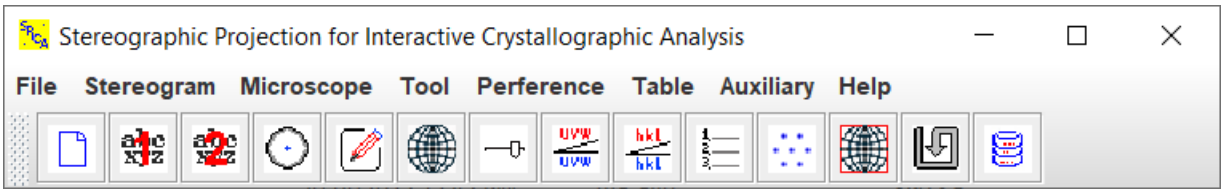
LANDYNE 蓝带软件

用户操作手册

SPICA 交互式晶体学分析的球极平面投影

Copyright 2011-2025 LANDYNE ©

All Right Reserved



目录

1. 引言 2
2. 理论背景 3
2.1 乌尔夫（Wulff）网 *4*
2.2 立体投影 *5*
2.3 多个立体投影合成 *6*
2.4 菊池（Kikuchi）图和迹线 *6*
2.5 TEM 样品台倾动和转动的预测 *7*
2.6 系列晶体学计算小程序 *7*
3. 软件设计与图形用户界面 8
4. 软件使用 9
5. 应用示例 10
5.1 立体图与乌尔夫（Wulff）网 *10*
5.2 两立体投影图合成 *10*
5.3 菊池（Kikuchi）图 和迹线 *13*
5.4 TEM 样品台的倾动与转动角度计算 *14*
6. 软件安装与启动 15
6.1 计算机配置要求 *15*
6.2 软件安装 *15*
6.3 用蓝带启动条运行 SPICA *15*
6.4 软件许可 *15*
7. 参考文献 135

1. 引言

立体投影是将球面上的点投影到其赤道平面上的一种投影。在晶体学中，立体投影是非常重要的，一组点提供了在三维空间中一组方向的完整表示，这些方向是从球的中心到一组点的线的集合。某些特定点集的完整立体投影通常被称为立体图。立体投影的几何数学背后以及计算机实现在文献中有很好的记录（例如，Bennett，1928；Young＆Lytton，1972），在大多数有关电子显微镜和 X 射线晶体学的书籍中也可以找到（例如，Edington，1975；Cullity，1978；De Graef，2003；Fultz＆Howe，2008）。

晶体方向和面的立体投影通常是大多数商业或公共领域的晶体学或电子显微镜计算机程序中的关键模块；例如，CaRIne（Boudias＆Monceau，1998），Crystallographica（Siegrist，1997），DIAMOND（Bergerhoff 等，1996），CrystalMaker（Kohn，2007），Crystal Studio（Crystal Studio，2015），WebEMAP（Zuo＆Mabon，2004）和 JEMS（Stadelmann，1987）。作为程序模块，它们足以用于绘制晶体方向和平面的立体图；另一方面，还有专用的计算机程序可用于扩展的立体投影用途。基于 Young＆Lytton（1972）的工作，Lee 等人（1994）开发了一个用于模拟电子衍射 Kikuchi 图的计算机程序。JECP/SP（Li，2004）被开发用于生成立体投影，适用于调整透射电子显微镜（TEM）实验中的样品取向。SP2（Chen＆Chen，2012）被开发用于标准的立体投影操作，也可以用于制作复合立体图，这在探索两个晶体相之间的取向关系时是必要的。

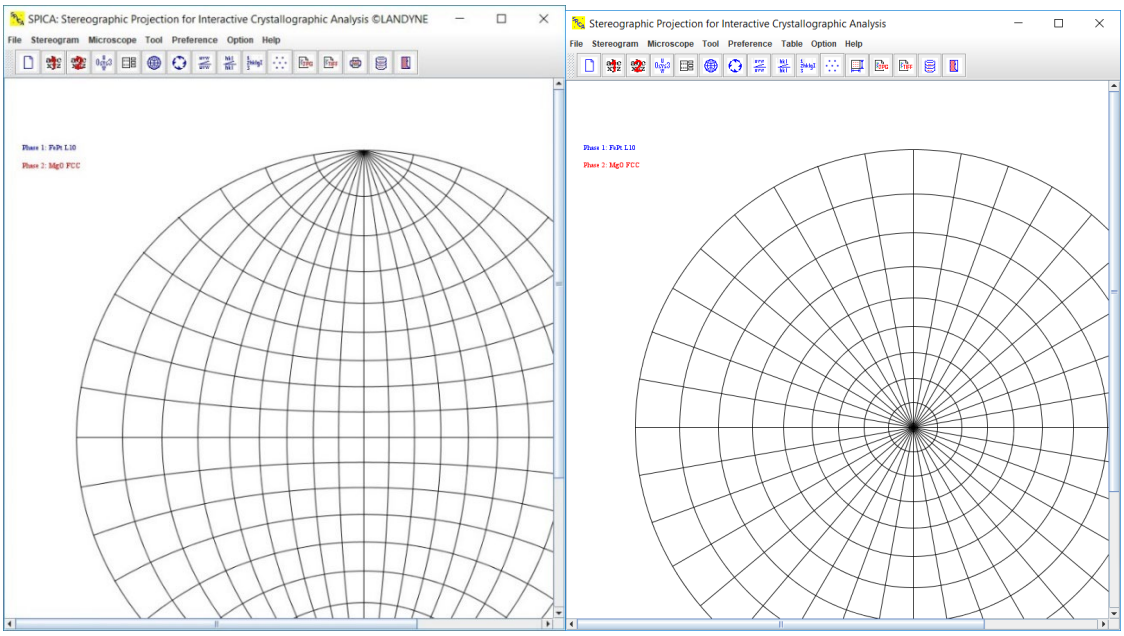


图 1：SPICA 的图形用户界面，包括（a）Wulff 网和（b）对称网。

对于在电子衍射实验中的晶体学分析，立体投影软件预计将包括更多功能；例如，不仅进行标准的立体图分析，还包括用于分析两个晶体相之间关系的复合立体图，模拟 Kikuchi 图和在选区电子衍射（SAED）实验中预测倾斜角的功能。SPICA 已经开发出来，它包括了上述特点以及更多功能。SPICA 既可以用作晶体学教学辅助工具，也可以用作进行 TEM 实验和分析实验结果的研究人员的实用工具。

2. 理论背景

如上所述，立体投影几何背后的数学可以在大多数有关电子显微镜和 X 射线晶体学的书籍中找到。在计算机程序中实现立体投影有各种不同的方法。SPICA 中的实现在本节中被简要描述。

2.1 乌尔夫（Wulff）网

乌尔夫（Wulff）网或立体投影网，是一个球面上经线和纬线的立体投影，可以绘制成两组圆形，其圆心和半径如图 3 所示。

经度曲线：

$$y^2 + (x \pm r/\tan(\varphi))^2 = (r/\sin(\varphi))^2 \qquad (1a)$$

纬度曲线:

$$(y \pm r/\cos(\theta))^2 + x^2 = (r\cdot\tan(\theta))^2 \qquad (1b)$$

其中 r 是立体图中球的半径。坐标 (x, y) 在经线或纬线圆上。上述公式可以基于乌尔夫（Wulff）网的定义导出。

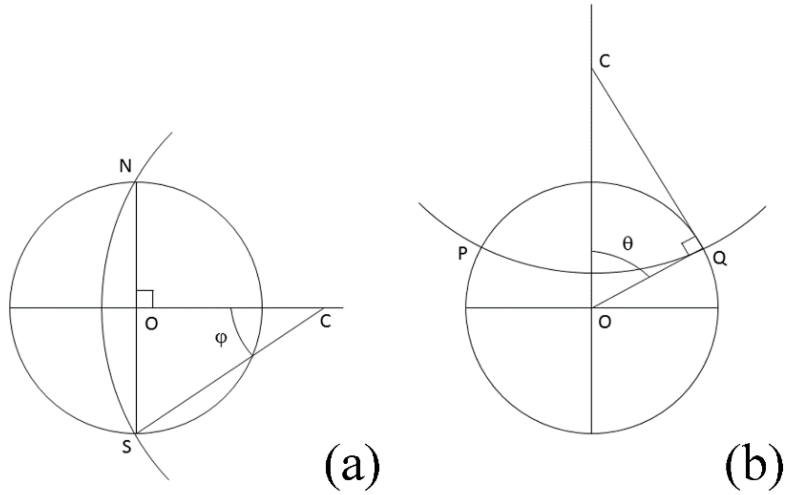


图 2：乌尔夫（Wulff）网的构造：（a）球面上的经度曲线和（b）纬度线曲线。

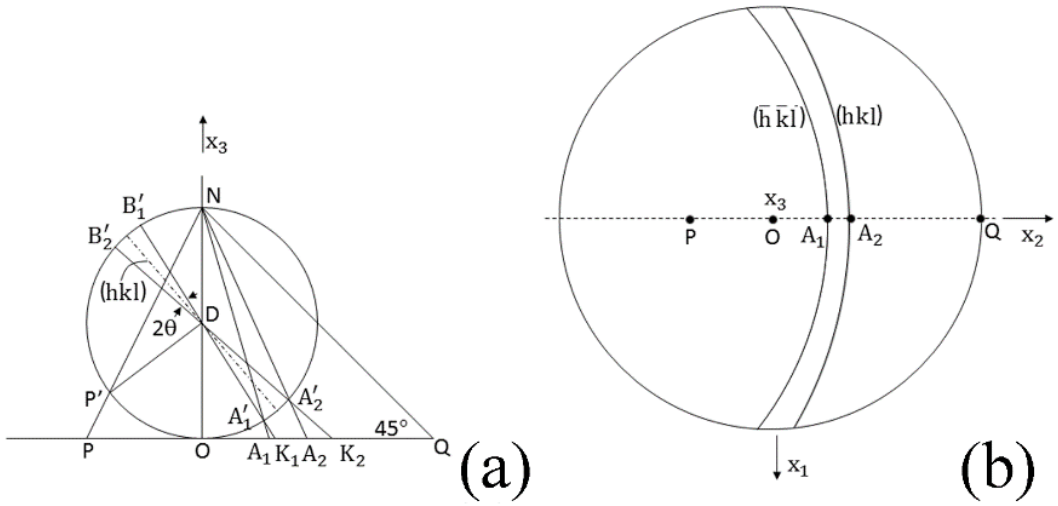


图 3：通过立体投影的几何构造，绘制了一个菊池（Kikuchi）图。

2.2 立体投影

晶体格子的笛卡尔坐标系设置如下：晶体格子的 c 轴设置为坐标系的 z 轴，a 轴设置在 x-z 平面中，然后固定 a 轴和 b 轴的坐标。首先使用（001）或[001]作为初始投影方向计算立体图。具有特定投影方向（hkl）或[uvt]的立体图通过旋转初始立体图，使（hkl）或[uvt]成为投影方向。

图 4（a）显示了一个以 D 为中心的球体和通过 O 的平面，用于立体投影。从球体的北极通过赤道到立体投影平面的投影是 NQ。它在立体投影平面上定义了一个半径为 OQ 的圆。对于立体投影平面上的任意点 P，线段 NP 与球体相交于一个点 P^'。它定义了 P^'到立体投影平面上的 P 的立体投影。在笛卡尔坐标中，球体上的（x，y，z）和平面上的（X，Y）以及立体投影平面上的投影点与球体上相关点的关系由以下公式给出，

$$(X,Y) = (\frac{x}{1-z}, \frac{y}{1-z}) \qquad (2)$$

其中一组点（x，y，z）在单位球上，使得 $x^2 + y^2 + z^2 = 1$.

2.3 多张立体投影图合成

SPICA 允许同时生成来自相同或不同晶体相的两个立体图；可以分别显示两个单独的立体图或叠加的立体图。立体图和乌尔夫（Wulff）网都可以以 0.01° 的增量步骤旋转，以分析晶体学关系。如果立体图来自同一晶体相，则可以显示不同的属性，例如，一个带有选定平面指标的图显示迹线，另一个显示标准平面指标；一个显示平面（hkl）的极点，另一个显示[uvw]极点，或一个显示菊池（Kikuchi）图，另一个显示[uvw]极点。

2.4 菊池（Kikuchi）图与迹线

尽管使用透射电子显微镜（TEM）获得的菊池（Kikuchi）图并非真正的立体投影，但在相机长度相对较大时，它们是很好的近似。此外，在模拟图中使用立体投影可以在单个图上显示所有可能的取向，这在照片蒙太奇中很难实现。

用于在立体投影中生成菊池（Kikuchi）图的坐标系采用了 Young＆Lytton（1971）的工作。标准菊池（Kikuchi）线对的立体投影几何结构如图 3 所示；（b）是（a）的投影，观察者从 N 朝向 O。在这里，投影的平面法线 P（P_x，P_y）可以从以下方程中计算得出，

$$P_x = (2DO)\tan\left(\frac{1}{2}\gamma\right) P'_x / (P'^2_x + P'^2_y)^{\frac{1}{2}} \tag{3a}$$

$$P_y = (2DO)\tan\left(\frac{1}{2}\gamma\right) P'_y / (P'^2_x + P'^2_y)^{\frac{1}{2}} \tag{3b}$$

$$\gamma = \cos^{-1}[P'_z/(P'^2_x + P'^2_y + P'^2_z)^{\frac{1}{2}} \tag{3c}$$

其中，P'_x, P'_y, 和 P'_z是P' $(r = (P'^2_x + P'^2_y + P'^2_z)^{\frac{1}{2}})$ 在立体投影的标准基准上的坐标，γ 是DP'的法线与 DO 之间的角度。上述公式可以通过将 $\theta = 0°$ 应用来生成迹线。

菊池（Kikuchi）图是从（h k l）立体投影的数据集中生成的，而在第二个立体图上可以从同一晶体相的[u v w]立体投影中找到菊池（Kikuchi）图上的晶带轴的分布。为了绘制迹线，我们需要知道平面法线的指数。对于立方晶体，平面法线与具有与该平面相同指数的取向平行，但是对于非立方晶体，需要在平面指数和平面法线指数之间进行转换。在 SPICA 中，基于（Liu＆Liu，2012）的矩阵提供了从平面（h k l）到平面法线[u v w]的转换函数。

2.5 TEM 样品台倾动和转动的预测

在透射电子显微镜（TEM）实验中，利用计算辅助的方法对晶体样品进行定向调整是可能的，前提是晶体样品的晶格参数已知。在计算辅助下，可以将显微镜保持在图像模式，同时将样品倾斜到在TEM样品支架可用范围内的任何晶区轴上。Chou（1987）描述了一种用于样品定向调整的立体投影应用。JECP/SP中采用了稍微不同的算法，并在SPICA中继承了这种算法。

关键是在立体投影球上设置TEM样品支架和晶体定向的位置。TEM旋转台的倾角和第二个倾角被假设沿立体投影球的经度和纬度。晶体定向可以从观察到的选区电子衍射（SAED）图中获得。假设当前观察到的SAED图具有一个晶体取向[u v w]。对于SAED图上的任何衍射斑点（hkl），方位角 x 在（000）-（hkl）线和TEM样品支架（或旋转台轴）在荧光屏上的投影之间，如图4所示。可以使用上述输入参数计算立体投影图，以提供所有晶带轴的计算预测倾斜或旋转角度。TEM支架的倾斜限制也可以在生成的立体图中绘制出来。

2.6 系列晶体学计算小程序

上面提到的一个模块用于将晶体平面（h k l）转换为非立方晶体相的平面法线[u v w]。其他模块包括计算两个晶体平面之间的角度、两个晶带轴之间的角度或平面法线与晶带轴之间的角度，六方晶系中米勒和米勒-勃拉维指数之间的转换，以及一个计算得到的反射（hkl）列表，包括平面间距和动力学强度。

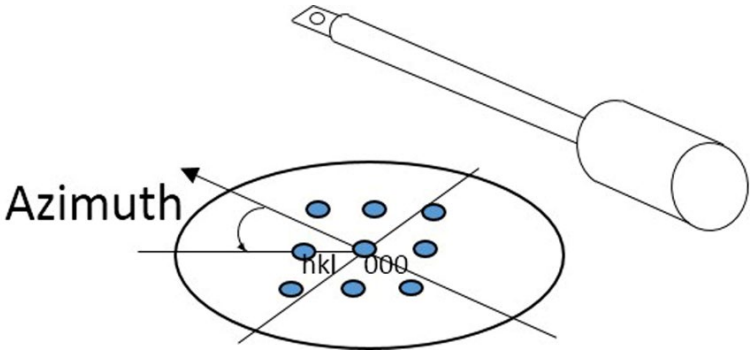


图 4: 观察到的 SAED 图样与 TEM 样品台之间的几何关系，用于在 SAED 实验中作为立体投影的指导。

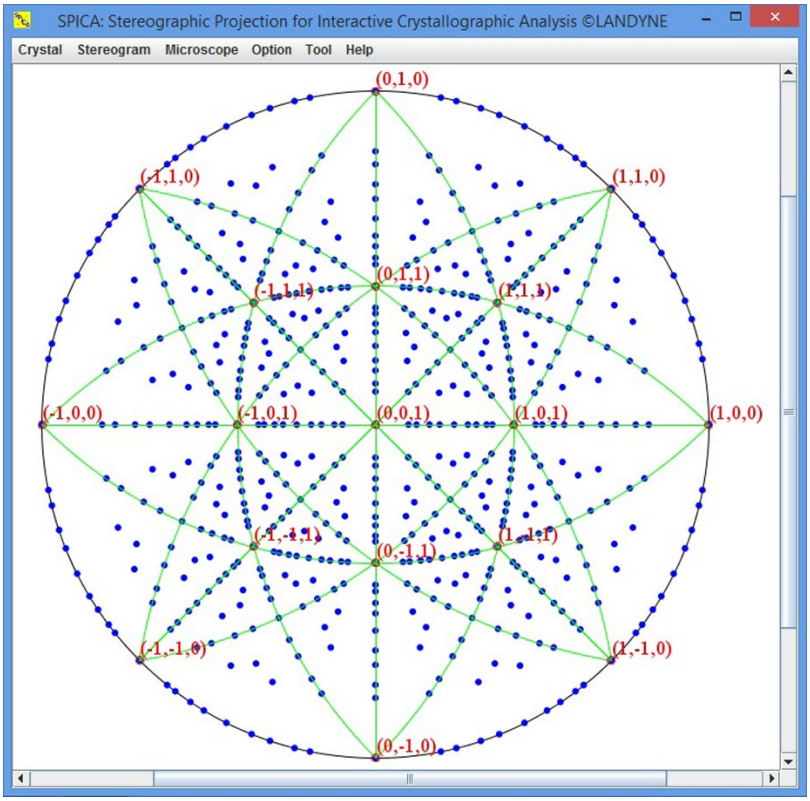


图 5: SPICA 显示一个立方结构的(hkl)立体图谱作为示例。

3. 软件设计与图形用户界面

SPICA 是使用 Oracle 的 Java SE Development Kit 8（JDK8u74）进行编程的。它已经在搭载 Java 虚拟机（即 Java 2 Runtime Environment，J2RE）的 Microsoft Windows 7 和 8 操作系统上进行了成功测试。该软件可以作为一个独立的程序执行，也可以作为 Landyne 软件包中的一个组件执行，配备有一个启动器。这两者可以在 https://landyne.com 下载。

SPICA 的图形用户界面（GUI）充分利用 Java Swing 提供了一个类似于 Windows 风格的操作环境。它包括一个可伸缩的立体图显示面板以及用于数据输入/输出和图形编辑操作的各种对话框。图 1 显示了 SPICA 的显示面板，其中包含一个菜单栏和一个带有一些主要追踪线的立方体（hkl）立体图的示例。图 2 显示了 SPICA 中的三个基本操作对话框：（a）计算对话框，（b）极点范围对话框和（c）用于 Wulff 网和立体图的定向对话框。SPICA 的更多用于其他目的的操作对话框也是可用的（未在此处显示）。

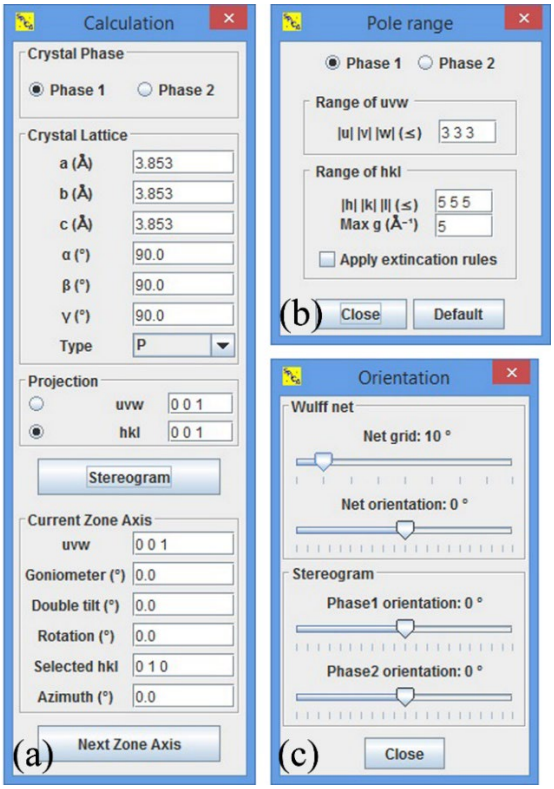


图 6: SPICA 中的三个基本操作对话框，(a) 计算对话框，(b) 极点范围对话框和(c) 用于 Wulff 网和立体图的方向对话框。

SPICA 是一个完全功能的工具，用于生成晶体方向和平面的立体图。要生成一个立体图，用户需要提供晶体的晶格参数，即 a、b、c、α、β、γ，以及投影方向，[uvw]或（hkl）。作为一个选项，可以在生成的立体图上绘制并旋转 Wulff 网。晶体的晶格参数可以从数据文件中加载，并在计算对话框中进行调整（参见图 2(a)）。可以从两个晶体相的两个立体图生成并叠加到一个用于分析其结构关系的复合立体图中。可以编辑（hkl）

的列表，以显示所选（hkl）极点的追踪线。可以显示从（hkl）极点的生成数据和入射光波长中生成的 Kikuchi 图。Kikuchi 图的晶带轴可以从第二个立体图上的相同晶体相生成，然后与 Kikuchi 图叠加。附加应用是预测双倾斜/旋转 TEM 支架的晶带轴的倾斜/旋转角度。

4. 软件使用

SPICA 主要使用 Java 进行编码，部分代码仅适用于 Microsoft Windows 的个人计算机。要运行该软件，您的个人计算机必须安装 Java Runtime Environment（JRE）1.8.0_60 或更高版本。Landyne 套件（包括 SPICA）的可执行字节码可以在 https://landyne.com 获取。

在选择的目录中解压安装文件 landyne5.z7，然后使用 Landyne 管理条，选择 SPICA。

以下是使用 SPICA 的基本步骤：

- 默认输入晶格为 FePt $L1_0$ 和 MgO FCC，用于晶体相 1 和晶体相 2。
- 晶体晶格可以从晶体/相加载，并通过输入字段进行修改。
- 单击 Calculation/Stereogram 以生成立体图投影图。
- 单击鼠标右键以修改显示选项。
- 计算 hkl 立体图，并单击鼠标右键以选择 Show trace 以进行显示。
- 计算 hkl 立体图，并选择 Show Kikuchi 以显示 Kikuchi 图。
- 加载相同相的其他相，并计算 uvw 以显示晶带轴。
- 按住 Ctrl 并单击鼠标左键以设置视点中心。
- 单击立体图/极点列表，以删除选定的极点或添加新的极点。
- 单击立体图/定位，可以旋转 Wulff 网和立体图。
- 叠加的立体图投影提供了两个相的晶体学关系。
- 单击 Calculation/Goniometer 以生成 TEM 支架信息。
- 单击 Option 以更改颜色、标签大小和倾斜标签。
- 单击 Tool 以计算两个[uvw]或两个(hkl)的角度。
- 单击 Help/Current drive 以获取当前驱动程序的序列号。

关于 i) 带有选定跟踪线的(hkl)立体图和 ii) 带有晶带轴索引的 Kikuchi 图的更多详细信息。创建(hkl)立体图和通过选择第二相作为第二相的同相结合选定的跟踪线通常很容易。通常先调整 hkl 范围，然后使用鼠标右键选择跟踪线。创建 Kikuchi 图并通过选择第二相作为第二相并在[uvw]立体图上操作来组合晶带轴的索引也很容易。

尽管 SPICA 中仅涉及晶格参数，但通常使用 Landyne 套件的晶体结构文件作为输入文件。可以使用 New Crystal Structure File 对话窗口准备新的晶体结构数据文件（更多详细信息请参见 SVAT）。该对话窗口为用户提供自动助手，确保满足文件格式的要求。模板中嵌入了 Hermann-Mauguin 符号法中的 230 个空间群，这些空间群在国际晶体学表中列出。要保存数据结构，单击 Save 按钮；或者要创建一个新的，请单击 New 按钮。

晶体文件还可以从以前的数据转换为修改，或从晶体学信息文件（CIF）中转换。如果使用非常规符号法的数据文件来表示三斜、单斜和正交系统，请单击备用设置（1~74）。提供了用于将非常规表示法的文件转换为标准表示法的工具。

5. 应用举例

下面给出的例子是用于展示 SPICA 的有效性和实用性。仅給出简要的使用步骤，更详细的操作在 SPICA 的用户手册列出。

5.1 立体投影图和乌尔夫（Wulff）网

生成立体图的输入参数包括晶体相的晶格参数和投影方向。可以使用菜单栏从晶体结构的输入文件中加载晶格参数，如果需要，可以在计算对话框中重新调整晶格参数。杆的范围由极点范围对话框中的一组预设值控制。当生成杆的列表时，可以从列表中删除杆，或者将新的杆添加到列表中。立体图和 Wulff 网可以分别旋转。立体图的显示可以进行缩放。图 6 显示了六角结构 Zn 的（hkl）立体投影图（a）和[uvw]投影立体图（b），其中 a = 0.26649 nm，b = 0.226649 nm，c = 0.49468 nm，α = 90°，β = 90°，γ = 120°。为了清晰显示所有索引，最大索引选择为 h ≤ 2，k ≤ 2，l ≤ 2，u ≤ 3，v ≤ 3 和 w ≤ 1。在立体图中标记了米勒（Miller）指数；米勒-布拉维（Miller-Bravais）指数可以通过 SPICA 中的一个模块从米勒（Miller）指数转换而来。用户可以通过乌尔夫（Wulff）网作为测量工具应用于立体图。乌尔夫（Wulff）网在图 1 中应用，在图 6 中没有应用。

5.2 两立体投影图 合成

取自我们在$Mn_2CrGa_{1-x}Al_x$合金（x = 0.0, 0.2, 0.5）上的最新工作的一个示例（Li等人，2016）。合金的自旋分解（x = 0.2, 0.5）在500°C退火处理2小时后生成了两个晶体相，并具有固定的取向关系。$Mn_2CrGa_{0.5}Al_{0.5}$合金中两个相的晶格参数列在表1中。图8（a）显示了$Mn_2CrGa_{0.5}Al_{0.5}$合金中两个晶体相的透射电子显微镜图像，浅灰色的立方相具有$Mn_{63}Cr_{11}Ga_{13}Al_{13}$的成分，而深灰色的条形状的四方相具有$Mn_{45}Cr_{31}Ga_{13}Al_{11}$的成分。图8（b-d）显示了选择区电子衍射（SAED）图，以揭示两个晶体相的取向关系。图9显示了（a）立方相上的索引标签和（b）四方相上的索引标签的复合立体图。两个晶体相的固定取向关系为：

$(001)_t$ // $(100)_c$　　$[100]_t$ // $[012]_c$　　$[310]_t$ // $[011]_c$　　$[120]_t$ // $[010]_c$

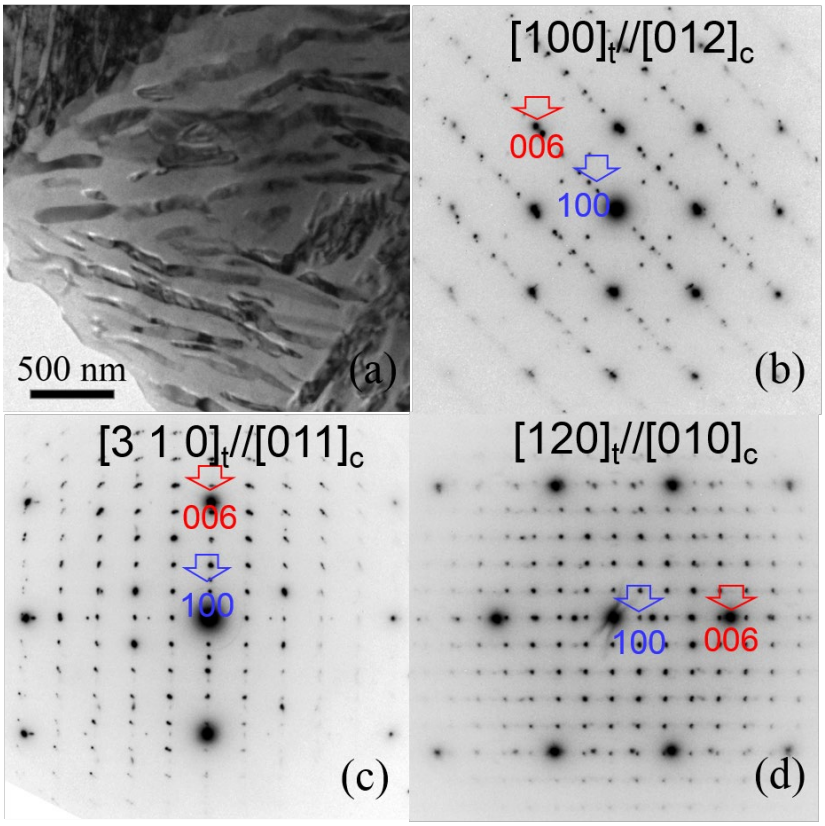


图7： $Mn_2CrGa_{0.5}Al_{0.5}$合金中的两个晶体相，由于自旋分解产生：（a）两个相的透射电子显微镜图像，浅灰色为立方相，深灰色为带状的四方相；（b-d）从两个晶体相处获取的电子衍射图。

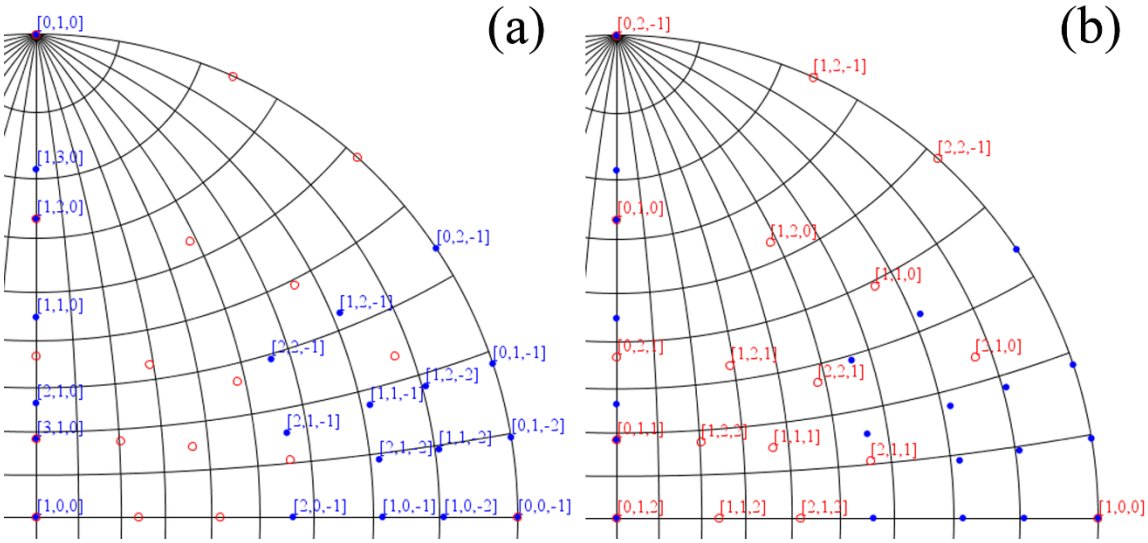


图8： 复合立体图，其中（a）为立方相的指数标签，（b）为四方相的指数标签。

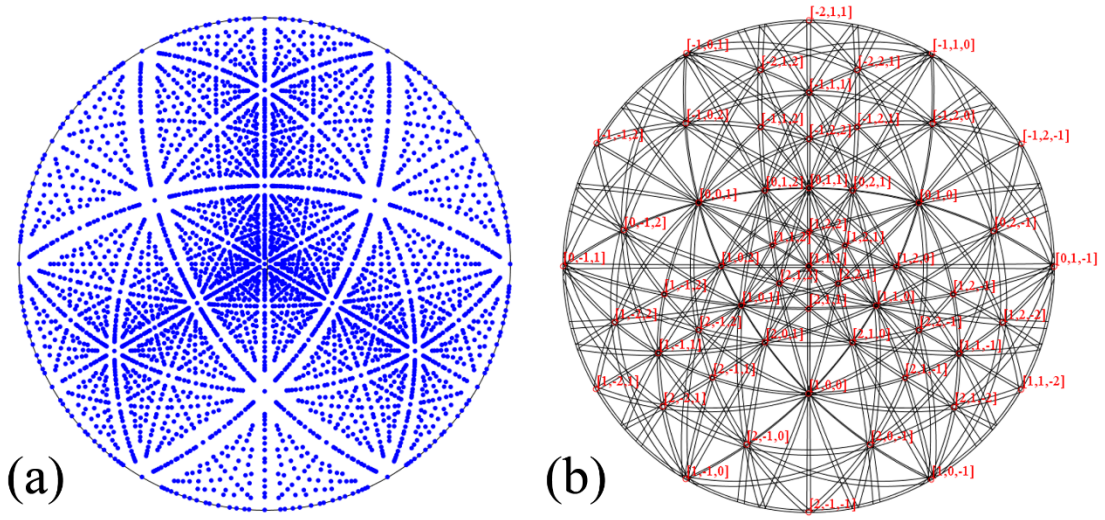


图 9： 具有[111]晶带轴的简单立方体结构的菊池（Kikuchi）图，（a）使用 Liu 和 Liu（2012）描述的方法生成，（b）使用 Young 和 Lytton（1971）的公式生成，波长为 0.0251 Å（200kV）。

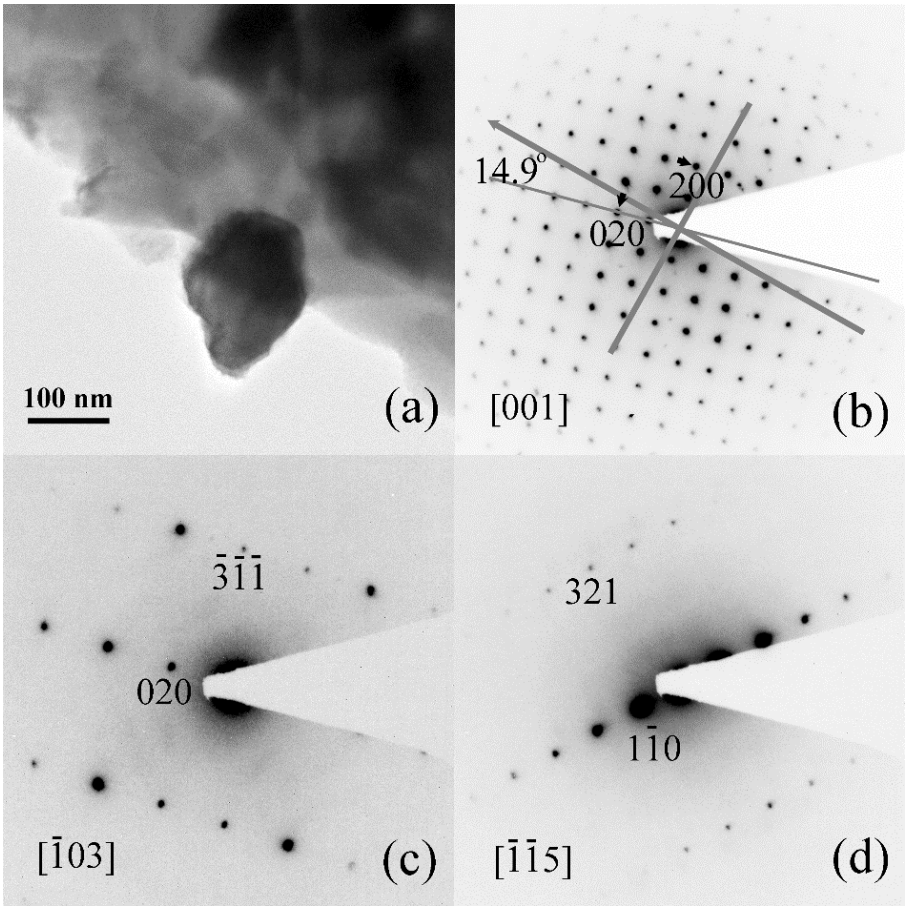


图 10. Co-Fe-Cr-Ge 合金中的新四方相。（a）四方相的透射电子显微镜图像，晶粒尺寸约为 150 nm，（b-d）四方相的电子衍射图。

5.3 菊池（Kikuchi）图和迹线

菊池（Kikuchi）图通过首先生成（h k l）的立体投影图，然后在 SPICA 中选择相应的显示模式来展示。菊池（Kikuchi）图的额外参数是入射光束的波长或 TEM 的高电压。图 10 显示了一个具有[111]晶带轴的基本立方结构的菊池（Kikuchi）图，（a）使用 Liu & Liu（2012）所述的方法生成，（b）使用 Young & Lytton（1971）的公式生成，波长为 0.0251 Å（200kV）。 [uvw]晶带轴的重叠分布在图 10（b）中显示，作为复合立体投影图的结果。

类似于菊池（Kikuchi）图，X 射线衍射中科塞尔（Kossel）图和电子背散射衍射（EBSD）图也可以通过在 SPICA 中选择适当的波长来模拟。跟踪曲线通过生成（h k l）的立体图，然后选择相应的模式来显示；一个示例在图 1 中展示。

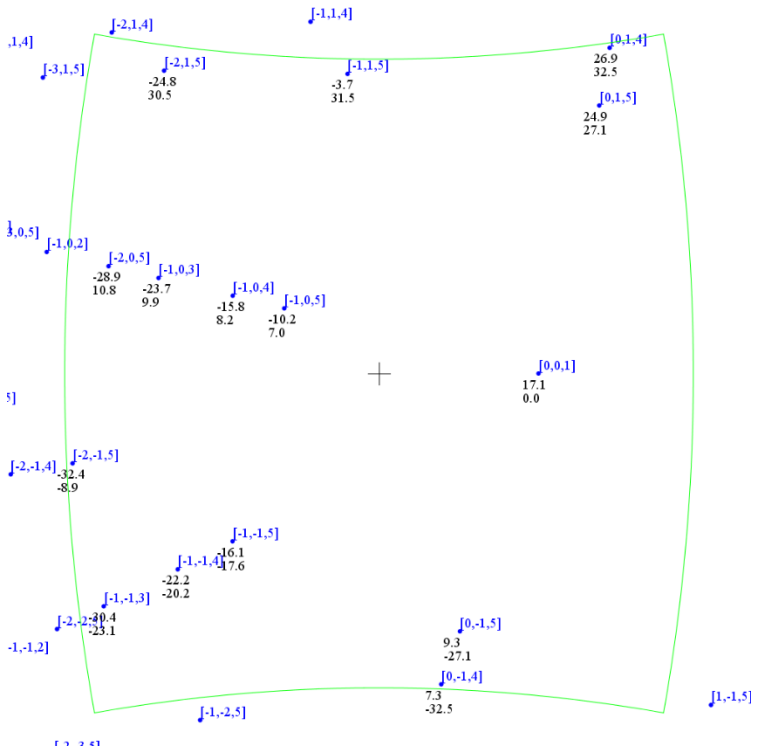


图 11. 以 Co-Fe-Cr-Ge 合金中的新四方相为例，使用 SPICA 来预测在 TEM 试样支架的倾斜限制范围内的所有晶带轴的倾斜角度。图中选取并展示了两个[$\bar{1}$03]和[$\bar{1}\bar{1}$5]晶带轴的 SAED 图，如图 10（c）和（d）所示。

5.4 TEM 样品台的倾动和转动角预测

这一功能在许多情况下都非常有益。例如，当观察到较强应力的样品时，导致菊池（Kikuchi）线对的可见度不足时；当观察到束流敏感的试样，并且在电子束照射试样感兴趣的区域时，必须缩短试样倾斜的时间；当研究颗粒尺寸较小的试样时，即使微小的方

向调整也可能导致相应的衍射图由于侧向样品位移而消失；以及当使用结构确定的可达晶带轴模式获取电子衍射强度时。

以我们最近的研究中对 $Co_{39}Fe_{42}Cr_9Ge_{10}$ 组成的新四方相的电子衍射实验为例（Jin *et al.*，2016）。晶格参数列在表 1 中。图 10（a）显示了新四方相的 TEM 图像，其晶粒尺寸约为 150 纳米，图 11（b-d）显示了新四方相的 SAED 衍射图。在实验中，图 11（b）中的[001] SAED 图是在倾斜角度（17.1°，0.0°）下使用双倾斜 TEM 支架获得的。矢量（000）-（010）与支架轴之间的夹角约为 14.9°。使用上述参数，通过 SPICA 生成了图 12，用于预测在 TEM 支架的倾斜限制范围内的所有晶带轴的倾斜角度。根据预测的倾斜角度倾斜 TEM 试样，并获得了所有 SAED 图。图 11（c）和（d）显示了[$\bar{1}$03] 和 [$\bar{1}\bar{1}$5] 晶带轴的两个 SAED 图。需要指出的是，图 11（c）中的禁止反射，例如（010），在图 11（d）中出现，这是由于双重衍射效应导致的。

6. SPICA 的安装与启动

6.1 计算机系统要求

从 Java 官方网站下载并安装最新的 JRE。同时，还可以下载并安装 JAI，它也可以在此处找到：https://www.unl.edu/ncmn-enif/xzli/download.

6.2 软件安装

创建一个专用文件夹用于 LANDYNE 软件套件。将软件包复制并解压缩到该文件夹中。如果用户拥有许可文件，请将许可复制到程序文件夹中。

6.3 用蓝带启动条运行 SPICA

在 LANDYNE 启动条中点击 SPICA 以启动该软件。

6.4 软件许可

需要一个许可文件才能解锁程序以加载新的文件数据。如果没有许可文件，程序将被锁定在演示模式中。许可证可以从 LANDYNE 计算机软件购买。

7. 参考文献

Bennett, T. (1928). *The American Mathematical Monthly*, 35, 24-27.

Bergerhoff, G., Berndt, M. and Brandenburg K. (1996). J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. 101, 221-225.

Boudias, C. & Monceau, D. (1998). CaRIne Crystallography. Verison 3.1. Software CaRIne Crystallography, Senlis, France.

Burgers, W. (1934). *Physica*, 1, 561-586.

Chou, C.T. (1987). *J. Elec. Micros. Tech*. **7**, 263-268.

Cullity B.D. (1978). *Elements of X-Ray Diffraction*, Addison-Wesley, London.

Crystal Studio (2015). http://www.crystalsoftcorp.com.

De Graef, M. (2003). *Introduction to Conventional Transmission Electron Microscopy*, Cambridge University Press.

Edington, J.W. (1976). *Electron Diffraction in the Electron Microscope*, The Macmillan Press Ltd.
Fultz, B. and Howe, J. (2008). *Transmission Electron Microscopy and Diffractometry of Materials,* Springer.
Jin, Y.L., Li, X.Z., Kharel, P., Shah, V.R., Skomski, R., and Sellmyer D.J. (2016). A New Tetragonal Phase in Co-Fe-Cr-Ge Alloy, to be published.
Kohn, S. C. (2007). Terra Nova, 7, 554–556.
Lee, W.-B., Park, C.-R., Park, C.-G. and Chun, C.-H. (1994), Korean J. Electron Microsc. 24, 115-122.
Li, X. Z. (2004). *J. Appl. Cryst*. **37**, 506-507.
Li, X.Z., Zhang, W.Y. and Sellmyer D.J. (2016). A TEM Study of the Spinodal Decomposition in $Mn_2CrGa_{0.5}Al_{0.5}$ Alloy, to be published.
Liu, H. and Liu, J. (2012). *J. Appl. Cryst.* 45, 130-134. .
Siegrist, T. (1997). J. Appl. Cryst. 30, 418–419.
Stadelmann, P. (1987). Ultramicroscopy, 21, 131–146.
Young C.T. and Lytton J.L. (1972). *J. Appl. Phys*. **43**, 1408-1417.
Zuo, J.M. & Mabon, J.C. (2004). Microsc. Microanal. 10, 1000–1001.