

# 内源全息术的原理和数学描述

朱佩平 王 越 吴自玉 田玉莲 贾全杰 胡天斗 巫 翔 储旺盛 黎 刚 冼鼎昌

(中国科学院高能物理研究所, 北京 100039)

(2003 年 6 月 24 日收到, 2004 年 1 月 16 日收到修改稿)

以往的全息术在对原子成像时, 在相干光源、探测器空间分辨和信号强度三个方面遇到了难以克服的困难. 阐述了内源全息术克服这些困难的原理, 研究了内源全息术的记录和再现全过程, 推导出内源球面全息图的再现公式, 并在散射因子球对称近似和能量无关近似下, 推导出以  $\delta$  函数表示原子全息再现像的解析表达式.

关键词: 内源全息术, 同步辐射, 晶体结构, 傅里叶变换

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

## 1. 引言

Gabor<sup>[1]</sup>发明的全息术对物体具有三维成像能力. 然而以往的全息术(相对于内源全息术, 以往的全息术可称为外源全息术)应用于原子成像时, 遇到了三大困难. 第一个困难是没有满足相干条件的短波长(波长和原子直径相当)相干光源; 第二个困难是没有高空间分辨探测器记录空间周期与原子间距相当的干涉条纹; 第三个困难是单个原子的干涉信号不但强度弱, 而且信噪比低, 难以探测.

1986 年, Szöke<sup>[2]</sup>提出了内源全息术新概念, 一举化解了上述三大困难, 开创了原子分辨全息术. 所谓内源, 是指相干光源位于样品内部. Szöke 认为, 在外场激发下, 样品中每个受激发光原子(例如, 发射荧光  $x$  射线、 $\gamma$  射线或光电子的原子)都可以作为全息术的相干光源; 从发光原子直接到达探测器的波为参考波, 被周围近邻原子散射后到达探测器的波为物波, 当探测器沿着以发光原子为中心的大球面上扫描时, 可记录参考波和物波的干涉花样. 这幅球面干涉花样可视为发光原子周围近邻原子的全息图(见图 1).

1988 年, Barton<sup>[3]</sup>根据内源全息术的概念, 指出光电子衍射图可以视为光电子全息图, 给出了内源球面全息图在球坐标系中的再现公式. Barton 还提出可以在直角坐标系中利用快速傅里叶变换再现内源球面全息图, 而他给出的表达式不完全正确. 1990 年, Harp 等<sup>[4]</sup>利用发射 Kikuchi 电子原子作为内源完成了第一张内源全息图的实验, 并利用数字

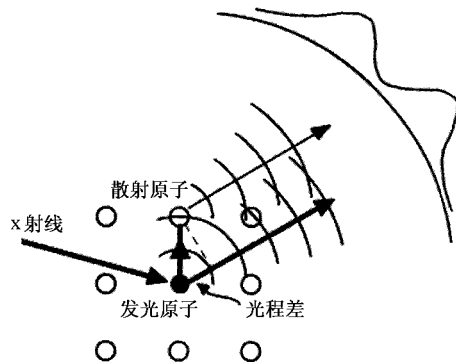


图 1 内源全息术原理示意图 以发射荧光或光电子的原子为相干光源, 未经散射的荧光或光电子为参考波, 经过近邻原子散射的荧光或光电子为物波, 在以发光原子为中心的球面上记录全息图

再现方法获得了原子再现像. 1991 年, Barton<sup>[5]</sup>为了消除单能量全息术中孪生像和原子多重散射的干扰, 利用发光原子与散射原子距离和波矢  $k$  的傅里叶变换关系, 提出了多能量全息术. 1996 年, Tegze 和 Faigel<sup>[6]</sup>第一次利用荧光  $x$  射线记录了内源全息图, 并获得了原子再现像. 同年, Gog 等<sup>[7]</sup>将光路可逆原理应用于内源全息术, 提出了逆内源全息术. 逆内源全息术和内源全息术的光路互逆, 因而它们的数学描述相同. 2002 年, Nishino 等<sup>[8]</sup>针对多能量全息术的缺点, 提出只需记录两张能量不同的全息图就能消除孪生像.

自从 Szöke 发明内源全息术以来, 不断有利用内源全息术研究物质微观结构的报道, 出现了光电子全息术、荧光全息术、 $\gamma$  射线全息术等. 这方面的综述, 读者可参考文献 [9]. 本文不再赘述.

本文要讨论内源全息术在原子成像时对光源相干性和探测器空间分辨的要求 ,以及获取原子弱干涉信号的原理 .对内源全息术记录和再现全过程做了详细的数学推导 ,分别推导出了内源球面全息图在球面坐标系和直角坐标系中的再现公式 ,在散射因子球对称和能量无关近似下 ,获得了以  $\delta$  函数表示原子全息再现像的解析表达式 .本文推出的内源球面全息图在直角坐标系中的再现公式纠正了 Barton<sup>[3]</sup>的结果 .

## 2. 三大困难的化解

### 2.1. 相干性

内源全息术对相干性的要求是 ,直接来自发光原子的参考波与近邻原子的散射波在全息图上相干 .相干性分空间相干性和时间相干性 .

在内源全息术中 ,直接来自发光原子的参考波与近邻原子的散射波同源 ,因而满足空间相干性要求 .

根据干涉波长(  $\lambda$  约为 0.1 nm )和近邻原子之间的距离( 一般小于 5 个波长 ),可知参考波和物波在全息图上的最大光程差小于 5 个波长( 参见图 1 ).因此 ,在考虑到再现原子像包括次近邻原子的条件下 ,内源全息术对时间相干性要求 ,实际上就是要求相干长度不小于 10 个波长 .这相当于要求原子发出的波列长度不小于 10 个波长 ,即

$$\frac{E}{\Delta E} = \frac{\lambda}{\Delta \lambda} \geq 10. \tag{1}$$

对于荧光内源全息术而言 ,相干长度就是荧光的波列长度 .发射荧光原子的弛豫时间约为飞秒量级 .如按 1 fs 计算 ,则发出的荧光波列长度约为 0.3  $\mu\text{m}$  ,约含有  $10^3$  个波长 .对于光电子内源全息术而言 ,光电子发射时间与荧光原子的弛豫时间相当 ,波长为 0.1 nm 的光电子的速度约为  $10^6\text{--}10^7$  m/s .按 1 fs 计算 ,则发出的光电子波列长度约为 0.01  $\mu\text{m}$  ,约含有  $10^1\text{--}10^2$  个波长 .

以上讨论表明 ,内源全息术的参考波和物波完全满足空间和时间相干条件 .

### 2.2. 干涉条纹间隔

在样品中 ,发光原子和某个近邻原子就像杨氏干涉实验中的双孔光源 ,其干涉花样基本相同( 见图 2 ).



图 2 发光原子和单个近邻原子的全息干涉示意图

近邻原子之间的距离  $a$  一般小于 0.5 nm ,发光原子到全息图的距离  $r_0$  约为 0.5 m ,相干光波长  $\lambda$  约为 0.1 nm .根据杨氏双孔干涉 ,干涉条纹间隔  $\Delta$  为

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{r_0 \lambda}{a} \\ &= \frac{0.5 \text{ m} \times 0.1 \text{ nm}}{0.5 \text{ nm}} \\ &= 10 \text{ cm}. \end{aligned} \tag{2}$$

因此 ,内源全息术不需要空间分辨本领高的探测器 .

### 2.3. 信号强度

虽然目前探测器的灵敏度已达到可探测单光子的水平 ,但是还不足以探测单个原子的干涉信号 .单原子的干涉信号不仅强度弱 ,而且信噪比低 ,因此信号必须达到足够的强度( 计数率 ),才能探测到单原子干涉信号的起伏 .内源全息术巧妙地解决了这个问题 .

同步辐射 x 射线照射样品的光斑直径为毫米量级 ,在 x 射线照射的样品范围内 ,有成亿个原子受激发光 .样品中每个( 由发光原子和近邻原子组成的 )局域结构产生的干涉花样都相同 ,各局域结构干涉花样之间在全息图上有一位移 ,最大位移为毫米量级 ,远小于近邻原子的干涉条纹间隔 ,因而内源全息图实际上是成亿个全同局域结构的干涉花样的重叠( 非相干叠加 ).换言之 ,内源全息图只记录了一个局域结构的信息 ,然而其信号强度却是单个局域结构信号的成亿倍 .

总之 ,内源全息术要求样品中每个由发光原子和近邻原子组成的局域结构相同 ,且有着相同的取向 .晶体显然满足这个要求 ,然而内源全息术的样品

范围不只局限于晶体,它不要求样品具有平移周期性. 已有人利用内源全息术获得了准晶的结构<sup>[10]</sup>.

### 3. 内源全息术的数学描述

一般而言,波源尺寸小于  $1/4$  波长时,波源可以看作点源,波阵面为球面,相干角度范围为  $4\pi$  立体角,空间完全相干.

对  $x$  射线而言,根据经典电动力学,最小的光源是振荡偶极子,发出偏振光,光的波阵面为沿极轴方向缺损的球面. 根据量子力学,发光原子能态降低,发出偏振光,光的波阵面与经典电动力学结果相同. 由于原子向各个方向发光的概率均等,各个方向偏振的概率均等,为非偏振光,所以能用标量振幅球面波描述发光原子在一定时间内的平均效应. 根据量子力学,球面波是发射光电子原子的终态,即原子向各个方向发射光电子的概率均等. 因此,可以用标量振幅球面波描述发射光电子原子在一定时间内的平均效应.

以下数学推导将发射荧光原子和发射电子原子都视为发射标量振幅球面波的发光原子.

#### 3.1. 定义空域和频域坐标系

以发光原子为原点,分别定义两套互相重合的直角坐标系,一套是用于描述近邻原子位置的空域直角坐标系  $(x, y, z)$ ,另一套是用于描述全息干涉条纹的频域(空间频率)直角坐标系  $(x_k, y_k, z_k)$ ,  $i_x, i_y, i_z$  分别为  $x, y, z$  轴和  $x_k, y_k, z_k$  轴的单位矢量. 第  $n$  个近邻原子的位置矢量为

$$\mathbf{r}_n = x_n \mathbf{i}_x + y_n \mathbf{i}_y + z_n \mathbf{i}_z, \quad (3)$$

全息图球面方程为

$$x_k^2 + y_k^2 + z_k^2 = r_o^2. \quad (4)$$

为数学描述的方便,定义频域球坐标系  $(r_o, \theta, \varphi)$ ,  $r_o$  的方向余弦为

$$\begin{aligned} \frac{x_k}{r_o} &= \alpha, \\ \frac{y_k}{r_o} &= \beta, \\ \frac{z_k}{r_o} &= \gamma = \cos\theta. \end{aligned} \quad (5)$$

数学推导还会用到波矢空间中的直角坐标系  $(k_x, k_y, k_z)$  和球坐标系  $(k, \theta, \varphi)$ , 频域坐标与波矢坐标成正比例关系

$$\begin{aligned} \frac{k_x}{k} &= \frac{x_k}{r_o}, \\ \frac{k_y}{k} &= \frac{y_k}{r_o}, \\ \frac{k_z}{k} &= \frac{z_k}{r_o}. \end{aligned} \quad (6)$$

因而在波矢空间中全息图球面方程为

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k^2. \quad (7)$$

#### 3.2. 内源全息图的记录<sup>[3,5]</sup>

发光原子发射的球面波为

$$R = \frac{e^{ikr_o}}{r_o}. \quad (8)$$

大部分球面波直接传播到全息图成为参考波,小部分被周围原子散射后再传播到全息图成为物波. 其中被第  $n$  个近邻原子一次散射后,传播到全息图的波为

$$\begin{aligned} o \rightarrow n &= \frac{e^{ikr_n}}{r_n} \cdot F(\theta_{r_n}^{r_o-r_n}) \cdot \frac{e^{ik|\mathbf{r}_o-\mathbf{r}_n|}}{|\mathbf{r}_o-\mathbf{r}_n|} \\ &= \frac{e^{ikr_n}}{r_n} \cdot F(\theta_{r_n}^{r_o-r_n}) \cdot \frac{e^{ik(\mathbf{r}_o-\hat{\mathbf{r}}_0 \cdot \mathbf{r}_n)}}{r_o - \hat{\mathbf{r}}_0 \cdot \mathbf{r}_n}. \end{aligned} \quad (9)$$

(9) 式中下标  $o \rightarrow n$  表示光被第  $n$  个近邻原子散射,  $F(\theta_{r_n}^{r_o-r_n})$  为一次散射因子,  $\theta_{r_n}^{r_o-r_n}$  代表  $\mathbf{r}_n$  与  $\mathbf{r}_o - \mathbf{r}_n$  的夹角,  $\hat{\mathbf{r}}_0$  为  $\mathbf{r}_o$  和  $k$  的单位矢量. 参考波与第  $n$  个近邻原子的一次散射波在半径为  $r_o$  的球面上发生干涉,形成一次散射的全息干涉图(见图 2 和图 3).

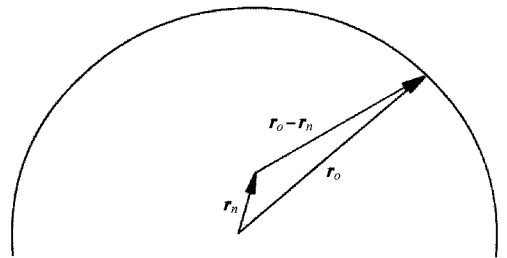


图 3 第  $n$  个近邻原子的一次散射的全息干涉图与其位置之间具有简单的一一对应关系

被第  $m$  个原子一次散射、又被第  $n$  个近邻原子二次散射后(参见图 4),传播到全息图球面的二次散射波为

$$\begin{aligned} o \rightarrow m \rightarrow n &= \frac{e^{ikr_m}}{r_m} \cdot F(\theta_{r_m}^{r_o-r_m}) \cdot \frac{e^{ik|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|}}{|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|} \\ &\quad \times F(\theta_{r_n}^{r_o-r_n}) \cdot \frac{e^{ik|\mathbf{r}_o-\mathbf{r}_n|}}{|\mathbf{r}_o-\mathbf{r}_n|} \end{aligned}$$

$$= \frac{e^{ikr_m}}{r_m} \cdot F(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \cdot \frac{e^{ik|r_n-r_m|}}{|r_n-r_m|} \times F(\theta_{r_n-r_m}^{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}) \cdot \frac{e^{ik(r_o-\hat{r}_o \cdot r_n)}}{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}. \quad (10)$$

(10) 式中下标  $o \rightarrow m \rightarrow n$  表示光被第  $m$  个原子一次散射, 然后又被第  $n$  个近邻原子二次散射,  $F(\theta_{r_m}^{r_n-r_m})$  和  $F(\theta_{r_n-r_m}^{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n})$  分别为一次和二次散射因子. 同理, 可以依次构造出二次以上散射波的表达式. 在二次散射波表达式中, 由于第  $m$  个原子有许多个, 二次散射波相位和二次散射原子位置的关系非常复杂. 本文主要讨论一次散射和二次散射在全息成像中的作用和影响, 二次以上散射影响的讨论和数学推导与二次散射类似.

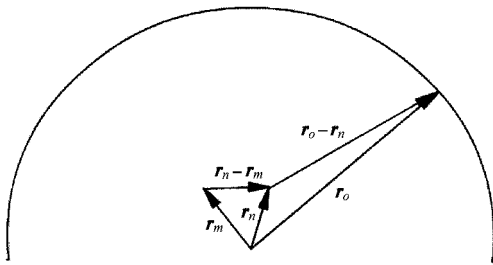


图 4 二次散射路径的多重性导致二次散射的干涉图与原子位置之间的关系非常复杂

物波为一次散射波与二次散射波之和

$$O = \sum_n o_{o \rightarrow n} + \sum_n \sum_m o_{o \rightarrow m \rightarrow n} \\ = \sum_n \left[ \frac{e^{ikr_n}}{r_n} \cdot F(\theta_{r_n}^{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}) + \sum_m \frac{e^{ikr_m}}{r_m} \cdot F(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \right] \times \frac{e^{ik|r_n-r_m|}}{|r_n-r_m|} \cdot F(\theta_{r_n-r_m}^{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}) \cdot \frac{e^{ik(r_o-\hat{r}_o \cdot r_n)}}{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}. \quad (11)$$

由于一次散射波相位和原子空间位置有简单明确的关系, 所以全息成像只利用一次散射, 而设法消除多次散射的影响.

扣除均匀本底  $RR^*$ , 忽略物波的自干涉  $OO^*$ , 在半径为  $r_o$  的球面上获得的全息干涉信号为

$$\frac{(R + O)(R + O)^* - RR^*}{RR^*} \\ \approx \frac{O}{R} + \frac{O^*}{R^*} \\ = r_o e^{-ikr_o} \cdot \sum_n \left[ \frac{e^{ikr_n}}{r_n} \cdot F(\theta_{r_n}^{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}) \right. \\ \left. + \sum_m \frac{e^{ikr_m}}{r_m} \cdot F(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \right]$$

$$\times \frac{e^{ik|r_n-r_m|}}{|r_n-r_m|} \cdot F(\theta_{r_n-r_m}^{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}) \cdot \frac{e^{ik(r_o-\hat{r}_o \cdot r_n)}}{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n} \\ + r_o e^{ikr_o} \cdot \sum_n \left[ \frac{e^{-ikr_n}}{r_n} \cdot F^*(\theta_{r_n}^{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}) \right. \\ \left. + \sum_m \frac{e^{-ikr_m}}{r_m} \cdot F^*(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \right] \times \frac{e^{-ik|r_n-r_m|}}{|r_n-r_m|} \cdot F^*(\theta_{r_n-r_m}^{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}) \cdot \frac{e^{-ik(r_o-\hat{r}_o \cdot r_n)}}{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}. \quad (12)$$

### 3.3. 内源全息图的再现<sup>[3,5]</sup>

当用一束和参考波完全相同的再现波照射全息图时, 即将(8)式作用于(12)式, 得全息图球面上的衍射波为

$$R \cdot \left( \frac{O}{R} + \frac{O^*}{R^*} \right) = O + \frac{R}{R^*} O^* \\ = \sum_n \left[ \frac{e^{ikr_n}}{r_n} \cdot F(\theta_{r_n}^{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}) \right. \\ \left. + \sum_m \frac{e^{ikr_m}}{r_m} \cdot F(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \right] \times \frac{e^{ik|r_n-r_m|}}{|r_n-r_m|} \cdot F(\theta_{r_n-r_m}^{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}) \cdot \frac{e^{ik(r_o-\hat{r}_o \cdot r_n)}}{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n} \\ + \sum_n \left[ \frac{e^{-ikr_n}}{r_n} \cdot F^*(\theta_{r_n}^{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}) \right. \\ \left. + \sum_m \frac{e^{-ikr_m}}{r_m} \cdot F^*(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \cdot \frac{e^{-ik|r_n-r_m|}}{|r_n-r_m|} \right] \times F^*(\theta_{r_n-r_m}^{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}) \cdot \frac{e^{-ik(r_o-\hat{r}_o \cdot r_n)}}{r_o-\hat{r}_o \cdot r_n}. \quad (13)$$

(13) 式等号右端第一项是一级衍射波, 它和近邻原子的物波完全相同, 形成近邻原子的真像. (13) 式等号右端的第二项是负一级衍射波, 形成近邻原子的孪生像. 在可见光全息术中, 当用一束和参考波完全相同的再现波照射全息图时, 直接用眼睛观察全息图的衍射波, 可以看到与样品完全相同的三维立体像. 然而对原子全息成像, 用光学方法再现全息图只能是理想实验, 不可能真正实行. 可行的方法是, 用数学描述全息图再现的物理过程, 然后根据全息图再现公式, 利用数字再现方法在计算机屏幕上再现原子像<sup>[11]</sup>.

根据亥姆霍兹-基尔霍夫积分定理<sup>[12]</sup>, 全息图球面内部的成像衍射场(包括虚像), 可以用全息图球面上的衍射波表示出来. 令

$$\chi(r_o) = R \cdot \left( \frac{O}{R} + \frac{O^*}{R^*} \right) \quad (14)$$

代表全息图球面上的衍射波,代入亥姆霍兹-基尔霍夫积分定理,有

$$U_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \iint_{S_k} \left[ G \cdot \frac{\partial \chi}{\partial r_o} - \chi \cdot \frac{\partial G}{\partial r_o} \right] \cdot dS_k, \quad (15)$$

式中  $U_k(\mathbf{r})$  为全息图球面内部任意一点的衍射场,  $G$  为格林函数. 为了再现出原子像, 格林函数应选择与真像衍射波传播方向相反的形式, 即选择格林函数为向观察点会聚的球面波, 有

$$G = \frac{e^{-ik|\mathbf{r}_o - \mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}_o - \mathbf{r}|} = \frac{e^{-ik(\mathbf{r}_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r})}}{r_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r}}. \quad (16)$$

格林函数就像一枚数学上的探针, 当格林函数的相位正好抵消衍射波相位时, 积分将会有有一个极大值, 因此可以将原子的像一一探出. 将(16)式代入(15)式, 有

$$\begin{aligned} U_k(\mathbf{r}) &= \frac{1}{4\pi} \cdot \iint_{S_k} \left[ \frac{e^{-ik(\mathbf{r}_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r})}}{r_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r}} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial r_o} \right. \\ &\quad \left. - \chi \cdot \frac{\partial}{\partial r_o} \left( \frac{e^{-ik(\mathbf{r}_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r})}}{r_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r}} \right) \right] \cdot dS_k \\ &= \frac{1}{4\pi} \cdot \iint_{S_k} \left[ \left( \frac{\partial \chi}{\partial r_o} + ik\chi \right) \cdot \frac{e^{-ik(\mathbf{r}_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r})}}{r_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r}} \right. \\ &\quad \left. + \chi \cdot \frac{e^{-ik(\mathbf{r}_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r})}}{(r_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r})^2} \right] \cdot dS_k. \quad (17) \end{aligned}$$

(17)式中

$$\begin{aligned} \frac{\partial \chi}{\partial r_o} &= \sum_n \left[ \frac{e^{ikr_n}}{r_n} \cdot F(\theta_{r_n}^{r_o-r_n}) \right. \\ &\quad + \sum_m \frac{e^{ikr_m}}{r_m} \cdot F(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \\ &\quad \times \frac{e^{ik|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|}}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|} \cdot F(\theta_{r_n-r_m}^{r_o-r_n}) \Big] \\ &\quad \times \frac{\partial}{\partial r_o} \left[ \frac{e^{ik(\mathbf{r}_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r}_n)}}{r_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r}_n} \right] \\ &\quad + \sum_n \left[ \frac{e^{-ikr_n}}{r_n} \cdot F^*(\theta_{r_n}^{r_o-r_n}) \right. \\ &\quad + \sum_m \frac{e^{-ikr_m}}{r_m} \cdot F^*(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \\ &\quad \times \frac{e^{-ik|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|}}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|} \cdot F^*(\theta_{r_n-r_m}^{r_o-r_n}) \Big] \\ &\quad \times \frac{\partial}{\partial r_o} \left[ \frac{e^{ik(\mathbf{r}_o + \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r}_n)}}{r_o + \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r}_n} \right] \\ &= ik\chi - \frac{\chi}{(r_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r}_n)}. \quad (18) \end{aligned}$$

在记录内源全息图的实验中,  $r_o$  约为 0.5 m, 与原子键长相比,  $r_o$  可视为无穷大. 当  $r_o \rightarrow \infty$  有

$$\frac{1}{r_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r}} \rightarrow \frac{1}{r_o} \ll k. \quad (19)$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial r_o} \rightarrow ik\chi, \quad (20)$$

$$\frac{e^{ik(\mathbf{r}_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r})}}{r_o - \hat{\mathbf{r}}_o \cdot \mathbf{r}} \rightarrow \frac{e^{i(kr_o - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}}{r_o}, \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \frac{O}{R} + \frac{O^*}{R^*} &\rightarrow \sum_n \left[ \frac{e^{ikr_n}}{r_n} \cdot F(\theta_{r_n}^{r_o}) \right. \\ &\quad + \sum_m \frac{e^{ikr_m}}{r_m} \cdot F(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \\ &\quad \times \frac{e^{ik|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|}}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|} \cdot F(\theta_{r_n-r_m}^{r_o-r_n}) \Big] \cdot e^{-ik \cdot \mathbf{r}_n} \\ &\quad + \sum_n \left[ \frac{e^{-ikr_n}}{r_n} \cdot F^*(\theta_{r_n}^{r_o}) \right. \\ &\quad + \sum_m \frac{e^{-ikr_m}}{r_m} \cdot F^*(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \\ &\quad \times \frac{e^{-ik|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|}}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|} \cdot F^*(\theta_{r_n-r_m}^{r_o-r_n}) \Big] \cdot e^{ik \cdot \mathbf{r}_n}. \quad (22) \end{aligned}$$

将(19)(20)和(21)式代入(17)式, 有

$$\begin{aligned} U_k(\mathbf{r}) &= \frac{ik}{2\pi} \iint_{S_k} \chi \frac{e^{-i(kr_o - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}}{r_o} \cdot dS_k \\ &= \frac{ik}{2\pi r_o^2} \cdot \iint_{S_k} \left( \frac{O}{R} + \frac{O^*}{R^*} \right) \cdot e^{ik \cdot \mathbf{r}} \cdot dS_k. \quad (23) \end{aligned}$$

(23)式说明全息图球面内部任意一点的衍射场  $U_k(\mathbf{r})$  由衍射波与格林函数的乘积在全息图球面上的积分决定. 在球坐标系中, 有

$$\begin{aligned} \frac{dS_k}{r_o^2} &= d\Omega_k \\ &= \sin\theta \cdot d\theta d\varphi. \quad (24) \end{aligned}$$

将(22)和(24)式代入(23)式, 有

$$\begin{aligned} U_k(\mathbf{r}) &= \frac{ik}{2\pi} \cdot \iint_{\Omega_k} \left( \frac{O}{R} + \frac{O^*}{R^*} \right) \cdot e^{ik \cdot \mathbf{r}} \cdot d\Omega_k \\ &= \frac{ik}{2\pi} \cdot \iint_{\Omega_k} \sum_n \left[ \frac{e^{ikr_n}}{r_n} \cdot F(\theta_{r_n}^{r_o}) + \sum_m \frac{e^{ikr_m}}{r_m} \right. \\ &\quad \times F(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \cdot \frac{e^{ik|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|}}{|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m|} \cdot F(\theta_{r_n-r_m}^{r_o-r_n}) \Big] \\ &\quad \times e^{ik \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)} \cdot d\Omega_k \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{ik}{2\pi} \cdot \iint_{\Omega_k} \sum_n \left[ \frac{e^{-ikr_n}}{r_n} \cdot F^*(\theta_{r_n}^{r_o}) \right. \\
& + \sum_m \frac{e^{-ikr_m}}{r_m} \cdot F^*(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \\
& \times \left. \frac{e^{-ik|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|}}{|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|} \cdot F^*(\theta_{r_n-r_m}^{r_o}) \right] \cdot e^{ik \cdot (\mathbf{r}+\mathbf{r}_n)} \\
& \times d\Omega_k. \quad (25)
\end{aligned}$$

(25) 式为球坐标系中内源全息图再现成像公式. 当

$$\mathbf{r} = \pm \mathbf{r}_n \quad (26)$$

时 (25) 式中的积分有极大值, 第一个积分和第二个积分分别对应原子的真像和孪生像.

Barton<sup>[5]</sup>提出可以在直角坐标系中利用快速傅里叶变换再现内源球面全息图, 然而他给出的再现像表达式不完全正确.

为了能使用快速傅里叶变换, 需要将球面全息图投影到平面, 即把 (23) 式从球坐标系变换到直角坐标系. 本文只推导上半球面全息图在直角坐标系中的再现公式, 下半球面全息图的再现公式可根据同理导出.

设全息图球面在 \$(x\_k, y\_k)\$ 平面上的投影区域为 \$D\_k\$, 将球坐标系到直角坐标系的变换公式和 (6) 式代入 (23) 式, 有

$$\begin{aligned}
U_k(\mathbf{r}) &= \frac{ik}{2\pi r_o^2} \cdot \iint_{D_k} \left( \frac{O}{R} + \frac{O^*}{R^*} \right) \cdot \frac{e^{ik \cdot \mathbf{r}}}{\cos\theta} \cdot d\mathbf{x}_k d\mathbf{y}_k \\
&= \frac{ik}{2\pi r_o} \cdot \int_{-r_o}^{r_o} \int_{-\sqrt{r_o^2-y_k^2}}^{\sqrt{r_o^2-y_k^2}} \left( \frac{O}{R} + \frac{O^*}{R^*} \right) \\
&\quad \times \frac{e^{ik \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{r_o^2 - x_k^2 - y_k^2}} \cdot d\mathbf{x}_k d\mathbf{y}_k \\
&= \frac{i}{2\pi} \cdot \int_{-k}^k \int_{-\sqrt{k^2-k_y^2}}^{\sqrt{k^2-k_y^2}} \left[ \left( \frac{O}{R} + \frac{O^*}{R^*} \right) \right. \\
&\quad \times \left. \frac{e^{iz\sqrt{k^2-k_x^2-k_y^2}}}{\sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2}} \right] \\
&\quad \times e^{i(k_x x + k_y y)} \cdot d\mathbf{k}_x d\mathbf{k}_y. \quad (27)
\end{aligned}$$

式中 \$\left(\frac{O}{R} + \frac{O^\*}{R^\*}\right)/\cos\theta\$ 是上半球面全息图在 \$(x\_k, y\_k)\$ 平面上的投影. (27) 式说明在直角坐标系中, 内源全息图的再现步骤是, 先将球面全息图向 \$(x\_k, y\_k)\$ 平面上投影, 再将格林函数在 \$z\$ 方向的相移指数项与投影全息图相乘, 然后进行二维傅里叶

变换. 根据频域坐标 \$(k\_x, k\_y)\$ 或波矢坐标 \$(k\_x, k\_y)\$ 与空域坐标 \$(x, y)\$ 之间的傅里叶变换关系, 可知 (27) 式表示一系列 \$z\$ 坐标不同的 \$(x, y)\$ 平面上的二维像. 因此 (27) 式是以类似断层扫描的方式描述原子三维再现像. 由于 (27) 式可以用快速傅里叶变换进行运算, 所以能大幅度减少计算机的运算时间.

进一步将 (22) 式代入 (27) 式, 有

$$\begin{aligned}
U_k(\mathbf{r}) &= \frac{i}{2\pi} \cdot \int_{-k}^k \int_{-\sqrt{k^2-k_y^2}}^{\sqrt{k^2-k_y^2}} \sum_n \left[ \frac{e^{ikr_n}}{r_n} \cdot F(\theta_{r_n}^{r_o}) \right. \\
&\quad + \sum_m \frac{e^{ikr_m}}{r_m} \cdot F(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \\
&\quad \times \left. \frac{e^{ik|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|}}{|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|} \cdot F(\theta_{r_n-r_m}^{r_o}) \right] \\
&\quad \times \frac{e^{ik(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n)}}{\sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2}} \cdot d\mathbf{k}_x d\mathbf{k}_y \\
&\quad + \frac{i}{2\pi} \cdot \int_{-k}^k \int_{-\sqrt{k^2-k_y^2}}^{\sqrt{k^2-k_y^2}} \sum_n \left[ \frac{e^{-ikr_n}}{r_n} \cdot F^*(\theta_{r_n}^{r_o}) \right. \\
&\quad + \sum_m \frac{e^{-ikr_m}}{r_m} \cdot F^*(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \\
&\quad \times \left. \frac{e^{-ik|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|}}{|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|} \cdot F^*(\theta_{r_n-r_m}^{r_o}) \right] \\
&\quad \times \frac{e^{ik(\mathbf{r}+\mathbf{r}_n)}}{\sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2}} \cdot d\mathbf{k}_x d\mathbf{k}_y. \quad (28)
\end{aligned}$$

由于不能一般地给出散射因子的解析表达式, 所以数学推导只能进行到 (25) 和 (28) 式. 然而为了能得到物理意义更明显的结果, 需要对散射因子做球对称近似.

### 3.4. 散射因子球对称近似

不论是电子的散射因子, 还是 \$x\$ 射线的散射因子, 都不是球对称的. 电子的散射因子与散射角度的相关程度高, \$x\$ 射线的散射因子与散射角度的相关程度低, 比较接近球对称的情况. 球对称散射因子是对实际情况的抽象, 利用它可以得到物理意义明显、数学表达完美的结果. 散射因子球对称近似的物理基础是散射因子的相移比原子键长引起的相移要小得多. 内源全息术中很多有物理意义的结果<sup>[3, 5-8, 13]</sup>实际上都是在散射因子球对称近似下获得的. 非球对称散射因子对全息成像影响的定量分析, 作者将在以后的论文中讨论.

根据 (25) 式, 将球对称散射因子提到积分号外, 有

$$\begin{aligned}
 U_k(\mathbf{r}) = & \frac{ik}{2\pi} \cdot \sum_n \left[ \frac{e^{ikr_n}}{r_n} \cdot F(\theta_{r_n}^o) \right. \\
 & + \sum_m \frac{e^{ikr_m}}{r_m} \cdot F(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \\
 & \times \left. \frac{e^{ik|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|}}{|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|} \cdot F(\theta_{r_n-r_m}^o) \right] \\
 & \times \iint_{\Omega_k} e^{ik(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n)} \cdot d\Omega_k \\
 & + \frac{ik}{2\pi} \cdot \sum_n \left[ \frac{e^{-ikr_n}}{r_n} \cdot F^*(\theta_{r_n}^o) \right. \\
 & + \sum_m \frac{e^{-ikr_m}}{r_m} \cdot F^*(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \\
 & \times \left. \frac{e^{-ik|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|}}{|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|} \cdot F^*(\theta_{r_n-r_m}^o) \right] \\
 & \times \iint_{\Omega_k} e^{ik(\mathbf{r}+\mathbf{r}_n)} \cdot d\Omega_k. \quad (29)
 \end{aligned}$$

定义函数

$$\frac{1}{\Omega_k} \cdot \iint_{\Omega_k} e^{ik \cdot \mathbf{r}} \cdot d\Omega_k = \tilde{\delta}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \text{当 } \mathbf{r} = 0, \\ 0, & \text{当 } \mathbf{r} \neq 0, \end{cases} \quad (30)$$

代入 (29) 式, 有

$$\begin{aligned}
 U_k(\mathbf{r}) = & \frac{ik\Omega_k}{2\pi} \cdot \sum_n \frac{e^{ikr_n}}{r_n} \cdot F(\theta_{r_n}^o) \cdot \tilde{\delta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n) \\
 & + \frac{ik\Omega_k}{2\pi r_o^2} \cdot \sum_n \sum_m \frac{e^{ikr_m}}{r_m} \cdot F(\theta_{r_m}^{r_n-r_m}) \\
 & \times \frac{e^{ik|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|}}{|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|} \cdot F(\theta_{r_n-r_m}^o) \cdot \tilde{\delta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n) \\
 & + \frac{ik\Omega_k}{2\pi} \cdot \sum_n \frac{e^{-ikr_n}}{r_n} \cdot F^*(\theta_{r_n}^o) \cdot \tilde{\delta}(\mathbf{r}+\mathbf{r}_n) \\
 & + \frac{ik\Omega_k}{2\pi r_o^2} \cdot \sum_n \sum_m \frac{e^{-ikr_m}}{r_m} \cdot F^*(\theta_{r_m}^{r_n-r_m})
 \end{aligned}$$

$$\times \frac{e^{-ik|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|}}{|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_m|} \cdot F^*(\theta_{r_n-r_m}^o) \cdot \tilde{\delta}(\mathbf{r}+\mathbf{r}_n). \quad (31)$$

(31) 式中等号右端第一项和第二项分别是一次散射和二次散射的真像, 第三项和第四项分别是一次散射和二次散射的孪生像. 结合多能量全息术<sup>[5]</sup>原理, 根据 (31) 式可以推导出消除了孪生像和多次散射干扰的全息再现像公式, 并可结合双能量全息术<sup>[8]</sup>原理推导出消除了孪生像的全息再现像公式.

本节的结果也可根据直角坐标系中内源全息图再现成像公式 (27) 推导出来.

## 4. 结 论

本文详细阐述了内源全息术对原子成像的原理, 对内源全息术记录和再现全过程做了详细的数学推导, 分别推导出了内源球面全息图在球面坐标系和直角坐标系中的再现公式, 在散射因子球对称和能量无关近似下, 推导出以  $\delta$  函数表示原子全息再现像的解析表达式. 本文推出的内源球面全息图在直角坐标系中的再现公式纠正了 Barton<sup>[3]</sup> 的结果.

内源全息术以发光原子作为相干光源, 其干涉条纹间距为分米量级, 其信号强度为单原子干涉信号的成亿倍, 克服了以往全息术对原子成像时遇到的困难, 从原理上解决了长期困扰晶体衍射的相位问题, 是全息光学发展的一个里程碑. 同步辐射 x 射线源以其准直性、波长连续可调、亮度高等特点, 为内源全息术的发展提供了强有力的支持, 目前国际上越来越多的内源全息图是在同步辐射装置上拍摄的<sup>[6-10, 13-16]</sup>. 北京同步辐射装置具有多条可提供单色硬 x 射线的光束线, 可作为国内内源全息术的研究基地.

[1] Gabor D 1948 *Nature* **161** 777

[2] Szoke A 1986 *Short Wavelength Coherent Radiation: Generation and Applications* Attwood D T, Boker J ed (New York: ATP) p361

[3] Barton J J 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 1345

[4] Harp G R, Saldin D K, Tonner B P 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 1012

[5] Barton J J 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3106

[6] Tegze M, Faigel G 1996 *Nature* **380** 49

[7] Gog T, Len P M, Materlik G et al 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 3132

[8] Nishino Y, Ishikawa T, Hayashi K et al 2002 *Phys. Rev. B* **66** 92105

[9] Faigel G, Tegze M 1999 *Rep. Prog. Phys.* **62** 355

[10] Marchesini S, Schmithüsen F, Tegze F et al 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 4723

[11] Xie H L, Gao H Y, Chen J W et al 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2223

( in Chinese ] 谢红兰、高鸿弈、陈建文等 2003 物理学报 **52** 2223 ]

[ 12 ] Goodman J W 1968 *Introduction to Fourier Optics* ( New York : McGraw-Hill )

[ 13 ] Len P M ,Thevuthasan S ,Fadley C S 1994 *Phys. Rev. B* **50** 11275

[ 14 ] Sébilleau D , Wu Z Y 2003 *Nucl. Sci. Techn.* **14** 28

[ 15 ] Tegze M ,Faigel G ,Marchesini S *et al* 2000 *Nature* **407** 38

[ 16 ] Kopecky M ,Lausi A ,Busetto E *et al* 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 185503

# Principle and analytical description of inside source holography

Zhu Pei-Ping   Wang Jun-Yue   Wu Zi-Yu   Tian Yu-Lian   Jia Quan-Jie   Hu Tian-Dou  
Wu Xiang   Chu Wang-Sheng   Li Gang   Xian Ding-Chang  
( *Institute of High Energy Physics ,Chinese Academy of Sciences ,Beijing   100039 ,China* )  
( Received 24 June 2003 ; revised manuscript received 16 January 2004 )

## Abstract

The conventional holography met with three unsolvable difficulties ,such as coherence of light source ,spatial resolution and sensitivity of detector ,when applied in atomic imaging. This paper is intended to explain how the inside source holography can overcome all these difficulties ,and to investigate the recording and reconstruction procedures of the inside source holography. The reconstruction formula of inside source spherical hologram and the  $\delta$ -functions describing reconstructed atomic images in spherical-symmetrical and energy-irrelevant approximations of atomic scattering factor are deduced.

**Keywords :** inside source holography , synchrotron radiation , crystal structure , Fourier transformation  
**PACC :** 4240K , 2920L , 6110M , 4230K