

# 用光学方法改善空间转动可变高分辨电子显微像的像质

沈晓庆

(上海机械学院)

郑师海 李芳华

(中国科学院物理研究所)

**提要:** 提出了提取相位衬度传递函数制作振幅滤波器方法和利用光栅及像全息制作相位滤波器的方法。对电子显微解卷, 得到与频率无关的传递函数, 提高了电子显微像的分辨率。

## Image improvement of high resolution electron micrographs with spatial rotational variant system by optical means

Shen Xiaoqing

(Shanghai Institute of Mechanical Engineering, Shanghai)

Zheng Shihai, Li Fanghua

(Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing)

**Abstract:** Ways are put forward for making amplitude filters by picking out the phase transfer function and for making phase filter by grating and hologram. Transfer function independent of frequency for electron micrograph deconvolution is obtained, which improves the resolution of electron micrograph.

### 一、引言

高分辨电子显微像传递函数的恢复和校正, 可利用光学滤频装置。Stroke 和 Zech 首先提出用复合频率滤波器实现图像再现。Stroke<sup>[1]</sup>给出了非相干照明下的理论推导。Lohmann 和 Werlich 第一次从实验上证实这个方法<sup>[2]</sup>。Stroke 和 Haloua 引进滤波器, 实现了对一张描述原始材料的非相干 STEM 照片的再现<sup>[3]</sup>, 他们又进一步将这个方法应用到部分相干和完全相干的普通电子显微镜(以下简称电镜)的高分辨率照片。以上图像恢复工作, 是在系统满足等晕条件下

实现的。当系统本身带有非对称旋转像差, 诸如像散、彗差等所引起的传递函数空间各向异性, 给系统传递函数的确定及滤波器的制作带来困难。在分析非旋转对称像差所带来的物像间差异、传递函数特性和非晶碳膜成像结构基础上<sup>[4,5]</sup>, 本文提出新的方法, 从非晶颗粒型分布的电子显微像中, 分离出物谱与传递函数, 再根据高分辨电镜的相位衬度传递函数(PCTF)来制作振幅滤波器; 用光栅和像全息的处理制作相位滤波器, 实现了空间转动可变高分辨电子显微像的像质改善。

收稿日期: 1986年6月9日; 修改稿收到日期: 1987年7月2日。

## 二、电镜成像原理

讨论的物体是其特征信息线性地传递到电镜像面,照明电子束有很好的相干性,样品是弱相位物体,像的衬度是相位移的线性函数。电子波经弱相位物体后,产生较小的电子波相位移,但实际的电子光学系统将引进附加相位差。透镜产生的相位移对像的影响,用相位衬度传递函数表示,其形式随电子波散射角增大呈正弦振荡。色差、加速电压起伏、能宽等将使传递函数的幅值随电子散射角增大而衰减。衰减的包络函数对传递函数的调制,使实际分辨率下降。图1所示的是JEM-200CX在Scherzer离焦条件 $\Delta f=88\text{nm}$ 时由球差所引起的相位移 $W$ 和幅值衰减的相位衬度传递函数PCTF。容易看出PCTF随散射角或空间频率不同在 $\pm 2$ 间振荡,不同的频率以递增或递减的相位传递到像平面,某些频率段则以相反的衬度传递。若考虑到非对称旋转像差,则PCTF沿方位各向异性,且每个确定方向都对应一不同离焦意义上的PCTF<sup>[4]</sup>。图7(a)给出了带非对称旋转像差的Thon衍射像。

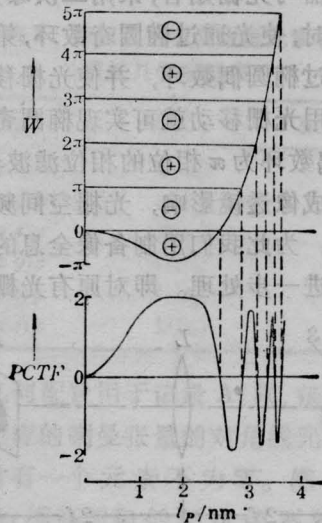


图1 电子显微镜的相位移和衰减的相位衬度传递函数

## 三、复合除法滤波器解卷原理

我们用二维径向对称函数 $f(r, \theta)$ 来描述样品后表面的物波(对于旋转可变系统,用极坐标表示)。它的傅里叶变换是位于物镜后焦面的衍射谱

$$F(\rho \cos \phi, \rho \sin \phi) = \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} f(r, \theta) e^{-j2\pi r \rho \cos(\theta - \phi)} r dr d\theta \quad (1)$$

$r, \theta$ 与 $\rho, \phi$ 分别表示空域与空频域中径向与角向频率变数对。由于系统仍满足平移不变,系统像平面上的波函数即像波是物波与系统点扩散函数的卷积:

$$g(r \cos \theta, r \sin \theta) = f(r \cos \theta, r \sin \theta) \otimes h(r \cos \theta, r \sin \theta) = \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} f(r' \cos \theta', r' \sin \theta') \times h(r \cos \theta - r' \cos \theta', r \sin \theta - r' \sin \theta') r' dr' d\theta' \quad (2)$$

像谱即像波的傅里叶变换是物谱与系统传递函数 $H(\rho \cos \phi, \rho \sin \phi)$ 的乘积,按卷积定理可得:

$$G(\rho \cos \phi, \rho \sin \phi) = F(\rho \cos \phi, \rho \sin \phi) \times H(\rho \cos \phi, \rho \sin \phi) \quad (3)$$

式中:

$$G(\rho \cos \phi, \rho \sin \phi) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} g(r, \theta) e^{j2\pi r \rho \cos(\theta - \phi)} r dr d\theta \quad (4)$$

(2)式描述了一般情况下像面上的电子波函数。电镜像是经相位衬度传递函数调制后的变形物体。为了解卷,制作一个滤波器,其复振幅透过率由振幅和相位两个部分组成:

$$H^{-1}(\rho \cos \phi, \rho \sin \phi) = \frac{e^{-j\sigma_H}}{|H(\rho \cos \phi, \rho \sin \phi)|} \quad (5)$$

$\sigma_H$ 描述了传递函数的相位。将(5)式代入(3)

式后可得到一个原始物谱，再作一次傅里叶变换，就可以得到一个倒置的原始像。

#### 四、实验原理

对于带非对称旋转像差的电子显微像，用通常的方法确定传递函数和制作滤波器是困难的。文献(5)指出，在一定离焦范围内，当  $\Delta f/\sqrt{C_s\lambda} = \Delta$ ， $\Delta < 2.5$  时 ( $C_s$  为球差系数， $\lambda$  为电子波长)，旋转像差影响加强。在 Scherzer 离焦量附近，此时图像有最好的传递特性与一定的对比度，但对旋转像差敏感。我们用来处理的电子显微像的 Scherzer 离焦量  $4f \approx 88 \text{ nm}$ 。其 Thon 衍射像(图 7(a))呈椭圆环形，传递函数各向异性。

##### 4.1 相位滤波器

传递函数零点由交变相位产生，零点两边区域的相位差为  $\pi$ 。相位差  $\pi$  的反转，使得物体细节黑白翻转，传递函数零点无信息传递。我们利用胶片的非线性特性，从实际电子显微像的傅里叶变换谱上确定相位零点。用图 2 前部所示的光学相干衍射装置，电子显微像置于透镜前焦面  $P_1$  处，用相干波照明，像的复振幅通过透镜  $L_1$  作傅里叶变换而被转换为频谱面分布，用照相材料线性记录下 Thon 衍射像。置此像于图 2 后部所示成像系统  $P_2$  面，用均匀非相干光照明，成像平面  $P_3$  放置高反差胶片。透过胶片的光强分布如图 3(a) 所示。假定入射光强为  $E_0$ ，在高反差胶片上的曝光量  $E = E_0 10^{-D_i(x)}$ ， $D_i(x)$  为输入图像的密度分布。限幅密度  $D_0$  给出了图 3(a) 中复制胶片曝光的最大密度值，限幅高低正比于使用光强。当我们所用胶片的阈值曝光量为  $E_0$ ，只要满足  $E_0 > E_c$ ，即满足  $D_i(x) < \log \frac{E_0}{E_c}$ ，底片曝光变黑，胶片透过率：

$$\tau(x) = \frac{1}{2} [1 + \text{sgn}(D_i(x) - D_0)] \quad (6)$$

复制的胶片在理想情况下，或者为 1 或者为 0。图 3(b) 是经处理后确定传递函数零点分

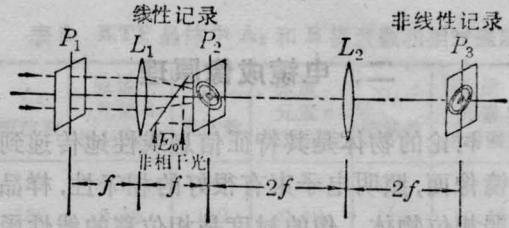
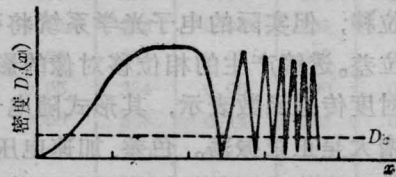
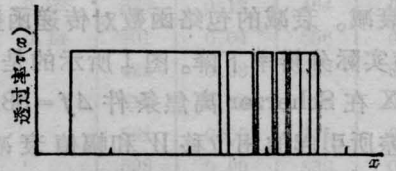


图 2 一个光学衍射系统与一个光学滤波系统



(a) 输入图像的光密度



(b) 处理后高反差胶片的透射率  $\tau(x)$

图 3

布的单位透射率。对一张已确定相位零点的高限幅照片，我们借助于朗奇光栅制作相位滤波器。用图 4 所示的成像系统。  $P_1$  面上放置具有单位透过率的照片，紧贴照片放置一朗奇光栅。对于椭圆的奇数环与偶数环做带通滤波器与光栅贴合，采用二次曝光法。第一次曝光时，使光通过椭圆奇数环，第二次曝光使光通过椭圆偶数环，并使光栅移动半个周期。利用光栅移动就可实现椭圆奇数环为零相位，偶数环为  $\pi$  相位的相位滤波器。上述滤波器受成像透镜影响，光栅空间频率不能做得很高，为此我们用制备像全息的方法对滤波器作进一步处理。即对原有光栅结构的

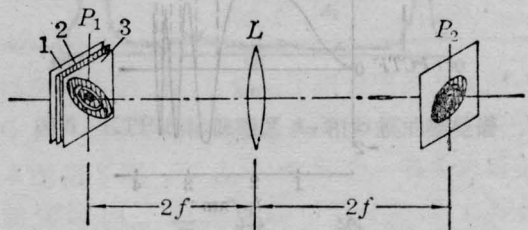


图 4 利用朗奇光栅制作滤波器的装置

1—原始像；2—朗奇光栅；3—带通滤波器

相位滤波器进行傅里叶变换, 在谱平面上只让衍射一级通过, 这儿所使用的滤波尺寸经过精心计算, 即要使信号频谱无衰减, 又要尽可能抑制噪声。经滤波后的衍射一级, 再作傅里叶变换, 引入参考光, 用全息法记录, 显影处理后, 得到一个含有原相位信息的全息图。

#### 4.2 振幅滤波器

根据非晶物体颗粒结构分布的性质, 从像谱上把物谱与传递函数分离开来, 从而提取出传递函数来制作振幅滤波器。实验用的非晶碳膜高分辨电子显微像是很多细小颗粒的空间分布函数与电子显微成像系统点扩散函数的卷积, 可表示为:

$$f(x, y) = \left[ \sum_{i=0}^n f(d_i, b_i) \delta(x-d_i, y-b_i) \right] \otimes h(x, y) \quad (7)$$

用沿  $y$  方向每单位长度的强度为 1 的  $\delta$  函数乘不同的加权因子  $f(d_i, b_i)$  来表示颗粒的空间位置与大小分布。(7) 式也可用极坐标表示:

$$f(r, \theta) = \left[ \sum_{i=0}^n f(r_i, \theta_i) \cdot \delta(r-r_i) \delta(\theta-\theta_i) \right] \otimes h(r, \theta) \quad (8)$$

$\delta(r-r_i) \delta(\theta-\theta_i)$  只表示了某一  $\delta$  函数的位置。对 (7) 式做傅里叶变换, 得到电子显微像的频谱:

$$F(u, v) = \sum_{i=0}^n f(d_i, b_i) e^{-j2\pi(ud_i+vb_i)} \cdot H(u, v) \quad (9)$$

用记录材料线性地记录下谱的分布:

$$\begin{aligned} |F(u, v)|^2 &= \sum_{i=0}^n f^2(d_i, b_i) H(u, v) H^*(u, v) \\ &+ \sum_{i=0}^n f^2(d_i, b_i) H(u, v) H^*(u, v) \\ &\times e^{-j2\pi[(d_i-d_k)u+(b_i-b_k)v]} \quad (10) \end{aligned}$$

为了分离物体与点扩散函数, 我们对谱的

强度分布再作傅里叶变换

$$\begin{aligned} g(x_3, y_3) &= \mathcal{F} |F(u, v)|^2 \\ &= \sum_{i=0}^n f^2(d_i, b_i) h(x_3, y_3) \otimes h^*(x_3, y_3) \\ &\quad \otimes \delta(-x_3, -y_3) \\ &+ \sum_{\substack{i=0 \\ k \neq i}}^n f^2(d_i, b_i) h(x_3, y_3) \\ &\quad \otimes h^*(x_3, y_3) \otimes \delta[-(x_3-(d_i-d_k)), -(y_3-(b_i-b_k))] \quad (11) \end{aligned}$$

在傅里叶变换面上得到点扩散函数的自相关函数与颗粒傅里叶变换后空频域位置分布函数的卷积。从 (11) 式中可见, 分布是离散的, 这样我们分离出其中一项而滤去其余项, 再做一次傅里叶变换就可以提取出传递函数。

置一圆形滤波器在傅氏变换面的任意位置上。滤波器为:

$$\text{circ}(\sqrt{x_3^2+y_3^2}) = \begin{cases} 1 & \sqrt{x_3^2+y_3^2} \leq \frac{1}{\pi a r_1} \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (12)$$

这里  $\frac{1}{\pi a r_1}$  是根据椭圆环傅氏变换后其响应函数最大尺寸的倒数<sup>[8]</sup>。这时变换面滤波器后分布为:

$$g(x'_3, y'_3) = g(x_3, y_3) \cdot \text{circ}(\sqrt{x_3^2+y_3^2}) \quad (13)$$

作为理想情况, 我们用 (11) 式中第一项通过而其它项均被滤去来讨论。再对其作傅里叶变换为:

$$\begin{aligned} G(u, v) &= H(u, v) H^*(u, v) \\ &\quad \cdot \sum_{i=0}^n f^2(d_i, b_i) \\ &= |H(u, v)|^2 \sum_{i=0}^n f^2(d_i, b_i) \quad (14) \end{aligned}$$

其中  $\sum_{i=0}^n f^2(d_i, b_i)$  是不随位置  $(u, v)$  变化很大的常数值  $C$ , 而  $|H(u, v)|^2$  则是传递函数强度分布。(14) 式若用极坐标表示为:

$$G(\rho, \phi) = |H(\rho, \phi)|^2 \sum_{i=0}^n f^2(\rho_i, \phi_i) \\ = C |H(\rho, \phi)|^2 \quad (15)$$

我们所要求振幅滤波器的振幅透过率是传递函数的倒数, 即  $TA = |H(\rho, \phi)|^{-1}$ 。对(15)式用记录材料记录后的密度为:

$$D(\rho, \phi) = \gamma_D \log E(\rho, \phi) \\ = 2\gamma_D \log |H(\rho, \phi)| \quad (16)$$

$E$  是强度值,  $\gamma_D$  为胶片的  $\gamma$  值。若  $\gamma_D$  已知, 可用显微密度计确定传递函数分布:

$$|H(\rho, \phi)| = 10^{\frac{D(\rho, \phi)}{2\gamma_D}} \quad (17)$$

光密度分布振幅透率  $TA = 10^{-\frac{D}{2}}$ , 因此按(17)式得负透明片为  $TA = |H(\rho, \phi)|^{-\gamma_D}$ 。如果选择  $\gamma_D = 1$ , 我们可以得到所要求的滤波器。

## 五、实验结果和讨论

### 5.1 滤波器的制作

实验用的是在 JEM-200CX 上拍摄的非晶碳膜高分辨电子显微照片, 如图 8(a) 所示。高压 200 kV, 球差系数  $C_s = 1.2 \text{ mm}$ 。高焦量  $4f \approx 88 \text{ nm}$ 。其 Thon 衍射像如图 7(a), 为线性记录。用图 2 后部所示光学系统,  $P_2$  面置线性记录的衍射照片,  $P_3$  面置高反差胶片, 用非相干照明长时间曝光。得到如图 3(b) 所示意的只有亮暗(0 与 1)变化的模板, 利用图 4 所示的成像装置, 紧贴模板放置一块 10 Lp/mm 的朗奇光栅和奇或偶的环带形

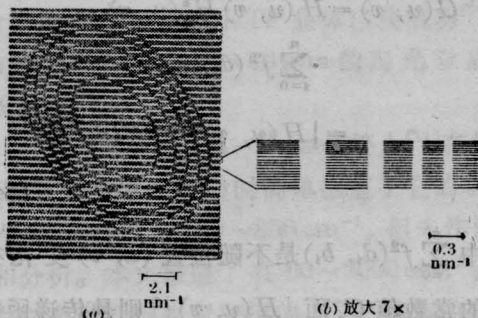


图 5 原理性的相位滤波器

滤波片。在环形滤波片奇数与偶数分别通过的二次曝光之间, 光栅移动半个周期。所得的原理性相位滤波器如图 5 所示。进一步用像全息方法处理。在衍射一级上所使用的滤波装置经计算半径为 0.4 mm, 空间频率为

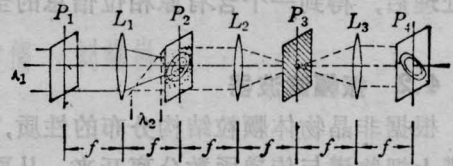
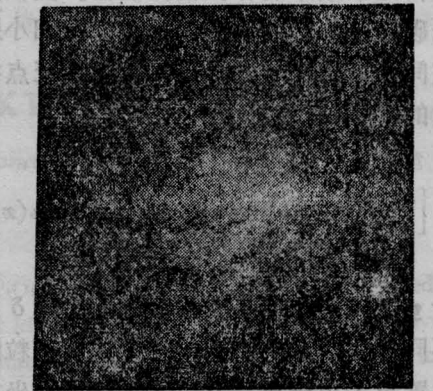
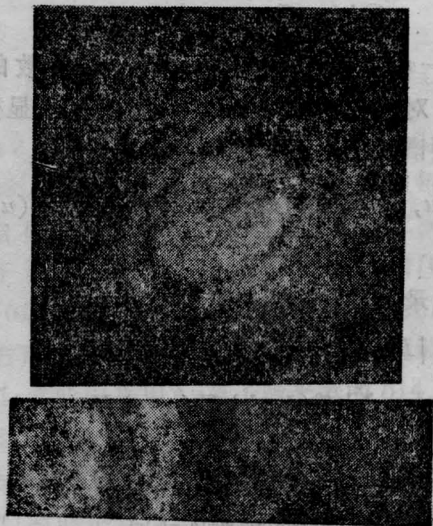


图 6 光学变换系统和光学处理系统的级联



(a) 非晶碳膜电子显微像的傅里叶变换谱



(b) 分离物谱后的传递函数振幅分布

图 7

800 Lp/mm。

振幅滤波器的制作分两部实现。图 6 是一个衍射系统与光学滤频系统串联。先置电子显微像于透镜  $L_1$  的前焦面  $P_1$  上, 在其后焦面记录频谱分布。得到结果如图 7(a) 所示。从下面放大照片可见频谱是由许多微细颗粒组成。再置记录的功率谱照片于  $P_2$  面, 在  $P_3$  面得 (11) 式所示的分布。根据椭圆环的分布在傅里叶变换后时域的椭圆短轴变为空频域长轴, 椭圆环的最小环带变成空频域的最大环带, 可算出  $\frac{1}{\pi a r_1} \cong 0.4 \text{ mm}$ 。为了不使传递函数的高频信息丢失, 取滤波器半径  $R \geq 0.4 \text{ mm}$ 。通过滤波器后的信息经透镜  $L_3$  的逆傅里叶变换, 在  $P_4$  面得到滤去物谱后的传递函数曲线。图 7(b) 是滤波后的分布照片。从下面放大的细节中我们可以看到颗粒状的碳原子像已滤去, 但由于孔形滤波器半径有一定的尺寸要求, 不能做到仅使单个粒子通过, 所得到的只是一个基本光滑且连续的传递函数曲线分布。控制记录胶片的  $\gamma$  值为 1, 制成  $|H(\rho, \phi)|^{-1}$  的振幅滤波器。

### 5.2 用复合滤波器解卷

利用光学相干滤频装置 ( $4f$  系统) 进行解卷。高分辨电子显微像照片的复制片, 经透镜傅里叶变换后与频谱面上准确叠置的两个照相透明片相乘, 一个是振幅滤波器, 通过吸收对入射到滤波器上的光场振幅起作用, 另一个是全息图, 通过其衍射光栅性质对光场的相位起作用。滤波后正一级衍射处得到传递函数负相位翻转和振幅恢复后物波谱的光场分布, 再经透镜逆傅里叶变换, 输出面可得到很大程度上忠实原物体的像。

### 5.3 讨论

图 8(A) 是未经处理的原始照片, 图 8(B) 是经相位滤波后的照片, 图 8(C) 是经复合滤波后的电子显微象。比较图 8(A) 与图 8(C) 可以看出, 复合滤波后的再现像与原始像的明显区别在于细节部分突出了, 像上碳颗粒

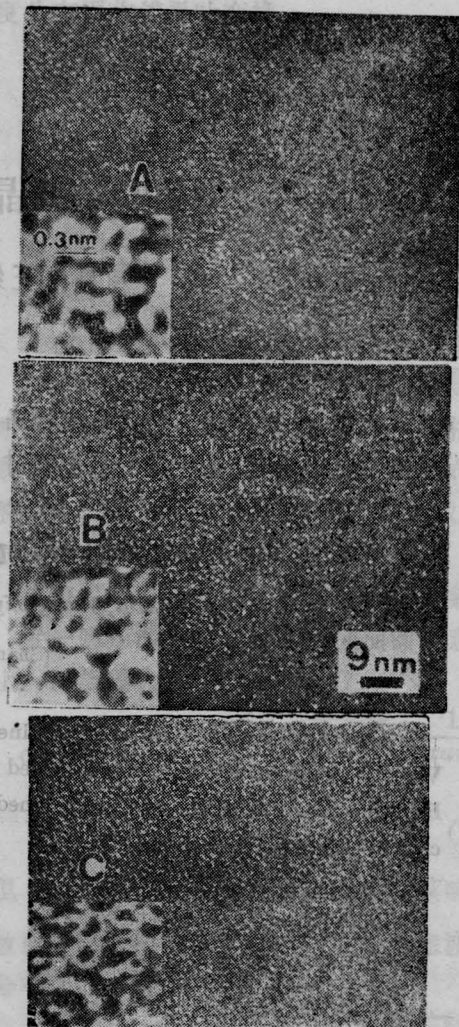


图 8 不同滤波后的再现像与输入图像的比较

(A) 原始碳膜高分辨电子显微像; (B) 相位恢复后的再现像; (C) 复合滤波后的再现像

随散射角增大而变小的衬度现在增大了。在图 8 放大的部分比较 C 与 A, 可见颗粒结构变细, 分辨率提高。而纯相位滤波器使原来黑白颠倒的细节恢复, 但细节部分经传递函数幅值衰减调制而衬度低、信噪比小, 精细结构没有很大改善。从图上 8(B) 放大的部分可以看到黑与白的部分有了变化, 这是相位恢复的结果。原始的传递函数经振幅和相位滤波后, 传递函数得到恢复, 分辨率有很大改善, 但传递函数零点依然没变, 也就是零点附近的区域或传递函数小于一定阈值的区域不传

(下转第 169 页)

其中  $\delta$  为正的小量。(2.14)显示了场散差极小值对于初态的依赖关系。利用(2.6),可将(2.14)改写为

$$\frac{(\Delta\beta)^2}{(\Delta\beta_0)^2} \Big|_{\theta \rightarrow 0} \rightarrow \begin{cases} \frac{\delta}{8(1+E)} \text{ (自发),} \\ \frac{E-1}{E+1} \text{ (触发).} \end{cases} \quad (2.15b)$$

很明显,两类超辐射的场散差极小值共同地在  $E \rightarrow 1$  时取最小值:

$$\frac{(\Delta\beta)^2}{(\Delta\beta_0)^2} \Big|_{\frac{E \rightarrow 0}{E \rightarrow 1}} \rightarrow \begin{cases} \frac{\delta}{16} \text{ (自发),} \\ \frac{\delta}{2} \text{ (触发).} \end{cases} \quad (2.16a)$$

(2.16)给出了最佳压缩点。

### 三、实验设想

1. 采用 Cs 原子束作为工作物质。因为人们对 Cs 的谱线比较熟悉,而且 Cs 的有关参数严格地满足产生单脉冲超辐射的时间不等式<sup>[9]</sup>,可以避免振铃(ringing)效应。

2. 利用里德堡态的跃迁获得辐射场。因为里德堡原子的偶极矩阵元非常大,原子与场相互作用很强,是研究量子辐射性质的理想工具<sup>[4]</sup>。而且它的增益高(即阈值低),容易从实验上得到较为理想的物理系统。另外可以通过自身的场-离子探测手段,对辐射场进行非常精确的测量。

3. 通过高强度相干激发以获得自发超

辐射的最佳初态。为了保证初始时刻有充分的原子处于位相关联的激发态(即  $\theta_0 \rightarrow \pi$ ),必须采用足够强的相干激发。而考虑到辐射上能级可能会处于较高激发态,则可能利用串级激发。即如图3所示,用一束波长为  $\lambda_1$  的激光使原子从基态  $n_0S$  跃迁到第一个共振态  $n_0P$ ,再用波长为  $\lambda_2$  的激光激发到里德堡态  $nS$ ,在高增益的情况下,向下能级  $(n-1)P$  的跃迁决定了超辐射的波长。

4. 当辐射场演变到最佳压缩态(即  $\theta \rightarrow 0$ )时,利用 Strak 失谐断开原子与场的相互作用,则此刻的超辐射场应该具有最佳压缩。

5. 利用外差混频(heterodyne mixing)装置<sup>[9]</sup>,测量辐射场的压缩量。

作者感谢 Mandel 教授的有益讨论。

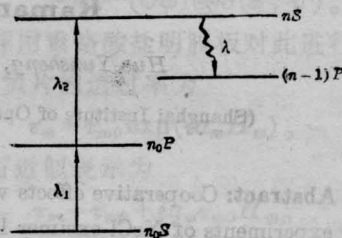


图3 里德堡自发超辐射的能级图

### 参考文献

- 1 Heidmann A *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1985; **54**(4): 328
- 2 顾樵. 西北大学学报(自然科学版), 1986; **16**(2): 119
- 3 顾樵. 中国激光, 1986; **13**(2): 76
- 4 Gross M *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1979; **43**(5): 343
- 5 顾樵. 中国激光, 1986; **13**(12): 739

### 参考文献

- 1 Stroke G W, Zech R G. *Phys. Lett.*, 1967; **33A**: 3
- 2 Lohmann A W, Werlich H W. *Phys. Lett.*, 1967; **25A**: 5700
- 3 Stroke G W, Haliona M. *Phys. Lett.*, 1970; **33A**: 3
- 4 Shen X Q, Boseck S. *Optik*, 1984; **68**: 137
- 5 Shen X Q, Boseck S. *Optik*, 1984; **68**: 17
- 6 Frank J. *Optik*, 1973; **34**: 519
- 7 Shen X Q, Zheng S H, Li F H. *Proc. Int. Conf. Holography Application*, Beijing, 1986: 266

(上接第161页)  
递信息。用两张电子显微像合成可以填补传递函数的零点空缺。复合滤波后,相应于不同离焦的传递函数幅值大致相同,由于传递函数零点的位置随方位不同而异,所以不同离焦量的恢复像仍有差异。这个方法可用于恢复普通和超导电镜的大分子样品和原子结构的电子显微像。