

ВОПРОСЫ ВОССТАНОВЛЕНИЯ  
ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

А. А. Вязигин

Определена предельная разрешающая способность реконструированных электронно-микроскопических изображений. Геометрические аберрации не приводят к потере информации о мелких деталях в изображении и при надлежащей обработке она может быть извлечена. Разрешение после восстановления существенным образом зависит от характера рассеяния электронов на атомах, апертуры объективной линзы и ускоряющего напряжения. При оптимальном восстановлении дифракционная ошибка может быть существенно снижена. Разрешающая способность изображений существенно зависит от их контраста и для тяжелых атомов разрешение выше, чем для легких.

При наблюдении мелких деталей объектов в просвечивающем электронном микроскопе для получения необходимого фазового контраста в изображении приходится довольно сильно дефокусировать объективную линзу микроскопа. Аберрация дефокусировки в сочетании с принципиально неустранимой сферической аберрацией объективной линзы приводит к сильному искажению в передаче различных пространственных частот. При наблюдении объектов с разрешающей способностью выше 10 Å частотно-контрастная характеристика (ЧКХ) объективной линзы может иметь причудливый характер и даже менять знак контраста в изображении для различных пространственных частот.

В настоящее время ведутся экспериментальные работы по устранению искажений изображений, вносимых ЧКХ объектива микроскопа. Это позволит расширить область достоверно передаваемых частот в объекте в сторону более высоких и повысить разрешающую способность электронного микроскопа. Восстановление изображений может быть проведено посредством обработки снятых в микроскопе негативов либо в когерентной оптической системе, либо на ЭВМ.

Принципиальные ограничения на качество восстановленных (реконструированных) изображений налагают шумы регистрирующей аппаратуры. При фотографической регистрации зерна фотоэмульсии приводят к появлению шумов в фотографическом изображении.

В этой работе с помощью методов математической статистики мы определим предельную разрешающую способность реконструированного электронно-микроскопического изображения. Рассмотрим разрешающую способность восстановленных изображений. Для того чтобы правильно поставить задачу, понадобится строго сформулировать понятие разрешения. В оптике уже много лет ведутся дискуссии, как следует формулировать это понятие. Нам представляется, что это понятие и не может быть единым для всех приборов и изображений. Одной из важнейших характеристик, определяющих качество изображения, является правильность передачи мелких деталей предмета. Это свойство изображения обычно измеряется наименьшим разрешаемым расстоянием между двумя точками, изображения которых мы видим раздельно. Такое определение разрешения не учитывает случайных помех.



Мы определение разрешения сформулируем в терминах задачи об измерении и будем говорить, что прибор разрешает два атома, если можно измерить расстояние между ними, или точнее средняя статистическая ошибка в расстоянии должна быть меньше, чем само расстояние между атомами в объекте. Напомним, что средняя статистическая ошибка является корнем квадратным из дисперсии. Поэтому целью наших дальнейших исследований будет оценка величины дисперсии при измерении расстояний между центрами атомов в восстановленном изображении.

Как известно, связь между изменением фазы электронной волны при прохождении через объект и распределением почернения на микрофотографии его изображения, снятом в электронном микроскопе, описывается соотношением типа свертки

$$f(x, y) = \iint_{-\infty}^{\infty} K(x - \eta, y - \xi) \varphi(\eta, \xi) d\eta d\xi + n(x, y). \quad (1)$$

Здесь  $f(x, y)$  — распределение почернения на фотопластинке,  $\varphi(\eta, \xi)$  — изменение фазы электронной волны при прохождении ее через объект,  $K(x, y)$  — аппаратная функция электронного микроскопа, определяемая его aberrациями и дифракцией,  $n(x, y)$  — случайные помехи, вносимые зерном фотоэмульсии.

В качестве объекта будем рассматривать два изолированных атома, отстоящих друг от друга на расстоянии  $\Delta$ . В этом случае функция объекта  $\varphi(\eta, \xi)$  будет, естественно, зависеть от этого параметра и в дальнейшем обозначаться  $\varphi(\eta, \xi, \Delta)$ .

Если мы восстановим искаженное изображение, решив интегральное уравнение (1) или обработав негатив с помощью оптических фильтров, мы сможем улучшить изображение двух атомов, которое было получено в электронном микроскопе. Ответ на вопрос, насколько может быть улучшено разрешение, дает теория статистических решений.

Совершенно аналогично тому, как это делается для спектральных приборов [1], для оценки дисперсии ошибки в измерении расстояния между центрами атомов может быть использовано неравенство Рао—Крамера. Оно дает нижнюю границу для дисперсии ошибки в измерении расстояния между центрами атомов в следующем виде:

$$D(\Delta^*) \geq \frac{4\pi^2}{\iint_{-\infty}^{\infty} |K(\omega_x, \omega_y)|^2 \left| \frac{\partial \Phi(\omega_x, \omega_y, \Delta)}{\partial \Delta} \right|^2 \frac{d\omega_x d\omega_y}{S(\omega_x, \omega_y)}}. \quad (2)$$

Здесь  $D(\Delta^*)$  — дисперсия ошибки в измерении расстояния между центрами атомов,  $K(\omega_x, \omega_y)$  — Фурье-образ аппаратной функции — частотно-контрастная характеристика прибора,  $S(\omega_x, \omega_y)$  — спектральная плотность шума фотоэмульсии,  $\Phi(\omega_x, \omega_y, \Delta)$  — Фурье-образ функции объекта  $\varphi(\eta, \xi, \Delta)$ . Если отсутствует осевой астигматизм, то  $K(\omega_x, \omega_y)$  — зависит только от модуля пространственной частоты  $K(\omega_x, \omega_y) = K(\omega)$  и для просвечивающего электронного микроскопа при когерентном освещении объекта имеет вид [2]

$$K(\omega) = \sin\left(\frac{a\omega^4}{k^4\alpha^4} - \frac{b\omega^2}{k^2\alpha^2}\right),$$

при  $\omega = \sqrt{\omega_x^2 + \omega_y^2}$ , где  $a = kC_{сф}\alpha^4/4$ ,  $b = \Delta f k\alpha^2/2$ ,  $k$  — волновое число,  $\alpha$  — апертурный угол,  $C_{сф}$  — коэффициент сферической aberrации,  $\Delta f$  — дефокусировка,  $\Delta^*$  — оценка  $\Delta$ .

Согласно работе [3], Фурье-образ функции объекта, составленного из двух атомов, находящихся на расстоянии  $\Delta$ , может быть записан в виде

$$\Phi(\omega_x, \omega_y, \Delta) = \frac{L \cos(\omega_x \Delta/2)}{1 + C \frac{\omega^2}{k^2 \alpha^2}}.$$



Здесь  $L=4\pi k^2 \alpha^2 \bar{r}^2 / 3 \cdot 137\beta$ , где  $\bar{r}^2$  — средний квадрат радиуса атома,  $\beta$  — отношение скорости электронов к скорости света,  $c=k^2 \alpha^2 \bar{r}^2 / 6Z$ ,  $c$  — порядковый номер элемента.

Так как шумы фотоэмульсии изотропны, то спектральная плотность  $S(\omega_x, \omega_y)$  зависит только от модуля частоты  $S(\omega)$ . Если теперь перейти к полярным координатам и проинтегрировать по азимутальному углу, то неравенство (2) можно записать в следующем виде

$$D(\Delta^*) \geq \frac{2\pi}{L^2 \int_0^1 x^3 dx \frac{\sin^2(ax^4 - bx^2)}{(1+cx^2)^2 S(x)} [1 - J_0(k\alpha\Delta x) + J_2(k\alpha\Delta x)]}, \quad (3)$$

при  $x = \omega/k\alpha$ . Интегрирование по апертуре  $\alpha$ .

Спектральная плотность шумов фотоэмульсии, засвеченной светом, довольно хорошо описывается функциональной зависимостью  $S(\omega) = S_0/\omega$ , где  $S_0$  зависит от фотоматериала.

Интеграл, стоящий в знаменателе неравенства (3), может быть приближенно вычислен в естественном приближении, что расстояние между центрами атомов достаточно мало. Разлагая функции Бесселя в ряд и удерживая квадратичные члены разложения с помощью метода стационарной фазы, можно получить

$$I = \int_0^1 \frac{x^3 dx \sin(ax^4 - bx^2)}{(1+cx^2)^2} = \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{3c(1+c)} - \frac{5}{3c^2(1+c)} - \frac{5}{2c^3(1+c)} + \frac{5 \operatorname{arc} \operatorname{tg} c^{1/2}}{2c^{1/2}} \right] \frac{\pi^{1/2} b^{5/2} \cos\left(-\frac{b^2}{2a} + \frac{\pi}{4}\right)}{16a^3 \left(1 + c \frac{b}{2a}\right)^2}, \quad (4)$$

и неравенство (3) запишется тогда в следующем виде;

$$D(\Delta^*) \geq \frac{16\pi S_0}{3L^2 \Delta^2 k^2 \alpha^2 I}. \quad (3')$$

Численные расчеты, проведенные по формуле (4), показали, что второй член в этой формуле, который только и зависит от сферической аберрации объектива и дефокусировки, по крайней мере на два порядка меньше, чем первый член в этом выражении, который в свою очередь определяется атомным номером атомов, которые мы рассматриваем, апертурой объектива и ускоряющим напряжением.

Для того чтобы надежно различать атомы отдельно и иметь возможность измерить расстояние между их центрами, надо, чтобы средняя статистическая ошибка измерения, равная  $\sigma = \sqrt{D(\Delta^*)}$ , была существенно меньше измеряемой величины  $\Delta$ . Скажем, для гауссовых случайных величин обычно принимают, что подобное измерение сделано надежно, если  $3\sigma > \Delta$  (так называемый закон «трех сигма»).

Во всяком случае можно утверждать, что если расстояние между атомами совпадает со средней статистической ошибкой, то почти наверное атомы уже нельзя увидеть раздельно. Поэтому оценка снизу для предельного разрешаемого расстояния  $\Delta = \sigma$ . Используя это в неравенстве (3) и заменяя его равенством, получим для предельного разрешения следующее выражение:

$$\Delta = \frac{2(2\pi)^{1/4} S_0^{1/4}}{(Lk\alpha)^{1/2} 3^{1/4} \left[ \frac{1}{3c(1+c)} - \frac{5}{3c^2(1+c)} - \frac{5}{2c^3(1+c)} + \frac{5 \operatorname{arc} \operatorname{tg} c^{1/2}}{2c^{1/2}} \right]^{1/4}}. \quad (5)$$

Разрешаемое расстояние для различных атомов представлено на рисунке, где по оси абсцисс отложен номер элементов, по оси ординат — разрешение. Расчеты были проведены для трех значений апертуры объ-



ектива  $\alpha=10^{-2}$ ,  $5 \cdot 10^{-2}$ ,  $10^{-1}$ . Ускоряющее напряжение 100 кэВ, постоянная  $S_0$ , характеризующая мощность шума фотоэмульсии была взята нами  $2 \cdot 10^{-3} \text{ А}^2$ , по данным о шумах фотоэмульсий, засвеченных видимым светом. Поскольку зависимость разрешения от этой постоянной содержит корень четвертой степени, можно надеяться, что полученные значения предельного разрешения не будут сильно отличаться от тех значений, которые могут быть получены при засветке фотопластинок электронами средних энергий. Из приведенных результатов можно сделать следующие выводы.

1. Геометрические аберрации, такие как сферическая и дефокусировка объектива, практически не сказываются на разрешении после восстановления. По-видимому, это будет иметь место и для других геометрических аберраций.

Таким образом, геометрические аберрации не приводят к потере информации о мелких деталях в изображении и при надлежащей обработке она может быть извлечена.

2. Разрешение после восстановления существенным образом зависит от характера рассеяния электронов на атомах, апертуры объектива и ускоряющего напряжения. Следует отметить, что при оптимальном восстановлении изображения дифракционная ошибка может быть существенно снижена.

3. Разрешающая способность электронно-микроскопических изображений существенно зависит от их контраста и для тяжелых атомов разрешение выше, чем для легких.

Автор благодарен Ю. В. Воробьеву за полезные обсуждения.

[1] В. П. Козлов. *Опт. и спектр.*, 16, 501, 1964.

[2] O. Scherzger. *J. Appl. Phys.*, 20, 20, 1949.

[3] А. А. Вязигин, Ю. В. Воробьев. *Изв. АН СССР, сер. физ.*, 27, 1122, 1963.

Поступило в Редакцию 7 февраля 1978 г.

