

中心挡板对扫描相干 X 射线衍射成像的影响*

刘海岗¹⁾²⁾ 许子健^{1)†} 张祥志¹⁾ 郭智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)

(2013 年 1 月 13 日收到; 2013 年 4 月 2 日收到修改稿)

本文采用重叠关联迭代引擎算法, 系统地模拟研究了扫描相干衍射成像中中心挡板导致的低频信号丢失对重建图像质量的影响. 结果表明, 扫描相干衍射成像对中心挡板的承受能力远大于平面波单次相干衍射成像, 且选择小尺寸入射探针和较高重叠度 ($\geq 70\%$) 可进一步降低中心丢失信号对扫描相干衍射成像的负面影响. 另外, 光斑扫描位置误差在重叠度较高时将超过中心挡板成为扫描相干衍射成像最主要的负面影响因素. 本文研究结果对扫描相干衍射成像实验中如何应用中心挡光板具有重要的指导意义, 将有助于进一步提高扫描相干衍射成像的分辨率.

关键词: 扫描相干衍射成像, 位相恢复算法, 低频丢失信号

PACS: 07.85.Tt, 61.05.cp, 68.37.Yz, 42.30.Rx

DOI: 10.7498/aps.62.150702

1 引言

相干衍射成像 (CDI) 方法是近年来发展起来的一种新颖的无透镜显微成像技术, 在材料、生物、医学等领域的二维和三维成像中具有重要的应用^[1-9]. 自从 1999 年被 Miao 等^[2] 用 X 射线实验证实以来, 该方法在同步辐射^[3-23]、电子显微^[24-26]、X 射线自由电子激光^[27,28] 和桌面软 X 射线激光^[29,30] 等领域都得到了快速发展. 在 CDI 方法中只需测量非周期样品的远场相干衍射花样, 在满足过采样条件下采用位相恢复算法迭代重构就可得到样品空间结构信息. 传统的平面波 CDI 成像技术要求样品为孤立的且尺寸小于入射光斑, 该条件限制了成像视场; 而且平面波 CDI 重构算法还有收敛慢、停滞、重建结果不唯一等缺陷. 为了解决上述问题, Rodenburg 和 Faulkner 提出一种名为 ptychographic CDI (PCDI) 或者扫描 CDI 的新型 CDI 方法^[31,32], 该方法理论上可以对垂直光轴的二维方向任意大小的样品成像, 它采用一个局域照明探针移动扫描透射样品, 相邻扫描位置间有部分重

叠, 在扫描移动的同时记录一系列扫描位置对应的衍射花样, 然后利用这一系列衍射花样来进行重建成像. 该方法已在可见光^[33] 和 X 射线^[34] 波段得到了实验验证. 2008 年, Thibault 等人提出了一种新的 PCDI 算法并进行了实验验证^[35]. 该算法也称为平行重叠关联迭代引擎 (pPIE), 它采用一组扫描相干衍射实验数据就可以同时重建出样品透射函数和入射光波. 后来, Maiden 和 Rodenburg 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 收敛更快和重建质量更好的特点^[36]. Guizar-Sicairos 和 Fienup 还提出了一种叫做非线性优化方法的 PCDI 算法, 该方法可以在迭代过程中对扫描位置误差进行改良修正^[37]. 到目前为止, 平面波 CDI 和扫描 CDI 在材料和生物科学的研究中均已取得了极大的成功.

在相干衍射成像实验中经常使用中心挡板来阻挡直透光和过强的中心衍射光以延长 CCD 探测器对高频信号的采集时间, 这是因为高空间频率信号的采集对提高相干衍射成像的空间分辨率至关重要. 尽管在 PCDI 中挡板很少使用^[38], 但我们意

* 中国科学院知识创新工程重要方向性项目 (批准号: KJCX2-YW-N38)、上海市自然科学基金 (批准号: 11ZR1445200)、国家自然科学基金青年基金 (批准号: 11005147) 和中国科学院大科学装置开放研究项目、自组装技术与超高密度纳米阵列研究项目资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: xuzijian@sinap.ac.cn

‡ 通讯作者. E-mail: tairenzhong@sinap.ac.cn

识到加装挡板对于进一步提高 PCDI 的分辨率非常必要. 然而挡板会造成低频信号的丢失, 从而导致图像重建不稳定甚至失败, 因此挡板的副作用需慎重考虑. 在传统的 CDI 实验中, 已发展了多种方案和算法来减轻或者部分解决挡板导致的丢失信号问题^[39–41], 但它们对一般的样品并不具有普适性.

本文系统地模拟研究了挡板引起的低频信号丢失对 PCDI 重建图像质量的影响. 通过模拟不同的入射探针尺寸、探针位置重叠度以及移动误差条件下固定尺寸样品的 PCDI 图像重建, 详细研究了重建图像质量随挡板大小的变化规律. 结果表明 PCDI 对中心挡板的承受能力远大于平面波 CDI, 且选择小尺寸入射光斑、高的探针重叠度及高的扫描移动精度会进一步增强 PCDI 对低频丢失信号的容忍度. 这些结果证明了在 PCDI 实验中应用中心挡板来进一步提高成像分辨率的高度可行性, 并对于 PCDI 中如何使用挡板具有重要的指导意义.

2 模拟方法

扫描相干衍射成像的实验示意图如图 1 所示, 一个有限大小的光探针扫描样品, 同时用 CCD 记录对应位置的衍射光强分布, 然后通过重叠关联迭代引擎算法就可重构样品图像. 本文所用的重叠关联迭代算法的原理及详细公式见文献^[31, 32, 36], 这里不再赘述, 只列出主要公式和步骤. 首先, 相干探针 $P(\mathbf{r})$ 入射到样品 $O(\mathbf{r})$ 上, 生成出射波

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

该出射波在远场形成衍射光强花样 $I_j(\mathbf{q})$ 为

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

式中 \mathbf{q} 是倒易空间坐标, 符号 F 表示傅里叶变换, \mathbf{R} 为探针在样品上的相对位置, 下标 j 表示第 j 个探针位置, g 表示第 g 轮迭代. 在傅里叶空间中将算得的振幅用实验光强的平方根替换

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

通过逆傅里叶变换得到新的出射波场为

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

把新的出射波函数代入下面的样品函数的更新方程中:

$$O_{j+1}(\mathbf{r}) = O_{g,j}(\mathbf{r}) + \alpha \frac{P_{g,j}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)}{|P_{g,j}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)|_{\max}^2}$$

$$\times (\Psi'_{g,j}(\mathbf{r}) - \Psi_{g,j}(\mathbf{r})), \quad (5)$$

可得到升级后的样品透射函数. 式中 α 为控制升级步长的参数, 取值范围为 0—1, 本文中取 1. 然后移动到下一个有部分重叠的位置 \mathbf{R} , 重复上述步骤直到每一个探针位置的衍射花样都被代入方程用于升级, 这便完成了一步迭代. 持续重复上面整个迭代过程直到衡量重建图像质量的均方根误差函数

$$\text{RMS} = \sqrt{\sum_{i=1}^N |O_{\text{recon}}(i) - O_{\text{orig}}(i)|^2 / N} \quad (6)$$

足够小为止. 上式中 O_{recon} 和 O_{orig} 分别为重建图像函数和原始图像函数, N 为被照射样品区域总像素数. 在 PCDI 模拟过程中, 探针扫描覆盖的区域稍大于整个样品图像, 因此重建图像误差的计算区域为整幅图范围.

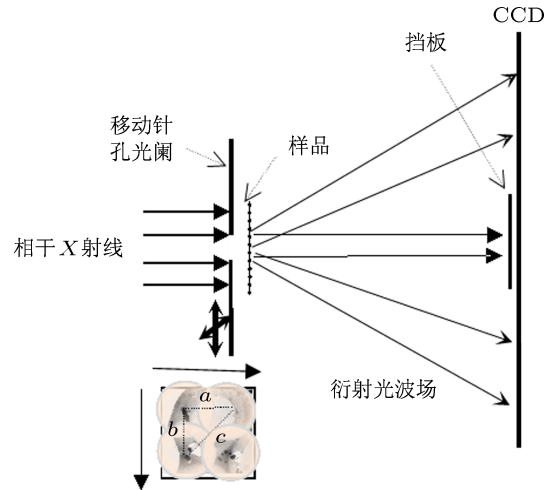


图1 扫描相干衍射成像实验示意图

在所有 CDI 方法中, 过采样条件必须满足. 在实际中, 通过采用像素足够小或像素阵列足够稠密的 CCD 且保证探测器和样品距离足够远, 可很好地满足该条件. 本文模拟中, CCD 阵列被设置为 1024×1024 . 大小为 256×284 像素的一幅苔藓细胞扫描电镜图被选为测试样品原图, 如图 2(b) 所示, 其灰度值范围为 0—1. 经计算^[42] 可知该图的过采样比为 14.4. 由于 PCDI 的探针尺寸远小于待测样品, 所以其对应的过采样比更大, 更能满足过采样条件. 本工作中假设待测样品只改变入射光波的位相而不影响其振幅, 即光子吸收被忽略, 则样品的透射函数是非负的实数.

本文的模拟所用中心挡板均为圆形, 半径大小为 0—90 CCD 像素 (cps). 尽管所采用的重叠关联

迭代算法^[36]可同时重构探针和样品函数,但为了简化问题以集中考察我们感兴趣的挡板的影响问题,我们假定入射光斑是已知的,为具有特定发散立体角的球面波(发散角大小依赖于所设定的入射光斑尺寸)

$$P(r) = \frac{A}{\sqrt{R_0^2 + r^2}} e^{ik\sqrt{R_0^2 + r^2}}, \quad (7)$$

式中 A^2 对应于单位时间内 X 射线通量,其值被设为 10^8 ; R_0 为样品离入射光束源点的距离,其尺寸被设置为 1 m,远大于入射探针大小. $k = 2\pi/\lambda$, λ 为入射 X 射线波长,设为 1 nm,对应 X 射线能量为 1240 eV. 因此在样品面上入射光斑的振幅大小几乎不变,但是位相具有足够的曲率,其变化幅度为 $1\pi - 2\pi$ (依赖于入射光斑尺寸).

3 数值计算结果和分析

在真实实验中,PCDI 会受多种因素影响,如入射探针大小、探针位置重叠度、扫描移动的精度及噪声等.为了全面地说明中心挡板对 PCDI 的影响,模拟中对这些因素都加以考虑.另外,我们还模拟了简单的单次平面波 CDI 受挡板影响的情形,并同 PCDI 的结果进行比较.模拟中噪声设置为均匀随机噪声,其分布与衍射花样之间满足^[43,44]

$$\text{陨} = \frac{\text{信号}}{\text{信噪比}} \times \text{随机函数}. \quad (8)$$

其中信噪比设为 20,随机函数取值范围为 -0.5 到 0.5 ,则噪声最大值为每个像素点光强值的 2.5%. 探针重叠度 (OR) 定义为

$$\text{OR} = 1 - \frac{a}{d_{\text{probe}}}, \quad (9)$$

式中 a 是扫描步长, d_{probe} 是探针直径. 探针移动偏差 (SD) 定义为探针移动步长的随机抖动范围,通常用最大偏差的绝对值 $|\text{SD}|_{\text{max}}$ 表示.

图 2 给出了探针无移动偏差且重叠度为 60% 时,不同尺寸探针条件下重建图像和重建误差随挡板尺寸的变化,同时还列出了单次平面波 CDI 的模拟结果以作对比.由图 2(a) 可知,对于同一中心挡板尺寸,探针直径越小,则重建误差越小,重建图质量也越高.当 $d_{\text{probe}} = 28 \text{ fps}$, $r_{\text{beamstop}} \leq 70 \text{ cps}$; $d_{\text{probe}} = 44 \text{ fps}$, $r_{\text{beamstop}} \leq 40 \text{ cps}$; 或 $d_{\text{probe}} = 83 \text{ fps}$, $r_{\text{beamstop}} \leq 20 \text{ cps}$ 时,重建误差 RMS 随挡板增大几乎不变.而当挡板大于这些值时,RMS 随挡板的增大而显著上升.这表明 PCDI 对低频信号丢失有一

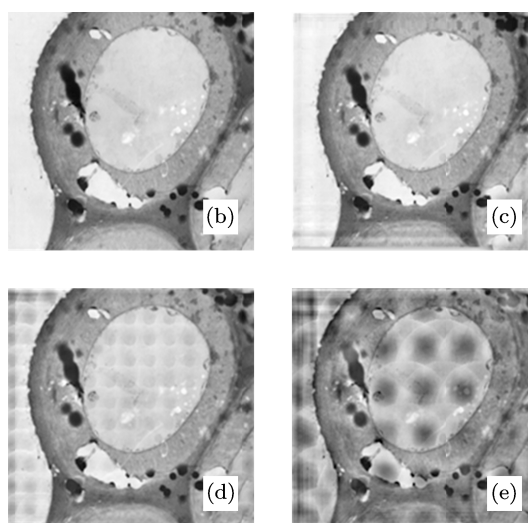
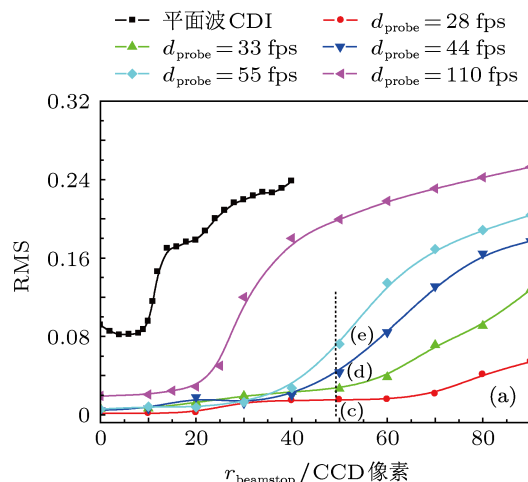


图 2 无移动偏差且重叠度为 60% 时挡板大小和入射光斑尺寸对重建图像质量的影响 (a) 不同尺寸入射探针条件下挡板大小对重建图像误差 RMS 的影响,图中还包括了单次平面波 CDI 的结果以作对比; (b) 测试原图: 苔藓细胞 SEM 图; (c)—(e) 为挡板半径 $r_{\text{beamstop}} = 50 \text{ CCD 像素 (cps)}$ 时,探针直径 d_{probe} 分别为 28, 44 和 55 物空间像素 (fps) 时的重建图像. 它们的对应 RMS 值已在图 2(a) 中标出

定的容忍度,且容忍度随着入射探针尺寸的增大而降低.将单次平面波 CDI 的结果与 PCDI 相比较可知,单次平面波 CDI 对中心丢失信号的容忍度远小于扫描 CDI,只能承受 $\leq 10 \text{ cps}$ 的挡板造成的信号丢失.对于同样的挡板尺寸,各种探针尺寸的 PCDI 重建误差都显著小于单次 CDI,即 PCDI 的成像质量显著优于单次 CDI.例如,当 $r_{\text{beamstop}} = 10 \text{ cps}$ 时,单次 CDI 的 RMS 误差为 0.084,而 $d_{\text{probe}} = 55 \text{ fps}$ 的扫描 CDI 误差仅为 0.00835,表明 PCDI 的成像质量至少 10 倍优于单次 CDI.而为了使该探针尺寸 PCDI 误差达到 0.084 附近,则其所用之中心挡板尺寸可放宽至 52 cps;对于更小探针尺寸的 PCDI,挡板尺寸还可进一步方大.因此 PCDI 能承受之中心

信号丢失区域面积比单次 CDI 大至少 25 倍.

PCDI 对中心丢失信号的容忍度随探针尺寸减小而增大的行为, 表明相对于单次 CDI(要求入射光斑必须大于样品尺寸), PCDI 明显受益于小探针尺寸效应. 这是由于较小的入射探针将产生较大的中心衍射斑, 二者的尺寸呈反比关系. 而由前人的单次 CDI 研究结果可知^[40], 当低频信号丢失区域小于中心衍射光斑时, 丢失的信号对重建图像的影响很弱甚至无影响. 由夫琅和费衍射理论可知, 圆形探针产生的衍射花样的中心光斑半径为

$$\Delta l = 1.22N/r_{\text{probe}}, \quad (10)$$

式中 N 为 CCD 横向或者纵向的像素数, r_{probe} 为入射探针半径(单位为物平面像素), Δl 为包括零级和一级衍射斑的中心光斑的半径. 由该式计算可得直径分别为 28, 44 和 83 fps 的探针产生的中心衍射斑半径 (r_{cs}) 分别为 44 cps, 28.4 cps 和 15 cps. 因而可知, PCDI 所能容忍的丢失信号区域显著大于中心衍射光斑的面积, 这表明在小探针效应的基础上, 60%的探针重叠度进一步增强了 PCDI 对中心丢失信号的容忍能力. 这是由于探针位置重叠引起了样品相邻照射区域间的信息关联, 这些关联信息会对各相关区域的丢失低频信号进行一定程度的弥补所致. 图 2(c)—(e) 直观地显示了在相同挡板尺寸条件下 ($r_{\text{beamstop}} = 50$ cps), 探针尺寸越小, 重构图像误差就越小, 成像质量就越高的规律. 以上结果及分析都表明, 对于扫描 CDI, 选择小尺寸的入射探针可有效提高重构成像对中心挡板造成的低频信号丢失的承受能力, 从而有利于获得更高质量的重建图形.

由于探针重叠度决定着关联信息量的多少, 是扫描 CDI 能够成功的关键, 也是 PCDI 对中心挡板高容忍能力的重要成因, 因此我们也详细考察了不同的探针重叠度下, 挡板尺寸对 PCDI 成像质量的影响. 在模拟中, 假设水平和垂直方向的扫描步长相同, 如图 1 所示, $a = b$. 为使扫描区域完全覆盖待测样品, 探针位置中心对角线距离 c 需满足条件 $c \leq d_{\text{probe}}$, 这意味着扫描步长 $a \leq d_{\text{probe}}/\sqrt{2}$, 即 $\text{OR} = 1 - a/d_{\text{probe}} \geq 0.293$.

图 3(a) 给出了无扫描移动误差条件下, 入射探针尺寸为 $r_{\text{probe}} = 33$ fps 时挡板尺寸和探针重叠度对重建图像质量的联合影响. 此处亦给出了单次 CDI 结果以作对比. 由图 3(a) 可知, 对于所考虑的任意大小的挡板 ($r_{\text{beamstop}} \leq 90$ cps), RMS 误差都随着重叠度的增大而降低. 在重叠度 $\text{OR} \leq 50\%$ 的情

况下, 当挡板从 0 增大到 90 cps 时会引起 RMS 急剧上升, 表明此时挡板对 PCDI 重构质量有着严重的负面影响, 亦表明此时 PCDI 对中心丢失信号的容忍度相对来说也较低. 当重叠度 $\text{OR} \leq 30\%$ 时, 即使挡板很小, 如 $r_{\text{beamstop}} \leq 10$ cps, 重建图像质量也会非常差(图 3(c)), 甚至差于单次 CDI 成像. 这是由于过低的重叠度使样品未被扫描探针完全覆盖, 造成部分样品信息丢失所致. 由图 3(a) 还可知, 中心挡板对重建图像质量的影响随着重叠度的增大而降低, 这点亦可从图 3(c)—(e) 看出; 当重叠度 $\text{OR} \geq 70\%$ 时, 挡板对重建图像几乎无影响, 因为图 3(a) 显示, 在挡板半径由 0 增大到 90 cps 的过程中, 其对应的 RMS 误差几乎不变且始终很小, 图 3(e),(f) 亦直观地证实了此点. 因此, 在实际的扫描 CDI 实验中, 在辐射剂量和光束稳定性允许的情况下, 选择足够大的探针重叠度至关重要, 这不仅可以提高重建图像质量, 同时还可以大幅提高 PCDI 对低频丢失信号的容忍度.

由于探针重叠度对扫描 CDI 的重要性, 我们对其进行了进一步的模拟研究, 结果如图 3(b) 所示. 该图为挡板 $r_{\text{beamstop}} = 50$ cps 时, 不同探针尺寸条件下重叠度对重建图像质量的影响. 由图可知, 当重叠度 $\text{OR} \leq 70\%$ 时, 入射探针尺寸越小, 对应的 RMS 误差也越小, 同时越大尺寸的探针对应的 RMS 随重叠度的上升(从 0.2 升至 0.8)而下降得也越为显著, 这些都表明重叠度对大尺寸入射探针时的 PCDI 图像质量影响较重. 然而, 当重叠度 $\text{OR} \geq 80\%$ 时, 不同尺寸探针对应的重建图像的误差几乎都为零, 成像质量几乎不再随探针尺寸变化, 且重建图质量也非常完美, 如图 3(f) 所示. 这一结果再次表明, 在实际实验中应选择足够高的探针重叠度.

在 PCDI 中, 探针位置重叠会引起样品相邻照射区域间的信息关联, 这些关联信息会在一定程度上对相关区域的低频丢失信号产生弥补作用. 由于探针位置重叠, 在同一个探针位置上, 样品会被邻近的多个探针以不同面积比例在该位置内的不同部位进行照射, 所得的多个衍射花样间的对比衬度, 会在一定程度上反映该位置上样品的低频空间结构信息, 从而可在一定程度上弥补中心挡板造成的低频信号丢失. 探针重叠度越高, 在某一探针位置上样品被邻近探针照射的次数也越多, 区域间的关联信息也就越多, 对丢失的低频信息的弥补也就越全面越完整. 因此提高探针重叠度会显著提高 PCDI 对中心挡板的容忍度.

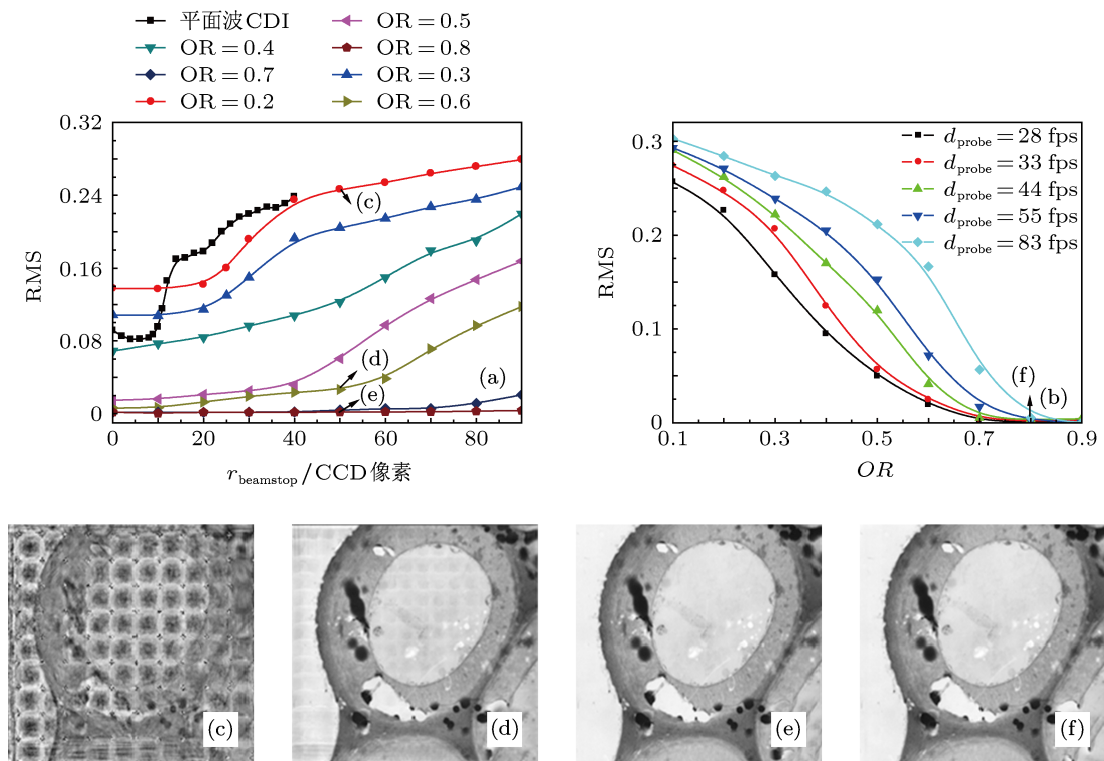


图3 探针无移动误差时挡板尺寸和探针重叠度对重建图像质量的联合影响 (a) 探针直径为 33 fps 时, 不同重叠度下挡板大小对重建误差 RMS 的影响; (b) 挡板 $r_{\text{beamstop}} = 50 \text{ cps}$ 时, 不同尺寸探针和重叠度对重建误差的影响; (c)—(e) 探针 $d_{\text{probe}} = 33 \text{ fps}$, 挡板 $r_{\text{beamstop}} = 50 \text{ cps}$ 时, 重叠度 OR 分别为 0.2, 0.6 和 0.8 时的重建图像; (f) 探针 $d_{\text{probe}} = 55 \text{ fps}$, 挡板 $r_{\text{beamstop}} = 50 \text{ cps}$ 且重叠度 OR = 0.8 时的重建图像; (c)—(f) 各图对应的 RMS 误差值已在图 (a) 和 (b) 中标出

样品或者探针的移动偏差是一个严重影响扫描模式显微成像质量的因素, 对于扫描 CDI 该因素也应当考虑. 图 4 给出了移动误差分别为 1 fps 和 3 fps, 重叠度分别为 50% 和 80% 时, 中心信号丢失对成像质量的影响. 由图 4(a) 可知, 对于所考虑的任一挡板尺寸, 较大移动偏差时的重建图像质量都明显差于较小移动偏差时的结果; 无论对于 1 fps 偏差还是 3 fps 的偏差, 较高重叠度 (80%) 时, 挡板尺寸的增大对重建图像的负面影响都大大地弱于低重叠度 (50%) 时的情形. 这一规律还可从图 4(b) 和 (d)、图 4(b) 和 (f)、图 4(e) 和 (g) 的对比中直接看出, 再次表明了高重叠度在 PCDI 中扮演至关重要的角色, 也与图 3 的结论一致.

然而由图 4(a) 还可看出, 较高的重叠度会显著增大移动误差对重建图像的影响. 尽管对于相同的移动偏差, 高重叠度时的重建误差更小, 但当移动偏差从 1 增大到 3 fps 时, 高重叠度对应的 RMS 误差的变化比低重叠度情形更为明显. 该结论也可从图 4(b) 和 (c), (f) 和 4(g) 的对比中得到验证. 引起上述结果的原因是, 高重叠度时, 同一尺寸的探针比低重叠度时的移动步长更小, 相同的绝对偏差对于

移动步长的相对偏差则更大, 故而对衍射花样的影响也会更明显. 而且, 对于相同大小的样品区域, 较高探针重叠度需要探针移动更多步才能完全覆盖样品, 这可能会使移动误差产生累积效应并产生更多噪声. 因此, 高重叠度时探针移动误差对 PCDI 的负面影响比低重叠度时的情形更为显著. 实际上, 在高重叠度情况下, 移动误差相对于中心挡板来说是一个更为严重的负面影响因素. 因此, 在扫描 CDI 实验中应尽可能地提高移动精度或者通过其他的算法对扫描移动误差加以修正.

4 结论

本文对于中心挡板造成的低频信号丢失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, 相对于单次平面波 CDI, 扫描 CDI 对低频丢失信号具有强得多的容忍度, 且探针尺寸越小, 重叠度越高, PCDI 对低频信号丢失的承受能力就越强. 研究还发现, 在探针重叠度小于 70% 时, 探针尺寸的减小可以显著改善 PCDI 重建图像的质量; 而当探针重叠度大于 70% 时, 探针尺寸的变化

对重建图像的影响较小. 在重叠度较高时探针移动偏差对重建图像质量的影响比挡板更加严重, 因此在实验中必须有效提高电机移动精度或通过算法

对其加以修正. 本文的结果对扫描相干衍射成像中使用中心挡板来提高高频信息的采集率具有重要的指导意义.

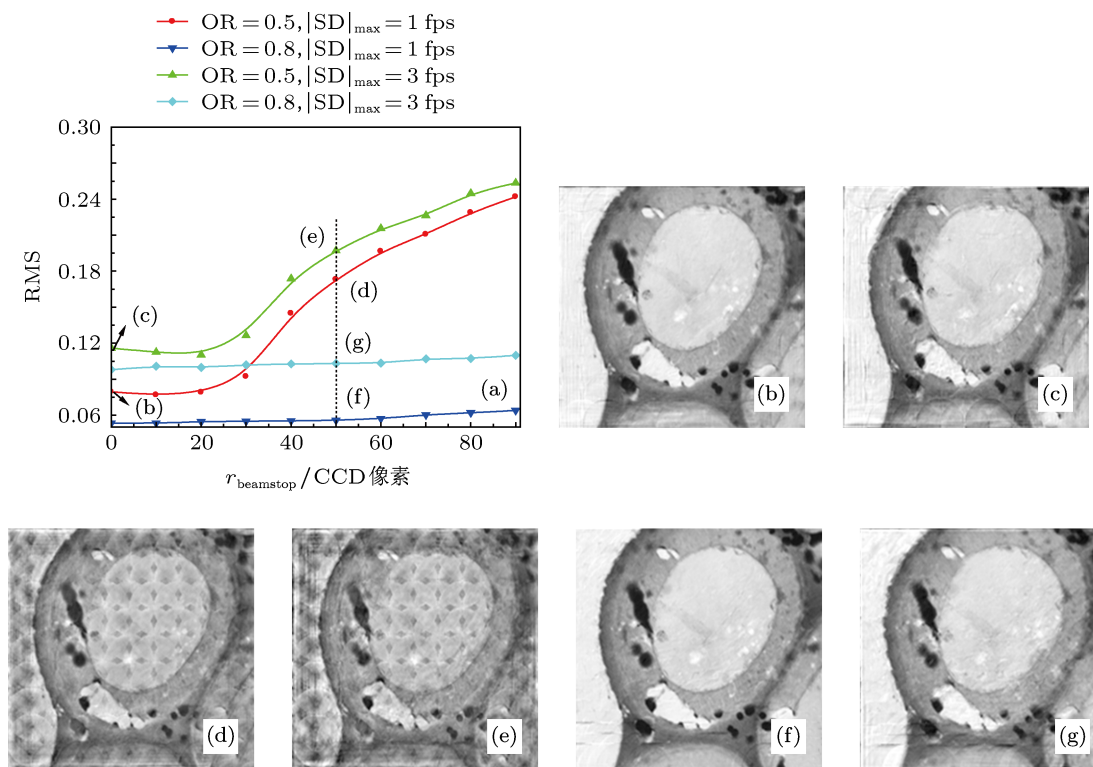


图 4 入射探针 $d_{\text{probe}} = 55 \text{ fps}$, 不同的移动偏差和探针重叠度条件下, 挡板大小对扫描相干衍射成像质量的影响 (a) 两种不同探针重叠度及移动偏差时挡板尺寸对 PCDI 重建误差的影响; (b)–(g) 不同参数下 PCDI 的重建图像, r_{bs} 表示挡板半径, 各图对应的 RMS 值已在图 (a) 中标出

[1] Chapman H N, Nugent K A 2010 *Nature Photon.* **4** 833
 [2] Miao J W, Charalambous P, Kirz J, Sayre D 1999 *Nature* **400** 342
 [3] Miao J W, Ishikawa T, Johnson B, Anderson E H, Lai B, Hodgson K O 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 088303
 [4] Shapiro D, Thibault P, Beetz T, Elser V, Howells M, Jacobsen C, Kirz J, Lima E, Miao H J, Neiman A M, Sayre D 2005 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102** 15343
 [5] Schroer C G, Boye P, Feldkamp J M, Patommel J, Schropp A, Schwab A, Stephan S, Burghammer M, Schöder S, Riekel C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 090801
 [6] Abbey B, Whitehead L W, Quiney H M, Vine D J, Cadenazzi G A, Henderson C A, Nugent K A, Balaur E, Putkunz C T, Peele A G, Williams G J, McNulty I 2011 *Nature Photon.* **5** 420
 [7] Raines K S, Salha S, Sandberg R L, Jiang H D, Rodriguez J A, Fahimian B P, Kapteyn H C, Du J C, Miao J W 2010 *Nature* **463** 214
 [8] Putkunz C T, Clark J N, Vine D J, Williams G J, Pfeiffer M A, Balaur E, McNulty I, Nugent K A, Peele A G 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 013903
 [9] Dierolf M, Menzel A, Thibault P, Schneider P, Kewish C M, Wepf R, Bunk O, Pfeiffer F 2010 *Nature* **467** 436
 [10] Beckers M, Senkbeil T, Gorniak T, Reese M, Giewekemeyer K, Gleber S C, Salditt T, Rosenhahn A 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 208101
 [11] Tripathi A, Mohanty J, Dietze S H, Shpyrko O G, Shipton E, Fullerton E E, Kim S S, McNulty I 2011 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **108** 13393
 [12] Nelson J, Huang X J, Steinbrener J, Shapiro D, Kirz J, Marchesini S, Neiman A M, Turner J J, Jacobsen C 2010 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **107** 7235
 [13] Jiang H D, Song C Y, Chen C C, Xu R, Raines K S, Rahimian B P, Lu C H, Lee T K, Nakashima A, Urano J, Ishikawa T, Tamanoi F, Miao J W 2010 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **107** 11234
 [14] Giewekemeyer K, Thibault P, Kalbfleisch S, Beerlink A, Kewish C M, Dierolf M, Pfeiffer F, Salditt T 2010 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **107** 529
 [15] Abbey B, Nugent K A, Williams G J, Clark J N, Peele A G, Pfeiffer M A, Jonge M D, McNulty I 2008 *Nature Phys.* **4** 394
 [16] Williams G J, Quiney H M, Dhal B B, Tran C Q, Nugent K A, Peele A G, Paterson D, Jonge M D 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 025506
 [17] Huang X J, Nelson J, Kirz J, Lima E, Marchesini S, Miao H J, Neiman A M, Shapiro D, Steinbrener J, Stewart A, Turner J J, Jacobsen C 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 198101
 [18] Whitehead L W, Williams G J, Quiney H M, Vine D J, Dilanian R A, Flewett S, Nugent K A 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 243902
 [19] Johnson I, Jefimovs K, Bunk O, David C, Dierolf M, Gray J, Renker

- D, Pfeiffer F 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 155503
- [20] Song C Y, Jiang H D, Mancuso A, Amirbekian B, Peng L, Sun R, Shah S S, Zhou Z H, Ishikawa T, Miao J W 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 158101
- [21] Jiang H D, Johnson D R, Song C Y, Amirbekian B, Kohmura Y, Nishino Y, Takahashi Y, Ishikawa T, Miao J W 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 038103
- [22] Song C Y, Bergstrom R, Johnson D R, Jiang H D, Paterson D, de Jonge M D, McNulty I, Lee J Y, Wang K, Miao J W 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 025504
- [23] Fan J D, Jiang H D 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 218702 (in Chinese) [范家东, 江怀东 2012 物理学报 **61** 218702]
- [24] Huang W J, Zuo J M, Jiang B, Kwon K W, Shim M 2009 *Nature Phys.* **5** 129
- [25] Scott M C, Chen C C, Mecklenburg M, Zhu C, Xu R, Ercius P, Dahmen U, Regan B C, Miao J W 2012 *Nature* **483** 444
- [26] Zuo J M, Vartanyants I, Gao M, Zhang R, Nagahara L A 2003 *Science* **300** 1419
- [27] Seibert M M, Ekeberg T, Maia F, Svenda M, Andreasson J, Jönsson O, Odić D, Iwan B, Rocker A, Westphal D, Hantke M, DePonte D P, Barty A, Schulz J, Gumprecht L, Coppola N, Aquila A, Liang M N, White T A, Martin A, Caleman C, Stern S, Abergel C, Seltzer V, Claverie J, Bostedt C, Bozek J D, Boutet S, Miahnahri A A, Messerschmidt M, Krzywinski J, Williams G, Hodgson K O, Bogan M J, Hampton C Y, Sierra R G, Starodub D, Andersson I, Bajt S, Barthelmeß M, Spence J C H, Fromme P, Weierstall U, Kirian R, Hunter M, Doak R B, Marchesini S, Hau-Riege S P, Frank M, Shoeman R L, Lomb L, Epp S W, Hartmann R, Rolles D, Rudenko A, Schmidt C, Foucar L, Kimmel N, Holl P, Rudek B, Erk B, Hömke A, Reich C, Pietschner D, Weidenspointner G, Strüder L, Hauser G, Gorke H, Ullrich J, Schlichting I, Herrmann S, Schaller G, Schopper F, Soltau H, Kühnel K U, Andritschke R, Schröter C D, Krasniqi F, Bott M, Schorb S, Rupp D, Adolph M, Gorkhover T, Hirschmann H, Potdevin G, Graafsma H, Nilsson B, Chapman H N, Hajdu J 2011 *Nature* **470** 78
- [28] Chapman H N, Barty A, Bogan M J, Boutet S, Frank M, Hau-riege S P, Marchesini S, Woods B W, Bajt S, Benner W H, London R A, Plönjes E, Kuhlmann M, Treusch R, Düsterer S, Tschentscher T, Schneider J R, Spiller E, Möller T, Bostedt C, Hoener M, Shapiro D A, Hodgson K O, der Spoel D V, Burmeister F, Bergh M, Caleman C, Hultdt G, Seibert M M, Maia F R N C, Lee R W, Szöke A, Timneanu N, Hajdu J 2006 *Nature Phys.* **2** 839
- [29] Sandberg R L, Song C Y, Wachulak P W, Raymondson D A, Paul A, Amirbekian B, Lee E, Sakdinawat A E, La-O-Vorakiat C, Marconi M C, Menoni C S, Murnane M M, Rocca J J, Kapteyn H C, Miao J W 2008 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **105** 24
- [30] Sandberg R L, Paul A, Raymondson D A, Hädrich S, Gaudiosi D M, Holtsnider J, Tobey R I, Cohen O, Murnane M M, Kapteyn H C, Song C, Miao J W, Liu Y W, Salmassi F 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 098103
- [31] Faulkner H M, Rodenburg J M 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 023903
- [32] Rodenburg J M, Faulkner H M 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 4795
- [33] Rodenburg J M, Hurst A C, Cullis A G 2007 *Ultramicroscopy* **107** 227
- [34] Rodenburg J M, Hurst A C, Cullis A G, Dobson B R, Pfeiffer F, Bunk O, David C, Jefimovs K, Johnson I 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 034801
- [35] Thibault P, Dierolf M, Menzel A, Bunk O, David C, Pfeiffer F 2008 *Science* **321** 379
- [36] Maiden A M, Rodenburg J M 2009 *Ultramicroscopy* **109** 1256
- [37] Guizar-Sicairos M, Fienup J R 2008 *Opt. Express* **16** 7264
- [38] Wilke R N, Priebe M, Bartels M, Giewekemeyer K, Diaz A, Karvinen P, Salditt T 2012 *Opt. Express* **20** 19232
- [39] Takahashi Y, Suzuki A, Zettsu N, Kohmura Y, Senba Y, Ohashi H, Yamauchi K, Ishikawa T 2011 *Phys. Rev. B* **83** 214109
- [40] Miao J W, Nishino Y, Kohmura Y, Johnson B, Song C Y, Risbud S H, Ishikawa T 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 085503
- [41] He H, Marchesini S, Howells M, Weierstall U, Hembree G, Spence J C H 2003 *Acta Crystallogr. Sect. A: Found. Crystallogr.* **59** 143
- [42] Zhou G Z, Tong Y J, Chen C, Ren Y Q, Wang Y D, Xiao T Q 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 028701 (in Chinese) [周光照, 佟亚军, 陈灿, 任玉琦, 王玉丹, 肖体乔 2011 物理学报 **60** 028701]
- [43] Zhou G Z, Wang Y D, Ren Y Q, Chen C, Ye L L, Xiao T Q 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 018701 (in Chinese) [周光照, 王玉丹, 任玉琦, 陈灿, 叶琳琳, 肖体乔 2012 物理学报 **61** 018701]
- [44] Miao J W, Sayre D, Chapman H N 1998 *J. Opt. Soc. Am. A* **15** 1662

Influence of central beamstop on ptychographic coherent diffractive imaging*

Liu Hai-Gang¹⁾²⁾ Xu Zi-Jian^{1)†} Zhang Xiang-Zhi¹⁾ Guo Zhi¹⁾ Tai Ren-Zhong^{1)‡}

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

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

(Received 13 January 2013; revised manuscript received 2 April 2013)

Abstract

A beamstop is commonly used in coherent diffractive imaging (CDI) experiments to collect more high-angle diffraction signals. But it causes the low-frequency signals missed, which can make CDI reconstruction unstable or even fail. In this work, a systematic simulation investigation of the effects of the missing low-frequency signals on the quality of reconstructed images of ptychographic CDI (PCDI) is performed using the ptychographic iterative engine algorithm. We found that the robustness of PCDI to the beamstop is much higher than that of the plane-wave CDI, and a smaller incident probe or a larger probe overlap ratio ($\geq 70\%$) can further decrease the negative influence of missing low-frequency signals on the reconstruction image. The probe scanning position error will be the main degrading factor of PCDI instead of the beamstop in the higher overlap cases, and needs to be corrected in experiments by using high precision motors or adopting the position refinement algorithms. Our results provide quantitative guidelines for the usage of beamstops in ptychographic CDI experiments.

Keywords: ptychographic coherent diffractive imaging, phase retrieval algorithm, low-frequency signal missing

PACS: 07.85.Tt, 61.05.cp, 68.37.Yz, 42.30.Rx

DOI: 10.7498/aps.62.150702

* Project supported by the Main Direction Program of Knowledge Innovation of Chinese Academy of Sciences (Grant no. KJCX2-YW-N38), the Shanghai Municipal Natural Science Foundation, China (Grant no. 11ZR1445200), the National Natural Science Foundation for Youth of China (Grant no. 11005147), the Project of Open Device of Large Science from Chinese Academy of Sciences Research: Self-assembly Nanometer Array Technology and Ultra-high Density Study.

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

‡ Corresponding author. E-mail: tairenzhong@sinap.ac.cn