

基于光栅分光法的相干衍射成像*

刘诚[†] 潘兴臣 朱健强

(中国科学院上海光学精密机械研究所, 高功率激光物理联合实验室, 上海 201800)

(2013年5月10日收到; 2013年6月18日收到修改稿)

提出一种可以通过单次曝光实现 PIE (ptychographic imaging engine) 成像的方法, 该方法用正交光栅将入射细光束衍射为传播方向不同的子光束簇以对样品进行照明, 并用 CCD 同时记录各个子光束所形成的衍射光斑阵列. 该方法很好地克服了现有 PIE 方法的成像质量易受机械扫描误差影响和数据采集时间过长两个缺点, 具有很好的实用价值.

关键词: 相干衍射成像, 相位恢复, 显微成像, 迭代算法

PACS: 42.30.Rx, 42.30.Kq, 42.25.Fx, 42.25.Kb

DOI: 10.7498/aps.62.184204

1 引言

相干衍射成像 CDI (coherent diffraction imaging) 是一种用迭代算法直接从所记录的物体散射斑恢复物体强度和相位的成像技术. 它最早在 1969 年由 Hoppe^[1] 提出, 后经 Fienup^[2,3] 和 Misell^[4] 的改进而逐步发展起来. 由于其不需要复杂的光学元件, 成像质量不受透镜像差的影响, 理论上 CDI 能够获得接近衍射极限的空间分辨率^[5-8], 同时对使用环境的要求比传统的干涉技术低很多. 鉴于这些优点, 在 X-射线和电子束等短波长成像领域, CDI 技术得到较多的研究并取得较大进展^[9-12]. 但由于其需要利用小孔对待测物体进行限制, 因此所成像的视场较小, 而且对于相位分布稍微复杂的物体, 传统 CDI 往往计算收敛速度较慢或者不收敛, 因此对于实际应用来说, CDI 方法存在很大不足. 为了克服 CDI 的缺点, 2004 年 Faulkner 和 Rodenburg^[13,14] 提出一种改进的 CDI 算法并命名为 PIE (ptychographic, imaging engine). PIE 方法通过用局域照明光场对待测物体进行横向扫描并同时记录相应的衍射光斑序列, 只要相邻两次照明区域间有一定比例的重叠, PIE 方法就可以快速而且可靠地重建出

物体的相位像和强度像. 和传统的 Fienup 算法相比较, PIE 方法可以对任意结构和任意大小的物体进行成像, 不仅重建收敛速度快而且所成的像具有很高的信噪比^[15,16], 现在已经在可见光^[17]、X 射线^[18,19]、电子束^[20,21] 频段获得成功. 但目前的 PIE 技术具有两个主要的缺点. 首先, 由于需要对待测量样品进行横向步进扫描, PIE 技术的数据采集时间较长, 在可见光频段总的数据采集时间在 20 min 以上, 而 X-射线频段的数据采集时间甚至可达几个小时. 如此长的数据采集时间, 对整个成像系统的稳定性有很高的要求, 在数据采集过程中系统的振动、样品变性和光源本身参数的变化都可能引起实验失败. 其次, PIE 成像精度严重依赖于步进扫描机构的定位准确度. 常用的机械扫描台的单次定位精度往往低于 1 μm , 压电陶瓷扫描的单次定位精度在 1 nm 左右, 在 PIE 的数百次扫描定位过程中, 定位误差的逐次积累很容易引起成像精度降低甚至使成像失败. 由于这两个缺点的存在, 目前的 PIE 技术暂时还不可能进行大范围的实际应用.

为了克服步进扫描方法给 PIE 技术带来的缺点, 本文从理论上提出了一种新的光路安排和相应的图像重建方法来实现单次曝光 PIE 成像. 在所提出的方法中, 现有 PIE 技术中的单一光束照明被正

* 中国科学院百人计划基金 (批准号: 1104331-JRO) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: cheng.liu@hotmail.co.uk

交光栅所衍射出的数十数子光束同时照明代替,且所有这些光束在物体平面上存在一定的重叠.这些照明光束在穿过待测样品时,若待测量样品的散射足够弱(大部分 PIE 实验中所用的样品都满足此条件),则各透射光仍然基本沿着原来的方向继续传播,并在样品后的记录面上形成一组彼此分离的衍射斑.这样的光路安排和所得到的数据,完全满足现有 PIE 技术的成像要求,因此可以用来对待测量样品进行精确的相位和强度重建.由于不再需要对样品进行逐步扫描,所有的数据可以通过 CCD 的一次曝光而全部得到记录,数据采集时间大幅度缩短,同时由于没有机械扫描,扫描误差积累所带来的影响完全不存在,所以现有 PIE 技术的两个最主要的缺点全部得以解决.本文在给出理论分析的同时,进行了细致的模拟计算并详细地讨论了本方法的适用范围和优缺点.

2 现有 PIE 算法简介

现有 PIE 的基本光路如图 1 所示.一个空间局部的照明光波(可以是被平面波照明的小孔的透射光波)传播一段距离后到达待测样品面,形成分布为 $P(x,y)$ 的照明光;待测样品相对于照明光在 $x-y$ 平面内做 M 行 N 列扫描,位于样品后方且和样品距离为 z 的 CCD 记录样品在每个扫描位置时所形成的衍射光斑 $I_{mn}(x,y)$. PIE 方法要求样品在相邻两次扫描位置时,有一定比例的面积被重复照明.以 4×4 移动矩阵为例,样品在编号为 1—4 的四个扫描位置时,四个照明位置的相对位置关系如图 2 所示.

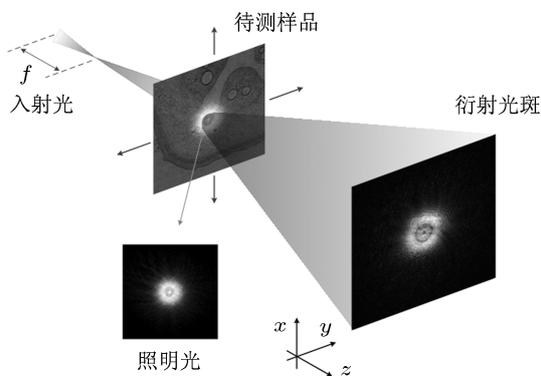


图 1 PIE 基本光路

在图 1 和图 2 所示记录条件下,对样品进行扫描并记录下全部散射斑 $I_{mn}(x,y)$ 后, PIE 将按如下

步骤重建样品的相位像和强度像:

1) 对待测样品的分布 O 给一个随机猜测,比如振幅为 0—1 的随机分布,相位为 0;

2) 计算照明光 $P_{m,n}$ 照射样品 O 后在 CCD 记录平面上所形成的衍射光斑 $E_{m,n}$, 即

$$E_{m,n} = \mathcal{F}(P_{m,n} \cdot O) = |E_{m,n}| \exp(i\varphi_{m,n}), \quad (1)$$

其中 $\varphi_{m,n}$ 为对应的相位分布, $\mathcal{F}()$ 表示正向传播菲涅耳衍射积分, $\mathcal{F}^{-1}()$ 表示反向传播菲涅耳衍射积分;

3) 使用实际记录的衍射光斑的振幅分布 $\text{sqrt}(I_{m,n})$ 代替 $|E_{m,n}|$, 并保留相位不变, 得到更新后的 $E'_{m,n}$, 即

$$E'_{m,n} = \text{sqrt}(I_{m,n}) \exp(i\varphi_{m,n}), \quad (2)$$

其中 sqrt 表示开根号;

4) 逆传播 $E'_{m,n}$ 到待测样品面, 得到更新的样品出射波函数 $D_{m,n}$, 即

$$D_{m,n} = \mathcal{F}^{-1}(E'_{m,n}); \quad (3)$$

5) 通过以下公式根据照明光分布 $P_{m,n}$ 对待测样品分布 O 进行更新, 得到

$$O' = O + \frac{|P_{m,n}|}{|P_{m,n}|_{\max} |P_{m,n}|^2 + \alpha} \text{conj}(P_{m,n}) (D_{m,n} - P_{m,n} \cdot O), \quad (4)$$

其中 α 为防止 $|P_{m,n}|^2$ 为 0 处分母无意义, conj 表示取共轭;

6) 逐次使用记录的所有光斑重复步骤 2 到步骤 5, 并将上一个循环更新后的样品分布 O' 将会作为下一个循环样品分布的初始值 O 传递下去;

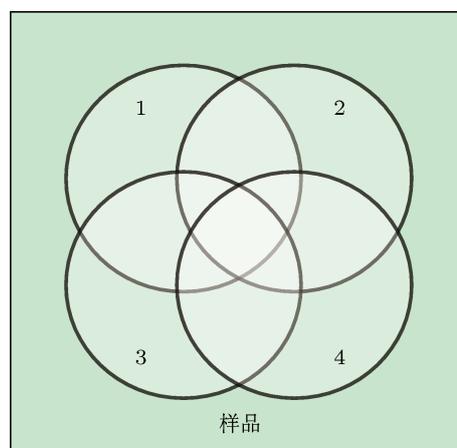


图 2 照明光对待测样品进行扫描 4 次时照明光的扫描分布

7) 当所有记录的光斑都迭代过一次之后计算误差 $SSE = (||E_{m,n}|^2 - I_{m,n}|)/N$, 若 SSE 足够小, 则

计算得到的 O 即为重建结果, 否则再重复以上步骤 2 到步骤 6, 直到获得较小的 SSE 为止.

图 2 所示的相邻位置间的照明重叠是 PIE 技术最为重要的改进, 由于远场散射斑是重叠区域和非重叠区域所透射的光的相干叠加, 这种重叠对样品不同位置处的相位关系进行了锁定, 客观上起到了全息中参考光的作用. 也就是说, PIE 没有单独使用参考光, 但是客观上却达到了和使用参考光类似的效果. 这是 PIE 与其他 CDI 方法相比较有较快的收敛速度和较高的成像精度的客观原因所在.

3 基于光栅分光的单次曝光 PIE 方法

为克服现有 PIE 的缺点, 本文提出一种避免使用机械扫描的 PIE 方法, 该方法的光路如图 3 所示. 一束细激光束照射到二维光栅上后, 光栅的衍射作用使入射细激光束被衍射为沿不同方向传播的 $N \times N$ 光束矩阵, 并同时照射到待测样品上. 待测样品和光栅间的距离在一定范围内时, 相邻的子光束将在样品表面上将形成类似图 2 所示的照明重叠. 同时当待测样品的衍射能力足够弱时 (大部分 PIE 成像所用的样品满足此条件), 各子光束的透射光束大体上仍然沿着原来的方向继续传播, 处于样品后面一定距离处的 CCD 上将接收到彼此分离的衍射光斑矩阵, 也即每一个照明子光束所形成的衍射光斑都会被 CCD 不同的区域所记录. 图 3 所示的光路用子光束的空间错位代替现有的 PIE 技术的机械扫描, 用 CCD 靶面的不同区域代替现有 PIE 技术的时间记录序列, 所以图 3 所示光路完全满足 PIE 技术在照明和数据记录两方面的要求, 可以用标准的 PIE 理论从所记录到的散射斑阵列重建出样品的振幅和相位像.

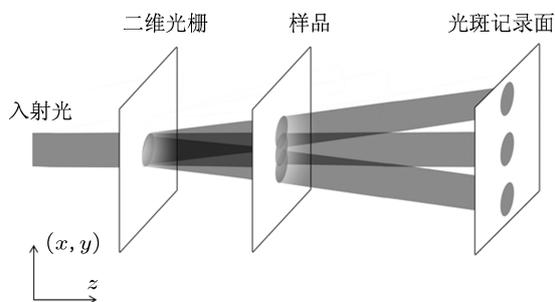


图 3 利用光栅实现相干衍射成像的装置

在图 3 所示的光路中, 所有的散射斑可以通过 CCD 的一次曝光而全部得以记录, 所以的曝光时间

可以由原来的 20 min 以上降低到 1 s 以下, 因此对系统和样品的稳定性要求大为降低. 同时, 图 3 中没有任何的机械扫描装置, 因此机械扫描误差对样品的成像精度的影响完全不存在. 所以采用图 3 所示的光路, 现有 PIE 技术的两个主要缺点可以完全得以克服.

为了验证上述方法的可行性, 我们进行了详细的计算机模拟分析. 假设待测样品具有图 4(a) 和 (b) 所示透射率和相位分布, 其中相位分布范围为 $0-\pi$, 振幅分布范围为 $0-1$. 直径为 1.28 mm 的圆形平行光经过密度为 90 线/mm 二维正弦光栅后变成 4×4 束子照明光并传播 25 mm 到达待测样品面, 在待测样品平面上形成图 4(c) 所示的照明光场. 由于各相邻子照明光束之间有部分重叠, 起到了现有 PIE 中用照明光进行扫描的作用. 待测样品的透射光传播 100 mm 后形成图 4(d) 所示的衍射光斑阵列, 由于各个子衍射斑之间相互分离, 因此它们可以分别用于图像重建. 为了和实验室实际使用的参数一致, 假定 CCD 像元大小为 $6.4 \mu\text{m}$, 像素个数为 2048×2048 , 激光波长为 $0.6328 \mu\text{m}$. 上述模拟参数是在考虑实验可行性的前提下而选择的, 如在上述参数条件下 $6.4 \mu\text{m}$ 像元正好可以在计算过程中使光斑的相位能满足采样定理要求, 同时 2048×2048 个像素又确保可以记录到 16 个光斑.

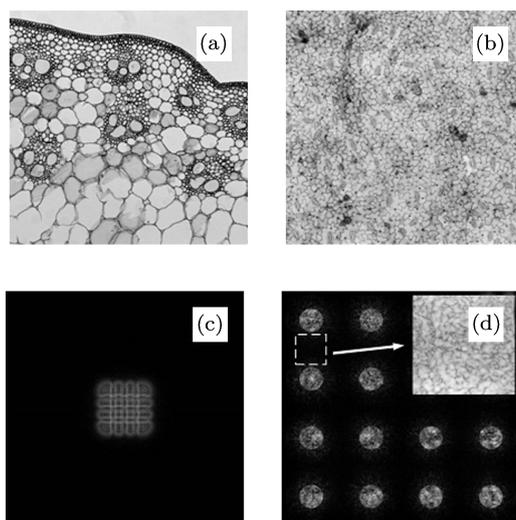


图 4 (a) 待测样品的振幅分布; (b) 待测样品的相位分布; (c) 照射到待测样品的照明光的分布, 一共有 16 个子照明光; (d) 记录的衍射光斑的振幅分布

在实际的实验中, 一束光通过光栅以后可以变为数百束衍射光, 但由于 CCD 靶面的尺寸有限, 只有中间的几级衍射光束能得以记录, 如果将相位光

栅看作余弦级数的叠加, 则其中真正起作用的部分仅仅是中间几个低阶级数, 而不是光栅的全部. 所以在模拟计算中可以不考虑光栅的真实结构, 而将正交光栅的表达式 $T(x,y)$ 假定为

$$T(x,y) = \sum_{\substack{m=1,3 \\ n=1,3}} 4 \cos \left[\frac{km\alpha x}{\sqrt{(m\alpha)^2 + L^2}} \right] \times \cos \left[\frac{kn\alpha y}{\sqrt{(n\alpha)^2 + L^2}} \right], \quad (5)$$

其中 k 为波矢, 即 $k = 2\pi/\lambda$, α 为 1638.4, L 为光栅到 CCD 的距离 125 mm, 所有长度和坐标 (x,y) 单位都是微米, 通过计算可以精确地得到图 4(c) 中的 16 个子光束的复振幅分布. 为了简单起见, 我们假定光栅的各级衍射能量相等, 但并不必须如此. 在实际实验中, 样品平面上的照明光可以用 ePIE 或者波前调制法预先进行精确测量, 并由此得到记录平面上的衍射光斑的复振幅分布, 同时由于它们彼此独立因此可以分别截取出来并传播回样品所在平面, 得到满足 PIE 要求的各个子光束的复振幅分布. 各个子光束之间的主要区别在于它们有各不相同的相位倾斜因子, 而且愈靠近边缘倾斜因子愈大, 为了使相位能满足采样定理要求, 要确保相邻像素的相位差小于 2π , 因此倾斜因子的大小必须根据所用 CCD 像元等参数进行合理选择, 也即选择合适密度的光栅和合适的光斑数, 这也是为什么在模拟计算中选择 4×4 个子光束, 而不是更常见的 5×5 等奇数分布的原因.

采用这种方法, 进行迭代运算 50 个循环共 $50 \times 16 = 800$ 次迭代之后所得到的重建结果如图 5 所示. 其中图 5(a) 为再现的样品振幅分布, 图 5(b) 为再现的样品的相位分布, 图 5(c) 为迭代过程中的误差 SSE 变化, 可以发现经过 800 次迭代后误差变为 0.007. 从这个模拟计算结果可以看出, 本文所提出的方法能够较好地恢复待测样品的分布.

虽然上述模拟计算很好地验证了本文所提方法的可行性, 但与标准 PIE 方法相比, 最终的精度明显偏低. 标准 PIE 方法的重建误差可以达到 10^{-5} (鉴于篇幅的限制, 标准 PIE 方法的重建过程和结果不再给出详细描述). 主要原因在于, 虽然对于弱散射样品, 其各个子衍射光斑的主要能量都集中于基频光中, 但依然有一些高频信息散播到相邻衍射光斑的位置, 变为其他衍射光斑的噪声. 图 4(d) 右上角的局部放大图为左侧方框内的振幅分布取 log,

可以明显看出每个子光斑之间还有很多高频信息, 因此截取出来的光斑并不是准确的光强分布, 往往夹杂其他子光斑的信息, 同时由于截取出子光斑的范围有限, 包含样品细节信息的高频量往往不能够准确截取出来, 因此与标准 PIE 相比收敛速度和最终图像的精度都会有所降低. 由于出现上述结果的主要原因是迭代过程中使用的子光斑并不是完全准确的分布, 因此可以同时使用相邻的 2 个, 4 个甚至更多的子光斑为一组进行计算. 当用单个子光斑进行迭代运算误差基本不变时, 选用相邻的 2 个子光斑为一组进行迭代运算, 当其误差基本不变时, 再使用相邻的 4 个子光斑一组进行迭代运算, 如此逐步增加每次迭代中子光斑的个数, 直到所有子光斑同时用于迭代, 这样在重建物体的过程当中, 子光斑之间的高频信息就能够得到越来越准确的更新, 能够进一步降低重建结果的误差. 为验证此思想的正确性, 我们做了另一模拟计算, 计算结果在图 6 中给出. 首先, 在 A 阶段单独使用图 4(d) 中所示的各个光斑进行恢复计算, 迭代大概 40 个循环后误差约为 3.5%, 然后在 B 阶段将每行中相邻的 2 个光斑为一组进行迭代运算, 10 个循环后误差变为 2.5%, 最后在 C 阶段将彼此相邻的 4 个光斑分为一组, 继续迭代运算 20 个循环, 误差可以降低到 2%.

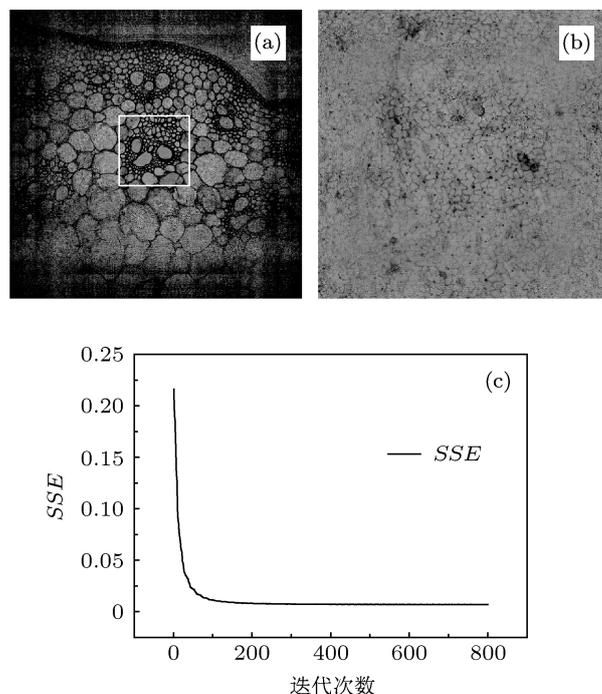


图 5 重建结果及误差 (a) 重建的振幅分布, 方框内为主要照明区域; (b) 再现的相位分布; (c) 迭代运算过程的误差变化

所以, 当同时记录更多的衍射光斑时, 将有更

多的光斑排列组合的方式, 这些不同的分组方式进行交替迭代运算可以有效降低各个光斑单独使用时所带来的误差, 进一步提高最终重建像的精度. 除了改变分组方式外, 在条件允许的情况下还可以使用大靶面尺寸的 CCD, 使用密度更大的分光光栅, 使各个子光斑能够分离更远的距离, 降低各个子光斑之间的相互影响.

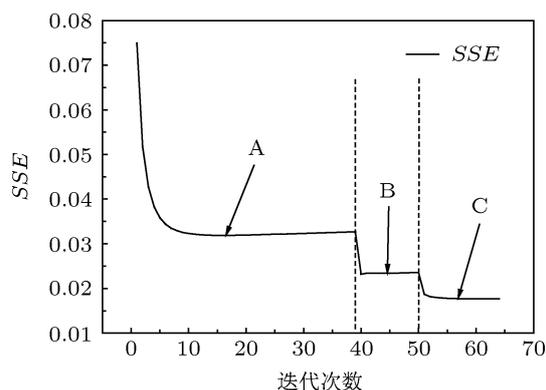


图6 依次使用三种分组方式进行迭代运算的误差变化

4 结论

利用光栅衍射所产生的多光束对样品进行照明, 并用 CCD 同时记录各子光束产生的衍射光斑, 可以实现单次记录 PIE 成像. 该方法有效避免了标准 PIE 方法受机械扫描误差影响的缺点, 具有传统 CDI 成像方法的光路简单、对装置稳定性要求低、不受透镜像差影响等诸多优点, 同时又具有标准 PIE 成像方法的收敛速度快和稳定性高等优点. 虽然通过截取子衍射光斑的方式会带来一定误差, 但可以通过同时截取多个子衍射光斑进行排列组合的方法降低误差, 也可以选择更大尺寸的记录器件以提高精度. 更重要的是这个缺点对弱散射物体的成像影响将会非常微小, 特别是当光源为电子束时, 由于电子能量较高, 各个子光斑可以被认为是百分之百的分离. 因此本文提出的方法具有很好的应用前景, 可以进一步研究以提高成像质量和应用范围.

- [1] Hoppe W, Strube G 1969 *Acta Crystallogr. A* **25** 502
- [2] Fienup J R 1982 *Appl. Opt.* **21** 2758
- [3] Fienup J R 1978 *Opt. Lett.* **3** 27
- [4] Misell D L 1973 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **6** L6
- [5] Maiden A M, Humphry M J, Zhang F, Rodenburg J M 2011 *J. Opt. Soc. Am. A* **28** 604
- [6] Rodenburg J M 1989 *Ultramicroscopy* **27** 413
- [7] Gazit S, Szameit A, Eldar Y C, Segev M 2009 *Opt. Express* **17** 23920
- [8] Szameit A, Shechtman Y, Osherovich E, Bullkich E, Sidorenko P, Dana H, Steiner S, Kley E B, Gazit S, Cohen-Hyams T, Shoham S, Zibulevsky M, Yavneh I, Eldar Y C, Cohen O, Segev M 2012 *Nat. Mater.* **11** 455
- [9] Miao J, Charalambous P, Kirz J, Sayre D 1999 *Nature* **400** 342
- [10] Zhang F, Rodenburg J M 2010 *Phys. Rev. B* **82** 121104
- [11] Putkunz C T, Clark J N, Vine D J, Williams G J, Balaur E, Cadenazzi G A, Curwood E K, Henderson C A, Scholten R E, Stewart R J, McNulty I, Nugent K A, Peele A G 2011 *Ultramicroscopy* **111** 1184
- [12] Williams G J, Quiney H M, Dhal B B, Tran C Q, Nugent K A, Peele A G, Paterson D, de Jonge M D 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 025506
- [13] Faulkner H M L, Rodenburg J M 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 023903
- [14] Rodenburg J M, Faulkner H M L 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 4795
- [15] Hüe F, Rodenburg J M, Maiden A M, Midgley P A 2011 *Ultramicroscopy* **111** 1117
- [16] Faulkner H M L, Rodenburg J M 2005 *Ultramicroscopy* **103** 153
- [17] Rodenburg J M, Hurst A C, Cullis A G 2007 *Ultramicroscopy* **107** 227
- [18] Miao J, Ishikawa T, Anderson E H, Hodgson K O 2003 *Phys. Rev. B* **67** 174104
- [19] 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
- [20] Nishino Y, Miao J, Ishikawa T 2003 *Phys. Rev. B* **68** 220101
- [21] Humphry M J, Kraus B, Hurst A C, Maiden A M, Rodenburg J M 2012 *Nat. Commun.* **3** 730

Coherent diffractive imaging based on the multiple beam illumination with cross grating^{*}

Liu Cheng[†] Pan Xing-Chen Zhu Jian-Qiang

(Joint Laboratory on High Power Laser and Physics, Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Science, Shanghai 201800, China)

(Received 10 May 2013; revised manuscript received 18 June 2013)

Abstract

A single shot PIE (ptychographic imaging engine) imaging method is proposed to overcome the disadvantages of common PIE algorithm. In this proposed method, a multiple beam illumination obtained with a cross grating is used to illuminate the object studied, and a CCD camera is adopted to record the diffraction pattern array of all the illumination beams simultaneously. The phase and the modulus images of the object can be faithfully reconstructed with stand PIE computation algorithm from the recorded data.

Keywords: coherent diffraction image, phase retrieval, microscopy, iterative engine

PACS: 42.30.Rx, 42.30.Kq, 42.25.Fx, 42.25.Kb

DOI: 10.7498/aps.62.184204

^{*} Project supported by the "100 Talents Project" of Chinese Academy of Sciences (Grant No. 1104331-JRO).

[†] Corresponding author. E-mail: cheng.liu@hotmail.co.uk