

双能量 X 射线荧光全息图重构算法消除 孪生像的模拟研究

谢红兰 胡雯 罗红心 邓彪 杜国浩 薛艳玲 陈荣昌 师绍猛 肖体乔

(中国科学院上海应用物理研究所 上海 201800)

摘要 X 射线荧光全息术以样品内部的发光原子作为相干光源进行全息成像,可以直接观测到晶体内部原子的三维排列结构。和传统的全息术一样,X 射线荧光全息术也遇到了孪生像问题。本文以 27 个 Fe 原子成立方排列的结构为模型,采用双能量荧光全息图重构算法研究入射 X 射线能量的选取对消除孪生像效果的影响。结果表明:记录荧光全息图的两个 X 射线能量越接近(对于内探测器全息术而言,最小能量差取决于单色器和探测器的能量分辨率;对于内源全息术而言,最小的能量差取决于元素的两个紧邻荧光能量差和探测器的能量分辨率),消除孪生像的效果越好;而入射 X 射线的能量越高,则原子像的分辨率越高。

关键词 X 射线荧光全息术,孪生像,重构算法,同步辐射

中图分类号 O434.1, O438.1

物质的各种宏观性质源于本身的微观结构。探索物质结构与性质之间的关系是凝聚态物理、结构化学、材料科学、分子生物等学科的一个重要研究内容,因此物质的原子或分子的三维排列的结构信息是物理学、材料学、化学、生物学的基础。传统全息成像的分辨率受限于波长、光源尺寸和探测器的分辨能力,难以在原子水平上观测样品内部的三维结构^[1]。为克服这种限制,Szöke^[2]提出了 X 射线荧光全息术的概念。把样品内部受到 X 射线激发的荧光原子作为光源,直接到达探测器的荧光和经邻近原子散射后到达探测器的荧光发生干涉,探测器在 4π 立体角范围内记录干涉信号,即得到发光原子周围的所有散射原子的全息图,利用计算机数值法重构全息图,就能获得荧光原子周围的邻近原子在实空间的三维分布。这种全息术也叫内源全息术。Gog^[3]将光路可逆原理应用于内源全息术,将光源与探测器互换,提出了内探测器全息术。用这两种全息术,能获得单晶或者准晶体内部具有原子分辨率的三维结构分布信息^[4-10]。

尽管 X 射线荧光全息术突破了传统全息术成像分辨率的限制,但是,和传统的全息术一样,X 射线荧光全息术也有自 Gabor^[11]发明全息术以来所遇到的孪生像问题。原子的真像与孪生像中心对称,两者强度相等,无法分辨。而且,大部分成像单晶

都是中心对称结构,因此原子的孪生像与其中心对称的原子的真像重合,无法将原子真像与孪生像分离,甚至当原子位置满足 $kr=\pi(2m+1)/2$ (其中 $k=2\pi/\lambda$, r 代表原子位置, $m=0, 1, 2, \dots$) 的条件时,在 $\pm \vec{r}$ 的位置上,原子的真像与这个原子中心对称的原子的孪生像的强度相互抵消,造成原子像的消失。因此,对于 X 射线荧光全息术,孪生像干扰更甚于传统的可见光全息术中的干扰。

1991 年, Barton^[12]提出多重能量 X 射线全息术重构算法以消除孪生像,在不同能量 X 射线的入射下,记录一系列的荧光全息图,并按照一定的位相重组将这些全息图重构得到的原子像叠加在一起,即能得到消除了孪生像的原子像。这种方法也叫作多重能量的 X 射线全息术,因为它需要改变入射 X 射线的能量,因此这种消除孪生像的算法只适合于内探测器全息术,而不适合内源全息术。实验和理论都已经证明,多重能量的 X 射线全息术能够消除孪生像的影响^[6,7,13-15]。在这种重构算法中,为使孪生像随机位相的和趋于零,须在能量范围足够宽的人射 X 射线下记录全息图,每次实验都得记录很多张全息图。这样不仅实验上增加了很多困难,而且很多实际情况下,人们并不能自由地选择入射 X 射线源的能量。

国家自然科学基金(10505028)资助

第一作者:谢红兰,女,1977 年出生,2004 年于中国科学院上海光学精密机械研究所获博士学位,副研究员,现从事同步辐射 X 射线成像技术研究

收稿日期:2007-12-27,修回日期:2008-03-21

2002 年, Nishino^[16]等提出在两个非常接近的入射能量上记录两张全息图就可消除孪生像的方法。这种方法将两个全息图重构的原子像经过一定的位相重组后相减, 以消除孪生像的影响。这样, 只需要记录两张全息图, 实验操作并无多大困难。由于内源全息术可利用 K_α 线和 K_β 线作记录, 这种消除孪生像的重构算法于内探测器全息术和内源全息术都可适用。

本文以 27 个 Fe 原子成立方排列的结构为模型, 数值模拟了在多个入射 X 射线能量下记录的荧光全息图, 并采用双能量全息图重构算法, 研究入射 X 射线能量选取对消除孪生像效果的影响。我们发现, 记录荧光全息图的两个 X 射线能量越接近(对于内探测器全息术, 最小能量差取决于单色器和探测器的能量分辨率; 对于内源全息术, 最小的能量差取决于元素的两个紧邻荧光能量差和探测器的能量分辨率), 消除孪生像的效果越好; 入射 X 射线的能量越高, 原子像的分辨率越高。这对在上海光源开展双能量 X 射线荧光全息术研究, 十分重要。

上海光源首批七条光束线将于 2009 年 4 月出光。我们将在 XAFS 线站上开展这方面的实验研究。此光束线的单色器的能量分辨率($\Delta E/E$, 10 keV)可达 1×10^{-4} ; 在聚焦模式下的能区为 4~22.5 keV; 样品处聚焦光斑尺寸为 0.3 mm×0.3 mm; 样品处光通量 $> 1.0 \times 10^{13}$ phs/s(10 keV); 光束线实验站配备一台高计数率高能量分辨率荧光探测系统——32 元高计数率高纯锗探测器(Canberra 公司), 配合 XIA 公司的高速电子学数据采集系统, 可达 $\sim 10^8/s$ 的计数率和 $\sim 10^{-3}$ 的能量分辨率, 宜于对 Fe、Cu、Co、Ni、Zn、Sr 等原子进行双能量荧光全息术成像的实验研究。此外, 我们配备有二维旋转的电控样品台, 并已和日本东北大学 Kouichi Hayashi 博士开展合作研究, 在日本 PF 的同步辐射装置上进行了 Fe 单晶和记忆金属 TiNiFe 的 X 射线荧光全息术的实验研究, 取得了一系列的实验数据。

1 消除孪生像的双能量全息图重构算法

X 射线荧光全息图的强度为^[1,17]:

$$\chi(\vec{k}) = \sum_j (2/r_j) F(\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}}) \cos(r_j k - \vec{r}_j \cdot \vec{k}) \quad (1)$$

式中, $\vec{k}$ 为荧光的人射波矢, $k=2\pi/\lambda$; $F(\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}})$ 为在 $\vec{r}_j$ 处的原子对荧光的散射因子; $\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}}$ 为 $\vec{r}_j$ 与 $\vec{k}$ 间的夹角。

全息图的重构公式^[1,17]:

$$U_k(\vec{r}) = \frac{ik}{2\pi} \iint_{\Omega_k} \chi(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\Omega_k \quad (2)$$

式中, $\chi(\vec{k})$ 为全息图强度, $U_k(\vec{r})$ 为重构的原子像强度, Ω_k 为全息图球面面积, $d\Omega_k$ 为全息图球面元。

每个原子的真像和孪生像互为中心对称。若近邻原子以发光原子为中心对称排列, 两个中心对称原子都会将其孪生像相干迭加于对方真像。下文讨论此类真像和孪生像叠加问题。

根据式(1)和式(2), 任意两个中心对称原子的真像和孪生像的强度和为

$$U_k(\vec{r}_j) + U_k(-\vec{r}_j) \approx \frac{ik\Omega_k}{2\pi} \cdot \sum_j \left[\frac{e^{ikr_j}}{r_j} \cdot F(\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}}) + \frac{e^{-ikr_j}}{r_j} \cdot F^*(\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}}) \right] \quad (3)$$

其中, * 表示复共轭符号。

设 $|F|$ 为散射因子的振幅, α 为散射因子的相移, 则有

$$U_k(\vec{r}_j) + U_k(-\vec{r}_j) = \frac{ik\Omega_k}{\pi} \cdot \sum_j \frac{|F|}{r_j} \cdot \cos(kr_j + \alpha) \quad (4)$$

式(4)表明, 中心对称原子的孪生像和原子真像出现在同一位置, 振幅相同, 其振幅随波矢 k 和散射因子的相移 α 的不同而变化。当

$$kr_j + \alpha = m\pi \quad (m = 0, 1, 2, \dots) \quad (5)$$

时, 中心对称原子的孪生像与原子真像位相一致, 干涉相长, 再现像有最大振幅。当

$$kr_j + \alpha = (2n+1)\frac{\pi}{2} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (6)$$

时, 中心对称原子的孪生像与原子真像位相正好相反, 干涉相消, 再现像消失。由于 X 射线散射因子的相移很小, 多次散射很弱, 可以忽略, 所以再现像消失的条件为

$$kr_j = (2n+1)\frac{\pi}{2} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (7)$$

根据原子像消失须满足的条件, 可知散射原子与发光原子间的距离不同, 其原子真像与孪生像间的位相差也不同, 且此位相差随着入射 X 射线能量的改变而改变。对于待测样品, 其原子的间距是固定的, 我们无法改变原子间的距离而使其孪生像消失, 但可改变记录全息图的波长。基此, Barton^[12]提出了多重能量的 X 射线全息术, 但该重构算法需

多个入射能量的全息图, 很为不便。Nishino^[16]等提出的双能量全息图重构算法, 只需两张全息图就可消除孪生像。该法将两个非常接近的入射能量 k_1 和 k_2 上的两张全息图重构得到的原子像 $U_{k_1}(\vec{r})$ 和 $U_{k_2}(\vec{r})$ 进行一定的位相重组, 再两者相减, 以消除孪生像, 其重构公式为:

$$V_{k_1, k_2}(\vec{r}) = U_{k_1}(\vec{r})e^{ik_1 r} - U_{k_2}(\vec{r})e^{ik_2 r} \quad (8)$$

由式(8), 位于 $\vec{r}_j$ 处的原子的真像的强度为:

$$\begin{aligned} V_{k_1, k_2}(\vec{r}_j) &= U_{k_1}(\vec{r}_j)e^{ik_1 r_j} - U_{k_2}(\vec{r}_j)e^{ik_2 r_j} = \\ &= \frac{ik_1 \Omega_k}{2\pi} \sum_j \frac{e^{i2k_1 r_j}}{r_j} F(\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}_1}) - \\ &= \frac{ik_2 \Omega_k}{2\pi} \sum_j \frac{e^{i2k_2 r_j}}{r_j} F(\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}_2}) \end{aligned} \quad (9)$$

设 $\vec{k} = (k_1 + k_2)/2$, $\delta k = k_2 - k_1$, 如 k_1 和 k_2 非常接近, 其散射因子也非常接近, 则式(9)可写成:

$$\begin{aligned} V_{k_1, k_2}(\vec{r}_j) &= \frac{ik_1 \Omega_k}{2\pi} \sum_j \frac{F(\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}_1})}{r_j} \\ &= (e^{i2k_1 r_j} - e^{i2k_2 r_j}) \cong \\ &= \frac{k_1 \Omega_k}{\pi} \sum_j \frac{F(\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}_1})}{r_j} e^{2i\vec{k} r_j} \sin(\delta k r_j) \end{aligned} \quad (10)$$

由于 k_1 和 k_2 非常接近, 位于 $-\vec{r}_j$ 处的原子的孪生像的强度为:

$$\begin{aligned} V_{k_1, k_2}(-\vec{r}_j) &= U_{k_1}(-\vec{r}_j)e^{ik_1 r_j} - U_{k_2}(-\vec{r}_j)e^{ik_2 r_j} \\ &= \frac{ik_1 \Omega_k}{2\pi} \sum_j \frac{F^*(\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}_1})}{r_j} - \frac{ik_2 \Omega_k}{2\pi} \sum_j \frac{F^*(\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}_2})}{r_j} \\ &\approx 0 \end{aligned} \quad (11)$$

由式(10)和(11), 只要在两个非常接近的入射能量上记录两张全息图, 就可文献[16]的重构算法消除孪生像。双能量全息图重构算法能消除孪生像的样品尺寸, 约为 $a \leq r \leq \pi/\delta k$, a 为最小原子间距, 即只有与荧光原子的距离 r 在此范围内的散射原子的孪生像可被消除。

若记录全息图时考虑二次散射, 则原子真像强度为:

$$\begin{aligned} V_{k_1, k_2}(\vec{r}_j) &= U_{k_1}(\vec{r}_j)e^{ik_1 r_j} - U_{k_2}(\vec{r}_j)e^{ik_2 r_j} = \\ &= \frac{k_1 \Omega_k}{\pi} \sum_j \frac{F(\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}_1})}{r_j} e^{2i\vec{k} r_j} \sin(\delta k r_j) + \\ &= \frac{k_1 \Omega_k}{\pi} \sum_j \sum_m \frac{F(\Theta_{\vec{r}_m}^{\vec{k}_1}) F(\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}_2})}{r_m |\vec{r}_j - \vec{r}_m|} e^{i\vec{k} (r_j + r_m + |\vec{r}_j - \vec{r}_m|)} \\ &= \sin \left[\frac{\delta k}{2} (r_j + r_m + |\vec{r}_j - \vec{r}_m|) \right] \end{aligned} \quad (12)$$

式(12)的第一项来自一次散射, 第二项来自二次散射, 即双能量全息图重构算法无法消除二次散射对原子像的干扰。

而孪生像的强度为:

$$\begin{aligned} V_{k_1, k_2}(-\vec{r}_j) &= U_{k_1}(-\vec{r}_j)e^{ik_1 r_j} - U_{k_2}(-\vec{r}_j)e^{ik_2 r_j} \approx \\ &= \frac{ik_1 \Omega_k}{2\pi} \sum_m \frac{F(\Theta_{\vec{r}_m}^{\vec{k}_1}) F(\Theta_{\vec{r}_j}^{\vec{k}_2})}{r_m |\vec{r}_j - \vec{r}_m|} e^{i\vec{k} (r_j - r_m - |\vec{r}_j - \vec{r}_m|)} \\ &= \sin \left[\frac{\delta k}{2} (r_j - r_m - |\vec{r}_j - \vec{r}_m|) \right] \end{aligned} \quad (13)$$

因为 $r_j - r_m - |\vec{r}_j - \vec{r}_m| \neq 0$, 所以 $V_{k_1, k_2}(-\vec{r}_j) \neq 0$,

即双能量全息术只能消除一次散射孪生像, 而不能消除二次散射孪生像。

2 双能量全息图重构算法的数值模拟

我们以由 27 个 Fe 原子组成的立方排列晶格为模型(图 1a), 研究入射 X 射线能量的孪生像消除效果。模型中央原子为荧光原子, 余为散射原子。该模型的晶格常数为 2.9 Å。

图 1(b)是该样品在入射波数为 $8.0 \text{ \AA}^{-1}$ 即 $E = 15.7882 \text{ keV}$ 下, 计算得到的全息图。图 1(c)为由该全息图重构得到的 $z=0$ 平面上的原子像。图像的亮点代表原子。由上述模型, $z=0$ 平面上应有 9 个原子, 然而图 1(c)却只有 4 个亮点。这是因为: 计算中选定 $z=0$ 平面中央的一个原子为荧光原子, 该原子未被成像, 故图 1(c)上不见该原子的像; 其余 4 个原子的像的消失是因为孪生像的影响。由前文的孪生像讨论可知, 两个中心对称的散射原子的全息信号互相干涉, 导致原子图像强度相消或相长。每个原子的真像都与中心对称于它的原子的孪生像相互叠加。当散射原子与荧光原子的距离满足 $kr =$

$\pi(2m+1)/2$ 时(m 是不等于零的正整数),该原子的真像与中心对称于它的原子的孪生像的强度相互抵消,即在该原子的位置处,强度为零。 $k=8.0 \text{ \AA}^{-1}$,

原子 $(\pm 2.90 \text{ \AA}, \pm 2.90 \text{ \AA}, 0.00 \text{ \AA})$ 满足此条件, $m=10$ 。所以在这 4 个原子相应的位置上,未出现原子的像。

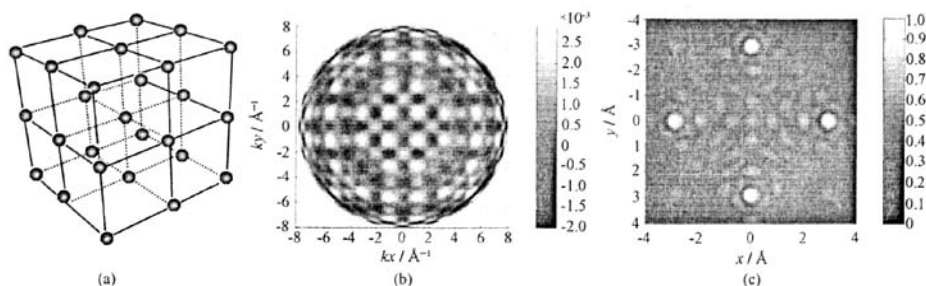


图 1 由 27 个 Fe 原子成立方排列的晶格结构模型(a)及其在入射能量 $k=8.0 \text{ \AA}^{-1}$ 记录的全息图(b)和由该全息图重构得到的平行于[001]晶面 $z=0$ 平面上的原子像(c)

Fig.1 The model of a 27-Fe-atom cubic lattice (a) with the hologram recorded at the energy $8.0 \text{ \AA}^{-1}$ (b) and the reconstructed atomic images in the plane parallel to the [001] crystallographic plane at $z=0$ (c).

现在讨论两个人射能量的接近程度对消除孪生像效果的影响。图 2(a)的原子像由两个记录在入射 X 射线波数差为 $\delta k=0.1 \text{ \AA}^{-1}$ 的全息图重构,即入射能量分别为 15.7882 keV 和 15.9885 keV ($\Delta E=197 \text{ eV}$, $\Delta E/E=1.2 \times 10^{-2}$)。对于内探测器全息术,只要单色器和探测器的能量分辨率($\Delta E/E$)高于 1.2×10^{-2} ,就可分辨这两个人射 X 射线,得到理想的孪生像消除效果。若将波数差增大为 $\delta k=0.5 \text{ \AA}^{-1}$,即两入射 X 射线波数为 $k_1=8.0 \text{ \AA}^{-1}$ 和 $k_2=8.5 \text{ \AA}^{-1}$, $\Delta E=985 \text{ eV}$ 。

图 2(b)为由此模拟得的全息图重构结果。4 个原子像出现在 $(\pm 2.90 \text{ \AA}, \pm 2.90 \text{ \AA}, 0.00 \text{ \AA})$ 处,证明由记录在入射能量相差 985 eV ($\Delta E/E=6.2 \times 10^{-2}$)的两个全息图重构的原子像,能消除孪生像。但与图 2(a)相比,这 4 个新出现的原子像的亮度因为记录全息图的能量差增大而明显低于其它 4 个原子像,不易清晰地分辨这 4 个原子像。这说明双能量的全息图重构算法只有当两个人射能量非常接近时,才有可能完全消除孪生像。

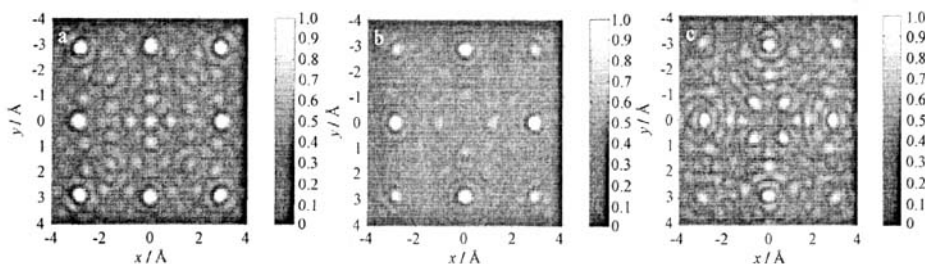


图 2 27 个 Fe 原子成立方排列的晶格结构在 (a) $k_{1,2}=8.0, 8.1 \text{ \AA}^{-1}$, (b) $k_{1,2}=8.0, 8.5 \text{ \AA}^{-1}$, (c) $k_{1,2}=8.0, 8.8 \text{ \AA}^{-1}$ 三种情况下记录的全息图重构的平行[001]晶面 $z=0$ 平面上的原子像

Fig.2 Atomic images of the 27-Fe-atom cubic lattice in the plane parallel to the [001] crystallographic plane at $z=0$ reconstructed from the hologram recorded at (a) $k_{1,2}=8.0, 8.1 \text{ \AA}^{-1}$, (b) $k_{1,2}=8.0, 8.5 \text{ \AA}^{-1}$, and (c) $k_{1,2}=8.0, 8.8 \text{ \AA}^{-1}$.

将入射能量差增为 $\delta k=0.8 \text{ \AA}^{-1}$ ($\Delta E=1.578 \text{ keV}$, $\Delta E/E=10.0 \times 10^{-2}$, $k_1=8.0 \text{ \AA}^{-1}$, $k_2=8.8 \text{ \AA}^{-1}$),其重构结果见图 2(c)。可以看到,在 $(\pm 2.90 \text{ \AA}, \pm 2.90 \text{ \AA}, 0.00 \text{ \AA})$ 处的原子像亮度非常微弱,淹没于亮度差不多的背景噪声中,根本无法分辨,且其余 4 个原子像也出现失真。可见当记录全息图的入射能量差过大,双能量全息图重构算法不能消除孪生像,且易导致原子像失真。

上述数值模拟结果表明,记录全息图的两个人射能量的接近程度是关键。

对于内探测器全息术,如单色器和探测器的能量分辨率理想,两个人射 X 射线的能量越接近,消除孪生像的原子像重构结果越好;最小的能量差取决于单色器和探测器的能量分辨率,它们的能量分辨率越高,可供选取的两个单色 X 射线能量差就越小,消除孪生像的效果也越好。而对于内源全息术,两个 X 射线能量的最小的能量差取决于元素的两个紧邻荧光能量差和探测器的能量分辨率,如探测器能量分辨率不足以分辨元素的两个紧邻荧光能量,则最小能量差取决于探测器的能量分辨率。由上述

模拟结果，两个人射能量只要满足 $\Delta E/E < 1 \times 10^{-2}$ ，用双能量全息图重构算法，能获得理想的无孪生像的原子重构像。

再讨论入射能量的高低对双能量全息图重构结果的影响。入射能量差均为 $\delta k=0.2 \text{ \AA}^{-1}$ ，分别计算 (a) $k_1=8.0 \text{ \AA}^{-1}$ 和 $k_2=8.2 \text{ \AA}^{-1}$ ，(b) $k_1=12.0 \text{ \AA}^{-1}$ 和 $k_2=12.2 \text{ \AA}^{-1}$ ，(c) $k_1=15.0 \text{ \AA}^{-1}$ 和 $k_2=15.2 \text{ \AA}^{-1}$ 的重构结果(图 3)。比较图 3(a)、(b)、(c)，可发现原子像的分辨率随入射能量提高而提高。

为了更清楚地显示在双能量全息图的重构算法中，入射能量对原子像分辨率的影响，我们给出位于 $(2.90 \text{ \AA}, 0.00 \text{ \AA}, 0.00 \text{ \AA})$ 处的单个 Fe 原子在上述三种情况下重构像的强度分布(图 4)。一般将原子像强度峰的 FWHM 作为原子像的分辨率。当入射能量为 $8.0 \text{ \AA}^{-1}$ 和 $8.2 \text{ \AA}^{-1}$ 、 $12.0 \text{ \AA}^{-1}$ 和 $12.2 \text{ \AA}^{-1}$ 、 $15.0 \text{ \AA}^{-1}$ 和 $15.2 \text{ \AA}^{-1}$ 时，其原子像分辨率分别为 $0.70 \text{ \AA}$ 、 $0.45 \text{ \AA}$ 和 $0.33 \text{ \AA}$ 。

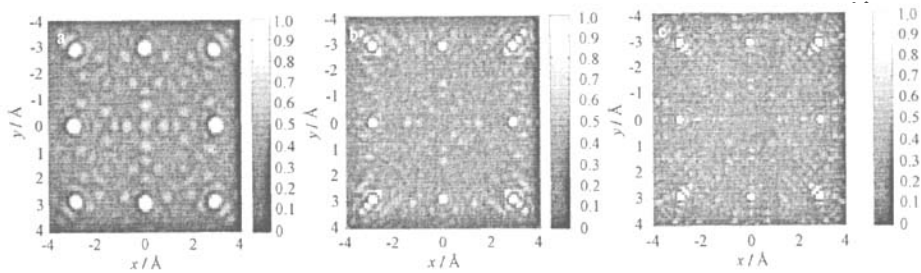


图 3 27 个 Fe 原子成立方排列的晶格结构在(a) $k_{1,2}=8.0, 8.2 \text{ \AA}^{-1}$ ，(b) $k_{1,2}=12.0, 12.2 \text{ \AA}^{-1}$ ，(c) $k_{1,2}=15.0, 15.2 \text{ \AA}^{-1}$ 三种情况下记录的全息图重构的平行 $[001]$ 晶面 $z=0$ 平面上的原子像

Fig.3 Atomic images of the 27-Fe-atom cubic lattice in the plane parallel to the $[001]$ crystallographic plane at $z=0$ reconstructed from the hologram recorded at (a) $k_{1,2}=8.0, 8.2 \text{ \AA}^{-1}$, (b) $k_{1,2}=12.0, 12.2 \text{ \AA}^{-1}$, and (c) $k_{1,2}=15.0, 15.2 \text{ \AA}^{-1}$.

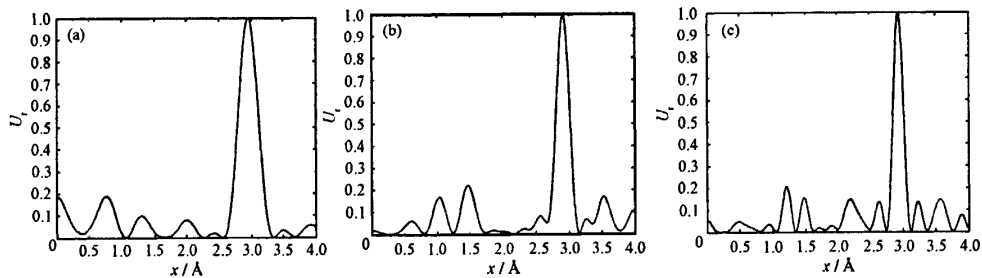


图 4 位于 $(2.90 \text{ \AA}, 0.00 \text{ \AA}, 0.00 \text{ \AA})$ 处的原子分别在(a) $k_{1,2}=8.0, 8.2 \text{ \AA}^{-1}$ ，(b) $k_{1,2}=12.0, 12.2 \text{ \AA}^{-1}$ ，(c) $k_{1,2}=15.0, 15.2 \text{ \AA}^{-1}$ 情况下记录的全息图重构得到的原子像

Fig.4 Image intensity of the atom at $(2.90 \text{ \AA}, 0.00 \text{ \AA}, 0.00 \text{ \AA})$ reconstructed from the holograms recorded at (a) $k_{1,2}=8.0, 8.2 \text{ \AA}^{-1}$, (b) $k_{1,2}=12.0, 12.2 \text{ \AA}^{-1}$, and (c) $k_{1,2}=15.0, 15.2 \text{ \AA}^{-1}$.

3 结论

双能量全息图重构算法虽然只需要记录两张全息图就可以消除孪生像的干扰，但是无法消除二次及多次散射的背景噪声。记录两张全息图的 X 射线能量越接近(内探测器全息术，最小能量差取决于单色器和探测器的能量分辨率；内源全息术，最小的能量差取决于元素的两个紧邻荧光能量差和探测器的能量分辨率)，采用双能量全息图重构算法得到的原子像消除孪生像的效果越好；反之，则效果越差，甚至出现更多暗点严重干扰真实原子像的再现。此外，随着入射 X 射线能量的提高，采用双能量全息图重构算法得到的原子像的空间分辨率也随之提高。这一结论表明要想得到非常理想的原子像，记

录两个荧光全息图的入射 X 射线的能量范围要足够窄($\Delta E/E < 1 \times 10^{-2}$)，同时能量要足够高，这一点用来指导将来在上海光源上开展相关的实验研究是十分重要的，可以指导实验研究实现对晶体材料的原子结构排列的观察，为改变材料特性、新材料研制、铁电材料高温相变过程提供有用的信息，具有一定的社会效益和经济效益。

参考文献

- 1 Faigel G, Tegze M. Rep Prog Phys, 1999, 62: 355–393
- 2 Szöke A. Short wavelength coherent radiation: Generation and Applications, edited by Atwood T, Boker J. AIP Conf Proc, 1986 147: 361–367
- 3 Gog T, Len P M, Materlik G, et al. Phys Rev Lett, 1996,

- 76(17): 3132–3135
- 4 Harp G R, Saldin D K, Tonner B P. *Phys Rev Lett*, 1990, **65**(8): 1012–1015
 - 5 Tegze M, Faigel G. *Nature*, 1996, **380**: 49–51
 - 6 Adams B, Novikov D V, Hior T, *et al.* *Phys Rev B*, 1998, **57**(13): 7526–7534
 - 7 Tegze M, Faigel G, Marchesini S, *et al.* *Phys Rev Lett*, 1999, **82**(24): 4847–4850
 - 8 Marchesini S, Schmithüsen F, Tegze M, *et al.* *Phys Rev Lett*, 2000, **85**(22): 4723–4726
 - 9 Korecki P, Materlik G. *Phys Rev Lett*, 2001, **86**(11): 2333–2336
 - 10 Tegze M, Faigel G, Marchesini S, *et al.* *Nature*, 2000, **407**: 38
 - 11 Gabor D. *Nature*, 1948, **161**: 777–778
 - 12 Barton J J. *Phys Rev Lett*, 1991, **67**(22): 3106–3109
 - 13 Len P M, Gog T, Fadley C S, *et al.* *Phys Rev B*, 1997, **55**(6): R3323–R3327
 - 14 XIE Honglan, CHEN Jianwen, GAO Hongyi, *et al.* *Opt Commun*, 2004, **229**(1–6): 123–129
 - 15 Hayashi K, Matsui M, Awakura Y, *et al.* *Phys Rev B*, 2001, **63**(4): 041201–041204
 - 16 Nishino Y, Ishikawa T, Hayashi K, *et al.* *Phys Rev B*, 2002, **66**(9): 92105–92108
 - 17 谢红兰, 高鸿奕, 陈建文, 等. *物理学报*, 2003, **52**(9): 2223–2229
- XIE Honglan, GAO Hongyi, CHEN Jianwen, *et al.* *Acta Phys Sin*, 2003, **52**(9): 2223–2229

Simulation study of two-energy X-ray fluorescence holograms reconstruction algorithm to remove twin images

XIE Honglan HU Wen LUO Hongxin DENG Biao DU Guohao XUE Yanling
CHEN Rongchang SHI Shaomeng XIAO Tiqiao

(Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)

Abstract Unlike traditional outside-source holography, X-ray fluorescence holography is carried out with fluorescent atoms in a sample as source light for holographic imaging. With the method, three-dimensional arrangement of atoms into crystals can be observed obviously. However, just like traditional outside-source holography, X-ray fluorescence holography suffers from the inherent twin-image problem, too. With a 27-Fe-atoms cubic lattice as model, we discuss in this paper influence of the photon energy of incident source in removing twin images in reconstructed atomic images by numerical simulation and reconstruction with two-energy X-ray fluorescence holography. The results indicate that incident X-rays of nearer energies have better effect of removing twin images. In the detector of X-ray holography, minimum difference of the two incident energies depends on energy resolution of the monochromator and detector, and for inside source X-ray holography, minimum difference of the two incident energies depends on difference of two neighboring fluorescent energies emitting from the element and energy resolution of detector. The spatial resolution of atomic images increases with the incident energies. This is important for experiments of X-ray fluorescence holography, which is being developed on Shanghai Synchrotron Radiation Facility.

Key words X-ray fluorescence holography, Twin image, Reconstruction algorithm, Synchrotron radiation

CLC O434.1, O438.1