

从电子显微镜的象面和衍射面强度 复原相位的计算实例

西门纪业 晏继文

(北京大学无线电电子学系)

1982年5月4日收到

提 要

高分辨率电子显微学中相位复原问题是一个重要问题。本文的计算表明,对于振幅为常数或线性函数,相位为抛物型、正弦型或指数型的波函数,可以采用 Gerchberg-Saxton 迭代算法从已知的象面和衍射面上的强度分布来唯一地和精确地复原真实的相位。我们编制了计算机程序,对于给定的象面波函数,采用离散的快速傅里叶算法,可以计算其衍射面的波函数。输入数值在 $-\pi$, $+\pi$ 间的初始相位后,按照 G-S 迭代算法,利用本程序可以复原相位。文中详细给出了若干个计算实例。所得的相位迭代解对于1弧度的初始相位扰动是稳定的。

一、引 言

近年来高分辨率电子显微镜得到了广泛应用。高分辨率电子显微镜既能够获得高分辨率电子显微象(包括晶格象,结构象和原子象),同时还能得到微区电子衍射图。因此,高分辨率电子显微镜已经成为研究晶体结构的重要工具。但是,在电子显微镜中,显微象照片和衍射图照片只是分别记录了象面波和衍射面波的强度。为了精确决定试样结构或进行图象处理,还需要获得这些平面上的相位信息。因此高分辨率电子显微学中的相位复原问题是一个重要问题。许多作者对于这个问题进行了研究和讨论,见文献[1—3]及其引用的文献。Gerchberg 和 Saxton^[4,5]首先提出从已知象面和衍射面的强度出发来复原相位的迭代算法(以下简称为 G-S 算法)。Misell^[6]则提出从两个不同失焦量的象面上的强度分布出发来恢复相位的算法。这两种方法是电子显微学中相位复原问题的典型处理方法。近年来我国一些作者对光学显微镜和电子显微镜中的相位复原问题亦作了讨论^[7,8]。

应该强调,相位复原的关键在于由已知两个平面上的强度分布求解其相位的问题是否有唯一解。文献上对于这个问题作了许多讨论^[2,3,5]。有的文献[9]在较强的条件下证明了某些类型的波函数相位复原问题有唯一解。有的文献^[5,10]则给出若干反例,证明相位复原问题没有唯一解(甚至于任意多解)。迄今为止,人们尚未能够对于这个唯一性问题给以严格的、普遍证明。

本文对于几个具有实际意义的波函数模型(即振幅为常数或线性函数,相位为抛物型、正弦型或指数型分布),采用 G-S 迭代算法,从已知的象面和衍射面上的强度分布求

出相位的迭代解。由于这些模型可以求出解析的傅里叶变换公式,因此将迭代值与解析解对比分析后,就可以看出迭代结果是足够精确的。本文给出的几个正面例子,可能有助于探讨在什么条件下相位复原问题有唯一解。

二、计算原理^[1,2,4,5]

设电子显微镜成像系统的象面波函数为

$$f(x) = |f(x)| \exp[j\phi(x)]. \quad (1)$$

衍射面波函数为

$$F(\omega) = |F(\omega)| \exp[j\Phi(\omega)]. \quad (2)$$

在相干照明下,不考虑象差和失焦,则电子光学成像系统的作用在于使 $f(x)$ 和 $F(\omega)$ 互为傅里叶变换,即

$$f(x) \longleftrightarrow F(\omega).$$

傅里叶正变换为

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-j\omega x} dx. \quad (3)$$

傅里叶逆变换为

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(\omega) e^{j\omega x} d\omega. \quad (4)$$

设计算给定的或实验测定的象面和衍射面强度为

$$I = |f(x)|^2, \quad |f(x)| = \sqrt{I}, \quad (5)$$

$$D = |F(\omega)|^2, \quad |F(\omega)| = \sqrt{D}. \quad (6)$$

G-S 算法就是在给定的 I 和 D 分布下,赋予象面(或衍射面)波函数任意的初始相位分布 $\phi_0(x)$ (或 $\Phi_0(\omega)$),然后反复进行傅里叶正变换和逆变换,并且对每次所得的共轭的 $f(x)$ 和 $F(\omega)$ 加以修正,使其振幅保持 $\sqrt{I}$ 和 $\sqrt{D}$ 的数值。由此通过反复迭代可以得到相位复原问题的近似解,并使得象面振幅误差平方和

$$SSE = \sum_{i=1}^M (|f_i| - \sqrt{I_i})^2 / \sum_{i=1}^M I_i \quad (7)$$

小于给定的小量 ϵ 。G-S 算法的框图如图 1。

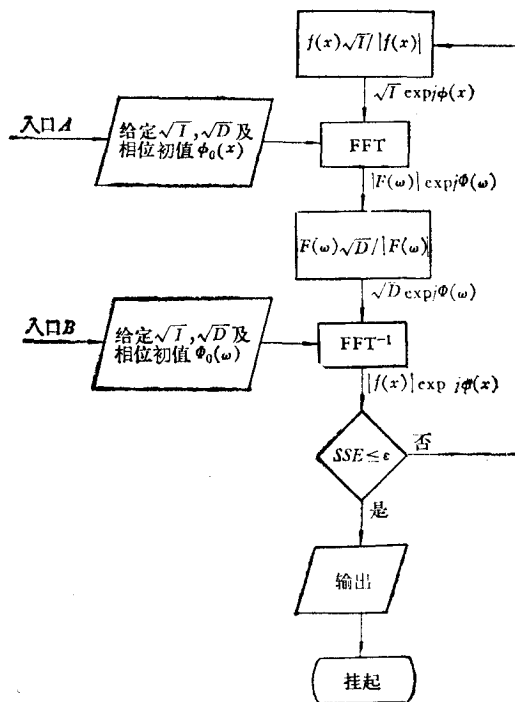


图 1

文献[1, 2, 5]证明了上述算法的收敛性,文献[8]则证明了上述算法解的存在性。

对于实际的成像系统可以认为象面波函数或衍射面波函数是有限宽度的连续函数。因此可以用有限数目的取样点上的数值来描述波函数。从而它们变成为空域(象面上)与

频域(衍射面上)的离散的周期信号。这样一来,有限宽度的连续信号的傅里叶变换归结为离散的傅里叶变换,它们在空域和频域中都实现了周期化。文献[11, 12]提出了实现离散傅里叶变换的快速算法。这个方法称为快速傅里叶变换(简称为FFT)。

根据以上原理,我们编制了计算机程序,可以按照G-S迭代算法利用快速傅里叶变换方法求解已知 I 和 D 的相位复原问题。我们对于以下几种具有实际意义的波函数模型进行了计算试验。

三、计算结果

为简单起见,本文只讨论一维问题。规定在象面上 $-2 < x < 2$ 的范围中总的取样点数一律为128,相应地在衍射面上取样点数亦为128。设象面上总的非零取样点数为 M ,迭代次数为 N ,象面振幅误差平方和为 SSE ,见(7)式。 $\phi(x)$ 为真实的或理想的相位分布, $\phi^*(x)$ 为迭代得到的相位分布。选取象面初始相位分布 $\phi_0(x)$ 为 $-\pi, +\pi$ 之间的随机分布; $\phi(x), \phi^*(x), \phi_0(x)$ 一律用弧度计算。在每张图上实线表示 $\phi(x)$ 分布,点子表示 $\phi^*(x)$ 分布。我们规定 $\phi^*(x)$ 较之 $\phi(x)$ 的平均绝对误差为 $\Delta\phi$,即

$$\Delta\phi = \sum_{i=1}^M |\phi(x_i) - \phi^*(x_i)| / \sum_{i=1}^M i. \quad (8)$$

由于相位复原问题中相位绝对值没有意义,因此在计算 $\phi(x_i) - \phi^*(x_i)$ 时允许忽略一个固定的常数。

1. 模型 1a (有限宽度、单位振幅、抛物型相位)。设象面波函数为

$$f_p(x) = p(x)e^{i\beta x^2}, \quad (9)$$

$$p(x) = \begin{cases} 1 & -l < x < l \text{ (其上均分为 } M \text{ 个取样点),} \\ 0 & \text{其余 } x \text{ 值.} \end{cases} \quad (10)$$

以下 $p(x)$ 一律按照(10)式定义,它描写了有限宽度 $2l$ 、单位振幅的波函数。式中实数 β 为抛物型相位分布的特征参数。(9)式可以描绘电子显微镜中直边菲涅耳衍射波^[13]。

按照文献[14]可以求出相应的衍射面波函数

$$F_p(\omega) = \sqrt{\frac{\pi}{2\beta}} \left[K\left(\frac{2\beta l - \omega}{\sqrt{2\pi\beta}}\right) + K\left(\frac{2\beta l + \omega}{\sqrt{2\pi\beta}}\right) \right] e^{-j\omega^2/(4\beta)}, \quad (11)$$

式中 K 是非涅耳积分,即

$$K(x) = \int_0^x e^{i\pi t^2/2} dt.$$

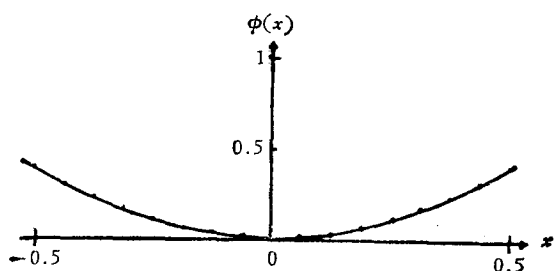
由(11)式可见,衍射面振幅 $|F_p(\omega)|$ 含有 β, l 参数,亦即包含了象面相位的信息。

在计算中令 $\beta = \pi/2, l = 1/2, M = 32$ 。输入 $-\pi, +\pi$ 之间的随机初始相位分布 $\phi_0(x)$ 后,按照上述框图进行迭代,最后结果为: $N = 100, SSE = 10^{-5}, \Delta\phi = 3 \times 10^{-2}$ 。所得结果见图2(a)。

2. 模型 1b (有限宽度、线性调幅、抛物型相位)。设象面波函数为

$$f_q(x) = q(x)e^{i\beta x^2}, \quad (12)$$

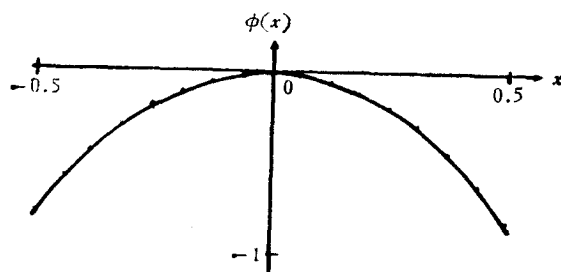
$$q(x) = \begin{cases} 1 + cx & -l < x < l \text{ (其上均分为 } M \text{ 个取样点),} \\ 0 & \text{其余 } x \text{ 值.} \end{cases} \quad (13)$$



(a) 有限宽度、单位振幅、抛物型相位的波函数

$$f(x) = \begin{cases} \exp(j\pi x^2/2) & -0.5 < x < 0.5, \\ 0 & \text{其余 } x \text{ 值.} \end{cases}$$

图上给出了 $\phi(x)$ 和 $\phi^*(x)$



(b) 有限宽度、线性调幅、抛物型相位的波函数

$$f(x) = \begin{cases} (1+x)\exp(-j\pi x^2) & -0.5 < x < 0.5, \\ 0 & \text{其余 } x \text{ 值.} \end{cases}$$

图上给出了 $\phi(x)$ 和 $\phi^*(x)$

图 2

以下 $q(x)$ 一律按照 (13) 式定义, 它描写了有限宽度 $2l$ 、线性调幅 (c 为实数) 的波函数。

同理可得衍射面波函数

$$F_q(\omega) = \left(1 + \frac{c\omega}{\beta}\right) F_p(\omega) - \frac{c}{\beta} e^{i\beta l^2} \sin \omega l, \quad (14)$$

式中 $F_p(\omega)$ 见 (11) 式。

计算中令 $c = 1$, $\beta = -\pi$, $l = 1/2$, $M = 32$. 迭代结果为: $N = 40$, $SSE = 10^{-11}$, $\Delta\phi = 5 \times 10^{-6}$. 由此可见, 线性调幅的模型 1b 比较模型 1a 迭代精度有很大提高, 因而迭代相位更为准确. 这些结果见图 2(b).

3. 模型 2a (有限宽度、单位振幅、正弦型相位). 设象面波函数为

$$f_p(x) = p(x) \exp \left[j \frac{m}{2} \sin \left(\frac{2\pi x}{L} \right) \right]. \quad (15)$$

上式代表通过一维正弦相位光栅的波函数, m (实数) 为相位改变的峰到峰的幅度, L (实数) 为光栅的空间周期^[15]. 在高分辨率电子显微镜中当试样厚度小于 100 埃时, 可以把试样看成一系列不同空间周期的相位光栅的叠加^[16].

按照文献 [15] 可以得到衍射面波函数

$$F_p(\omega) = 2 \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k \left(\frac{m}{2} \right) \sin \left[\left(\frac{2\pi k}{L} - \omega \right) l \right] / \left(\frac{2\pi k}{L} - \omega \right)$$

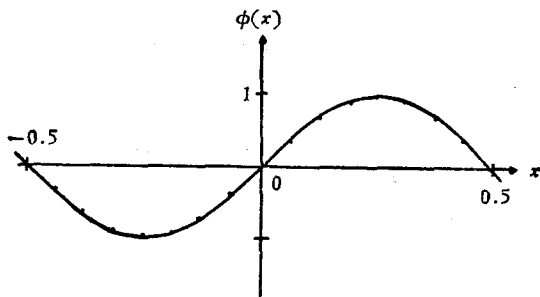
$$(k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \quad (16)$$

式中 J_k 为 k 阶的第一类贝塞耳函数。由 (16) 式可见, $F_p(\omega)$ 为实函数, 且 $|F_p(\omega)|$ 含有 $m/2, l, 1/L$ 等参数, 亦即包含了象面相位的信息。

在计算中令 $m = 2, L = 1, l = 1/2, M = 32$. 迭代结果为: $N = 300, SSE = 10^{-6}, \Delta\phi = 3 \times 10^{-2}$. 所得结果见图 3(a).

4. 模型 2b (有限宽度、线性调幅、正弦型相位). 设象面波函数为

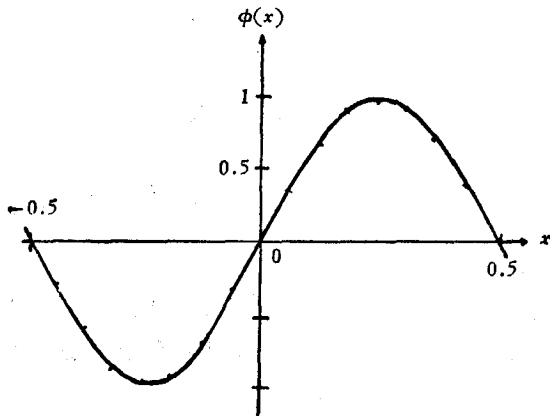
$$f_q(x) = q(x) \exp \left[j \frac{m}{2} \sin \left(\frac{2\pi x}{L} \right) \right]. \quad (17)$$



(a) 有限宽度、单位振幅、正弦型相位的波函数

$$f(x) = \begin{cases} \exp(j \sin 2\pi x) & -0.5 < x < 0.5, \\ 0 & \text{其余 } x \text{ 值.} \end{cases}$$

图上给出了 $\phi(x)$ 和 $\phi^*(x)$



(b) 有限宽度、线性调幅、正弦型相位的波函数

$$f(x) = \begin{cases} (1+x) \exp(j \sin 2\pi x) & -0.5 < x < 0.5, \\ 0 & \text{其余 } x \text{ 值.} \end{cases}$$

图上给出了 $\phi(x)$ 和 $\phi^*(x)$

图 3

同理可得衍射面波函数为

$$F_q(\omega) = 2 \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k \left(\frac{m}{2} \right) \left\{ \left[1 + \frac{cj}{\left(\frac{2\pi k}{L} - \omega \right)} \right] \frac{\sin \left[\left(\frac{2\pi k}{L} - \omega \right) l \right]}{\frac{2\pi k}{L} - \omega} \right\}$$

$$-jcl \frac{\cos\left[\left(\frac{2\pi k}{L} - \omega\right)l\right]}{\frac{2\pi k}{L} - \omega} \left\} \quad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots).$$

计算中令 $m = 2$, $L = 1$, $l = 1/2$, $c = 1$, $M = 32$. 迭代结果为: $N = 90$, $SSE = 10^{-11}$, $\Delta\phi = 8 \times 10^{-5}$. 同样可以看出, 线性调幅的模型 2b 比较模型 2a 迭代精度有很大提高, 且迭代相位更为准确. 结果见图 3(b).

5. 模型 3a (有限宽度、单位振幅、指数型相位). 设象面波函数为

$$f_p(x) = p(x) \exp[j\alpha e^{rx}], \quad (18)$$

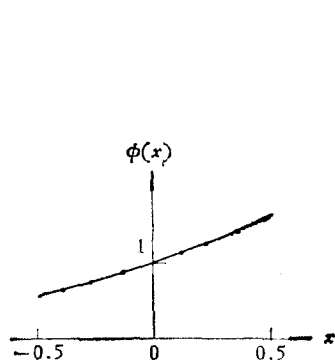
式中 α, r 为实常数. 虽然指数型相位试样尚未找到实际应用, 然而它作为一种解析模型还是值得探讨的.

由指数函数的级数展开式可以得出衍射面波函数为

$$F_p(\omega) = 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(j\alpha)^k}{k!} \left(\frac{rk + j\omega}{r^2 k^2 + \omega^2} \right) [\text{sh}(\gamma k l) \cos \omega l - j \text{ch}(\gamma k l) \sin \omega l] \quad (k = 0, 1, 2, \dots). \quad (19)$$

由此可见衍射面振幅 $|F_p(\omega)|$ 中包括了 α, r, l 等参数, 亦即包含了象面相位分布的信息.

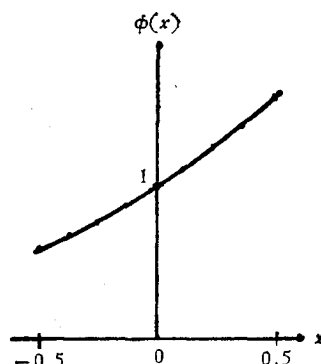
计算中令 $\alpha = 1$, $r = 1$, $l = 1/2$, $M = 32$. 迭代结果为: $N = 200$, $SSE = 10^{-8}$, $\Delta\phi = 7 \times 10^{-3}$. 结果见图 4(a).



(a) 有限宽度、单位振幅、指数型相位的波函数

$$f(x) = \begin{cases} \exp(je^x) & -0.5 < x < 0.5, \\ 0 & \text{其余 } x \text{ 值.} \end{cases}$$

图上给出了 $\phi(x)$ 和 $\phi^*(x)$



(b) 有限宽度、线性调幅、指数型相位的波函数

$$f(x) = \begin{cases} (1+x)\exp(je^x) & -0.5 < x < 0.5, \\ 0 & \text{其余 } x \text{ 值.} \end{cases}$$

图上给出了 $\phi(x)$ 和 $\phi^*(x)$

图 4

6. 模型 3b (有限宽度、线性调幅、指数型相位). 设象面波函数为

$$f_q(x) = q(x) \exp[j\alpha e^{rx}]. \quad (20)$$

同理可以得出衍射面波函数为

$$F_q(\omega) = 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(j\alpha)^k}{k!} \left(\frac{rk + j\omega}{r^2 k^2 + \omega^2} \right) \left\{ \left[1 - c \left(\frac{rk + j\omega}{r^2 k^2 + \omega^2} \right) \right] \times [\text{sh}(\gamma k l) \cos \omega l - j \text{ch}(\gamma k l) \sin \omega l] + cl [\text{ch}(\gamma k l) \cos \omega l \right.$$

$$-j\text{sh}(\gamma kl)\sin\omega l\} \quad (k=0, 1, 2, \dots). \quad (21)$$

计算中令 $\alpha=1$, $\gamma=1$, $l=1/2$, $c=1$, $M=32$. 迭代结果为: $N=40$, $SSE=10^{-11}$, $\Delta\phi=4\times 10^{-5}$. 由此可见, 线性调幅的模型 3b 比模型 3a 迭代精度有很大提高, 且迭代相位更为准确. 结果见图 4(b).

此外, 我们还计算了由以上模型叠加得出的象面波函数, 即

$$f(x) = \begin{cases} \exp\left[j\frac{\pi}{2}\left(x^2 - \frac{1}{4}\right)\right] & -0.5 < x < 0.5, \text{ (其上均分为 32 个取样点)}, \\ (x-1)\exp\left[j\pi\left(\frac{1}{4} - (x-2)^2\right)\right] & 1.5 < x < 2.5, \text{ (同上)}, \\ 0 & \text{其余 } x \text{ 值}. \end{cases} \quad (22)$$

迭代结果为 $N=300$, $SSE=10^{-10}$, $\Delta\phi=6\times 10^{-4}$ 结果见图 5.

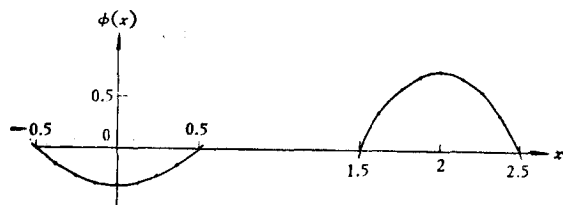


图 5 按照 (22) 式给出的象面波函数 图上给出了 $\phi(x)$ 和 $\phi^*(x)$

四、结 束 语

我们分析了上述计算实例, 并参考了文献 [5], 现在提出以下的初步看法.

1. 由已知 I 和 D 复原相位问题具有唯一解(或至多是一对共轭解)的条件为

第一, 象面波函数是有限宽度的函数;

第二, 象面和衍射面强度的测量结果或计算数据有足够的精度;

第三, 衍射面的强度(或振幅)分布中包含了足够的信息来决定象面的相位分布.

不难看出, 上述各个模型都满足上述条件, 因而其迭代解是唯一的, 而且具有足够高的精度. 事实上文献 [5, 10] 提出的一些反例和我们计算中遇到的一些反例表明, 当象面波函数不符合上述条件时, 便没有唯一解.

2. 在存在唯一解的情况下, 迭代结果与初始相位的选取无关. 例如, 对于每个模型可以用不同的随机的初始相位输入, 但是迭代结果却是相同的. 而且迭代过程还是很稳定的. 例如在计算的任何时刻若使相位受到 1 弧度的扰动后, 再继续进行迭代其结果仍然不变.

3. 我们没有采用弱相位或弱振幅的近似假定, 因而所得的结果可能适用于较强相位和较强振幅的试样.

4. 我们的计算限于一维情况, 但是可以推广到二维情况. 这些结果不仅对于电子显微镜而且对于光学显微镜的相位复原都有一定的意义.

参 考 文 献

- [1] R. W. Gerchberg, W. O. Saxton, in "Image Processing and Computer Aided Design in Electron Optics", (P. W. Hawkes ed.), Academic Press, (1973), p. 66.
- [2] W. O. Saxton, in "Computer Processing of Electron Microscope Images", (P. W. Hawkes ed.), Springer, Berlin, (1980), p. 35.
- [3] H. A. Ferwerda, in "Inverse Source Problem in Optics", (H. P. Baltus ed.), Springer, Berlin, (1978), p. 13.
- [4] R. W. Gerchberg, W. O. Saxton, *Optik*, **34**(1971), 257; **35**(1972), 237.
- [5] W. O. Saxton, Computer Techniques for Image Processing in Electron Microscopy, Academic Press, (1978).
- [6] D. L. Misell, *J. Phys. D*, **6**(1973), L6, 2000, 2217.
- [7] 李方华, 物理学报, **26**(1977), 193; 李方华、范福海, 物理学报, **28**(1979), 276.
- [8] 杨国楨、顾源本, 物理学报, **30**(1981), 410; 顾源本、杨国楨, 光学学报, **1**(1981), 518.
- [9] A. M. J. Huizer, A. J. J. Drenth, H. A. Ferwerda, *Optik*, **45**(1976), 303;
A. M. J. Huizer, H. A. Ferwerda, *Optik*, **46**(1976), 407;
A. M. J. Huizer, P. van Toorn, H. A. Ferwerda, *Optik*, **47**(1977), 1;
P. van Toorn, H. A. Ferwerda, *Optik*, **47**(1977), 123.
- [10] P. Schiske, *Optik*, **40**(1974), 261.
- [11] J. W. Cooley, J. W. Tukey, *Math. Comp.*, **19**(1965), 297.
- [12] J. W. Cooley, P. A. W. Lewis, P. D. Welch, *IEEE Trans.*, **AU-17**(1969), 77.
- [13] J. M. Cowley, Diffraction Physics, North-Holland Publishing, (1975).
- [14] A. Papoulis, Signal Analysis, MacGraw-Hill, (1977), 中译本(毛培法译), 科学出版社, (1981).
- [15] J. W. Goodman, Introduction to Fourier Optics, MacGraw-Hill, (1978), 中译本(詹达三等译), 科学出版社, (1976).
- [16] 西门纪业、葛肇生, 电子显微镜的原理和设计, 科学出版社, (1979).

COMPUTATIONAL TRIALS FOR PHASE RETRIEVAL IN ELECTRON MICROSCOPY FROM IMAGE AND DIFFRACTION PATTERNS

Ximen Ji-ye Yan Ji-wen

(Department of Radio-electronics, Peking University)

ABSTRACT

The problem of phase retrieval from image and diffraction patterns is of importance in electron microscopy. In this paper the true phase can be extracted uniquely and accurately by Gerchberg-Saxton iterative algorithm for the wave function, its amplitude being unity or a linear function, while its phase being a parabolic, sinuous or exponential function.

A computer program for retrieving the phase has been worked out. As an image wave function is given, its Fourier transform may be calculated by the discrete fast Fourier transform algorithm. So we can recover the phase with G-S algorithm, using a random initial phase between $-\pi$ and $+\pi$. The numerical examples are given in detail. The phase retrieval solution is stable under fluctuation of input initial phase up to 1 rad.