

相干 X 射线衍射成像三维重建的数字模拟研究*

周光照¹⁾²⁾ 王玉丹¹⁾²⁾ 任玉琦¹⁾²⁾ 陈灿¹⁾²⁾ 叶琳琳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)

(2011 年 1 月 10 日收到; 2011 年 3 月 18 日收到修改稿)

利用相干 X 射线衍射成像“过采样”采集样品的远场相干衍射图样, 结合相位重建迭代算法重建物空间样品信息. 三维重建过程中, 边界约束条件是相位重建算法中最为关键的部分. 本文采用数字模拟的方法, 利用灰度值图像作为物空间的样品, 研究并实现了边界条件的自动寻找, 重建结果显示比以往采用较“松”的边界约束更为精确. 利用噪声模拟方法, 研究了衍射图样中不同噪声类型的滤除对重建结果的影响. 研究发现传统的去噪方法在高噪声情况下不能直接应用于相干 X 射线衍射成像, 并找到了适用于相干 X 射线衍射成像噪声滤除的有效方法. 研究表明, 此方法能非常有效地降低噪声对重建结果的影响. 利用模拟三维纳米金颗粒作为样品, 完成了对纳米金颗粒中电子密度分布的三维重建, 在有随机噪声的影响下, 也得到了很好的重建结果, 并找到了成功实现三维重建的噪声限为信噪比不低于 27.

关键词: X 射线相干衍射成像, 过采样, 三维相位重建, 显微成像

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

1 引言

近一个世纪以来, 显微成像技术为各个学科领域带来了深入的变革, 人们不仅希望能够获得高的分辨率, 而且希望得到物质内部的三维结构信息. 目前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. 运用成熟的 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, 但是要求样品是很好的结晶体. 而在实际应用中, 有许多材料得不到足够好的结晶体, 甚至以目前的技术根本无法结晶. 因此对于不能结晶的非周期性样品来说, 不能通过传统的 X 射线晶体衍射的方法来测定它们的结构. X 射线荧光全息术 (X-ray fluorescence holography, 简记为 XFH) 能够达到原子尺度的分辨率, 然而该方法同样要求样品是晶体^[1]. X 射线

相位衬度成像 (X-ray phase contrast imaging, 简记为 XPCI) 可以实现高分辨三维成像^[2-4], 分辨率可达到微米甚至亚微米量级, 但是对于无序纳米材料、量子点和量子线、生物单细胞以及大分子量的蛋白等样品, 这样的分辨率还不能满足要求.

相干 X 射线衍射成像 (coherent X-ray diffractive imaging, 简记为 CXDI)^[5] 是一种新型衍射显微术, 近十年来发展非常迅速. 该方法不要求样品是结晶体, 同时成像分辨率高 (目前最好的分辨率可达到 5 nm 左右)^[6], 而且可以实现三维重建观察样品内部的结构信息. 早在 1952 年 Sayre^[7] 就提出了 CXDI 的设想, 并于 1980 年开始 CXDI 成像实验^[8], 但是没有得到样品的重建结果, Fienup 等^[9] 不断完善了相位重建算法, 直到 1999 年, 由 Miao 等^[10] 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建图像. 从此该领域取得快速发展, 在材料学和生物科学领域得到广泛应用^[11-16].

* 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.

† E-mail: tqxiao@sinap.ac.cn

本文主要完成了三方面的工作: 一是对相位重建算法的优化改进, 实现了边界约束条件的自动寻找, 得到了更为精确的重建结果; 二是系统地研究了衍射图样带有不同类型噪声的重建问题, 在传统降噪方法失效的情况下, 提出了适用于相干 X 射线衍射成像噪声滤除的有效方法; 三是利用三维相位重建方法, 结合改进算法及降噪方法, 模拟研究了纳米金颗粒电子密度分布的重建问题.

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, X 射线与物质内部核外电子发生相互作用, 使得 X 射线的波前受到调制而改变传播方向, 透过样品后 X 射线在远场区域遵循 Fraunhofer 衍射原理, 因此在像面上探测得到的图样是样品在入射 X 射线方向上投影的二维 Fourier 变换, 结合过采样理论采集这样的衍射图样分布, 然后将其代入相位重建算法, 重建丢失的相位信息就可以获得样品物空间的重建图像 (实质上是样品在入射 X 射线方向上投影的电子密度分布). 对于三维样品, 根据 Fourier 切片定理, 在像面上探测到的图样是样品三维 Fourier 变换的一张切片; 实验过程中旋转实验样品, 可以获得样品在不同角度下投影的 Fourier 变换, 分别对这一系列的衍射花样进行相位重建, 便能得到三维样品不同角度下的投影图; 再利用传统 CT 原理进行三维重建便可以恢复物空间样品的三维结构信息. 基本原理如图 1 所示.

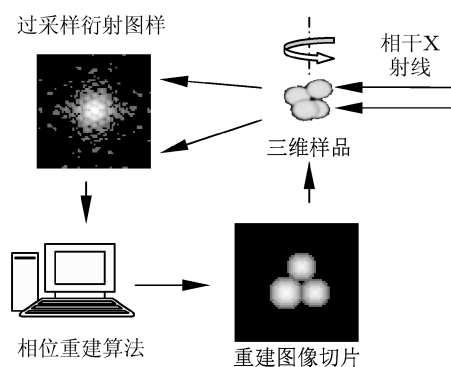


图1 相干 X 射线衍射成像原理示意图

2.2 相位重建算法

在物空间, 假定物质的电子密度函数为 $f(x, y)$, 其 Fourier 变换为

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

$\phi(u, v)$ 是 Fourier 频谱的相位分布函数. 在实验中, 只有衍射图样的强度可以被记录下来, 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. 如果想要通过衍射图样的强度信息恢复物空间的电子密度分布, 就必须借助相位重建算法重建丢失的相位信息, 进而重建物空间电子密度分布.

由采样定理可知, 只要在频域空间的采样间隔不大于物空间限带函数带宽的倒数, 就可以利用采集的频谱分布准确地重建原函数. 在物空间计算这样一个比例:

$$S = \text{总像素数目} / \text{未知像素数目}. \quad (2)$$

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为零, 边界以内是需要的求解的区域, 即未知像素区域. 如果这个边界满足了 $S > 2$ 便能够成功实现相位重建. 因此将过采样方法决定的比率 S 称为过采样比.

经过不断发展, 人们提出了多种不同的相位重建算法^[17-21], 本文主要介绍由 Fienup 提出的混合输入-输出算法 (hybrid input-output algorithm, 简记为 HIO)^[9]. 结合 (3)–(6) 式, FFT 表示快速 Fourier 变换, FFT^{-1} 表示快速 Fourier 逆变换, 迭代算法的初始输入为随机振幅估计 $g(x, y)$ 或者是随机相位估计 $\phi(u, v)$. 如果采取随机振幅估计 $g(x, y)$ 作为物空间初始输入, 接下来重复以下 4 个步骤: 1) 对这个物空间函数做 Fourier 变换, 对应 (3) 式; 2) Fourier 变换的结果得到一个新的复函数, 保持其相位部分不变, 其振幅部分用在 Fourier 空间所探测到的强度的平方根替换, 构成新的复函数, 对应 (4) 式; 3) 对上一步所得的复函数做 Fourier 逆变换, 对应 (5) 式; 4) 对于 Fourier 逆变换的结果施加物空间边界约束, 在边界以内的部分保持上一步运算

得到的结果, 边界以外的部分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, 以此组成新的物空间函数作为下一次迭代的输入, 对应 (6) 式.

$$\begin{aligned} G_j(u, v) &= |G_j(u, v)| \exp[i\phi_j(u, v)] \\ &= FFT[g_j(x, y)], \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} G'_j(u, v) &= |F(u, v)| \exp[i\phi_j(u, v)], \\ g'_j(x, y) &= |g'_j(x, y)| \exp[i\theta'_j(x, y)] \end{aligned} \quad (4)$$

$$= FFT^{-1}[G'_j(u, v)], \quad (5)$$

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

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 Fourier 频谱振幅分布, γ 表示物空间约束边界, (4) 和 (6) 式分别是 Fourier 频谱和物空间的边界约束条件, β 是 0 到 1 之间的某一常数, 本文的实验中设定为 0.95.

3 结果与分析

3.1 边界条件的自动寻找算法

由于输入 - 输出迭代算法需要事先知道物空间的边界信息, 而实验时不一定能够获得物空间信息, 同时通常情况下该方法迭代过程中的边界条件

为一个矩形框, 这样给定的约束条件比较“松”, 导致的结果可能是重建图像不够精确. 为了克服这样的困难, 本文结合 shrink-wrap 方法并做出相应的修正^[22], 利用物空间自相关函数作为较“松”的边界条件进行迭代初始输入, 前 200 次迭代均采用自相关函数作为其边界条件, 200 次之后改变具有对称性的自相关函数边界约束, 而使用输出的物空间重建结果结合一个 Gauss 卷积核计算得到边界, 迭代过程中每隔 20 次对 Gauss 卷积核进行一次收紧修正. 运用这种方法, 迭代过程中边界条件可以自动收紧, 最终得到一个精确的较“紧”的边界条件, 从而提高了重建结果的精确性. 如图 2(a) 是第一次迭代由物空间自相关函数计算得到的边界条件和相应的物空间初始输入, 前 200 次迭代均采用图 2(a) 左边的边界作为约束条件. 图 2(b), 2(c) 和 2(d) 分别是迭代次数为 200, 1000 和 3000 次的重建结果图. 可以看到, 当使用物空间重建结果计算得到的边界条件时, 边界的对称性被打破, 同时边界条件逐渐从杂乱趋向于物空间的真实边界, 变得越来越“紧”. 研究中发现, 虽然这种方法的重建结果也会产生随机平移, 但是由于该算法能够对边界进行自动修正, 边界约束条件也随着重建结果一起发生平移, 形成一个“紧”的动态边界约束, 因此保证了重建结果的完整性.

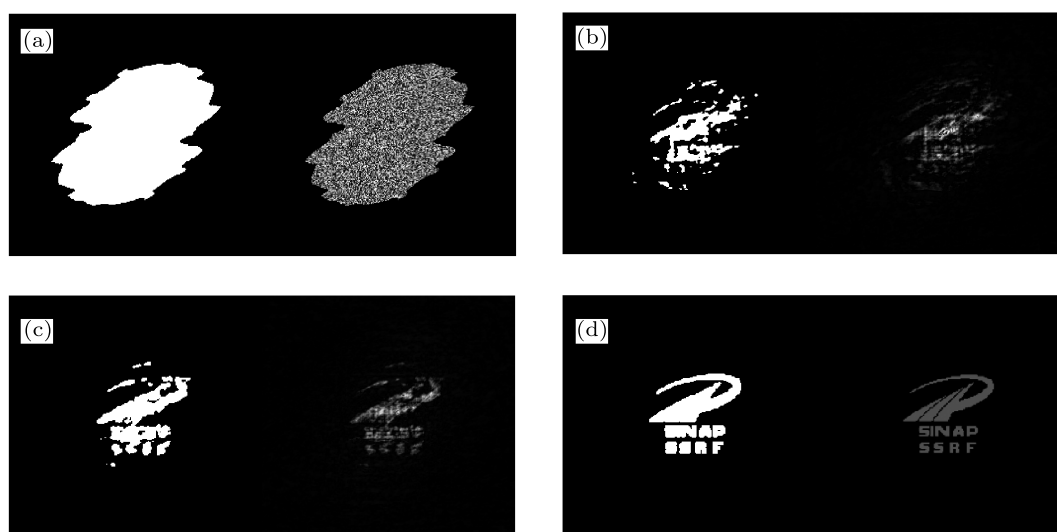


图 2 随着迭代次数的增加, 边界约束及对应的重建结果对比, 每幅子图的左边是边界约束, 右边是对应的重建结果 (a) 由物空间自相关产生的边界约束和物空间估计; (b), (c) 和 (d) 分别是迭代次数为 200, 1000 和 3000 次的结果

3.2 噪声影响的有效抑制

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, 无法从根本上消除, 所以在相干 X 射线衍射成像实验中, 采集得到的远场衍射图含有探测器的固有噪声, 这些噪声为衍射花样的主要噪声来源. 实际应用中这些噪声大体可以分为两类: 一类是在一定灰度值范围内具有随机分布特性的随机噪声, 另一类是具有随机脉冲分布特性的椒盐噪声. 因此本节主要研究如何对这两种噪声进行有效滤除, 以达到提高物空间重建效果的目的.

传统的降噪方法中, 对于随机噪声, 我们可以在采集完样品的衍射图之后, 再采集一幅相同时间的无光照背景图, 通过减背景抑制衍射图采样过程中的随机噪声; 对于具有脉冲特性的椒盐噪声, 通过对图像进行中值滤波, 达到消除椒盐噪声的目的. 然而模拟研究发现, 对于随机噪声, 只有在噪声比较低的情况下, 直接减背景进行降噪的方法才有效, 但是低噪声情况不做降噪处理直接进行相位重建, 仍然可以得到较好的结果. 如果是高噪声情况, 直接减背景降噪便得不到很好的降噪效果. 对于具有脉冲特性的椒盐噪声, 只适用于一般的图像处理, 不能直接应用于相干 X 射线衍射成像. 就相干 X 射线衍射成像而言, 衍射图样的数据要直接应用于物空间的相位重建, 当我们用传统降噪方法对整幅图像进行降噪的同时, 也破坏了衍射图样原有的频域结构, 尤其是高频细节信息丢失特别严重, 从而导致降噪之后的衍射图样无法成功地重建物空间信息. 本文通过改进传统降噪方法, 使不同类型的噪声得到了有效抑制, 很好地实现了带有噪声的相位重建. 以下的重建结果均经过了 1000 次迭代, 前 500 次采用传统 HIO 算法的固定边界约束条件, 后 500 次采用本文的边界自动寻找算法.

3.2.1 随机噪声的抑制

带有随机噪声的衍射图样, 用 HIO 算法直接进行重建可以成功重建出物场的图像, 但是重建图像的质量受到较大的影响, 重建图像中的细节信息丢失非常严重^[23]. 传统的降噪方法是采集一幅噪声强度大体相当的背景图像直接相减, 在信噪比较高的情况下, 降噪效果比较好, 但是在信噪比较低的情况下, 如本文信噪比 $SNR = 5$ 的高噪声情况, 直

接减去背景达不到理想的降噪目的. 如图 3 是不同噪声处理的效果对比图, 图 3(e) 是噪声以及两种降噪方法处理后衍射图样与信号之间的误差曲线对比. 从图中可以看出, 噪声较大的情况下, 直接减去背景降噪的方法不能达到理想的降噪目的, 减去背景均值的方法可以有效地降低噪声. 因此, 采用本文的降噪方法可以有效地提高抗噪能力.

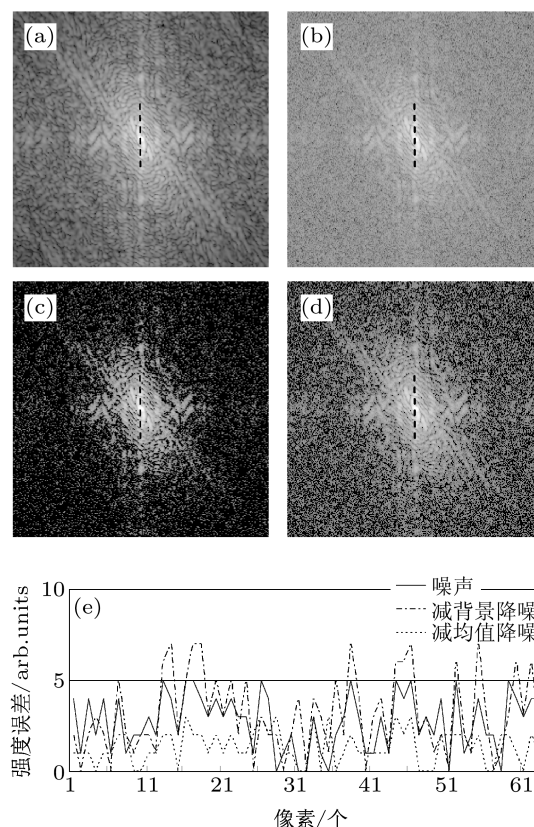


图 3 对随机噪声进行不同降噪处理的效果对比图 (a) 不含噪声的衍射图样; (b) 有随机噪声且信噪比 $SNR = 5$ 的衍射图样; (c), (d) 分别采用直接减去背景进行降噪和减去背景均值进行降噪的衍射图样; (e) 是 (b), (c) 和 (d) 中黑色虚线位置的强度值同 (a) 图中相应位置上强度真实值之间的误差曲线对比图. 图中 (a), (b), (c) 和 (d) 图是原始衍射图样求对数后的图像, (e) 图是原始衍射图样的强度误差曲线, 纵坐标“强度”表示衍射图样振幅平方

图 4(a) 是用于模拟实验的样品图像, 图 4(b) 是图 4(a) 中白色虚线位置的强度值分布, 图 4(c) 是直接减去背景进行降噪处理的重建结果, 图 4(d) 是与图 4(a) 中白色虚线位置相同的强度值分布, 从对比中可以看出, 降噪后的重建结果并不理想.

如果降噪修正时不是直接减去背景, 而是减去背景图像的均值, 这样降噪处理后的重建结果质量就有了很大提升. 图 4(e) 是采用减去背景图像的均

值的重建结果, 图 4(f) 是与图 4(a) 中白色虚线位置相同的强度值分布, 可以看出, 重建结果使随机噪声得到了有效抑制, 整幅物空间图像的轮廓及细节信息都得到了很好的恢复.

3.2.2 椒盐噪声的抑制

对于带有椒盐噪声的衍射图样, 传统的降噪方法是直接对整幅图像进行中值滤波, 这样的结果是, 噪声有效地得到了滤除, 但是衍射图样的数据结构也发生了改变, 某些有用信息尤其是频率细节信息丢失掉了, 这样导致降噪处理过后的衍射图样根本无法用于相位重建, 得不到正确的物空间重建图像.

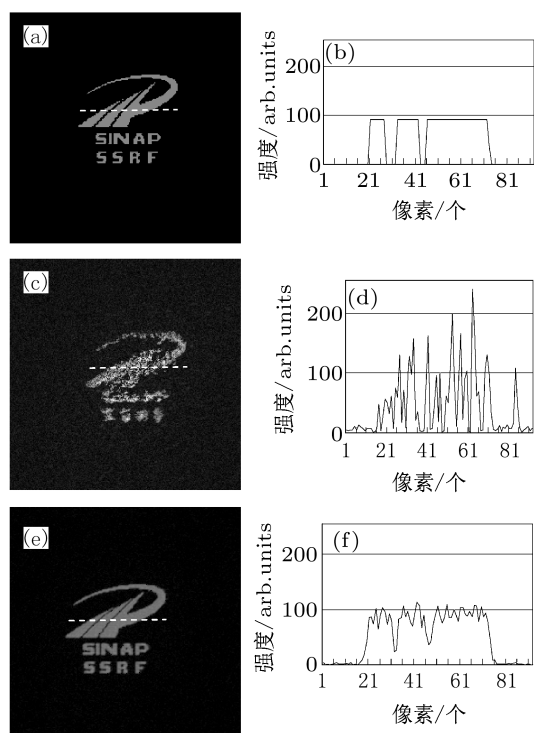


图 4 对随机噪声进行不同降噪处理, 迭代 1000 次之后得到的重建结果对比 (a) 作为样品的二维灰度值图像; (b) 是 (a) 图中白色虚线位置的强度值分布; (c) 采用直接减去背景进行噪声修正的重建结果; (e) 采用减去背景均值进行噪声修正的重建结果; (d) 和 (f) 分别是对应 (c), (e) 图中白色虚线位置的强度值分布

本文通过改进传统中值滤波算法, 增加了一个检测噪声点的步骤, 对于检测判断为噪声点的像素逐一单独进行中值滤波, 而非对整幅图像进行滤波, 判断为信号的像素不做任何处理. 图 5(a) 是一个 3×3 窗口, 被检测像素点 (i, j) 不在边缘的一般情况, 该像素点的灰度值为 $n(i, j)$. 由于

椒盐噪声具有脉冲特性, 噪声点的灰度值在 $[0, d]$ 或者 $[255 - d, 255]$ 范围, d 是可调值. 据此判断噪声点的过程是: 判断出灰度值 $n(i, j)$ 在 $[0, d]$ 或者 $[255 - d, 255]$ 范围的像素点, 然后再判断 (i, j) 临近 8 个像素点的灰度值范围, 记录包括 (i, j) 在内的 9 个像素点中灰度值在 $[0, d]$ 或者 $[255 - d, 255]$ 范围内的像素个数, 如果超过一定的数目, 我们便认为 (i, j) 点是噪声点, 灰度值 $n(i, j)$ 由 3×3 窗口中灰度值的中值取代, 对于被判断为信号点的像素不做任何处理. 图 5(b) 是添加了大量椒盐噪声的衍射图样, 运用上述方法去噪以后, 物空间重建图像如图 5(c) 所示. 图 5(d) 是与图 4(a) 中白色虚线位置相同的强度值分布. 可以看出, 用该方法进行去噪, 取得了非常好的效果.

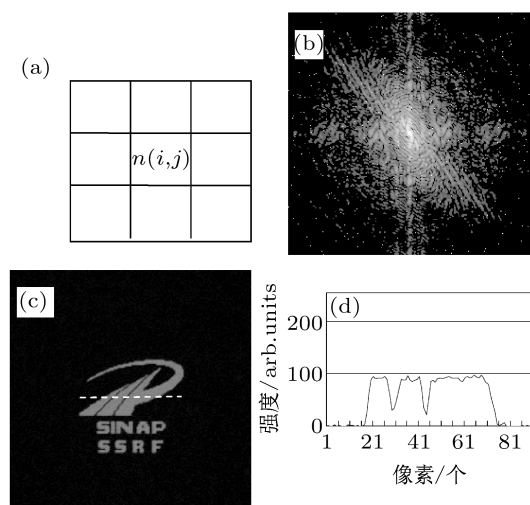


图 5 对大强度椒盐噪声进行降噪处理的结果图 (a) 是一个 3 像素 $\times 3$ 像素窗口, 被检测像素点 $n(i, j)$ 不在边缘的一般情况; (b) 加入噪声后的衍射图样, 原始衍射图样求对数后的图像; (c) 采用本文降噪方法进行处理后的重建结果, 迭代次数为 1000 次; (d) 对应图 (c) 中白色虚线位置的强度值分布

3.2.3 混合噪声的抑制

对于带有混合型噪声的衍射图样, 将上述两种方法结合起来进行降噪处理, 如图 6(a) 是被混合型噪声污染的衍射图样, 图 6(b) 是综合降噪后得到的重建图像, 图 6(c) 是与图 4(a) 中白色虚线位置相同的强度值分布. 可以看出上述两种改进的降噪方法可以对混合型噪声进行有效的抑制, 能够得到很好的物空间重建图像.

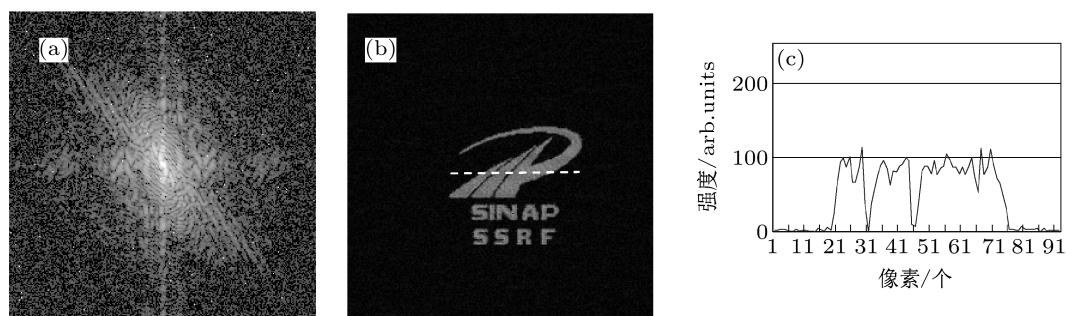


图6 对混合型噪声进行综合降噪处理的结果图 (a) 加入随机噪声和椒盐噪声后的衍射图样, 原始衍射图样求对数后的图像; (b) 综合两种降噪方法进行处理后的重建结果, 迭代次数为 1000 次; (c) 对应图 (b) 中白色虚线位置的强度值分布

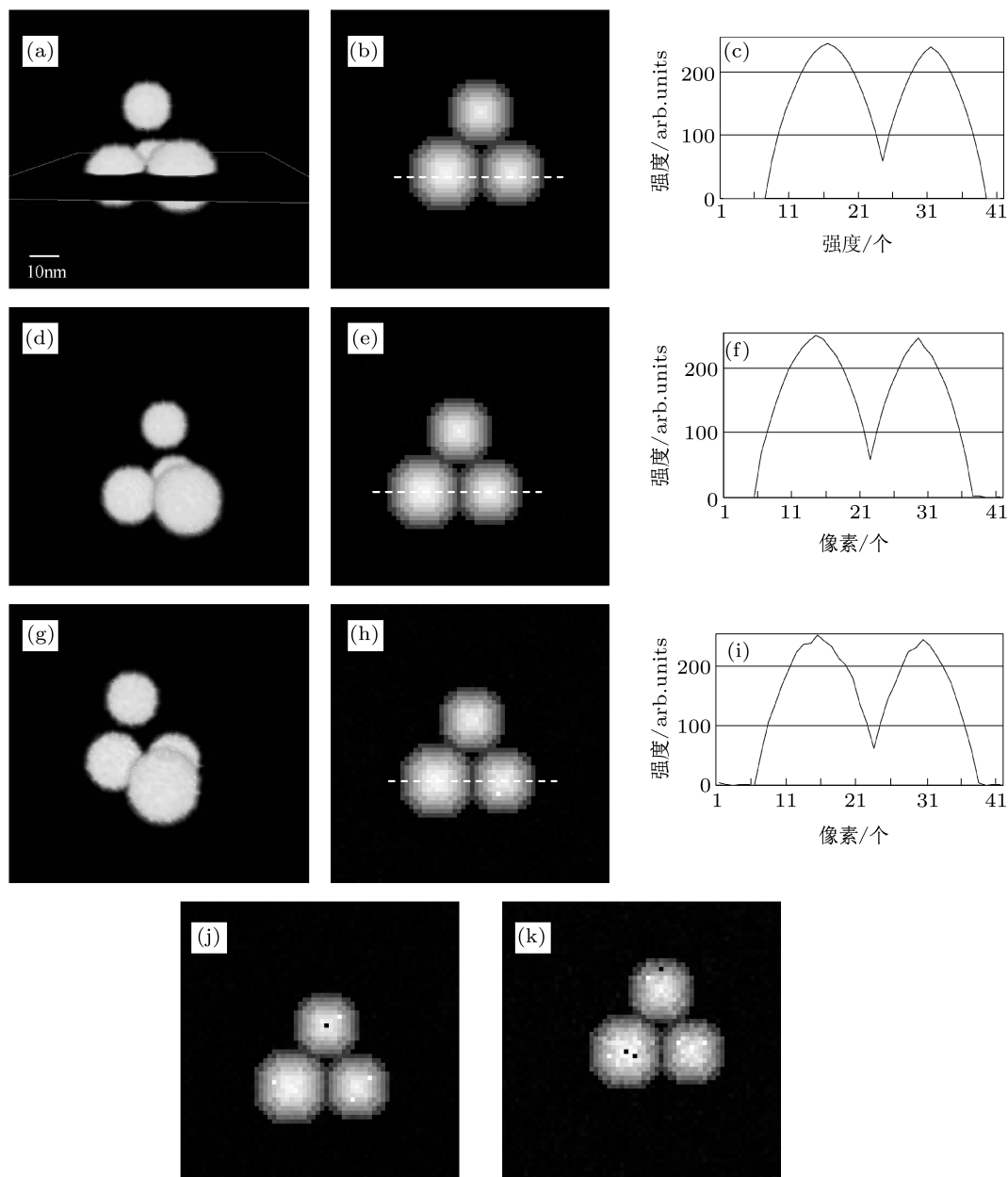


图7 纳米金颗粒的三维模拟重建 (a) 模拟四颗纳米金颗粒样品的三维显示图; (b) 是 (a) 图中框型平面所在的第 27 层切片图; (c) 是 (b) 中白色虚线位置的强度值分布; (d) 和 (g) 分别是无噪声和加入随机噪声并降噪处理的三维重建结果; (e) 和 (h) 分别是图 (d) 和 (g) 中第 27 层切片图; (f) 和 (i) 分别是对应图 (e) 和 (h) 中白色虚线位置的强度值分布, 信噪比 $SNR = 27$; (j) 和 (k) 分别是信噪比 $SNR = 26$ 和 20 重建结果中的切片图. (c), (f) 和 (i) 图中纵坐标“强度”代表投影电子密度

3.3 三维重建模拟

目前用于相干 X 射线衍射成像三维重建的方法主要有三种: 一种是旋转样品, 采集样品不同角度的衍射图样并分别经过二维相位重建, 将重建结果作为不同角度的投影图进行 CT 重建, 由得到的重建切片最终实现样品的三维重建^[24]; 第二种是采集到样品不同角度的衍射图样之后, 根据 Fourier 切片定理, 将不同角度的二维衍射图插值到三维空间, 运用三维情况的相位重建算法直接进行三维重建^[12,25]; 第三种是最近由 Miao 等^[26]刚刚提出的单次曝光三维重建的新方法. 这三种方法当中, 前两种运用比较广泛, 本文三维重建模拟采用第二种方法, 采集样品的三维 Fourier 变换运用三维情况的 HIO 算法直接进行重建.

图 7(a) 是模拟实验的金颗粒样品, 粒径在 15—20 nm 之间; 每个像素定义为 1 nm; 整个三维模拟空间的大小定义 $64 \times 64 \times 64$ 像素. 图 7(b) 是图 7(a) 中平面所在位置的第 27 层切片图, 图 7(c) 是图 7(b) 中白色虚线位置的强度值分布. 连续的强度分布代表纳米金颗粒中投影电子密度的分布情况, 在金颗粒中心厚度最大, 投影电子密度最高, 边缘处投影电子密度最低, 没有金颗粒的区域投影电子密度为零. 实验中采集图 7(a) 中样品的远场衍射图样, 过采样比为 5.6, 将只有强度信息的衍射图样代入相位重建算法, 重建结果如图 7(d) 和图 7(g) 所示. 图 7(d) 是衍射图样中没有噪声情况下的重建结果, 图 7(e) 是重建结果中第 27 层切片图, 图 7(f) 是图 7(e) 中白色虚线位置相同的强度值分布. 图 7(g), 7(h), 7(i) 是衍射图样中加入信噪比 $SNR = 27$ 的随机噪声后得到的重建结果. 从重建结果的切片图及其相同位置的投影电子密度强度值分布中可以看出, 在不带噪声的情况下, 金颗粒的投影电子密度分布可以得到比较完美的重建, 在有噪声的情况下, 重建的投影电子密度虽然有一定的误差, 但仍

可以得到很好的重建.

对衍射图样带有噪声的重建过程中发现, 当加入的噪声过大, 信噪比 $SNR < 27$ 的情况下, 虽然可以得到重建结果, 但是结果中有一部分切片出现了“坏点”, 即有一部分像素重建后的强度值与周围相差很大, 显然不是正确的重建结果. 这些“坏点”的出现带有很大的随机性, 不同的重建过程会出现在不同的位置, 如图 7(j) 和 7(k) 分别是信噪比 $SNR = 26$ 和 20 重建结果中的切片图, 图中的某些像素点不能代表正确的重建信息. 因此对于三维重建的情况, 想要得到正确的重建结果, 要求采集衍射图样的信噪比不得低于 27. 对于“坏点”, 可以通过对重建结果进行后续处理予以消除, 但是这样得到的结果并没有从根本上提高重建结果的质量, 因为重建算法本身没有得到优化. 在三维重建情况下, 尤其在实验过程中, 如何提高算法本身抗噪能力以更加有效地降低噪声影响, 还需要综合考虑光源相干性, 光子通量密度等很多重要因素, 因此今后还需要做更进一步的深入研究.

4 结 论

采用数字模拟的方法, 研究并实现了边界条件的自动寻找算法, 优化了以往的相位重建算法, 得到了更好的重建结果. 对于衍射图样中带有不同噪声类型的重建问题, 在传统的去噪方法效果不好的情况下, 找到了适用于相干 X 射线衍射成像噪声滤除的有效方法, 降噪后的重建结果显示新的降噪方法能非常有效地降低噪声对重建结果的影响. 对于三维重建问题, 利用模拟的三维纳米金颗粒作为样品, 模拟了纳米金颗粒中投影电子密度分布, 实现了投影电子密度分布的三维重建, 在带有随机噪声的影响下, 也得到了较好的重建结果. 同时找到了为成功实现三维重建衍射图样的噪声限, 为下一步相干 X 射线衍射成像实验提供了理论依据.

- [1] 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]
- [2] 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]

- [3] 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]
- [4] 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]
- [5] Marchesini S, Chapman H N, Hau-Riege S P, London R A, Szoke A 2003 *Opt. Express* **11** 2344
- [6] Schroer C G, Boye P, Feldkamp M J, Patommel J, Schropp A, Schwab A, Stephan S, Burghammer, Schöder S, Riekel C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 090801
- [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, 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, Kjoerratanawanich B, Gullikson E, Plönjes E, Toleikis S, Tschentscher T 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 145502
- [16] Chapman H N, Nugent K A 2010 *Nature Photon* **4** 833
- [17] Gerchberg R W, Saxton W O 1972 *Optik* **35** 237
- [18] Abrahams J P, Leslie A W G 1996 *Acta Crystallogr.* **D52** 30
- [19] Elser V 2003 *J. Opt. Soc. Am. A* **20** 40
- [20] Luke D R 2005 *Inverse Probl.* **21** 37
- [21] Chen C C, Miao J W, Wang C W, Lee T K 2007 *Phys. Rev. B* **76** 064113
- [22] Marchesini S, He H, Chapman H N, Hau-Riege S P, Noy A, Howells M R, Weierstall U, Spence J C H 2003 *Phys. Rev. B* **68** 140101
- [23] 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]
- [24] Jiang H D, Song C Y, Chen C C, Xu R, Raines K S, Benjamin P F, Lu C H, Lee T K, Nakashima A, Urano J, Ishikawa T, Tamanoi F, Miao J W 2010 *PNAS* **107** 11234
- [25] Barty A, Marchesini S, Chapman H N, Cui C, Howells M R, Shapiro D A, Minor A M, Spence J C H, Weierstall U, Ilavsky J, Noy A, Hau-Riege S P, Artyukhin A B, Baumann T, Willey T, Stolken J 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 055501
- [26] 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

Digital simulation for 3D reconstruction of coherent x-ray diffractive imaging*

Zhou Guang-Zhao¹⁾²⁾ Wang Yu-Dan¹⁾²⁾ Ren Yu-Qi¹⁾²⁾ Chen Can¹⁾²⁾
Ye Lin-Lin¹⁾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 10 January 2011; revised manuscript received 18 March 2011)

Abstract

In coherent x-ray diffractive imaging, the oversampled far-field diffraction pattern for phase retrieval iterative algorithm is used in order to reconstruct the information about the real space. The support constraint is one of the most important steps of the 3D phase retrieval process. Here we use a small nonperiodic 2D digital image as an object for studying the algorithm of pursuing support constraint automatically and noise correction for different types of noises in the diffraction pattern. We find an efficient method of noise correction while the traditional methods do not work well in the high noise condition. The result shows that this method can be used to reduce the effect effectively for the reconstruction. We also study the 3D reconstruction for the electron density distribution of Au nano-particles. We achieve a good reconstruction separately with and without noise effect in the diffraction pattern and we find that the signal-to-noise ratio should be bigger than 27 for successful 3D reconstruction.

Keywords: coherent x-ray diffractive imaging, oversampling, 3D phase retrieval, microscopy

PACS: 87.59.—e, 42.30.Rx, 87.59.bf, 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, China (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).

† E-mail: txiao@sinap.ac.cn