

基于离散 Fourier 变换的内源全息图重构计算方法^{*}

王 越^{1,2)} 朱佩平¹⁾ 郑 欣¹⁾ 袁清习¹⁾ 田玉莲¹⁾ 黄万霞¹⁾ 吴自玉¹⁾

¹⁾中国科学院高能物理研究所,北京 100039)

²⁾中国科学院研究生院,北京 100039)

(2004 年 5 月 14 日收到,2004 年 6 月 15 日收到修改稿)

对基于离散 Fourier 变换的内源全息图重构计算方法作了深入系统的分析,讨论了如何计算整个球面全息图对原子重构像的贡献,克服了以往该方法只能计算半个球面全息图的不足,并运用采样定理知识,分析了全息图的采样率、重构像的空间范围和分辨率等问题.

关键词:内源全息术,离散 Fourier 变换,采样定理,同步辐射

PACC:4240K,4230K,0260,2920L

1. 引 言

Gabor^[1]提出的全息思想早在宏观领域获得了广泛应用,它能用二维介质记录物体的三维景象.1986 年,Szöke^[2]将全息术引入晶体结构分析中,提出了内源全息术,它能够将原子的三维空间排列以二维全息图的形式记录下来,并且同时记录了振幅和相位信息,不存在长期困扰晶体衍射方法的相位问题.由于它通过对内源全息图的数字重构,能把晶体原子的空间排列直观地展示出来,不需要因无法获得相位信息而猜测,引起了人们极大兴趣.利用光电子^[3]和 x 射线荧光^[4]的内源全息实验相继获得成功.

1988 年,Barton^[5]在研究光电子全息时,提出了内源全息图的基本重构计算方法.一种是利用 Helmholtz-Kirchhoff 定理的积分求和方法,该方法被很多人采用^[6-8],其特点是编程简单,很容易计算整个球面全息图的贡献,但是计算速度慢.另一种是利用 Fourier 变换方法,虽然编程较复杂,但可以利用快速 Fourier 变换,一些现代科学计算语言已把 Fourier 变换子程序用机器语言编写,计算速度非常快,对于全息实验数据的快速处理和全息理论数值计算模拟都非常有益,因而也有一些人采用这种计算方法^[9,10],但一直都是将半个球面全息图投影在平面上后做 Fourier 变换,只计算了半个球面全息图的贡献.事实上,如本文下面所述,从半个球面全息

图的平面投影的 Fourier 变换是可以计算出整个球面全息图的贡献的.我们对后一种计算方法的改进克服了只计算半个球面全息图的不足.本文对这种基于离散 Fourier 变换的内源全息图重构计算方法进行了深入分析,详细讨论了全息图的离散化和离散 Fourier 变换的应用,并结合采样定理相关知识,对全息图的采样率、重构像的空间范围和分辨率等问题进行了分析.

有关内源全息术基本原理的数学解析描述可参考文献 [11].文中所用到的连续和离散 Fourier 变换知识可参考文献 [12].

2. 从连续到离散

在频域中,设 k 为从原点到半径为 $|k| = \frac{2\pi}{\lambda}$ 的球面上点的波矢量,全息图在这个球面上的分布为 $\chi(k) d\sigma_k$ 为球面上 k 处的小面积元.在仍以全息图球面的球心为原点的空域中,在空间位置矢量为 r 点上的描述原子存在概率的波函数 $U(r)$ 可用下式从 $\chi(k)$ 算出:

$$U(r) = \iint \chi(k) \exp(-ik \cdot r) d\sigma_k. \quad (1)$$

上式是对整个球面全息图积分的. Barton 在重构光电子全息图时,提出可以将半个球面全息图投影到平面上,这样可以应用快速 Fourier 变换^[5].把矢量 k

^{*} 国家自然科学基金(批准号 60477006)资助的课题.

[†] E-mail: zhupp@mail.ihep.ac.cn

[‡] E-mail: wuzy@mail.ihep.ac.cn

和 r 分别用频域中直角坐标系中的点 (k_x, k_y, k_z) 和空域中直角坐标系中的点 (x, y, z) 表示, 两坐标系原点都在球心上, k_x, k_y, k_z 轴分别与 x, y, z 轴重合, 可以把球面全息图任意分成两个半球, 同时投影到一个平面上, 计算它们的贡献之和, 即

$$U(x, y, z) = \iint_{k_z > 0} \frac{\chi_+(k_x, k_y)}{|k_z/k|} \exp(-ik_z z) \times \exp[-i(k_x x + k_y y)] dk_x dk_y + \iint_{k_z < 0} \frac{\chi_-(k_x, k_y)}{|k_z/k|} \exp(-ik_z z) \times \exp[-i(k_x x + k_y y)] dk_x dk_y \quad (2)$$

其中 $\chi_+(k_x, k_y)$ 和 $\chi_-(k_x, k_y)$ 分别为 $k_z > 0$ 和 $k_z < 0$ 频域内两个半球面全息图在 (x, y) 平面上的投影全息图.

$$|k_z/k| = |\pm \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2}/k|$$

为面积元 $d\sigma_k$ 与 $dk_x dk_y$ 之间夹角的余弦^[11], Barton 在其文章中遗漏了这个因子^[5]. (2) 式中两个积分项显然可以看作是 Fourier 变换. 空间反演操作对晶体点阵而言是对称操作, 所以根据对称性原理, 全息图至少也是空间反演对称的, 即

$$\chi(k) = \chi(-k)$$

或

$$\chi_-(k_x, k_y) = \chi_+(-k_x, -k_y). \quad (3)$$

注意到 Fourier 变换的反转和复共轭性质, 如果 $f(t)$ 与 $F(w)$ 互为 Fourier 变换对, 即

$$\tilde{F}\{f(t)\} = F(w),$$

则

$$\tilde{F}\{f^*(-t)\} = \tilde{F}^*[-(-w)] = F^*(w).$$

再利用 (3) 式可以看出, 如果把 (2) 式等号右端第一项待做 Fourier 变换的部分先改变自变量 k_x, k_y 的符号, 然后取复共轭, 就得到 (2) 式等号右端第二项, 因而 (2) 式中两项做 Fourier 变换后的结果应互为共轭, 这样它们的和是实数, 为其中任何一个 Fourier 变换结果的实部的两倍, 即

$$U(x, y, z) = 2\text{Re} \left[\iint_{k_z > 0} \frac{\chi_+(k_x, k_y)}{|k_z/k|} \exp(-ik_z z) \times \exp[-i(k_x x + k_y y)] dk_x dk_y \right]. \quad (4)$$

所以只利用半个球面全息图进行重构, 仍然可以获得整个球面全息图的贡献, 弥补了以往计算方法少计算了半个球面全息图的不足. 从 Barton 开始一直都

是取 (4) 式中中括号内部分的模, 而现在我们看到实际上取其实际部恰好可以获得整个球面全息图的贡献.

以下只考虑 (4) 式中中括号内的积分式的计算, 设其为 $U_1(x, y, z)$, 再设

$$\chi_1(k_x, k_y, z) = \begin{cases} \frac{\chi_+(k_x, k_y)}{k_z/k} \exp(-ik_z z) & k_x^2 + k_y^2 \leq \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \\ 0 & k_x^2 + k_y^2 > \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \\ & \text{且 } k_x, k_y \in \left[-\frac{2\pi}{\lambda}, \frac{2\pi}{\lambda}\right], \end{cases} \quad (5)$$

则

$$U_1(x, y, z) = \iint_{-2\pi/\lambda}^{2\pi/\lambda} \chi_1(k_x, k_y, z) \times \exp[-i(k_x x + k_y y)] dk_x dk_y \quad (6)$$

这里通过填充零值的方式, 把圆形的全息图投影扩展成正方形, 这样便于做二维离散 Fourier 变换. 为简化起见, 选择新的单位制: 对于 k_x, k_y, k_z , 新单位制中 $2/\lambda = 1$, 对于 x, y, z , 新单位制中 $\lambda = 1$, 则 (6) 式变成

$$U_1(x, y, z) = \iint_{-1/2}^{1/2} \chi_1(k_x, k_y, z) \times \exp[-i2\pi(k_x x + k_y y)] dk_x dk_y. \quad (7)$$

把全息图在 (k_x, k_y) 平面内平移为

$$\chi'_1(k_x, k_y, z) = \chi_1\left(k_x - \frac{1}{2}, k_y - \frac{1}{2}, z\right),$$

根据 Fourier 变换第一平移定理, 可得

$$U_1(x, y, z) = \exp[i\pi(x + y)] \int_0^1 \chi'_1(k_x, k_y, z) \times \exp[-i2\pi(k_x x + k_y y)] dk_x dk_y, \quad k_x, k_y \in [0, 1]. \quad (8)$$

对连续函数 $\chi'_1(k_x, k_y, z)$ 进行采样, 离散化为二维序列

$$\chi'_1(m, n, s) = \chi'_1(m\Delta k_x, n\Delta k_y, s\Delta z) = \sum_m \sum_n \chi'_1(k_x, k_y, z) \delta(k_x - m\Delta k_x) \times \delta(k_y - n\Delta k_y),$$

Δk_x 和 Δk_y 为采样率, m 和 n 为非负整数, $z = s\Delta z$ 作为一个参数出现. 对 $\chi'_1(m, n, s)$ 做离散 Fourier 变换, 得到

$$F(p, q, s) = \frac{1}{N^2} \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} \chi'_1(m, n, s) \times \exp\left[-i2\pi\left(\frac{m}{N}p + \frac{n}{N}q\right)\right], \quad (9)$$

其中 $p, q = 0, 1, 2, \dots, N-1, s$ 取为整数,我们暂时只在全息图的定义域内取 $N \times N$ 个样本,即 $N\Delta k_x = N\Delta k_y = 1$,所以 $F(p, q, s)$ 的采样率 $\Delta x = 1/(N\Delta k_x) = 1, \Delta y = 1/(N\Delta k_y) = 1$,注意到 $1/N = \Delta k_x \Delta x = \Delta k_y \Delta y$,可以计算这样一个二维序列

$$\begin{aligned}
 U_1(p, q, s) &= \exp[i\pi(p\Delta x + q\Delta y)] \\
 &\times \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} \chi'_1(m, n, s) \\
 &\times \exp[-i2\pi(m\Delta k_x p \Delta x + n\Delta k_y q \Delta y)] \Delta k_x \Delta k_y \\
 &= \frac{\exp[i\pi(p\Delta x + q\Delta y)]}{\Delta x \Delta y} \\
 &\times \frac{1}{N^2} \sum_{m=0}^{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} \chi'_1(m, n, s) \\
 &\times \exp\left[-i2\pi\left(\frac{m}{N}p + \frac{n}{N}q\right)\right] \\
 &= \exp[i\pi(p + q)]F(p, q, s). \tag{10}
 \end{aligned}$$

显然(8)和(10)式有相似的形式(10)式是(8)式的离散形式,所以可以根据采样定理插值公式,通过二维序列 $U_1(p, q, s)$ 还原为 $U_1(x, y, z)$,事实上,只需把二维序列 $U_1(p, q, s)$ 以图形方式显示在计算机屏幕上即可,没有进行繁琐的插值计算的必要.

3. 扩展域上的重构像

按照离散 Fourier 变换的定义,用定义在域 $m, n \in [0, N-1]$ 上的函数,计算出的离散 Fourier 变换是定义在域 $p, q \in [0, N-1]$ 上的,所以(10)式 p, q 都是非负整数,而 $U_1(x, y, z)$ 中 x, y 围绕原点既可取正值,也可取负值,因此要考察离散 Fourier 变换在定义域外的扩展域上的值.序列的离散 Fourier 变换当项数取负值时,可以从定义域上的离散 Fourier 变换得到,即有 $F(-j) = F(N-j)$,这样就可以把(10)式在扩展域上取值,得到

$$\begin{aligned}
 &U_1(p, q, s) \\
 &\left[\begin{array}{ll} \exp[i\pi(p + q)]F(p, q, s) & p, q \in [0, \Omega] \\ \exp[i\pi(p + q)]F(N + p, q, s) & p \in [-\Omega, 0], \\ & q \in [0, \Omega] \\ \exp[i\pi(p + q)]F(p, N + p, s) & p \in [0, \Omega], \\ & q \in [-\Omega, 0] \\ \exp[i\pi(p + q)]F(N + p, N + q, s) & p \in [-\Omega, 0], \\ & q \in [-\Omega, 0], \end{array} \right. \\
 &\tag{11}
 \end{aligned}$$

其中 $\Omega = \left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor$ 表示刚好小于或等于 $\frac{N}{2}$ 的整数.离散 Fourier 变换在扩展域上的值并不是新东西,而是定义域上的值平移整数倍周期得到的,所以现在 $U_1(p, q, s)$ 的样本数仍然还是 $N \times N$ 个.按照我们选取的 $\lambda = 1$ 的单位制,可以看出只能重构出 $x, y \in [-\Omega\lambda, \Omega\lambda]$ 范围内的原子像.然而在利用(1)式的积分求和重构算法中,似乎可以计算空间中任何处的原子像,至少难以获知多大范围内的重构像准确可信. Fourier 变换在原子像重构中不仅仅是一种提高计算速度的数学技巧,它与采样定理一起,揭示了对于一张给定的全息图,究竟多大范围内的原子像可以被准确重构.从物理上看,只能在有限空间内重构原子像显然是实验数据采集精度或者是可被记录的全息条纹最高空间频率有限的结果.能准确重构的范围大小取决于样本数 N 或者采样率 Δk ,只有根据全息图条纹的空间频率和衬度在 Fourier 变换和采样定理的指导下对它们进行合适的选取,才能在实验和重构中确定重构范围,保证精度的同时,避免不必要的数据采集和数值计算.

4. 全息图采样率 Δk 的选取

由于距发光原子较近的散射原子对全息图的形成贡献较大,所以通常只能重构出离原点几个晶格常数范围内的原子像,随着距离增大,原子像的“亮度”显著减弱,甚至看不到,因而可以认为 $U_1(x, y, z)$ 在有限的区间外几乎为零,即 $\chi'_1(k_x, k_y, z)$ 差不多是带限函数.根据采样定理可知,若 $U_1(x, y, z)$ 的值域为 $x, y \in [-\Omega, \Omega]$,则对 $\chi'_1(k_x, k_y, z)$ 的采样率 Δk_x 和 Δk_y 至少应达到 $\frac{1}{2\Omega}$,实际中为取得更好效果,通常可选取为该值的 $1/10$,即

$$\Delta k_x = \Delta k_y = \frac{1}{10} \frac{1}{2\Omega}. \tag{12}$$

例如,期望能够在 $x\lambda, y\lambda \in [-6.4\lambda, 6.4\lambda]$ 范围内得到可信的原子重构像,则按(12)式 Δk_x 和 Δk_y 应取为 $\frac{1}{128}$,注意到 $N = \frac{1}{\Delta k \Delta x} = \frac{1}{\Delta k}$,可得 $N = 128$,所以为了保证 x 和 y 方向正负 6.4 个波长范围内的原子像能被准确重构,应对平面投影全息图 $\chi'_1(k_x, k_y, z)$ 按 128×128 个样本等间距采样.这里有意使 N 为 2 的整数次幂是因为可以提高快速 Fourier 变换的计算速度.(12)式不仅指明了进行重构数值计算

时应如何离散采样,而且为实验数据采集提供了依据,在球面上进行数据采集,必须使全息图投影到平面上后能达到(12)式规定的采样率.

5. 重构原子像的采样率

选取了 $\lambda = 1$ 的单位制后,重构原子像的采样率 $\Delta x = \Delta y = 1$,所以样本间隔 Δx 和 Δy 为一个波长,这并不是选取新单位制造成的,而是做形如(9)式定义的 Fourier 变换得到的,频域和空域中的采样率 Δk_x 和 Δk_y , Δx 和 Δy 总具有 $\Delta k_x \Delta x = \Delta k_y \Delta y = 1/N$ 的关系.如果希望样本间隔 Δx 和 Δy 缩小,可以在保持 Δk_x 和 Δk_y 不变的情况下增大 N ,例如,希望 $\Delta x = \Delta y = \frac{1}{2}$,则只须将样本数扩大为 2^2 倍,变为 $2N \times 2N$ 个(9)式变为

$$F(p, q, s) = \frac{1}{4N^2} \sum_{m=0}^{2N-1} \sum_{n=0}^{2N-1} \chi'_1(m, n, s) \times \exp\left[-i2\pi\left(\frac{m}{2N}p + \frac{n}{2N}q\right)\right]. \quad (13)$$

这里需要将 $\chi'_1(m, n, s)$ 的定义域扩大,并填充零值,成为

$$\chi''_1(m, n, s) = \begin{cases} \chi'_1(m, n, s) & m, n \in [0, N-1], \\ 0 & m \text{ 或 } n \in [N, 2N-1]. \end{cases} \quad (14)$$

虽然用这种方法填充不同数量的零值,可以使 Δx 和 Δy 取为不同的数值,但并不意味着可以任意提高重构像的分辨率,被测物体的尺度与探测它所用的光的波长相比越小,测量就越困难.缩小采样间隔 Δx 和 Δy ,只会使离散函数 $U_1(p, q, s)$ 的轮廓更加接近连续函数 $U_1(x, y, z)$,但并不会使 $U_1(x, y, z)$ 对客观世界的描述的近似程度有任何改变,在没有扩大定义域和填充零值之前,采样定理的插值公式就已经把与离散函数相对应的连续函数的所有轮廓与细节确定下来了.在实际计算中,也可以使用其他常用的插值方法,得到具有较小样本间隔的原子重构像.

6. 全息图重构计算结果

图1是模拟计算的面立方点阵的全息图.计算了堆积在一起的8个晶胞共63个原子的贡献,波长与晶格常数之比为0.33,全息图基本是按下式所

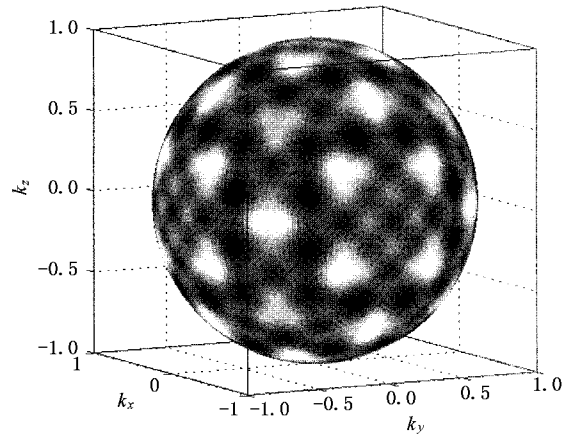


图1 模拟计算的面立方点阵全息图

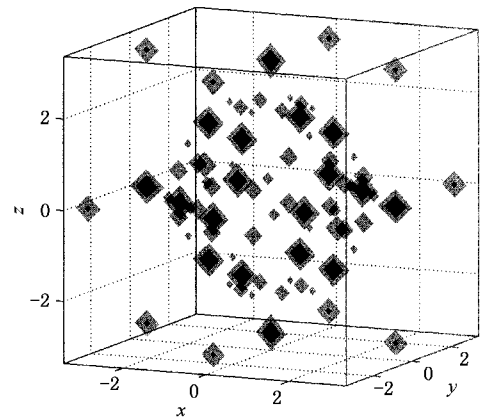


图2 对图1进行重构所得三维原子像

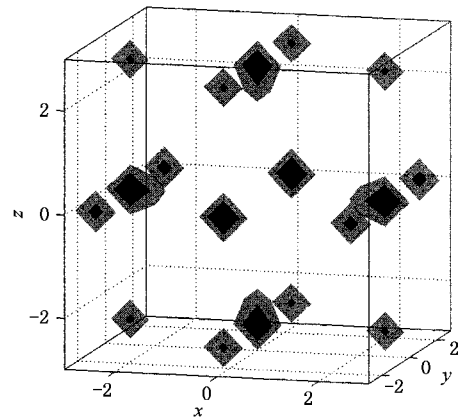


图3 对波长与晶格常数之比为0.4时的全息图进行重构所得原子像

示简单模型计算:

$$\chi(\mathbf{k}) = \sum_j \frac{1}{r_j} \cos(r_j k - \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{k}), \quad (15)$$

其中 r_j 为第 j 个原子相对于发光原子的位置. 图 2 是对其进行重构所得的三维原子像. 图 3 是对波长与晶格常数之比改为 0.4 时的全息图进行重构所得的原子像, 初看起来像是简单立方点阵, 实际上这时发生了孪生像相消的现象, 即处于面心位置 r_n 的原子满足了 $kr_n = (2l+1)\frac{\pi}{2}$ ($l=0, 1, 2, \dots$) 的条件^[6], 因而看不到了. 例如图 4 是我们对 Kopecky 等人实

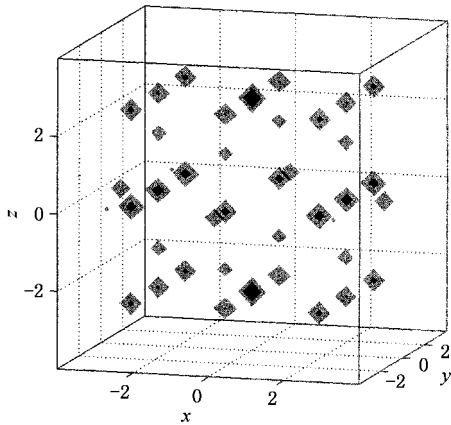


图 4 对 Kopecky 等人实验拍摄的 CoO 全息图^[7]进行重构所得三维原子像

验拍摄的 CoO 全息图^[7]进行重构所得的三维原子像, 它与图 3 较相似, 该实验中波长与晶格常数之比就约为 0.4. 图 2 至图 4 均为三维等值面图, 黑色的面是值为 $|U(p, q, s)|^2$ 最大值的 1/2 的点构成的等值面, 半透明的灰色的面是值为 $|U(p, q, s)|^2$ 最大值的 1/4 的点构成的等值面.

7. 结 论

基于离散 Fourier 变换的内源全息图重构计算方法, 同样可以计算整个球面全息图的贡献, 这种重构计算方法可以利用快速 Fourier 变换获得较快的计算速度. Fourier 变换不仅仅是一个提高计算速度的数学工具, 它的应用使人们能在采样定理的帮助下, 方便地考察全息图的采样率、重构像的空间范围和分辨率等问题, 能为实验设计提供一定参考依据. 对模拟全息图和国外实验全息图进行重构, 获得了较好的原子重构像, 为在北京同步辐射装置开展具有原子分辨率的 x 射线内源全息实验, 做好了数据处理方面的准备.

- [1] Gabor D 1948 *Nature* **161** 777
- [2] Szöke A 1986 *Short Wavelength Coherent Radiation: Generation and Applications* ed by D T Attwood and J Boker (New York: ATP) p 361
- [3] Harp G R, Saldin D K and Tonner B P 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 1012
- [4] Tegze M and Faigel G 1996 *Nature* **380** 49
- [5] Barton J J 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 1345
- [6] Len P M *et al* 1994 *Phys. Rev. B* **50** 11275
- [7] Kopecky M *et al* 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 2985
- [8] Kopecky M, Lausi A, Busetto E, Kub J and Savoia A 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 185503
- [9] Saldin D K and Andres P L 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 1270
- [10] Thevuthasan S, Ynzunza R X and Tober E D 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 595
- [11] Zhu P P *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2800 (in Chinese) [朱佩平等 2004 *物理学报* **53** 2800]
- [12] Weaver H J 1983 *Applications of Discrete and Continuous Fourier Analysis* (New York: Wiley)

Study on the inside source hologram reconstruction algorithm based on discrete Fourier transform *

Wang Jun-Yue^{1)‡} Zhu Pei-Ping^{1)†} Zheng Xin¹⁾ Yuan Qing-Xi¹⁾
Tian Yu-Lian¹⁾ Huang Wan-Xia¹⁾ Wu Zi-Yu^{1)‡}

¹⁾*(Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)*

²⁾*(Graduate School, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)*

(Received 14 May 2004; revised manuscript received 15 June 2004)

Abstract

The inside source hologram reconstruction algorithm based on discrete Fourier transform was investigated in detail, and how to calculate the contribution of whole spherical hologram to the reconstructed image of atoms was demonstrated in this algorithm, which was previously regarded to be capable of calculating only half of the spherical hologram. Using the sampling theorem in this issue, we are able to examine such essential factors as the sampling rate of the hologram, domain and resolution of reconstructed image.

Keywords : inside source holography, discrete Fourier transform, sampling theorem, synchrotron radiation

PACC : 4240K, 4230K, 0260, 2920L

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.60477006).

† E-mail : zhupp@mail.ihep.ac.cn

‡ E-mail : wuzi@mail.ihep.ac.cn