

# 利用全息图象处理技术的图象改善 和三维重现

**摘要** 全息计算原理使我们有可能在目前科学和工程关心的许多方面作图象改善和合成。给出了在电子显微镜中改善分辨率,在电子显微镜和X-射线结晶学中作三维重现的例子,接着对这些应用中的光学计算和数字计算作了比较分析。

## 前 言

以相当改善了的形式显示的有意义的信息,现在可以实际地从照片中抽取出来,而这些照片初看起来,可能认为已模糊到不可挽救的程度。

实际上,照片上的模糊并没有不可挽救地“扰乱”成象信息,而常常以容易恢复的形式将它编码。复原的程度,虽然一般并不完美,但是在目前关注的越来越多的方面实际上是很显著的。“改善”的成象信息当然已包含在原始的“模糊”照片中,但是消模糊有可能以更直接的形式显示信息,这种形式可直接由观察者或一些自动图形识别系统进行判读。

结果是用称为“解卷积”的图象处理方法得到的。这个方法也是叫做“消除图象模糊”的一种计算方式。它把模糊图象解码并将它转化为一个改善了的形象。所要求的数学运算可以通过数字电子计算来完成,也可以通过依靠使用激光和全息技术的光学模拟计算来完成。从X-射线天文学到电子显微镜等方面都有成功的应用。实际上,至今较好的结果仍然是利用全息术得到的,正如这里所讨论的那样,尽管在数字图象处理方面已有了相当的进展。

首先全息图象处理的能力是从透镜的自然能力中产生的,即透镜能在其象空间和傅氏(谱)空间之间完成基本的傅氏变换运算。傅氏变换运算以二维的并行处理形式完成的,即同时对所有象点(以及各傅氏空

间点)以光速完成这个运算。例如,对一个有一百万( $10^6$ )个图片元( $1000 \times 1000$ ),每个元具有8-位(即256个)的灰度等级的图片来说,用一个2米焦点距离(指前后焦面的距离)的透镜,这相应于600 Tbit/秒(即 $6 \times 10^{14}$ 位/秒)的处理速率,以及0.24 Gbits/秒的照相即出速率。用短焦距镜头甚至可以得到更快的傅氏变换速率,这是将来的事情了。可以认为透镜有存储所要求的二维傅氏变换处理程序的能力,并有相应的算术逻辑运算能力。

另一个并行处理能力是由于在傅氏空间使用了全息滤波器。这个滤波器以电场矢量乘积的形式,同时对所有谱点的振幅和相位进行运算;特别是按照需要,修正“模糊”图象傅氏谱的电矢量的空间分量的振幅和相位,以便把它变成所希望的“消模糊”图象的谱。从计算意义上看,滤波器寄存了所要求的“程序”,并能将它完成。实际上,全息消模糊滤波器很容易以照相透明片的形式做出来,这可以通过纯光学方法,纯数字方法来实现,也可以通过联合的数字和光学机械方法来实现。

一般地,消除图象模糊(解卷积)的问题涉及三个因素: i) 模糊图片上的强度分布; ii) 原始景物上的强度分布; iii) 模糊函数(脉冲响应函数),即景物上单个点在象上的强度分布,它是在模糊照片的特定条件下被模糊的。这是非相干光成象的情形,如普通摄影,X-射线天文学等。另一些情形,如在电子显微镜中,除了用来代替原来“景物”和“点”强度的,样品相位和振幅函数以及相

应的脉冲响应函数外，在实验上是和非相干成象相同的。实际上，找到模糊函数一般就足以从模糊照片中抽取出原来景物或样品的

大大改善了象。

消除模糊运算（解卷积）是在一个相干光学处理系统中完成的，需用一准直（平行）

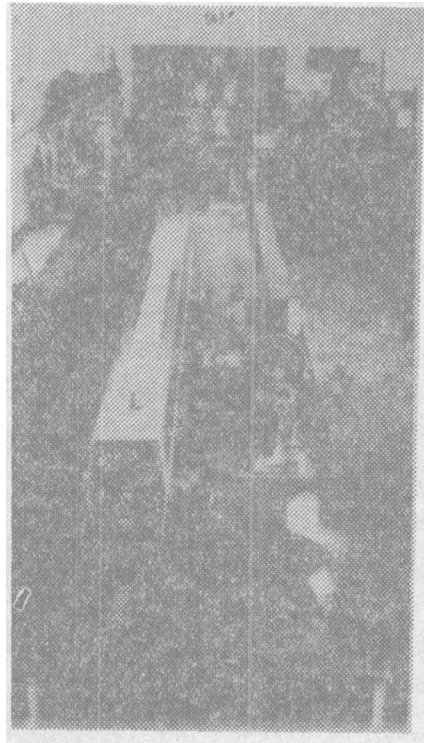
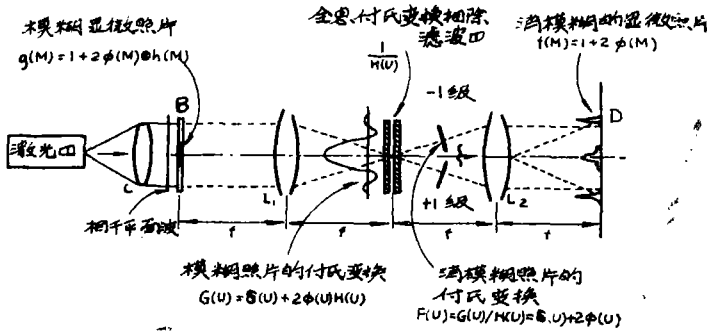
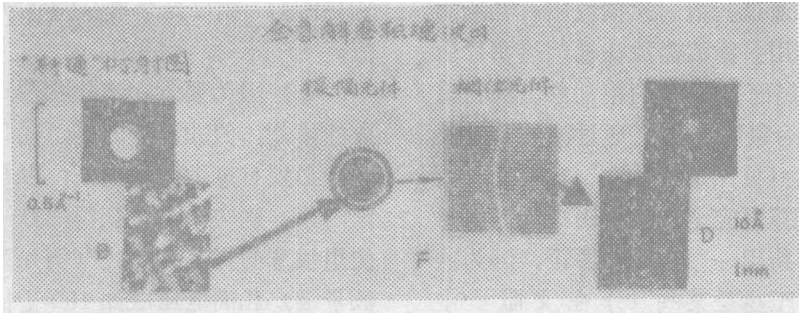


图1 (a)全息图象消模糊：装置略图。插图说明正文中所描述的高分辨电子显微镜图象改善的例子，用的是标准碳膜检验样品。(b)全息图象消模糊的实验装置。

激光束照明模胡透明片。全息消模胡滤波器一般是叠置的两个照相透明片，一个是“振幅元件”，通过吸收对电场振幅起作用，另一个是全息图，通过其衍射光栅性质对电场的空间相位起作用。滤波器放在模胡透明片后的透镜  $L_1$  的焦面上，而消模胡象出现在第二个透镜  $L_2$  的象面上， $L_2$  通过滤波器对模胡透明片聚焦（见图1）。

本文不打算以完全学术和历史的形式对光学图象处理给出一个广泛的评论，因为这样一些评论，至少是某些部分在文献<sup>[3]</sup>中已经可以得到。而我们打算对电子显微镜成象问题的三个关键方面作批判性的评定，说明在理想成象方面的现时进展，理想成象有可能通过全息图象处理来作到，特别是也可通过这方面的一些新进展来作到，而这些进展还没有在文献中被详细介绍；我们还要介绍在 X-射线结晶学方面对三维原子成象重现作的新的光学数字计算方法。

我们挑选的电子显微镜成象方面的三个进展，是人们越来越感兴趣的，因为最近几年在建造一些技术上非常先进的电子显微镜方面已有一些主要的进展，这些显微镜由于其应用广泛而得到普遍的重视，这就是

1) 高分辨率“常规”(成象)透射电子显微镜；

2) 高分辨率扫描(飞点)透射电子显微镜。

目前用它们可得到的图象，即使在“最佳”条件下获得的，也远没有达到相当于电子波长的终极分辨率。与光学显微镜对比一下，在光学显微镜中很容易得到波长数量级的点分辨率，而在 100 千伏的电子显微镜中用  $0.037 \text{ \AA}$  波长的电子只能得到  $1-3 \text{ \AA}$  的分辨率。

实际上，使用电子显微镜有 4 个限制，这些限制可以通过图象处理技术来突破，而且有必要进一步找出常规电子显微镜和扫描电子显微镜可应用的最佳领域。这四个问题介绍如下：

1) 仪器限制(透镜象差)：目前电子显微镜物镜的有效孔径的  $f$  数被限定为  $f/50$  的数量级(即  $D/f = 1/50$ ,  $D$  是直径,  $f$  是工作焦距)，相反光学显微镜有  $f/1$  或更好的值。

2) 因为要求在离焦相位对比下工作造成的模胡：似非而是的是，在普通电子显微镜中必须有意地引入模胡，以得到有足够对比的象。确实，为了获得高分辨率，就必须使用很薄的样品“切片”(例如可能为  $50 \text{ \AA}$  的数量级)和高电压(如 100 千伏或更高)来工作。在这些条件下，样品的性质接近光学意义的纯“相位物体”，这就是说在理想显微镜聚焦成象时它们表现为完全透明的。在无透镜象差的光学显微镜中，相位物体是用熟知的相位对比和干涉对比方法成象的。这一方法已对电子显微镜考虑过，但在高分辨普通(成象)电子显微镜中，对相位物体(和弱染色样品)成象优先选用的工作方式是使显微镜强离焦，从而获得所要求的足够对比，代价是造成不可避免工作模胡(可以说有意的)。离焦的数量对  $0.032 \text{ \AA}$  的电子束波长来说大致有 50000 个波长，这很有代表性，它相当于工作波长为  $5000 \text{ \AA}$  的  $f/1$  光学显微镜中  $0.5 \text{ mm}$  的离焦量，按光学标准讲这是一巨大的数量。

实际上，借助适当测量已知道，这些所谓“离焦相位对比图象”的低于 15 到  $20 \text{ \AA}$  的细节是不能判读的，要不是离焦的话，仪器是很好的并能获得数量级为 2 到  $3 \text{ \AA}$  的固有“点分辨率”。正常的样品的淡染色决不会定性地改变这种情形。图 1 和图 2 表示一些有代表性的结果。

3) 三维结构投影造成的“模胡”：尽管在 1) 和 2) 的条件下完善的相位对比成象是可能的(于是一个样品点通过理想的振幅脉冲响应函数成象)，但是由于样品有一定的厚度，它比许多情况下显微镜的点分辨率大得多，图象上仍然有模胡。在电子显微镜中得到的，即使在利用波恩(Born)近似的最简

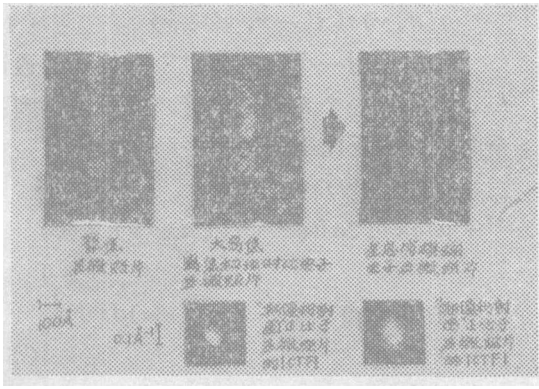


图2 早期的，生物检验样品的电子显微照片的全息改善的例子，样品是  $T_2$  噬菌体病毒尾部

单情况，也是几何意义上的投影，亦即三维样品的许多无穷薄的切片在一个平行平面上的叠加。在样品很厚以及要用衍射的动力学理论的情况下，事情甚至更复杂。（关于数射理论及其定义的一些问题，包括波恩近似，衍射的动力学理论等。

4) 普通电子显微镜和扫描电子显微镜可应用的领域；既使按上述说法的所有成象条件都能最优化，仍然有一个在普通电子显微镜和扫描显微镜之间作抉择的问题，特别是在具有同等分辨能力的情况下，因为这两个仪器在其正常工作条件下，其成象过程和成象方程实际上是完全不同的。例如，对于弱相位样品来说，普通显微镜以相干照明“亮场”方式工作并产生一个强度正比于样品相位函数的图象，而扫描显微镜用其普通环状探测器时，以非相干照明“暗场”方式工作，产生一个强度正比于相位函数平方的图象。

本文将比较详细地介绍一些新结果，它是最近在朝着了解、阐述和解决这四个问题的方向的进展中得到的。但是，因为最近开始变得明显的是，“光学计算”方法在某些图象处理应用中引进了一些逐渐增加的，熟知的益处，所以我们一开始简要地讨论一下光学计算在这方面相对数字计算的优点。

我们将以下的顺序介绍这些问题

第二节—在图象解卷积处理方面比较光学和数字计算。

第三节—描述在高分辨电子显微镜上光学图象改善的方法。我们特别挑选出，复原具有平的无缝隙的传递函数的电子显微镜图象的最新结果。（第三节A）

我们进一步对普通电子显微镜和扫描显微镜成象问题作某些评论，这是可以应用成象理论以及从图象解卷积的可能性中推导出来的。（第三节-B）

最后，我们指出“实时”和“联机”图象处理技术现在与将来在这些以及其它一些应用中的可能性问题（第三节-C），第四节介绍在电子显微镜和X-射线结晶学中，一个新的用一组二维光学全息傅氏变换代替某些三维数字傅氏变换计算的可能性问题。

## II 光学图象解卷积处理和数字处理的比较

光学解卷积方法对于提高分辨率的工作来说，可能在一段时间内仍然是一个实际的方法，尽管逐渐完善地使用了新一代的数字计算机和新型的输入—输出终端装置（这包括小计算机，并行处理，高密度磁盘和其它大型存储器，以及高分辨率扫描器，激光飞点显示与阵列型显示等）。

光学解卷积方法的能力可以得到很好的说明，只要注意到目前使用的数字计算机处理，一开始就要求在实际数字计算的两端利用某些类型的原始图象输入扫描，以及一些同等的输出显示扫描，并要求各种存储元件。另一方面，现在已有了实用的光学实时扫描解卷积系统，它直接产生所希望的解卷积（消模糊）图象，它使用同类的输入和输出扫描系统，但不需要使用任何数字系统的算法或逻辑计算元件，也不需要任何缓冲器或其它存储器。这个光学计算机的显著性能，由于使用有力的透镜—全息图联机傅氏变换计算原理是能够做到的。



其它处理，而所有这些在有相同的输入和输出扫描系统的数字图象处理系统中当然是需要的。

基本“全息傅氏变换相除滤波器”，我们把它和有关透镜一起用作为联机实时处理机，在进行处理前滤波器可以照相透明片的形式，用光学方法或数字方法来实现。它也可以以计算机控制的“实时”全息图来实现，这要用一个象热塑光阀那样的实时转换器。

虽然光学计算用于解卷积时比数字计算的好处是这样明显，但是我们相信，同样明显的是，当应用于一般的图样识别方面，包括景物分析，特征抽取以及用于相关运算等，数字处理（与扫描器，飞点管，阵列等一起用）有比较明显的好处。例如，数字方法也很适于解决某些简单问题，包括增强，也适合于原来信号本身就是电或数字形式的情况，比如通讯和电信的信号，以及在扫描电子显微镜中。在这些应用中，一定量的光学滤波（包括全息照相）在予处理阶段是有帮助的，例如消模糊，扫描线噪音和其它噪音的滤波等等。照相胶片存储介质（模拟和数字的）在只读存储的大型存储器中可以有一些显著的优点，这一点也逐渐明显起来。

图3可以用来比较扫描方式的光学处理

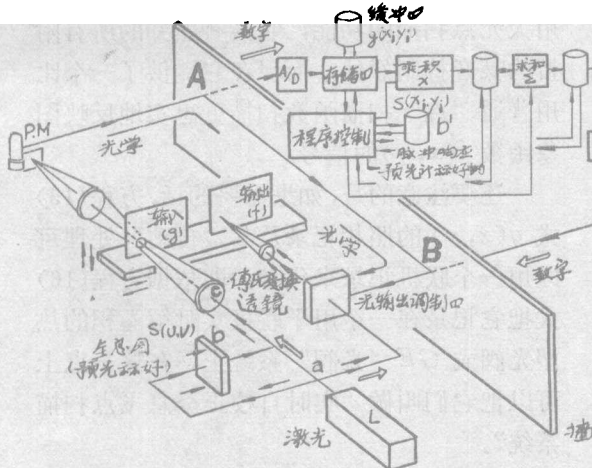


图3 光学处理和数字图象处理的比较。装置略图说明，扫描透明片(g)，A/D转换，用“A”作输入的数字处理过程。实际上不要数字计算，通过消模糊的“傅氏变换相除全息图”经由a-b-c照明输入，也进行了完整的处理

和数字处理的优缺点。光学处理的确有某些显著的优点，但是人们也能找出纯数字处理的优点。然而，与在一些潜在的用户当中仍然广为流行的感觉相反，数字处理的优点并不象人们有时所想象的那样大。实际上，从图3容易看出，只要在a和c之间插入一个事先计算好的全息图b，它对应于事先计算好的数字脉冲响应函数b'，那么整个数字计算D分，以及相联的程序和存储器，从A经由C到B可以一起省略，因为它们没有给光学处理D分A到B增加什么。

图3布置的光学D分（墙的左边）适合于完成下述空间运算，即象域运算

- 1) 卷积（解卷积）；
- 2) 相关；
- 3) 导数（边缘增强，特征抽取）；
- 4) 象增强（低通，高通滤波）。

这个布置，通过扫描输入透明片来完成这些运算，同时重现输出象。这里整个计算时间等于扫描时间。

应注意的是，给定全息图b，按着方程(10)式其透过率 $S(u, v) = 1/H(u, v)$ ，图象 $g = g(x', y')$ 也可以用完全非扫描的光学处理方式消除模糊，如图1所示。

简单地说，光学计算机（扫描的和非扫描的）看来特别适合于图象解卷积（消模糊）。它使用了比数字计算机简单得多的系统。

和数字计算机一样，使用光学计算机也可以有大的运算简单性，而且不需要任何特殊的技术技能。例如，不需要严格地调整图3的全息图，因为它在平行光束中。至于全息图本身，如同一个寄存的数字计算机程序或记忆一样，完全可以通过数字计算以二元形式直接在胶片或干板上实现，甚至可以借助热塑光阀或类似的（如一般电学的）计算机控制的光阀实时地执行。

最后还要特别强调一下噪音问题及其抑制问题。首先我们注意到维纳（Wiener）滤波器，或它的更完善的形式，很容易用光学

和数字方法执行，并且在图象处理工作中一开始就很普遍地使用了。这特别适合于光子或电子噪音，以及照相颗粒噪音。

其它的噪音沉可能出在处理过程中，并应尽可能地加以抑制。首先我们要注意的，在设计很好的光学处理机中噪音是由灰尘，干涉或振动等造成的，即使有一般讲也很小，这与偶然听到的有关这个影响的说法相反，并且只要适当地细心是能够控制任何这种噪音的。这样的细心在获取数字处理后的图象时无论如何也是必须的。在这方面，光学处理机在实践中可以有一些重要的好处，因为扫描函数  $s(x, y) = FT[S(u, v)]$  恰巧比照片颗粒大得多，并且它比把同一图象，比如  $g(x, y)$ ，数字化而一般要求为最佳的“点”扫描函数大得多。所以数字计算所考虑的“点”扫描就会在实践中产生比光学解卷积扫描大得多的扫描颗粒起伏噪音。但是这个严重的“数字化”噪音限制，它造成熟知的灰度等级量化困难，是可以在有意造成一个初始模糊的代价下克服的，这就是用一个比普通“点”扫描函数大得多的大光点  $s_d(x, y)$  扫描待数字化的图象，并作为数字处理的一部分完成它对应的解卷积运算。

例如在傅氏变换域表示，用大扫描函数  $s_d(x, y)$  扫描  $g(x, y)$  产生了

$$S_d(u, v)G(u, v) = S_d(u, v)F(u, v)H(u, v) \quad (11)$$

其中  $S_d(u, v) = FT[s_d(x, y)] \quad (12)$

所以代替(10)式的  $S(u, v) = 1/H(u, v)$  的消模糊滤波器函数就变成

$$S'(u, v) = \frac{1}{S_d(u, v)H(u, v)} \quad (13)$$

最好把  $s_d(x, y)$  选择为高斯函数，因为其傅氏变换还是高斯函数，它是实的和正的，也不会谱上引进任何零点或相位移动。

这是一个方法的例子；通过它很好建立了光学处理原理，而且光学计算有可能进一步对数字处理技术的改善有帮助。

方程 (13) 式特别适合于作解卷积的问

题。

但是，我们相信大光点扫描的好处一般可以扩充到数字图象上，一般的作法是用一个“全息噪音抑制飞点扫描器”实际地扫描要作数字处理的图象，扫描器由图 3 的光学部分  $a, b, c, PM, A$  所构成， $A$  是它的信号输出端，信号被输送给计算机的  $A/D$  转换输入端，而对计算机，可以要求它作任何完善的数字计算机处理，例如图象识别等。数字处理将包括所要求的数字解卷积。这时，图 3 的全息滤波器的透过率变成

$$S(u, v) = \frac{1}{S_d(u, v)} \quad (14)$$

的一般情形，而对于高斯扫描函数光点  $s_d(x, y)$ ，全息滤波器  $S(u, v)$  将简化为只有振幅的滤波器。

另外，可以先记录有意编码（模糊）的图象

$$s_d(x, y) \otimes f(x, y) = g(x, y) \quad (15)$$

然后如图 2 所示扫描译码（“消模糊”）它，这要用一个扫描函数  $s(x, y)$ ，使

$$s(x, y) \otimes s_d(x, y) = \delta \text{ 函数} \quad (16)$$

所以对于在  $A$  处进入数字计算机的信号，现在不需要再把数字解卷积作为数字处理的一部分了。给数字计算机带来的净效果是一个用大光点扫描的功能，它具有熟知的所有附带的噪音抑制好处，而现在它提供了一个比用普通“点”扫描函数扫描更忠实地反映图象函数  $f(x, y)$  的信号。

还要注意的，如果需要的话，方程(15)式  $g(x, y)$  的照相记录及其“自动”处理可以用一个联机记录来代替，即依据方程(16)式把它记录在一个用于联机实时解卷积的热塑光阀或  $GE$  “光阀”系统上，在这一点上可以把它们叫做“实时自校正全息飞点扫描系统”。

以这种方法完成的信噪比 ( $S/N$ ) 的改善是实实在在的，参照一些我们早期关于扫描电子显微镜和  $x$  射线针孔相机成象工作就可以说明这点。因为它与这个讨论以及一般

的图象处理问题有直接关系，显然希望在这里借助一些有关的方程突出这个原理性的结论。

埃弗哈特 (Everhart) 首先给出了我们这里所用的扫描电子显微镜的信噪比理论。对于一个打在样品上的有  $\bar{n}$  个电子的电子束来说，信噪比  $S/N$  由下面方程给出

$$\frac{S}{N} = \left(1 + \frac{1}{\sigma}\right)^{1/2} \sqrt{\bar{n}} \quad (17)$$

其中  $\bar{\sigma}$  是二次发射因子。罗斯 (Roze) 给出了图象上阈值对比与  $S/N$  的关系

$$\left(\frac{\Delta S}{S}\right) = \kappa \left(\frac{S}{N}\right)^{-1} \quad (18)$$

其中  $\kappa$  是一个数值因子 (例如按 [38] 它等于 5)。最后，大家熟知的是， $S/N$  近似线性地 (实际上是  $4/3$  次方) 随扫描电子显微镜所用的探测束直径  $d$  增加，例如依照 [39] 有

$$\frac{S}{N} \propto d^{4/3} \quad (19)$$

可见，可用的探测束直径的增加产生了

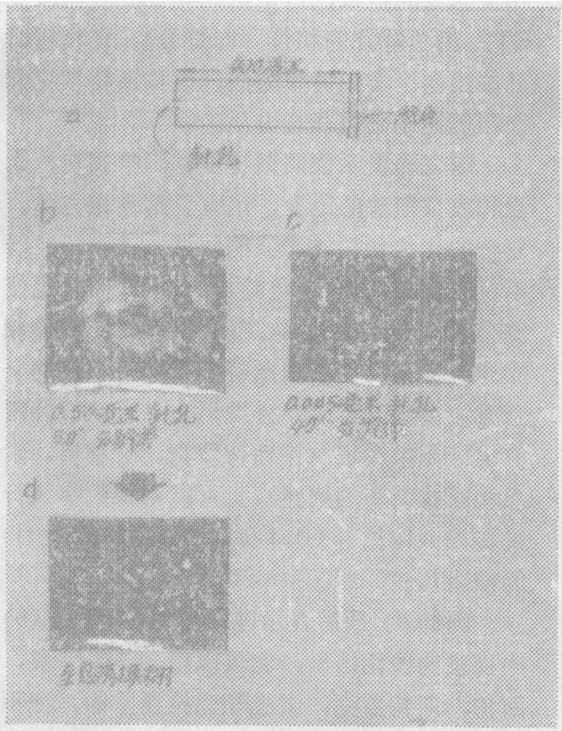


图 4 太阳的 X-射线照片消模糊的早期例子。原始图象是在火箭上用针孔相机拍的

$S/N$  的相应增加。这个评论的重要性在于，用一个直径  $d$  的探测束扫描图象而抽取出的“消模糊”图象，不仅有一个增加了的分辨率，比如说  $m$  倍，而且显示一个  $S/N$  比原来用细直径探测束记录的图象所对应的，大同样倍数  $m$  的变锐的图象，而在现实条件下是可以这样的细直径探测束来记录的。

这个重要的结论实际已经被我们的消除 X-射线针孔相机的太阳照片模糊的工作所证明，为了说明这个结果以完满的形式复制在图 4 上。

最后，当原始图象是记录在较粗颗粒胶片上时，我们前面已经说明，由于激光处理，用白光把图象放大拷贝在细颗粒干板上，就在实际上产生了相当的噪音减小，这是通过透镜“涂掉”了照片颗粒而没有损失成象信息的结果。

### III 高分辨电子显微镜的图象改善

#### A 普通成象电子显微镜的情况

在这里我们首先在非数学的意义上叙述一下，其目的是校正物镜的传递函数从而校正高分辨图象。依照传递理论的预计以及实验的验证，普通电子显微镜的传递函数的特性是有一些正的和负的对比传递区域。这说明，作为空间频率的函数，CTF (对比传递函数) 的大小和符号都有改变，出现了反转。结果，CTF 也有了零值。在零值的那些频率，以及由于噪音阈值水平，实际上是零值附近的一个频率区域，完全没有被成象。此外，由于色象差和局口相干的影响，CTF 的振幅在高空间频率减少。但是决不可能从单张照片中再复原对应于这个空隙的信息。由于所有这些原因，有时还有其它原因，显微镜得到的图象是模糊的。

高分辨电子显微镜图象的校正已经用数字计算机处理，光学模拟处理或“光学计算”这两种方法研究了。

斯特罗克首先在1967年引入了所谓“全息解卷积”方法，在光学重现时使用了一个相位和一个振幅滤波器。在1972年斯特罗克和哈利奥(Halioua)把它应用来改善电子照片，后来斯特罗克、哈利奥、索恩和威拉斯基进一步扩充了这个方法，从那以后，使用过索恩(Thon)和西格尔(Siegel)，以及哈恩(Hahn)所描述的不完全的方法，这可参看索恩(Thon)最近的评述。

本节限于考虑用这些模拟方法的处理，因为甚至这个也是个很宽的方面，所以我们想进一步把它限制在弱相位物体的高分辨图象的光学处理方面，图象是用圆物镜孔径在轴上照明条件下得到的，也是由于这是现时主要关心的实际问题。可以用图5来概括要讨论的方法。图5(a)表示离焦量  $\Delta z = 2369 \text{ \AA}$  的一个普通物镜的CTF。在这个表述中，所有重要的CTF的降低因素都已

考虑过了，特别是离焦，球差，色差和衍分相干。我们还进一步地注意到，传递函数随离焦量的改变很剧烈，此外按弗朗克(Frank)的说明，衍分相干的影响在一级近似条件下可通过一个包迹函数来考虑。

实际上，只有传递函数的第一个区间[即图5(a)的第一个正叶片]在不作图象处理时可用作判读，所以就希望尽可能地把它扩大。这就是在所谓斯开泽(Scherzer)“最佳离焦”(常叫做“最佳聚焦”)条件下的情形，见图5(b)。

一个理想传递函数将表明图象在整个频率范围有同符号的最大对比，是一个在整个范围内都等于1的恒值函数。

图6说明三个处理方法的理论结果，使用这些方法可以逐渐接近理想的目标，正如图7的实验结果说明的那样。

图6(a)表示依据索恩(Thon)和西格尔(Siegel)论文的波带板的滤波结果。

图6(b)表示依照哈恩(Hahn)论文的纯相位滤波的结果，这里用纯相位滤波器改变CTF的负叶片的相位(即符号)，在执行时可按迁内论文用镀膜方法，或按斯特罗克和哈利奥的论文用全息方法。

图6(c)表示依照斯特罗克，哈利奥，索恩和威拉斯基的论文，用全息解卷积方法，复合的相位和振幅滤波的结果。这时滤波器不仅改变了CTF上负叶片的符号，而且也使整个CTF的振幅变平。复合全息傅氏变换相除滤波器可以完全用斯特罗克和哈利奥的全息方法实现，可以衍分地用全息术，衍分用数字计算来实现(按斯特罗克，哈利奥，索恩和威拉斯基的描述)，也可以用纯数字执行来实现(按伯奇(Burge)和斯科特(Scott)的描述)。

图6(d)最后表示进一步将在图10(b)中描述的理论结果，它可以根据哈利奥，西伯，斯特罗克，索恩和威拉斯基的，把不同离焦量的解卷积的电子显微图象迭加起来的方法来获得，正如图10的实验结果说明的

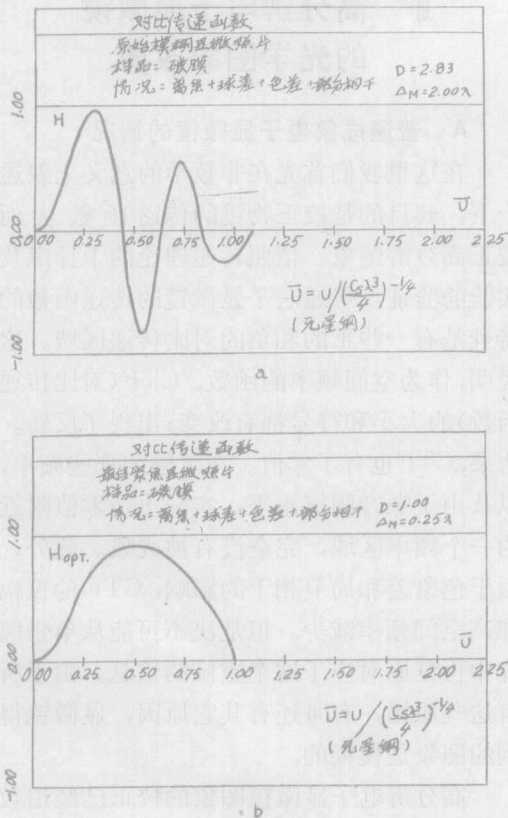


图5 (a)离焦值  $\Delta z = 2369 \text{ \AA}$  的普通物镜的CTF。  
(b)斯开泽最佳聚焦条件的CTF。

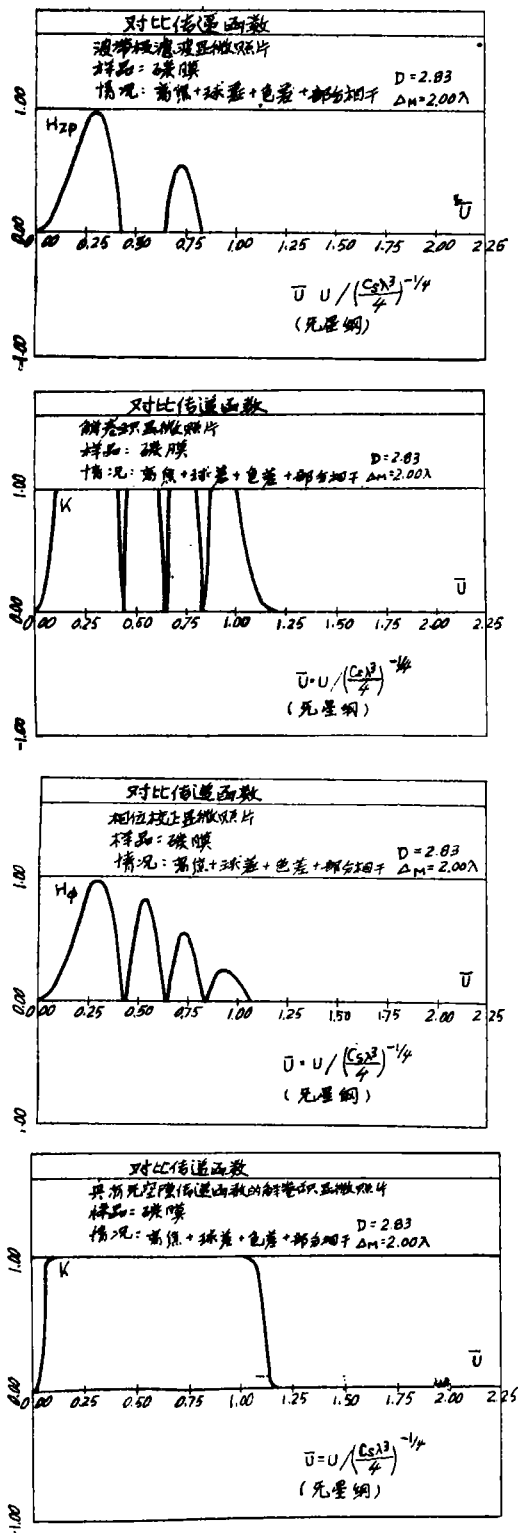


图 6 (a)波带板滤波结果, (b)纯相位滤波结果, (c)复合相位和振幅滤波结果, (d)把不同离焦的消模糊照片迭加所得到的理论结果

那样,这个方法产生了理想的无空隙的展开传递函数,而且它表示我们的工作的扩充,利用了我们以前工作的一些方面。

我们现在描述实验结果。

图 7 对复合全息解卷积的结果和其它重现方法的结果作了比较。图 7 的原始图样 (B) 表示一个碳膜检验样品的显微照片的放大 10 分, 同时也表示用各种方法重现的同一 10 分。还说明了依照索恩在 1966 年首先描述的方法得到的相应的衍射图, 衍射图也可以拍照放在图 1(a) F 面上的显微照片的空间傅氏变换 (即傅氏变换的振幅平方) 来获得。

图 7 的原始“模糊”电子照片 (B) 是用离焦量  $\Delta z = 1725 \text{ \AA}$  的离焦相位对比记录的, 消模糊图象 (D) 是用复合全息 (振幅 + 相位) 解卷积滤波从模糊照片抽取出的改善了图象, 这个图象有时用  $D_{(A+\phi)}$  代表。为了比较,  $D_{ZP}$  是用波带板滤波处理的结果, 而  $D_{\phi}$  是纯相位滤波的结果。最后图 7 的 (O) 是在所谓“最佳聚焦”条件下对同一碳膜检验样品拍的未处理的电子显微照片, 即用斯开泽给出的离焦值, 所以其 CTF 被限制为只有一个正叶片。

通过比较这些结果, 就能逐一研究原始图象的解卷积结果。显然, 有许多结构细节已显现出来, 它是被复合全息解卷积过程揭示出来的, 正如所预计的那样, 纯相位滤波后一些细节有较低的对比, 波带板滤波后所揭露的细节更少。复合解卷积的图象不仅对比比原始离焦照片增加, 而且把成象可靠性和细节分辨率改善了相当大的程度, 关于这点现在将进一步描述。

首先, 除了如刚才所讨论的作逐一比较外, 对图 7 的全息消模糊图象 (D) 和未处理的“最佳聚焦”电子照片 (O) 的比较也明显证明了, 处理所揭露的结构细节是可靠的。处理所揭露的小细节和结构细节的关系问题, 或者说它是辐射损伤和电子噪音所产生的或强烈影响的结果, 仅由这些实验和比较不可能作出圆满的回答。

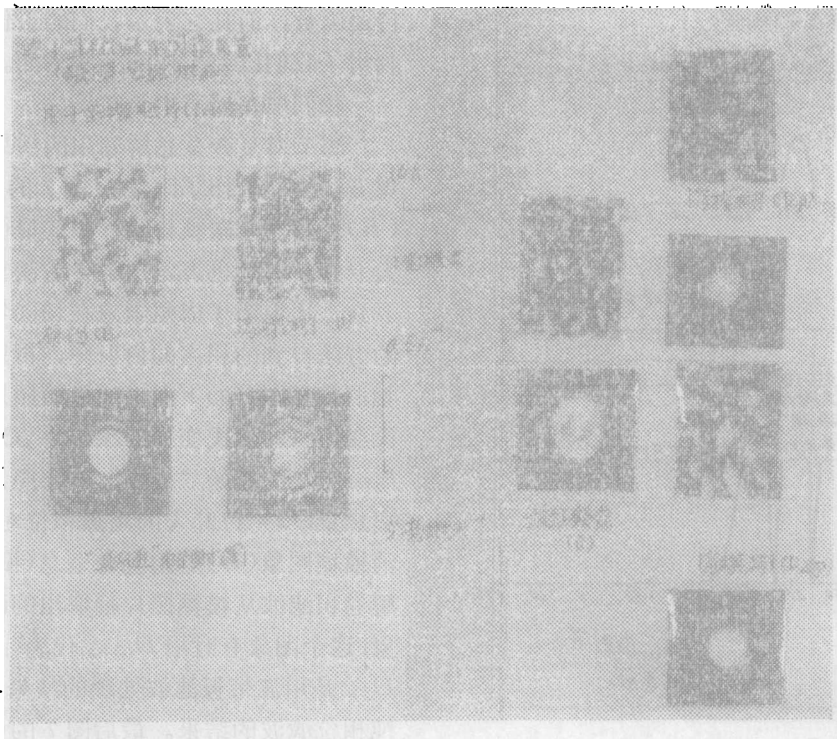


图7 高分辨电子显微镜图象的全息改善, 以及和其它方法的比较。样品是标准非结晶碳膜检验样品

为了研究噪音和幅射影响, 两张样品的显微照片是在同样条件下紧接着拍得的, 并进行比较。为了完满的表示, 图8复制了这个重要实验的结果。文献<sup>[3]</sup>详细地给出了这些结果和有关研究的描述。由此以及图7介绍的结果得出了下面重要的结论。

1) 一些结构细节, 特别是那些接近分辨极限( $3 \text{ \AA} - 4 \text{ \AA}$ )的细节是可以认清的, 这些细节在两张样品的重现图象上完全相同, 图象是用全息处理从两张在同样条件下紧接着拍下的显微照片中抽取出来的, 这说明样品被“忠实”地成象而且重现了细节。从原来的显微照片中决不会以这样的清晰度和对比将它们探测出来, 在最佳聚焦照片, 在纯相位或纯波带板滤波的图象上这些细节也不会有这样的清晰度和对比。

2) 显然, 从两张依次拍照的电子显微照片得到的样品的重现象上仍然有一些细节是不同的。这种不一致在原始照片上总是存在的, 一部分是由于幅射损伤, 一部分是由于电

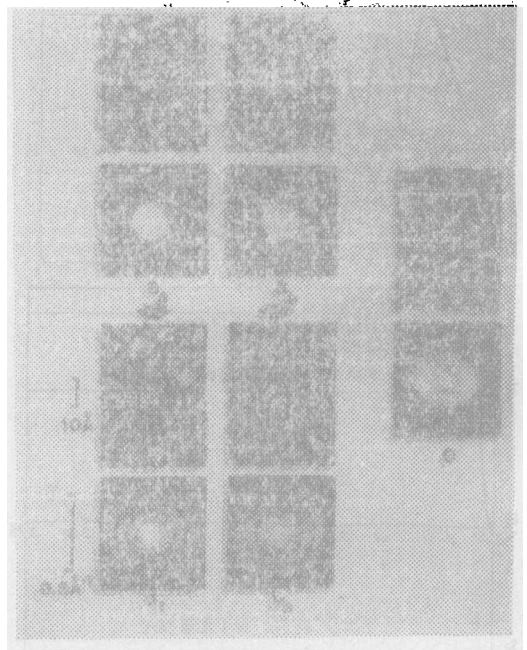


图8 高分辨电子显微镜图象的全息改善。说明依次拍照的同一样品的显微照片的相似点和差别

子噪音。事实上在重现象之间，即使是小细节，相同的部分仍是主要的；看来这有力地说明，电子噪音对滤波象的影响比原始显微照片的影响小得多。

这一点可以从下面得到进一步地理解

a) 滤波消除了高频噪音，即在滤波器孔径之外的噪音；

b) 重要细节成象的增益主要是由于把大衍分谱均等而产生的，这时有好的信噪比；

c) 在空隙衍分的噪音谱的能量要比谱的其余衍分小，这里噪音和信号受到滤波器同等的影响。

但是人们仍应注意减少电子噪音的影响。例如，用低灵敏度的干板记录图象就能改善统计关系。但这将导致更大的幅射损伤，幅射损伤问题在电子显微镜中是目前最感兴趣的问题，也研究得最广泛。

图7所示图象的改善程度也可以通过比较不同图象对应的脉冲响应函数来定量表

示，为此在图6中给出了理论的CTF。图9说明了脉冲响应函数，它们是与图7的实际实验结果对应的。首先，在图9(a)表示了图7的原始模糊离焦相位对比电子显微照片(B)的脉冲响应函数，这是从其衍射图计算(数字)出的。很容易看出，这个脉冲响应函数与理想“衍射极限”相位对比脉冲响应函数〔如图9(b)所示〕比较起来是多么差。图9(b)比较了其它改善了脉冲响应函数，它们相应于图7上用不同方法改善的照片 $D_{ZF}$ 、 $D_s$ 和 $D$ ；可以注意到，与全息解卷积图象对应的脉冲响应函数(在图9(b)上标以“全息解卷积改善的”)接近等于理想“衍射极限”脉冲响应函数，即在显微镜孔径内的完善相位对比成象。

用不同的电子显微照片图象改善方法完成的实验结果，正如我们这里所做的那样，大多数已被一些非结晶碳膜构成的适当检验样品的显微照片所证明，并得到相应的光学衍射图的补充，衍射图显示功率谱从而显示了传递函数的形状(借助一些简单的算法和计算)，并由此得到相应的脉冲响应函数(也通过简单的数字傅氏变换计算)。但是这已经表明，同一全息图象改善方法很容易应用于实际生物样品(如广毒)的显微照片(见图2)，而且我们的工作在进一步发展。

与此同时，我们已达到了更进一步的进展，用全息图象改善方法在高分辨电子显微镜中获得了理想的CTF。图10说明一个把不同离焦量的显微照片相迭加的方法，以便产生一个具有无空隙展平传递函数的电子显微图象。汉森于1966年，希斯克(Schiske)，以及弗兰克(Frank)，巴斯勒(Bussler)，兰格(Langer)和霍佩(Hoppe)于1970年首先提出这个原理，这个方法和斯特罗克于1969年独自引入的“光学孔径合成”原理也有密切的关系。合成方法是以选择这样一些离焦值为依据的，第一张显微照片的CTF的空隙能够为第二或第三张照片的CTF的相当高的振幅所充满。按这个方法可以很大程度

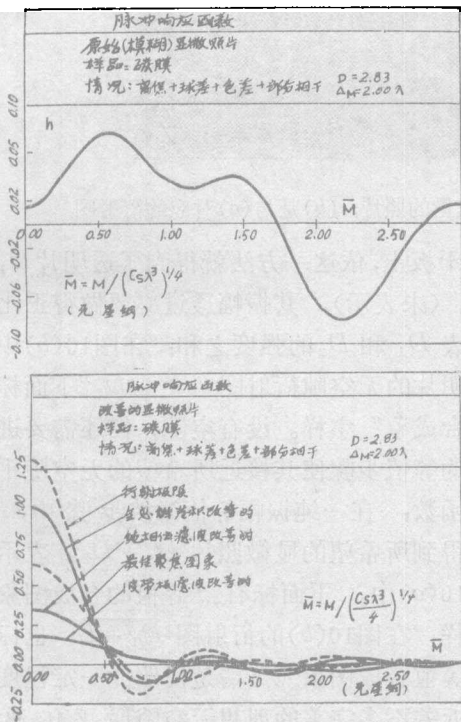


图9 (a) 强离焦电子显微照片的脉冲响应函数，(b) 全息图象改善所达到的脉冲响应函数，以及与其它方法，未处理的“最佳聚焦”图象的比较。全息改善的脉冲响应很接近理论的“衍射极限”函数

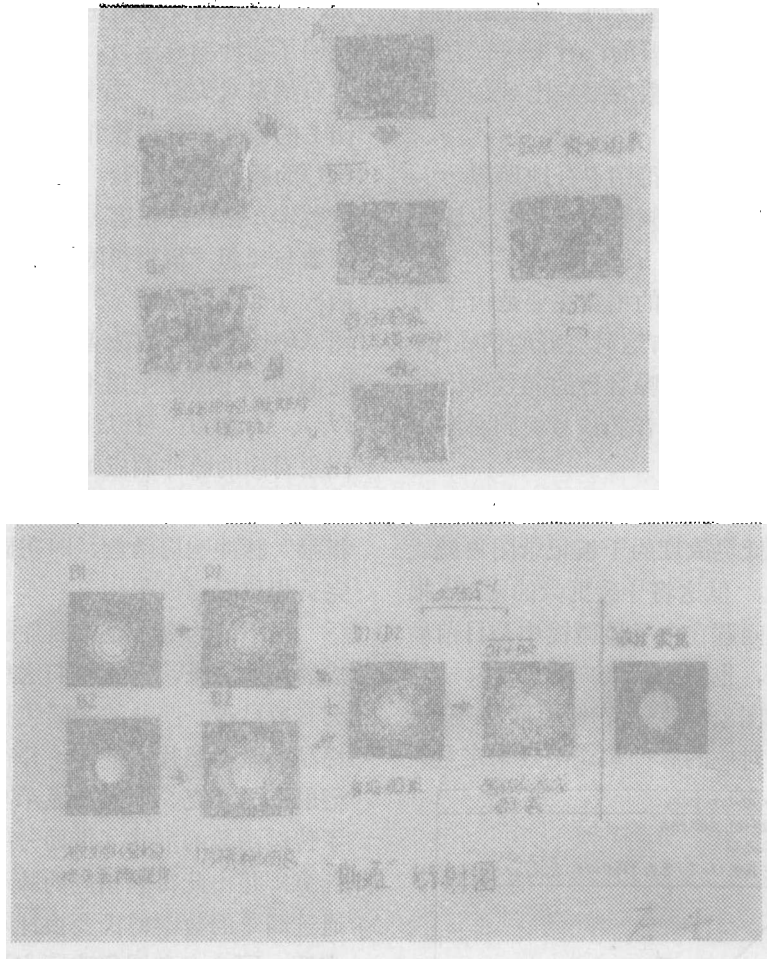


图10 (a)在非晶薄碳膜上金团的两张不同离焦量的照片；(b)是与(a)对应的衍射图

地消除在接近 CTF 空隙的低  $S/N$  区域上的噪音“放大”问题。我们最近已经用这个原理的“光学计算”模拟执行方法实际完成了第一个结果,并且在即将发表的论文中,用另一些实验结果更详细地描述它。但是在图10和图11中已经扼要地讲了一般原理和结果。

在图10(a)中,  $B_1$  和  $B_2$  是非结晶薄碳膜上的金团(Clusters)的两张不同离焦量的显微照片( $\Delta z_1 = 1960 \text{ \AA}$ ,  $\Delta z_2 = 1420 \text{ \AA}$ )。图10(b)是对应的衍射图  $B_1$  和  $B_2$ 。首先用全息方法分别把两张模糊照片  $B_1$  和  $B_2$  消模糊,产生改善了的组分图象  $D_1$  和  $D_2$  [图10(a)],以及对应的衍射图  $D_1, D_2$  [图10(b)]。其次按斯特罗克的方法 [见图11(b)]依次将两个消模糊照片  $D_1$  和  $D_2$  非相干地迭加在一

块干板上,依这一方法就得到了透明片  $D_1 + D_2$  (未表示),其振幅透过率要做得正比于代表  $D_1$  和  $D_2$  的强度之和;在图10(b)中,透明片的无空隙衍射图“ $D_1 + D_2$ ”下面标有“合成象”字样。没有空隙,但还需要进一步的等值步骤使其接近所希望的无空隙平传递函数:在一纯振幅等值滤波步骤中,最后得到所希望的显微照片  $\overline{D_1 + D_2}$ ,表示在图10(a)中,下面标有“等值的合成图象”字样,在图10(b)的衍射图  $\overline{D_1 + D_2}$  也标有“等值合成图象”。这清楚说明能一定程度地接近差不多完美的理想无空隙展平传递函数,这一传递函数代表理想相干成象系统的特征(即这些电子显微镜)。实际上就我们所知,在电子显微镜成象中完成一具有无空隙

图象解卷积方法的理论和实验细节，在第三章A描述的所有工作都是用的这个方法。更详细地可参考文献[3]和[15]。

图1(a)是描述过的所有实验所用的空间滤波“光学计算”系统的示意图，图1(b)是其照片。解卷积实验步骤的起点是精确和毫不含糊地确定待处理照片的实际传递函数CTF。为此，光学衍射图〔图1(a)，图2，图7，图8，图10(b)〕是用激光傅氏变换从照片中得到的。衍射图应加以平滑以使用显微密度计作测量（如在圆对称函数的情形传动透明片）。显微密度计追迹图样的最小值决不会降到0值，而是有一逐渐减小的背景曲线。这是由于在照片上有噪音，在制作解卷积滤波器时应适当予以考虑。衍射图上振幅衰减也能测量。这给出一个包迹函数，它主要是由色差，下分相干产生的，也是由物体性质，例如原子散射函数产生的。图5(a)表示我们所讨论的显微照片的有代表性的CTF。它有两个正的和两个负的传递区间。

下面简要描述一下这个工作所用全息解卷积滤波器的实现问题。滤波器由一个振幅元件和一个相位元件组成，其作用是把原始模糊照片上的每个模糊斑复原成改善图象上的细锐的类点脉冲响应函数。所以要注意的是，斯特罗克和泽柯的“全息傅氏变换相除滤波器”，例如斯特罗克和哈利奥快速实现的“扩展动态范围”的形式，它与用来作相关而不是卷积（或解卷积）运算的所谓“匹配滤波器”是完全不同的，而且完成根本不同的作用；例如对一张照片与一组代表照片某些下分的函数作相关运算，结果完全不是一个改善的图象，而是一组在相关峰值处的点函数，正如从前在文献中详细讨论过的那样。

我们的全息傅氏变换相除解卷积滤波器可以用许多方法完满地实现，例如用数字计算，或下分地用于干涉术以及照相机械方法来制作。在后一情形，特别是在电子显微镜图象改善中用的滤波器，其振幅元件是拍照一个掩膜作成的，这个掩膜是依据原始模糊照

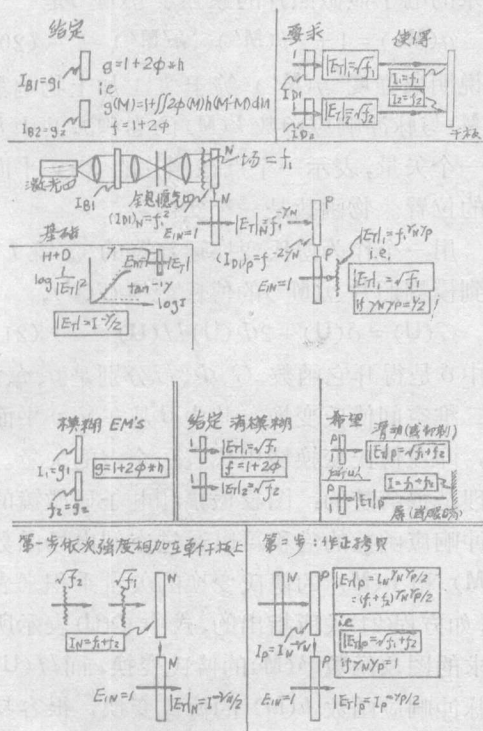


图11 (a)和(b)是图10给出的结果的实验方法的原理图解

展平传递函数的电子显微镜图象，这是第一次。为了比较，图10(a)是“最佳聚焦”显微照片，图10(b)是其衍射图，很容易看出，在“等值合成图象”上有大得多的细节分辨率；正如在对应的衍射图上的相当大的空间频率范围所证明的那样。事实上两个照片的结构显著不同，尽管在最佳聚焦图象上并没有对比颠倒。区别主要是因为最佳聚焦照片的传递函数在比合成象低得多的空间频率上就截止了，此外是非均衡振幅分布的结果，它给粗的和细的细节以不同的加权。如上所述，这就是我们第一次用这种方法，有一定深度地描述的初步结果。下面应当再仔细地考虑噪音问题。首先合成纯相位滤波的象，由此可以产生某些好处，下一步是所要求的振幅等值过程，这对于一些信噪比  $S/N$  差的情形来说可能是有意义的，正如将在文献[27]中更全面地描述的那样。

总之，我们仍然必须给出一些关于全息

片的衍射图的显微密度计迹以及显微镜工作数据,用数字计算和绘图作成的。滤波器的相位元件可以用于干涉法以全息图的形式实现,全息图是一个衍射光栅,但各交替光栅间距之间从一个环到下个环移动了半个条纹周期,如图1(a)的放大形式所示。光栅上的半个条纹移动很容易通过半波相位移动引入,借助一个适当的相位板的轻微转动,并借助一对适当的照相实现的“波带板”型基元掩膜,连续地拷贝正的和负的环状间距来实现。在我们的论文[3]中给出了细节,若要求进一步的基础知识可参考有关文献。

关于这一点,另一个或许最重要的评论可叙述如下,利用适当的知识和装置,全息图象改善过程实际上是非常简单和很快的。包括最初的照片分析和相应消象模糊滤波器的制作,一个有代表性的情况是改善一个电子显微照片的整个过程也就用两小时,当然用适当的产品而不是实验室系统,处理过程能进一步加快到相当的程度。

对这个方法作一简要理论概述之前,需要作一个评注。重要的是指出,在接近CTF那些零点的波带环上无光栅结构〔见图1(a)〕。因为只有一侧的衍射象用作重现(即作为全息“消模糊”改善的图象),所以这些无光栅结构的波带的作用就好像它们的透过率是零一样,因此对那些噪音信号比  $N/S$  趋于无穷大的区域来说,一个维纳型噪音抑制滤波器的要求被自动满足了。这个例子还应当有助于进一步说明,这种光学图象处理计算机的某些固有优点。

图1(a)图示了对模糊电子照片解卷积的原理,其理论可以简单概述如下。为了清楚起见,首先对无噪音照片描述这个原理,虽然已经知道,有噪音的照片以及噪音滤波,正如实践中所用的那样,介绍它不困难。图1(a)表示实验系统的布置,放大的电子显微照片,对应的衍射图,以及全息消模糊滤波器的两个元件的放大图。

一个弱相位物体,在离焦相位对比情形

记录的电子显微照片的象强度  $g(M')$  是

$$g(M') = 1 + 2\phi(M') \otimes h(M') \quad (20)$$

这说明象强度  $g(M')$  等于 [1 加上物函数  $\phi(M)$  与脉冲响应函数  $h(M)$  的卷积], 其中  $M$  是一个矢量,表示一个点在照片的  $x-y$  平面上的位置。物函数是一个实函数。

用一个作为傅氏变换运算器的透镜  $L$ , 得到模糊照片  $g(M')$  的傅氏变换  $G(U)$ ,

$$G(U) = \delta(U) + 2\Phi(U)H(U) \quad (21)$$

其中  $\delta$  是得耳它函数,  $G, \Phi, H$  分别是  $g, \phi, h$  的二维空间傅氏变换, 其中  $U$  是在  $u, v$  平面上, 即在傅氏变换域中代表一个点的矢量。原理是很清楚的: 图象振幅和电子显微镜的脉冲响应函数的卷积可以通过空间电场函数  $\phi(M)$  和  $h(M)$  的傅氏变换的矢量乘积来表示, 如方程(21)式所指出的, 式中  $\Phi(U)$  表示所要求的图象函数  $\phi(M)$  的傅氏变换, 而  $H(U)$  是脉冲响应函数  $h(M)$  的傅氏变换, 很容易看出它就是 CTF。所以, 用“全息傅氏变换相除”原理, 可以把  $G(U)$  除以  $H(U)$  来得到所要求的“消模糊”图象  $\phi(M)$  的傅氏变换  $\Phi(U)$ , 实际上这是把  $G(U)$  乘上  $1/H(U)$  来完成的, 其中函数  $1/H(U)$  是以具有这个透过率的透明片的形式实现的, 即以“全息傅氏变换相除”的形式实现的, 一般为了实验简单的原故, 它是以分开的透过率为  $1/|H(U)|$  的振幅元件, 以及透过率为  $\exp[-i\phi_H(U)]$  的全息相位元件的形式实现的, 其中  $H(U) = |H(U)| \exp[i\phi_H(U)]$ 。

在考虑噪音时, 滤波函数  $1/H(U)$  可以简单地用其它适当的函数来代替, 把它写作  $D(U)$ 。

总之, 当消除图象模糊在傅氏变换域进行时, 在无噪音情形有:

$$\begin{aligned} F(U) &= \frac{G(U)}{H(U)} = G(U) \cdot \frac{1}{H(U)} \\ &= \delta(U) + 2\Phi(U) \end{aligned} \quad (22a)$$

而考虑噪音时有

$$F(U) = G(U)D(U) \quad (22b)$$

其中

$$D(U) = \frac{1}{H(U)} \frac{1}{[1 + |\varepsilon(U)|^2 / |H(U)|^2]}$$

其中 $|\varepsilon(U)|^2$ 是噪音  $n(M)$  的功率谱与信号  $[1 + 2\phi(M)]$ 的功率谱之比。

最后, 通过第二个透镜[图1(a)]所完成的“逆”傅氏变换, 得到所要求的“消模糊”象  $f(M)$ , 透镜  $L_2$  在其后焦面给出消模糊图象,

$$f(M) = 1 + 2\phi(M) \quad (23)$$

在图11(a)和11(b), 概括了执行具有展平无空隙传递函数的合成显微照片的原理。

总之, 我们可以说, 斯特罗克和哈利奥的图象消模糊方法也已经用数字方法产生的滤波器执行了, 正如最近伯奇 (Burge) 和斯科特所描述的那样, 他们用的是我们滤波器的二元形式。二元滤波器提供了一个用独立的振幅选样和相位选样表示二维复函数的方法。二元滤波器是计算机绘图画出的经过修正的二维光栅。图12表示伯奇和斯科特所得到的且白质铁脞的图象改善, 图中  $B$  是原始照片及其衍射图,  $F$  是计算机制作的全息滤波器,  $D$  是全息消模糊图象以及它的衍射图, 衍射图表明, 按着我们方法的一般原理高频  $\omega$  分相对低频  $\omega$  分有很大的提高。参考这些有意义的结果可以看到, 图12的消模糊图象的最大分辨率, 按其衍射图来说数量级是  $10 \text{ \AA}$ , 使用的是全数字方法产生的滤波器; 可与在图 8 用全息滤波器得到的  $3.3 \text{ \AA}$  分辨率比较一下, 这个滤波器的一部分是用数字计算和照相机械装置来制作的 (振幅元件), 另

一部分是用全息照相(即干涉, 对相位元件)制作的。顺便说一说在电子显微镜图象改善方面探索的其它方法, 在那些已作过研究的方法中有单侧全息术。

## B 扫描透射电子显微镜的情形

扫描透射电子显微镜是“飞点”扫描类型的装置, 类似于扫描雷达, 声纳或激光扫描系统。一个扫描的电子“点”以扫描的方式穿过样品。样品透过的电子, 有散射也有非散射的, 都被适当的探测器所收集, 它们被平方律强度探测并被转换成电信号; 电信号强度调制一个阴极射线管屏幕, 调制过程与样品扫描同步。

实际上, 如果只许可非常严格地处理的话, 扫描电子显微镜的成象理论仍然是复杂的问题。这正如在光学中, 如果人们企图在最严密地意义上, 应用带有边值解的整组麦克斯韦方程, 量子论和相对论, 来处理光学显微镜中有实际意义的问题的话, 也将产生差不多的复杂性。恰巧对于扫描电子显微镜的成象描述, 有可能在某些合理的近似下使用光学衍射公式, 这些近似类似于能使物理光学用于可见光显微镜的那些条件。如果能够以某种方式来处理电子和样品的相互作用, 特别是电子被样品的“散射”, 而这种方式 and 已被正式认为是光学显微镜成象的正确表述的处理方式差不多, 那么在这两方面几乎是完全对应的。

不幸, 在电子显微镜中电子与样品的相互作用一般远比光学显微镜中光与样品的相

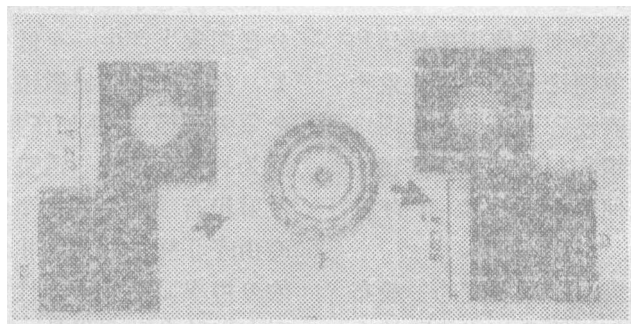


图12 用全数字计算的全息消模糊滤波器的图象改善。样品是蛋白质铁脞

互作用复杂得多。

所以电子显微镜，普通透射和扫描的电子显微镜的成象理论，既使用一个很好的有实际意义的近似，特别是用成象问题的类波性方面来处理，也决不能处理电子和样品的相互作用的细节，但是这的确考虑到了电子与样品相互作用之后电子的性质。

确实按照克鲁(Crewe)及其合作者的说明，扫描电子显微镜的一个实际重要的特性就在于，它能够处理样品透过和散射的不同类型的电子所产生的信号，例如由于取一个适当的比例，就会在阴极射线管上产生一个正比于样品原子的原子数 $Z$ 的亮度，从而实实在在地“看到”原子。克鲁特别区分了三种电子：弹性散射电子（它偏折一个大角度，这个角度与样品厚度以及 $Z^{1/3}$ 成正比），非弹性散射电子（小角度偏折，角度与样品厚度以及 $Z^{1/3}$ 成正比），“非散射”电子（它是沿入射方向传输的，同时这些电子与弹性散射电子发生干涉，在普通电子显微镜中有产生相位对比亮场图象的相干背景的作用）。在扫描电子显微镜中，弹性散射电子的信号与非弹性散射电子信号之比产生了一个信号， $Z^{1/3} : Z^{1/3} = Z$ ，正比于原子数 $Z$ 。

关于成象理论，在扫描电子显微镜成象中除了这个信号处理的方法及其电子计数原理外它是很重要的。成象理论是建立显微镜（透镜参数，象差，探测器参数）最佳设计参数的基础以及在合适的波的意义上的图象判读的基础，此外还有克鲁所用的电子计数和信号处理对比原理。

对于高分辨成象，特别是使用薄样品和高电压，可以说明成象理论是显微镜成象物理学的一个特别好的表述。这个波成象理论适合于普通电子显微镜和扫描电子显微镜，同时要考虑可用的几何形式和所探测的电子。

图13(a)表示扫描电子显微镜的一般布置，图13(b)是说明探测器几何形状的放大图。透过样品后的电子束由三部分组成：

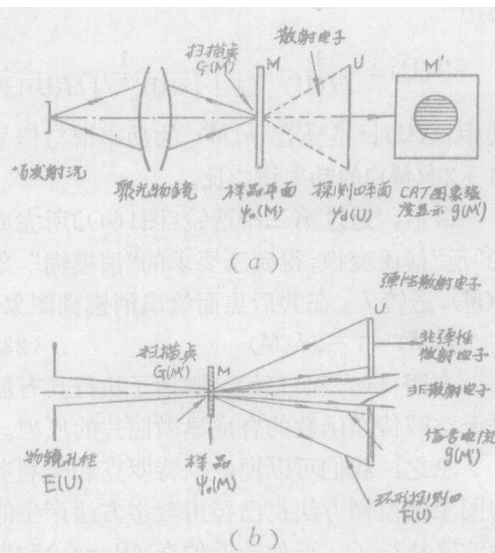


图13 (a)扫描电子显微镜的一般装置。(b)说明探测器几何形状的放大图

i) 弹性散射电子，它没损失能量，有大角度散射，与入射束是相干的，并携带着样品的高分辨结构信息；ii)非弹性散射电子，它在透过样品时损失了能量，有小角度散射，在不同的能量损失带上的电子是非相干的，并且与非散射和弹性散射电子是非相干的，由于在样品内的非位置相互作用，这些非弹性电子携带样品结构的低分辨信息；iii)非散射电子，它透过样品时没发生偏折。非散射电子是与入射束以及弹性散射电子相干的，所以可以与弹性电子发生干涉（如在相位对比电子显微镜中）但单独的非散射电子不包含样品信息。

正是弹性散射电子，一般主要是它反映了高分辨电子显微镜的图象信息。非弹性电子在图象上产生一个低分辨率的非相干背景，在普通电子显微镜中它进一步被物镜的色差所模糊，叠加在相当细锐的弹性象上。因为扫描显微镜的透镜在样品前面，非弹性散射没有受到聚光物镜色差的不利影响，而由于非弹性散射的非位置性质，非弹性象的分辨率显然低于弹性象。我们要强调的是，正在试验各种薄样品（如染色的DNA纤维和在薄碳膜基片上的病毒），对此有希望增大

弹性和非弹性电子之比。

我们根据上述考虑着手分析扫描电子显微镜的成象过程，它与米希尔(Misell)，斯特罗克和哈利奥在1974年首先提出来的理论是一致的。在它的一般形式中(成象方程)，特别是对于被广泛认为是扫描显微镜的最实际最重要的情况，即用一个环形探测器的非相干亮场成象方式的情形。蔡特勒(Zeitler)和汤姆逊于1970年已给出了在假定为相干照明的扫描显微镜中的相位对比成象理论(成象方程)。在扫描显微镜中，从场发射源发出的电子聚焦在样品上，坐标  $M'$  确定聚光物镜的扫描“点”的位置(图13)；入射电子束(点)用扫描函数  $G(M')$  来定义，它包括透镜象差和离焦的影响，如普通显微镜一样。直接在样品后面的电子波函数取决于物体波函数  $\psi_0(M)$ ，它描述样品在坐标  $M$  处对入射电子束的影响。利用通常的移动—不变条件，可把这个电子波函数  $\psi_i(M')$  写为

$$\psi_i(M') = \psi_0(M)G(M'-M) \quad (24)$$

我们设法确定波函数  $\psi_0(M)$  描述的样品结构。在扫描显微镜中，被样品散射的电子在探测器面  $U$  收集起来。为描述在探测面  $U$  上的电子波函数  $\Psi_d(U)$ ，我们依照夫朗和斐衍射定理取方程(24)式关于  $M$  的傅氏变换。有

$$\Psi_d(U) = \iint \psi_0(M)G(M'-M) \exp[2\pi i U \cdot M] dM \quad (25)$$

对应扫描点位置  $M'$  的象强度  $g(M')$ ，通过在探测器场  $F(U)$  上的积分  $|\Psi_d(U)|^2$  来计算，而象强度  $g(M')$  顺次显示在 CRT 屏上。我们定义， $F(U) = 1$ ，对于实际探测到电子的探测器  $\Omega$  分，对于空白  $\Omega$  分  $F(U) = 0$ 。因此象强度  $g(M')$  由下式给出

$$g(M') = \iint |\Psi_d(U)|^2 F(U) dU \quad (26)$$

即

$$g(M') = \iiint \iint \psi_0(M)G(M'-M) \exp[2\pi i U \cdot M] dM \cdot F(U) dU \quad (27)$$

为了下面的讨论把方程(27)式写成详细的形式，有

$$g(M') = \iiint \iint \psi_0(M_1)G(M' - M_1) \psi_0^*(M_2)G^*(M'/M_2) \cdot \exp[2\pi i U \cdot (M_1 - M_2)] F(U) dM_1 dM_2 dU \quad (28)$$

方程(28)式和衍分相干照明的普通成象过程的成象方程一样。于是很明显可把它应用到扫描显微镜上也可用于普通电子显微镜中；证明了一般情形的所谓倒易定理(普通显微镜成象方式的沅函数显然可以用扫描显微镜扫描方式的等价探测函数  $F(U)$  来代替)。

换言之，方程(28)式是扫描显微镜的基本成象方程，可应用于弹性散射电子和非散射电子，也可用于任何形状的探测函数  $F(U)$ 。特别是，方程(28)式是目前最广泛使用的扫描显微镜的基本方程，这种显微镜用一个专门设计的，基本上只收集弹性散射电子而不收集其它电子的环形孔径探测器，其中  $F(U)$  表示探测环。

方程(28)式从叙述的角度看是一个严格的成象方程。不幸的是从实际应用于设计和成象的角度看，它是不能解释的。

可以从方程(28)式导出一个大大简化的方程。我们特别感兴趣的应是：i)为了能在较好的实际近似下，把它用于扫描显微镜的成象分析和设计，要考虑样品的性质和散射电子的性质(弹性的和非弹性的，目前它们是成象最关注的)；ii)为了指导而作为一个理想情形。在从(28)式导出简化方程时，我们将说明，它实际上表示扫描电子显微镜理想成象时的严格方程，所谓理想情况是只接受弹性散射电子(即所有弹性散射电子，其它如非弹性散射和非散射电子都不在内)。

在扫描电子显微镜成象时使用的正式探测器是一个环状探测器(图13)，非散射分量，大多数非弹性分量，很少  $\Omega$  分弹性散射电子通过环形探测器的中心洞，依据最近地估计，人们知道探测器的环形带探测了大约70—90%的弹性散射电子。所以考虑弹性散射时，孔径函数  $F(U)$  在整个接收器角度范围上实际是常数，因为只有很小  $\Omega$  分弹性

散射电子未被探测而通过探测孔径上的洞。样品波函数可以写成下面形式

$$\psi_0(\mathbf{M}) = 1 + \psi_s(\mathbf{M}) \quad (29)$$

其中  $\psi_s(\mathbf{M})$  表示弹性散射波, 常数 1 表示非散射波。根据克鲁等人的论述, 正是这个散射波  $\psi_s(\mathbf{M})$  波被探测器的环状刀分所接受, 并用来成象, 同时非散射波进了探测器的中心洞。对所有的  $\mathbf{U}$ , 取  $F(\mathbf{U}) \cong 1$  的极端情形作为实验条件的很好近似, 并用  $\psi_s(\mathbf{M})$  代替(28)式中的  $\psi_0(\mathbf{M})$ , 我们来计算(28)式对  $\mathbf{U}$  的积分。

$$\begin{aligned} & \iint \exp[2\pi i \mathbf{U} \cdot (\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2)] F(\mathbf{U}) d\mathbf{U} \\ & \cong \iint \exp[2\pi i \mathbf{U} \cdot (\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2)] \cdot 1 d\mathbf{U} \\ & = \delta(\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2) \end{aligned}$$

在(28)式对  $\mathbf{M}_2$  积分给出

$$\begin{aligned} & \iint \psi_s^*(\mathbf{M}_2) G^*(\mathbf{M}' - \mathbf{M}_2) \delta(\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2) d\mathbf{M}_2 \\ & = \psi_s^*(\mathbf{M}_1) G^*(\mathbf{M}' - \mathbf{M}) \quad (30) \end{aligned}$$

结果由  $|\psi_s|^2$  与  $|G|^2$  的卷积给出了象强度  $g(\mathbf{M}')$ ,

$$g(\mathbf{M}') \cong \iint |\psi_s(\mathbf{M})|^2 |G(\mathbf{M}' - \mathbf{M})|^2 d\mathbf{M} \quad (31)$$

即  $g(\mathbf{M}') \cong \iint F(\mathbf{M}) h(\mathbf{M}' - \mathbf{M}) d\mathbf{M}$  (32) 其中  $F(\mathbf{M}) = |\psi_s(\mathbf{M})|^2$ ,  $h(\mathbf{M}') = |G(\mathbf{M}')|^2$ 。

方程(31)式表示按(28)式的扫描显微镜成象的简化形式, 适合于用环形孔径探测器, 接收大刀分弹性散射电子的情况。方程(31)式是一个非相干方式成象方程, 如(32)式的形式清楚表明的那样, 它和表示普通非相干光成象的方程相同。因此依据(31)式的扫描显微镜成象本身就导出了光学中对非相干光成象的经典分析。特别是按照(31)式, 对扫描显微镜成象使用斯特罗克和哈利奥的非相干图象的解卷积方法, 如他们已对扫描显微镜图象消模糊所用的那样, 是完全正确的。

扫描电子显微镜成象原则上总是要求作图象的解卷积的, 因为按(31)式得到的象是弹性散射电子波函数的平方  $|\psi_s(\mathbf{M})|^2$ , 即弹性散射波的强度。不幸的是扫描显微镜图象  $g(\mathbf{M}')$ , 只在扫描点函数  $G(\mathbf{M}')$  是一个类点的  $\delta$  函数  $\delta(\mathbf{M}')$  时, 才等于  $|\psi_s(\mathbf{M})|^2$ 。实

际上, 并没有  $\delta$  函数扫描点, 也就是说(31)式的等价形式(32)式本身就导至非相干图象的消模糊方法, 例如是以上面方程(1)式到(10)式对扫描方式消模糊给出的形式导出的。我们还注意到, 消除扫描显微镜图象的模糊可以在非扫描“光学滤波”系统中完成, 这和普通电子显微镜图象消模糊所用的相同, 如图1所示。这种消模糊方式的出发点也是方程(32)式, 对它作傅氏变换给出

$$G(\mathbf{U}) = F(\mathbf{U}) H(\mathbf{U}) \quad (33)$$

在通过全息傅氏变换相除滤波器

$$\frac{1}{H(\mathbf{U})} = \text{消模糊滤波器}$$

或通过其维纳(Wiener)型滤波器

$$D(\mathbf{U}) = \frac{1}{H(\mathbf{U})} \cdot \frac{1}{[1 + |\varepsilon(\mathbf{U})|^2 / |H(\mathbf{U})|^2]} \quad (35)$$

后, 依照下方程的进一步的傅氏变换

$$FT \left[ G(\mathbf{U}) \cdot \frac{1}{H(\mathbf{U})} \right] = f(\mathbf{M}) \quad (36)$$

与  $FT[G(\mathbf{U}) \cdot D(\mathbf{U})] = f(\mathbf{M})$  (37)

就给出了所希望的消模糊图象  $f(\mathbf{M})$ 。这里写出的方程分别是对考虑噪音的情况, 以及无噪音的情况而言的: 在实际作实验时, 消模糊是按照方程(37)式完成的, (37)式当然包括了维纳型噪音滤波。

最后, 将说明方程(31)式实际上严格地表示扫描显微镜的成象情形, 在这个成象过程中将收集所有弹性散射电子, 而无其它。在这个意义上, (31)式可认为是扫描显微镜成象的理想情形。对这个理想情况的推导也有助于对导致方程(31)式的近似, 建立一个进一步的, 更为详尽的计算的基础。这需要从下方程开始

$$\psi_0(\mathbf{M}) = 1 + \psi_s(\mathbf{M}) \quad (29)$$

我们用扫描点函数  $G(\mathbf{M}')$  照明样品  $\psi_0(\mathbf{M})$ , 透过的波等于

$$\begin{aligned} & G(\mathbf{M}' - \mathbf{M}) + G(\mathbf{M}' - \mathbf{M}) \psi_s(\mathbf{M}) \\ & = \text{透射波} \quad (38) \end{aligned}$$

其中  $G(\mathbf{M}' - \mathbf{M})$  表示非散射线,  $G(\mathbf{M}' - \mathbf{M})\psi_s(\mathbf{M})$  表示弹性散射波。

对于仅仅接收弹性散射电子的情形, 探测到的强度则是

$$g(\mathbf{M}') = \iint |G(\mathbf{M}' - \mathbf{M})\psi_s(\mathbf{M})|^2 d\mathbf{M} \quad (39)$$

即, 信号严格正比于

$$g(\mathbf{M}') = \iint |\psi_s(\mathbf{M})|^2 |G(\mathbf{M}' - \mathbf{M})|^2 d\mathbf{M} \quad (40)$$

于是扫描显微镜成像是严格非相干的。

斯特罗克和哈利奥在1971年所得到的早期结果, 说明了按照这些原则的消模糊, 丹尼斯·伽伯教授在其诺贝尔演讲中谈到这个结果并作为演讲的图33加以说明。在这个早期生物学应用中所用的样品是一个丝状细菌 *fd* 病毒, 是用克鲁的  $5 \text{ \AA}$  扫描显微镜成象的。

### C 关于普通电子显微镜和扫描显微镜成象的评注

人们对普通电子显微镜和扫描显微镜的成象过程的相似性和差别自然是关注的, 特别是在它们有同等分辨能力的情况。实际上, 扫描和普通电子显微镜在其正常工作条件下的成象方式, 成象方程是完全不同的。

例如, 在弱相位样品情形, 普通电子显微镜以相干照明“亮场”方式工作, 并产生一个正比于样品相位函数的象强度; 而扫描显微镜, 在使用其普通环形孔径探测器时, 是以非相干照明“暗场”方式工作的, 并形成其强度正比于相位函数平方的象。

要继续对两种仪器作详细地比较, 特别是在一般的情形, 需要包括  $S/N$  分析和其它许多参数 (例如见[64])。

对于薄样品来说, 正如在高分辨工作所要求的, 两个成象方式在实践中是共同的:

- 1) 亮场相位对比成象;
- 2) 暗场成象。

而且在扫描显微镜中使用非相干亮场成象逐渐增多起来, 特别是对厚物体成象。

在普通电子显微镜中按下面方程以离焦相位对比的方式得到了亮场成象

$$g(\mathbf{M}') \cong 1 + 2 \iint \phi(\mathbf{M}) h(\mathbf{M}' - \mathbf{M}) d\mathbf{M} \quad (20)$$

这是相干成象方式, 而在扫描电子显微镜中依据同一方程, 要用一小的中心探测器。对于亮场成象来说, 看来普通显微镜要好些, 因为用小的中心探测器的扫描显微镜, 只探测了很少的弹性散射电子, 而弹性散射电子却携带着大部分成象信息。

另一方面, 暗场成象最容易在扫描电子显微镜中得到, 依照文献[24]给出的方程。

$$g(\mathbf{M}') \cong \iint \phi(\mathbf{M})^2 [G(\mathbf{M}' - \mathbf{M})]^2 d\mathbf{M} \quad (41)$$

这是可以看出来的, 只要注意到方程(31)式对于在(29)式中有下面式子成立的情况, 就给出了(41)式。

$$\Psi_s(\mathbf{M}) \cong 1 + i\phi(\mathbf{M}) \quad (42)$$

$$\text{即 } \Psi_s(\mathbf{M}) \cong i\phi(\mathbf{M}) \quad (43)$$

这是对相位为  $\phi(\mathbf{M})$  的弱相位物体而言的。

换言之, 可以在最有利的意义上对两种仪器作比较, 只要考虑, 对相干方式相位对比亮场成象使用普通显微镜, 而对非相干方式暗场成象用扫描显微镜, 它们分别根据方程(20)和(41)式。

方程(20)式表明, 对解卷积来说, 在普通显微镜中成象信息正比于相位函数  $\phi(\mathbf{M})$ , 并保留它的正负号, 而按方程(41)式在扫描显微镜中成象信息正比于  $\phi^2(\mathbf{M})$ 。至于最终的图象对比, 在扫描显微镜中已经很高的暗场成象对比通过电子学方法甚至可进一步增强 (所用的方法完全可与光学显微镜使用高“伽玛”照相干板得到的增强相比), 并且原来较低的普通显微镜图象的亮场对比也可以用象增强器类似地增强, 同时, 在普通显微镜中具有这样高对比的可靠的高分辨成象, 我们已经说明了, 通过使用在这里介绍的全息解卷积方法是能够得到的。

### D 实时图象处理

这里介绍的所有方法现在都可用许多方式“实时”地甚至“联机”地来执行, 因而这些方式, 许多年来得到了迅速地发展。例如就扫描显微镜来说, 这可以用一个实时联机光学相关器的新原理来完成, 可以把它描述为

“扫描—时间—终端实时联机二维相关器”；它可用于卷积，解卷积以及相关运算，并且它允许以“飞点”方式在仅完成对样品的一次扫描的时间内，完成所要求的相关(或卷积)。克鲁和华尔(Wall)在他们一开始这方面的工作时就已在扫描显微镜中使用了电子学处理，尽管不是作解卷积运算。在普通显微镜方面，赫尔曼(Hermann)和克拉尔(Krahl)已经使用了一个带有“Lumatron”型的热塑料管探测器的“实时”衍射术。这种管子也可以用于实时解卷积，例如用激光束照明一个用电子束记录在热塑料表面上的模胡照片，其处理步骤如图1(a)所示。另一个方法是用电子学方法(如用一个光导摄像管)扫描电子显微镜图象，并实时地处理相应的信号，例如可按文献[94]去做。在其余几个已报道的普通和扫描电子显微镜的实时图象处理方法中，我们认为，维内克兰斯(Veneklasen)所提议的“在扫描电子显微镜中的联机全息成象”是理想的，它适合于，探测面上的强度分布可以瞬时地表示为物体的联机投影全息图的情形。

#### IV. 在X-射线结晶学和电子显微镜中通过化为二维全息执行过程的三维重现

三维重现是目前在许多不同领域中人们最关注的问题。三维重现有根本重要性的两个领域是X-射线结晶学和电子显微镜。

在X射线结晶学和电子显微镜中，三维结构的重现有一些基本的相似点，把它们揭示出来，是为了将那些至今仍在研究的可怕的三维数字傅氏变换计算和显示问题化为一组二维光学傅氏变换全息执行过程，这就使人们得到几个实际的益处，包括增加重现速率以及直接显示在结构中的“光学的原子象”(而不是电子密度轮廓)，最后通过一个全息图就能观察到它。

我们认为“全息三维重现方法”，自从1940

年布喇格(Bragg)和伯格(Buerger)把光学重现引入结晶学以来，是光学重现的一个新的重要步骤；在文献[30]中我们曾说明过，所谓“光学变换”(不幸的是它最终只产生了在真实空间结构域中的投影)的传统困难，现在可以通过全息重现加以克服；首先投影在傅氏域中，然后就能从它们(使用通常称为“傅氏域投影原理”的方法)重现所希望的在真实空间结构域中的“非编码”截面。

所要求的傅氏域投影是以全息图的形式记录的(“傅氏域投影全息图”)，它可以直接从普通三维倒易空间X射线衍射仪的数据和结构剖面的二维光学重现的相位数据，特别是与下面(46)式一致的对应于广义投影(所谓“初始傅氏求和”)的平行剖面的数据，用数字计算以数字全息图的形式产生。此外用同样的傅氏域投影全息图的数字计算从计算机控制的衍射仪得到的数据和已确定的相位数据，可以通过混合的数字光学方法或纯光学方法产生所要求的傅氏域投影全息图。

在X射线结晶学中，我们有表示电子密度分布的结构函数 $\rho(x, y, z)$ ，和谱的傅氏域结构“因子” $F(h, k, l)$ 之间的三维傅氏变换关系，

$$\begin{aligned} \rho(x, y, z) &= \sum_k \sum_h \sum_l F(h, k, l) \exp[i2\pi(hx + ky + lz)] \end{aligned} \quad (44)$$

其中结构空间轴 $(x, y, z)$ 一般不是直角的，傅氏域轴 $(h, k, l)$ 一般也不是直角的，而是“倒易”的，即在结构域的点M和在傅氏域的点P是用矢量 $\overline{OM}$ 和 $\overline{OP}$ 这样定义的

$$\begin{aligned} \overline{OM} &= x\bar{a} + y\bar{b} + z\bar{c} \\ \overline{OP} &= h\bar{a}^* + k\bar{b}^* + l\bar{c}^* \end{aligned} \quad (45)$$

$$\begin{aligned} \text{其中: } \bar{a} \cdot \bar{a}^* &= 1 & \bar{a} \cdot \bar{b}^* &= \bar{a} \cdot \bar{c}^* = 0 \\ \bar{b} \cdot \bar{b}^* &= 1 & \bar{b} \cdot \bar{a}^* &= \bar{b} \cdot \bar{c}^* = 0 \\ \bar{c} \cdot \bar{c}^* &= 1 & \bar{c} \cdot \bar{a}^* &= \bar{c} \cdot \bar{b}^* = 0 \end{aligned}$$

在(44)式中对某个 $z = z_i = \text{常数}$ ，先对 $l$ 值求和，就给出一个“广义投影”，它平行于 $l$ 方向而成为下面形式的 $h, k$ 平面

$$Pz_i(h, k) = \sum_l F(h, k, l) \exp(i2\pi lz_i) \quad (46)$$

我们把它称为“傅氏域投影”。

正如在文献[30]中首次注意到的，按照(44)式，普通的  $\rho(x, y, z)$  的三维数字计算可以用一组光学方法完成的二维傅氏变换来代替，这要求首先把(46)式描述的一组傅氏域投影  $Pz_i$  以一组相应的全息图的形式存储起来，这种全息图叫做“傅氏域投影全息图”，因为一个傅氏域投影全息图  $Pz_i(h, k)$  的二维光学傅氏变换，按下面方程给出一个平行于  $x, y$  平面的结构域剖面  $\rho(x, y, z_i)$

$$\begin{aligned} \rho(x, y, z_i) \\ = \sum_{k'} \sum_{h'} Pz_i(h', k') \exp[i2\pi(h'x + k'y)] \end{aligned} \quad (47)$$

进一步的理论细节和实验验证的结果将在我们准备发表的文章中[92]介绍。

在人们一开始就可以获得一组在物体（即结构）域的投影（如在电子显微镜中，超声和X射线成象，地球物理学等）的情形，

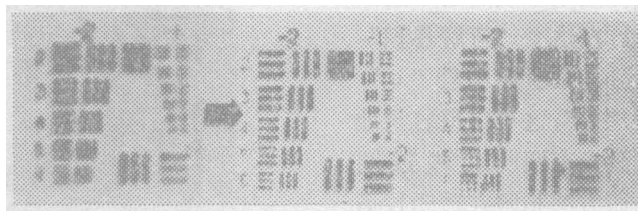
这是一组三维结构  $\rho(x, y, z)$  的投影  $Pj$ ，首先作二维光学傅氏变换，产生一组在傅氏域  $(X, Y, Z)$  的中心剖面（即通过原点），例如有下面形式

$$\begin{aligned} S_0(X, Y, 0) \\ = \iint P_0(x, y) \exp[-i2\pi(Xx + Yy)] dx dy \end{aligned} \quad (48)$$

它表示  $Z=0$  的情形，在以各个全息图的形式记录之后，依据“迭加全息术”的原理就可用它记录一组傅氏域投影全息图，而它的二维光学傅氏变换产生一组在结构域  $(x, y, z)$  的中心剖面，例如下面形式

$$\begin{aligned} s_0(x, y, 0) \\ = \iint S_0(X, Y, 0) \exp[i2\pi(Xx + Yy)] dx dy \end{aligned} \quad (49)$$

对于所希望的三维重现来说，表示  $z=0$  的情形。可以做出一组在给定方向的广义投影，以便给出一组垂直于投影方向的平行剖面。



模糊照片                      可靠的                      识别的消模糊照片

图14 检验卡的高焦模糊照片的全息改善

## V 从意外模糊的照片复原好的图象

全息改善方法能完成的模糊照片的改善程度是相当大的。但是从第Ⅲ节的叙述来看，对此作全面评价可能并不是容易的，因为在高分辨电子显微镜中要研究的生物或其它样品原来的结构，一般在这之前当然不会看清楚。

所以为了完整和清楚的原故，在这里重

复两个可识别景物的全息图象改善的重要例子，可能是有益的。两种有代表性的照片是按第Ⅱ节方程(1)式记录的，并且它们说明，实际上有三种有实际意义的情况：a) 离焦成象；b) 运动模糊成象；c) 未知性的模糊（所谓“盲解卷积”），为此必须从照片本身建立模糊函数。

图14是一个标准检验卡的高焦照片的改善结果，用的是图1的系统。检验卡大小约为  $20 \times 20$  毫米。  $h = h(x, y)$  指出模糊检验卡图样的点扩散函数，相应于  $f = 240$  毫米镜

头的焦面上直径大约为 1mm 的模糊点。用脉冲响应函数  $h(x, y)$ ，通过全光学全息方法来制作两种消模糊滤波器  $1/H(U)$ ,  $H(U) = FT[h(x, y)]$ ，根据的是第 II 节给出的一般原理，当然和通常一样也考虑维纳噪音滤波要求。在物体是未知的时候，图象的可靠性是很重要的（如在电子显微镜中），重点放在低和中等空间频率的复原上，并且滤波器要作得能产生一个“可靠”型的消模糊结果，如图所示。在对识别物体感兴趣时，人们对此已经有了一些了解（字母、熟悉的面孔或景物，及其它许多例子），要强调的是复原最高的空间频率，即使要付出某些 Gibbs 型的代价而集中了“噪音”，为的是产生一个“识别”型的消模糊结果，如图所示。在这个实验室检验例子中，模糊程度是作为方法研究的一下分单独建立的，即同时拍照特性点扩散脉冲响应函数  $h(x, y)$  和检验卡的离焦照片。

图 15 表示另一个特别有趣的情况，在这里模糊的性质必须从照片本身中去确定，如上面的叙述，它很象那些用来确定电子显微照片的 CTF 的线条。在这个“盲解卷积”的例子中所用的手续，是分析模糊象“a”的傅氏变换（衍射图）“d”，这可以很容易地得到，只要用一准直激光束照明模糊透明片“a”，并且以普通方法拍照在透明片后的透镜后焦面上的衍射图样“d”（这就是“谱”）。由于事先对某些类型衍射图的了解，例如在衍射理论，结晶学，以及类似的应用中，我们就能直接识别，在图 15 中的衍射图“d”明显类似于一个水平小狭缝产生的衍射图，正如箭头所指的“c”处表示的狭缝，所以就认定模糊主要是线性运动型的。实际上，一个实际“函数族”缝孔径产生的谱表示在“e”上；测量谱“d”并与谱族“e”作比较使我们能确定线性运动的大小，正是它把景物上的每个点模糊成一个狭缝似的线。用一个适当长度的狭缝（按比例大约是 1.3mm，模糊照片“a”的宽度近似是 110mm）很容易作成全息消模糊滤波器，



模糊照片

指出是线性运动的检验

模糊照片的谱分析

图 15 由偶然模糊的照片复原好的图象。从图片 (a) 到 (b)，以及从 (f) 到 (g) 的改善使用了同一滤波器

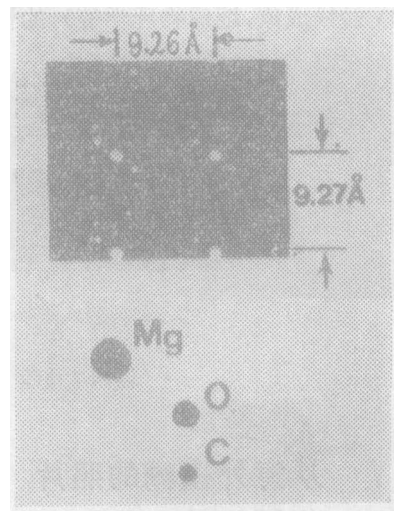


图 16 在三斜晶系分子的一个截面上 ( $x=0$ ) 的原子成象。首次在“X-射线显微镜的意义上，对晶面上的原子成象。

并用它从原始模糊照片“a”中抽取出显著改善的图象“b”。我们在没有比能从照片本身以及事先对衍射图的了解中获得的信息更多一些的情况下，也已对离焦照片得到了

注：图 15 (f), (g) 省略

同样的改善,并且一般来说这个方法当然是与模糊函数族一道使用的,同时借助于适当的算法和简单的数字计算,为的是弄清在电子显微照片上的模糊,正如在第三节中所讨论的那样。这个方法在消除意外模糊的宇航和考古学照片方面也得到了应用,例如可参考文献[98]。

## 附注:原子的成象

我们现在已从实验上成功地证实了(与萨尔马(Sarma)教授和斯瑞尼瓦桑(Srinivasan)教授合作)第三节叙述的新的混合光学数字三维重现方法,方程式(44)到(47)对于三斜晶系的四氢呋喃溴化镁复晶结构( $\text{MgBr}_2 \cdot 4(\text{C}_4\text{H}_8\text{O}) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ )样品也是成立的。光学二维傅氏变换重现产生了原子中电子密度整体的实际“象”,例如,正如在图16所说明的 $x=0$ 的截面上[根据(46)式对 $h$ 求和而重现的],其中镁(Mg),氧(O)和碳(C)原子的象以很完美的形式显现出来,它相当于数字计算的电子密度值(如同用来画出在这一截面上的普通电子密度轮廓)。图16表示的光学重现结果是依据方程(46)式,数字计算倒易(傅氏域)格子 $F(h,k,l)$ 的“初始傅氏求和”(傅氏域投影)得到的。傅氏域投影是用光数字方法实现的,依据我们上面叙述的原理,用一个“photowrite1500”胶片绘图仪以照相透明片的形式实现的,开始时通过计算机控制的X射线衍射仪收集三维傅氏域数据并确定相位数据。在我们即将发表的文章将给出进一步的细节,包括记录

数字方法产生的傅氏域投影全息图所用的方法,特别是关于需要通过适当选择全息图面的轴线来保证,“傅氏域投影全息图”轴线和晶体截面轴线之间在光学重现时的二维倒易问题。

新的光数字三维重现方法是以三个值得注意的事实为依据的:

a) 利用透镜能实现的二维光学傅氏变换对于一般非矩形“倒易”坐标以及普通的矩形坐标 $x, y$ 和 $u, v$ 都是成立的。

b) 结构域剖面 $\sigma(x, y, z_i)$ 可以按照在文献[30]首先说明的“傅氏域投影定理”(47)式,通过二维光学傅氏变换从记录为全息图 $Pz_i(h', k')$ 的二维投影中得到。

c) 普通三维数字傅氏变换计算,正如通常在结晶学中是从确定的 $F(h, k, l)$ 数据开始作的,可以简化为两步简单手续,根据(46)式数字执行的“初始求和”,接着是依照(47)式光学完成的二维傅氏变换,其结果是获得了在重现的晶体结构剖面上的实际原子“象”,而不仅仅是它们的电子密度“图”,这就要求,首先把按(46)式得到的复数傅氏域投影 $Pz_i(h, k)$ 以全息图的形式存储起来,我们把这个全息图称为“傅氏域投影全息图”。

d) 新的光学数字重现方法,现在实际上解决了布喇格在1939年首先定义的“X射线显微镜”的问题,这需要使用斯特罗克和哈利奥在1975年首先提出的“傅氏域投影定理”和全息计算。

(遼小靖 译)