

同步辐射 X 射线光斑信息对扫描相干衍射成像的影响

刘海岗^{1,2} 许子健¹ 王春鹏^{1,2} 郭智¹ 张祥志¹ 邵仁忠¹

¹ (中国科学院上海应用物理研究所 上海同步辐射光源 上海 201800)

² (中国科学院大学 北京 100049)

摘要 本文采用拓展重叠关联迭代引擎算法,系统地模拟研究了 X 射线光斑尺寸、扫描点数及波前形貌对扫描相干衍射成像重建图像质量的影响。结果表明,在实际入射光斑尺寸不易确定时,算法中初始猜测光斑尺寸可以由模拟入射光斑最大光强值的 1% 对应边界确定。对物体进行扫描时,入射光斑个数大于 7×7 且重叠度优于 70% 可以重建出较好的图像。入射光斑的振幅和位相分布对重建图像质量也有着显著影响。

关键词 扫描相干衍射成像, 位相恢复算法, 分辨率, 同步辐射 X 射线

中图分类号 TL11

基于同步辐射 X 射线的相干衍射成像 (CDI) 方法是近年发展起来的一种新颖的无透镜显微成像技术,已经在材料、生物、医学、环境等多个领域的二维和三维成像方面得到了广泛应用^[1-16]。由于相干衍射成像的分辨率与入射光波长成反比,与入射光的光通量成正比,而同步辐射具有短波长、高通量、高相干性、高单色性、大视场等独特的优势,可以用来开展相干衍射成像,并使 CDI 在生物医学成像和材料科学等领域都有着广阔的应用前景。传统的单次 CDI 成像需要待测物体尺寸小于入射光斑,这限制了成像视场;并且其所需位相恢复算法还有停滞、收敛慢、重建结果不唯一等缺陷^[16]。为了解决这些问题,Faulkner^[17]和 Rodenburg^[18]提出一种名为 Ptychographic CDI (缩写为 PCDI) 或扫描 CDI 的新型成像方法。PCDI 理论上可以对垂直光轴方向上任意大小的物体成像,它采用一个局域照明探针移动扫描透射物体(或者探针不动,样品移动),相邻扫描光斑有部分重叠,在扫描移动的同时用 CCD 记录一系列扫描位置对应的衍射花样,最后采用重叠关联迭代引擎算法 (PIE) 对衍射花样进行重构得到样品图像。PCDI 已在可见光^[19]和 X 射线^[20]波段得到了实验验证。2008 年,Thibault^[13]提出了

一种名为平行重叠关联迭代引擎 (pPIE) 算法并进行了实验验证。该算法可以同时重建出物体透射函数和入射光波函数。2009 年,Maiden^[21]提出的拓展重叠关联迭代引擎 (ePIE) 亦能同时重构出样品透射函数和探针入射函数,但具有比 pPIE 收敛更快和重建图像质量更好的特点。2012 年,Maiden^[22]又提出了位置纠正重叠关联迭代引擎算法 (pcPIE),该算法可以很好地修正扫描移动偏差提高重建图像分辨率。除此之外,Guizar-Sicairos^[23]还提出了非线性优化的 PCDI 算法,该算法也可以在重建迭代过程中对扫描位置偏差进行修正。

在扫描相干衍射成像 (PCDI) 实验中,入射光斑信息对图像重建质量的优劣有着至关重要的影响。尽管已有文献部分涉及到这个问题^[24-25],但是他们均采用旧的重叠关联迭代算法^[17-18],重建过程中入射探针信息需事先预知,所以入射光斑对重建图像的影响研究甚少且不全面。本文采用拓展重叠关联迭代算法,模拟研究了实际入射光斑尺寸不易确定时,算法中如何选择初始猜测光斑的尺寸;对物体进行扫描时,如何选择入射光斑扫描的个数和扫描重叠度;入射光斑的振幅和位相分布对重建图像质量的影响规律。

基金项目: 中国科学院知识创新工程重要方向性项目 (批准号:KJ CX2-YW-N38)、国家杰出青年科学基金 (批准号:11225527)、国家自然科学基金青年基金 (批准号:11205232) 和中国科学院大科学装置开放研究项目: 自主装技术与超高密度纳米阵列研究资助

第一作者: 刘海岗, 男, 1982 年出生, 2009 年于四川大学获硕士学位, 2013 年于中国科学院上海应用物理研究所获博士学位。主要研究方向是 X 射线相干衍射成像

通讯作者: 许子健, 副研究员, E-mail: xuzijian@sinap.ac.cn; 邵仁忠, 研究员, E-mail: tairenzhong@sinap.ac.cn

收稿日期: 2013-04-14; 修回日期: 2013-05-13

1 模拟方法

扫描相干衍射成像的实验装置如图 1 所示。一个有限大小的光探针移动扫描物体（或探针不动，样品移动），同时用 CCD 采集对应位置的衍射光强花样，最后采用重叠关联迭代引擎算法可重构出物体图像。本文所用算法的原理及详细公式见文献 [17]、[18] 和 [21]，这里只给出主要公式和步骤。入射光波 $P(\mathbf{r})$ 入射到物体 $O(\mathbf{r})$ 上，形成出射波

$$\psi_{g,j}(\mathbf{r}) = O_{g,j}(\mathbf{r})P_{g,j}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (1)$$

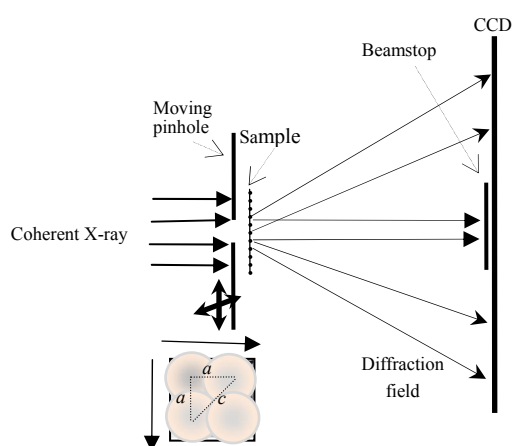


图 1 扫描相干衍射成像实验示意图
Fig.1 Schematic of the experimental setup of scanning CDI

该出射波在远场形成衍射光强花样 $I_j(\mathbf{q})$

$$I_j(\mathbf{q}) \propto \left| F[O_{g,j}(\mathbf{r})P_{g,j}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)] \right|^2, \quad (2)$$

式中， $\mathbf{q}$ 为傅里叶空间坐标，符号 F 表示傅里叶变换， $\mathbf{R}$ 为探针与物体的相对位置矢量，下标 j 表示第 j 个探针位置， g 表示第 g 轮迭代。在傅里叶空间中用 CCD 采集的光强的平方根替换修正

$$\Psi_{g,j}(\mathbf{q}) = \sqrt{I_j(\mathbf{q})} \frac{F[\psi_{g,j}(\mathbf{r})]}{F[\psi_{g,j}(\mathbf{r})]}. \quad (3)$$

进行逆傅里叶变换得到新的透射波函数为

$$\psi'_{g,j}(\mathbf{r}) = F^{-1}[\Psi_{g,j}(\mathbf{q})], \quad (4)$$

把新的透射波函数代入下面的物体和探针函数的更新公式 (5) 和 (6) 中可得到升级后的物体透射函数和入射光斑函数。其中参数 α, β 控制升级步长，取值范围为 0-1。然后移动到下一个扫描位置，重复上述步骤 (1) - (6) 直到每一个扫描位置的衍射花样都参与物体和探针函数的升级，这便完成了一步迭代。重复上面的循环迭代直到重建图像质量不再改善为止。重建图像的质量由 (7) 式来衡量，其中 O_{recon} 和 O_{orig} 分别为重建图像函数和原始图像函数， N 为物体扫描区域总像素个数。

$$O_{j+1}(\mathbf{r}) = O_j(\mathbf{r}) + \alpha \frac{P_j^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{s(j)})}{|P(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{s(j)})|_{\max}^2} (\psi'_{j,j}(\mathbf{r}) - \psi_j(\mathbf{r})) \quad (5)$$

$$P_{j+1}(\mathbf{r}) = P_j(\mathbf{r}) + \beta \frac{O_j^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}_{s(j)})}{|O(\mathbf{r} + \mathbf{R}_{s(j)})|_{\max}^2} (\psi'_{j,j}(\mathbf{r}) - \psi_j(\mathbf{r})) \quad (6)$$

$$RMS = \frac{\sum_{i=1}^N |O_{\text{orig}}(i) - \gamma O_{\text{recon}}(i)|^2}{\sum_{i=1}^N |O_{\text{orig}}(i)|^2}, \quad \gamma = \frac{\sum_{i=1}^N O_{\text{orig}}(i) O_{\text{recon}}^*(i)}{\sum_{i=1}^N |O_{\text{recon}}(i)|^2} \quad (7)$$

过采样条件决定着能否成功重构出物体图像。实验时选用小尺寸像素且像素阵列足够大的 CCD 并合理选择探测器和物体的距离可很好地满足过采样条件。本文模拟中，CCD 阵列设为 1024×1024 。大小 340×340 像素的一对数据图像处理经常使用的

图像作为测试原图，如图 2(b) 所示，其中标注 1 和 2 分别对应振幅和位相图像。振幅灰度值范围为 0-1，位相取值范围为 -0.5-0.5。计算可知整幅图的过采样比为 10.8。由于 PCDI 的探针尺寸远小于测试图片，故有更大过采样比，更能满足过采样条件。

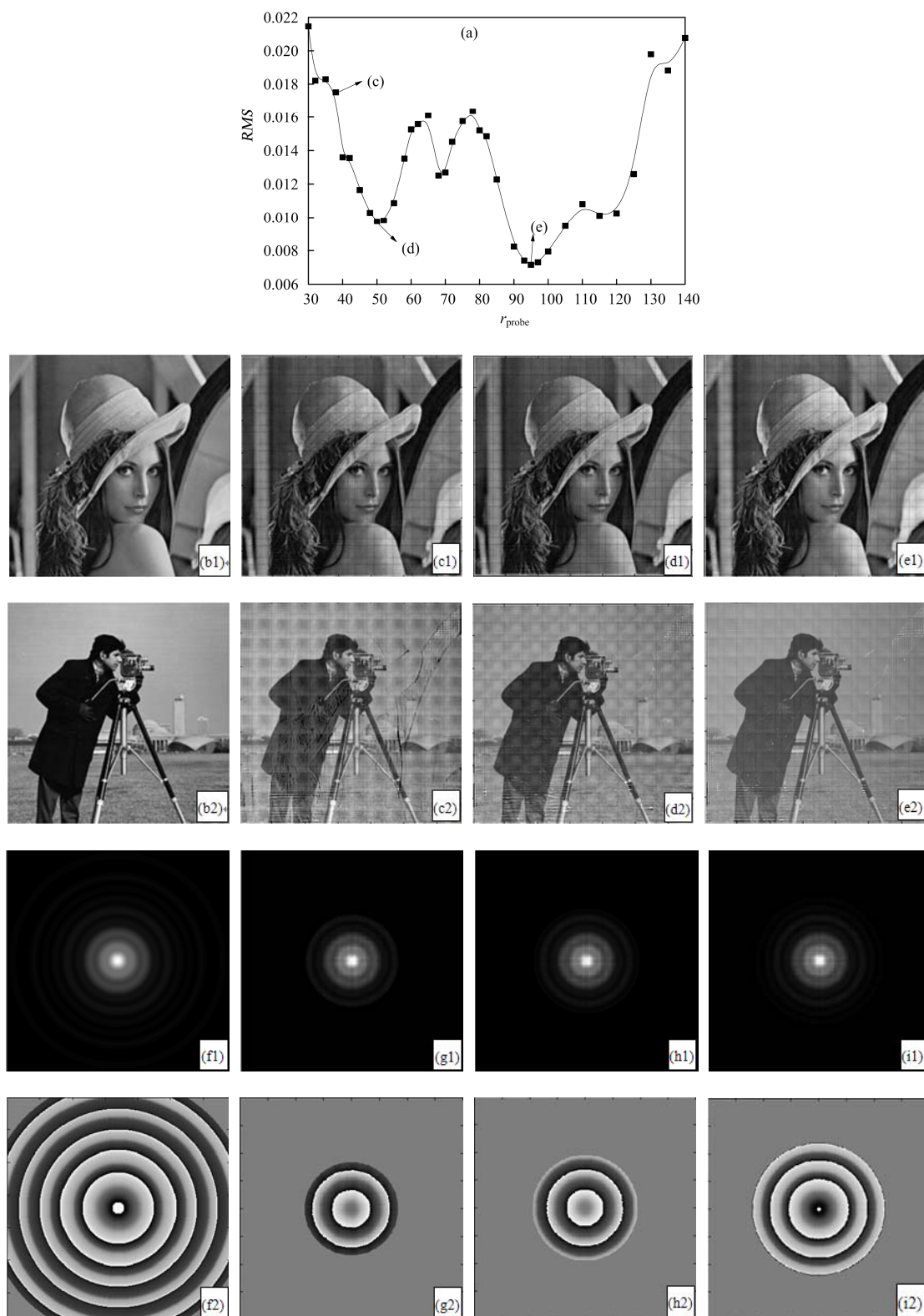


图2 算法中初始猜测光斑尺寸对重建振幅(标注1)和位相(标注2)图像和误差的影响: (a)不同初始猜测光斑尺寸对重建物体误差的影响; (b)测试物体原图; (c-e)初始猜测光斑尺寸(r_{probe})分别为 38、50 和 95 个物空间像素(fps)的重建物体图像(它们的对应 RMS 值已在图 2(a)中标出); (f)入射光斑的原始振幅和位相图; (g-i)与图(c-e)同时重建的入射光斑图像

Fig.2 Effects of initial guessed spot in algorithm on the reconstructed amplitude (labeled 1) and phase (labeled 2) images and RMS: (a) RMS of reconstructed object versus the different initial guessed spot. (b) Original object image. (c-e) Reconstructed object images for initial guessed spot $r_{\text{probe}}=38, 50$ and 95 real figure pixels (fps), respectively, and their corresponding RMS errors are denoted by the arrows in Fig.2(a). (g-i) Reconstructed probe images for the same positions of Figs. (c-e)

2 数值计算结果和分析

实验中 PCDI 会受多种因素影响,如入射探针尺寸和分布、扫描探针个数及重叠度、噪声等。本文中噪声选为随机噪声,其大小分布与衍射花样之间满足关系:噪声=信号 $\times$ 随机函数/信噪比^[26]。其中随机函数取值范围为-0.5~0.5,信噪比为 20,则每个像素点上噪声最大值为光强值的 2.5%。扫描探针重叠度 (OR) 定义为

$$OR=1-a/2r_{\text{probe}}, \quad (8)$$

式中参数 a 为扫描探针步长, r_{probe} 是扫描探针半径。

在真实 CDI 实验中,由于入射光斑边界(或者尺寸)很难确定,而在位相算法中又需要知道初始猜测光斑的尺寸。对于这个问题,本文以菲涅耳波带片^[27]形成的光束作为真实入射光斑,如图 2(f)所示。图 2 给出了算法中初始猜测光斑大小对物体和入射光斑重建图像及误差的影响。模拟过程中,真实光斑移动步长为 29 个物图像像素 (fps) 产生一系列衍射花样,重建过程中光斑移动步长也设定为 29 fps。初始猜测光斑为圆透射函数,所有重建结果均经过 500 次循环迭代,RMS 计算范围为物体图像中心 200 $\times$ 200 个像素区域。

由图 2(a)可知,随着初始猜测光斑尺寸的增大,重建图像误差不是线性变化,而是波动变化,且出现了若干个极大值和极小值,各极小值对应初始入射光斑的半径分别为 $r_{\text{probe}}=50$ 、70 和 95 fps。在真实入射光斑光强分布中,上述半径对应的光强与中心最大值的比分别为 1.23%、0.18%和 0.2%。因此,算法中初始猜测光斑尺寸可以由真实入射光斑最大光强值的 1%对应边界确定。由公式 (8) 可知,极小值对应的重叠度 OR 分别为 71%、80%和 84.7%,最小值对应 OR=84.7%。这一结论与文献[25]的结论有所不同,这是由于模拟时算法中初始探针信息是否预知和扫描区域是否固定等因素所致。不过重叠度大于 70%有好的重建图像,此结论与文献[25]一致。

上述变化规律由图 2(c-e)也可以看出来。图中出现的方格噪声是由矩形扫描方式引起的,采用环形或者无规律扫描方式可以减弱或消除^[28]。由图 2(c-e)可知,随着光斑尺寸增大,重建物体振幅和位相图像中的重影消失,且方格噪声逐渐减弱。物体振幅图像对比度比位相图像高,这说明振幅比位相更容易重建。图 2(g-i)为入射光斑的重建图像。由图 2 可知,振幅和位相的重建图像质量都非常好,且没有方格噪声出现,这说明入射光斑比物体更容易重建。在实际实验时,通常情况下入射光斑尺寸固定。

对物体进行扫描时需选择光斑扫描的重叠度和扫描个数,图 3 给出了这两个因素对重建结果的影响规律,此时生成衍射花样的真实入射光斑仍为图 2(f)所示。由于物体大小的限制及光斑扫描个数的讨论,重建算法中初始入射光斑的半径设定为 $r_{\text{probe}}=50$ fps,误差计算范围为初始光斑扫描覆盖的区域(与光斑大小和重叠度有关)。由图 3(a)可知,扫描光斑个数较少时,如 OR=60%, $n_{\text{probe}}\leq 25$; OR=70%, $n_{\text{probe}}\leq 16$; OR=80%, $n_{\text{probe}}\leq 9$ 时,重建误差很大,这表明重建图像很差甚至不能成功重建。当扫描光斑个数较多,如 OR=60%, $n_{\text{probe}}\geq 7$; OR=70%, $n_{\text{probe}}\geq 6$; OR=80%, $n_{\text{probe}}\geq 5$ 时,重建误差很小,这表明重建图像质量较好,如图 3(b-e)所示。上述结果也表明,较大重叠度下只需较少的光斑扫描个数就可以成功重建图像。对于相同的光斑扫描个数,重叠度越大,重建图像质量越好,如图 3(b-d)所示。这是由于重叠度越高,在某一光斑位置处物体被相邻光斑照射的次数也越多,区间的相关信息也就越多,同时扫描区域越小,未知信息越少,也就是已知信息对未知信息比越大,因此更容易重建。对于一定的重叠度,更多的光斑扫描个数也会促使重建图像质量更好,如图 3(d)和 3(e)所示。因此,实际实验时选择光斑扫描数多于 7 $\times$ 7 且优于 70%的重叠度对物体进行扫描可以获得更好的重建图像。

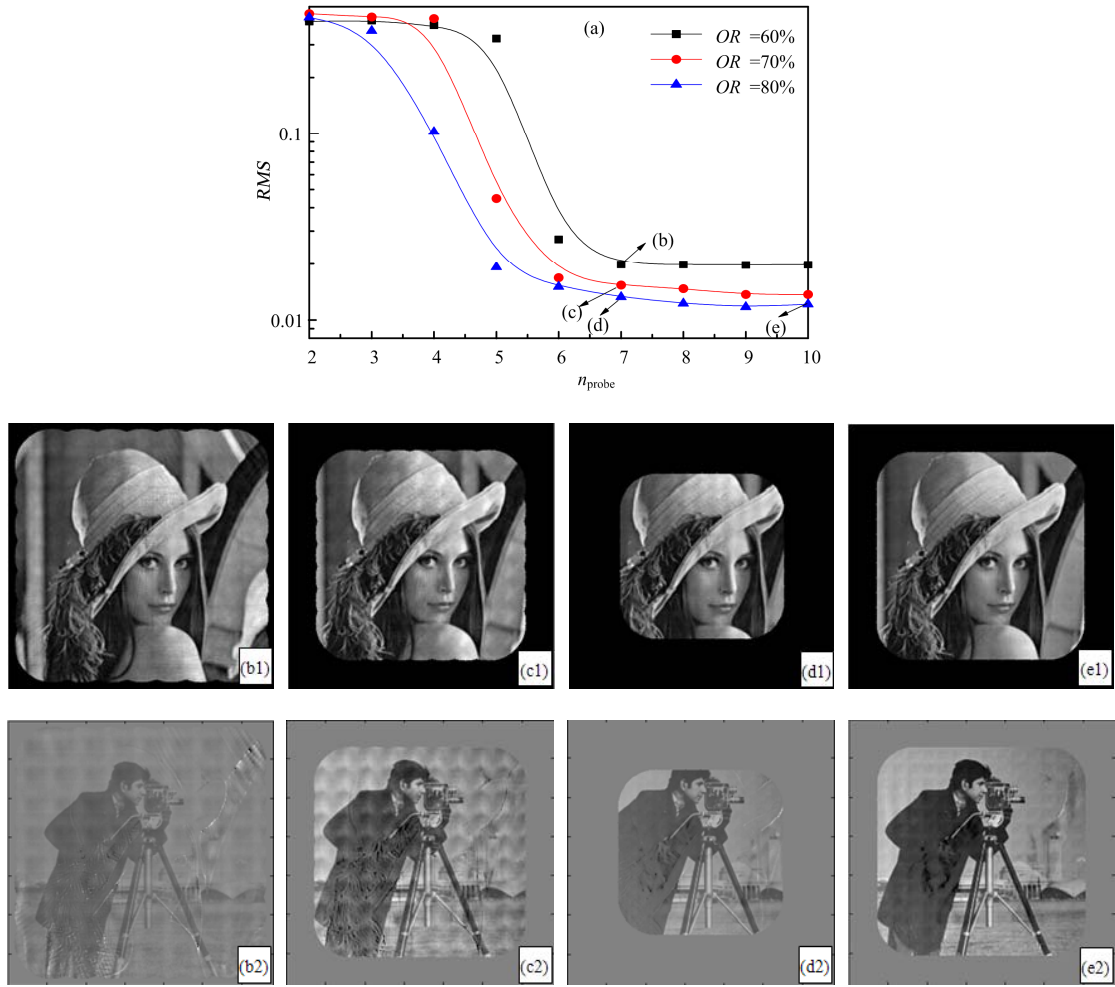


图 3 光斑扫描数和重叠度对重建物体图像和误差的影响: (a)光斑扫描数(n_{probe})和重叠度(OR)对重建物体图像误差的影响, 其中 n_{probe} 为方形扫描横向或纵向上光斑位置个数; (b-d) $n_{\text{probe}}=7$, OR=60%、70%和 80%对应的重建物体图像;(e) $n_{\text{probe}}=10$, OR=80%对应的重建物体图像; 它们的对应 RMS 值已在图 3(a)中标出

Fig.3 Effects of scanning probe number and overlap ratio on the reconstructed object images and RMS. (a) RMS of reconstructed object versus the scanning probe number (n_{probe}) and overlap ratio (OR), where n_{probe} is the probe position number in horizontal or vertical direction of square scan. (b-d) Reconstructed object images for OR=60%, 70% and 80% with $n_{\text{probe}}=7$, respectively. (e) Reconstructed object image for $n_{\text{probe}}=7$ and OR=80%; their corresponding RMS errors are denoted by the arrows in Fig.3(a)

针对入射光斑振幅和位相形貌信息对重建图像的影响, 图 4 给出了模拟结果。模拟时, 光斑入射通量相同, 振幅 A_1 为常数, A_2 为具有一定变化分布。位相 φ_1 变化范围小于 2π 周期, 且取值范围为 $-0.9\pi-0.24\pi$, 位相 φ_2 变化范围大于 2π 周期, 且取值范围为 $-\pi-\pi$ 。由图 4(a)可知, 对于相同的振幅, 剧烈变化位相的重建误差值比缓慢变化位相的重建误差值小, 表明有更好的重建图像, 如图 4(b)和 4(c),

4(d)和 4(e)所示。对于相同的位相, 平滑不变的振幅比变化的振幅有更小的重建误差, 意味着有更高质量的重建图像, 如图 4(b)和 4(d), 4(c)和 4(e)所示。对比重建的振幅和位相图像可知, 入射探针不同的振幅和位相分布主要对重建物体的位相图像有明显影响, 而对振幅的影响几乎可以忽略。因此, 实验中选择振幅无明显变化, 而位相有剧烈曲率变化的入射光斑可以重建出更高质量的图像。

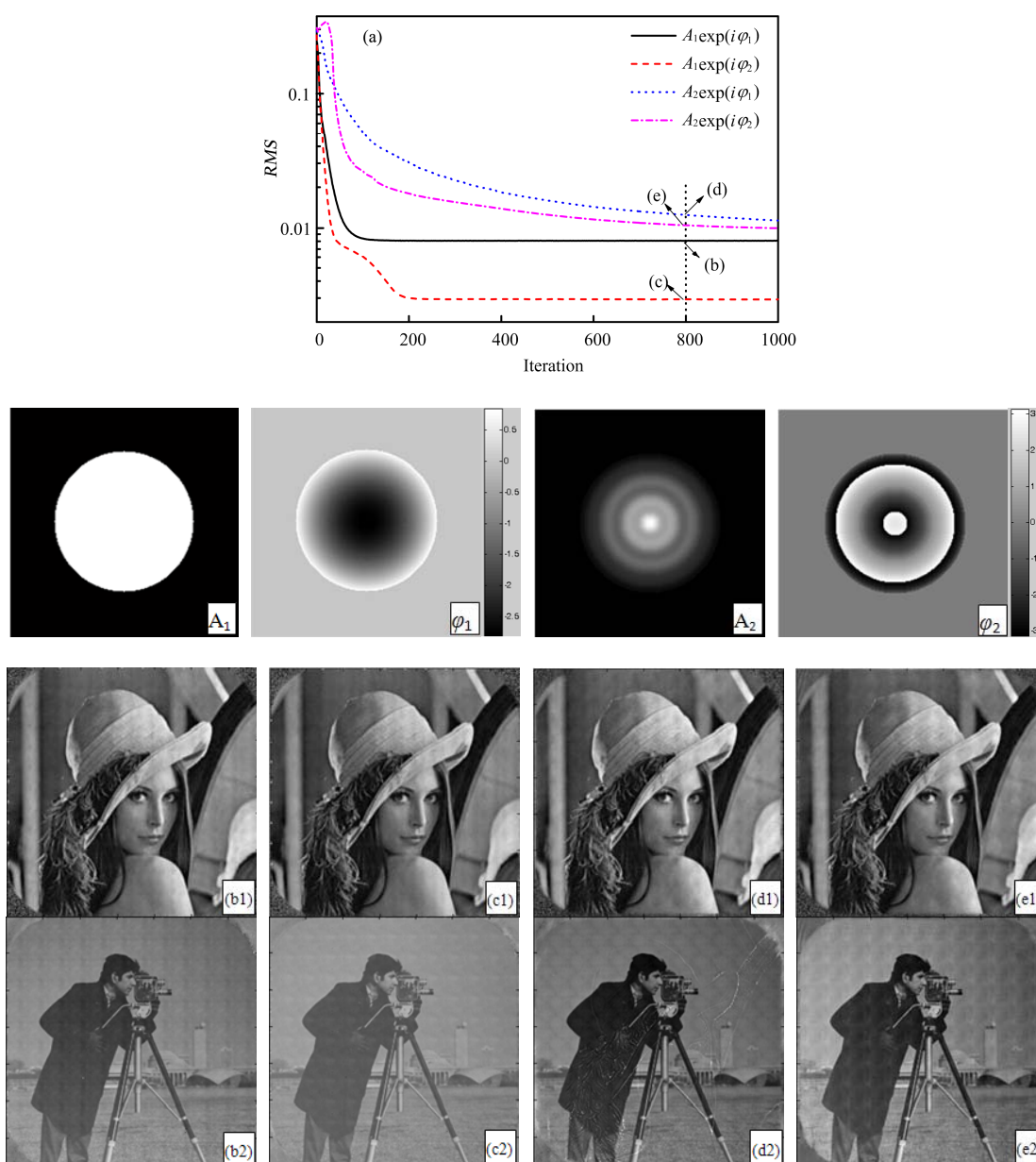


图4 入射光斑振幅和位相分布对重建物体图像和误差的影响: (a)不同形式的入射光斑对重建物体误差的影响, 其中 A_1 和 A_2 为两种不同的光斑振幅分布, φ_1 和 φ_2 为两种不同的光斑位相分布; (b-e)为重建物体振幅和位相图像, 它们的对应 RMS 值已在图 4(a)中标出

Fig.4 Effects of amplitude and phase of incident probe on the reconstructed object images and RMS: (a) RMS of reconstructed object images versus different incident probe, where A_1 and A_2 are two different amplitude distributions, φ_1 and φ_2 are two different phase distributions. (b-e) Reconstructed object amplitude and phase images, their corresponding RMS are denoted by the arrows in Fig.4(a)

3 结论

本文采用拓展重叠关联迭代算法对入射光斑信息对扫描相干衍射成像的影响进行了系统的数值模拟研究。结果发现, 对于真实入射光斑边界不易确定问题, 重建算法中初始光斑尺寸可以由真实入射光斑选取阈值来确定, 即最大光强值 1%对应的半

径可以作为算法中初始光斑的半径。对物体进行扫描时, 选取覆盖物体的光斑数目多于 7×7 且扫描移动重叠度优于 70%可以获得较好的重建图像。实验中选用振幅无明显变化和位相具有显著曲率变化的入射光斑可以更快、更好的重建物体图像。本文所得结果对提高扫描相干衍射成像的分辨率具有重要的指导意义。

参考文献

- Chapman H N, Nugent K A. Coherent lensless X-ray imaging [J]. *Nature Photon*, 2010, **4**: 833-839
- Miao J W, Charalambous P, Kirz J, *et al.* Extending the methodology of X-ray crystallography to allow imaging of micrometre-sized non-crystalline specimens [J]. *Nature*, 1999, **400**: 342-344
- Miao J W, Ishikawa T, Johnson B, *et al.* High resolution 3D X-ray diffraction microscopy [J]. *Phys Rev Lett*, 2002, **89**: 088303-088304
- Shapiro D, Thibault P, Beetz T, *et al.* Biological imaging by soft x-ray diffraction microscopy [J]. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2005, **102**: 15343-15346
- Schroer C G, Boye P, Feldkamp J M, *et al.* Coherent X-Ray Diffraction Imaging with Nanofocused Illumination [J]. *Phys Rev Lett*, 2008, **101**: 090801
- Abbey B, Whitehead L W, Quiney H M, *et al.* Lensless imaging using broadband X-ray sources [J]. *Nature Photon*, 2011, **5**: 420-424
- Raines K S, Salha S, Sandberg R L, *et al.* Three-dimensional structure determination from a single view [J]. *Nature*, 2010, **463**: 214-217
- Putkunz C T, Clark J N, Vine D J, *et al.* Phase-Diverse Coherent Diffractive Imaging: High Sensitivity with Low Dose [J]. *Phys Rev Lett*, 2011, **106**: 013903
- Dierolf M, Menzel A, Thibault P, *et al.* Ptychographic X-ray computed tomography at the nanoscale [J]. *Nature*, 2010, **467**: 436-440
- Jiang H D, Song C Y, Chen C, *et al.* Quantitative 3D imaging of whole, unstained cells by using X-ray diffraction microscopy [J]. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2010, **107**: 11234-11239
- Song C Y, Jiang H D, Mancuso A, *et al.* Quantitative Imaging of Single, Unstained Viruses with Coherent X Rays [J]. *Phys Rev Lett*, 2008, **101**: 158101
- Jiang H D, Ramunno-Johnson D, Song C Y, *et al.* Nanoscale Imaging of Mineral Crystals inside Biological Composite Materials Using X-Ray Diffraction Microscopy [J]. *Phys Rev Lett*, 2008, **100**: 038103
- Thibault P, Dierolf M, Menzel A, *et al.* High-resolution scanning X-ray diffraction microscopy [J]. *Science*, 2008, **321**: 379-382
- 范家东, 江怀东. 相干 X 射线衍射成像技术及在材料学和生物学中的应用 [J]. *物理学报*, 2012, **61**(21): 218702-14
- FAN Jiadong, JIANG Huaiddong. Coherent X-ray diffraction imaging and its application in materials science and biology [J]. *Acta Phys Sin*, 2012, **61**(21): 218702-14
- 祝江威, 许子健, 刘海岗, 等. 基于 X 射线相干衍射成像的元素分布成像 [J]. *核技术*, 2012, **35**: 245-250
- ZHU Jiangwei, XU Zijian, LIU Haigang, *et al.* Three-dimension elemental mapping based on coherent X-ray diffraction imaging [J]. *Nucl Tech*, 2012, **35**: 245-250
- Marchesini S, Chapman H N, Hau-Riege S P, *et al.* Coherent X-ray diffractive imaging: applications and limitations [J]. *Opt Express*, 2003, **11**: 2344-2353
- Faulkner H M, Rodenburg J M. Movable aperture lensless transmission microscopy: A novel phase retrieval algorithm [J]. *Phys Rev Lett*, 2004, **93**: 023903
- Rodenburg J M, Faulkner H M. Phase retrieval algorithm for shifting illumination [J]. *Appl Phys Lett*, 2004, **85**: 4795-4797
- Rodenburg J M, Hurst A C, Cullis A G. Transmission microscopy without lenses for objects of unlimited size [J]. *Ultramicroscopy*, 2007, **107**: 227-231
- Rodenburg J M, Hurst A C, Cullis A G, *et al.* Hard-X-ray lensless imaging of extended objects [J]. *Phys Rev Lett*, 2007, **98**: 034801
- Maiden A M, Rodenburg J M. An improved ptychographical phase retrieval algorithm for diffractive imaging [J]. *Ultramicroscopy*, 2009, **109**: 1256-1262
- Maiden A M, Humphry M J, Sarahan M C, *et al.* An annealing algorithm to correct positioning errors in ptychography [J]. *Ultramicroscopy*, 2012, **120**: 64-72
- Guizar-Sicairos M, Fienup J R. Phase retrieval with transverse translation diversity: a nonlinear optimization approach [J]. *Opt Express*, 2008, **16**: 7264-7278
- Faulkner H M L, Rodenburg J M. Error tolerance of an iterative phase retrieval algorithm for moveable illumination microscopy [J]. *Ultramicroscopy*, 2005, **103**: 153-164
- Bunk O, Dierolf M, Kynde S, *et al.* Influence of the overlap parameter on the convergence of the ptychographical iterative engine [J]. *Ultramicroscopy*,

- 2008, **108**: 481-487
- 26 Miao J, Sayre D, Chapman H N. Phase retrieval from the magnitude of the Fourier transforms of nonperiodic objects [J]. J Opt Soc Am A, 1998, **15**: 1662-1669
- 27 Attwood D. Soft X-rays and extreme ultraviolet radiation: principles and applications [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2000: 353-357
- 28 Dierolf M, Thibault P, Menzel A, *et al.* Ptychographic coherent diffractive imaging of weakly scattering specimens [J]. New J Phys, 2010, **12**: 035017

Effects of synchrotron radiation X-ray beam on ptychographic coherent diffractive imaging

LIU Haigang^{1,2} XU Zijian¹ WANG Chunpeng^{1,2} GUO Zhi¹
ZHANG Xiangzhi¹ TAI Renzhong¹

¹ (Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences,
Shanghai 201800, China)

² (University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

ABSTRACT Based on the extended ptychographical iterative engine (ePIE) algorithm, the effects of the incident probe size, scanning position number, and wavefront morphology on the reconstructed image were systematically studied with numerical simulation. The results show that the guessed initial probe size in ePIE can be determined by the corresponding boundary of 1% of maximum intensity of the simulated incident probe when the real incident beam size is difficult to determine exactly. When imaging a sample by PCDI, a better image can be reconstructed by choosing the number of scanning points as more than 7×7 and a scanning overlap ratio as larger than 70%. The amplitude distributions and incident spot phase also have significant effects on the reconstructed image quality.

KEYWORDS Ptychographical coherent diffractive imaging, Phase retrieval algorithm, Resolution, Synchrotron radiation X-ray

CLC TL11