

相干 X 射线衍射成像的数字模拟研究*

周光照¹⁾²⁾ 佟亚军¹⁾²⁾ 陈 灿¹⁾²⁾ 任玉琦¹⁾²⁾ 王玉丹¹⁾²⁾ 肖体乔^{1)†}

1) (中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201204)

2) (中国科学院研究生院, 北京 100049)

(2009 年 11 月 11 日收到; 2010 年 4 月 12 日收到修改稿)

相位重建是实现 X 射线相干衍射成像的关键, 它利用远场采集的样品傅里叶相干衍射花样, 结合过采样理论, 再采用迭代算法复原样品的相位信息. 文中采用数字模拟的方法, 利用小尺寸二维非周期性图形作为物场, 研究了过采样比对重构结果的影响, 研究发现, 迭代次数为 1000 次时最佳过采样比的范围是 3—7 之间. 利用噪声模拟方法, 研究了噪声对相位重建的影响, 找到了完成相位重建的噪声限是信噪比不能低于 10. 分析了重构结果中孪生像以及随机平移的产生原因, 并给出了相应的解决办法, 结果表明, 此方法可有效地提高重构图像的质量.

关键词: 相干 X 射线衍射成像, 过采样, 相位重建算法, 显微成像

PACS: 87.59.-e, 42.30.Rx, 42.30.Wb

1. 引言

近一个世纪以来, 科学家们不断探索测定物质三维结构的方法, 希望能够看到物质内部的原子是如何排列的. 传统的 X 射线晶体衍射成像方法 (XRD) 能够实现物质的高分辨三维测定, 但是需要的样品是晶体. 然而在实际应用中, 有许多材料不能得到足够好的结晶体, 甚至根本无法结晶, 因此对于这些非周期性样品来说, 不能通过传统的 XRD 的方法来测定它们的结构. X 射线相位衬度成像 (X-ray phase contrast imaging, XPCI) 可以实现高分辨率的二维及三维成像^[1-3], 分辨率可达到 1 μm , 但是对于无序纳米材料、量子点和量子线、生物单细胞以及单个复杂大蛋白等, 这样的分辨率显然还不能满足要求. 无透镜傅里叶变换 (LLFT) X 射线全息术虽然可以实现非周期样品的二维及三维成像, 但是由于实验光路中使用波带板, 分辨率受到了波带板的严格限制. X 射线荧光全息术 (X-ray fluorescence holography, XFH) 能够达到原子尺度的分辨率, 然而该方法要求样品是晶体^[4]. 目前其他一些比较成熟的显微成像方法中, 诸如扫描电子显

微镜 (SEM), 扫描隧道显微镜 (STM) 以及原子力显微镜 (AFM) 等, 虽然有很高的分辨率, 但是只能观察到样品表面的显微结构, 无法看到样品内部的结构信息.

X 射线相干衍射成像 (coherent X-ray diffractive imaging, CXDI)^[5] 是一种新型衍射显微术, 不仅成像分辨率高 (目前最好的分辨率可达到 10 nm 左右)^[6], 而且可以实现三维重构观察样品内部的结构信息, 同时也不要样品是结晶体. CXDI 也可称为 X 射线相干衍射显微术 (coherent X-ray diffraction microscopy, CXDM) 或者称为无透镜成像 (lensless imaging). 早在 1952 年 Sayre^[7] 就提出了 CXDI 的设计, 并于 1980 年开始非晶样品的成像实验^[8], 但是都没有得到样品的重建结果, Fienup 等^[9-10] 不断完善了相位重建算法, 直到 1999 年, 由 Miao 等完成首个验证实验, 成功地获得了直径约 100 nm 金颗粒非周期性排列点阵的重构图像. 从此该领域取得快速发展, 在材料学和生物科学领域获得了很好的实验结果^[11-17].

本文采用数字模拟的方法, 克服了实验装置的限制性, 较为系统地研究了过采样比和噪声对于重构结果的影响, 较深入地分析了重构结果中孪生像

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2010CB834301)、中国科学院对外合作重点项目 (批准号: GJHZ09058)、国家自然科学基金 (批准号: 10805071, 10705020) 和上海市基础研究重点项目 (批准号: 08JC1411900) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: tqxiao@sinap.ac.cn

以及随机平移的产生原因以及消除其影响的解决办法.

2. 物理模型

2.1. 实验原理

当一束相干或者部分相干的 X 射线穿透样品时,其波前受到调制在不同厚度或者折射率突变的地方发生传播方向的改变,透过样品后 X 射线在远场区域遵循夫琅和费衍射原理,像面上探测到的衍射花样的强度连续分布,结合过采样理论采集衍射场分布,然后将采样得到的连续强度分布代入相位重建算法,重建丢失的相位信息就可以获得样品的重构图像,基本原理如图 1 所示.

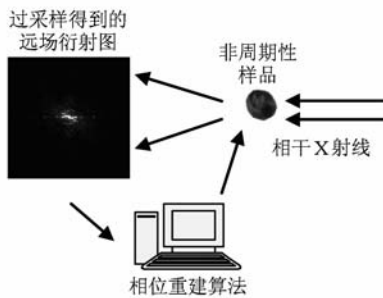


图 1 相干 X 射线衍射成像原理示意图

2.2. 相位重建算法

在物空间,假定物函数为 $f(x, y)$, 其傅里叶变换为

$$F(u, v) = |F(u, v)| \exp[i\phi(u, v)] \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) \exp[-2\pi i\phi(ux + vy)] dx dy, \quad (1)$$

$\phi(u, v)$ 是傅里叶频谱的相位分布函数. 在实验中, 只有衍射场的强度可以被探测到, 即 $|F(u, v)|^2$, 而相位信息 $\phi(u, v)$ 丢失了, 这就是所谓的相位问题.

最早提出的相位重建算法是 Gerchberg-Saxton^[18] 迭代算法, 这种算法要求衍射场强度与物函数振幅分布已知, 运用傅里叶变换及逆变换在空域和频域之间反复运算逐步重建丢失的相位信息. 对于仅仅已知衍射场强度的情况, Fienup^[9] 进一步改进 Gerchberg-Saxton 算法, 提出了误差递减算法 (error-reduction algorithm, ER) 和混合输入-输出算

法 (hybrid Input-output algorithm, HIO), 其中 HIO 算法不仅大大增加了收敛的速度, 而且还可以避免迭代过程中相位停滞问题的出现.

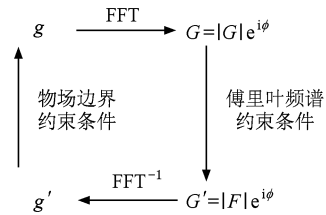


图 2 误差递减迭代算法的流程示意图

如图 2 是 ER 算法的流程示意图, FFT 表示快速傅里叶变换, FFT^{-1} 表示快速傅里叶逆变换. 迭代算法的初始输入为随机振幅估计 g 或者是随机相位估计 ϕ . 如果采取随机振幅估计 g 作为初始输入, 对于二维情况, 接下来第 j 次迭代的几个步骤如下:

$$G_j(u, v) = |G_j(u, v)| \exp[i\phi_j(u, v)] \\ = FFT[g_j(x, y)], \quad (2)$$

$$G'_j(u, v) = |F(u, v)| \exp[i\phi_j(u, v)], \quad (3)$$

$$g'_j(x, y) = |g'_j(x, y)| \exp[i\theta'_j(x, y)] \\ = FFT^{-1}[G'_j(u, v)], \quad (4)$$

$$g_{j+1}(x, y) = \begin{cases} g'_j(x, y) & (x, y) \in \gamma \\ 0 & (x, y) \notin \gamma \end{cases}, \quad (5)$$

式中 $g_j(x, y)$ 是对 $f(x, y)$ 的近似估计, $|F(u, v)|$ 是探测得到的已知傅里叶频谱振幅分布, γ 表示物场约束边界, (3) 和 (5) 式分别是傅里叶频谱和物场的边界约束条件. 对于 HIO 算法, 一次迭代过程中前面三个步骤与 ER 算法相同, 不同的是最后一步物场边界约束条件由下式给出:

$$g_{j+1}(x, y) = \begin{cases} g'_j(x, y) & (x, y) \in \gamma \\ g_j(x, y) - \beta g'_j(x, y) & (x, y) \notin \gamma \end{cases} \quad (6)$$

β 是 0 到 1 之间的某一常数, 即在物场边界约束以内, 下一次迭代的输入是上一次迭代运算的输出 $g'_j(x, y)$, 而边界以外则是上一次迭代的输入 $g_j(x, y)$ 与输出 $g'_j(x, y)$ 的线性组合. 迭代算法的收敛性由下式的物场误差函数来衡量

$$E_o = \left[\frac{\sum_{(x, y) \notin \gamma} |g'_j(x, y)|^2}{\sum_{x, y} |g'_j(x, y)|^2} \right]^{1/2}. \quad (7)$$

3. 结果及分析

样品材料选取为金,对应复折射率参数引自文献[19],计算中所用的计算机主频 2.10 GHz,计算机语言采用 Visual C++,相位重建算法选用 HIO 迭代算法,图像大小为 256 × 256 像素,迭代 1000 次计算机运行时间约为 9 min.

3.1. 过采样比的影响

为了简便起见,讨论一维情况,(1)式变为

$$F(u) = |F(u)| \exp[i\phi(u)] = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \exp[2\pi i u \cdot x] dx. \quad (8)$$

实际应用中用离散形式近似,假设有 N 个像素点,则(8)式变为

$$F(u) = \sum_{x=0}^{N-1} f(x) \exp[2\pi i u \cdot x/N]. \quad (9)$$

由于实验中只能探测到傅里叶频谱的强度分布,与(9)式的模值有关,对(9)式取模得到

$$|F(u)| = \left| \sum_{x=0}^{N-1} f(x) \exp[2\pi i u \cdot x/N] \right|. \quad (10)$$

在对 $f(x)$ 的相位重建过程中,需要对每个像素点进行求解,因此(10)式是由 N 个方程组成的方程组.下面分两种情况讨论一下这个方程组:一种是假如 $f(x)$ 是复函数,那么这个方程组只有 N 个方程,而未知数却有 $2N$ 个($f(x)$ 的实部和虚部);另一种假

如 $f(x)$ 是实函数,根据 Friedel 定律^[20],其傅里叶频谱强度分布具有中心对称性,因此方程组有 $N/2$ 个方程,而未知数是 N 个.综合两种情况,该方程组的未知数都是方程个数的两倍,方程组是没有解的.若要使方程组有解,一个有效的方法是变方程组中一部分未知数为已知,只要总的像素点数目达到未知像素点目的两倍时,方程组便有唯一解.计算这样一个比率

$$s = \frac{\text{总像素}}{\text{未知像素}}, \quad (11)$$

分母中未知像素便是需要求解的区域.对于已知傅里叶频谱强度分布的相位重建问题,理论上只要满足 $s > 2$ 便能够实现图像重构.过采样方法是在满足 Shannon 采样定理的基础上,通过减小采样间隔同时增加采样点数目,使得在物空间获得一个有限边界,边界以外的像素点值是零,边界以内是需要求解的区域,如果这个边界满足了 $s > 2$ 便能够成功实现相位重建.因此通过过采样方法决定的比率 s 我们称之为过采样比.

如图 3,采用一幅二维图像作为物场振幅分布,对不同过采样比条件下重构结果进行了对比,图 3(c) 不满足 $s > 2$ 的条件,不能得到预期的重构结果.从图 3(h) 中可以看出, $s = 1.9$ 时算法不收敛,并且出现了相位停滞现象;当 $s = 2.5$ 时,可以看到在迭代次数为 400 和 600 时误差分别有一次比较迅速的下降,600 次迭代以后收敛得比较好; $s = 4.8$ 时,迭代次数超过 200 之后就已经收敛得比较好了;

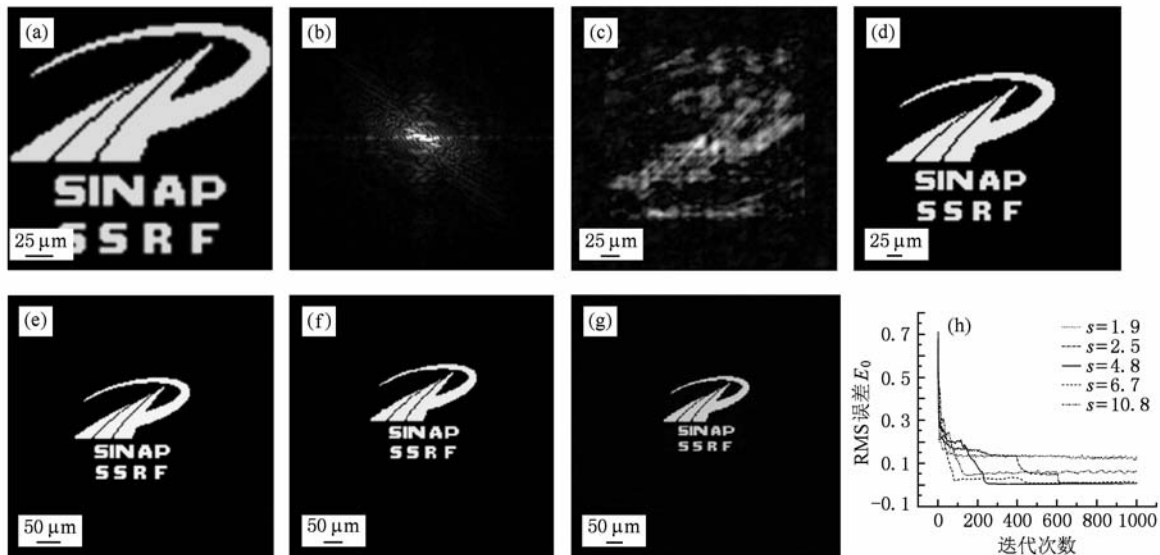


图 3 已知衍射场振幅分布,不同过采样比情况下二维重构结果 (a) 二维图像的振幅分布, (b) $s = 4.8$ 时采样得到的衍射场强度分布, (c), (d), (e), (f) 和 (g) 分别是 $s = 1.9, 2.5, 4.8, 6.7$ 和 10.8 的重构图像, (h) 是误差函数与迭代次数的关系曲线

$s = 6.7$ 时,在前 100 次迭代过程误差迅速的下降,但直到 400 次迭代收敛情况并不是很好,之后收敛得比较好; $s = 10.8$ 时,前 100 次误差迅速降低,但直到 1000 次迭代收敛情况并不好,这说明重构结果的质量已经降低,要想使误差曲线收敛得更好,可能还需要更多的迭代次数. 图 3(c), (d), (e), (f), (g) 的误差最小值分别为 0.115216, 0.005872, 0.003247, 0.004961, 0.043731. 误差对比曲线提示最好的过采样比大致在 3—7 的范围.

3.2. 噪声对重构结果的影响

在实际实验过程中,运用高灵敏度的 X 射线 CCD 探测器采集远场衍射花样,由于 CCD 探测器存在固有的噪声,如散粒噪声、非均匀性噪声和暗电流噪声等,所以在相干 X 射线衍射成像实验中,这些噪声成为了衍射花样的主要噪声来源. 由于这些噪声来源都具有随机特性,所以在数字模拟噪声对重构结果的影响时,用随机噪声来模拟探测器的固有噪声.

如图 4(a),在衍射场中加入随机噪声,经过 1000 次迭代得到的重构结果中,不论在约束边界的内外,都产生了一定程度的背景噪声,如图 4(b)—(d),随着信噪比的降低,重构结果的质量逐渐变差,当信噪比为 10 时,重构结果的细节已经不能识别,信噪比为 5 时,不能实现图像的重构,因此要成功地实现相位重建,要求信噪比不能低于 10.

在实验过程中,探测器的固有噪声无法从根本上消除,采样得到的远场衍射图中含有探测器的固有噪声,在采集完样品的衍射图之后,再采集一幅无照明的背景图,通过减背景使衍射图的噪声得到最大限度的抑制.

3.3. 重构像随机平移的产生与消除

考虑物场 $f(x, y)$ 有一定的平移,则物场函数变为 $f(x - x_0, y - y_0)$,其中 x_0 和 y_0 是某一常数. 其傅里叶变换为

$$\begin{aligned} & F\{f(x - x_0, y - y_0)\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x - x_0, y - y_0) \\ & \quad \times \exp[-2\pi i\phi(ux + vy)] dx dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x', y') \exp\{-2\pi i\phi[u(x' + x_0) \\ & \quad + v(y' + y_0)]\} dx' dy' \Big|_{\substack{x'=x-x_0 \\ y'=y-y_0}} \end{aligned}$$

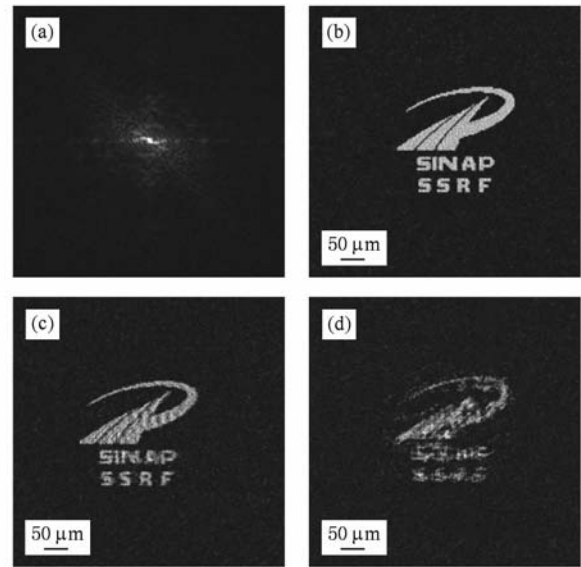


图 4 衍射场中加入不同程度的随机噪声,迭代 1000 次之后得到的重构结果对比图 (a) 是加入随机噪声后的衍射场强度分布(SNR = 14), (b), (c) 和 (d) 分别是信噪比 SNR = 14, 10 和 5 情况下的重构结果图

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x', y') \exp[-2\pi i\phi(ux' + vy')] \\ & \quad \times dx' dy' \exp[-2\pi i\phi(ux_0 + vy_0)] \\ &= F\{f(x, y)\} \exp[-2\pi i\phi(ux_0 + vy_0)], \end{aligned} \quad (12)$$

F 表示傅里叶变换,对上式取模值得

$$\begin{aligned} & |F\{f(x - x_0, y - y_0)\}| \\ &= |F\{f(x, y)\} \exp[-2\pi i\phi(ux_0 + vy_0)]| \\ &= |F\{f(x, y)\}|. \end{aligned} \quad (13)$$

(12) 和 (13) 式表明,空域的平移会导致对应频域发生相移,而频域中的强度分布不发生变化,即 $f(x, y)$ 与 $f(x - x_0, y - y_0)$ 具有相同的傅里叶频谱强度分布. 迭代算法中施加傅里叶频谱约束条件的时候,运用的是探测得到衍射场强度分布信息替换计算得到的强度信息,因此 $f(x - x_0, y - y_0)$ 也是算法的一个正确解,平移量 x_0 和 y_0 是随机的常数(一般是几个像素点),从模拟的结果来看这种现象的发生是不可避免的,这样产生的问题是,算法中在物空间施加的物场边界约束条件是静态边界,如果重构结果发生的平移量超出了约束边界,一部分重构图像会被边界切除掉,从而导致重构结果不完整. 如图 5(c) 所示,右上角显示的是框中区域放大 3 倍的图片,可以清楚地看到,由于重构结果产生了向右的随机平移,重构像右边有一部分平移到了物场边界约束范围之外,导致了重构结果不完整.

若要保证重构结果的完整性,必须对算法中的边界约束条件进行修正. 由于重构结果的不完整主要原因是静态边界约束不能随着重构图像的随机平移做出相应的调整,因此改用动态边界约束条件,使得迭代过程中物场的边界约束随着重构图像的随机平移做出相应的调整,从而保持重构图像的完整性. 具体的做法是:在利用(6)式施加物场边界约束时,边界的区域大小 γ 保持不变,计算边界以内物场的强度,然后对边界 γ 进行上下左右等各个方向的平移,最大平移量在几个像素点,每一次平移过程都记录下边界内物场的强度,最后对所有的物

场强度进行比较,选择物场强度最大的边界作为下一次迭代新的边界约束条件. 这样的边界修正可以在每一次迭代过程中进行,也可以每隔几次迭代做一次修正,直到迭代算法计算结束. 如图5(d)是每隔5次迭代采用一次动态边界约束进行修正,迭代1000次之后得到的重构图像,框中的部分放大3倍以后可以清楚地看见,原来采用静态边界约束而导致不完整的部分图像已经完整地重构出来了,重构图像的其他部分也没有出现不完整的现象,这说明该方法可以很好地解决由随机平移带来的图像不完整的问题.

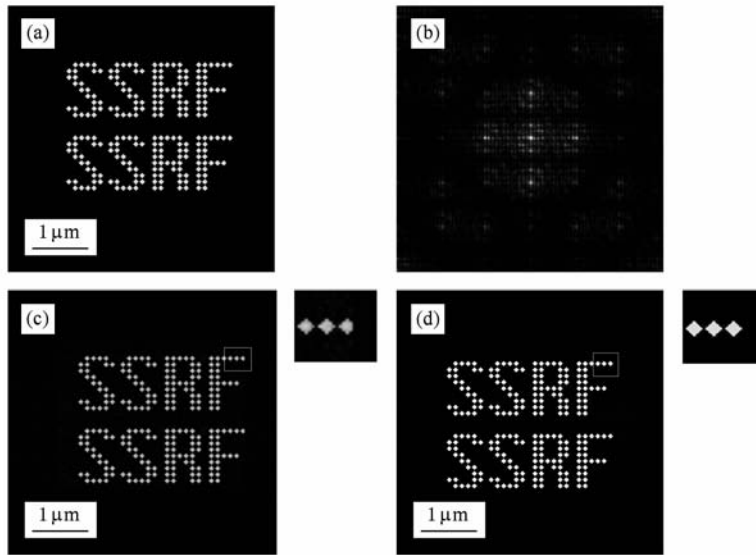


图5 光子能量为8 keV($\lambda=0.155$ nm)的相干平行X光照明条件下,直径100 nm左右金颗粒非周期排列图形的重构结果,重构结果产生随机平移与修正的结果对比图 成像距离为50 cm, $s=3$ (a)金颗粒非周期排列图形,(b)衍射场强度分布,(c)重构结果产生随机平移,重构图像一部分被边界约束所切除,(d)采用动态边界约束条件后得到的完整重构图像

3.4. 孪生像的产生与消除

与随机平移的产生相类似,原物场 $f(x, y)$ 与其孪生像 $f^*(-x-x_0, -y-y_0)$ (考虑有随机平移 x_0 和 y_0)也具有相同的傅里叶频谱强度分布(*表示复共轭),对 $f^*(-x-x_0, -y-y_0)$ 进行傅里叶变换有

$$\begin{aligned} & \mathbf{F}\{f^*(-x-x_0, -y-y_0)\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f^*(-x-x_0, -y-y_0) \\ & \quad \times \exp[-2\pi i\phi(ux+vy)] dx dy, \quad (14) \end{aligned}$$

两边取复共轭

$$\{\mathbf{F}\{f^*(-x-x_0, -y-y_0)\}\}^*$$

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(-x-x_0, -y-y_0) \\ & \quad \times \exp[2\pi i\phi(ux+vy)] dx dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x', y') \exp[-2\pi i\phi(ux'+vy')] dx' dy' \\ & \quad \times \exp[-2\pi i\phi(ux_0+vy_0)] \Big|_{\substack{x'=-x-x_0 \\ y'=-y-y_0}} \\ &= \mathbf{F}\{f(x, y)\} \exp[-2\pi i\phi(ux_0+vy_0)], \quad (15) \end{aligned}$$

上式两边取模

$$\begin{aligned} & |\{\mathbf{F}\{f^*(-x-x_0, -y-y_0)\}\}^*| \\ &= |\mathbf{F}\{f^*(-x-x_0, -y-y_0)\}| \\ &= |\mathbf{F}\{f(x, y)\} \exp[-2\pi i\phi(ux_0+vy_0)]| \end{aligned}$$

$$= |F\{f(x,y)\}|, \quad (16)$$

上式表明,在已知傅里叶频谱强度分布的相位重建问题中,孪生像也是相位重建算法的一个正确解.如果迭代算法中所施加的物场边界约束是中心对称或者边界约束的中心对称将原物场孪生像的所有边界包括在内,同时也因为算法的初始输入是一组随机数,所以重构结果得到正立像和孪生像的概率是相同的.如果不采取措施,正立像和孪生像就可能同时出现在重构结果中,造成重构结果模糊不清,导致重构失败.从第一次迭代开始,采用如图6(a)所示的物场边界约束条件,边界以内是作为迭代初始输入的随机振幅分布,以后的每一次迭代都采用相同大小的边界(采用动态边界修正以后其位置会有所变化),这样可能得到的重构结果如图6(b)所示,重构结果中正立像与孪生像同时存在,重构图像模糊不清.

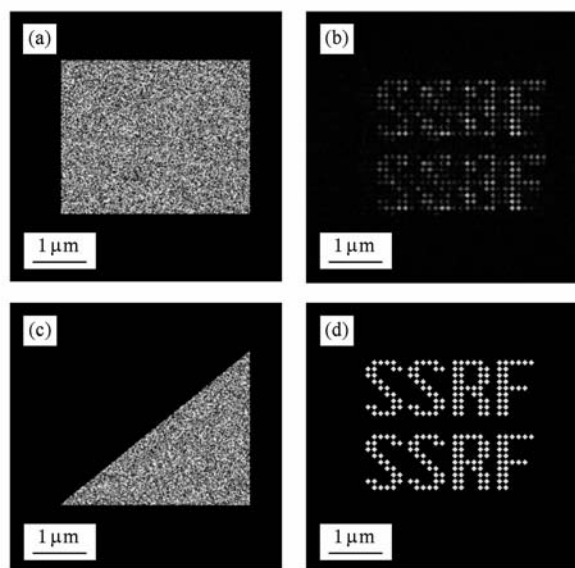


图6 光子能量为8 keV($\lambda = 0.155$ nm)的相干平行X光照明条件下,直径100 nm左右金颗粒非周期排列图形的重构结果,重构结果中孪生像的产生与修正后的结果对比图.成像距离为50 cm, $s = 3$. (a)物场边界约束条件, (b)重构结果中正立像与孪生像同时存在,重构图像模糊不清, (c)物场临时边界约束条件, (d)采用临时边界约束条件后得到的清晰正立重构图像

对于二维相位重建问题,我们关心的是能否得到完整清晰的高质量重构图像,因此问题的关键在于如何将正立像和孪生像有效地区分开来,而并不要求重构像一定是正立像.为了解决这一问题,可以采取两种方式:其一是用另一组随机数估计作为输入重新进行一次新的迭代运算,这样有可能使正立像和孪生像分开,输出结果是二者之一;其二是在最初的几次迭代过程中,引入一种临时边界约束条件,以改变正立像和孪生像同时出现的概率,而在以后的迭代过程恢复完整的边界约束,这种方法比进行重新运算更加有效和可靠,同时对于三维重构的过程中需要做大量的二维图像重构而言,也更加省时.本文在前10次迭代过程中采用临时边界约束条件,如图6(c)所示,在以后的迭代过程采用如图6(a)所示的边界约束,经过1000次的迭代之后得到了完整清晰的重构结果,如图6(d)所示.

4. 结 论

本文采用HIO相位重建方法,较为系统地研究了过采样比对重构结果质量的影响,发现了相位重建算法的收敛速度随过采样比变化的规律,这对于今后的CXDI实验过程中选取最佳过采样比具有重要的指导意义.同时研究了噪声对相位重建的影响,找到了实现相位重建所要求的噪声水平,对今后实验过程中噪声的控制提出了明确的要求.理论分析了随机平移和孪生像的产生原因以及消除办法,有效地提高了相位重建的质量.由于相干X射线衍射成像的各种相位重建算法均是以ER算法和HIO算法为基础^[6],因此本文的结论具有普遍意义.

相干X射线衍射成像是一种新的显微成像技术,近几年来发展十分迅速,而国内这一方面的研究还处在基础阶段.已建成并投入使用的上海同步辐射光源是第三代同步辐射光源,可提供高亮度高相干性的X射线光源,为下一步的相干X射线衍射成像实验提供了必要条件.

- [1] Liu L X, Du G H, Hu W, Xie H L, Xiao T Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4556 (in Chinese) [刘丽想、杜国浩、胡雯、谢红兰、肖体乔 2007 *物理学报* **56** 4556]
- [2] Shi S M, Chen R C, Xue Y L, Ren Y Q, Du G H, Deng B, Xie H L, Xiao T Q 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6319 (in Chinese)

- [师绍猛、陈荣昌、薛艳玲、任玉琦、杜国浩、邓彪、谢红兰、肖体乔 2008 *物理学报* **57** 6319]
- [3] Xue Y L, Xiao T Q, Wu L H, Chen C, Guo R Y, Du G H, Xie H L, Deng B, Ren Y Q, Xu H J 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 5496 (in Chinese) [薛艳玲、肖体乔、吴立宏、陈灿、郭

- 荣怡、杜国浩、谢红兰、邓彪、任玉琦、徐洪杰 2010 物理学报 **59** 5496]
- [4] Xie H L, Hu W, Luo H X, Du G H, Deng B, Chen R C, Xue Y L, Shi S M, Xiao T Q 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 7044 (in Chinese) [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 2008 物理学报 **57** 7044]
- [5] Marchesini S, Chapman H N, Hau-Riege S P, London R A, Szoke A 2003 *Opt. Express.* **11** 2344
- [6] Miao J W, Ishikawa T, Shen Q, Earnest T 2008 *Annu. Rev. Phys. Chem.* **59** 387
- [7] Sayre D 1952 *Acta Cryst.* **5** 843
- [8] Sayre D, Schlenker M 1980 *Lecture Notes in physics* (vol. 112) (Berlin:Springer) p229
- [9] Fienup J R 1982 *Appl. Opt.* **21** 2758
- [10] Miao J W, Charalambous P, Kirz J, Sayre D 1999 *Nature* **400** 342
- [11] Miao J W, Chen C C, Song C Y, Nishino Y, Kohmura Y, Ishikawa T, Damien R J, Lee T K, Risbud S H 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 215503
- [12] Chapman H N, Barty A, Marchesini S, Noy A, Cui C, Howells M R, Rosen R, He H, Spence J C H, Weierstall U, Beetz T, Jacobsen C, Shapiro D 2006 *J. Opt. Soc. Am.* **23** 1179
- [13] Abbey B, Williams G J, Pfeifer M A, Clark J N, Putkunz C T, Torrance A, McNulty I, Levin T M, Peele A G, Nugent K A 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 214101
- [14] Thibault P, Elser V, Jacobsen C, Shapiro D, Sayre D 2006 *Acta Cryst.* **62** 248
- [15] Hau-Riege S P, London R A, Szoke A 2004 *Phys. Rev. E* **69** 051906
- [16] Hau-Riege S P, Chapman H N, Krzywinski J, Sobierajski R, Bajt S, London R A, Bergh M, Caleman C, Nietubyc R, Juha L, Kuba J, Spiller E, Baker S, Bionta R, Tinten K S, Stojanovic N, Kjoernrattanawanich B, Gullikson E, Plönjes E, Toleikis S, Tschentscher T 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 145502
- [17] Raines K S, Sara S, Richard L S, Jiang H D, Jose A R, Benjamin P F, Henry C K, Du J C, Miao J W 2009 *Nature* **463** 214
- [18] Gerchberg R W, Saxton W O 1972 *Optik* **35** 237
- [19] Henke B L, Gullikson E M, Davis J C 1993 *At. Data Nucl. Data Tables* **54** 181
- [20] Miao J W, Sayre D, Chapman H N 1998 *J. Opt. Soc. Am. A* **15** 1662

Digital simulation for coherent X-ray diffractive imaging*

Zhou Guang-Zhao¹⁾²⁾ Tong Ya-Jun¹⁾²⁾ Chen Can¹⁾²⁾ Ren Yu-Qi¹⁾²⁾ Wang Yu-Dan¹⁾²⁾ Xiao Ti-Qiao^{1)†}

1) (Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China)

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

(Received 11 November 2009 ; revised manuscript received 12 April 2010)

Abstract

Phase retrieval is one of the most important steps for coherent X-ray diffractive imaging (CXDI), which uses the oversampled far-field diffraction pattern for phase retrieval iterative algorithm in order to achieve the lost phase information. Here we used a small nonperiodic 2D digital image as the object for studying the effect of the oversampling ratio and obtained the optimum oversampling ratio of 3—7 when the iteration times was 1000. We also added random noise to the diffraction pattern to examine the applicability of this approach to real data. We found the reconstruction failed when the signal to noise ratio is less than 10. As the reconstruction process may fail when the twin image or stochastic shift appears in the reconstructed image simultaneously, we explained why these phenomena come into being, and found methods to overcome the difficulty effectively.

Keywords: coherent X-ray diffractive imaging, oversampling, phase retrieval algorithms, microscopy

PACS: 87.59.-e, 42.30.Rx, 42.30.Wb

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2010CB834301), the External Cooperation Program of Chinese Academy of Sciences (Grant No. GJHZ09058), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10805071, 10705020) and the Key Basic Research Program of Shanghai, China (Grant No. 08JC1411900).

† Corresponding author. E-mail: tqxiao@sinap.ac.cn