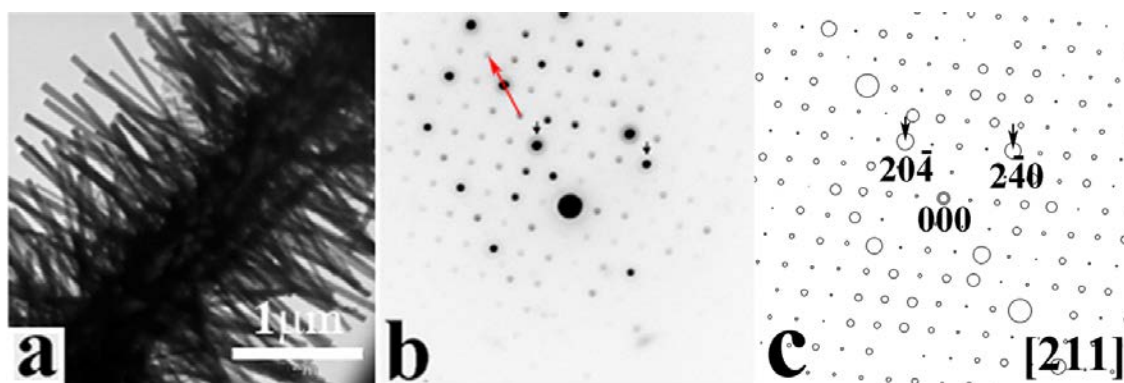


图 12: (a) 分层结构的透射电子显微镜图像。(b) Cu<sub>2</sub>S 纳米线的实验电子衍射图, (c) 箭头显示了纳米线的生长方向, 以及对应的单斜 Cu<sub>2</sub>S 晶体结构的模拟图。



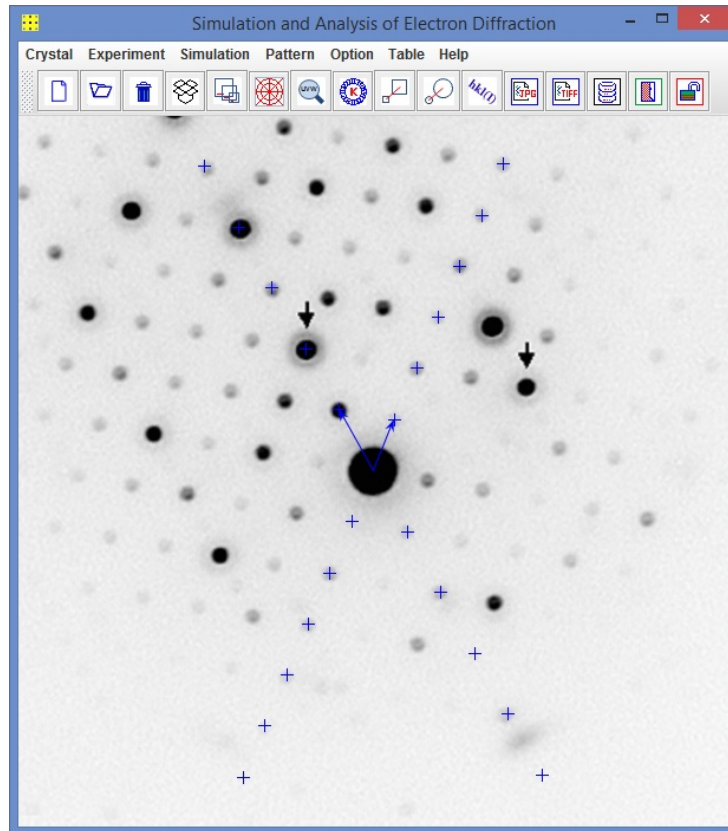


图 13: 对  $\text{Cu}_2\text{S}$  纳米纤维实验电子衍射图中的基本倒易矢量进行测量。

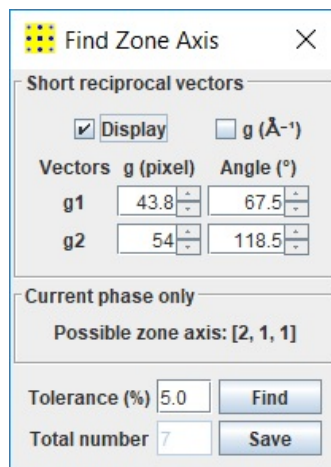


图 14: 匹配因子和基本倒易矢量的长度和角度。在 5% 的容差下找到可能的晶带轴为  $[2\ 1\ 1]$ 。

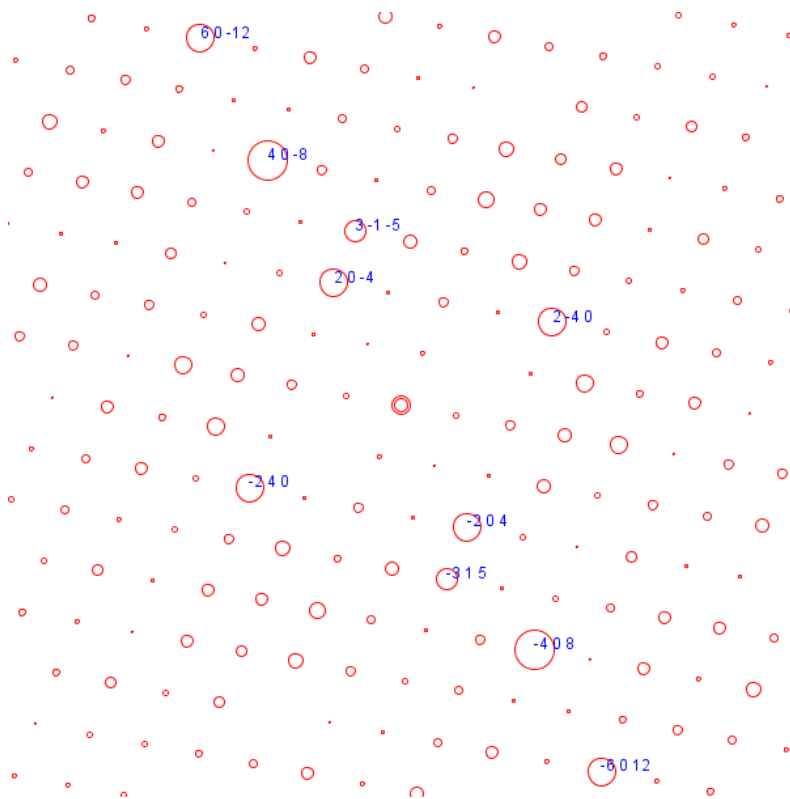


图 15.  $\text{Cu}_2\text{S}$  的模拟电子衍射图，晶带轴为  $[2\ 1\ 1]$ 。

实验电子衍射图的基本倒易矢量如图 13 所示测量。校准后的匹配因子和实验电子衍射图的基本倒易矢量如图 14 所示列出。选择容差为 5%。可能的晶带轴确定为  $[2\ 1\ 1]$ ，共有七个可能的晶带轴，可以保存到文件中。图 15 显示了  $[2\ 1\ 1]$  晶带轴的模拟图与实验电子衍射图非常匹配；因此，确定了电子衍射图的晶带轴和指数标定。

## 7. 蓝带软件包中的相关软件

所有蓝带（Landyne）套件中的程序都使用相同的输入结构数据格式。以下列出了其中几个，可以与 SAED 一起使用。用户可以详细查阅每个程序的规格说明书或用户手册。

### 7.1 SVAT

随着 Landyne 套件中的程序和用户数量的增长，需要一个使用相同输入数据格式的结构可视化/分析工具变得很明显。

### 7.2 SPICA

SPICA 是早期 JECF/SP 的下一个版本，设计用于具有透射电子显微镜台的标准投影。SPICA 继承了 JECF/SP 的功能，并扩展到许多用于晶体学分析的新功能，并具有更用户友好的 GUI 设计。

### 7.3 PCED

PCED是之前的JEC/PCED的升级版。新功能包括（i）用于强度计算的Blackman理论，一个积分的双光束动态理论，（ii）用于外平面和内平面纹理的匹配模型，（iii）用于衍射环峰值轮廓的拟Voigt函数，以及（iv）改进的衍射图指数和与实验图的匹配。

### 7.4 SAKI

SAKI可以视为SAED的扩展。SAKI可用于模拟Kikuchi图和双衍射效应；SAKI还可用于使用三对菊池（Kikuchi）线确定晶体的精确取向。

### 7.5 ESPOT

ESPOT是SAED的扩展，用于生成晶体结构的电静势（差值）图。SAED提供ESPOT的计算衍射数据。用于ESPOT的实验衍射数据可以使用QSAED生成。

### 参考文献：

Humphreys, C.J., The scattering of fast electrons by crystals, Rep.Prog.Phys., 42 (1970) 122.

Li, X.Z., PCED2.0 - A computer program for advanced simulation of polycrystalline electron diffraction pattern. Ultramicroscopy 110 (2010) 297-304.

Li, X.Z., SAED3: simulation and analysis of electron diffraction patterns. Microscopy and Analysis, May issue (2019) 16-19.

Li, X.Z. SVAT4: a computer program for visualization and analysis of crystal structures. Journal of Applied Crystallography 53 (2020) 848-853.

Metherell, A.J.F., Diffraction of electrons by perfect crystals, Microscopy in Materials Science II, ed. by Valdre, U. and Ruedl, E., CEC Brussels, 1975.

Peng, L.M., Dudarev, S.L., and Whelan, M.J., High Energy Electron Diffraction and Microscopy, Oxford University Press, 2004.

Peng, L.M., Ren, G., Dudarev, S.L., and Whelan, M.J., Robust Parameterization of Elastic and Absorptive Electron Atomic Scattering Factors, Acta Cryst. A52 (1996) 257.

Self, P.G., M.A.O'Keefe, M.A., Buseck P.R., Spargo, A.E.C. Practical computation of amplitudes and phases in electron diffraction, Ultramicroscopy 11 (1983) 35-52.