

# 用 Linfoot 象质评价理论研究高分辨 电子显微镜依赖失焦的象质

沈 晓 庆

(上海机械学院)

1988年3月30日收到

本文用 Linfoot 象质评价函数对弱相位物体成像高分辨电子显微镜的失焦特性作了研究。测量厚度为 10nm 的无定形非晶碳膜的高分辨电子显微象功率谱,从而确定相对结构容量分布,并从理论计算上进行了证实,据此对保真度相关量及未知晶体成像和自动聚焦作了讨论。

## 一、引 言

在研究 0.2nm 间距金属原子通过高分辨电子显微镜成像时,重现象的象质是十分重要的。通过测量和理论计算确定电子光学系统的照明条件、物体傅里叶变换功率谱和相应的相位衬度传递函数是必要的,但仅知道这些条件还不够。由于物体成像后的相似性取决于所有空间频率的贡献,所以得考虑空间频率的积分值,积分频带宽度与物体成像时电子显微镜所使用的带宽相同。这个工作中用到的象质评价函数是 Linfoot 在评价光学图象的物象相似性时给出的<sup>[1]</sup>。本文将这个评价函数用于电子显微镜系统,并证明对高分辨电子显微镜中弱相位物体相位衬度起主导作用成的象是同样适用的。用相对结构容量对失焦系列的高分辨电子显微象进行计算和实验测量,结果非常符合。进一步用相关量等评价函数讨论了未知晶体的成像方法和自动聚焦判据。

## 二、原理和方法

### 1. 象质判据

由 Linfoot<sup>[1]</sup> 引入的象质判据试图确定象上与物上强度分布之间的相似性度量并成功地用在光学显微镜的振幅衬度上。定义物体的理想象为  $I_{ob}(x)$ , 该物体的实际象为  $I_{im}(x)$ 。保真度  $A$  是由理想象强度与实际象强度之差的平方平均确定,并用因子

$\frac{1}{\text{面积}} \iint_{-\infty}^{\infty} |I_{ob}(x)|^2 dx$  适当规范化、保真度为

$$A = 1 - \frac{\iint_{-\infty}^{\infty} |I_{ob}(x) - I_{im}(x)|^2 dx}{\iint_{-\infty}^{\infty} |I_{ob}(x)|^2 dx} \quad (1)$$

上式假设了系统的脉冲响应空间不变。用系统传递函数表示

$$A = 1 - \frac{\iint_{-\infty}^{\infty} |1 - H(u)|^2 |I_{ob}(u)|^2 du}{\iint_{-\infty}^{\infty} |I_{ob}(u)|^2 du} \quad (2)$$

这里  $H(u)$  为传递函数,  $I_{ob}(u)$  为  $I_{ob}(x)$  的傅里叶变换。显然若传递函数等于常量 1, 就能得到物象间的理想关系  $A = 1$ 。相关量  $K$  描述了物象间的关联,

$$K = \frac{\iint_{-\infty}^{\infty} |I_{ob}(x)I_{im}(x)| dx}{\iint_{-\infty}^{\infty} |I_{ob}(x)|^2 dx} \quad (3)$$

或写成

$$K = \frac{\iint_{-\infty}^{\infty} H(u) |I_{ob}(u)|^2 du}{\iint_{-\infty}^{\infty} |I_{ob}(u)|^2 du} \quad (4)$$

这一积分可直接用来描述点扩散的中心对比度,文献 [2] 将它作为象质评价详细地研究过。

相对结构容量  $S$  定义为象的结构量与物的结构量之比,描述了产生精细物体细节的能力,信息密度的大小,

$$S = \frac{\iint_{-\infty}^{\infty} |I_{im}(x)|^2 dx}{\iint_{-\infty}^{\infty} |I_{ob}(x)|^2 dx} \quad (5)$$

或写成

$$S = \frac{\iint_{-\infty}^{\infty} |H(u)I_{ob}(u)|^2 du}{\iint_{-\infty}^{\infty} |I_{ob}(u)|^2 du} \quad (6)$$

相对结构容量  $S$  没有直接考虑传递函数相位,而仅与  $|H(u)|$  有关,对比度改变而不考虑符号。保真度、相关量和相对结构容量三者之间的关系为

$$S = 2K - A \quad (7)$$

本文将讨论如何将上述评价方法用于相位衬度的信息,即研究高分辨电子显微象的相位衬度传递函数与图象质量的依赖关系。我们设所研究的物体功率谱在空间频率域是恒定的,比如一极薄的无定形碳膜就具有这样的特性。将它作为物体用于高分辨电子显微镜

中. 一方面无定形薄碳膜经电子显微镜相位衬度调制破坏了其物体原子结构的分辨率, 另一方面作为电子显微镜成像系统的输入信号, 它具有如同宽频噪声的特性, 这给我们研究带来很大方便. 线性传递时输出信号的功率谱——即电子显微象谱——正比于传递函数绝对值的平方, 这里物谱近似于常量. 从薄碳膜电子显微象的衍射图人们可以直接读出由球差和失焦所确定的相位衬度传递函数的平方值.

## 2. 相位衬度传递函数

在高分辨电子显微镜中, 照明电子束具有很好的相干性, 很薄的样品是弱相位物体. 象的衬度是相位移的线性函数, 电子波经弱相位物体后, 相位改变很小, 经过样品后的电子波函数可表示为

$$\psi_0(\mathbf{r}) = 1 - i\eta(\mathbf{r}), \quad (8)$$

$\eta(\mathbf{r})$  为样品引起的电子波相位移. 实际的电子系统将引起附加的相位差. 若考虑物镜球差和离焦的影响, 相位移为

$$W(\theta) = \frac{2\pi}{\lambda} \left( \frac{1}{4} C_s \theta^4 - \frac{1}{2} \Delta f \theta^2 \right), \quad (9)$$

式中  $\lambda$  为电子波长,  $C_s$  为物镜球差系数.  $\Delta f$  为物镜离焦量, 欠焦时为正.  $\theta$  为电子波散射角,  $\theta = \lambda u$ ,  $u$  为空间频率. 透镜产生的相位移对图象的影响可用相位衬度传递函数表示为

$$T = -2 \sin W(\theta). \quad (10)$$

由于色差  $C_c(\text{mm})$ , 加速电压起伏  $\Delta u/u$ , 阴极射线温度  $T(\text{K})$ , 电子能量  $E_b(\text{J})$ , Boltzmann 常数  $k(\text{J/K})$  使幅值随电子波散射角增大而下降, 按文献[3]给出

$$\begin{aligned} \tilde{T} &= T \cdot G_1 \cdot G_2, \\ G_1 &= \exp \left[ - \left( \frac{\pi}{4} C_c \theta^2 \lambda^{-1} (\ln 2)^{-1/2} \cdot \Delta u/u \right)^2 \right], \\ G_2 &= \left[ 1 + \left( \frac{1}{2.45 E_b} \pi C_c k T \lambda^{-1} \theta^2 \right)^2 \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (11)$$

$G$  表示色差和照明孔径等对传递函数的影响, 这一因子使振荡的传递函数高频振幅衰减并确定了理论上可能达到的分辨率. 实验用的电子显微镜为 DEEKO 100, 球差系数  $C_s = 0.5 \text{mm}$ , 色差  $C_c = 0.7 \text{mm}$ , 高压不稳定  $\Delta u/u = 2 \cdot 10^{-6}$  加速电压  $u = 100 \text{kV}$ , 相应的电子波长  $\lambda = 37 \cdot 10^{-3} \text{nm}$ , 点分辨率小于  $0.18 \text{nm}$ . 图 1 给出了在高斯 (GF), Scherzer (SF) 和失焦系列中另外两个失焦量对应的相位衬度传递函数 (PCTF). 这里 Scherzer 失焦量  $= \sqrt{C_s \cdot \lambda}$ , 并用  $\Delta = \frac{\Delta f}{\sqrt{C_s \cdot \lambda}}$  来归化失焦, 这样使得我们研究的

失焦特性不取决于电子显微镜的参量. 相位衬度传递函数随电子散射角  $\theta$  或空间频率  $\nu$  不同而振荡. 不同的频率以递增或递减的相位衬度传递到象平面. 某些频率段相位衬度反转, 传递函数零值和附近频带对应物体信息丢失了. 这些特性从高分辨电子显微象上是很难分析与解释. 本实验用厚度为  $10 \text{nm}$  薄碳膜样品. 采用轴上照明, 照射孔径为  $10^{-4}$  级. 这个样品在电子显微镜中有稳定的特性. 失焦系列以  $383,000 \times$  的放大倍率成

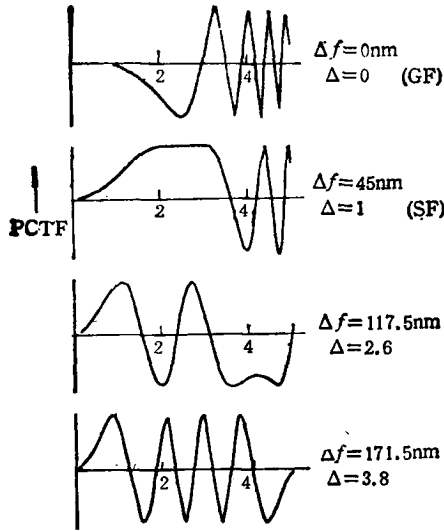


图 1 给定失焦量弱相位物体的相位衬度传递函数

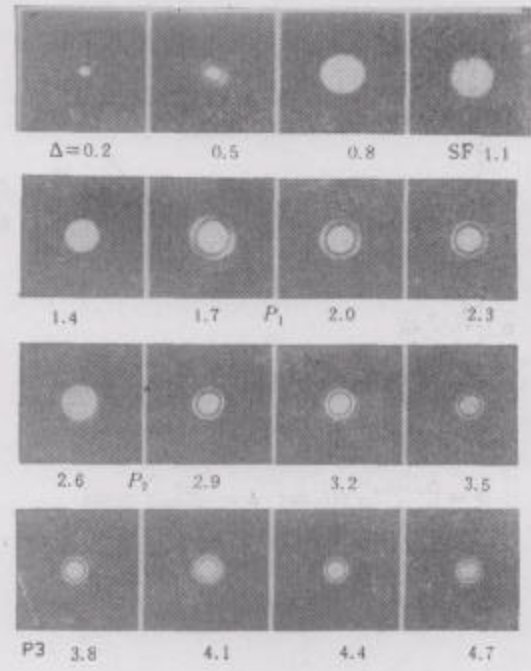


图 2 失焦系列薄碳膜高分辨电子显微象的光学衍射象

象。尽管光与电子的散射,衍射机制不同,但在波动这点上是相似的。我们借助于光学衍射装置来研究电子显微象的傅里叶变换后功率谱。图 2 给出了失焦系列高分辨电子显微象的光学衍射象。由于所使用的物体接近于白噪声发生器,物谱在电子显微镜衍射极限对应频率范围内接近于常量,与空间频率无关,这里直接读出调制传递函数的强度分布。

### 3. 相对结构容量的确定

由于严格消除了非对称旋转象差的影响,图 2 所示的传递函数各向同性。沿任一方向测量功率谱,除上一个常量,就可确定电子显微镜的相位衬度传递函数<sup>[4]</sup>。这里所测量的是传递函数的平方。这使我们想到相对结构容量  $S$ , 它也是与传递函数平方有关。由于物谱为常量,(6)式变为

$$S = C \int_{-\infty}^{\infty} |H(u)|^2 du. \quad (12)$$

(12)式表明,测量我们所制作的极薄碳膜样品并控制电子显微镜成象条件所得高分辨电子显微象的光学衍射象,并做积分,就得到相对结构容量。我们在傅里叶变换谱面用光电转换装置测量图 2 所示离焦系列高分辨电子显微象的光学衍射象,并严格控制测量的相同条件,联接计算机,计算所测光强的积分值。图 3 是一个实测的依赖于失焦的相对结构容量评价函数曲线。为了证实积分的结果就是相对结构容量,我们又按照电子显微镜成象条件,从理论上计算了依赖于失焦的相对结构容量曲线。计算结果如图 4 中实线所示,两者基本符合,在强度规范化上稍有差异。这就证明了 Linfoot 的象质评价理论(包括保真度、相关量)可以用来评价弱相位物体的高分辨电子显微象。

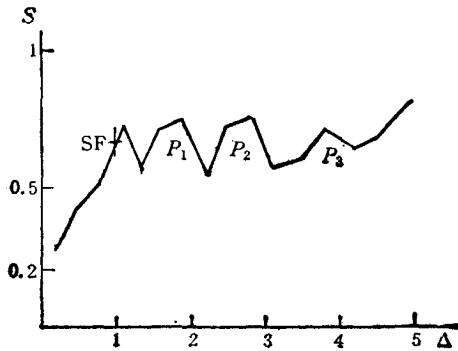


图3 测量所得相对结构容量曲线分布

$$S = \int_{(2.5\text{nm})^{-1}}^{(0.2\text{nm})^{-1}} |H| du; \quad \Delta = \frac{\Delta f}{\sqrt{C_s \lambda}}; \text{碳膜};$$

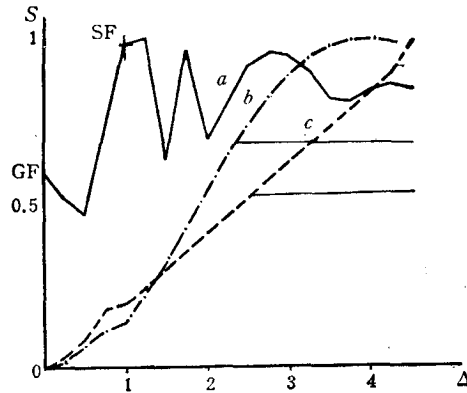
DEKO100;  $\times 383000$ 

图4 理论计算所得相对结构容量曲线分布

$$\text{曲线 } a \quad S = \int_0^{(0.2\text{nm})^{-1}} |H|^2 du;$$

$$\text{曲线 } b \quad S = \int_0^{(1.0\text{nm})^{-1}} |H|^2 du;$$

$$\text{曲线 } c \quad S = \int_0^{(3.3\text{nm})^{-1}} |H|^2 du;$$

其余图注同图3

### 三、结果与讨论

图3和图4分别给出了实测与计算所得的相对结构容量与离焦的变化曲线,测量和计算的空间频率接近于电子显微镜的衍射极限分辨率  $0.2\text{nm}^{-1}$ 。从图中可以看到,在高斯失焦量相对结构容量极小,对应图象所有的结构衬度极小。在  $0.4\Delta$  为曲线绝对极小值,随失焦加大曲线递增,在 Scherzer 失焦量,严格说在  $1.1\Delta$  为曲线绝对极大值,随失焦继续增大,曲线有几次振荡,峰值分别为  $1.7\Delta$ ,  $2.6\Delta$  和  $4.0\Delta$ 。图2和图3中分别用  $P_1$ ,  $P_2$  和  $P_3$  来表示出 Scherzer 失焦量  $\Delta$  以外的三个峰值。在绝对极大值附近  $\Delta = 1$  到  $\Delta = 1.2$  都有最大值。实际操作中更精细的调节是很困难的,人们几乎无法辨别这些差异。对于宽频物体采用失焦系列成象,几个极小值对应的失焦量是应注意或避免。对于物体细节小到  $3.3\text{nm}$  的低频物体,相对结构容量以很高的斜率递增,如图4虚线所示,失焦量愈大,传递象信息密度或者说信息容量愈增多,也就是说对于低频物体,可以不考虑信息丢失而采用大的失焦量。当物体细节小到  $1\text{nm}$  时,如图4所示曲线仍有相同的趋势。只是要得到相同的信息密度而可以用较小的失焦量。相对结构容量的峰值是取决于某几个失焦量所对应的相位衬度传递函数在各频带的峰值,且与符号无关。这些频带的峰值是由球差和离焦引起相位移相互平衡补偿的结果,它们决定了图象的质量。衬度反转是可通过消卷积的方法而加以恢复的<sup>[5,6]</sup>。相关量与保真度一样,与相位衬度传递函数的符号有关,它的最大值比相对结构容量的最大值向大的离焦方向移动,这里没有给出计算结果。文献[27]研究了相关量与点扩散中心衬度的比例关系。以上讨论的失焦,均是在欠焦范围,这个范围的失焦很大程度上受到球差的影响。值得提到的是过焦范围,图5

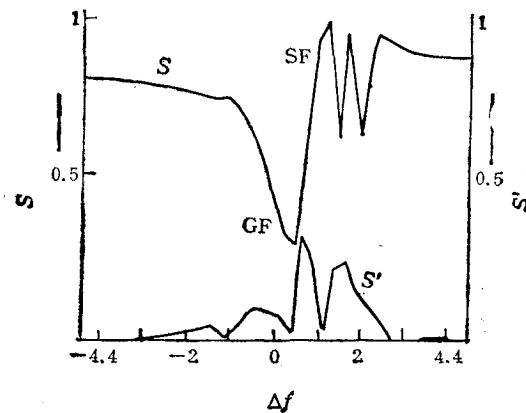


图5 整个失焦过程的相对结构容量曲线, 和它的变化率曲线

$$S = \int_0^{(0.2\text{nm})^{-1}} |H|^2 d\mu; \quad S' = \frac{\partial S}{\partial(\Delta f)}$$

是计算的从过焦到欠焦整个失焦过程, 在图左方的过焦范围, 象质评价函数单调缓慢上升, 图象的性质几乎没有太大的变化, 相位衬度传递函数在低频第一个峰值便衬度反转, 实验表明过焦范围中较少有可需要的成象。

另外值得讨论的, 对于未知晶体或无定形分子物体。成象在相对结构容量的极大峰值上, 可使得在理论分辨范围内每一个频率(除去传递函数零值)都落在传递函数的主频带上。对于周期性的物体根据周期计算出相对结构容量选择失焦量是非常恰当的。上述判据, 也可以作为电子显微镜自动调焦的依据, 因为这种判据是直接从图象傅里叶变换功率谱上测算出来, 综合了各种随机因素, 特别是在  $0-3\Delta$  范围内, 相对结构容量曲线有很快的变化率, 如图5下面曲线所示。这是较人眼判断要灵敏得多, 这种判据所确定离焦很准确。同样也适合于带非对称旋转象差的显微象。

作者与 S. Boseck 教授, 李方华教授进行了有益的讨论, 李方华教授并对本文提出修改意见, 在此表示感谢。

本实验所用样品由 Max-Planck-Ges 西柏林 Fritz-Haber 电子显微镜研究所 K. Weiss 和 W. Kunath 先生提供。

- [ 1 ] E. H. Linfoot, *Fourier Methods in Optical Image Evaluation*, The Focal Press, London and New York, (1964), p30.
- [ 2 ] R. Eusemann, H. Rose, *Ultramicroscopy*, 9(1982), 85.
- [ 3 ] X. Q. Shen, S. Boseck, *Optik*, 68(1984), 17.
- [ 4 ] H. Formanek, E. Knapek, *Ultramicroscopy*, 4(1979), 77.
- [ 5 ] G. W. Stroke, M. Halioua, F. Thon, D. H. Willasch, *Proc. IEEE*, 65(1977), 39.
- [ 6 ] X. Q. Shen, S. H. Zheng, F. H. Li, S. Boseck, *Optik*, 79(1988), 171.
- [ 7 ] H. Block, S. Boseck, *Optik*, 75(1986), 1.

## A STUDY ON IMAGE QUALITY DEPENDING ON DEFOCUSING HREM WITH IMAGE QUALIFICATION THEORY OF LINFOOT

SHEN XIAO-QING

*(Shanghai Institute of Mechanical Engineering)*

### ABSTRACT

Using image qualification theory of Linfoot, we studied the defocusing character of imaging of weak phase object in HREM. The power spectrum of electron micrographs of an amorphous carbon thin foil specimen of 10  $\mu\text{m}$  thick is measured from which the distribution of the relative structural content is determined. It is further verified by numerical analysis. The correlation factor, the image fidelity, the choice of the defocus amount in the electron microscope for the unknown crystal objects and automatic focusing is discussed.

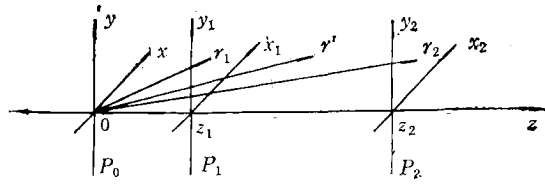


图 1

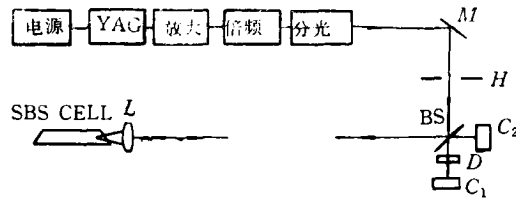


图 2

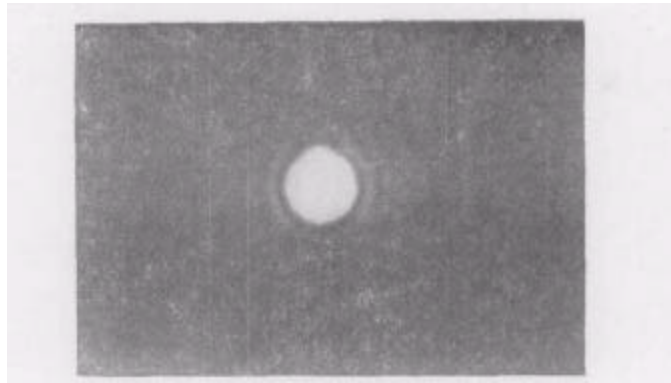


图 3

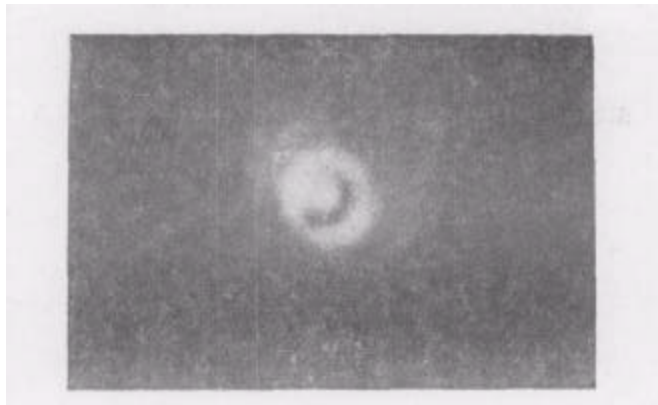


图 4



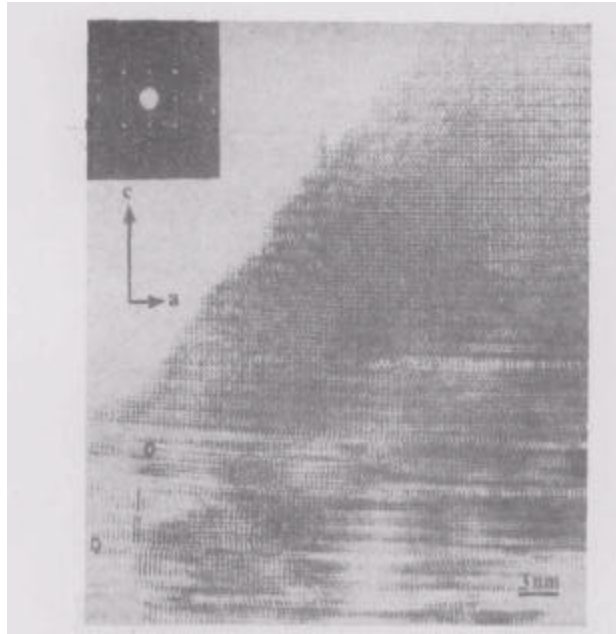


图1 NdBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-x</sub> [010] 方向晶格象,对应缺陷较多的区域

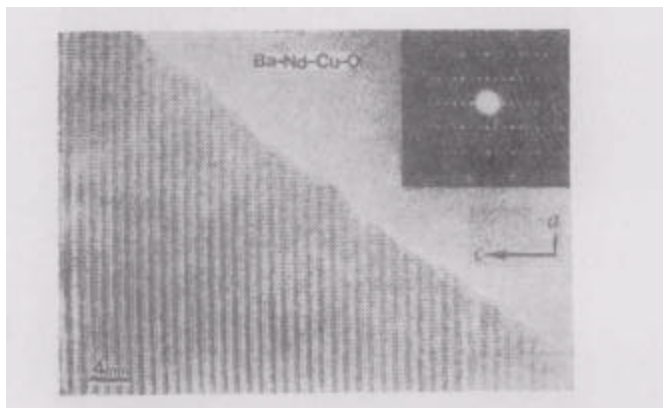


图2 NdBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-x</sub> [010] 方向结构象,对应于较完整的区域

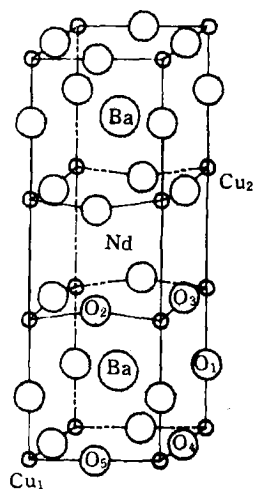


图3 NdBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-x</sub> 的结构模型图

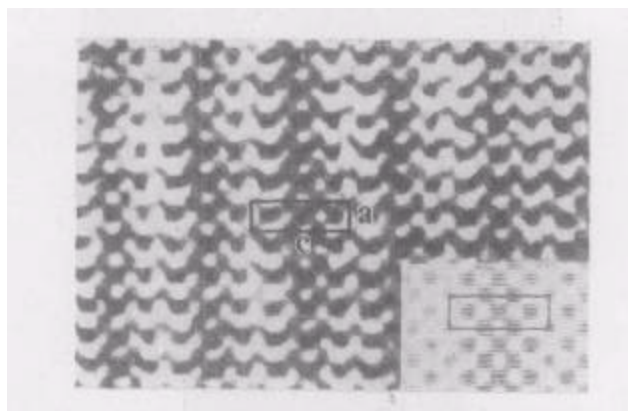


图4 对应图2 边缘区域的放大象和相应的计算机模拟象

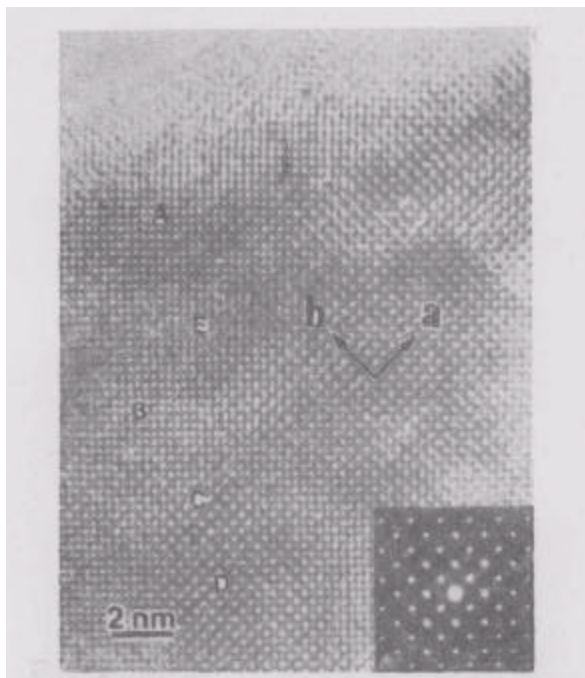


图5 NdBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-δ</sub> [001] 方向结构象

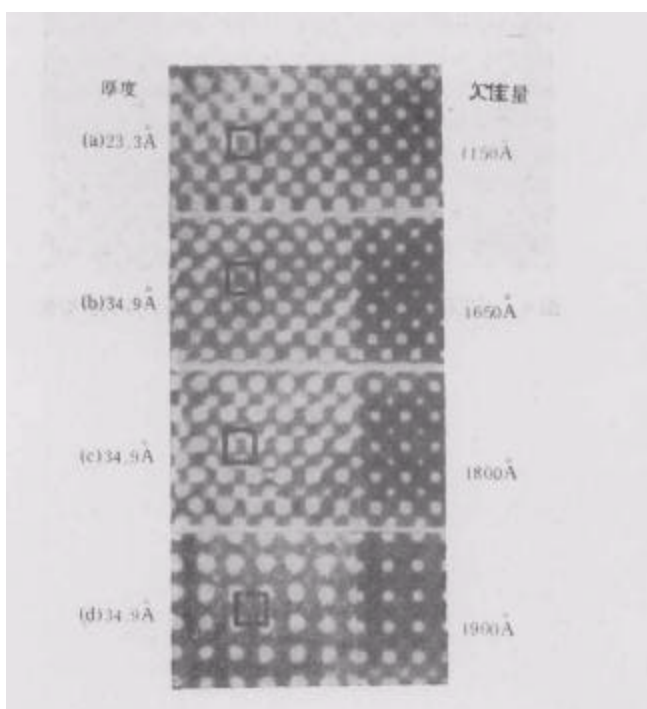


图6 对应于图5各区域的放大象及计算机模拟象