

X 射线荧光全息术中消除光源偏振效应 和孪生像的重构新算法*

谢红兰[†] 胡 雯 罗红心 杜国浩 邓 彪 陈荣昌 薛艳玲 师绍猛 肖体乔

(中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201800)

(2007 年 9 月 3 日收到, 2008 年 5 月 16 日收到修改稿)

以 27 个铁原子成立方排列的晶体结构为模型, 通过数值模拟和重构, 讨论了入射光源的偏振性对原子像的影响. 结果表明, 入射光源的偏振性对原子像的可观测性有非常重要的影响. 为此, 提出了一种能同时消除光源偏振性影响和全息成像所固有的孪生像的数字重构新算法, 并通过数字模拟及重构, 结果证明了这是一种有效的数字重构算法, 能够解决实验过程中光源偏振性和孪生像对原子像的影响.

关键词: X 射线荧光全息术, 同步辐射, 偏振性

PACC: 6110M, 4240K, 2920L, 4230K

1. 引 言

我们感知周围事物一个最重要的信息就是它们在三维空间的结构分布. 不仅宏观物体, 微观物体也是如此. 运用衍射方法, 大部分物质的结构信息能被获知. 虽然衍射存在所谓的位相问题, 但 Miao 等人^[1]于 1999 年提出了在傅里叶空间过采样的方法, 已经能够使衍射法获得样品的相位信息. 除了衍射方法能够得到物体的三维结构信息外, 1948 年 Gabor^[2]提出的全息术也能够重现物体的波前, 从而得到物体的三维结构信息. 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. 科学家们一直致力于研究提高全息成像的分辨率, 试图在原子水平上去观察样品内部的三维结构分布. 而全息成像的分辨率受两个因素制约: 一个是波长, 除了波长外, 全息成像的分辨率由全息图的数值孔径决定, 也就是说全息图必须记录到足够大的样品相干散射光锥.

为克服这些限制, 在原子水平上看到物质的内部结构, Szöke^[3]在 1986 年提出了内源全息术的概念. 他建议把样品内部的原子作为光源, 这样发光原子和散射原子之间的干涉可以形成数值孔径足够大的全息图, 并使全息图的重建达到原子分辨率. 在外

场激发下, 样品内部的每个受激发射出荧光 X 射线或 γ 射线或光电子的原子都可以作为相干光源, 直接到达探测器的光波与经周围原子散射后到达探测器的光波相干涉, 当探测器以发光原子为中心在 4π 立体角范围内进行扫描, 就可以记录到整张发光原子周围邻近原子的全息图. 再通过计算机数字重构就可以得到发光原子周围的邻近原子在三维实空间的分布信息. 这种荧光全息术因为把样品内部的荧光原子作为光源, 所以被称为内源全息术, 而它的逆光路则被称为内探测器全息术, 也可以称之为逆全息术, 而内源全息术也可以称为正全息术. 因为成像分辨率能达到原子水平, 最近的几年里, X 射线荧光全息术已成为一大研究热点, 国内外的几个研究小组在这一领域已取得相当的进展^[4-23], 获得了高达 0.01 nm 的三维成像分辨率^[4], 而这是现有的其他成像技术所达不到的; 而且这种技术不仅仅可以应用在单晶样品^[4-11] (比如 SrTiO_3 单晶、CoO 单晶、 Cu_3Au 单晶、GaAs 单晶等), 还可以应用到掺杂单晶样品^[12, 13] (比如掺杂了 200 ppm 的 Zn 的 GaAs 单晶等)、准晶体样品^[14] (比如 $\text{Al}_{70.4}\text{Pd}_{21}\text{Mn}_{8.6}$ 准晶体等)、半导体合金和超导薄膜^[15, 16] (比如掺杂了 780 ppm 的 Cu 的硅钢和 FePt 薄膜等)上, 目前我们还打算和日本东北大学合作, 利用这种技术来实时观测记忆

* 国家自然科学基金(批准号: 10505028)资助的课题.

[†] E-mail: xiehonglan@sinap.ac.cn

金属 TiNiFe 和其他铁电材料如钛酸钡等随温度变化的相变过程中的原子排列的结构变化,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,而这些应用也是这种技术比 X 射线晶体衍射更具优越性的具体体现。

为了同时得到在横向位置和纵向位置上原子最佳的重构像,理想的做法是采用非偏振光源。然而,在实际的 X 射线荧光全息术实验中,同步辐射 X 射线源被广泛选作入射 X 射线源,因为其具有连续可调谐性、高亮度、窄带宽等特点。而同步辐射源是一种高度线偏振光。在正全息术中,同步辐射 X 射线入射到样品上,激励样品内的原子发出荧光,参与干涉而形成全息图的参考波是由发光原子发出的 X 射线荧光,而物波是被发光原子周围的邻近原子散射的 X 射线荧光。因为被原子散射的是 X 射线荧光,而 X 射线荧光是非偏振光,可以近似为理想球面波,所以不必考虑入射 X 射线源的偏振性对原子像的影响。而在逆全息术中,参考波是入射的同步辐射 X 射线,物波是被探测原子周围的邻近原子散射的同步辐射 X 射线。物波和参考波在样品内部的探测原子附近发生干涉,干涉场激励探测原子发出荧光,荧光强度与干涉场强度成正比,探测原子受干涉场激发发出的荧光强度分布就是这个干涉场强度分布的一个直接记录,所以这个探测原子在逆全息术中是作为一个探测器的,这也是逆全息术被称作内探测器全息术的原因。在逆全息术中,物波是被原子散射的入射同步辐射 X 射线,而原子对 X 射线的散射的角度分布与光源的偏振方向和汤姆逊散射截面密切相关。而入射的同步辐射 X 射线是一种高度线偏振光,它的这种偏振性使得某些原子像强度增强或者减弱,严重影响到原子像的图像质量。因此,在逆全息术中,有必要讨论入射 X 射线的偏振性对原子像的影响并提出一种数字重构新算法来消除这种影响。

2. 入射 X 射线偏振性效应的理论描述

如图 1 所示,考虑一个平面单色波波长为 λ 的 X 射线源照射样品,一部分 X 射线直接入射到样品内部的一个原子上,该原子位置视作原点,外部 X 射线源距离该原子为 R ,这部分 X 射线视作参考波,可写成

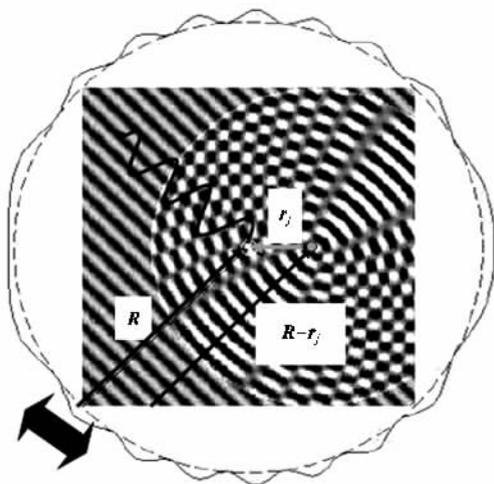


图 1 内探测器全息术的成像示意图

$$a_r = ae^{ikR}, \quad (1)$$

其中 a 为参考波的振幅, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ 。

另一部分 X 射线经过位于 r_j 处的原子散射后,以球面波的形式传播到达位于原点的原子,这部分 X 射线视作物波,可写成

$$\begin{aligned} O_j &= aF(\Theta_r^k)P(\Theta_r^k)e^{ik(R-r_j)}\frac{e^{ikr_j}}{r_j} \\ &\approx ae^{ikR}\frac{F(\Theta_r^k)P(\Theta_r^k)}{r_j}e^{i(kr_j-k\cdot r_j)}, \end{aligned} \quad (2)$$

其中, $F(\Theta_r^k)$ 是原子的散射因子, $P(\Theta_r^k)$ 是偏振因子, Θ_r^k 是散射角,即散射原子的位置矢量与入射光波矢的夹角。 $R - r_j$ 是散射原子到外部 X 射线源的距离,因为外部 X 射线源到样品的距离 R 远大于样品内部的原子间距 r_j ,因此可以采用近似 $|R - r_j| \approx R$, $R - r_j \approx R - r_j \cdot \hat{R} = R - r_j \cdot \hat{k}$ 。其中 $\hat{R} = \hat{k}$ 。散射因子可以查表得到^[24]。

将周围所有原子散射的 X 射线叠加求和,可得

$$\begin{aligned} O &= \sum_j O_j = ae^{ikR} \sum_j \frac{F(\Theta_r^k)P(\Theta_r^k)}{r_j} e^{i(kr_j-k\cdot r_j)} \\ &= ae^{ikR} \sum_j a_j, \end{aligned} \quad (3)$$

其中

$$\begin{aligned} a_j &= F(\Theta_r^k)P(\Theta_r^k)\frac{\exp(i kr_j - ik \cdot r_j)}{r_j} \\ &= (1/r_j)F(\Theta_r^k)P(\Theta_r^k)\exp[i(kr_j - r_j \cdot k)] \end{aligned}$$

是被单个散射原子散射的波幅。

设参考波的强度为

$$I_0 = |ae^{ikR}|^2, \quad (4)$$

参考波和物波在位于原点的原子处发生干涉,干涉场的强度为

$$\begin{aligned} K(\mathbf{k}) &= |a_r + O|^2 \\ &= I_0 \left| 1 + \sum_j a_j \right|^2 \\ &= I_0 \left[1 + 2\text{Re}(\sum_j a_j) + \left| \sum_j a_j \right|^2 \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

归一化后的全息图的强度分布为

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{k}) &= \frac{K(\mathbf{k}) - I_0}{I_0} \\ &= 2\text{Re}(\sum_j a_j) + \left| \sum_j a_j \right|^2. \end{aligned} \quad (6)$$

当入射光是非偏振光时,

$$P_{\text{unpolarized}}(\Theta_{r_j}^k) = \sqrt{\frac{(1 + \cos^2 \Theta_{r_j}^k)}{2}}, \quad (7)$$

其中, $\Theta_{r_j}^k$ 是散射角,即散射原子的位置矢量与入射 X 射线波矢的夹角.

当入射光是偏振光时,

$$P_{\text{polarized}}(\Theta_{r_j}^k) = \sqrt{\sin^2 \Theta_{r_j}^k}, \quad (8)$$

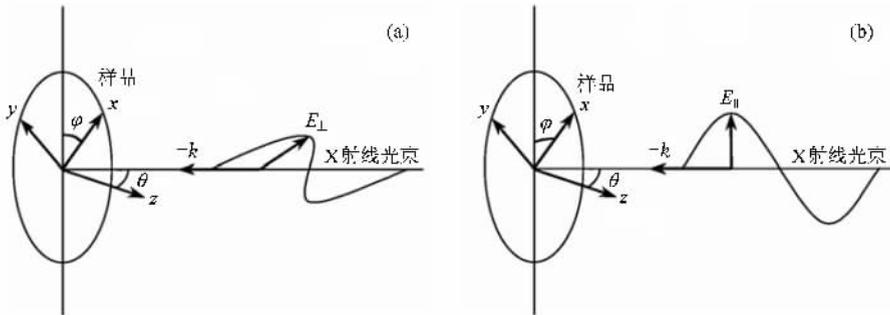


图 3 X 射线逆全息术的两种偏振光源入射的实验示意图 (a) P 偏振光入射 (b) S 偏振光入射

当偏振矢量 E_p 垂直样品极角 ϑ 的旋转轴时,如图 3(a) 所示,即入射光是 P 偏振光时,偏振因子为

$$\begin{aligned} P_{\text{polarized}}(\Theta_{r_j}^k) &= \sqrt{\sin^2 \Theta_{r_j}^k} \\ &= \sqrt{1 - \cos^2 \Theta_{r_j}^k} \\ &= \sqrt{1 - \frac{(\mathbf{E}_\perp \cdot \mathbf{r})^2}{E_\perp^2 r^2}} \\ &= \sqrt{1 - \frac{(x \cos \vartheta \sin \varphi + y \cos \vartheta \cos \varphi - z \sin \vartheta)^2}{r^2}}. \end{aligned} \quad (9)$$

当偏振矢量 E_p 平行样品极角 ϑ 的旋转轴时,如图 3(b) 所示,即入射光是 S 偏振光时,偏振因

其中 $\Theta_{r_j}^k$ 是入射 X 射线的偏振矢量与散射波矢的夹角. $\Theta_{r_j}^k$ 和 $\Theta_{r_j}^k$ 的几何关系见图 2, 其中 \hat{e}_p 是 P 偏振矢量, \hat{e}_s 是 S 偏振矢量.

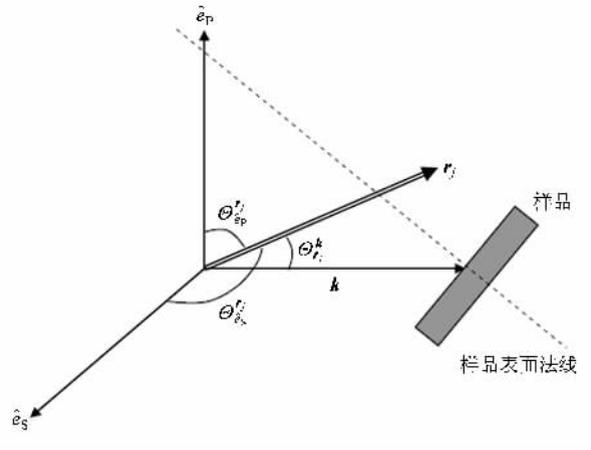


图 2 $\Theta_{r_j}^k$ 和 $\Theta_{r_j}^k$ 的几何关系图

现在我们考虑两种情况, P 偏振光和 S 偏振光入射.

子为

$$\begin{aligned} P_{\text{polarized}}(\Theta_{r_j}^k) &= \sqrt{\sin^2 \Theta_{r_j}^k} \\ &= \sqrt{1 - \cos^2 \Theta_{r_j}^k} \\ &= \sqrt{1 - \frac{(\mathbf{E}_\parallel \cdot \mathbf{r})^2}{E_\parallel^2 r^2}} \\ &= \sqrt{1 - \frac{(x \cos \varphi - y \sin \varphi)^2}{r^2}}, \end{aligned} \quad (10)$$

其中 $x, y, z, \vartheta, \varphi, \mathbf{k}, \mathbf{E}_\perp, \mathbf{E}_\parallel$ 的定义如图 3(a)(b) 所示. x, y, z 是样品在三维实空间的位置坐标, $\mathbf{r} = (x, y, z)$.

根据 Helmholtz-Kirchhoff 理论^[25], 全息图的数字重构^[26]能够表示为

$$U(\mathbf{r}) = \iint \chi(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\sigma_k, \quad (11)$$

其中, $d\sigma_k$ 为全息图球面的表面元. φ 为采样的方位角, 取角范围 $0\sim 360^\circ$, ϑ 为采样的极角, 取角范围 $0\sim 180^\circ$. k 空间的坐标系可表示为 $k_x = k \cos\varphi \sin\vartheta$, $k_y = \sin\varphi \sin\vartheta$, $k_z = \cos\vartheta$. 则(11)式可写为

$$U(x, y, z) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \chi(\vartheta, \varphi) e^{-i(k_x \sin\vartheta \cos\varphi + y \sin\vartheta \sin\varphi + z \cos\vartheta)} \times \sin\vartheta d\vartheta d\varphi. \quad (12)$$

3. 光源偏振性对原子像的影响

我们以 27 个铁原子成立方排列的晶体结构为模型, 通过数值模拟来讨论入射光源的偏振性对重构的原子像的影响.

图 4(a)–(c) 分别是该模型在非偏振光、S 偏振

光、P 偏振光入射三种情况下记录的全息图. 位于晶格中心的那个原子作为荧光原子, 其他原子作为散射原子. 荧光原子的位置视作原点, 入射波矢均为 8.0 \AA^{-1} .

图 4(d)–(f) 分别显示了由图 4(a)–(c) 中的全息图重构得到的 $z = 0$ 平面上的原子像. 图像上最亮的点代表原子. 根据模型, 在 $z = 0$ 平面上应该有 9 个原子, 然而在图 4(d)–(f) 上, 却只有四个很亮的点. $z = 0$ 平面中央的荧光原子未被成像. 而另外四个原子像的消失是因为孪生像的影响. 当散射原子与荧光原子的距离满足 $kr = \pi(2m + 1)/2$ 时, 该原子的真像与和它中心对称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. 其中 m 是一个不为零的正整数. 当 $k = 8.0 \text{ \AA}^{-1}$ 时, 原子 $(\pm 2.90 \text{ \AA}, \pm 2.90 \text{ \AA}, 0.00 \text{ \AA})$ 满足这样的条件, $m = 10$. 关于如何消除孪生像, 见文献 [22].

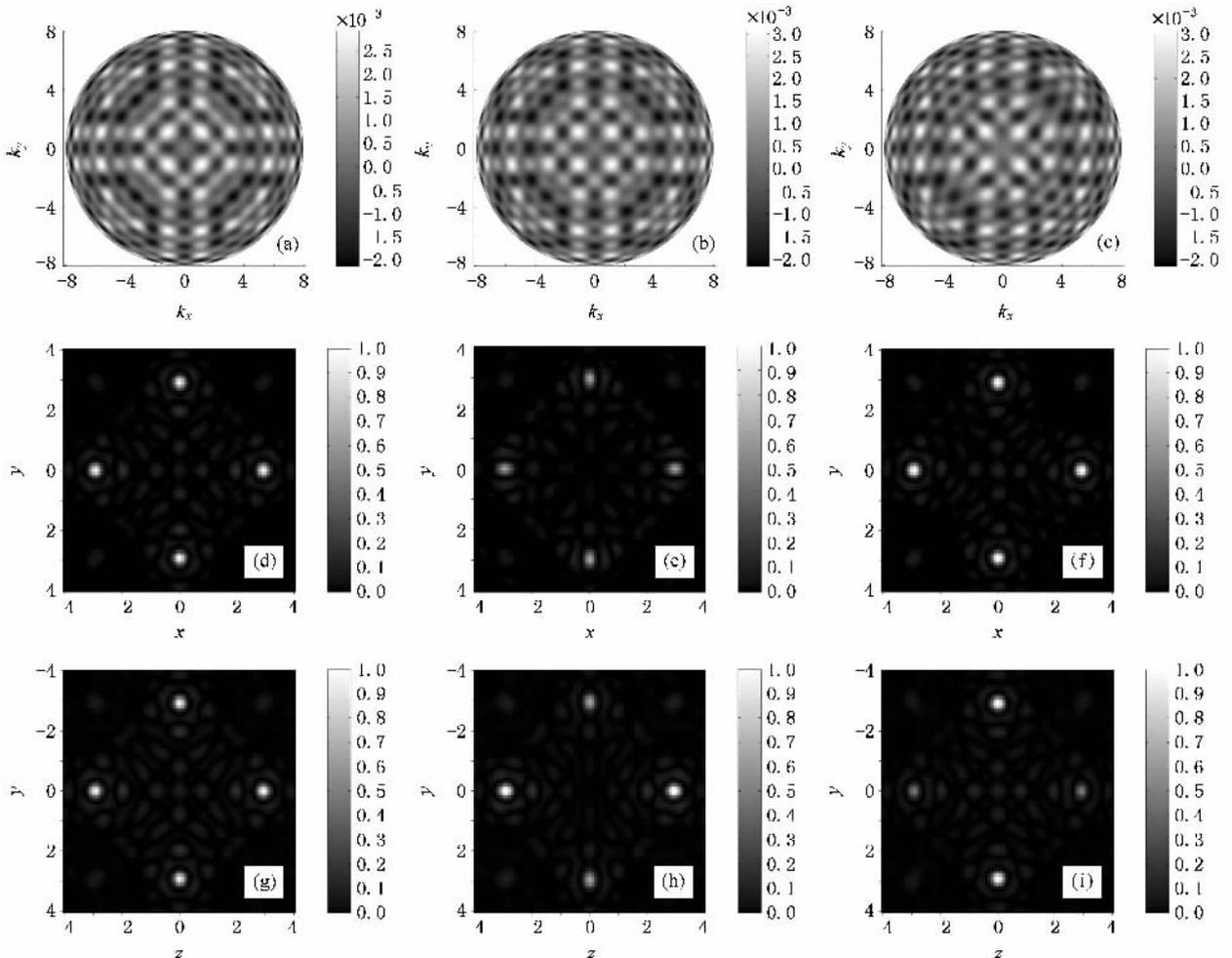


图 4 由 27 个 Fe 原子成立方排列的晶格结构在入射 X 射线 (a) 非偏振光 (b) S 偏振光 (c) P 偏振光三种情况下的全息图 (入射光源 $k = 8.0 \text{ \AA}^{-1}$) (d)–(f) 分别为三种光源入射情况下重构得到的 $z = 0$ 平面上的原子像 (g)–(i) 分别为三种光源入射情况下重构得到的 $x = 0$ 平面上的原子像

由图 4(d)–(f) 可以看到, S 偏振光入射与非偏振光入射所得到的 $z = 0$ 平面上的原子像相比, 原子像强度明显降低, 而且原子像呈现出明显的被拉长的现象. 而 P 偏振光入射所得到的原子像没有出现被拉长的现象, 而且原子像的强度大大增加.

图 4(g)–(i) 分别显示了由图 4(a)–(c) 中的全息图重构得到的 $x = 0$ 平面上的原子像. 可以看到在 $x = 0$ 平面上, S 偏振光使得 z 轴上的原子像变亮, y 轴上的原子像变暗, 而 P 偏振光使得 z 轴上的原子像变暗, y 轴上的原子像变亮.

根据我们对多散射原子模型的讨论可知, 入射光源的偏振性对原子像的影响具有方向选择性. 计算结果显示, S 偏振光入射将增强 [001] 晶向上的原子像, 而减弱 (001) 晶面上的原子像; P 偏振光入射将减弱 [001] 晶向上的原子像, 而增强 (001) 晶面上的原子像. S 偏振光对原子像的影响与 P 偏振光的影响正好相反.

4. 消除光源偏振性的影响及孪生像的新算法

前面我们通过数值模拟讨论了入射光源的偏振性对于内探测器全息成像的原子像的影响, 知道光源的偏振性对原子像的影响具有方向选择性. 因此, 为了得到理想的原子像, 必须要消除入射光源的偏振性对原子像的影响.

为了消除这种影响, 有人将物空间中 r_j 处的实际的偏振因子 $P(\Theta_j^r)$ 近似为像空间中 r 处的理论的偏振因子 $P(\Theta_c^r)$, 提出了一种修正的原子像重构算法^[27]为

$$U(\mathbf{r}) = \iint \frac{\chi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{P(\Theta_c^r)} d\sigma_k. \quad (13)$$

然而理论的偏振因子 $P(\Theta_c^r)$ 在某些区域中的区域接近零, 而无法实现(13)式中的修正.

另一个方法是用重构得到的 r 处的原子像强度除以 r 处的偏振因子的平均值, 其修正的重构算法^[27]为

$$U(\mathbf{r}) = \frac{\iint \chi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\sigma_k}{\iint P(\Theta_c^r) d\sigma_k}, \quad (14)$$

而这样得到的原子像和非偏振光入射时得到的原子像还是有差异的. 我们希望通过修正偏振光入射时重构的原子像, 得到近似非偏振光入射时得到的原

子像.

考虑偏振光入射时的原子像强度与非偏振光入射时的原子像强度的比值可以写成^[28]

$$R_{\text{enh}} = \frac{U_{\text{polarized}}(\mathbf{r})}{U_{\text{unpolarized}}(\mathbf{r})}, \quad (15)$$

这个强度比值不需要直接通过实验测量偏振光入射的全息图和非偏振光入射的全息图得到. 通过分析内探测器全息术的原子像的重构公式及偏振因子的表达式, 可以得到这个强度比的一个近似, 为

$$R_{\text{enh}} = \frac{U_{\text{polarized}}(\mathbf{r})}{U_{\text{unpolarized}}(\mathbf{r})} = \frac{\iint \sin(\Theta_c^r) d\sigma_k}{\iint \frac{\sqrt{1 + \cos^2(\Theta_k^r)}}{2} d\sigma_k}, \quad (16)$$

这样就可以得到消除了偏振性影响的原子像的强度为

$$U(\mathbf{r}) = \frac{U_{\text{polarized}}(\mathbf{r})}{R_{\text{enh}}}. \quad (17)$$

我们根据(16)和(17)式, 修正了图 4(e)–(f) 中的 S 偏振光和 P 偏振光入射得到的 $z = 0$ 平面上的原子像, 其修正后的原子像见图 5(a)–(b). 此外, 我们还修正了图 4(h)–(i) 中的 S 偏振光和 P 偏振光入射得到的 $x = 0$ 平面上的原子像, 其修正后的原子像见图 5(c)–(d). 将修正后的两种入射偏振光的原子像与非偏振光入射的原子像比较可知, 经过修正后, S 偏振光、P 偏振光和非偏振光三种光源入射情况下得到的原子像强度相当, 即表明了采用这种修正算法可以消除入射光源的偏振性对原子像的方向性选择的影响.

上面我们只是给出了单能量全息重构的原子像的修正结果, 得到的原子像虽然消除了偏振效应的影响, 但还是存在孪生像的现象. 为了得到一张理想的原子像, 我们将消除孪生像的两种重构算法与消除偏振效应的修正算法结合起来, 提出了既能消除孪生像又能消除偏振效应的影响的两种重构算法. 一种是将多重能量全息图重构算法^[26]与修正算法结合起来的三重能量全息修正重构算法, 重构的原子像强度可表示为

$$U(\mathbf{r}) = \frac{\iiint \chi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3 k}{R_{\text{enh}}} = \frac{\iiint \chi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3 k}{\frac{\iint \sin(\Theta_c^r) d^3 k}{\iint \frac{\sqrt{1 + \cos^2(\Theta_k^r)}}{2} d^3 k}}. \quad (18)$$

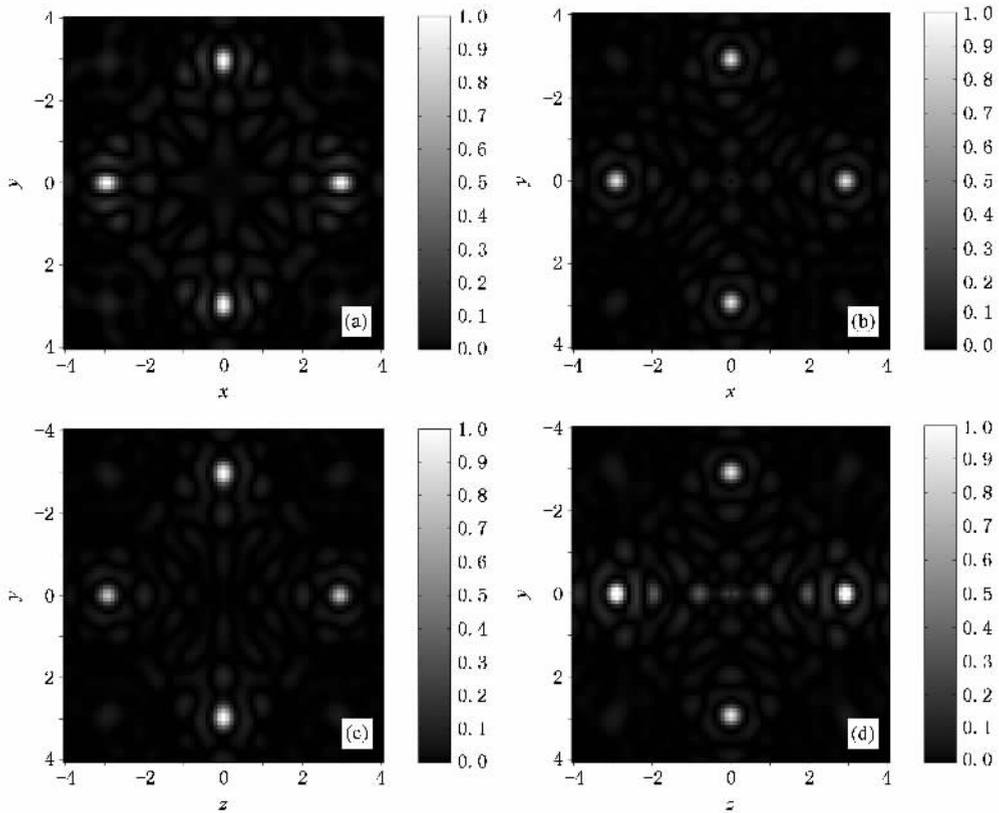


图 5 修正后的(a)S 偏振入射光情况下和(b)P 偏振入射光情况下的 $z = 0$ 平面上原子像;修正后的(c)S 偏振入射光情况下和(d)P 偏振入射光情况下的 $x = 0$ 平面上原子像

这种算法需要在不同的入射能量上记录一系列的荧光全息图,因此在实验上实现有一定的困难.一种是将消除孪生像的双能量全息重构算法^[9]与偏振效应修正算法结合起来,提出一种只需记录两张全息图就可以既消除孪生像又可以消除偏振效应的双能量全息修正重构算法,重构的原子像强度可以表示成

$$\begin{aligned}
 U(\mathbf{r}) &= \frac{U_{k_1}(\mathbf{r})e^{ik_1r} - U_{k_2}(\mathbf{r})e^{ik_2r}}{R_{\text{enh}}} \\
 &= \frac{U_{k_1}(\mathbf{r})e^{ik_1r} - U_{k_2}(\mathbf{r})e^{ik_2r}}{\frac{\iint \sin(\Theta_e^r) d\sigma_k}{\iint \frac{\sqrt{1 + \cos^2(\Theta_k^r)}}{2} d\sigma_k}}, \quad (19)
 \end{aligned}$$

其中 $U_{k_1}(\mathbf{r})$ 和 $U_{k_2}(\mathbf{r})$ 分别是由在入射能量 k_1 和 k_2 上记录的全息图重构的原子像.要使这个算法有效,记录全息图的两个入射能量要非常接近.

我们用双能量全息修正重构算法重构了 S 偏振光入射情况下的 27 个 Fe 原子立方排列的晶格结构的全息图,得到了该样品在 $x = 0$ 平面上的原子像,如图 6 所示.将它与图 4(h)比较,可以看到原来因

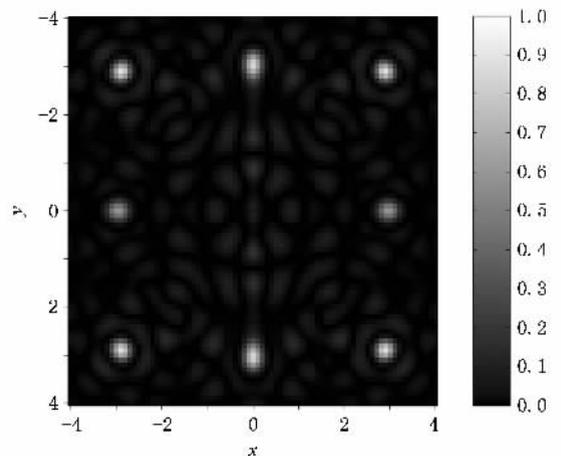


图 6 采用双能量修正重构算法得到的 S 偏振光入射情况下的 $x = 0$ 平面上的原子像

为孪生像现象消失的原子像出现在重构的图像平面上,而且原来在 y 轴上减弱的原子像,其强度增加.重构的图像平面上,八个原子的图像强度相当,可知采用这种修正重构算法,在消除了孪生像的同时,也消除了光源的偏振性对原子像的影响,能够得到清

晰准确的原子像.

5. 结 论

综上所述,我们首先给出了非偏振光、P 偏振光和 S 偏振光入射三种情况下偏振因子的表达式,并通过数值模拟详细讨论了入射光源的偏振性对重构原子像的影响.计算结果显示,入射光源的偏振性对于原子像的可观测性有着非常重要的影响.光源偏

振效应使得原子的亮度不均.而全息成像所固有的孪生像现象则不仅使原子像发生畸变,甚至会使真实的原子像消失.这两种现象严重干扰了原子像的真实再现.为了使原子像具有更好的可观测性,本文提出了一种能同时消除孪生像和入射光源的偏振性对原子像的影响的重构新方法,并通过数值模拟验证这一方法是可行的,这对于指导实验研究和实验数据的处理是非常有意义的.

- [1] Miao J W , Charalambous P , Kirz J , Sayre D 1999 *Nature* **400** 342
- [2] Gabor D 1948 *Nature* **161** 777
- [3] Szöke A 1986 *AIP Conf. Proc.* **147** (AIP , New York) 361
- [4] Kopecky M , Lausi A , Busetto E , Kub J , Savoia A 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 185503
- [5] Tegze M , Faigel G 1996 *Nature* **380** 49
- [6] Takahashi Y , Hayashi K , Matsubara E 2005 *Phys. Rev. B* **71** 134107
- [7] Adams B , Novikov D V , Hiort T , Materlik G 1998 *Phys. Rev. B* **57** 7526
- [8] Tegze M , Faigel G , Marchesini S , Belakhovsky M , Chumakov A I 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 4847
- [9] Nishino Y , Ishikawa T , Hayashi K , Takahashi Y , Matsubara E 2002 *Phys. Rev. B* **66** 92105
- [10] Spence J 2001 *Nature* **410** 1037
- [11] Korecki P , Szymoński M , Korecki J , et al 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 205501
- [12] Hayashi K , Matsui M , Awakura Y , Kaneyoshi T , Tanida H , Ishii M 2001 *Phys. Rev. B* **63** R41201
- [13] Hayashi K , Yamamoto T , Kawai J , Suzuki M , Goto S , Hayakawa S , Sakurai K , Gohshi Y 1998 *Anal. Sci.* **14** 987
- [14] Marchesini S , Schmithüsen F , Tegze M , Faigel G , Calvayrac Y , Belakhovsky M , Chevrier J , Simionovici A S 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 4723
- [15] Hayashi K , Takahashi Y , Yonenaga I , Matsubara E 2004 *Mater. Trans.* **45** 1994
- [16] Hayashi K , Hayashi T , Takahashi Y , Suzuki S , Matsubara E 2005 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **238** 192
- [17] Kopecky M , Busetto E , Lausi A , Miculin M , Savoia A 2001 *Appl. Phys. Rev. Lett.* **78** 2985
- [18] Bortolani V , Celli V , Marvin A M 2003 *Phys. Rev. B* **67** 24102
- [19] Hiort T , Novikov DV , Kossel E , Materlik G 2000 *Phys. Rev. B* **61** R830
- [20] Tegze M , Faigel G 2001 *J. Phys. : Condens. Matter* **13** 10613
- [21] Xie H L , Gao H Y , Chen J W , Wang J Y , Zhu P P , Xiong S S , Xian D C , Xu Z Z 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2223 (in Chinese)
- [谢红兰、高鸿奕、陈建文、王越、朱佩平、熊诗圣、洗鼎昌、徐至展 2003 物理学报 **52** 2223]
- [22] Xie H L , Chen J W , Gao H Y , Xiong S S , Xu Z Z 2004 *Optics Communications* **229** 123
- [23] Faigel G , Tegze M 1999 *Rep. Prog. Phys.* **62** 355
- [24] Lonsdale K 1968 *International Tables for X-ray Crystallography* (Dordrecht : Reidel) Vol. III
- [25] Born M , Wolf E 1964 *Principles of Optics* (London : Pergamon) 375
- [26] Barton J J 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 1356
- [27] Marchesini S 2000 *PhD dissertation disertion* (University Joseph Fourier) 31
- [28] Len P M , Gog T , Novikov D , Eisenhower R A , Materlik G , Fadley C S 1997 *Phys. Rev. B* **56** 1529

A new reconstructing algorithm for removing polarization effect of incident X-ray source and twin images in X-ray fluorescence holography *

Xie Hong-Lan[†] Hu Wen Luo Hong-Xin Du Guo-Hao Deng Biao Chen Rong-Chang

Xue Yan-Ling Shi Shao-Meng Xiao Ti-Qiao

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

(Received 3 September 2007 ; revised manuscript received 16 May 2008)

Abstract

This paper discusses the influence of the polarization of incident X-ray on the reconstructed atomic image by numerical simulation and reconstruction , using a crystal structure composed of 27 Fe atoms arranged in a cubic lattice as the model. Calculated results show that the choice of polarization is crucial for the atom observability. This paper proposes a new reconstructing algorithm which can eliminate the polarization effect of incident X-ray source and twin images inherent to holography at the same time. Numerical simulation and reconstruction results show that the reconstructing algorithm is effective and can be used to eliminate the influence of polarization of incident light source and twin image in experiments.

Keywords : X-ray fluorescence holography , synchrotron radiation , polarization

PACC : 6110M , 4240K , 2920L , 4230K

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10505028).

[†] E-mail : xiehonglan@sinap.ac.cn