

# abTEM 应用案例概览

## 1. 与 AI 技术结合

- **Yang et al. (2025)**, Advanced Science. 该工作构建了一个深度学习框架 (DIVAESR + Faster R-CNN) 用于沸石中单分子 (噻吩、吡啶) 的检测。研究者利用 **abTEM** 模拟了集成差分相位对比 (iDPC-STEM) 图像, 用作神经网络的训练数据 <sup>1</sup>。在图像增强和目标检测模块中, 所有低剂量 STEM 图像均通过 **abTEM** 生成的高质量模拟图像 (结合噪声和失真变换) 来训练模型, 显著提高了检测准确率 (DOI: 10.1002/advs.202408629)。
- **Ghosh et al. (2024)**, npj Computational Materials. 该工作采用基于集合学习的深度网络 (ELIT) 自动识别 MoS<sub>2</sub> 中硫空位缺陷。研究团队用 **abTEM** 的多层片段算法模拟了含有不同点缺陷的 HAADF-STEM 图像, 用于生成训练标签 <sup>2</sup>。具体地, 研究者构造了掺杂单/双硫空位的 MoS<sub>2</sub> 晶体模型, 利用 **abTEM** 将其投影成原位 STEM 图像, 再对这些合成图像进行标注和数据增强, 以训练缺陷检测网络 <sup>2</sup> (DOI:10.1038/s41524-024-01448-7)。
- **Li et al. (2025)**, arXiv (AutoMat 项目)。该工作提出了“从显微镜到材料”的自动结构重建管道。作者从公开材料数据库 (C<sub>2</sub>DB、Materials Project 等) 收集了2143种单层晶体结构, 并使用 **abTEM** 对每种结构生成其 iDPC-STEM 模拟图像 <sup>3 4</sup>。这些合成数据构成一个高质量基准数据集, 用于训练机器学习模型, 实现从 STEM 图像到晶体结构的端到端预测。文中明确指出“我们使用开源的 **abTEM** 仿真引擎生成每个结构对应的 iDPC-STEM 图像” <sup>3 4</sup> (arXiv:2505.12650)。

## 2. 与 DFT 相结合

- **Hofer et al. (2025)**, Journal of Microscopy. 该工作利用单侧带 (SSB) 电子多焦点像重构技术直接检测 WS<sub>2</sub> 中缺陷引起的电荷转移。研究者首先基于密度泛函理论 (DFT) 计算了缺陷结构的电子态和散射势能, 然后用 **abTEM** 的多层片段算法分别以 DFT 势和独立原子模型 (IAM) 势生成4D-STEM数据 <sup>5</sup>。结果表明, 当使用 DFT 势时, W 原子和 S 原子的相位对比发生了反转, 这与实验结果一致 <sup>5</sup>。文中明确写到“使用 **abTEM** 对4D-STEM数据进行多层片段模拟”并对比了包含与不包含键合效应的模拟结果 <sup>5</sup>。这一案例展示了将 **DFT 计算势能** 与 **abTEM** 联合使用, 以模拟和解释键合导致的电荷转移对电子显微成像的影响 (DOI:10.1111/jmi.13404)。
- **Jiang et al. (2023)**, Nature Communications. 该工作通过 4D-STEM 中的质心成像 (Center-of-Mass, CoM) 实验直接绘制了单层 MoS<sub>2</sub> 的电场和电荷密度图。研究者利用 DFT 计算了硫和钼原子的散射势, 并用 **abTEM** 模拟了 STEM 强度来校准实验结果。文中指出实验中测得的 ADF 强度“符合 **abTEM** 多层片段模拟”结果 <sup>6</sup>, 并结合 DFT 模型 (根据核电荷) 重建电子密度图。该研究通过 **abTEM 模拟** 验证了不同原子 Z 值下的强度比例, 并成功区分了核电荷和电子电荷分布 <sup>6</sup>。这表明在基于 DFT 计算的散射势能下, **abTEM** 能有效模拟和解释实验观测 (DOI:10.1038/s41467-023-39304-9)。

## 3. 与实验紧密结合

- **Jiang et al. (2023)**, Nature Communications (同上)。该工作不仅利用 **abTEM** 验证 DFT 结果, 也将模拟用于实验解释: 研究者将 **abTEM** 模拟所得的散射强度与实验 CoM 图像进行对比, 对应了论文中的“通过 **abTEM** 多层片段模拟验证实验结果” <sup>6</sup>。利用已知样品核电荷信息, 研究者用 **abTEM** 进行透射波前卷积, 获得理论核电荷密度图, 并与实验值相减, 最终得到电子电荷密度 <sup>6</sup>。这一过程直接将模拟结果用于实验数据的定量解读, 展示了 **abTEM** 在结合 4D-STEM 实验拟合和解释中的作用 (DOI: 10.1038/s41467-023-39304-9)。

- **Han et al. (2025)**, Nature Communications. 该工作针对金属有机框架 (MOF) 材料, 研究了在极低电子剂量下进行电子全息成像 (4D-STEM ptychography) 的可行性。研究组通过 **abTEM** 在 GPU 环境下模拟了不同会聚角和剂量条件下的4D-STEM数据<sup>7</sup>。文中明确说明“使用 abTEM 软件包模拟了 4D-STEM 数据集”<sup>7</sup>。通过对比多组模拟数据, 作者确定了最佳的成像参数 (如 10 mrad 会聚角和~100 e<sup>-</sup>/Å<sup>2</sup> 剂量), 并在实验中验证了重构结果。该例展示了 abTEM 在实验前通过虚拟实验优化参数、预先验证成像方案的典型应用<sup>7</sup> (DOI:10.1038/s41467-025-56215-z)。

以上案例均在正式出版物中明确引用了 abTEM 库, 并公开了使用方法和数据来源。引用格式示例已附在各条末尾 (包括 DOI 或 arXiv 号)。

**参考文献:** 各案例中引用的文段已使用 **【+】** 格式给出。具体文献及 DOI 链接请参阅各条说明。

---

<sup>1</sup> Deep Learning-Enabled STEM Imaging for Precise Single-Molecule Identification in Zeolite Structures - PubMed

<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/39703985/>

<sup>2</sup> Exploring electron-beam induced modifications of materials with machine-learning assisted high temporal resolution electron microscopy | npj Computational Materials

[https://www.nature.com/articles/s41524-024-01448-7?error=cookies\\_not\\_supported&code=410893e8-a300-4da0-a404-9e912f0b08f9](https://www.nature.com/articles/s41524-024-01448-7?error=cookies_not_supported&code=410893e8-a300-4da0-a404-9e912f0b08f9)

<sup>3</sup> <sup>4</sup> AutoMat: Enabling Automated Crystal Structure Reconstruction from Microscopy via Agentic Tool Use

<https://arxiv.org/html/2505.12650v1>

<sup>5</sup> Detecting charge transfer at defects in 2D materials with electron ptychography

<https://arxiv.org/html/2301.04469v4>

<sup>6</sup> Imaging the electron charge density in monolayer MoS<sub>2</sub> at the Ångstrom scale | Nature Communications

[https://www.nature.com/articles/s41467-023-39304-9?error=cookies\\_not\\_supported&code=edd9fd1d-211f-4a7b-9d5a-913ab794f083](https://www.nature.com/articles/s41467-023-39304-9?error=cookies_not_supported&code=edd9fd1d-211f-4a7b-9d5a-913ab794f083)

<sup>7</sup> Atomically resolved imaging of radiation-sensitive metal-organic frameworks via electron ptychography | Nature Communications

[https://www.nature.com/articles/s41467-025-56215-z?error=cookies\\_not\\_supported&code=a886281e-0dfc-4240-a6df-18aa162e6f13](https://www.nature.com/articles/s41467-025-56215-z?error=cookies_not_supported&code=a886281e-0dfc-4240-a6df-18aa162e6f13)