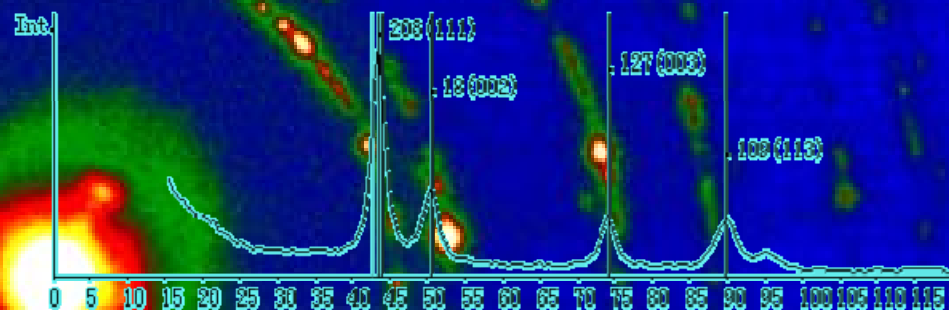


EDP2XRD

Version 1.0.0



刘宏伟

悉尼大学电镜中心

2015.07.12

软件说明书

- 技术说明
- 作者简介
- 功能概述
- 使用详解
- 致谢

技术说明

编程语言: Visual basic 6.0

核心算法: 机器视觉

知识背景: 晶体衍射

关键技术: 图像处理

行数总量: 5050行

运行环境: Windows9X/2000/xp/7操作系统; 64MB
内存; 50MB硬盘空间

作者简介

- 姓名: 刘宏伟
- 专业: 先进材料的制备与表征
- 联系地址: 悉尼大学电镜中心
- 电子邮件: microscopy.liu@gmail.com

功能概述

- 可自动或手动将透射电子衍射环和花样转化为X射线衍射谱
- 可实现单晶和多晶电子衍射花样的转化
- 可实现完整和非完整电子衍射花样的转化

功能概述

- 电子衍射花样图像的预处理及特征搜索与提取
 - 直方图提取
 - 衬度反转
 - 彩色图像灰度化
 - 光滑降噪
 - 锐化增强
 - 边界搜索
 - 二值化
 - 标尺搜索
 - 圆形中心搜索

功能概述

- 可以根据需要设定转换参数
- 针对电子衍射花样标尺信息不完整的情况，可实现手工逐步转换
- 在衍射花样标尺信息完整的前提下，可以一步实现转化
- 可以输出X射线衍射谱为TXT格式数据文件，作为其他X-ray衍射谱分析软件的输入文件
- 可导入晶体结构CIF文件，计算任意晶体的晶面间距，X-ray衍射角，以便寻峰和标定

使用详解

1. 设置转换参数:

- 输入倒空间标尺(默认为5), 单位为1/nm;
- 输入X射线波长(默认为0.154), 单位为 nm;
- 输入衍射环法向分辨率(默认为0.1), 单位为角度;
- 输入衍射环径向分辨率(默认为0.1), 单位为角度;
- 输入起始转换角度(默认为15), 单位为角度.

注: 若各项默认参数不需修改, 即可执行一键转换。

EDP convert

Step I - Set calibration

Scale Length (Pixel)

Reciprocal Distance (1/nm)

Calibration (1/nm)

Step II - Set the centre

Beam centre (Pixel) X

Y

Distance Range (1/nm)

Real space Distance (nm)

X-ray angle (°)

Step III - Conversion into X-ray diffraction pattern

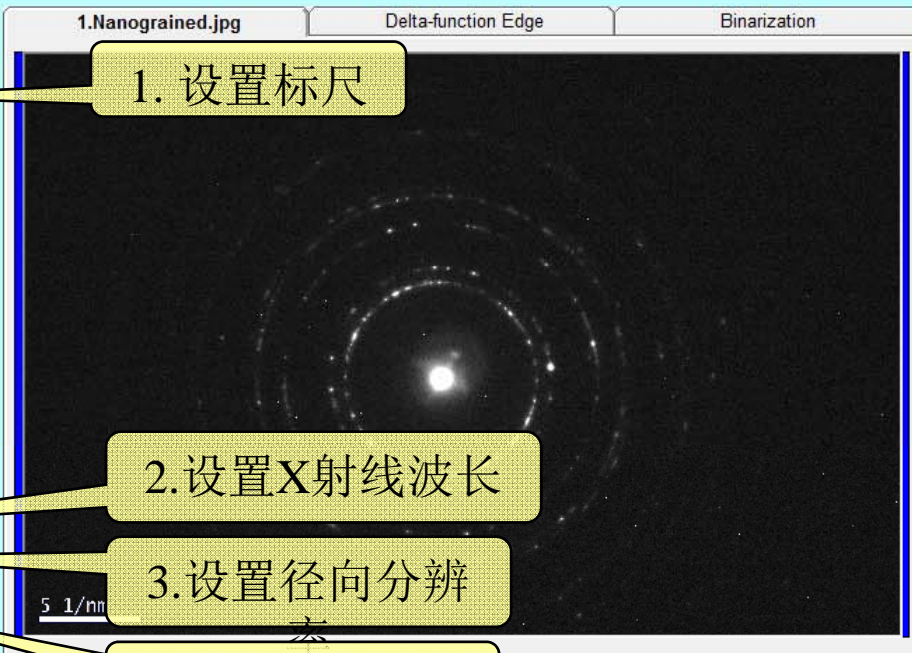
Electron wavelength (nm)

X-ray wavelength (nm)

ED Radius Resolution (°)

ED ring Resolution (°)

Start Angle (°)



Crystal		Refined spots		Hough Trans	
Crystal:					
a	0.368 nm	Alpha	90 °	N max	
b	0.368 nm	Beta	90 °		3
c	0.368 nm	Gamma	90 °		List
No	2 theta	d (nm)	H	K	L
54	103.054	.098	3	1	
55	131.581	.084	3	1	
56	97.95	.102	3	2	
57	103.054	.098	3	2	
58	119.245	.089	3	2	
59	157.874	.078	3	2	
60	125.178	.087	3	3	
61	131.581	.084	3	3	
62	157.874	.078	3	3	

No	Angle (2-th)	Intensity	Normalized	D-spacing

1. 设置标尺

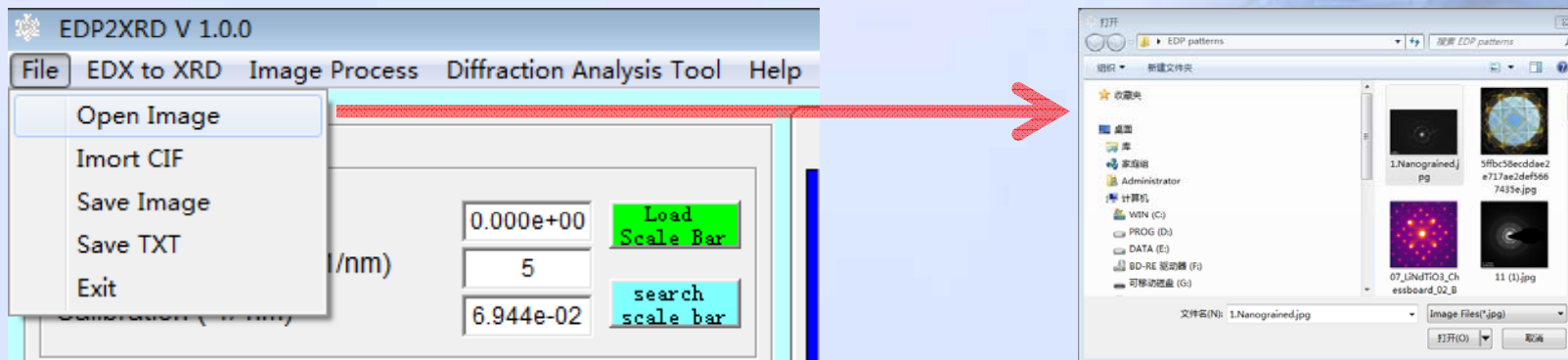
2. 设置X射线波长

3. 设置径向分辨

4. 设置圆周分辨

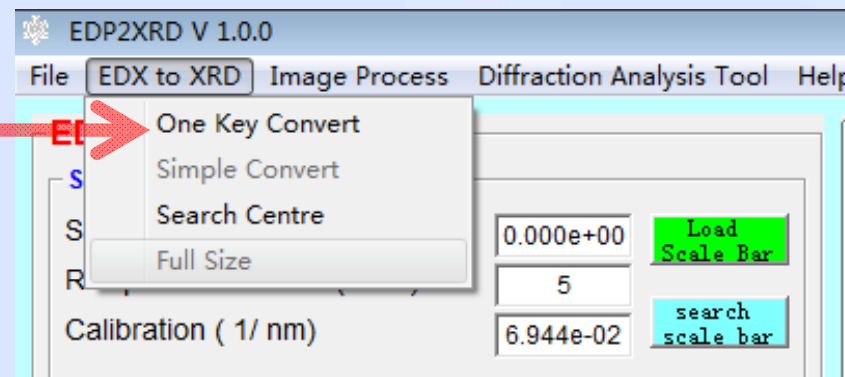
5. 设置起始衍射角

2. 打开或者拖入JPG格式的电子衍射图到图片框位置



3. 自动模式1:一键自动转换

- 从主菜单EDX to XRD 选择 One Key Convert
- 等待图像自动分析图像和给出相应的X射线衍射谱。



注：一键自动转换是当图像噪音大、质量不高、衍射环特征不完整不明显，需要额外图像预处理才能更好完成的情况下的精细转换。

将获得的XRD衍射谱存储为TXT格式。

The screenshot shows the EDP2XRD V 1.0.0 software interface. The main window displays a selected area electron diffraction (SAED) pattern for '1.Nanograined.jpg'. The interface is divided into several sections:

- File Menu:** Includes 'Open Image', 'Import CIF', 'Save Image', 'Save TXT', and 'Exit'.
- Step II - Set the centre:** Parameters include Beam centre (Pixel) X: 296, Y: 232; Distance Range (1/nm): 3.25e+01; Real space Distance (nm): 4.434e-01; X-ray angle (°): 170.
- Step III - Conversion into X-ray diffraction pattern:** Parameters include Electron wavelength (nm): 0.00251; X-ray wavelength (nm): 0.154; ED Radius Resolution (°): 0.5; ED ring Resolution (°): 1; Start Angle (°): 15.
- Crystal Parameters:** a: 0.368 nm, Alpha: 90°; b: 0.368 nm, Beta: 90°; c: 0.368 nm, Gamma: 90°.
- SAED Pattern:** Shows concentric rings with a central spot marked by a crosshair. A scale bar indicates 5 1/nm.
- Table:** A table with columns: No, 2 theta, Intensity, Normalized, d (nm), H, K, L. It lists various diffraction spots.
- XRD Pattern:** A plot of Intensity vs. 2-theta (°) with peaks labeled at 208 (111), 18 (002), and 127 (003).

标定的结果显示在衍射谱的数据列表。

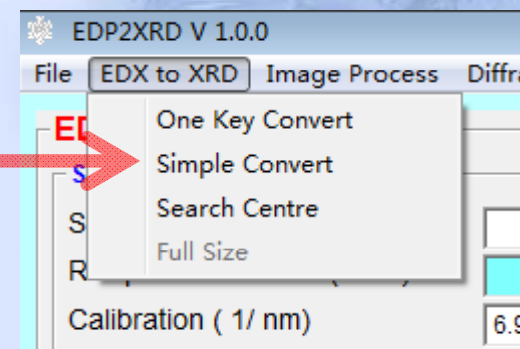
鼠标单击衍射峰位置，会更具提供的CIF文件计算的晶面给出晶面指数。(要更准确需考虑结构消光)

在XRD谱图上移动鼠标，会同时在电子衍射花样上给出对应衍射环的位置。

导入或拖入CIF文件或者输入晶胞参数，自动列出各个面间距和衍射角2-theta。

4. 自动模式2:简单转换

- 从主菜单EDX to XRD 选择 Simple Convert
- 等待图像自动分析图像和给出相应的X射线衍射谱。



注：简单转换是当图像噪音小质量高，衍射环特征完整明显，不需要额外图像预处理就可以完成的情况下的快速转换。最终转换效果与一键转换一致，区别在于图像处理的时耗不同。

5. 手动模式1:简单转换

EDP2XRD V 1.0.0

File EDX to XRD Image Process Diffraction Analysis Tool Help

EDP convert

Setp I - Set calibration

Scale Length (Pixel) **Calibration**

Reciprocal Distance (1/nm) **Search Scale Bar**

Calibration (1/ nm) **Search Scale Bar**

Setp II - Set the centre

Beam centre (Pixel) X **Load Centre**

Y **Load Centre**

Distance Range (1/nm) **Search Centre**

Real space Distance (nm) **Search Centre**

X-ray angle (°) **Search Centre**

Step III - Conversion into X-ray diffraction pattern

Electron wavelength (nm) **Convert**

X-ray wavelength (nm) **Convert**

ED Radius Resolution (°) **Convert**

ED ring Resolution (°) **Convert**

Start Angle (°) **Convert**

1.Nanograined.jpg Delta-function Edge Binarization

Step 1: search scale bar

Step 2: search centre

Step 3: convert

Crystal

Refined spots

Hough Trans

Crystal:

a 0.368 nm Alpha 90° N max

b 0.368 nm Beta 90° 3

c 0.368 nm Gamma 90° List

No	2 theta	d (nm)	H	K	L
54	103.054	.098	3	1	
55	131.581	.084	3	1	
56	97.95	.102	3	2	
57	103.054	.098	3	2	
58	119.245	.089	3	2	
59	157.874	.078	3	2	
60	125.178	.087	3	3	
61	131.581	.084	3	3	
62	157.874	.078	3	3	

No Angle (2-th) Intensity Normalized D-spacing

Ready. NUM 1:36 PM 9/08/2015

注：手动模式简单转换是与自动模式简单转换区别在于后者被分解为三个阶段，但要求图像有标尺。

6. 手动模式2:手工转换

Step 1: 单击“Calibration”, 进入标尺定义模式.

EDP2XRD V 1.0.0

File EDX to XRD Image Process Diffraction Analysis Tool Help

EDP convert

Step I - Set calibration

Scale Length (Pixel) 0 Calibration

Reciprocal Distance (1/nm) 5 Search Scale Bar

Calibration (1/ nm) 1

Step II - Set the centre

Beam centre (Pixel) X 0 Load Centre

Y 0

Distance Range (1/nm) 0

Real space Distance (nm) 0 Search Centre

X-ray angle (°) 170

Step III - Conversion into X-ray diffraction pattern

Electron wavelength (nm) 0.00251 Convert

X-ray wavelength (nm) 0.154

ED Radius Resolution (°) 0.5

ED ring Resolution (°) 1

Start Angle (°) 15

1.Nanograined.jpg Delta-function Edge Binarization

Step 1

5 1/nm

Crystal

Crystal:

a 0.368 nm Alpha 90 ° N max

b 0.368 nm Beta 90 ° 3

c 0.368 nm Gamma 90 ° List

No	2 theta	d (nm)	H	K	L
54	103.054	.098	3	1	
55	131.581	.084	3	1	
56	97.95	.102	3	2	
57	103.054	.098	3	2	
58	119.245	.089	3	2	
59	157.874	.078	3	2	
60	125.178	.087	3	3	
61	131.581	.084	3	3	
62	157.874	.078	3	3	

No Angle (2-th) Intensity Normalized D-spacing

Ready. NUM 1:36 PM 9/08/2015

注：手工转换是对于标尺信息缺少或不清晰的情况下，手工校准，以便获得准确信息。

6. 手动模式2:手工转换

Step 2 指定标尺长度

鼠标左键单击标尺起点位置P1, 然后按住不放, 拖动到标尺结束位置P2, 红色橡皮筋线段会一直跟踪到松开鼠标左键。在弹出的对话框输入所校准的对象标尺长度。其结果将被自动输入到Scale length (Pixel) 一栏。

The screenshot displays the EDP2XRD V 1.0.0 software interface. The main window shows a diffraction pattern with a scale bar labeled '1/nm'. Two red arrows, labeled P1 and P2, indicate the start and end points of the scale bar. A dialog box titled 'Option of Calibrate EDP' is open, showing the 'Calibration' section with the following options:

- Measure Scale Bar Length [5] 1/nm
- Measure d-spacing [0.2] nm

The 'OK' button is highlighted in green. The left sidebar contains three sections:

- Step I - Set calibration:** Scale Length (Pixel) [0], Reciprocal Distance (1/nm) [5], Calibration (1/nm) [1].
- Step II - Set the centre:** Beam centre (Pixel) X [0], Y [0], Distance Range (1/nm) [0], Real space Distance (nm) [0], X-ray angle (°) [170].
- Step III - Conversion into X-ray diffraction pattern:** Electron wavelength (nm) [0.00251], X-ray wavelength (nm) [0.154], ED Radius Resolution (°) [0.5], ED ring Resolution (°) [1], Start Angle (°) [15].

The right sidebar shows a histogram and a table of refined spots:

No	2 theta	d (nm)	H	K	L
54	103.054	.098	3	1	
55	131.581	.084	3	1	
56	97.95	.102	3	2	
57	103.054	.098	3	2	
58	119.245	.089	3	2	
59	157.874	.078	3	2	
60	125.178	.087	3	3	
61	131.581	.084	3	3	
62	157.874	.078	3	3	

The bottom left corner shows a table with columns: No, Angle (2-th), Intensity, Normalized, D-spacing.

6. 手动模式2:手工转换

Step 3 指定衍射环圆心位置

单击“Load Centre”，进入圆心指定模式。移动鼠标到衍射花样中，鼠标作为圆心在其周围出现一个红色空心圆。仔细移动红色圆圈位置，使其与衍射环圆心位置重合。然后单击鼠标左键，获得圆心位置。该位置被自动记录到Beam centre (Pixel) X Y 一栏。

1. 单击进入圆心指定模式

2. 移动鼠标至圆心位置，单击退出。

EDP convert

Step I - Set calibration

Scale Length (Pixel) 0 Calibration

Reciprocal Distance (1/nm) 5 Search Scale Bar

Calibration (1/ nm) 1

Step II - Set the centre

Beam centre (Pixel) X 0 Load Centre

Y 0

Distance Range (1/nm) 0 Search Centre

Real space Distance (nm) 0

X-ray angle (°) 170

Step III - Conversion into X-ray diffraction pattern

Electron wavelength (nm) 0.00251 Convert

X-ray wavelength (nm) 0.154

ED Radius Resolution (°) 0.5

ED ring Resolution (°) 1

Start Angle (°) 15

No	2 theta	d (nm)	H	K	L
54	103.054	.098	3	1	
55	131.581	.084	3	1	
56	97.95	.102	3	2	
57	103.054	.098	3	2	
58	119.245	.089	3	2	
59	157.874	.078	3	2	
60	125.178	.087	3	3	
61	131.581	.084	3	3	
62	157.874	.078	3	3	

Step 4 单击convert, 开始转换。

图像处理功能

直方图提取

彩色图像灰度化

衬度反转

光滑降噪

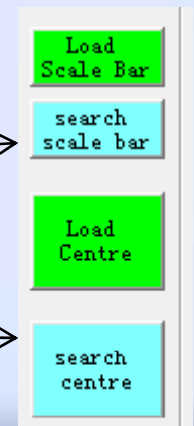
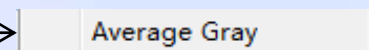
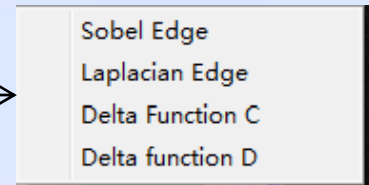
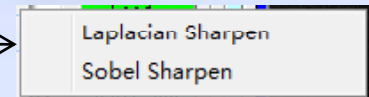
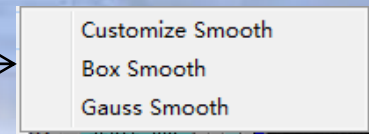
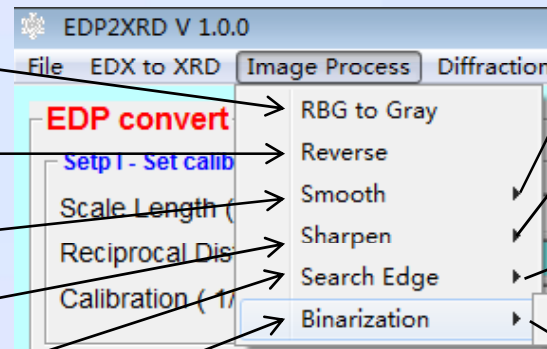
锐化增强

边界搜索

二值化

标尺搜索

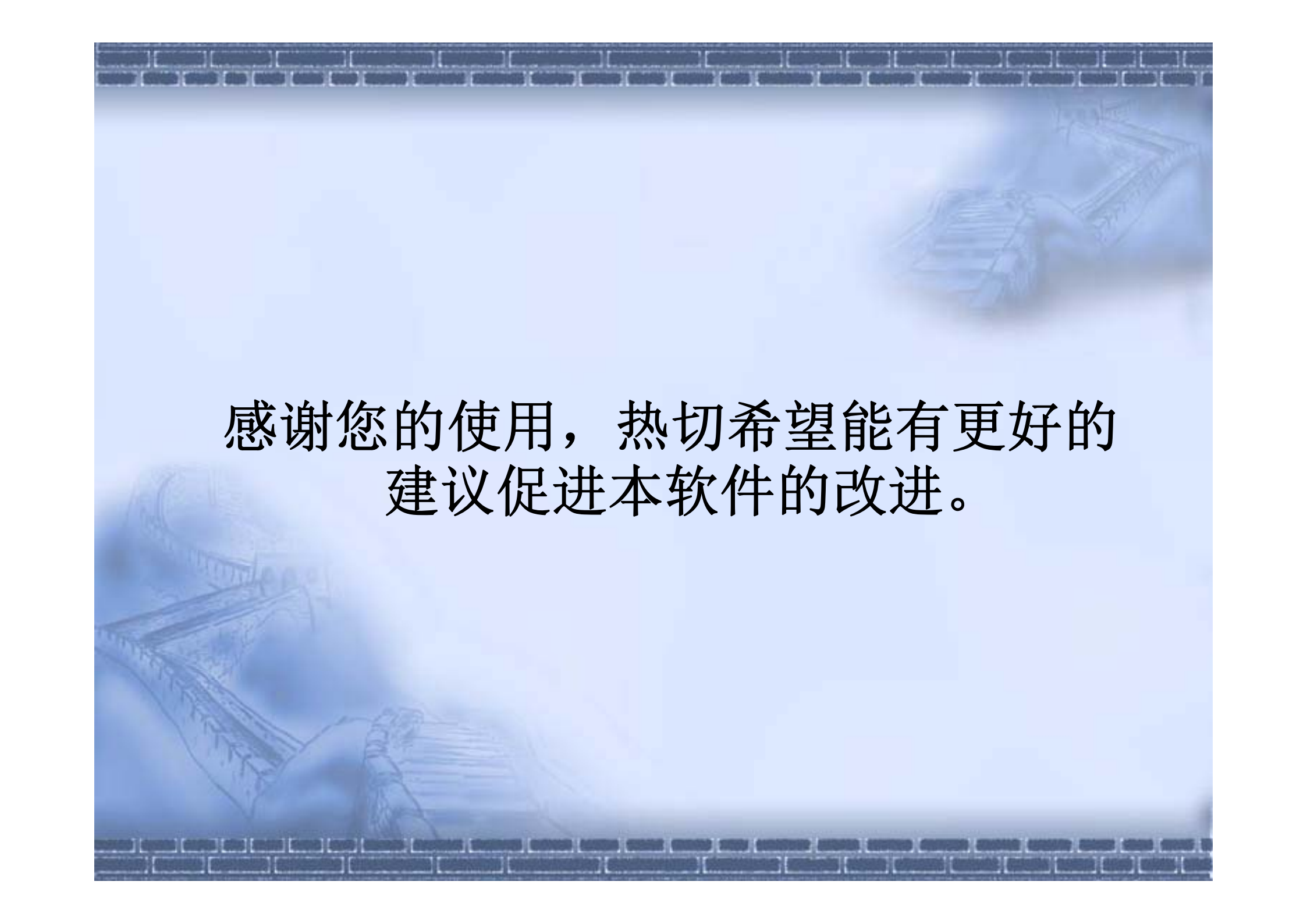
圆形中心搜索



致谢

本软件的设计编写，得益于与悉尼大学电镜中心的Dr Matthew Foley, Dr Anna Ceguerra和悉尼大学航空与机械工程系Dr Qing Lin等的讨论。

刘宏伟
20150725悉尼



感谢您的使用，热切希望能有更好的
建议促进本软件的改进。