

样品转动方式对中子全息成像结果的影响

唐彬 曹超 尹伟 孙勇 刘斌

Neutron holography simulation based on different sample rotations

Tang Bin Cao Chao Yin Wei Sun Yong Liu Bin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 242801 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.242801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.242801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I24>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

新型热中子敏感微通道板探测效率的蒙特-卡罗模拟研究

Optimal calculation of detection efficiency for thermal neutron sensitive microchannel plate

物理学报.2015, 64(10): 102801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.102801>

中子散射成像探测角分辨研究

Angular resolution of a neutron scatter imaging system

物理学报.2015, 64(4): 042801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.042801>

极化中子照相磁场量化技术方案比较与分析

Comparison of two approaches to magnetic field quantification by polarized neutron images

物理学报.2014, 63(18): 182801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.182801>

装置极化效率对极化中子成像质量的影响及修正分析

Effect of apparatus polarization efficiency on quantification analysis in polarized neutron imaging

物理学报.2013, 62(16): 162801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.162801>

基于小型加速器的编码中子源成像研究

Study of coded source neutron imaging based on a compact accelerator

物理学报.2013, 62(12): 122801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.122801>

# 样品转动方式对 neutron 全息成像结果的影响\*

唐彬 曹超<sup>†</sup> 尹伟 孙勇 刘斌

(中国工程物理研究院核物理与化学研究所, 绵阳 621900)

(2015年6月10日收到; 2015年8月19日收到修改稿)

在中子全息成像实验中, 为避免透射中子干扰, 入射中子束方向与样品-探测器方向不能在一条直线上, 同时采用探测器移动结合样品转动或仅样品转动的方式, 避免探测系统的大范围移动. 因此在样品的转动过程中, 入射中子束和探测器相对于样品的位置同时发生改变, 内源全息项和内探测器全息项作为变量被记录在同一幅全息图中, 并在重建过程中相互干扰. 本文对基于中子三轴谱仪和四圆谱仪的三种不同转动方式进行了中子全息记录和重建模拟研究, 并讨论其修正方法. 结果表明, 各转动方式都可以通过适当的方法消除或减轻相关影响, 而其中基于三轴谱仪的纯样品转动方式可以使用两个探测器记录的方式, 避开入射中子束方向与样品-探测器方向不能在一条直线上的限制, 得到完整的全息图, 同时通过数据处理能基本消除相对转动造成的干扰, 达到理想的重建结果, 在条件允许的情况下应予优先采用.

**关键词:** 中子全息术, 样品转动方式, 三轴谱仪, 四圆谱仪**PACS:** 28.20.Pr, 28.20.Cz, 29.30.Hs**DOI:** 10.7498/aps.64.242801

## 1 引言

与基于透射式成像的射线照相方法<sup>[1-3]</sup>不同, 具有原子分辨率的微观全息成像技术利用电子、X射线、中子等射线激发样品内不同位置的原子, 使其分别产生物波和参考波, 并相互叠加生成可被记录的宏观二维全息图像, 通过反解全息图最终得到原子的三维排布. 与散射和衍射技术相比, 微观全息术基于点原子散射球面波的衍射和干涉信息, 因此可以获得更准确的原子位置信息, 而且不要求平移周期性, 可用于准晶体样品的探测.

2001年, Cser等<sup>[4]</sup>首次提出中子全息成像技术, 利用单能中子束对样品微观三维结构进行成像. 与电子和X射线等全息成像技术相比, 中子全息术有一些前者所不具备的优势: 首先, 中子穿透性比较强, 可以深入样品内部进行探测; 其次, 中子直接与原子核发生作用, 其尺度远小于原子尺寸, 而且由于中子呈电中性, 可以避免由于样品原子核

外电子分布带来的误差, 因此理论上中子全息术可以实现更高的定位精度; 由于中子对氢元素及<sup>10</sup>B, <sup>48</sup>Cd, <sup>64</sup>Gd等特定核素较为灵敏, 中子全息技术可用于能源、生物、地质等领域的材料研究, 与X射线全息术在研究对象方面形成一定互补.

经过在加拿大NRU反应堆、法国ILL研究堆和ORR研究堆、日本JRR-3反应堆、瑞士PSI散裂源以及匈牙利Budapest反应堆<sup>[5-12]</sup>上的多次实验, 中子全息技术在装置设计、实验方法以及重建技术上都取得了长足的进步. 但受制于中子源强、束流调制技术及探测器效率, 要得到完整的全息图可能需要数天时间, 而且信噪比相对较低, 给应用和研究带来不便, 加上起步时间较晚, 因此在很多方面需要借鉴X射线等全息技术的成熟经验, 并根据中子全息自身的特点加以改进.

在理想情况下, 中子全息实验应保证样品不动, 通过改变外探测器位置或布置多个探测器进行记录. 为避免探测系统的大范围移动, 实验中多采用探测器在 $\theta$ 角增大的方向移动结合样品转动, 或

\* 国家自然科学基金(批准号: 11375156)和中国工程物理研究院中子物理学重点实验室(批准号: 2012BB03)资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: celdyq@gmail.com

纯样品转动的方式,同时入射中子束与样品-探测器方向不能在一条直线上,以避免透射中子的影响.在样品的转动过程中,入射中子束和探测器相对于样品的位置同时发生改变,此时记录的全息图同时包含内源全息项和内探测器全息项,并在重建过程中相互干扰.这一问题存在于各类射线全息术中,但与电子和X射线等相比,中子全息术基于弹性散射,无法通过能量分辨内源全息项和内探测器全息项,在数据处理时存在更大的困难.

为解决上述问题,近几年发展了一些特殊的全息记录或数据处理方法.1999年, Tegze等<sup>[13]</sup>用三轴谱仪进行的X射线全息实验通过特殊转动方式和精密测量消去内探测器干扰,但并未说明其具体操作方式;2010年, Markó等<sup>[9]</sup>针对建于匈牙利 Budapest 研究堆的中子全息照相装置(类似四圆衍射谱仪)发展了双重重建法以降低内探测器全息项干扰.但目前还没有样品转动方式对全息成像质量影响的系统研究,特别是基于三轴谱仪的纯样品转动方式,在现有的文献中未见相应的影响和修正分析.

本文在前期研究<sup>[14-16]</sup>的基础上,采用数值方法分析并比较基于三轴谱仪<sup>[17]</sup>和四圆谱仪<sup>[18]</sup>的三种不同转动方式对全息图记录和重建的影响,并研究相应的修正方法,为进一步在反应堆上开展中子全息成像工作奠定基础.

## 2 中子全息成像原理

中子全息成像的基本思想是利用中子激发样品内不同位置的原子,使其分别产生物波和参考波,并相互叠加生成可被记录的宏观二维全息图像,通过反解全息图最终得到原子的三维排布.

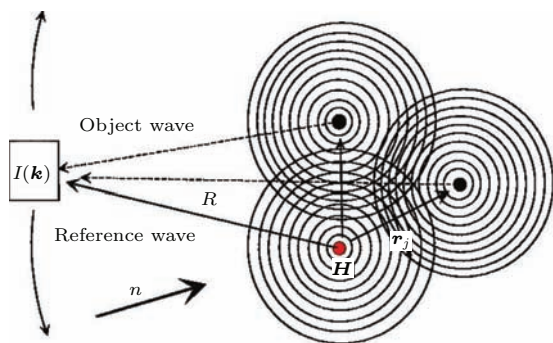


图1 内源全息术示意图<sup>[19]</sup>

Fig. 1. Principle of inside-source holography<sup>[19]</sup>.

图1为内源全息术示意图.外中子束经源核散射后以球面波的形式传播,其中一部分直接到达距离源核R处的探测器(参考波),另一部分被邻近原子核散射后再到达探测器(物波).在不考虑高次散射的情形下,参考波波幅为

$$A_0 = \sqrt{I_0} \exp(ikR)/R, \quad (1)$$

式中  $I_0$  为外中子束经源核散射后的源强,  $R$  为探测器与样品距离,波数  $k = 2\pi/\lambda$ ,  $\lambda$  为入射中子波长.内源波经一次散射后形成的物波波幅为<sup>[15]</sup>

$$\begin{aligned} A_1^f &= \sum_l \frac{b_l}{r_l} \exp(ikr_l) \frac{\sqrt{I_0}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_l|} \exp(ik|\mathbf{R} - \mathbf{r}_l|) \\ &\approx \sum_l \frac{b_l}{r_l} \exp[i(kr_l - \mathbf{k}^f \cdot \mathbf{r}_l)] \cdot A_0 \\ &\equiv \sum_l a_l^f A_0, \end{aligned} \quad (2)$$

其中,  $\mathbf{r}_l$  为散射核坐标,矢量  $\mathbf{k}^f$  大小为波数  $k$ ,方向与  $\mathbf{R}$  一致,用上标  $f$  表示其与出射中子方向相关,  $b_l$  为散射长度 ( $10^{-14} - 10^{-15}$  m).

将中子计数器作为探测器,通过转动探测器(或样品)获取不同方向上的中子强度,形成二维全息图

$$\begin{aligned} I(\mathbf{k}^f) &= |A_0 + A_1^f|^2 \\ &= \frac{I_0}{R^2} \left[ 1 + 2\text{Re} \left( \sum_l a_l^f \right) + \left| \sum_l a_l^f \right|^2 \right], \end{aligned} \quad (3)$$

式中第一项参考波幅为恒定值,可作为背景项;第三项物波幅为二阶小量,因此全息图信息主要包含在第二项全息干涉项中.

利用 Helmholtz-Kirchhoff 积分变换对全息图进行重建,

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= \iint_s \text{Re} \left( \sum_l a_l^f(\mathbf{k}^f) \right) \\ &\quad \times \exp(i\mathbf{k}^f \cdot \mathbf{r}) d\sigma(\mathbf{k}^f), \end{aligned} \quad (4)$$

式中  $d\sigma(\mathbf{k}^f)$  为全息图的二维积分面元,  $|U(\mathbf{r})|$  峰值坐标近似为各散射核的空间坐标  $\mathbf{r}_l$ .

## 3 样品转动方式的影响

在进行内源全息术实验时,内源核同时也是内探测器散射核,因此参考波幅应包含源核周围的散射波.忽略高阶小量,仅考虑一次散射,参考波幅为

$$A'_0 = A_0 \left\{ 1 + \sum_l b_l \exp[i(kr_l + \mathbf{k}^i \cdot \mathbf{r}_l)]/r_l \right\}$$

$$\equiv A_0 \left( 1 + \sum_l a_l^i \right), \quad (5)$$

式中  $\mathbf{k}^i$  为入射中子波矢, 由于中子与源核发生弹性散射,  $\mathbf{k}^i$  与  $\mathbf{k}^f$  大小相同, 均为中子波数  $k$ . 则物波幅应为  $\sum_l a_l^f A_0'$ , 由 (3) 式推导, 忽略高阶小量, 可将全息图记录的中子强度分布改写为

$$I(\mathbf{k}^i, \mathbf{k}^f) \approx I_0 \left[ 1 + 2\text{Re} \left( \sum_l a_l(\mathbf{k}^i, \mathbf{k}^f) \right) \right] / R^2, \quad (6)$$

其中全息项为内探测器全息项和内源全息项之和, 即

$$a_l(\mathbf{k}^i, \mathbf{k}^f) = a_l^i(\mathbf{k}^i) + a_l^f(\mathbf{k}^f).$$

理想情况下, 内源法全息成像应保持入射中子束和样品方向不变, 通过改变外探测器位置或布置多个探测器进行记录, 此时内探测器项  $\text{Re} \left( \sum_l a_l^i \right)$  为定值, 可看作背景项, 不会对重建造成影响. 然而由于探测器与样品距离较远, 通常采用探测器移动加样品转动, 或仅样品转动的方式, 避免探测系统的大范围移动. 另一方面, 入射中子束与样品-探测器方向需有一定程度的偏移, 以避免样品透射中子干扰. 则在样品的转动过程中, 入

射中子束和探测器相对于样品的位置同时发生改变, 内源全息项和内探测器全息项分别以  $\mathbf{k}^i$  和  $\mathbf{k}^f$  为变量被全息记录和重建

$$U(\mathbf{r}) = \iint_s \text{Re} \left( \sum_l a_l(\mathbf{k}^i, \mathbf{k}^f) \right) \times \exp(i\mathbf{k}^f \cdot \mathbf{r}) d\sigma(\mathbf{k}^f). \quad (7)$$

以 Pd-H 晶格为研究对象, 为简化数据分析, 相邻原子间距粗略取为 0.2 nm (实际为 0.2028 nm<sup>[7]</sup>). 在前期研究中, 我们发现由于孪生像等因素干扰, 中子全息的重建质量受入射中子波长的影响较大<sup>[15,16]</sup>, 而反应堆中子源可提供的单能中子波长通常在 0.1 nm 附近 (法国 ILL 研究堆的 D9 实验孔道可提供 0.035—0.085 nm 波长的中子, 基本是研究堆可提供单色中子的能量上限), 为获得较好的重建质量, 在研究堆可提供的范围内, 取入射中子波长 0.08 nm, 进行源核 H 外四层 Pd 原子和外四层 H 原子 (合计 110 个原子) 的全息记录和重建. Pd-H 晶格结构如图 2(a) 所示, 图 2(b) 和图 2(c) 分别为纯探测器转动条件的理想情况下模拟得到的全息记录和  $z = 0$  平面重建结果. 以下主要基于  $z = 0$  面进行分析.

样品转动后  $\mathbf{k}^i, \mathbf{k}^f$  与原点的相对位移变化可由旋转矩阵  $\mathbf{R}$  得到:

$$\mathbf{R}(\theta, \hat{\nu}) = \begin{pmatrix} \cos \theta + (1 - \cos \theta)v_x^2 & (1 - \cos \theta)v_x v_y - (\sin \theta)v_z & (1 - \cos \theta)v_x v_z + (\sin \theta)v_y \\ (1 - \cos \theta)v_x v_y + (\sin \theta)v_z & \cos \theta + (1 - \cos \theta)v_y^2 & (1 - \cos \theta)v_y v_z - (\sin \theta)v_x \\ (1 - \cos \theta)v_x v_z - (\sin \theta)v_y & (1 - \cos \theta)v_y v_z + (\sin \theta)v_x & \cos \theta + (1 - \cos \theta)v_z^2 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

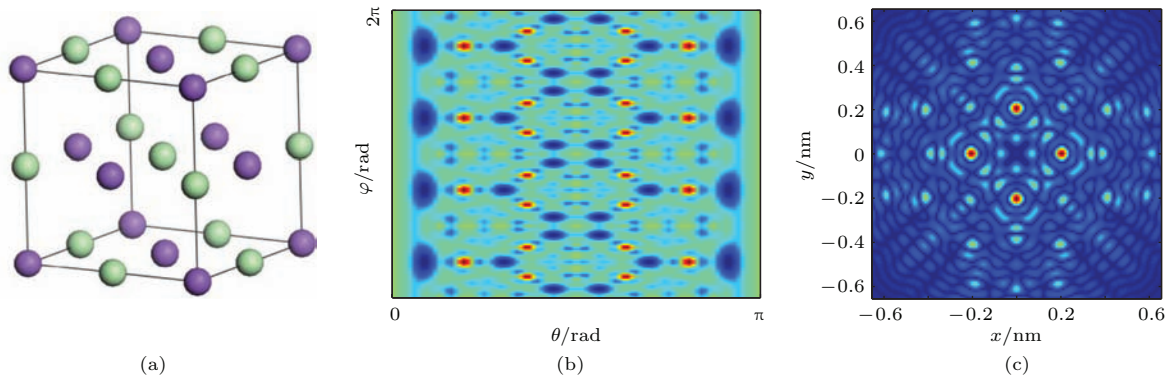


图 2 (网刊彩色) Pd-H 晶格结构、纯探测器转动条件下的模拟全息图及其重建 (a) 晶格结构; (b) 内源全息图; (c)  $z = 0$  平面重建图

Fig. 2. (color online) The crystal structure, simulated hologram and reconstruction of Pd-H based on pure detector rotation: (a) The crystal structure; (b) simulated hologram; (c)  $z = 0$  nm plane reconstruction, red circles mark the H atoms, yellow circles mark the Pd atoms.

其中  $\hat{v}$  为单位矢量,  $\mathbf{R}$  与空间任一矢量  $\mathbf{V}$  相乘后, 得到该矢量绕单位矢量旋转  $\theta$  角后形成的新矢量. 若取转动后的坐标系为参考坐标系, 则原矢量变为  $\mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}$ ,  $\mathbf{R}^T$  为  $\mathbf{R}$  的转置矩阵.

取样品坐标为原点,  $\mathbf{k}^f$  初始方向  $\mathbf{k}^f = (0, 0, k)$ , 即  $z$  轴, 样品-探测器方向与入射中子束夹角为  $\chi$ , 如图 3 所示, 考虑三种转动方式:

1) 转动方式 1: 探测器与  $\mathbf{k}^i$ ,  $\mathbf{k}^f$  在同一平面, 并绕  $y$  轴转动  $\theta$  角, 样品绕  $z$  轴旋转  $\varphi$  角, 转动方式 1 可由四圆谱仪和三轴谱仪实现 [12,13];

2) 转动方式 2: 探测器固定在  $z$  轴, 并与  $x$  轴、

$\mathbf{k}^i$  在同一平面, 样品固定在  $\varphi$  转轴末端,  $\varphi$  转轴绕  $y$  轴旋转  $-\theta$  角, 并绕自身旋转  $\varphi$  角, 转动方式 2 可由三轴谱仪实现 [5];

3) 转动方式 3: 探测器固定在  $z$  轴, 并与  $y$  轴、 $\mathbf{k}^i$  在同一平面, 样品固定在  $\varphi$  转轴末端,  $\varphi$  转轴绕  $y$  轴旋转  $-\theta$  角, 并绕自身旋转  $\varphi$  角, 转动方式 3 可由四圆谱仪实现 [11].

上述三种方式样品转动后的  $\mathbf{k}^f$  均为  $(k \sin \theta \cos \varphi, k \sin \theta \sin \varphi, k \cos \theta)$ , 样品转动前后的  $\mathbf{k}^i$  见表 1, 图 4 为相应的全息图和重建.

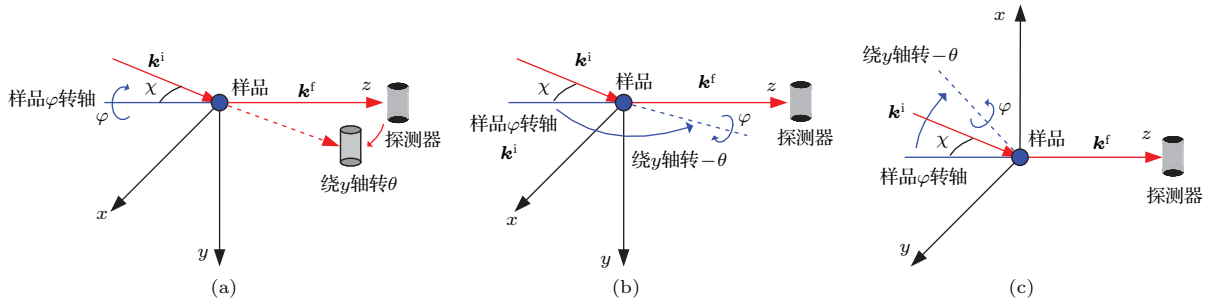


图 3 (网刊彩色) 三种特殊转动方式 (a) 转动方式 1; (b) 转动方式 2; (c) 转动方式 3

Fig. 3. (color online) Three kinds of special rotations: (a) Type 1 rotation; (b) type 2 rotation; (c) type 3 rotation.

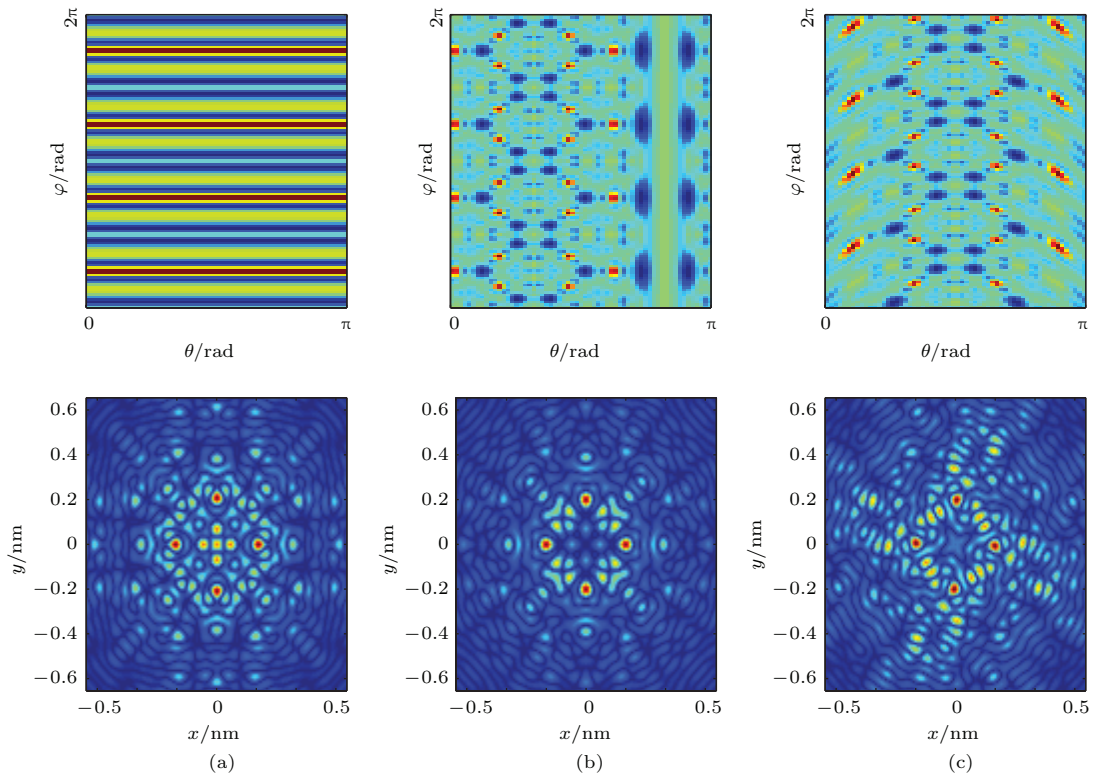


图 4 (网刊彩色) 不同转动方式下的全息图及其重建 (a) 转动方式 1; (b) 转动方式 2; (c) 转动方式 3

Fig. 4. (color online) Simulated holograms and reconstructions based on different rotations: (a) Type 1 rotation; (b) type 2 rotation; (c) type 3 rotation.

表1 不同转动方式前后  $k^i$  值  
Table 1.  $k^i$  changes during different rotations.

	转动方式 1	转动方式 2	转动方式 3
转动前 $k^i$	$\begin{bmatrix} k \sin \chi \\ 0 \\ k \cos \chi \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} k \sin \chi \\ 0 \\ k \cos \chi \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 \\ k \sin \chi \\ k \cos \chi \end{bmatrix}$
转动后 $k^i$	$\begin{bmatrix} k \sin \chi \cos \varphi \\ k \sin \chi \sin \varphi \\ k \cos \chi \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} k \sin(\theta + \chi) \cos \varphi \\ k \sin(\theta + \chi) \sin \varphi \\ k \cos(\theta + \chi) \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} k(-\sin \chi \sin \varphi + \cos \chi \sin \theta \cos \varphi) \\ k(\sin \chi \cos \varphi + \cos \chi \sin \theta \sin \varphi) \\ k \cos \chi \cos \theta \end{bmatrix}$

由图 4 可以看出, 即使不进行全息图修正, 转动方式 1 和 2 仍能获得较好的重建结果, 由下文分析可知, 这是由于其内探测全息图相对于内源全息图只出现了线性偏移. 而转动方式 3 中内探测器全息图发生了扭曲, 因此直接重建的质量不佳.

转动方式 3 相较其他转动方式的优点主要在于  $\theta$  角不受限制. 而转动方式 1 中当探测器移至

入射中子束方向时, 会受到样品透射中子干扰; 而转动方式 2 中, 样品  $\varphi$  转轴也不能转至入射中子束方向, 否则转轴会与中子束作用产生散射中子. 图 5 为  $\theta$  角取  $46.5^\circ$ — $133.5^\circ$  情形下的重建结果, 可以看出此种情况下即使不考虑内源项和内探测器项的干扰, 重建质量已有显著下降, 引入干扰项后, 甚至可能出现严重失真.

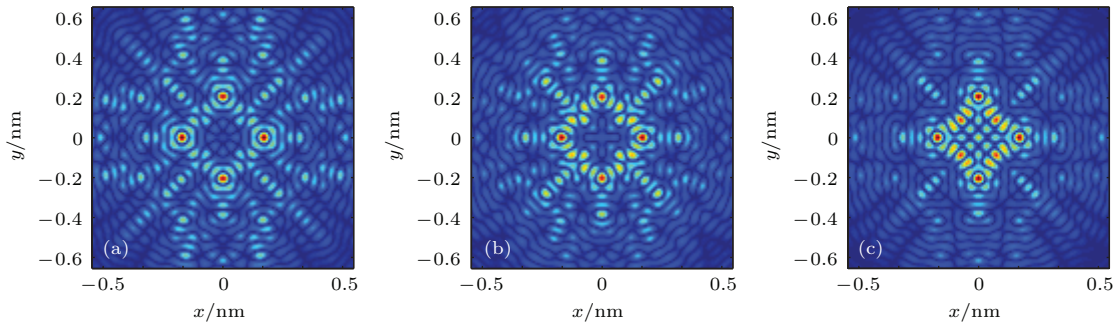


图 5 (网刊彩色)  $\theta = 46.5^\circ$ — $133.5^\circ$  时不同转动方式全息重建图 (a) 纯探测器转动; (b) 转动方式 1,  $\chi = 30^\circ$ ; (c) 转动方式 2,  $\chi = 30^\circ$

Fig. 5. (color online) Simulated holographic reconstructions based on different rotations,  $\theta = 46.5^\circ - 133.5^\circ$ : (a) Pure detector rotation; (b) type 1 rotation,  $\chi = 30^\circ$ ; (c) type 2 rotation,  $\chi = 30^\circ$ .

## 4 修正方法研究

以下讨论几种转动方式的修正方法及前提条件.

### 4.1 转动方式 1

根据表 1, (2) 和 (5) 式可得  $a(\theta, \varphi) = a^f(\theta, \varphi) + a^i(\chi, \varphi)$ . 若晶体散射核关于源核中心对称, 则有

$$\sum a^f(\theta, \varphi) = \sum a^i(\theta, \varphi),$$

且

$$\sum a^f(\theta, \varphi) = \sum a(\theta, \varphi) - \sum a(\chi, \varphi)/2. \quad (9)$$

但当  $\theta \approx \chi$  时, 探测器移动至  $k^i$  方向附近, 探测器计数中包含样品透射中子, 因此 (9) 式通常无法被用于反解内源全息项  $a^f(\theta, \varphi)$ .

若样品除中心对称性外还具备某些特殊对称性, 可以考虑利用对称性求解, 以 Pd-H 晶体为例, 当  $z = 0$  平面平行于  $k^i, k^f$  时, 有  $\sum a^i(\chi, \varphi) = \sum a^i(\chi, \varphi + \pi) = \sum a^i(\pi - \chi, \varphi)$ , 代入 (9) 式得到

$$\sum a^f(\theta, \varphi) = \sum a(\theta, \varphi) - \sum a(\pi - \chi, \varphi)/2. \quad (10)$$

这种方法要求对晶格结构有一定了解, 已通过其他方法确定晶向并对样品进行精确定位.

更为普适的方法是整体旋转样品

和探测器, 使初始  $\mathbf{k}^i$  为  $(k \sin \chi, 0, k \cos \chi)$  和  $(-k \sin \chi, 0, k \cos \chi)$ , 进行两次测量, 分别记录为  $a_1(\theta, \varphi) = a^f(\theta, \varphi) + a^i(\chi, \varphi)$  和  $a_2(\theta, \varphi) = a^f(\theta, \varphi) + a^i(-\chi, \varphi)$ , 不难推得

$$\sum a^f(\theta, \varphi) = \left[ \sum a_1(\theta, \varphi) + \sum a_2(\theta, \varphi) - \sum a_1(-\chi, \varphi) \right] / 2. \quad (11)$$

因此可以根据记录的全息图反解出内源全息项进行重建. 其需要满足如下条件:

- 1) 晶体散射核关于源核中心对称;
- 2) 取初始  $\mathbf{k}^i$  为  $(k \sin \chi, 0, k \cos \chi)$  和  $(-k \sin \chi, 0, k \cos \chi)$ , 进行两次测量;
- 3) 在  $\mathbf{k}^i = (k \sin \chi, 0, k \cos \chi)$  时, 调整  $\theta$  角至  $-\chi$ , 并记录为  $a_1(-\chi, \varphi)$ .

### 4.2 转动方式 2

根据表 1, (2) 和 (5) 式可得  $a(\theta, \varphi) = a^f(\theta, \varphi) + a^i(\theta + \chi, \varphi)$ . 若晶体散射核关于源核对称, 则有  $\sum a^f(\theta, \varphi) = \sum a^i(\theta, \varphi)$ , 且  $\sum a(\theta, \varphi) = \sum a(\theta + \pi, \varphi)$ , 即全息图在  $\theta$  方向具有  $\pi$  周期, 由

此建立  $\sum a^f(\theta, \varphi)$  与  $\sum a^i(\theta + \chi, \varphi)$  的联系,

$$\begin{aligned} \sum a(\theta, \varphi) &= \sum a^f(\theta, \varphi) + \sum a^f(\theta + \chi, \varphi), \\ &\theta + \chi \leq \pi, \\ \sum a(\theta, \varphi) &= \sum a^f(\theta, \varphi) + \sum a^f(\theta + \chi - \pi, \varphi), \\ &\theta + \chi > \pi, \end{aligned} \quad (12)$$

若  $\theta$  在 0 到  $\pi$  内取  $N$  个点  $\theta_1 - \theta_N$ , 则可由记录全息图得到  $N$  个方程, 联立求解方程组, 可以反解得到相应的  $\sum a^f(\theta_i, \varphi)$ . 此时要求  $N$  为奇数, 以保证方程组的系数矩阵满秩, 即方程组有惟一解.

实际上, 当  $\theta \approx \pi$  时, 样品轴移至  $\mathbf{k}^f$  方向附近, 可能挡住探测器, 这可以利用全息图在  $\theta$  方向的  $\pi$  周期, 用  $\theta' \approx \theta - \pi$  代替. 而当  $\theta \approx \pi - \chi$  时, 样品转轴移动至  $\mathbf{k}^i$  方向附近, 记录的  $a(\chi, \varphi)$  中包含转轴散射中子, 可以考虑调整样品在  $\theta$  方向的转动步进角, 避开  $\theta \approx \pi - \chi$  取值, 但在高精度测量时, 转动步进角很小, 此时 (12) 式无法被用于反解内源全息项  $a^f(\theta, \varphi)$ . 如 3.1 节所述, 若样品除中心对称性外还具备某些特殊对称性, 可以考虑利用对称性求解.

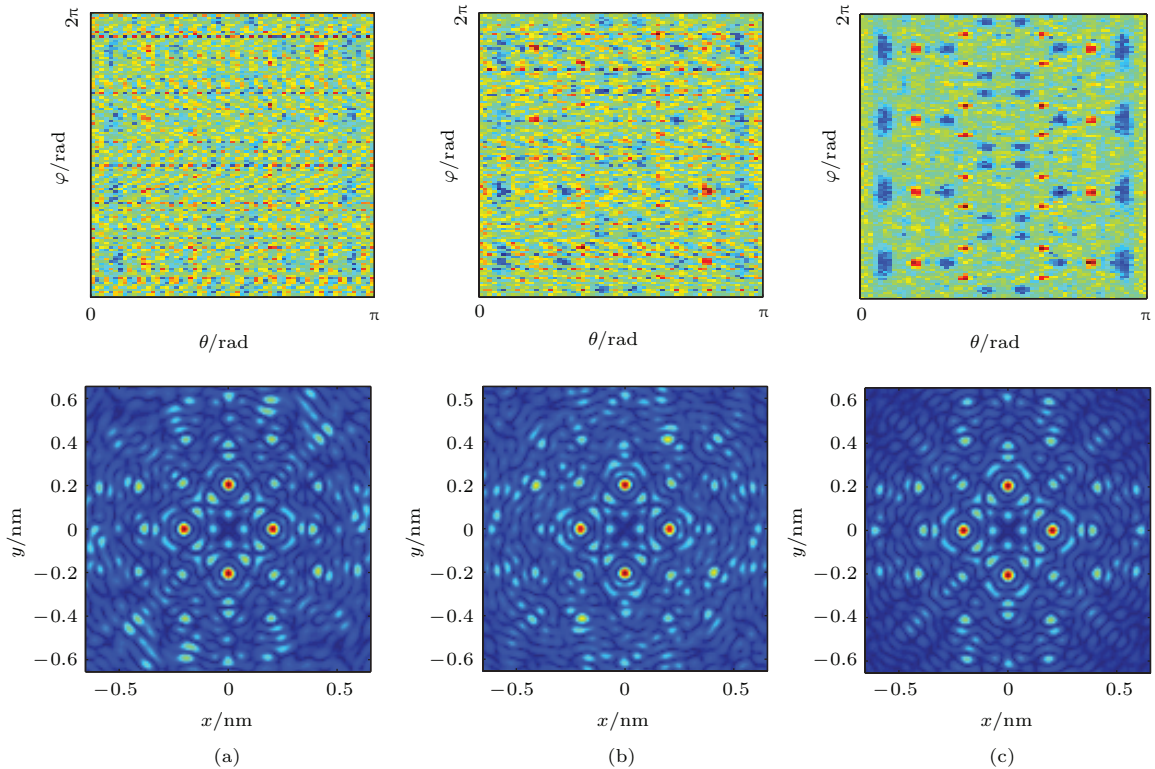


图 6 (网刊彩色) 转动方式 2, 引入统计噪声,  $\chi$  取不同值的修正全息图及其重建 (a)  $\chi = 26.56^\circ$ ; (b)  $\chi = 50.16^\circ$ ; (c)  $\chi = 26.56^\circ$  与  $\chi = 50.16^\circ$  联立

Fig. 6. (color online) Corrected holograms and reconstructions based on type 2 rotation with Poisson noise and different  $\chi$ : (a)  $\chi = 26.56^\circ$ ; (b)  $\chi = 50.16^\circ$ ; (d) simultaneous solution with  $\chi = 26.56^\circ$  and  $\chi = 50.16^\circ$ .

为解决  $\theta$  在  $\pi - \chi$  附近无法取值的问题, 较为普适的方法是整体旋转样品和探测器, 使初始  $\mathbf{k}^i$  为  $(k \sin \chi_1, 0, k \cos \chi_1)$  和  $(k \sin \chi_2, 0, k \cos \chi_2)$ , 分别进行两次完整测量并去掉测量 1 中  $\theta = \pi - \chi_1$  附近的点和测量 2 中  $\theta = \pi - \chi_2$  附近的点, 按 (12) 式得到两组方程, 将其相加后求解, 而且由于迭加后方程组系数矩阵的秩增大, 因此  $\theta$  角取样点总数  $N$  可以为偶数.

也可以用两个探测器同时记录, 其初始  $\mathbf{k}^f$  分别为  $(0, 0, k)$  和  $(k \sin \theta_1, 0, k \cos \theta_1)$ , 记为探测器 1 和探测器 2. 探测器 2 转动后  $\mathbf{k}^f$  变为  $(k \sin(\theta + \theta_1) \cos \varphi, k \sin(\theta + \theta_1) \sin \varphi, k \cos(\theta + \theta_1))$ , 记录的  $a_2(\theta, \varphi) = a^f(\theta + \theta_1, \varphi) + a^i(\theta + \chi, \varphi)$ , 经过适当变换, 等效于初始  $\mathbf{k}^i$  为  $(-k \sin(\chi - \theta_1), 0, k \cos(\chi - \theta_1))$ , 可以用前述方法进行求解.

另一方面, 在实验中记录的全息图中各点强度存在统计涨落, 因此方程组 (12) 的解与实际的  $a^f$  并不严格相等. 因此引入统计噪声 ( $I_0 = 5 \times 10^7$ , 平均信噪比约为 2.7) 进行模拟, 图 6 (a) 和图 6 (b) 分别为  $\chi$  为  $26.56^\circ$  和  $50.16^\circ$  的修正全息图和重建图 (包含  $\theta$  在  $\pi - \chi$  附近的所有测量点), 图 6 (c) 为叠加求解 (每个测量分别去掉  $\pi - \chi$  附近  $\pm 11.80^\circ$  共计  $7 \times 122$  个测量点) 得到的修正全息图和重建图, 计算图 6 各重建图与图 2 (c) 归一后的均方差, 由图 6 (a)—(c) 依次为 0.1068, 0.1108 和 0.0336. 因此单次测量的修正重建结果受统计噪声影响较大, 而变换  $\chi$  角进行迭加求解, 可以稳定地获得较好的重建结果.

综上, 基于转动方式 2 的全息图可以进行修正, 需要满足如下条件:

- 1) 晶体散射核关于源核中心对称;

2) 改变初始  $\mathbf{k}^i$  进行两次测量, 或使用两个探测器;

- 3)  $\chi$  角取值为  $\theta$  步进角的整数倍.

### 4.3 转动方式 3

转动方式 3 得到的全息图和内源全息图不在线性关系, 因此无法从全息图中反解, 直接重建的图像质量也明显差于另两种转动方式.

为改善四圆谱仪的中子全息成像质量, 匈牙利 Budapest 研究堆的 Markó 等<sup>[9]</sup> 提出双重重建法, 对记录的全息图分别沿  $\mathbf{k}^i$  方向和  $\mathbf{k}^f$  方向进行重建后迭加, 重建结果得到改善, 此处对其进行模拟验证, 结果显示在图 7 (a)—(c) 中.

Markó 等还提到利用二维位置灵敏探测器 (PSD) 进行双重重建, PSD 上各点对应的  $\mathbf{k}^i$  方向相同而  $\mathbf{k}^f$  方向不同, 因此可以提供比点探测器更多的信息. 此处对基于 PSD 探测器的双重重建进行模拟, 取  $\chi = 45^\circ$ , 样品转动步进角  $3^\circ$ , 将 PSD 等分为  $8 \times 8 = 64$  个单元, 分别对每个单元的全息记录结果按其对应的  $\mathbf{k}^i$  和  $\mathbf{k}^f$  进行双重重建并迭加, 模拟 PSD 覆盖角度为  $8^\circ \times 8^\circ$  和  $16^\circ \times 16^\circ$  的情形, 同时由于大面积的 PSD 可能会覆盖 Bragg 衍射角并记录衍射峰, 模拟取  $16^\circ \times 16^\circ$  PSD 角上 4 单元 (相当于四个  $1^\circ \times 1^\circ$  的点探测器) 进行重建的情形, 将上述模拟重建结果与点探测器重建结果进行比对, 结果显示在图 8 中. 计算图 8 各子图与图 2 (c) 归一后的均方差, 由图 8 (a)—(d) 依次为 0.1407, 0.119, 0.0908 和 0.0951 (可与图 6 的均方差结果进行比较). 因此 PSD 双重重建的效果随覆盖角增大而变强, 而且为避开 Bragg 衍射峰, 可以优先选择 PSD 边缘的单元进行重建.

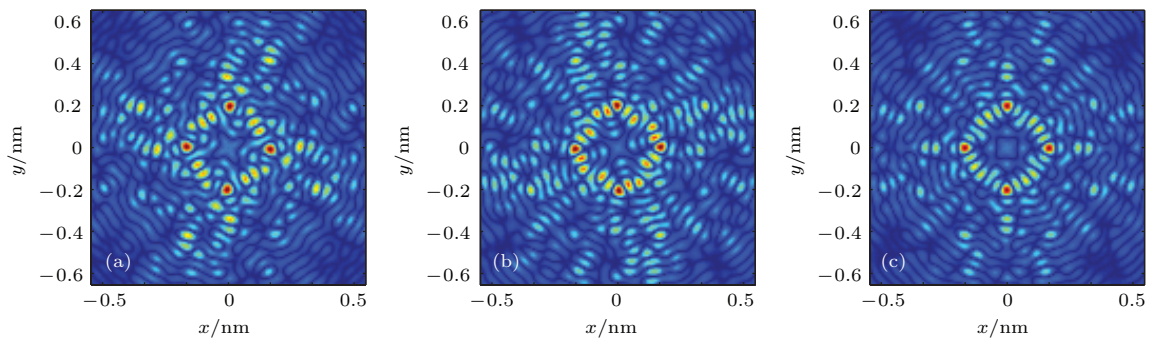


图 7 (网刊彩色) 转动方式 3,  $\mathbf{k}^i$ ,  $\mathbf{k}^f$  方向重建图及双重重建图 (a)  $\mathbf{k}^f$  方向重建图; (b)  $\mathbf{k}^i$  方向重建图; (c) 双重重建图  
 Fig. 7. (color online) Single (along  $\mathbf{k}^i$ ,  $\mathbf{k}^f$ ) and double holographic reconstructions based on type 3 rotation: (a) Reconstruction along  $\mathbf{k}^f$ ; (b) reconstruction along  $\mathbf{k}^i$ ; (c) double reconstruction (mixture of (a) and (b)).



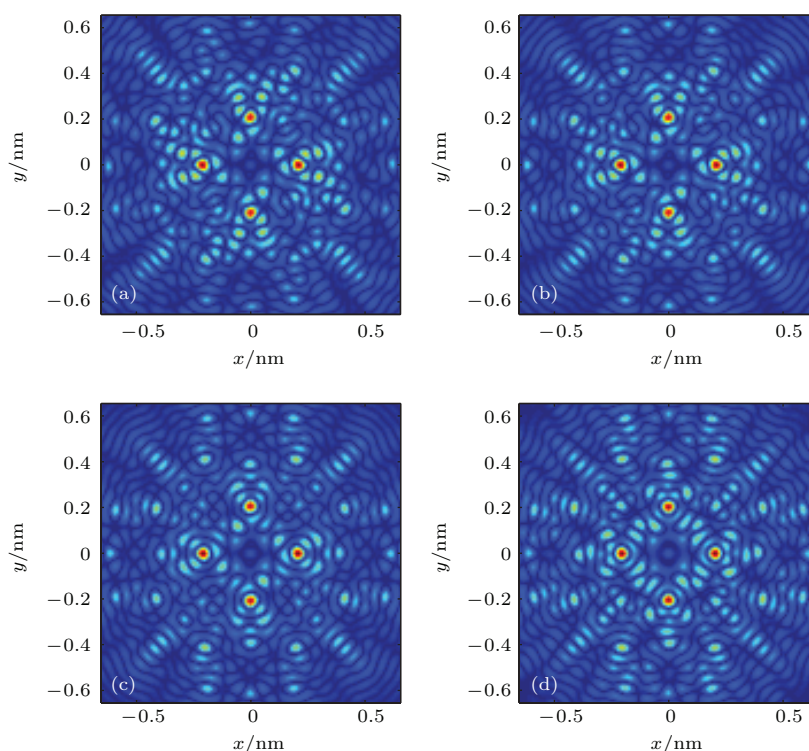


图8 (网刊彩色) 转动方式3, 基于点探测器和二维PSD的双重重建图,  $\chi = 45^\circ$  (a) 点探测器; (b)  $8^\circ \times 8^\circ$  PSD探测器; (c)  $16^\circ \times 16^\circ$  PSD探测器; (d)  $16^\circ \times 16^\circ$  PSD探测器四角单元

Fig. 8. (color online) Double holographic reconstructions based on type 3 rotation detector,  $\chi = 45^\circ$ : (a) Using a point detector; (b) using a  $8^\circ \times 8^\circ$  PSD detector; (c) using a  $16^\circ \times 16^\circ$  PSD detector; (d) using 4 corner of a  $16^\circ \times 16^\circ$  PSD detector.

## 5 结 论

本文对三种不同转动方式中内探测器全息项对记录全息图的干扰及其在重建中的影响进行了数值模拟研究, 并探讨其修正方法. 结果表明, 尽管基于四圆谱仪的纯样品转动方式(转动方式3)具有样品转动范围不受限制的优点, 但其全息记录和重建受内探测器全息项干扰较大, 即使采用双重重建法也只能加以改善, 不能完全消除. 而当样品满足散射核关于源核中心对称的条件时(适用于大多数晶体对象), 样品转动结合探测器移动(转动方式1)和基于三轴谱仪的纯样品转动方式(转动方式2)均可通过合适的全息记录和数据处理方法, 将内探测器全息项的干扰消除. 其中转动方式2可以通过进行两次测量或使用两个探测器, 避开单次测量中 $\theta$ 角的限制, 得到完整的全息图, 进一步保证全息重建的质量. 再考虑到转动方式2可以固定探测器与入射中子束的相对位置, 在全息记录过程中避免Bragg衍射峰, 因此在条件允许的情况下, 可优先采用基于三轴谱仪的纯样品转动方式.

## 参考文献

- [1] Arif M 2008 *Neutron Radiography: Proceedings of the Eighth World Conference* (Lancaster: Destech Publications)
- [2] Cao C, Wang S, Tang K, Yin W, Wu Y 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 182801 (in Chinese) [曹超, 王胜, 唐科, 尹伟, 吴洋 2014 物理学报 **63** 182801]
- [3] Wang S, Zou Y B, Wen W W, Li H, Liu S Q, Wang H, Lu Y R, Tang G Y, Guo Z Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 122801 (in Chinese) [王胜, 邹宇斌, 温伟伟, 李航, 刘树全, 王浒, 陆元荣, 唐国有, 郭之虞 2013 物理学报 **62** 122801]
- [4] Cser L, Krexner G, Török G 2001 *Europhys. Lett.* **54** 747
- [5] Sur B, Rogge R B, Hammond R P, Anghel N P, Katsaras J 2001 *Nature* **414** 525
- [6] Cser L, Török Gy, Krexner G, Faragó B 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 175504
- [7] Cser L, Török Gy, Krexner G, Prem M, Sharkov I 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 1149
- [8] Hayashi K, Ohoyama K, Orimo S, Nakamori Y, Takahashi H, Shibata K 2008 *Jpn. J. Appl. Phys.* **47** 2291
- [9] Markó M, Krexner G, Schefer J, Szakál A, Cser L 2010 *New J. Phys.* **12** 063036
- [10] Cser L, Krexner G, Markó M, Sharkov I, Török Gy 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 255501
- [11] Marko M, Szakal A, Török Gy, Cser L 2010 *Rev.Sci. Instrum.* **81** 105110

- [12] Tegze M, Faigel G, Marchesini S, Belakovsky M, Chumakov A I 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 4847
- [13] Tegze M, Faigel G 1996 *Nature* **380** 49
- [14] Xie H L, Gao H Y, Chen J W, Wang 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]
- [15] Cao C, Sun Y, Tang B, Huo H Y 2013 *Nucl. Tech.* **36** 010202 (in Chinese) [曹超, 孙勇, 唐彬, 霍合勇 2013 核技术 **36** 010202]
- [16] Cao C, Tang B, Sun Y, Li H, Liu B, Huo H Y 2015 *Atomic Energy Sci. Technol.* **49** 1109 (in Chinese) [曹超, 唐彬, 孙勇, 李航, 刘斌, 霍合勇 2015 原子能科学技术 **49** 1109]
- [17] Li S L, Dai P C 2011 *Physics* **40** 33 (in Chinese) [李世亮, 戴鹏程 2011 物理 **40** 33]
- [18] Li M J, Liu X L, Liu Y T, Tian G F, Wu L Q, Sun K, Chen D F 2014 *Atomic Energy Sci. Technol.* **48** 532 (in Chinese) [李眉娟, 刘晓龙, 刘蕴韬, 田庚方, 吴立齐, 孙凯, 陈东风 2014 原子能科学技术 **48** 532]
- [19] Cser L, Faragó B, Krexner G, Sharkov I, Török Gy 2004 *Physica B* **350** 113

# Neutron holography simulation based on different sample rotations\*

Tang Bin Cao Chao<sup>†</sup> Yin Wei Sun Yong Liu Bin

(Institute of Nuclear Physics and Chemistry, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

( Received 10 June 2015; revised manuscript received 19 August 2015 )

## Abstract

Neutron holography is a new imaging technique based on the recording of the interference pattern of two coherent waves emitted by the same source, which allows observing the spatial order of microscopic objects like molecules or atoms in crystal sample. Two approaches can be used in neutron holography measurements. One is called inside-source holography, in which both the reference wave and object wave come from embedded atoms in the sample and propagate toward the detector outside the sample. The second approach called inside-detector holography is the inverse method of inside-source holography, in this case the reference wave is the initial neutron beam coming from a distant source outside the sample, while the atoms embedded in the sample act as detectors. In an ideal inside-source holography experiment, the sample should be fixed and the detector moves on a sphere, which is not practical because the detector system is usually heavy and far from the sample. In order to minimize the operation space, the detector always moves on a circle around sample or is located at a fixed position, while the sample rotates in an appropriate way to imitate the motion of the detector in a sphere. However, the orientation of the sample relative to the incident neutron beam is changed during sample rotation, and part of the inverse hologram is recorded together with the inside-detector hologram, which can cause distortion in the holographic reconstruction. In this paper, we simulate neutron holograms and reconstructions based on three different sample/detector rotations. In the first case, the detector moves on a circle, while the sample rotates about an axis perpendicular to the detector moving surface. In the second case, the detector is fixed, while the sample rotates around two perpendicular axes, the  $\theta$  axis rotating the sample through  $\pi$  radians is perpendicular to the incident beam-detector plane, while the  $\varphi$  axis rotating the sample through  $2\pi$  radians moves on a circle parallel to the incident beam-detector plane, this rotation can be carried out on a 3-axis spectrometry. In the third case, the detector is also fixed and the sample rotates around two perpendicular axes, but the  $\theta$  axis is parallel to the sample-detector direction, while the  $\varphi$  axis moves on a circle perpendicular to the incident beam-detector plane, this rotation can be carried out on a 4-cycle spectrometry. The distortions and corresponding correcting methods of three kinds of rotations are discussed. The result shows that most distortions can be corrected by using special measurement or reconstruction techniques. Furthermore, pure sample rotation based on 3-axis spectrometer can achieve the best reconstruction result, so this rotation approach is preferred if conditions permit.

**Keywords:** neutron holography, sample rotation, 3-axis spectrometry, 4-cycle spectrometry

**PACS:** 28.20.Pr, 28.20.Cz, 29.30.Hs

**DOI:** [10.7498/aps.64.242801](https://doi.org/10.7498/aps.64.242801)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11375156) and the Neutron Physics Laboratory, China Academy of Engineering Physics (Grant No. 2012BB03).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [cclidyq@gmail.com](mailto:cclidyq@gmail.com)