

# X 射线同轴全息术中像差的数字模拟\*

肖体乔 陈建文 徐至展 朱佩平 冠雷刚 王之江

(中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

**摘 要** 给出了 X 射线同轴全息中像差的数值模拟, 分别研究了其三级波差和光线像差, 用一个较为简便的方法计算出光线像差, 给出了类似于光线追迹中的点列图, 并由此相应地估计出像差对分辨率的限制. 所有的计算都是基于一个典型的 X 射线激光全息实验中的参数进行的. 根据分析还讨论了减小像差的条件.

**关键词** X 射线全息术, 波差, 光线像差.

## 1 引 言

现代电子显微镜已能分辨原子尺度的细节. 然而它有一个缺点, 就是被观察的样品必须脱水、切片及染色. 因为这些样品制备过程必然会破坏样品的内部结构. 而用软 X 射线成像就可以避免这些缺陷.

位于碳、氧 K 边界<sup>[1]</sup>波长范围(即所谓的水窗波段)的 X 射线在水中传播时其衰减很小, 用水窗 X 射线对生物活细胞成像, 获得很高的对比度. 基于 X 射线成像元件加工上的困难, 目前广泛采用全息记录方式, 其优势在于能再现出样品的三维结构, 这对遗传学研究来说, 无疑是很有吸引力的.

迄今为止, X 射线全息研究已取得了很大的进展<sup>[2~8]</sup>, 只是所获得的分辨率仍不能令人满意. 现有 X 射线源的相干性较差, 记录介质的灵敏度、分辨率也不尽如人意, 再加上散斑、孪生像等因素的影响, 都限制了全息分辨率的提高. 另外, 记录方式不同也影响到 X 射线全息的分辨率<sup>[9]</sup>. 其中源的相干性对 X 射线全息分辨率的影响可见参考文献[10].

此外, 当用短波长光记录、长波长光重现 X 射线全息时可得到放大的物像, 这样就不可避免地产生像差. 很多作者都曾提到过这一问题, 但很少有人进行过仔细研究, 尤其是定量研究.

X 射线全息记录方式主要有两种, 即同轴方式和无透镜傅里叶变换方式, 本文主要研究同轴全息的像差\*\*.

应用计算机数字模拟, 分析 X 射线全息的波差和光线像差, 进而估计像差对其成像质量

\* 国家自然科学基金资助项目.

\*\* 无透镜傅里叶变换的 X 射线全息, 作者将另文撰述.

收稿日期: 1993年9月29日; 收到修改稿日期: 1993年11月11日

的影响. 为此目的, 首先给出了用于数值分析的公式, 接着对一个典型的物点研究其波像差, 然后计算出光线像差并给出其点列图、分析点列图上的点分布, 可估计出 X 射线全息的分辨率. 分析中所有的参数取自 Trebes 等人<sup>[6]</sup>用 X 射线激光拍摄的全息实验

## 2 基本方程

X 射线全息术中, 全息图是由 X 射线的干涉得到的, 再用可见光照明全息图即可得到一个放大的物像, 这也是 X 射线全息显微的基本原理. 然而, 重现-记录光波长比与全息图尺寸变化率不一致时, 将必然导致像差. 图 1 为 X 射线同轴全息的记录和重现示意图.

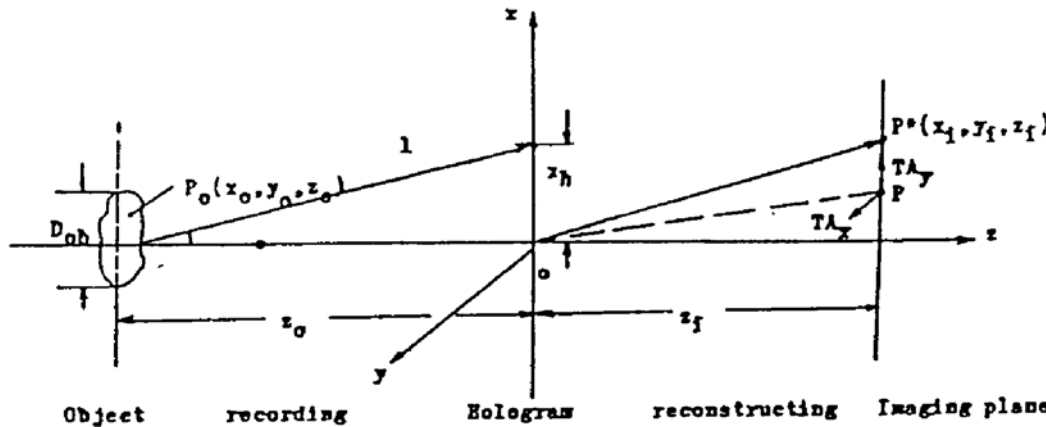


Fig. 1 Schematic diagram for in-line X-ray hologram recording and reconstructing

以原点在全息图的中心、XY 轴位于全息图平面建立直角坐标系, 则物点、参考点源、重现光点源及像点坐标分别为  $(x_0, y_0, z_0), (x_r, y_r, z_r), (x_c, y_c, z_c), (x_i, y_i, z_i)$ . 仿 Seidl 像差, 全息波差定义为参考球面与实际波面的程差,

其中的五种像差系数也可以相应地给出<sup>[11]</sup>.

对同轴型 X 射线全息来说, 参考光通常是准直的, 且平行于 Z 轴, 因而  $z_r = \infty, (x_r/z_r) = (y_r/z_r) = 0$ . 又由于同轴全息图对原点对称的, 照明点源也应置于 Z 轴上, 亦即  $x_c = y_c = 0$ . 并且分析仅局限于实像. 考虑所有的这些条件后, 波像差可表示为:

$$W = -\frac{(x^2 + y^2)^2 S}{8} + \frac{(x^2 + y^2)(XC_r + yC_y)}{2} - \frac{(x^2 A_x + y^2 A_y + 2xy A_{xy})}{2} - \frac{(x^2 + y^2)F}{4} + \frac{x D_x + y D_y}{2} \quad (1)$$

式中  $S, C, A, F$  和  $D$  分别为球差系数、慧差系数、像散系数、场曲系数和畸变系数, 并有

$$S = \frac{\mu}{m^3} \left[ \left( \frac{\mu^2}{m^2} - 1 \right) \frac{1}{z_0^3} - \frac{3\mu}{z_c z_0^2} + \frac{3m^2}{z_0 z_c} \right], \quad (2)$$

$$C_x = -\frac{\mu x_0}{m z_0} \left[ \frac{1}{m^2 z_0^2} - \left( \frac{1}{z_c} - \frac{\mu}{m^2 z_0} \right)^2 \right], \quad C_y = -\frac{\mu y_0}{m z_0} \left[ \frac{1}{m^2 z_0^2} - \left( \frac{1}{z_c} - \frac{\mu}{m^2 z_0} \right)^2 \right] \quad (3)$$

$$A_x = -\frac{\mu x_0^2}{m^2 z_0^2} \left[ \left( \frac{1 - \mu^2}{m^2} \right) \frac{1}{z_0} + \frac{\mu}{z_c} \right], \quad A_y = -\frac{\mu y_0^2}{m^2 z_0^2} \left[ \left( 1 - \frac{\mu^2}{m^2} \right) \frac{1}{z_0} + \frac{\mu}{z_c} \right] \quad (4)$$

$$A_{xy} = -\frac{\mu x_0 y_0}{m^2 z_0^2} \left[ \left( 1 - \frac{\mu^2}{m^2} \right) \frac{1}{z_0} + \frac{\mu}{z_c} \right]; \quad (5)$$

$$F = A_x + A_y \quad (6)$$

$$D_x = \frac{\mu}{m} \left( \frac{\mu^2}{m^2} - 1 \right) \frac{x_0 (x_0^2 + y_0^2)}{z_0^3}, \quad D_y = \frac{\mu}{m} \left( \frac{\mu^2}{m^2} - 1 \right) \frac{y_0 (x_0^2 + y_0^2)}{z_0^3}. \quad (7)$$

式中  $\mu$  为重现-记录光波长比,  $m$  为全息图的尺寸缩放因子. 从波差与光线像差的关系式<sup>[12]</sup>

$$TA_x = (I/n) (\partial w / \partial x'), \quad TA_y = - (I/n) (\partial w / \partial y), \quad (8)$$

可推导出光线像差的表达式:

$$\begin{aligned} TA_x &= (I/2n) [(x^2 + y^2) (C_x - xS) + 2x^2C_x + 2xyC_y - 2xA_x - 2yA_{x_y} - xF + D_x], \\ TA_y &= (I/2n) [(x^2 + y^2) (C_y - yS) + 2xyC_x + 2y^2C_y - 2yA_y - 2xA_{x_y} - yF + D_y] \end{aligned} \quad (9)$$

$$\left. \begin{aligned} I &= (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2)^{1/2} x_i = x_0 M_{lat}, \quad y_i = y_0 M_{lat}, \quad z_i = z_0 M_{long} \\ M_{lat} &= m / [1 - (m^2 z_0 / \mu z_c)], \quad M_{long} = - (M_{lat}^2 / \mu) \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

且  $M_{lat}$ 、 $M_{long}$  分别为横向和纵向放大率,  $TA$  表示实际像点对理想像点的偏移.

根据(1)式和(9)式, 就可以进一步分析 X 射线全息的波差与光线像差.

### 3 数值模拟

#### 3.1 波差

1987 年, Trebes 等人<sup>[6]</sup>首次利用 X 激光拍摄全息图. 他们所用的样品具有三维结构, 在一根  $\phi 40 \mu\text{m}$  的玻璃主杆顶端粘放三根  $\phi 10 \mu\text{m}$  的金丝, 这些金丝呈标准正交排列. 激光波长和物到记录介质的距离分别为:  $\lambda = 20.6 \text{ nm}$ ,  $z_0 = 5.08 \text{ cm}$ . 拍出的全息图用放在  $3 \text{ m}$  以外的 He-Ne 激光重现, 给出了重现像, 并报道说获得了  $10 \mu\text{m}$  的分辨率. 不过, 从它们给出的重现像来看, 即使是  $\phi 40 \mu\text{m}$  的玻璃主杆也是模糊的. 这也许有散斑和孪生像的影响, 但作者认为像差也是一个重要的因素. 为证实这一点, 将对这一实验中的像差进行数值模拟.

假定样品的尺寸为  $100 \mu\text{m}$ , 取一个典型的物点  $O(25, 25, 5.08 \times 10^4)$  以备下一步的数值计算, 坐标单位为  $\mu\text{m}$ . 图 2 给出了波差对全息平面的分布, 其中图(a)为三维分布, (b)为其截面图. 从图中可以看出, 平均波差约为  $1 \mu\text{m}$ , 大于重现光波长 ( $0.6328 \mu\text{m}$ ). 这样就可以用几何像差理论来分析其像差. 靠近全息图边界时, 波差逐渐增大, 这就是说, 随着全息图尺寸的增大, 还必须综合考虑像差和衍射限制. 另外, 波差的整体分布对全息图稍有不对称.

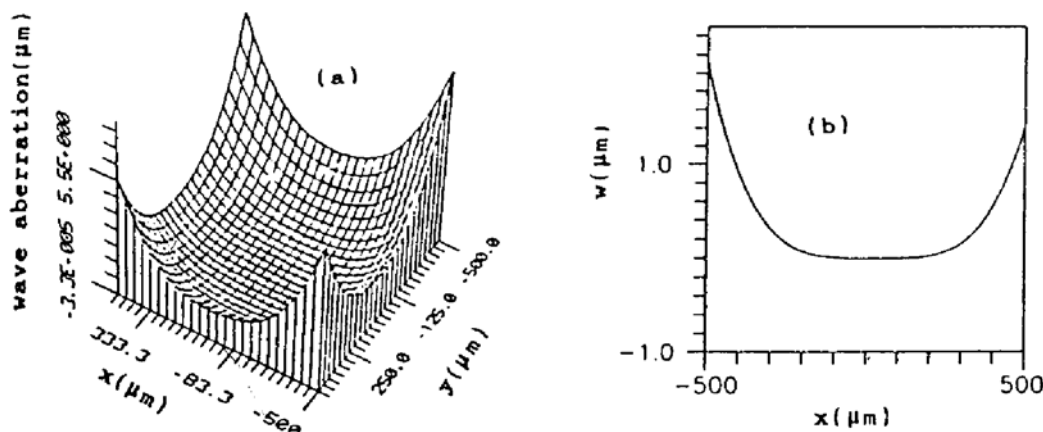


Fig. 2 Distribution of wave aberration on the hologram plane, (a) three-dimensional; (b) its section.  $\mu = 30.72$ ,  $m = 1$ ,  $z_0 = -5.08 \text{ cm}$ ,  $z_c = -3 \text{ m}$

图 3 为球差、慧差和像散分别引起的波差截面图, 其中球差和慧差分别对  $x = 0$  平面和原点对称, 其值相对较大, 而像散值对整个  $XY$  平面来说是一个小的常数. 由此可以看出, 在所有影响该 X 射线全息分辨率的三种像差中, 球差和慧差是两种最主要的像差. 另外, 慧差对  $x = 0$  平面的不对称性导致了图 2 所示整个波差分布的不对称性. 由图 3 还可以看出, 球差对整个波差的影响最大, 尤其是在全息图的外围. 而对每一个物点来说, 球差对成像质

量的影响又都是相同的. 因此, 重现中必须首先设法减小此类像差.

(2)式给出了球差系数  $S$  作为  $z_0$ 、 $z_c$  的函数, 其中  $z_0$  及物体尺寸  $(x_0, y_0)$  要受到 X 射线源相干性的限制<sup>[13]</sup>, 因而可以对它们取定值.  $z_c = 2m^2 z_0 / \mu$  时,  $S$  具有最小值. 文献<sup>[6]</sup>中, 如果取  $z_c = 3.308 \text{ mm}$ , 即可将球差降至最小. 图 4 为  $S$  随  $z_c$  变化的曲线图, 它表明无法将  $S$  减小到零. 随着  $z_c$  的增大,  $S$  有一极限值  $\mu(\mu^2/\text{mm}^2 - 1)/m^4 z_0^3 (-2.209 \times 10^{-10})$ . 因此, 为减小球差我们必须让重现光点源很靠近全息图或是以近平行光入射. 此外, 在球差较大时还可以在重现过程中用一个会聚透镜来校正球差, 这一方法已被 Tonomura<sup>[14]</sup> 成功地用于电子全息的像差校正中.

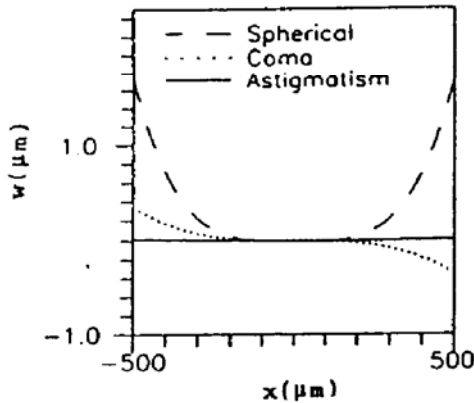


Fig. 3 The contributions of spherical aberration, coma, astigmatism to wave aberration (a cross section of  $y = 0$ ), with  $\mu = 30.72$ ,  $m = 1$ ,  $x_0 = y_0 = 25 \mu\text{m}$ ,  $z_0 = -5.08 \text{ cm}$ ,  $z_c = -3 \text{ m}$

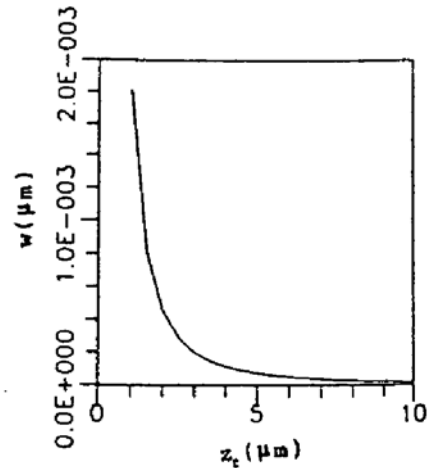


Fig. 4 The curve of  $S$  taking  $z_c$  as independent variable, with  $\mu = 30.72$ ,  $x_0 = y_0 = 25 \mu\text{m}$ ,  $z_0 = -5.08 \text{ cm}$ ,  $z_c = -3 \text{ m}$

根据(3)式, 在下列条件下慧差系数  $C_z$  可以彻底消失:

$$z_c = \frac{m^2 z_0}{\mu + m}, \quad z_c = \frac{m^2 z_0}{\mu - m}. \quad (15)$$

这一条件类似于球差的情形.  $\mu$  越大  $z_c$  值越小 (1.602 mm 或 1.709 mm). 这一距离很小较难控制, 但可以用会聚透镜将一束平行光聚集到全息平面附近, 即可得到满足条件的重现光源. 另一方面  $C_z$  又随  $x_0$  而增大, 在靠近样品边界处慧差表现得更为突出, 这也可从图 3 看出. 这意味着待研究的样品应做得尽可能小, 并对称放置在主轴 ( $Z$  轴) 上才可以减小慧差. 按以上分析调整记录重现光的参数, 可在一定程度上减小波差, 如果要将整个全息平面上的波差调整到最佳, 还需用到像差平衡技术, 只是这一技术涉及到全息记录参数, 这对 X 射线全息来说是很难实现的.

### 3.2 光线像差和点列图

实际波面对理想波面的偏移会使一个理想像点扩展成一个散斑图形. 计算出光线像差并绘出其点列图即可清晰地模拟出这一散斑图形, 从图形上的点分布可求出与上述典型物点相对应的像面散斑图的有效半径. 类似于埃里斑, 这一半径也可以看成是像差对全息分辨率的限制.

研究光线像差的传统方法是光线追迹, 但其计算较繁. 为简化计算, 可以充分利用已知的波差来求出光线像差. 用一个均匀的方形网络把全息图划分开来, 由(9)式分别计算通过

每个网格点的光线在高斯像平面上的光线像差. 以理想像点为原点、 $TA_x$  为横坐标、 $TA_y$  为纵坐标, 即可得到如图 5 所示的点列图. 这实际上是对特定物点成像过程的数字模拟, 点列图中的点密度分布即相应于像面上的光强分布. 图 6 示出的是图 5 中一个过中心截面上的点密度分布, 其半宽度约为  $1 \mu\text{m}$ .

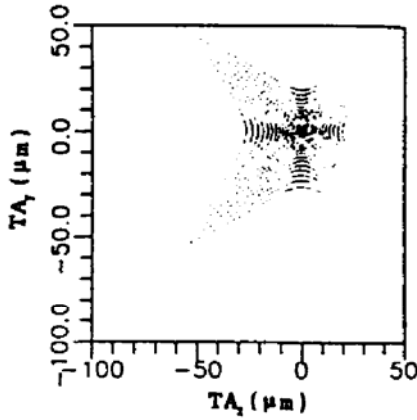


Fig. 5 The point diagram due to all the five aberrations, with  $\mu = 30.72$   $m = 1$ ,  $x_0 = y_0 = 25 \mu\text{m}$ ,  $z_0 = -5.08 \text{ cm}$ ,  $z_c = -3 \text{ m}$

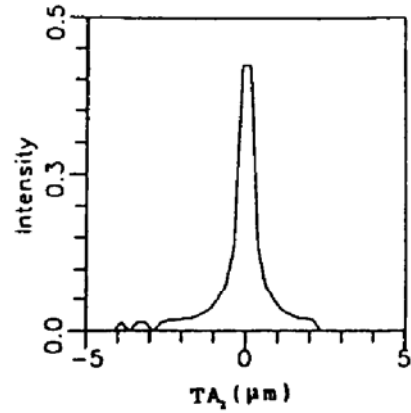


Fig. 6 The intensity distribution of points on axis  $TA_x$  in fig. 5

图 7 给出类似于图 6 的点密度分布, 只是这时有两个物点, 相距为  $1 \mu\text{m}$ . 两个值间的波谷处的强度约为最大强度的 50%. 根据瑞利判据, 这两个物点的像仍可以分辨开来. 由于在所研究的全息图中横向放大率接近于 1, 可以说仅考虑像差时该全息图的分辨率约为  $1 \mu\text{m}$ . 图 7 中除峰值外, 仍有较强的背景光强, 因而实际的分辨率值应大于  $1 \mu\text{m}$ . 因此, 要不是受记录介质分辨率 ( $5 \mu\text{m}$ ) 及其它因素的限制, 文献<sup>[6]</sup>中的分辨率应可以达到  $2 \mu\text{m}$  左右.

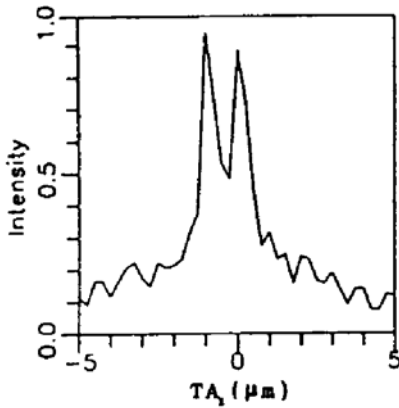


Fig. 7 The intensity distribution of point diagram for two object points. The spacing between the two points is  $1 \mu\text{m}$

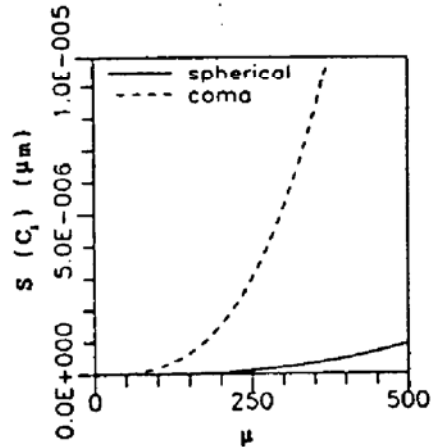


Fig. 8 The curves of spherical aberration and coma with wavelength ratio of recording- to-reconstruction light as independent variable

### 4 讨 论

在所研究的全息中重现-记录光波长比  $\mu$  相对较小. 图 8 给出了  $S$ (绝对值)、 $C$  随  $\mu$  变化曲线. 这两种像差都随  $\mu$  而增大, 只是  $C$  增加得较快. 这表现, 随着  $\mu$  的增大像差变得愈加突出. 如果记录光用软 X 射线 ( $2.4 \sim 4.4 \text{ nm}$ ). 重现用 He-Ne 激光, 直接重现必然会引入较大的像差, 因而有必要采用数字重现或其它像差补偿方法来消除像差.

图 9 分别给出了相应于球差(a)、慧差(b)、像散(c)的点列图,并有意地取图(a)中的全息图为圆形.慧差和像散的点列图与一般文献中定义的分类相符合,这从一定程度上反映出文献[11]对全息像差的定义是有效的.然而,由球差引起的点列图不是通常的中心对称分布,而是一个畸变了 的图形.该图形的形状很容易使人联想到枕形畸变,因而可以认为文献[11]定义的球差是与畸变混杂在一起的,而不是纯粹的 Seidl 球差.事实上,该定义与 Seidl 像差定义是有区别的,而文献[11]中像差系数的推导又是仿 Seidl 三阶像差的形式得到的,因而得到图 9(a)中的图形应该是有可能的.当然,把像差作为一个整体来研究时,这一定义上的异同并不影响本文的分析结果.

需要指出的是本文所引用的公式仅适用于同轴全息图.对离轴全息或其它非对称型全息,在离轴角度较大时可能会导致错误的结果.本文提供的方法可用于分析、估计进而设法减小 X 射线全息像差,它也可以用于其它波段的大像差全息成像.

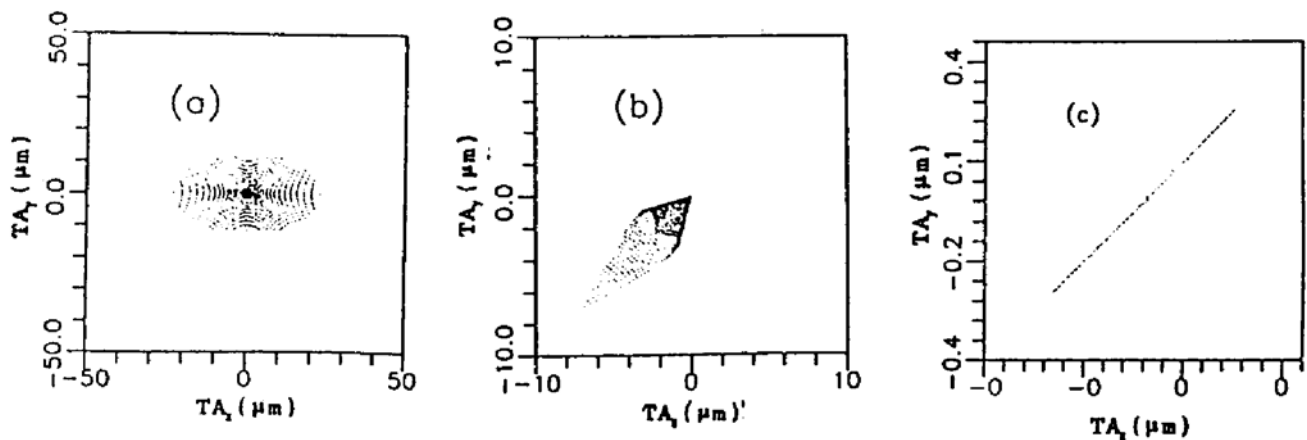


Fig. 9 The point diagrams due to spherical aberration (a) coma (b), astigmatism (c).  $\mu = 30$ .

$$72, m = 1, x_0 = y_0 = 25 \mu\text{m}, z_0 = -5.08 \text{ cm}, z_c = -3 \text{ m}.$$

### 参 考 文 献

- [1] J. C. Solem, G. F. Chapline, X-ray biomicroholography. *Opt Engng.*, 1984, **23**(2): 193~203
- [2] A. V. Baez, A study in diffraction microscopy with special reference to X-rays. *J. Opt. Soc Am.*, 1952, **42**(10): 756~762
- [3] S. Aoki, S. Kikuta, X-ray holographic microscopy using synchrotron radiation. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1974, **13**(9): 1385~1392
- [4] B. Reuter, H. Mahr, Experiments with Fourier transform holograms using 4.48 nm X-rays. *J. Phys.* 1976, **E9**(11): 746~751
- [5] M. R. Howells, M. A. Iarocci, J. Kirz, Experiments in X-ray holographic microscopy using synchrotron radiation. *J. Opt. Soc. Am.*, 1986, **A3**(12): 2171~2178
- [6] J. E. Trebes, S. B. Brown, E. M. Campbell *et al.*, Demonstration of X-ray holography with an x-ray laser. *Science*, 1987, **238**(4826): 517~519
- [7] C. Jacobsen, M. Howells, J. Kirz *et al.*, X-ray holographic microscopy using photoresists. *J. Opt. Soc. Am.*, 1990, **A7**(10): 1847~1861
- [8] Ian McNulty, J. Kirz, C. Jacobsen *et al.*, High resolution imaging by Fourier transform X-ray holography. *Science*, 1992, **256**(5): 1009~1012
- [9] 朱佩平, 陈建文, 徐至展, X光全息术的记录方式对其分辨率的影响. *光学学报*, 1993, **13**(8): 717~722
- [10] 朱佩平, 陈建文, 徐至展等, 相干性对 X 射线全息分辨率的影响. *光学学报*, 1994, **14**(11): 1166~

1171

- [11] R. W. Meier, Magnification and third-order aberrations in holography. *J. Opt. Soc. Am.*, 1965, **55**(8): 987~992
- [12] 王之江著, 光学设计理论基础, 第二版, 北京, 科学出版社, 1985: 22
- [13] J. Solem, High intensity X-ray holography; an approach to high-resolution imaging of biological specimen. *Los Alamos National Laboratory Report*, LA-9508-MS, 1982
- [14] Tonomura A., T. Matsuda, J. Endo, Spherical-aberration correction of an electron lens by holography. *Jap. J. Appl. Phys.*, 1979, **18**(7): 1373~1377

## Simulation to Aberrations in In-Line X-ray Holography

Xiao Tiqiao      Chen Jianwen      Xu Zhizhan      Zhu Peiping  
Kou Leigang      Wang Zhijiang

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica, Shanghai 201800)

(Received 29 September 1993; revised 11 November 1993)

**Abstract** A digital simulation to aberrations in in-line X-ray holography, and the third order wave aberration and ray aberration are discussed. The ray aberration is derived via a relatively simple method. The point diagrams are gives and the resolution limiting is estimated based on a typical holography with x-ray laser. Some propositions for reducing aberrations are given.

**Key words** X-ray holography, wave aberration, ray aberration.