

非旋转对称像差下不同离焦电子 显微像的叠加改善传递函数

沈晓庆 李明杰 郑师海 李方华
(上海机械学院) (中国科学院物理研究所)

提 要

本文提出用不同离焦的高分辨电子显微像光学方法叠加,改善带有非旋转对称像差的电子显微像相位衬度传递的数。使叠加后传递函数在全场区域同相位,并使传递函数的零值由另一传递函数的峰值填补,改善了电子显微像的像质。

关键词: 高分辨电子显微镜; 传递函数。

一、引 言

弱相位物体的高分辨电子显微像,经相位衬度传递函数(PCTF)调制,分辨率降低。相位衬度传递函数取决于电子波长 λ ,球差系数 C_s 与离焦量 Δf ,并随空间频率变化作正弦振荡,其衰减包络取决于色差等因素^[1]。已有多种方法(光学或计算机处理)用来改善电子显微像的传递函数恢复衍射极限分辨率^[2,3]。对带有旋转像差非对称系统电子显微像的像质和像质改善工作进行了研究^[4,5],Hanssen首先提出同一样品在不同条件下拍摄的电子显微像叠加法,并被应用于拍摄同一物体在不同物镜孔径和不同离焦条件于同一底片过程,物镜对中和校正像散所用的时间中,像漂移和辐照损伤等将影响叠加后的像质^[6]。文献[8]用计算机后处理方法进行叠加,这个工作的困难在于每张像上的细节横向与方位方向须完全一致。文献[9]用光学后处理方法叠加两张不同离焦且旋转对称的电子显微像。后处理的优点是可以任意选择传递函数不同的频带滤波后再进行叠加,所使用的空间频率带通滤波器相当于物镜具有带通孔径,本文对带有非对称旋转像差的两张不同离焦电子显微像用光学方法叠加,改善了像的像质。

二、实验原理

电子显微像是样品函数 $f(x, y)$ 与系统点扩散函数 $h(x, y)$ 的卷积。若不考虑物镜孔径限制,高分辨电镜的点扩散函数即相位衬度传递函数 $H(u, v)$ 的傅里叶变换。电子显微像 $i(x, y)$ 及其像谱 $I(u, v)$ 分别为

$$i(x, y) = f(x, y) \otimes h(x, y), \quad (1)$$

$$I(u, v) = F(u, v) H(u, v), \quad (2)$$

⊗ 表示卷积。在高分辨电镜中, 照明电子束相干性好, 样品很薄, 相位衬度传递函数 $H(u, v) = \sin \chi(\theta)$ 呈正弦形式^[10], $\chi(\theta)$ 是球差和离焦量引起的电子波相位移, 散射角 $\theta = \lambda u$ 。球差取决于物镜极靴的设计, 不同离焦量下的传递函数振荡形式不一样。利用两张不同离焦量的电子显微像 $i_1(x, y)$ 与 $i_2(x, y)$ 叠加, 对应于某一定离焦量的传递函数的零点和其附近的频率域以及传递函数的负区, 可由另一个离焦量所对应的传递函数来弥补, 该传递函数应在上述区域恰有正的峰值。把相应于此二传递函数的像叠加起来, 可得到一张改善传递函数的电子显微像 \tilde{i} 。在傅里叶谱面叠加为

$$\begin{aligned} \tilde{I}(u, v) &= F(u, v) H_1(u, v) + F(u, v) H_2(u, v) \\ &= F(u, v) [H_1(u, v) + H_2(u, v)], \end{aligned} \quad (3)$$

为了避免相位反转而引起叠加后的传递函数相抵消, 在谱面上放置一个按传递函数零点位置所设计的二元带通滤波 $G(u, v)$, 只使传递函数正的部分通过, 这时谱面上的叠加为

$$\tilde{I}'(u, v) = F(u, v) [H_1(u, v) G_1(u, v) + H_2(u, v) G_2(u, v)], \quad (4)$$

$G(u, v)$ 的作用如同物镜孔径带通受限。通常电镜物镜孔径受限于物镜光阑为圆形的, 即 $G(u, v) = \text{circ}(\sqrt{u^2 + v^2})$ 。电镜的脉冲响应函数为^[10]

$$\mathcal{F}\{\sin \chi(u, v) G(u, v)\} = \frac{2\pi}{\lambda^2} \int_0^{e^{i\chi}} \sin \chi(\theta) J_0\left(\frac{2\pi\theta\rho}{\lambda}\right) \theta d\theta, \quad (5)$$

\mathcal{F} 表示傅里叶变换, ρ 是径向矢量。光学后处理所用的二元带通滤波器可表示为

$$\left. \begin{aligned} G(r) &= \sum_{i=1}^n \left[\text{circ}\left(\frac{r}{a_{2i}}\right) - \text{circ}\left(\frac{r}{a_{2i-1}}\right) \right], \\ r &= \sqrt{u^2 + v^2}, \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

式中 a 为各环半径, 且 $a_{i+1} > a_i$, 其脉冲响应函数 $g(\rho)$ 为

$$g(\rho) = \sum_{i=1}^n \left[|a_{2i}|^2 \frac{J_1(2\pi a_{2i}\rho)}{\rho} - |a_{2i-1}|^2 \frac{J_1(2\pi a_{2i-1}\rho)}{\rho} \right], \quad (7)$$

我们选择两个离焦量不同的电子显微像, 一个是 Scherzer 离焦量 $\Delta f = \Delta$, 另一个是 $\Delta f = 3\Delta$

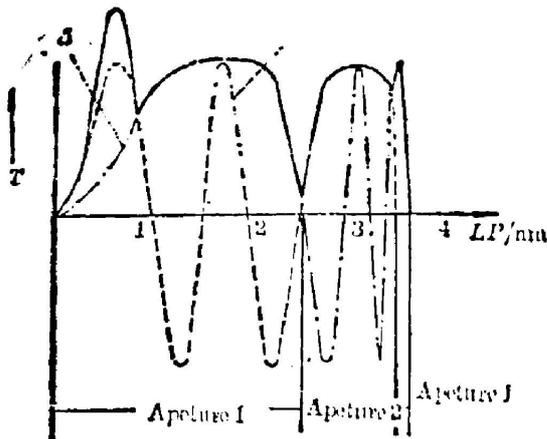


Fig. 1 Phase contrast transfer function for defocus $\Delta=1$ and $\Delta=3$. Solid curve is the transfer function of synthesized image

使光学叠加, 当离焦量为 3Δ 时, 传递函数振荡频率较高, 低频传递函数幅值递增较快, 并且恰在离焦量为 Δ 的传递函数第一个负区所对应的频率段有一个正的峰值。图 1 所示点划线与虚线分别对应 Δ 与 3Δ 的相位衬度传递函数曲线, 实线是经简单的带通滤波处理后传递函数叠加的结果。

讨论带有非对称旋转像差(如像散)的电子显微像。根据像散对分辨率的影响 d 为

$$d = \sqrt{0.7z_s\lambda}, \quad (8)$$

z_s 为像散(是子午与弧矢焦距之差)系数, 带有像散的电子显微像的光学衍射图如图 3(a) 与 (b) 所示, 呈椭圆环状。每个方位角方向代表不同离焦传递函数调制的结果。改善衍射

图在椭圆环短轴方向一定方位角范围的传递函数, 使其接近长轴方位角方向的传递函数, 缩

小像散系数 α_s , 即可改善由非旋转对称像差引起的分辨率降低。由于带像的传递函数沿方位方向并不满足标准椭圆方程, 叠加只能在一定的方位角范围内进行。我们把这个范围选择在短轴方向。叠加后新的传递函数在短轴方向的第一个零点接近于 Δ 离焦量传递函数的第一个零点, 在长轴方向一定的方位角范围内被滤去负传递函数值的频率段可能未完全被另一传递函数的正区覆盖, 但全场区域传递函数保持同相位。

二、确定被叠加物体细节的空间位置

我们用两张电子显微像的相关, 在其傅里叶换面上产生干涉条纹来确定像在滤波后叠加时物体细节的相对位置。图 2 显示了所用的光学系统, 其步骤为

(1) 置电子显微像 $f_1(x, y)$ ($\Delta=1$) 于 P_1 面, 在其谱面 P_2 加一带通滤波器 G_1 , 滤去负传递函数部分, 在 P_3 面成像作第一次曝光。

(2) 置电子显微像 $f_2(x, y)$ ($\Delta=3$) 于 P_1 面, 紧靠 $f_1(x, y)$, 当用一单色平面波照明一张透明片, 其振幅透过率为透过波和散射波两部分之和, 即

$$t(x, y) = c + i(x, y) = c + f(x, y) \otimes h(x, y), \quad (9)$$

式中 c 是零频载波, 第二项是散射部分, 将两张透明片叠在一起, 若两透明片物体细节不重合, 振幅透过率为

$$t'(x, y) = [c + f(x, y) \otimes h_1(x, y)] \times [c + f(x, y) \otimes h_2(x + \Delta x, y + \Delta y)], \quad (10)$$

式中 $\Delta x, \Delta y$ 是第二透明片相对第一透明片的位移量, 它的傅里叶变换为

$$\begin{aligned} T(u, v) &= c\delta(u, v) + cF(u, v) \\ &\times \{H_1(u, v) + H_2(u, v)\exp[-i2\pi(u\Delta x + v\Delta y)]\} \\ &+ F(u, v)H_1(u, v) \otimes \{F(u, v)H_2(u, v) \\ &\times \exp[-i2\pi(u\Delta x + v\Delta y)]\}, \end{aligned} \quad (11)$$

式中第一项 δ 函数为傅里叶变换面中心亮点, 第三项是单色平行光经第一透明片的散射再卷积上第二透明片的散射, 它近似于一个常数, 而第二项则是由物体间微小位移产生的干涉条纹^[1], 若第一与第二透明片传递函数相等, 即 $H_1(u, v) = H_2(u, v)$, 则条纹在整个频谱区域内呈直条纹; 若两个传递函数在某个频率带相位差 π 时, 这些频带所在区域条纹将移动半个周期。在图 2 所示的傅里叶变换面 P_2 可以观察到干涉条纹。

调整两个透明片使条纹由细变粗, 当物体细节完全重合时, $\Delta x, \Delta y$ 趋于零, 则条纹消失。整个过程如图 3 所示。图 3(a) 与 (b) 分别对应 $\Delta=1$ 与 $\Delta=3$ 的光学衍射像。图 3(c)~(e) 给出了根据干涉条纹变化来调正透明片位置使物体重合的过程。

(3) 取下电子显微像 $f_1(x, y)$, 在显微像的谱面加带通滤波器 G_2 , 然后在成像面 P_3 上再曝光一次, 即得到一张具有新传递函数的叠加像。

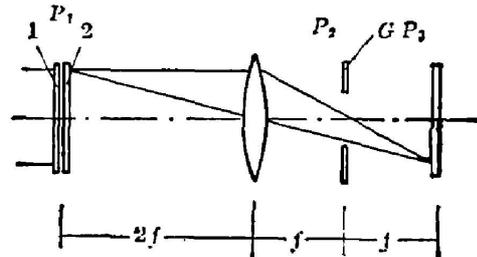


Fig. 2 Schematic of simple optical system for image synthesis

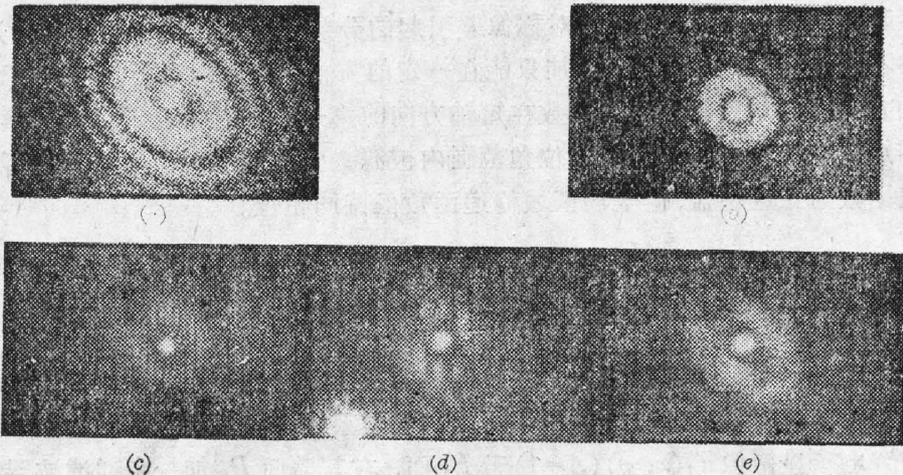


Fig. 3 (a) and (b): two diffractograms of the images at defocus $\Delta=1$ and $\Delta=3$ with astigmatism. (c)~(e): cross correlation diffractogram with the fringes to adjust the relative position of the detail objects by image synthesis

三、实验结果与讨论

图 4 显示的原始输入照片与在 JEM-200 CX 电镜(加速电压 200 kV, $C_s=1.2$ mm, $Z_0=50$ nm)下拍摄的碳膜高分辨电子显微像实验结果, 实验中采用两张带像散的电子显微像进行叠加。在实际电镜操作中, 严格校正像散有一定困难。若两张显微像分别取离焦量 $\Delta=1$ 与 $\Delta=3$, 由于物镜离焦量改变较大, 第二次拍摄像时像散需重新校正, 这个过程, 像会产生漂移, 辐照损伤使样品细节破坏。为了避免这些问题缩短两个曝光的调整时间是必要的。本实验是在 $\Delta=2$ 处校正像散后, 找到所需样品部分, 设置物镜离焦量 $\Delta=3$, 拍摄第一张电子显微像, 然后调整离焦量 $\Delta=1$, 拍摄第二张电子显微像, 这样得到的电子显微像带有一定数量的象散, 但细节保留较好。两张电子显微像的叠加, 采用图 2 所示的光学处理系统。每一张像经过与它匹配的带通滤波器, 在同一块干板上两次曝光后合成一张新的电子显微像。带通滤波器的作用相当于物镜孔径带通受限, 其脉冲响应如(7)式所示。图 4(a) 与图 4(b) 分别显示了在 $\Delta=1$ 与 $\Delta=3$ 离焦量的碳膜高分辨电子显微像。我们选取较为简单的带通滤波器进行处理, 对 $\Delta=1$ 的像, 我们选散射角 θ_{\max} 对应的频带与第三个正的峰值的频带通过, 如图 1 所示。低频物体大部透过成像。在图 4(c) 所示的再现像上, 物体大颗粒位置明显可见。对 $\Delta=3$ 所选择的滤波器为传递函数第三个峰值所对应的频带, 这个频带恰好是接着 θ_{\max} 所对应的频率, 如图 1 所示。由于只有高频带通, 再现像图 4(d) 只含有物体的细节, 图 4(e) 是叠加后的结果, 叠加后的电子显微像有一个较宽的同相位的相位衬度传递函数。原来因相位倒置而衬度反转的物体细节由同一物体但具有不同传递函数对应的细节叠加代替。原传递函数在部分方位零值也由同一物体但具有不同传递函数复盖, 即原来不传递物体信息的频率域由另一传递函数对应的物体信息弥补, 而这在卷积恢复理想传递函数中是不能完成的^[5]。叠加后电子显微像较单张像含有更多的信息, 像的结构位置更明确。但接近于限分辨率的细节, 因两个传递函数有相同的包络曲线, 没有改善。用这个方法改善传递函数不用卷积, 因此简便可行。光学处理系统简单, 可在大部分实验室应用。

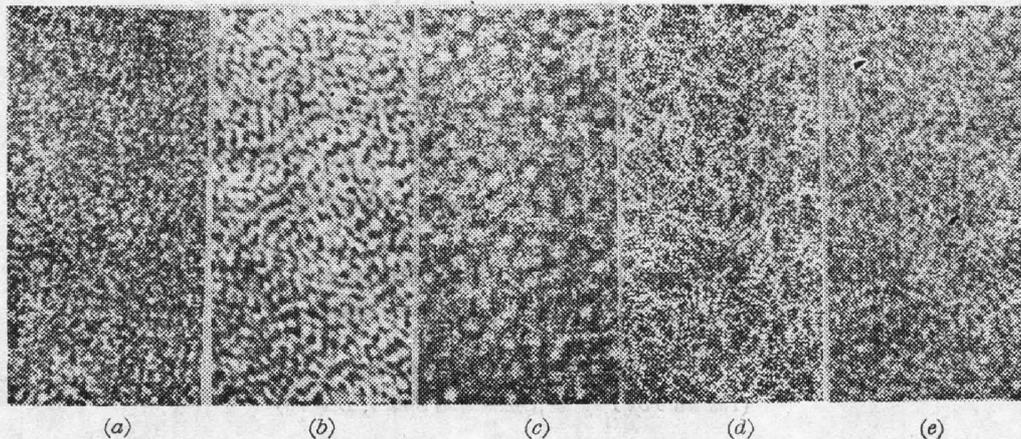


Fig. 4 (a) and (b): high resolution electron micrographs of carbon foil at defocus $\Delta=1$ and $\Delta=3$, (c) and (d): reconstructed images after bandpass filtration. (e) synthetic image

参 考 文 献

- [1] J. Frank; *Optik*, 1973, **38**, No. 5 (May), 519~536.
- [2] G. W. Stroke, M. Hattoua *et al.*; *Proc. IEEE*, 1977, **65**, No. 1 (Jan), 39~62.
- [3] R. E. Burye, R. F. Scott; *Optik*, 1975, **43**, No. 1 (Nov), 53~64.
R. E. Burye, R. F. Scott; *Optik*, 1976, **44**, No. 2 (Jun), 159~172
- [4] X. Q. Shen, S. Boseck; *Optik*, 1984, **68**, No. 2 (Mar), 137~145.
- [5] X. Q. Shen *et al.*; *Proc. Internat. Conf. Holography Application*, (Academic press, Beijing, 1986 July), 266~267.
- [6] K. J. Hanssen; *Proc. 6th Internat. Conf. Electron Microscopy*, Vol. 1 (Kyoto, Maruzen, 1966), 39~40.
- [7] J. Frank, P. Bussler *et al.*; *Ber Bunsengesellschaft*, 1970, **74**, No. 6 (Jun), 1105~1115.
- [8] J. Frank; *Biophysics J.*, 1972, **12**, No. 3 (Dec), 484~511.
- [9] F. Zemlin; *Ultramicroscopy*, 1978, **3** (Apr), 261~263.
- [10] J. C. H. Spence; *Experiment High-Resolution Electron Microscopy*, (Laendon Press Oxford, 1981), 71~104.
- [11] J. Frank; *Optik*, 1972, **35**, No. 5 (May), 608~612.

**Transfer function improvement by means of synthesis
of different defocused electron micrographs with
unsymmetrical rotational aberrations**

SHEN XIAOQING AND LI MINGJIE

(Shanghai Institute of Mechanical Engineering)

ZHENG SHIHAI AND LI FANGHUA

(Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing)

(Received 3 January 1987)

Abstract

The different defocused electron micrographs with the unsymmetrical rotational aberrations are synthesized. It makes possible to get a relatively broad distribution of phase contrast transfer function (PCTF). The PCTF in the spatial frequency area has the similar phase and the regions near the zero point of transfer function, which do not transfer information, are filled by other transfer function. The resolution of electron micrograph is improved.

Key words: high resolution electron microscope; transfer function.