

数字重现无透镜傅里叶变换 X 射线 全息实验模拟研究

肖体乔 徐至展 陈建文 韩申生 王晓方

(中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

摘 要 参照无透镜傅里叶变换(LLFT) X 射线全息图的记录光路, 采用可见光源模拟研究了无透镜傅里叶变换 X 射线全息从记录到数字重现的全过程, 给出了实验结果, 并对光学重现和数字重现结果作了比较, 分析了该记录方式存在的一些问题, 指出实际 X 射线全息记录中可直接使用波带板+ 1 级衍射而不必在物面加一滤波小孔。分析了利用数字重现消除记录过程中非线性效应的可行性。并着重指出波带板的多级衍射的互干涉对重现现象的干扰, 应设法消除。

关键词 无透镜傅里叶变换, X 射线全息, 数字重现。

1 引 言

X 射线全息术在生物样品、微电子样品和材料科学样品的高分辨率研究中是一项很有发展前途的技术。它能给出吸收和位相反衬, 且适用于脉冲光源, 与层析术相结合还可以进一步提高纵向分辨率, 实现三维高分辨率成像。处于水窗波段的软 X 射线特别适合于对薄的有机样品及湿的生物体如亚细胞细胞器等进行显微研究。近年来, 由于 X 射线源、X 射线光学及 X 射线探测器等方面的进展, 使用 350~ 600 eV 的光子可使盖伯和傅里叶变换全息术的横向分辨率达 50~ 60 nm^[1, 2]。与层析术相结合即采用全息层析术还实现了 100 nm 的纵向分辨率^[3]。随着第三代同步辐射源的使用, 更高能量(1~ 4 keV)的 X 射线全息术很快就会成为现实。这些方法就可能用来研究软 X 射线穿透不过的、更致密的物质, 如微电路中的缺陷、沸石的吸附物等。在不久的将来, 就可能看到 X 射线全息在更大的光子能量范围内取得进展, 能用来研究元素特性及化学特征, 并实现高分辨率成像。

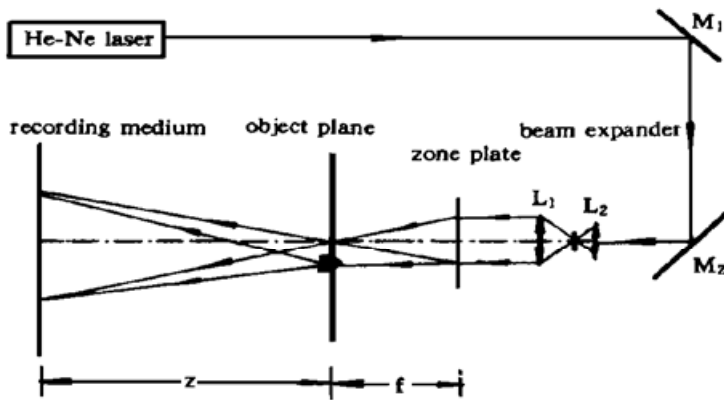
受 X 射线波段成像元件的限制, 目前 X 射线全息主要采用盖伯同轴和无透镜傅里叶变换(LLFT)两种记录方式。文献[4]认为无透镜傅里叶变换全息记录方式更适合于 X 射线全息术。同样, 在 X 射线全息图的两种重现方法即光学重现和数字重现中, 可见光重现由于象差等因素的影响很难获得高分辨率^[5]; 数字重现则具有较大的灵活性, 可消除像差、噪声、记录过程中非线性等因素的影响, 对同轴 X 射线全息还可以方便地消除孪生象的干扰。无透镜傅里叶变换 X 射线全息图的干涉条纹间隔可调, 适用于 X 射线波段 CCD 记录, 经 A/D 转换可直接把离散化的全息图条纹强度分布数据输入到计算机。采用二维离散傅里叶变换

(DFT) 运算, 只需几分钟即可完成整个重现过程, 并把重现象直接由阴极射线管(CRT)输出, 通过图形硬拷贝或拍照即可获取重现结果。从而大大简化重现工序、缩短重现时间, 并有效地提高重现象的质量, 实现 X 射线全息显微术的在线观测。实际上, 这也应该是未来 X 射线全息术发展的方向。

本文参照无透镜傅里叶变换 X 射线全息的记录光路, 采用可见光源模拟研究了该类全息图的记录、数字化及计算机重现过程。给出了模拟光路, 详细地分析了其中各参数的选取, 并指出了在实际用 X 射线记录全息图时所应采取的方法。给出了数字重现结果, 并与光学重现作了比较, 并分析了数字重现时消除记录过程中非线性效应的可行性。最后对模拟结果作了进一步的讨论。

2 模拟光路及参数分析

实验中采用的模拟光路如图 1 所示, 其中波带板一级聚焦光斑即为参考点源, 其余衍射



级的光照射样品产生物光, 这样可使光路简单化。波带板各级焦斑处于光轴 $\pm f/N$ 位置上, 其中 f 为波带板焦距, 即 +1 级焦点距波带板的距离, 负值代表位于入射光一侧的虚焦点, $N = 1, 3, 5, \dots$ 。各级焦点处的光强以 $1/N^2$ 递减, 照明样品的光主要为零级(直接透射光)和 -1 级。样品与一级焦斑处于同一位置上, 物面上开一小孔以过滤其它衍射级而仅让一级焦点处的光通过, 作为参考点源。在满足重现象与

Fig. 1 The experimental setup for simulation of LLFT

X-ray hologram recording 零级相分离的条件下, 参考点源与样品的距离应尽量小, 以增大条纹间隔。使用分辨率较低的记录介质可提高曝光灵敏度, 从而缩短曝光时间。X 射线全息对记录装置的稳定性要求较高, 因而这一点显得特别重要。适当调整记录参数, 还可以直接用带荧光转换板的 CCD 记录无透镜傅里叶变换 X 射线全息图。记录距离 z 的选择, 受多种因素的限制, 如曝光时间、记录介质分辨率等^[6]。

无透镜傅里叶变换全息记录方式中, 样品和参考点源到记录介质的距离相等, 每一物点产生的球面波和参考点源的球面波因子相互抵消, 因而全息图干涉条纹分布较为规则。实验中采用了两个样品, 其一为字符“F”, 用针在薄铜片上扎出, 故其边界分布不规则, 且在一竖的末端特意扎了三个小孔。在物旁再扎出一个直径约几百个微米的小孔以过滤参考点源。字符的横向尺寸约为 1.5 mm, 参考点源到字符的距离与字符尺寸相当。一般说来, 这个间隔可使重现象与零级分离。另一样品为无衍射光束研究中使用的特殊波带板(SZP), 其透明波带区满足下述条件^[7]:

$$[\sqrt{(r - d/2)^2 + f^2} - f] / \lambda - \text{int} \{ [\sqrt{(r - d/2)^2 + f^2} - f] / \lambda \} < 0.5 \quad (1)$$

其中 r 为各带到其中心的径向距离, f 为波带板焦距, d 为波带板聚焦环带的直径, λ 为波长, $\text{int} \{x\}$ 代表对 x 取整数。该样品由计算机产生, 再微缩到胶片上获得。与普通波带板相比, 该波带板在中心区域仍有一定的结构, 便于重现象低频结构的分析。将制得的波带板固定在

薄铜片的方孔上,方孔边长等于波带板直径。本文中所用的 SZP 样品的直径为 2 mm,其中心到参考点源的距离为 3.2 mm。

实验中应仔细调节物面的位置,使滤波小孔刚好处于波带板一级焦点的位置上,从而在记录平面上得到一均匀的光场。而且应把物面固定好,因为小孔位置稍有移动参考光场就会变得不均匀。在可见光波段达到上述要求并不难,但在 X 射线波段让一级焦斑准确地通过滤波小孔却十分困难。因此,实际记录 X 射线全息图时,可让一级焦斑从放置样品的方孔上某一角处通过。这样一来光路调节就容易得多,而且由于波带板其余衍射级相对较弱,仍可获得较好的效果。

3 数字重现及分析

图 2、图 3 分别为样品“F”与特殊波带片的全息图的一部分。按图 1 光路拍摄的全息图,经过一系列处理过程后再用微密度计数字化,将离散化的全息图光密度数据输入计算机,按灰度等级显示在阴极射线管上即得如图所示的条纹分布,其中屏幕显示阵列为 640×480 。扫描取样间隔 $\Delta x = \Delta y = 10 \mu\text{m}$,取样点阵 1024×1024 。取样间隔的选取应使得最小的条纹间隔内至少有两个取样点。图 2 表明,字符“F”的零级衍射区域内全息图条纹量度远大于周围区域。这样很容易导致记录过程的非线性,并抑制相对较弱的高频信息的记录。因而,实际在 X 射线全息中应设法将样品的零级衍射斑挡掉。对结构较复杂、衍射较强的特殊波带片样品来说,情况要好得多,如图 3 所示。

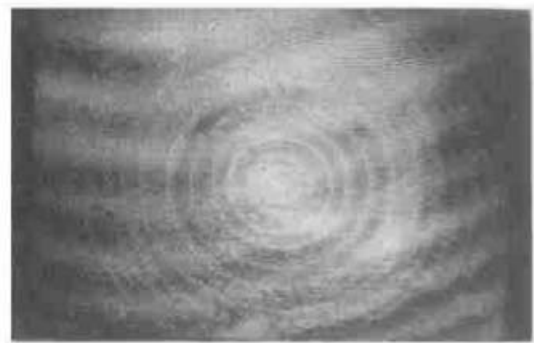
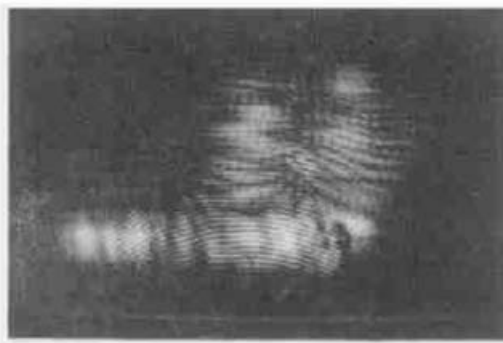


Fig. 2 The hologram for character “F” which is photoed from CRT, where the recording distance is 18 cm, the sampling step equals to $10 \mu\text{m}$, and only 640×480 of 1024×1024 data array is displayed

Fig. 3 The hologram for SZP which is photoed from CRT, where the recording distance is 20 cm, the sampling step equals to $10 \mu\text{m}$, and only 640×480 of 1024×1024 data array is displayed

图 4、图 5 分别为两全息图光学重现象。由于拍摄时很难把胶片准确地调整到象面,且曝光时间也较难掌握,因此重现象质量不太理想。而数字重现则很容易克服这些困难,获得较为理想的重现。

全息图数据处理及重现都是在 PC 586/60 微机上进行的。重现中采用了离散快速傅里叶变换(FFT)来近似地实现二维连续傅里叶变换:

$$A(x, y) = \iint I(\zeta, \eta) \exp\left[-\frac{2\pi i}{\lambda z}(\zeta x + \eta y)\right] d\zeta d\eta, \quad (2)$$

其中 $A(x, y)$ 正比于重现象的振幅, $I(\zeta, \eta)$ 为全息图干涉条纹强度分布, λ 为波长, (x, y) 和 (ζ, η) 分别为象面和全息面的坐标, z 为物面到记录介质的距离。重现程序与用于模拟全

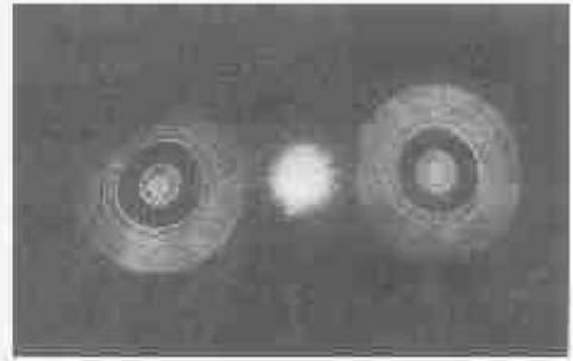
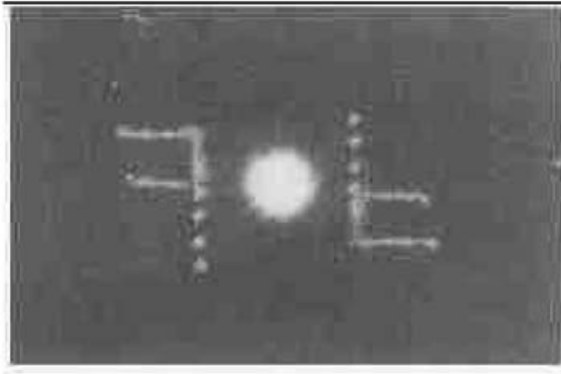


Fig. 4 The optically reconstructed image for the hologram of "F"

Fig. 5 The optically reconstructed image for the hologram of SZP

息图产生及重现过程的程序类似^[8]。重现一张 1024× 1024 点阵的全息图约需二分钟。图 6 为“F”的数字重现结果，其中图 6(a) 为缩小两倍的重现象场。正如所期望的那样，两个重现象上下、左右互为倒置，且分居于零级的两侧。因零级的亮度太高，为了显示方便，已把它滤掉，因而在零级中央可以看到一个方孔。由重现数据直接显示如图 6(b) 所示，此时可分辨出更多的细节。图 7 为样品特殊波带片的重现象，很明显，它比光学重现象的质量要好，可以分辨出直至最外环的结构。

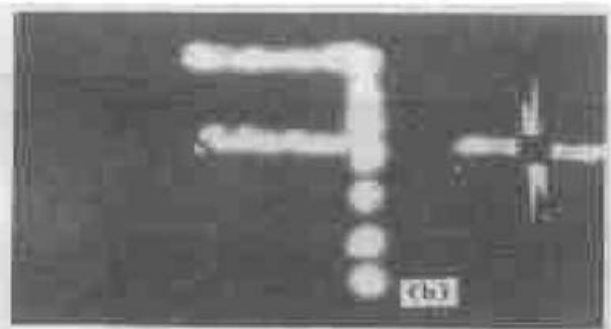
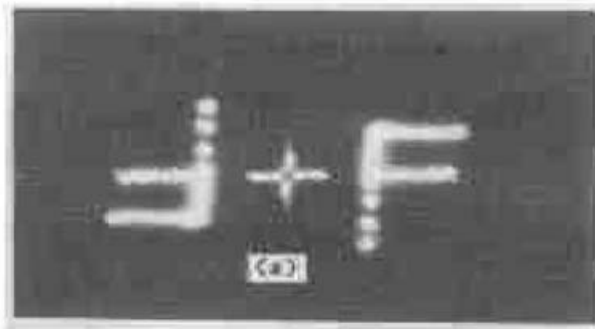


Fig. 6 The digitally reconstructed image for the hologram of "F", where (a) in reduced scale with 0th, ± 1th displayed; (b) in original scale and only 0th, 1th displayed



Fig. 7 Similar to Fig. 6 but the sample is SZP

从光学重现和数字重现结果中都不难发现，重现象上叠加了一套环形的干涉条纹。看上去这套条纹是以零级为中心的，很容易误以为是零级的干扰所致。作者对此进行了专门研究。结果表明，这主要是记录时波带板的负一级衍射与零级在样品面上的干涉所致。对同步辐射源，其时间相干性较差，加上波荡器后其时间相干长度亦仅为 1 μm 左右。用此光源记录无透镜傅里叶变换 X 射线全息时，这一干涉效应对重现象的影响也许可以忽略。但是如果使

用时间相干性较好的 X 射线激光来记录该类全息图, 该效应就会变得较为突出。这一现象在以往的文献尚未见报道, 应引起 X 射线全息工作者的注意。

正如前面所指出的那样, 无透镜傅里叶变换 X 射线全息中样品的零级衍射较强, 很容易导致记录过程的非线性, 该效应会影响重现象质量、降低重现分辨率。利用光学方法很难消除这一非线性效应的影响, 而在数字重现中则可以很方便地消除该效应。从原理上说以下方案是可行的:

- 1) 对记录介质定标, 绘出强度-灰度 ($I-D$) 曲线, 并拟合出相应的解析表达式;
- 2) 根据上述表达式, 将全息图的光密度值转换成全息图干涉条纹的强度分布值。只要全息图曝光的动态范围在 $I-D$ 曲线的定义域内, 这样得到的强度值就是真实值;
- 3) 将由上述过程得到的强度值代入(2)式进行重现, 即可得到不受非线性效应干扰的重现象。

不过, 对 X 射线记录介质定标本身就不是一件容易的事, 其定标误差也较大(最大可达 $\pm 20\%$), 因而该方法在实用上有一定的困难。利用下述近似可简化这一过程,

$$t = c_0 + c_1 I + c_2 I^2 + c_3 I^3 \quad (3)$$

其中 t 为全息图透过率, I 为入射到记录介质上的光强, $c_i (i = 0, 1, 2, 3)$ 为常数, 对特定的记录介质, 常数 c_i 是可以由实验方法测出的, 如对柯达(Kodak) 649F 底板: $c_0 = 0.92$, $c_1 = -0.575 \times 10^{-3}$, $c_2 = -0.137 \times 10^{-3}$, $c_3 = 0.735 \times 10^{-6}$ 。一般地 $c_3 \ll c_2$, 故仅考虑二阶效应就可以了。利用 $t = \exp(-D/2)$, D 为全息图光密度, 由下式就很容易求得光强 I 的分布:

$$\exp(-D/2) = c_0 + c_1 I + c_2 I^2 \quad (4)$$

如此, 即可有效地消除非线性效应的干扰, 获得高分辨率的重现象。

4 讨 论

通过模拟实验可以认为, 由于光路调整的困难, 在无透镜傅里叶变换 X 射线全息记录中, 很难通过在样品架上制作一小孔过滤波带板的一级衍射光来获得理想的参考点源, 而仅让参考点源从放置样品的方孔上的某一个角上通过, 这样可以使该光路更易于实现。其实无透镜傅里叶变换 X 射线全息的分辨率最终是要受参考点源尺寸的限制, 制作更精密的波带板才是提高其分辨率的有效途径^[8]。参考源上杂有其它衍射级可能降低全息图的衍射效率, 但不至于对重现象的分辨率有较大的影响, 因为波带板其余级光衍射级比一级衍射要弱得多。

实验中适当调整参考点源和样品的间隔及样品到记录介质的距离, 可在全息图上得到不同间隔的干涉条纹。如果用 CCD 直接记录无透镜傅里叶变换 X 射线全息图, 因 X 射线波段 CCD 中每一象素的尺寸为 $23 \mu\text{m}^2$, 故全息图最小条纹间隔应大于 $10 \mu\text{m}$ 。通过实验还发现, 记录光路中波带板的其它各级衍射光, 特别是 -1 级衍射, 在样品表面与零级干涉会严重影响重现象的质量, 应设法消除。对散射较强样品, 该效应也许可以忽略。不过对于一般的样品, 特别是生物样品, 对 X 射线的散射是比较弱的, 随着 X 射线源时间相干性的提高, 这一效应将变得较为突出。在生物样品中植一强散射金属小球来产生参考点源, 也许可以从根本上消除这一效应的影响。

作者感谢中国科学院南京紫金山天文台 PDS 组在实验方面的帮助。

参 考 文 献

- [1] C. Jacobsen, M. Howells, J. Kirz *et al.*, X-ray holographic microscopy using photoresists. *J. Opt. Soc. Am. (A)*, 1990, **7**(10): 1847~ 1861
- [2] I. McNulty, J. Kirz, C. Jacobsen *et al.*, High-resolution imaging by Fourier transform X-ray holography. *Science*, 1992, **256**(5059): 1009~ 1012
- [3] I. McNulty, The future of X-ray holography. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.*, 1994, **A347** (1994): 170~ 176
- [4] Tiqiao Xiao, Jianwen Chen, Zhizhan Xu *et al.*, Gabor and LLFT X-ray holography: a comparison. *J. Modern Opt.*, 1996, **43**(3): 607~ 615
- [5] Tiqiao Xiao, Jianwen Chen, Zhizhan Xu *et al.*, Effect of aberrations on the direct reconstruction of X-ray hologram with visible light. *Proc. SPIE*, 1994, **2321**: 558~ 560
- [6] Tiqiao Xiao, Jianwen Chen, Zhizhan Xu *et al.*, Theoretical study on the direct reconstruction of LLFT X-ray hologram with visible light. *Acta Physica Sinica*, (Overseas Edition), 1994, **3**(10): 736~ 745
- [7] T. Hidaka, Generation of a diffraction free laser beam using a specific Fresnel zone plate. *Jpn. J Appl. Phys.*, 1991, **30**(8): 1738~ 1739
- [8] Tiqiao Xiao, Jianwen Chen, Zhizhan Xu *et al.*, Simulated study on the recording and digital reconstruction of LLFT X-ray holography. *Chinese J. Lasers*, 1995, **B4**(4): 377~ 384

An Optically Simulated Experimental Study on the Digital Reconstruction of LLFT X-Ray Hologram

Xiao Tiqiao Xu Zhizhan Chen Jianwen
Han Shensheng Wang Xiaofang

anghai Institute of Optics and Fine Mechanics, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 20180
(Received 25 December 1995)

Abstract The LLFT X-ray holography is studied by optical experimental simulation on the whole process from recording to digital reconstruction. A He-Ne laser is used as light source and the recording setup is similar to that in LLFT X-ray holography. Experimental results are given and a comparison between digital reconstruction and optical reconstruction is made. Some problems in this kind of recording style are analyzed. As a result, we point out that in X-ray hologram recording the + 1st diffraction of zone plate can be taken as reference point source directly, rather than filtered by a small hole. The feasibility for eliminating the nonlinearity of recording medium is analyzed. The disturbance of the interference from the different diffractions of zone plate is emphasized.

Key words lensless Fourier transform (LLFT), X-ray hologram, digital reconstruction.