

探测器光电特性对叠层相干衍射成像的影响

齐乃杰¹⁾²⁾ 何小亮¹⁾ 吴丽青¹⁾²⁾ 刘诚^{1)2)†} 朱健强¹⁾²⁾¹⁾ (中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)²⁾ (中国科学院大学, 北京 100049)

(2023 年 4 月 14 日收到; 2023 年 5 月 31 日收到修改稿)

从叠层相干衍射成像的解析求解模型出发, 通过在频域中将叠层相干衍射成像描述为待测样品与照明光空间频谱的线性方程组, 将探测器的光电参数和线性方程组的个数以及每个方程的未知数个数直接关联. 根据方程组存在唯一解的条件, 从理论上定量分析叠层相干衍射成像对探测器采样间隔、靶面宽度、像元尺寸、灵敏度和动态范围等关键光电参数的要求以及图像重建所受影响. 通过数值模拟, 对理论分析和预测的正确性进行了数值验证, 得出了参数不理想情况下叠层相干衍射成像仍能获得高质量重建像的物理机制, 对于提高重建质量和改进实验装置具有直接促进意义.

关键词: 探测器光电特性, 相位恢复, 相干衍射成像, 叠层相干衍射成像**PACS:** 42.25.Fx, 42.25.Kb, 42.30.Rx, 42.79.Pw**DOI:** 10.7498/aps.72.20230603

1 引言

在可见光波段, 单个显微成像镜头的分辨率已经非常接近衍射极限, 共聚焦扫描、非线性光学成像和结构光照明成像等各种高性能成像方法, 已经突破了传统全场成像的 $1/2$ 衍射极限分辨率限制, 并在生物医学和材料科学等领域取得了广泛应用^[1-3]. 但在 X-射线和电子束等短波长成像领域, 由于可制作成像器件材料的缺乏或加工难度过大等因素, 成像器件的性能远没有光学波段的那样理想, 即使是光学波段最常见的高性能反射镜, 都很难在短波长领域实现^[4]. X-射线领域最常用的成像元件一直是波带片, 由于成像时需要遮挡住多余的衍射级次, 容易对射线通量造成较大浪费, 而且由于金属波带片边缘处的沟槽结构需要极小的宽深比, 加工难度很大^[5,6]. 在电子束成像领域, 透射电子显微镜和扫描电子显微镜为一直采用磁透镜作为主要成像元件^[7], 受制于磁透镜的严重球差, 最多仅能达到亚纳米量

级的空间分辨率, 比电子束亚埃量级的波长至少低一个数量级. 为规避短波长成像领域高性能光学元件缺乏的难题, Gerchberg 和 Saxton^[8] 在 1972 年提出被称为 G-S (Gerchberg-Saxton) 算法的相位恢复成像技术, 在垂直于光轴的两个间隔一定距离的平面上记录下两幅光场强度, 并用迭代计算重建出样品透射光的强度和相位. Fienup^[9] 在 1982 年对 G-S 算法进行改进并提出 ER (error-reduction) 算法和 HIO (hybrid input output) 算法, 克服了 G-S 算法需要在两个平面上记录数据的不足. 这 3 种方法一般被称为经典相干衍射成像 (CDI) 算法, 它们的成像系统不需要透镜等高性能光学元件, 能从样品的衍射光斑强度直接迭代计算出包含振幅和相位的复振幅像, 且理论上可以获得达到衍射极限的空间分辨率, 因此一直受到科研人员的高度重视, 各国的同步辐射装置一般都设有专门的线站对其开展研究和应用^[10-12]. 经典 CDI 算法具有成像系统简单和使用方便等优点, 但是一般要求有空域或者衍射强度的约束, 并且当待测物体的结

† 通信作者. E-mail: chengliu@siom.ac.cn

构比较复杂时,容易出现收敛速度慢、信噪比低和孪生像重叠等现象^[13]. 为克服经典 CDI 算法的缺点, 2004 年 Rodenburg 和 Faulkner^[14,15] 提出 PIE (ptychographic iterative engine) 成像技术, 国内一般称其为叠层相干衍射成像 (或者扫描叠层衍射成像). PIE 成像是将样品在垂直于光轴的方向做阵列扫描, 并用电荷耦合器件 (charge-coupled device, CCD) 记录下待测物体在每个位置处所形成的衍射光斑强度, 然后利用相应的重建算法, 高精度快速地同时计算出照明光和样品的复振幅分布, 能够克服经典 CDI 算法的大部分缺点. PIE 成像的最突出特点是将传统相干衍射成像和扫描成像技术相结合, 因此能以衍射极限的分辨率实现超大视场的高精度成像^[16–19]. 而且, 由于 PIE 在成像过程中往往记录数百幅衍射光斑, 因此具有较高的数据冗余度, 可在照明光无法预知、光源相干性不理想、扫描位置不准确和系统存在振动等条件下仍然获得高精度重建像, 并已经在新材料研发、生物医学观测、应力分布检测、光学元件检测和激光装置监测等领域获得了诸多应用^[20–24].

到目前为止, PIE 成像不但已在电子束、X-射线、可见光和太赫兹波段实现并获得了大量应用^[25–28], 还通过与超快测量技术、结构光照明技术、单像素探测技术、压缩感知技术和深度学习技术相结合, 发展出了诸多成像和测量新方法^[29–33], 是成像领域的一个国际研究热点. 与其他成像手段相似, 分辨率是分析各种 PIE 成像技术性能优劣的最重要参数. 由于样品和探测器之间不存在其他光学元件, 没有传统成像中的各种像差和滤波效应, 决定 PIE 成像分辨率的最直接因素是探测器所记录数据的精度、采样间隔和数据量等, 这些参数直接与探测器的动态范围、像素大小和芯片尺寸等光电参数一一对应. 长期以来, 由于没有数学公式或者数学模型能直接从 PIE 所记录的衍射强度中解出样品的复振幅分布, 导致难以定量研究探测器的各种光电参数对 PIE 重建分辨率的影响. 即便是“相干衍射成像能够实现衍射极限的分辨率”这个被大家普遍接受的论断, 也仅仅是根据透射光能够不受任何限制地传播到探测器上这一事实所得出的定性推论, 并没有得到从底层数学层面出发的定量论证. 定量理论分析手段的缺乏也导致无法对实验结果进行误差分析, 造成 PIE 大多只能用于成像观测而很难用于测量或者计量的被动局面. 为解决此

问题, 本文在空间频域分析 PIE 衍射光斑强度和物体及照明光频谱的数学关系, 得到由照明光频谱、样品频谱和所记录衍射光斑强度组成的线性方程组^[34], 从而将 PIE 的迭代重建过程简化为线性方程组的求解过程, 并在此基础上定量分析出探测器像素尺寸、采样间隔、动态范围和像素数目等对重建像分辨率的影响, 为 PIE 成像的技术进步和性能的定量分析提供了必要研究手段.

2 PIE 成像原理和解析求解模型

2.1 成像原理

PIE 成像方法结合了 ptychography 基本思想和 CDI 算法的优点, 其将待测样品相对固定照明光束做横向扫描运动的同时记录多幅衍射光斑, 并用迭代算法重建待测样品复振幅^[35,36]. 典型的 PIE 成像光路如图 1 所示, 样品相对光束横向扫描时, 相邻两个被照明区域有部分重叠, 从而大幅度提升重建收敛速度和重建精度. 由于没有其他光学元件限制光束的接收角, 理论上 PIE 成像可以实现衍射极限的空间分辨率, 而且由于横向扫描次数不受限制, 可以实现高分辨和大视场成像.

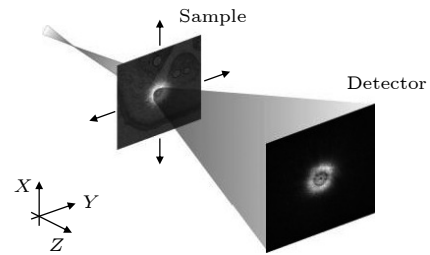


图 1 PIE 成像的示意图

Fig. 1. Diagram of the setup for PIE.

PIE 的重建过程按照如下步骤实现:

步骤 1 设置待重建测量样品的复振幅分布为随机的初始分布 $O(x, y)$;

步骤 2 对于照明光场 $P(x, y)$, 样品透射光的复振幅为 $\psi(x, y) = P(x, y) O(x - m\Delta_l, y - n\Delta_l)$, 利用菲涅耳衍射公式可以计算出透射光 $\psi(x, y)$ 在探测器平面形成的光场

$$U(x, y) = \mathcal{F}_{\text{res}}[\psi(x, y)] = |U(x, y)| e^{i\varphi(x, y)}, \quad (1)$$

其中, m 和 n 分别代表第 (m, n) 个扫描位置, Δ_l 代表扫描间隔, \mathcal{F}_{res} 表示菲涅耳衍射;

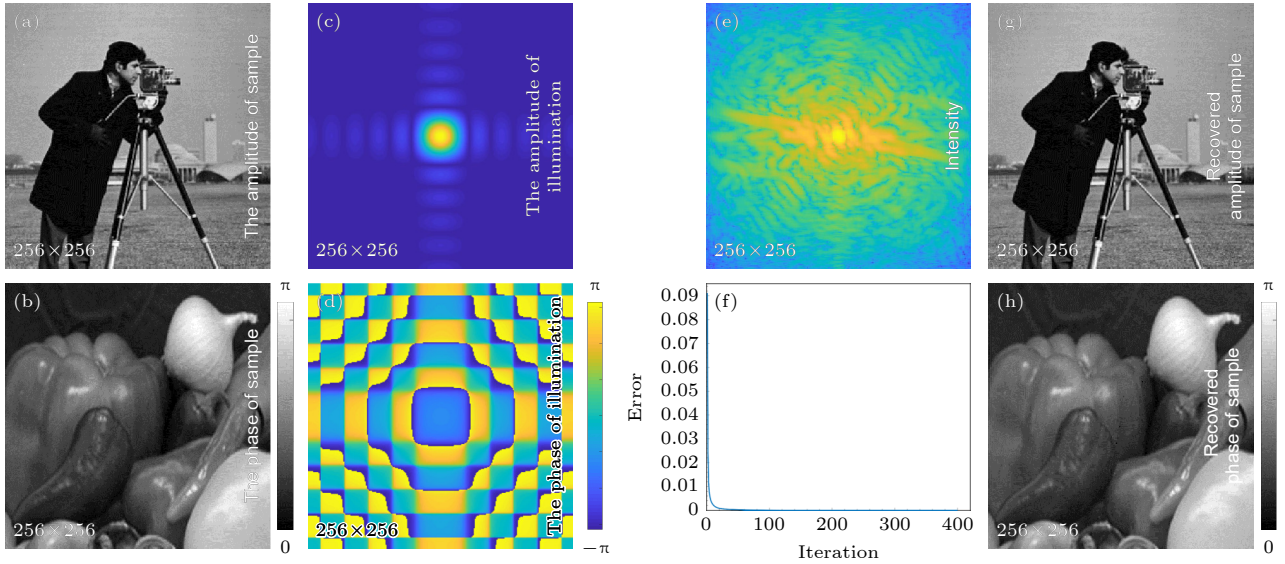


图2 待测样品的 (a) 振幅和 (b) 相位分布; 照明光的 (c) 振幅和 (d) 相位分布; (e) 所记录的其中一个衍射光斑强度图; (f) 重建迭代收敛曲线; 重建样品的 (g) 振幅和 (h) 相位分布

Fig. 2. (a) Amplitude and (b) phase of sample; (c) amplitude and (d) phase of illumination; (e) one of recorded diffraction patterns; (f) iterative convergence curve of reconstruction; (g) amplitude and (h) phase of recovered sample.

步骤3 用实际记录的第 (m, n) 幅衍射光斑 $I_{mn}(x, y)$ 的平方根代替 $|U(x, y)|$, 并保持相位 $\varphi(x, y)$ 不变, 得到更新后衍射光场

$$U'(x, y) = \sqrt{I_{mn}(x, y)} e^{i\varphi(x, y)}; \quad (2)$$

步骤4 将更新后的 $U'(x, y)$ 逆向传播到样品平面, 得到新的样品出射波 $\psi'(x, y)$:

$$\psi'(x, y) = \mathcal{F}_{\text{res}}^{-1} [U'(x, y)]; \quad (3)$$

步骤5 利用 (4) 式对待测样品分布 $O(x, y)$ 进行更新:

$$O'(x, y) = O(x, y) + \frac{|P(x, y)|}{|P(x, y)|_{\max}} \frac{P^*(x, y)}{|P(x, y)|^2 + \alpha} \times [\psi'(x, y) - \psi(x, y)], \quad (4)$$

其中, 上标“*”表示共轭; α 为避免计算中出现分母为 0, 一般取 0—1 之间的一个常数;

步骤6 所有的扫描位置重复上述步骤 2—步骤 5 后, 计算误差 $\text{SSE} = \|U\|^2 - I_{mn}(x, y) / N_p$, I_{mn} 表示第 (m, n) 个扫描位置记录的衍射光斑, N_p 为矩阵的像素个数. 若 SSE 的数值足够小, 则停止运算并将计算得到的 $O(x, y)$ 作为待成像样品的复振幅; 否则, 从第一个扫描位置再次执行步骤 2—步骤 5, 开始新一轮迭代计算.

图 2 是一个 PIE 记录数据和重建的模拟结果, 其中图 2(a) 和图 2(b) 分别为待测样品的振幅和相位分布, 图 2(c) 和图 2(d) 分别为照明光的振幅和

相位分布. 在数值模拟计算中, 假定照明光波长为 $0.6 \mu\text{m}$, 样品和 CCD 间距离为 $5 \times 10^4 \mu\text{m}$, 样品和照明光均用 256×256 的数组表示, 且每个数组元素相当于 $10 \mu\text{m}$. 为了计算方便, 假定照明光束是直径 60 像素的汇聚高斯光束, 且汇聚点在 CCD 靶面上. 样品相对于照明光横向扫描的步长为 8 个像素, 共扫描 23×23 个位置, 相邻扫描过程的面积重叠率约为 87%. 图 2(e) 和图 2(f) 分别为所记录的其中一个衍射光斑强度图和 PIE 重建迭代收敛曲线图. 图 2(g) 和图 2(h) 分别为按照上述重建步骤迭代 400 次所得到的振幅和相位像, 将其和原始样品比较可以发现, 二者基本相同. 在 PIE 的重建数值计算中, 由于模拟计算中探测器的光电参数是完全理想的, 所以经过 400 次循环后, 残余误差就可以降低到了 0.1%. 然而在实际的操作中, 所使用探测器的光电参数并非是完全理想的参数. 因此, 本文将使用与此 PIE 数值模拟中相同的样品和光学参数, 以研究光电探测器的相关特征参数对图像重建质量的影响.

2.2 解析求解模型

若设定照明光和样品的复振幅分别为 $P(x_0, y_0)$ 和 $O(x_0, y_0)$, 根据菲涅耳衍射公式, 距离物体轴向距离为 z 的探测器平面上的衍射光场可以表示为

$$U(x, y) = \frac{\exp(ikz)}{i\lambda z} \exp\left[ik\left(\frac{x^2 + y^2}{2z}\right)\right] \iint P(x_0, y_0) O(x_0, y_0) \times \exp\left[ik\left(\frac{x_0^2 + y_0^2}{2z}\right)\right] \exp\left[-ik\left(\frac{xx_0 + yy_0}{z}\right)\right] dx_0 dy_0, \quad (5)$$

其中, λ 为照明光的波长, k 为波数 ($k = 2\pi/\lambda$).

若定义 $P'(x_0, y_0) = P(x_0, y_0) \exp\left[ik\left(\frac{x_0^2 + y_0^2}{2z}\right)\right]$, 则 $U(x, y)$ 可被写为

$$U(x, y) = \frac{\exp(ikz)}{i\lambda z} \exp\left[ik\left(\frac{x^2 + y^2}{2z}\right)\right] \iint O(x_0, y_0) P'(x_0, y_0) \exp\left[-ik\left(\frac{xx_0 + yy_0}{z}\right)\right] dx_0 dy_0. \quad (6)$$

将 $x/(\lambda z)$ 和 $y/(\lambda z)$ 分别写为 f_x 和 f_y , 则 (6) 式可以改写为

$$U(\lambda z f_x, \lambda z f_y) = \frac{\exp(ikz)}{i\lambda z} \exp[i\lambda z \pi (f_x^2 + f_y^2)] \iint O(x_0, y_0) P'(x_0, y_0) \exp[-i2\pi (f_x x_0 + f_y y_0)] dx_0 dy_0, \quad (7)$$

即

$$U(\lambda z f_x, \lambda z f_y) = \frac{\exp(ikz)}{i\lambda z} \exp[i\lambda z \pi (f_x^2 + f_y^2)] [\tilde{P}'(f_x, f_y) \otimes \tilde{O}(f_x, f_y)], \quad (8)$$

其中, \otimes 为卷积符号. 因此, 探测器上的光强分布可以表示为

$$I(\lambda z f_x, \lambda z f_y) = [\tilde{P}'(f_x, f_y) \otimes \tilde{O}(f_x, f_y)] \cdot [\tilde{P}'(f_x, f_y) \otimes \tilde{O}(f_x, f_y)]^*. \quad (9)$$

由于探测器上的像是分立的, 假设像元大小是 $\Delta \times \Delta$ 则第 (i, j) 像元上的强度为

$$I(i\Delta, j\Delta) = \left[\sum_{m,n} \tilde{P}'\left(-f_m + \frac{i\Delta}{\lambda z}, -f_n + \frac{j\Delta}{\lambda z}\right) \tilde{O}(f_m, f_n) \right] \left[\sum_{k,l} \tilde{P}'^*\left(-f_k + \frac{i\Delta}{\lambda z}, -f_l + \frac{j\Delta}{\lambda z}\right) \tilde{O}^*(f_k, f_l) \right] \\ = \sum_{m,n} \sum_{k,l} \tilde{P}'\left(-f_m + \frac{j\Delta}{\lambda z}, -f_n + \frac{j\Delta}{\lambda z}\right) \tilde{P}'^*\left(-f_k + \frac{j\Delta}{\lambda z}, -f_l + \frac{j\Delta}{\lambda z}\right) \tilde{O}(f_m, f_n) \tilde{O}^*(f_k, f_l), \quad (10)$$

其中, (i, j) 为探测器平面上的整数点, 下标 “ m, n, k, l ” 为频域中的像素位置, 并且 $[m, n, k, l] \in (1, 2, 3, \dots)$.

在标准 PIE 成像中, 照明光 $P(x, y)$ 是已知的, 因此 (10) 式中

$$\tilde{P}'\left(-f_m + \frac{j\Delta}{\lambda z}, -f_n + \frac{j\Delta}{\lambda z}\right) \times \tilde{P}'^*\left(-f_k + \frac{j\Delta}{\lambda z}, -f_l + \frac{j\Delta}{\lambda z}\right)$$

也是已知. 假设系数

$$A = \tilde{P}'\left(-f_m + \frac{j\Delta}{\lambda z}, -f_n + \frac{j\Delta}{\lambda z}\right) \times \tilde{P}'^*\left(-f_k + \frac{j\Delta}{\lambda z}, -f_l + \frac{j\Delta}{\lambda z}\right),$$

未知数 $X = \tilde{O}(f_m, f_n) \tilde{O}^*(f_k, f_l)$, 衍射光斑的强度 $B = I(i\Delta, j\Delta)$, 则 (10) 式可以简化成 $AX = B$ 的线性方程. 当物体相对平移照明光距离 δ_{xH} 和

δ_{yH} 到第 H 位置时, 则系数会变为

$$A_H = \tilde{P}'\left(-f_m + \frac{j\Delta}{\lambda z}, -f_n + \frac{j\Delta}{\lambda z}\right) \times \tilde{P}'^*\left(-f_k + \frac{j\Delta}{\lambda z}, -f_l + \frac{j\Delta}{\lambda z}\right) \times \exp\{-i[(f_m - f_k)\delta_{xH} + (f_k - f_l)\delta_{yH}]\},$$

由于在每个扫描位置都会有一个线性方程组, 扫描所有位置就可以得到一个大的线性方程组

$$\begin{cases} A_0 X = B_0, \\ A_1 X = B_1, \\ A_2 X = B_2, \\ \vdots \\ A_H X = B_H. \end{cases} \quad (11)$$

在经典相干衍射成像中, (11) 式仅仅包含其中的一个方程组, 由于方程数量有限, 很难保证线性无关方程个数大于未知数 $\tilde{O}(f_m, f_n) \tilde{O}^*(f_k, f_l)$ 的

个数, 因此收敛速度和重建精度不理想. 而基于 PIE 原理的方法, (11) 式中线性方程组的个数会随着扫描位置的增加而相应增加. 因此, 只要扫描位置足够多, 就可以确保线性无关方程的个数大于未知数 $\tilde{O}(f_m, f_n) \tilde{O}^*(f_k, f_l)$ 的个数, 从而确保解出全部的 $\tilde{O}(f_m, f_n) \tilde{O}^*(f_k, f_l)$, 这是 PIE 成像所有优点的来源. 解出全部的 $\tilde{O}(f_m, f_n) \tilde{O}^*(f_k, f_l)$ 后, 将全部 $k = k_0$ 和 $l = l_0$ 的项选取出, 组成向量 $\mathbf{X}_1 = \tilde{O}(f_m, f_n) \tilde{O}^*(f_{k_0}, f_{l_0}) |_{m=1,2,\dots,M;n=1,2,\dots,N}$, 对 \mathbf{X}_1 做傅里叶逆变换, 即可得到 $\mathbf{O}'(x_0, y_0) = \tilde{O}^*(f_{k_0}, f_{l_0}) \mathbf{O}(x_0, y_0)$. 由于 $\mathbf{O}'(x_0, y_0)$ 和 $\mathbf{O}(x_0, y_0)$ 只相差一个常数 $\tilde{O}^*(f_{k_0}, f_{l_0})$, 因此, $\mathbf{O}'(x_0, y_0)$ 就是原物体 $\mathbf{O}(x_0, y_0)$ 的像.

3 探测器光电参数的影响

方程 (10) 中各个线性方程的形成过程, 可以用图 3 中的卷积运算说明. 其中 $\tilde{\mathbf{P}}'(f_x, f_y)$ 用一个频谱宽度为 $W_{\tilde{\mathbf{P}}'}$ 的 3×3 的数组表示, $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 用一个频谱宽度为 $W_{\tilde{\mathbf{O}}}$ 的 9×9 的数组表示, 探测器平面上的光场 $\mathbf{U}(\lambda z f_x, \lambda z f_y)$ 是 $\tilde{\mathbf{P}}'(f_x, f_y)$ 和 $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 的卷积, 它是一个 11×11 的数组. 因此, 探测器第 (i, j) 像元上的复振幅 $\mathbf{U}(\lambda z f_x, \lambda z f_y)$ 可以表示为 $\tilde{\mathbf{P}}'(f_x, f_y)$ 相对 $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 在水平方向错开 i 个单元和在竖直方向错开 j 个单元后相乘并相加的结果. 由于 $\tilde{\mathbf{P}}'(f_x, f_y)$ 是一个 3×3 的数组, $\mathbf{U}(i, j)$ 包含 $\tilde{\mathbf{O}}(i \pm 1, j \pm 1)$, $\tilde{\mathbf{O}}(i, j \pm 1)$, $\tilde{\mathbf{O}}(i \pm 1, j)$ 和 $\tilde{\mathbf{O}}(i, j)$ 共 9 个数组元素的信息, $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 的这 9×9 数组元素的信息全部包含在 $\mathbf{U}(i, j)$ 内, 通过将物体相对照明光束平移使 $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 获得不同的相位因子, 得到 (11) 式中的超大线性方程组, 并用其解出所有

$\tilde{\mathbf{O}}'(f_x, f_y)$ 的值, 然后做傅里叶逆变换得到 $\mathbf{O}'(x_0, y_0)$ 的分布. 需要说明的是, 探测器的采样间隔、单个像元尺寸、动态范围和灵敏度等都会影响上述衍射光斑的记录过程, 并因此改变 (11) 式中方程的个数和系数, 从而影响图像重建精度和速度.

3.1 探测器采样间隔

如果探测器平面上的采样间隔 (像素间隔) 增加为图 3 中所示的 3 倍, 则探测器像元的数量由图 3 中的 121 个减小到图 4 中的 9 个. 9 个像元分别与图 4 中 $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 上代表 $\tilde{\mathbf{P}}'(f_x, f_y)$ 位置的 9 个红色方框相对应, 所有的 $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 数组元素值刚好全部被包含到 9 个 $\mathbf{U}(\lambda z f_x, \lambda z f_y)$ 采样点中, 理论上只要增加足够多的物体相对于照明光的扫描位置, 则仍可使得 (11) 式包含足够多的线性方程, 从而解出 $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 数组的全部元素值. 如果采样间隔继续增大, 则图 4 中的 9 个红色方框之间将出现间隙, 间隙内的 $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 数组元素将不会出现在被记录数据 $|\mathbf{U}(\lambda z f_x, \lambda z f_y)|^2$ 中, 且无论 (11) 式包含多少个线性方程, 都无法解出这些丢失的 $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 元素, 从而导致重建结果偏离的原始物体分布.

为验证上述数学分析, 仍假定照波长为 $0.6 \mu\text{m}$, 物体和 CCD 靶面的距离为 $5 \times 10^4 \mu\text{m}$, 样品和照明光均用 256×256 的数组表示, 且每个数组元素相当于 $10 \mu\text{m}$, 照明光使用与图 2 中相同的汇聚高斯光束, 且汇聚点在 CCD 靶面上. 用快速傅里叶变换进行计算时, 照明光和待成像物体的空间频谱 $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 及 $\tilde{\mathbf{P}}'(f_x, f_y)$ 的分辨率皆为 $3.9 \times 10^{-4} \mu\text{m}^{-1}$. 为了减少运算量且不失普遍性, 取 $\tilde{\mathbf{P}}'(f_x, f_y)$ 中间显著不为零的 11×11 个元素代替全部 $\tilde{\mathbf{P}}'(f_x, f_y)$ 代

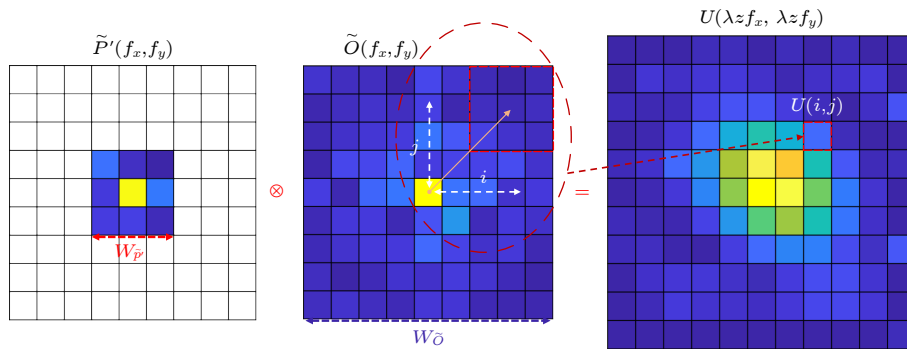


图 3 相干衍射成像中照明光与样品的频域卷积示意图

Fig. 3. Diagram of frequency domain convolution of illumination with sample in coherent diffraction imaging.

入 (10) 式计算 CCD 靶面上的衍射光斑分布, 其频谱分布如图 5(a) 所示. 当样品相对于照明光在空间做平移扫描时, 每个扫描位置都可以得到一个与图 5(c) 相类似的衍射光斑. 采用文献 [34] 中的方

法, 先利用 23×23 幅衍射光斑中每个衍射光斑左上角 11×11 个强度值, 可以得到一组由 64009 个方程组成的方程组, 从中抽取任意 14641 个线性无关方程组成类似 (11) 式的方程组, 从而解出 $\tilde{O}(f_x, f_y)$

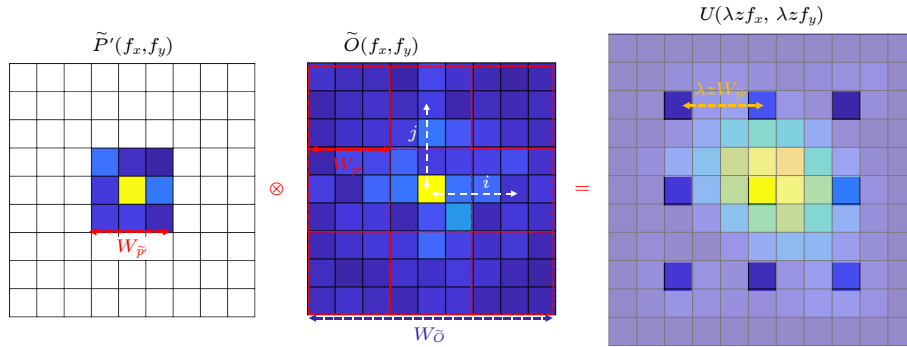


图 4 采样间隔为 3 时, 衍射光斑与探测器靶面像元分布示意图

Fig. 4. Diagram of diffraction pattern and detector target surface pixel plane undersampling (sampling interval of 3).

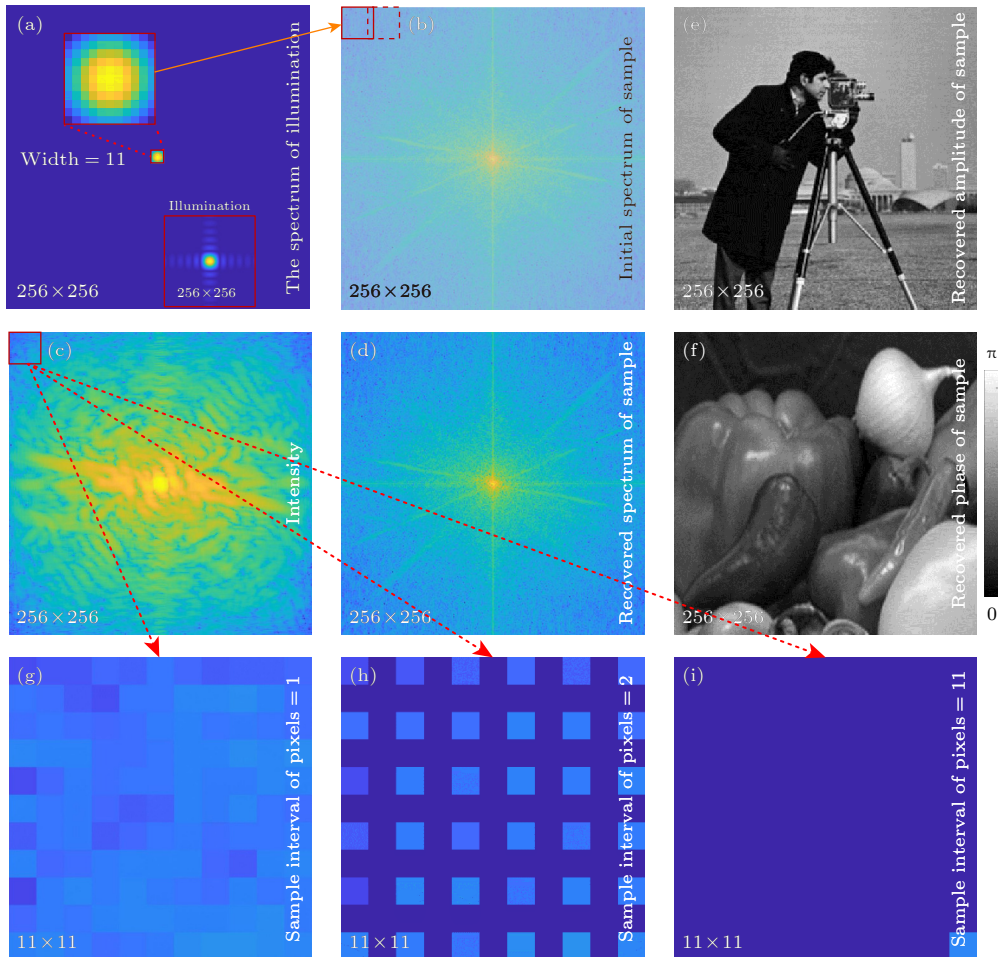


图 5 (a) 照明光的频谱分布; (b) 样品和照明光频谱交叠计算的示意图; (c) 所记录的其中一组衍射光斑; (d) 重建出的样品频谱分布; (e) 和 (f) 分别为重建样品振幅和相位; (g)–(i) 在探测器左上角 (11×11 个像素) 中不同采样间隔条件下探测器像元分布, 其采样间隔分别为 1, 2, 11

Fig. 5. (a) Spectrum of illumination; (b) diagram of overlapping calculation in sample and illumination spectrum; (c) one of recorded diffraction patterns; (d) distribution of recovered sample spectrum; (e) amplitude and (f) phase of recovered sample; (g)–(i) distribution of pixels on top left corner of detector (11×11 pixels) with sampling intervals of 1, 2, 11, respectively.

左上角 11×11 个数值. 随后, 将 $\tilde{\mathbf{P}}'(f_x, f_y)$ 移动到图 5(b) 中虚线的方框位置, 按照上述过程, 可以求出 $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 另外 11×11 个数值. 在依次交叠计算出所有的 $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 的值后, 对所求出的 $\tilde{\mathbf{O}}'(f_x, f_y)$ 做傅里叶逆变换, 就可以得到如图 5(e) 及图 5(f) 所示的 $\mathbf{O}'(x_0, y_0)$ 重建振幅和相位分布, 可以发现其同原物的振幅及相位分布没有任何差别. 如果在水平和竖直方向上将采样间隔增加为 2 倍, 则 23×23 幅所记录的衍射光斑左上角中有 6×6 个强度值可以使用, 如图 5(h) 所示, 总共有 19044 个方程组, 但由于其中的线性无关方程个数少于未知数个数, 无法解出相应的 $\tilde{\mathbf{O}}'(f_x, f_y)$. 但是, 当把扫描位置增加到 50×50 , 则仍然可得到 14641 个线性无关方程组, 从而解出所有的 $\tilde{\mathbf{O}}'(f_x, f_y)$ 和相应的 $\mathbf{O}'(x_0, y_0)$. 如果进一步将 CCD 水平和竖直方向上的采样间隔增加为 3—10 倍, 同时将扫描位置数按比例增加, 则仍然可以得到相同数目的方程并解出所有的 $\tilde{\mathbf{O}}'(f_x, f_y)$ 和相应的 $\mathbf{O}'(x_0, y_0)$, 由于重建结果仍然同原始物体完全相同, 文中没有给出重建结果. 但当 CCD 像元采样间隔增加到 11 个像素后, 其左上角 11×11 范围内所能记录到的光强如图 5(i) 所示. 虽然将扫描位置数增加到 255×255 后, 仍然可以得到 14641 个线性无关方程, 每次仍然可以解出 24×24 个 $\tilde{\mathbf{O}}'(f_x, f_y)$ 的局部值, 但由于各次解出 $\tilde{\mathbf{O}}'(f_x, f_y)$ 的局部值彼此独立, 缺乏固定的相位关系, 无法反算出正确的 $\mathbf{O}(x_0, y_0)$.

在实际实验研究中, 若照明光的频谱宽度为 $W_{\tilde{\mathbf{P}}'}$, 探测器的采样间隔为 Δ , 则根据 (10) 式和上面的模拟计算, 只有满足条件 $\frac{\Delta}{\lambda z} \leq W_{\tilde{\mathbf{P}}}'$ 时, 才能将所有的 $\tilde{\mathbf{O}}(f_x, f_y)$ 全部记录并重建. 即, 探测器平面

上允许的最大采样间隔为 $\lambda z W_{\tilde{\mathbf{P}}}'$, 其数值与照明光波长 λ 、记录距离 z 以及照明光本身的频谱宽度 $W_{\tilde{\mathbf{P}}}'$ 成正比. 反之, 在波长 λ 、记录距离 z 、探测器采样间隔 Δ 一定的情况下, 为了提高重建图像质量, 可以采用频谱宽度 $W_{\tilde{\mathbf{P}}}'$ 更大的照明光. 最简单的方法是用汇聚或者发散光对物体进行照明, 这种方法的效果已经被相关实验证实^[37,38], 反向验证了上述关于探测器采样间隔要求的正确性.

3.2 探测器像素大小

在上述讨论中, 其实是将探测器的第 (i, j) 个像元中心处的强度视为整个像元的强度. 而在 PIE 成像的实际操作中, 当样品离开探测器的距离足够远时, 样品透射光传播到探测器靶面上的衍射艾里斑直径将大于探测器像元尺寸, 假设此时每个像元内各处的光强近似均匀分布, 上述假设可以很好成立, 因此在 PIE 成像中一般可采用减小照明面积或者增加记录距离等方法, 来保证此条件成立. 但减小照明面积会导致扫描间隔减小, 明显增加数据记录时间, 而增大记录距离又会导致其成像的分辨率降低. 反之, 记录距离较近或者照明面积加大时, 衍射光斑的平均尺寸将小于探测器的像素尺寸, 此时每个探测器像元内各处的光强不再均匀, 从而出现欠采样现象, 往往导致重建像包含较多噪声. 在红外和太赫兹等波段, 由于其单光子能量较小或者材料量子效率低, 所使用探测器的单个像元尺寸较大, 容易造成这些波段的 PIE 成像分辨率不理想^[39,40]. 假设用像元大小为 $\delta \times \delta$ 的高分辨探测器可以将衍射光斑完全分辨, 则 (10) 式仍然成立, 其中的第 (i, j) 像元的强度为

$$I(i\delta, j\delta) = \sum_{m,n} \sum_{k,l} \tilde{\mathbf{P}}' \left(-f_m + \frac{j\delta}{\lambda z}, -f_n + \frac{j\delta}{\lambda z} \right) \tilde{\mathbf{P}}'^* \left(-f_k + \frac{j\delta}{\lambda z}, -f_l + \frac{j\delta}{\lambda z} \right) \tilde{\mathbf{O}}(f_m, f_n) \tilde{\mathbf{O}}^*(f_k, f_l). \quad (12)$$

当用像元尺寸更大的探测器记录衍射光斑时, 设像元大小 $\Delta \times \Delta$, 且 $Q = \Delta/\delta$, Q 为整数, 则

$$I'(i\Delta, j\Delta) = \sum_{\sigma=[-Q/2, Q/2], \rho=[-Q/2, Q/2]} \sum_{\sigma \in \mathbb{Z}, \rho \in \mathbb{Z}} I(i\Delta + \sigma\delta, j\Delta + \rho\delta). \quad (13)$$

(13) 式仍然是以 $\tilde{\mathbf{O}}(f_m, f_n) \tilde{\mathbf{O}}^*(f_k, f_l)$ 为未知数和以 $\tilde{\mathbf{P}}'(f_m, f_n) \tilde{\mathbf{P}}'^*(f_k, f_l)$ 为已知数的方程, 但其中 $\tilde{\mathbf{O}}(f_m, f_n) \tilde{\mathbf{O}}^*(f_k, f_l)$ 的采样间隔 $\delta/(\lambda z)$ 是 $\Delta/(\lambda z)$ 的 Q^{-1} 倍, (13) 式所包含的未知数 $\tilde{\mathbf{O}}(f_m, f_n) \tilde{\mathbf{O}}^*(f_k, f_l)$

的个数是 (12) 式的 Q^2 倍. 由于 (13) 式仍然是线性方程, 只要这种方程的个数足够多, 仍然可以解出所有的 $\tilde{\mathbf{O}}(f_m, f_n) \tilde{\mathbf{O}}^*(f_k, f_l)$. 但在同等靶面面积条件下, 探测器的像元数目将减小到原来的 Q^{-2} ,

每次曝光所获得的方程数随之减小到原来的 Q^{-2} ；若要保持方程组的数目不变，则需要将扫描位置数增加 Q^4 倍，以保证用上述算法可解出 $\tilde{O}(f_m, f_n)$ $\tilde{O}^*(f_k, f_l)$ 。因此，探测器平面上发生的欠采样并不会直接降低重建像的精度，只要增加物体相对照明光的扫描次数，数学上仍然可以从(13)式中正确解出物体的所有频谱 $\tilde{O}(f_m, f_n)$ 。图6解释了欠采样条件下衍射光斑的记录过程， $U(\lambda z f_x, \lambda z f_y)$ 仍然是 $\tilde{P}'(f_x, f_y)$ 和 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 的卷积结果，当像素大小扩大2倍时，每个像素所记录衍射光斑的强度是图中每个红色方格所包含的4个 $U(\lambda z f_x, \lambda z f_y)$

模的平方和，因此每个像素的光强包含的未知数 $\tilde{O}(f_m, f_n)\tilde{O}^*(f_k, f_l)$ 的个数增加到4倍。

为验证上述分析的正确性，仍然采用和图2完全一致的模拟计算参数，物体和照明光均由 256×256 个像素组成，每个像元大小为 $10 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$ ，物体的频谱也是一个 256×256 数组。照明光的频谱取中心 11×11 个不为零的数组单元，由(10)式计算所得理想采样的衍射光斑如图7(a)所示。采用与图5类似的方法，从左上角开始，利用 23×23 幅理想采样的衍射光斑，每次计算出 11×11 个 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 的数值。将 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 的数值全部计算出以后，对其做傅里叶逆变换即可以得到图7(c)和

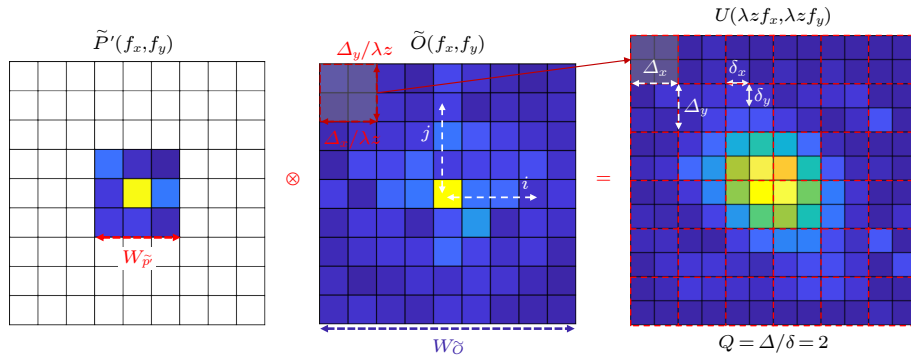


图6 衍射光斑分布与探测器像元尺寸示意图($Q = 2$)

Fig. 6. Diagram of diffraction pattern and detector pixel size ($Q = 2$).

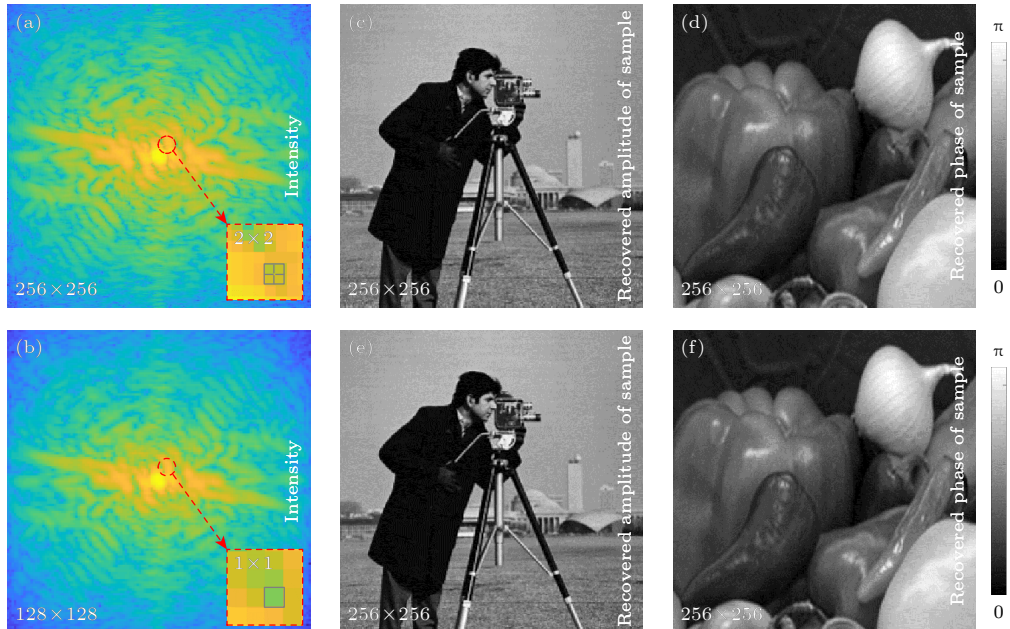


图7 (a) 理想采样时记录的衍射光斑; (b) 发生欠采样时记录的衍射光斑; (c) 和 (d) 分别为理想采样数据重建出的待测样品振幅和相位; (e) 和 (f) 分别为欠采样数据重建出的待测样品振幅和相位

Fig. 7. (a) Diffraction patterns with optimal sampling recording; (b) diffraction patterns with undersampling recording; (c) amplitude and (d) phase of recovered sample from optimal sampling data; (e) amplitude and (f) phase of recovered sample from undersampling data.

图 7(d) 所示的振幅和相位分布, 其重建结果同原始物体完全相同. 如果将 CCD 靶面上的单个像元大小增加为 2 倍, 像素数减少为 1/4 以保持 CCD 靶面的面积不变, 得到图 7(b) 所示的欠采样衍射光斑. 使用图 7(b) 所示的欠采样衍射光斑, 按照 (11) 式进行图像重建时, 需要将衍射光斑个数增加到 9000 幅, 以得到足够多的线性无关方程组, 从而计算出图 7(e) 和图 7(f) 所示的仍然同原始物体完全相同的振幅和相位分布. 图 7 的结果完全证明了上述数学分析的正确性.

在本质上, 单个像元面积内的强度叠加是一个退相干的过程. 而基于菲涅耳衍射原理, 将光场在样品平面和探测器平面之间进行往复传播迭代的普通相干衍射成像, 则不能处理 (13) 式中强度叠加的这种情况. 因此经典相干衍射成像需要避免衍射光斑的欠采样, 否则将难以得到准确在线像. PIE 多模态重建算法^[41,42]提供了处理这种强度叠加的方法, 通过将同一个像元上不同部分的衍射光斑当作物体的不同模态来处理, 即可在探测器欠采样的条件下仍然可以获得清晰的重建像.

3.3 探测器靶面宽度

从图 8 可以看出, 若要准确重建出样品的原始复振幅分布 $O(x_0, y_0)$, 则红色方块所代表的等效照明光的频谱 $\tilde{P}'(f_x, f_y)$ 需要覆盖样品的全部频谱 $\tilde{O}(f_x, f_y)$. 在图 8 中, 样品的空间频谱 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 和等效照明光的空间频谱 $\tilde{P}'(f_x, f_y)$ 的宽度分别为 $W_{\tilde{O}}$ 和 $W_{\tilde{P}'}$, 则图中左上方红色方块的中心到最右上方红色方块的中心距离为 $W_{\tilde{O}} - W_{\tilde{P}'}$, 根据 (10) 式可算出, 此时需要的靶面宽度为 $L = \lambda z (W_{\tilde{O}} - W_{\tilde{P}'})$. 若探测器靶面的实际尺寸为 L' , 且 $L' < L$, 则导

致图 8 中物体频谱周围宽度为 $(L - L')/(2\lambda z)$ 区域内的 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 没有被记录, 只有 $\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{L'}{\lambda z} + W_{\tilde{P}'}\right), \frac{1}{2}\left(\frac{L'}{\lambda z} + W_{\tilde{P}'}\right)\right]$ 范围内的频谱能够重建, 样品的部分高频信息丢失, 重建图像的理论分辨率为 $\frac{\lambda z}{\lambda z W_{\tilde{P}'} + L'}$, 部分细节因此变的模糊.

为验证上述分析的正确性, 仍采用与图 2 完全一致的模拟计算参数. 图 9(a) 是根据 (10) 式所计算出的 CCD 靶面的上衍射光斑强度分布 $I(x, y)$. 当 CCD 靶面不够大时, 相较于探测器靶面上如图 9(a) 中的衍射光斑, 探测器只有如图 9(b) 中红色方框内的衍射光斑可以被有效记录, 且红色方框外的边缘宽度 $W_1 > \lambda z W_{\tilde{P}'}$. 仅利用图 9(b) 中红色方框内的强度值, 采用与图 5 相同的计算方法, 可以解出图 9(d) 所示的样品频谱. 和图 9(c) 相比较可以发现, $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 外周 (频谱宽度为 W_2) 的部分没有能够被重建. 对图 9(d) 做傅里叶逆变换, 可以重建出样品 $O'(x_0, y_0)$ 的振幅和相位分布, 如图 9(e) 和图 9(f) 所示, 其重建结果和原始分布的差别 $|O'(x_0, y_0) - O(x_0, y_0)|$ 如图 9(g) 和图 9(h) 所示, 可以看到所重建出的样品丢失了细节分布.

在实际操作中, 虽然红色方框外的衍射光斑由于探测器靶面的限制而没有被记录, 如图 9(b) 所示, 但只要所记录的衍射光斑宽度满足最小靶面宽度的要求, 则依然可以根据 (11) 式将待测物体精确重建出来. 这也是文献 [37, 43] 中, 在衍射光斑尺寸受探测器尺寸限制时, 所记录衍射光斑外周的一定范围内不做强度更新, 而能明显提高图像质量的根本原因, 也从侧面验证了上述理论分析的正确性.

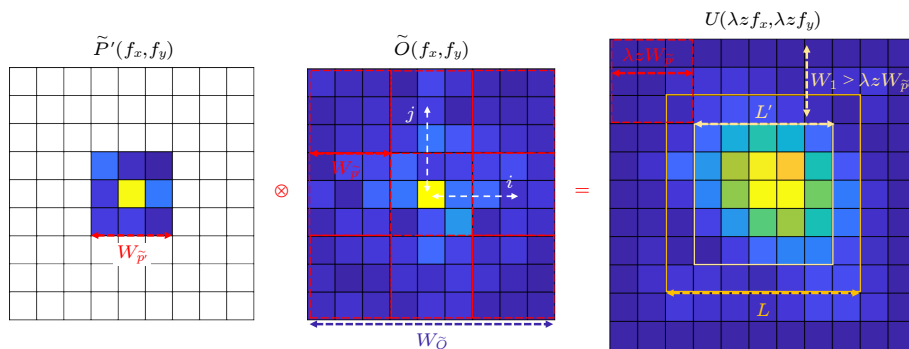


图 8 衍射光斑分布与探测器靶面宽度示意图

Fig. 8. Diagram of diffraction pattern and width of detector target surface.

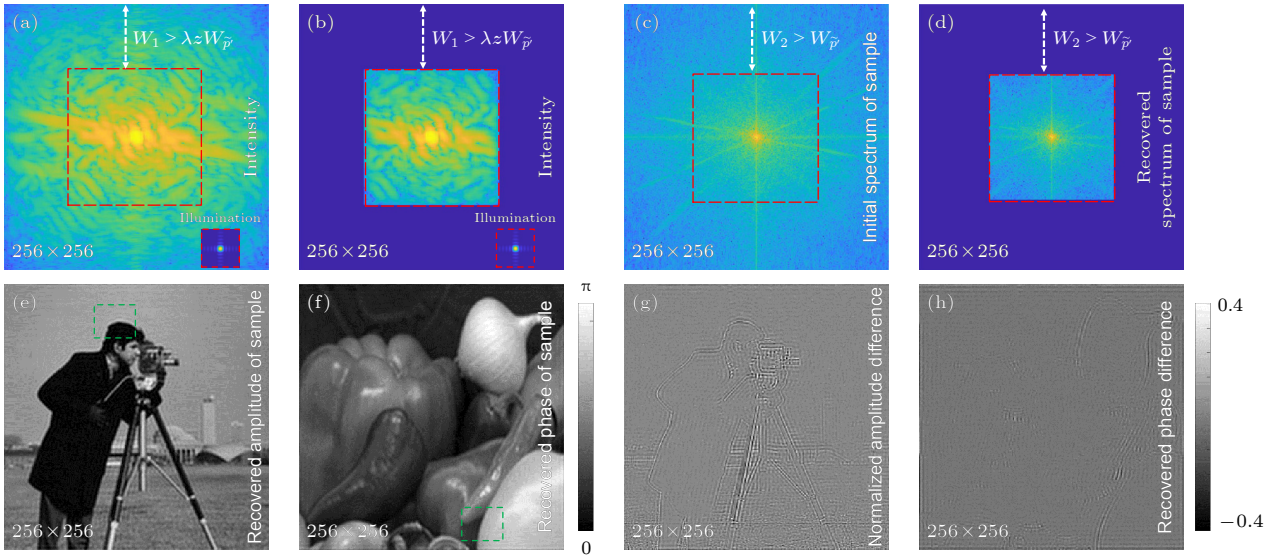


图9 (a) 探测器靶面上其中一个衍射光斑; (b) 探测器所记录的其中一个衍射光斑; (c) 待测样品的频谱分布; (d) 重建出的样品频谱分布; (e) 和 (f) 分别为重建出的样品振幅和相位; (g) 和 (h) 分别为重建结果与原始分布的振幅和相位差 (单位: rad)

Fig. 9. (a) One of diffraction patterns on detector target surface; (b) one of diffraction patterns recorded by the detector; (c) initial spectrum of sample; (d) recovered spectrum of sample; (e) amplitude and (f) phase of recovered sample; differences of (g) amplitude and (h) phase between recovered results and initial distribution (unit: rad).

3.4 探测器动态范围

当探测器某个像元上的光强大于某个阈值 I_{\max} 时, 探测器所记录到的光强值均由探测器位数的最大数值所决定 [44,45]. 对于常用的 8 位 CCD 来说, 其记录的光强最大值为 255, 只有强度介于 0— I_{\max} 范围内的强度被记录为 0—255, 其中 0—255 就是 8 位 CCD 的动态范围. 对于大部分样品来说, 其低频成分的强度一般远高于高频成分的强度, 其零频分量的强度甚至可以比高频分量高几个数量级. 因此在图 3 中, 当照明光频谱 $\tilde{P}'(f_x, f_y)$ 处于 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 中心附近时, 所产生衍射光斑的强度一般较高, 而随着 $\tilde{P}'(f_x, f_y)$ 逐渐远离 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 中心, 所形成衍射光斑的强度逐步降低. 因此 CCD 的饱和现象, 一般发生在衍射光斑的中心区域. 8 位 CCD 发生饱和时, 记录到衍射光斑的强度全部变为 255. 而发生强度饱和的像素所记录的强度值, 并不能反映 $\tilde{P}'(f_x, f_y)$ 与 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 的正确关系, (10) 式中该像素所对应的方程组不可用来求解 $\tilde{O}(f_x, f_y)$, (11) 式中的线性无关方程个数会因此而减少. 但 PIE 成像的实验中所用 CCD 一般有 1000×1000 个以上的像素, 一次曝光可产生 1000×1000 个方程, 若物体相对照明光做 10×10 扫描, 则一共有 10000×10000 个方程, 在大多数情况下其未饱和像元构成方程组矩阵的秩仍然可以大于 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 的频率分量个数,

仍然可以用方程组 (11) 解出大部分的 $\tilde{O}(f_x, f_y)$. 同时, 实际的待测样品往往包含丰富的频谱分布, 有限几个频谱成分的缺失, 一般只会使重建图像产生难以觉察的变化, 这是在 PIE 实验中只要不对发生饱和的像素进行强度更新, 仍然可以得到比较精确重建像的数学层面原因.

衍射光斑发生饱和是由于 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 中因某些频谱分量的强度值过大而引起, 其饱和区域的大小和所导致频谱成分丢失的多少, 不仅决定于这些 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 自身的绝对强度, 而且和这些频谱成分的分布和照明光的空间频谱宽度有关. 为验证上述的分析, 采用 2 种不同频谱宽度的照明光照明, 其中频谱宽度为 11×11 个像素的照明光被使用在图 10(b1), (b2) 和 (b4) 中, 频谱宽度为 5×5 个像素的照明光被使用在图 10(b3) 中, 且对应频谱的幅值较为均匀. 所使用的样品振幅图和相位图与图 2 中所使用的振幅图和相位图相一致. 图 10(a1) 所示的是一个样品的空间频谱 $\tilde{O}(f_x, f_y)$, 设置其右下角中有 2 个孤立点 (放大图中红圈黄点表示) 的频谱强度很大, 但两者之间距离大于红色方框所代表的照明光频谱 $\tilde{P}'(f_x, f_y)$ 的宽度. 当根据 (10) 式在 CCD 靶面上形成图 10(b1) 中的衍射光斑时, 将会在 2 个相互分离的区域发生饱和 (饱和区域仍然用黄色表示). 但除这 2 个强度较大的频谱成分外,

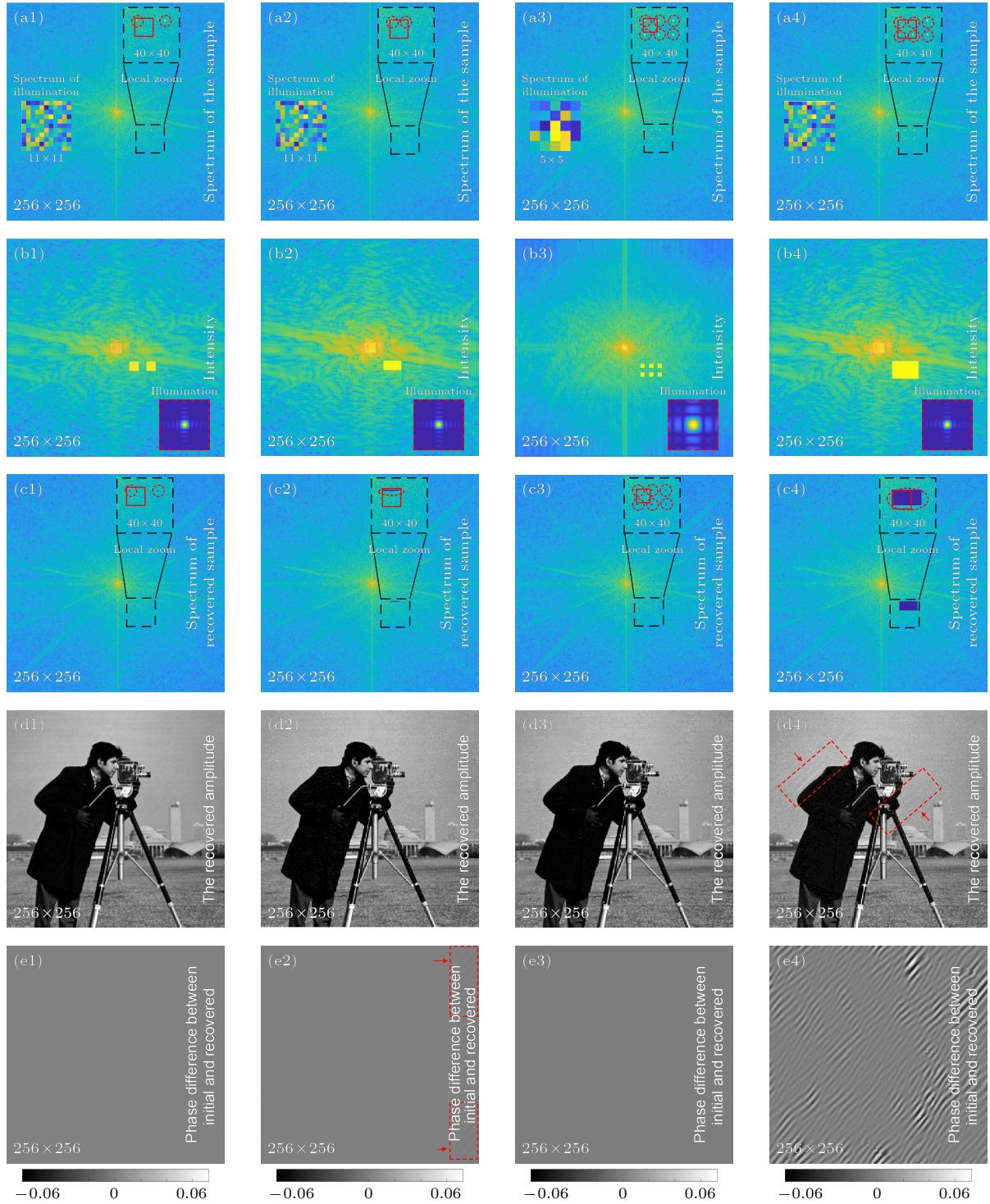


图 10 (a) 数值模拟中的样品频谱分布; (b) 所记录的其中一组衍射光斑; (c) 重建出的样品频谱分布; (d) 重建出的样品振幅; (e) 重建相位与原始相位的相位差 (单位: rad). 其中, (e1), (e2) 和 (e4) 使用有效频谱宽度为 11×11 个像素的照明光照明, (e3) 使用有效频谱宽度为 5×5 个像素的照明光照明, 其对应光强及频谱分布分别展示在 (a) 和 (b) 中的小插图中. 另外, 在样品频谱 (a1)–(a4) 中强度较大点之间的距离分别为 20, 10, 10, 10 (像素)

Fig. 10. (a) Spectrum of sample in numerical simulations; (b) one of recorded diffraction patterns; (c) recovered spectrum of sample; (d) recovered amplitude of sample; (e) differences of phase between recovered and initial (unit: rad). In (a1)–(a4), distances of adjacent extreme points are 20, 10, 10, 10 pixels, respectively. An illumination, adopted in (e1), (e2) and (e4), has a valid spectrum with 11×11 pixels, which are shown in (a) and (b). An illumination, adopted in (e3), has a valid spectrum with 5×5 pixels, which are shown in (a) and (b).

其他所有物光频谱 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 的信息都被包含在 CCD 靶面上未饱和区域内, 比如图 10(a1) 中 2 个强度较大频谱右下角的 2 个频谱成分的数值信息都分别包含在图 10(b1) 右下角中的 2 个饱和区域内. 因此, 只要数据记录过程中物体相对照明光扫描的位置足够多, 则可以解出除这 2 个点以外的所有其他 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 成分, 重建样品频谱如图 10(c1) 所示, 从而得到图 10(d1) 和原物体基本一致的重建像, 其重建相位与原始相位的相位差如图 10(e1) 所示. 如果在图 10(a2) 中设置 2 个强度较大频谱成分且相邻点间距大于照明光频谱 $\tilde{P}'(f_x, f_y)$ 的宽度, 则 CCD 所记录的衍射光斑强度图中将会形成图 10(b2) 中面积明显扩大的饱和区域. 此时 2 个频谱强度较大点连线上的所有 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 值都无法重建, 重建样品频谱如图 10(c2) 所示, 从而导致其重建像比图 10(d1) 中的重建像丢失更多的信息. 但由于仅仅是一个线段上的频谱信息发生丢失, 所以与图 10(d1) 相比, 此时图 10(d2) 中的重建像并无明显的变化, 其重建相位差如图 10(e2) 所示. 如果如图 10(a3) 设置样品中存在 6 个强度较大的频谱成分, 且照明光频谱 $\tilde{P}'(f_x, f_y)$ 的宽度小于其相邻点之间的距离时, CCD 所记录的衍射光斑强度图上将有 6 个图 10(b3)

中所示的彼此分离的饱和区域. 同理, 由于样品频谱中除这 6 个强度较大的点外, 其他所有 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 值均可以精确重建, 其重建样品频谱如图 10(c3) 所示, 其重建出的振幅和相位仍较为准确, 其重建振幅如图 10(d3) 所示, 其重建相位差如图 10(e3) 所示. 但当照明光频谱 $\tilde{P}'(f_x, f_y)$ 宽度大于相邻点之间的距离时, 如图 10(a4) 所示, 其所记录的衍射光斑中饱和区域将如图 10(b4) 所示连成一片, 导致图 10(a4) 中 6 个强度较大的频谱成分所围成的矩形区域内的所有 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 都将无法准确重建, 从而造成大量信息丢失, 其重建的样品频谱如图 10(c4) 所示, 此时图 10(d4) 中的重建振幅出现明显的变形, 其重建相位差如图 10(e4) 所示. 所以, 在待成像样品一定的情况下, 相比较于采用频谱宽度较大的发散或者汇聚光照明, 采用频谱宽度较窄的平行光照明, 更有利于克服饱和效应所带来的不良影响, 这与文献 [46] 中的实验结果相一致, 进一步验证了上述数学分析和数值计算结果的正确性.

3.5 探测器灵敏度

当入射到探测器某个像元上的光能量小于某个阈值时, 探测器所记录到的数值为零, 此时最小

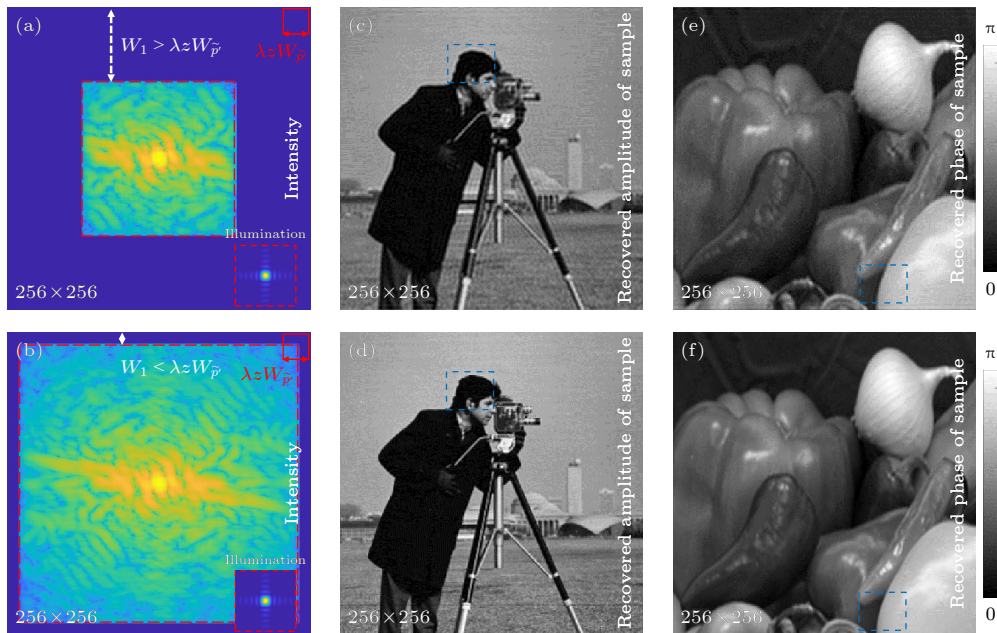


图 11 (a) 当边缘零值区域的宽度 (W_1) 大于 $\lambda z W_{P'}$ 时, 探测器所记录的其中一组衍射光斑强度图; (b) 当边缘零值区域的宽度 (W_1) 小于 $\lambda z W_{P'}$ 时, 探测器所记录的其中一组衍射光斑强度图; (c) 和 (e) 分别为使用 (a) 中的数据重建出的振幅和相位分布; (d) 和 (f) 分别为使用 (b) 中的数据重建出的振幅和相位分布

Fig. 11. (a) One of diffraction patterns recorded by detector when the width of the invalid region (W_1) is larger than $\lambda z W_{P'}$; (b) one of the diffraction patterns recorded by the detector when the width of the invalid region (W_1) is smaller than $\lambda z W_{P'}$; (c) amplitude and (e) phase recovered with (a); (d) amplitude and (f) phase recovered with (b).

光强值 I_{\min} 就是探测器的灵敏度. 理论上可以通过增加探测器曝光时间, 来降低相应 I_{\min} 的值, 以提高记录准确性, 但增加探测器的曝光时间会导致环境背景光的影响同步加大, 因而实际意义有限. 对于 (10) 式来说, 一些像素所对应的方程等号右边的数值本来不是零, 但由于探测器的灵敏度不够而错误的变为了零, 当将这些方程也用于重建计算时, 毫无疑问将导致重建精度降低.

由 (10) 式可知, 在衍射光斑的内部区域内, 第 (i, j) 像素所记录到的强度值 $I(i, j)$ 是照明光频谱 $\tilde{P}'(f_x, f_y)$ 相对样品频谱 $\tilde{O}(f_m, f_n)$ 在水平方向错开 i 个单元和在竖直方向错开 j 个单元后相乘并相加后模的平方. 对于衍射光斑边缘部分的强度 $I(i, j)$, 照明光频谱与样品频谱之间仅有很小的重叠面积, 且 $\tilde{O}(f_x, f_y)$ 边缘部分的高频分量的数值比中间部分的低频分量要弱很多, 从而导致衍射光斑边缘部分由于其强度小于 I_{\min} 而都被探测器记录为零值. 但这个效果和 3.3 节中所分析靶面尺寸不够大的效果相同, 此处无需要再次分析. 采用如图 2 中相同参数的对比数值模拟结果如图 11 所示, 其中图 11(a) 和图 11(b) 分别是探测器所记录的其中一个衍射光强, 对应边缘零值区域的宽度 (W_1) 分别为大于 $\lambda z W_{\tilde{P}'}$ 和小于 $\lambda z W_{\tilde{P}'}$. 从图 11 的对比重建结果可以发现: 相对于零值区域宽度小于 $\lambda z W_{\tilde{P}'}$ 的重建结果, 宽度大于 $\lambda z W_{\tilde{P}'}$ 时会造成重建出的样品高频信息丢失, 从而导致重建样品的细节信息缺失, 出现如图 11 的蓝色方框中边缘扭曲的现象. 显然, 更宽的照明光频谱宽度可使得 $\tilde{O}(f_m, f_n)$ 边缘与 $\tilde{P}'(f_x, f_y)$ 的重叠面积越大, 像元记录到零值的可能性就越小, 所以采用发散或者汇聚球面波照明时可以大幅度减少 (11) 式中等号右侧出现 0 的方程组个数, 有助于提高重建精度^[37], 这个技术要求和克服探测器饱和效应的要求正好相反.

4 结 论

本文提出一种针对 PIE 成像的解析求解模型, 通过该模型可以在频域中将衍射光斑、照明光及样品联系起来, 然后利用所记录的衍射光斑直接地关于样品的唯一数学解求解出来. 利用所提方法, 本文系统地分析和讨论了探测器不同光电性能对 PIE 成像的影响, 探索了高质量 PIE 成像的探测器光电性能要求, 并针对探测器光电性能不理想的

不同情况 PIE 成像给出了相应意见. 所提方法有助于进一步提升 PIE 成像质量, 本文给出了详细的模拟计算, 很好地验证了所提方法的可靠性. 另外, 这种基于相干衍射基础上的处理方法, 不仅使得整个相干衍射的整个过程可以被精确地数学描述, 还能为相干衍射成像中的各种操作提供一个新的观察角度和分析方法.

参考文献

- [1] Guo Y, Han H Y, Wang L W, Zhu Y R, Gao X W, Yang Z G, Weng X Y, Yan W, Qu J L 2022 *Appl. Phys. Lett.* **121** 023701
- [2] Wang Z, Zheng W, Hsu C Y S, Huang Z W 2015 *Appl. Phys. Lett.* **106** 033701
- [3] Fiolka R, Shao L, Rego E H, Davidson M W, Gustafsson M G L 2012 *Proc. Natl. Acad. Sci.* **109** 5311
- [4] Smith H I 1995 *J. Vac. Sci. Technol. B* **13** 2323
- [5] Wu S R, Hwu Y, Margaritondo G 2012 *Materials* **5** 1752
- [6] Jiang H, Li A G 2022 *Acta Opt. Sin.* **42** 1134004 (in Chinese) [蒋晖, 李爱国 2022 光学学报 **42** 1134004]
- [7] Roels J, Aelterman J, Luong H Q, Lippens S, Pizurica A, Saeys Y, Philips W 2018 *J. Microsc.-Oxford* **271** 239
- [8] Gerchberg R W, Saxton W O 1972 *Optik* **35** 237
- [9] Fienup J R 1982 *Appl. Optics* **21** 2758
- [10] Xu R, Salha S, Raines K S, Jiang H D, Chen C C, Takahashi Y, Kohmura Y, Nishino Y, Song C Y, Ishikawa T, Miao J W 2011 *J. Synchrotron Radiat.* **18** 293
- [11] Rau C, Wagner U, Pesic Z, De Fanis A 2011 *Phys. Status Solidi A* **208** 2522
- [12] Zhou G Z, Hu Z, Yang S M, Liao K L, Zhou P, Liu K, Hua W Q, Wang Y Z, Bian F G, Wang J 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 034102 (in Chinese) [周光照, 胡哲, 杨树敏, 廖可梁, 周平, 刘科, 潜文强, 王玉柱, 边凤刚, 王劼 2020 物理学报 **69** 034102]
- [13] Fienup J R, Wackerman C C 1986 *J. Opt. Soc. Am. A* **3** 1897
- [14] Faulkner H, Rodenburg J M 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 023903
- [15] Rodenburg J M, Faulkner H 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 4795
- [16] Sha H Z, Cui J Z, Yu R 2022 *Sci. Adv.* **8** 2275
- [17] Chen Z, Jiang Y, Shao Y T, Holtz M E, Odstril M, Guizar-Sicairos M, Hanke I, Ganschow S, Schlom D G, Muller D A 2021 *Science* **372** 826
- [18] Jiang S W, Guo C F, Bian Z C, Wang R H, Zhu J K, Song P M, Hu P, Hu D, Zhang Z B, Hoshino K, Feng B, Zheng G A 2022 *Biosens. Bioelectron.* **196** 113699
- [19] Wang T B, Jiang S W, Song P M, Wang R H, Yang L M, Zhang T, Zheng G A 2023 *Biomed. Opt. Express* **14** 489
- [20] Wise A M, Weker J N, Kalirai S, Farmand M, Shapiro D A, Meirer F, Weckhuysen B M 2016 *ACS Catal.* **6** 2178
- [21] Claus D, Maiden A M, Zhang F C, Sweeney F G R, Humphry M J, Schluesener H, Rodenburg J M 2012 *Opt. Express* **20** 9911
- [22] Cheng B, Zhang X J, Liu C, Zhu J Q 2019 *J. Optics-UK* **21** 065602
- [23] Zong B M, Luan J Y, Jiang Z L, Kong Y, Wang S Y, Liu C 2019 *Opt. Eng.* **58** 054102
- [24] Dong X, Pan X C, Liu C, Zhu J Q 2019 *High Power Laser Sci.* **7** 03000e48
- [25] Humphry M, Kraus B, Hurst A, Maiden A M, Rodenburg J M 2012 *Nat. Commun.* **3** 730

- [26] 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
- [27] Rodenburg J M, Hurst A C, Cullis A G 2007 *Ultramicroscopy* **107** 227
- [28] Lorenzo V, Thomas F, Peter Z, Erwin H 2018 *Opt. Lett.* **43** 543
- [29] Xu Y M, Pan X C, Sun M Y, Liu W F, Liu C, Zhu J Q 2022 *Photonics Res.* **10** 1937
- [30] Lu C C, Zhou Y, Guo Y X, Jiang S W, Zhang Z B, Zheng G A, Zhong J G 2021 *Opt. Express* **29** 12491
- [31] Li M, Bian L H, Zheng G A, Maiden A, Liu Y, Li Y M, Suo J L, Dai Q H, Zhang J 2021 *Opt. Lett.* **46** 1624
- [32] Shi Q S, Zhou W Y, Hui W W, Huang K C, Zhao H Y, Tian J G 2018 *Opt. Eng.* **57** 114104
- [33] Sinha A, Lee J, Li S, Barbastathis G 2017 *Optica* **4** 1117
- [34] He X L, Pan X C, Tao H, Liu C, Zhu J Q 2022 *AIP Adv.* **12** 065225
- [35] Maiden A M, Rodenburg J M 2009 *Ultramicroscopy* **109** 1256
- [36] Zhang F C, Peterson I, Vila-Comamala J, Berenguer A D F, Bean R, Chen B, Menzel A, Robinson I K, Rodenburg J M 2013 *Opt. Express* **21** 13592
- [37] Edo T B, Zhang F C, Rodenburg J M 2010 *Proc. SPIE* **7729** 77291H
- [38] Wang L, Dou J T, Ma J, Yuan C J, Gao Z S, Wei C, Zhang T Y 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 094201 (in Chinese) [王磊, 窦健泰, 马骏, 袁操今, 高志山, 魏聪, 张天宇 2017 *物理学报* **66** 094201]
- [39] Wan M, Healy J J, Sheridan J T 2020 *Opt. Laser. Technol.* **122** 105859
- [40] Liu C, Eschen W, Loetgering L, Molina D S P, Klas R, Iliou A, Steinert M, Herkersdorf S, Kirsche A, Thomas P, Hillmann F, Limpert J, Rothhardt J 2023 *Photonix* **4** 1
- [41] Thibault P, Menzel A 2013 *Nature* **494** 68
- [42] Batey D J, Edo T B, Rau C, Wagner U, Pešić Z D, Waigh T A, Rodenburg J M 2014 *Phys. Rev. A* **89** 043812
- [43] Maiden A M, Humphry M J, Zhang F C, Rodenburg J M 2011 *J. Opt. Soc. Am. A* **28** 604
- [44] Boyle W S, Smith G E 1970 *Bell Labs Tech. J.* **49** 587
- [45] Fossum E R 1997 *IEEE T. Electron Dev.* **44** 1689
- [46] Pan X C, Veetil S P, Wang B S, Liu C, Zhu J Q 2015 *J. Mod. Optic.* **62** 1270

Effect of detector photoelectric parameters on ptychographic iterative engine

Qi Nai-Jie¹⁾²⁾ He Xiao-Liang¹⁾ Wu Li-Qing¹⁾²⁾

Liu Cheng^{1)2)†} Zhu Jian-Qiang¹⁾²⁾

1) (*Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China*)

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

(Received 14 April 2023; revised manuscript received 31 May 2023)

Abstract

An analytical solution model for ptychographic iterative engine (PIE) is proposed. In this model, PIE can be described as a system of linear equations between the sample and the illumination in the frequency domain. This system of linear equations ($\mathbf{AX} = \mathbf{B}$) is derived with the spectrum of the illumination as the coefficient (\mathbf{A}), the spectrum of the sample as the unknown (\mathbf{X}), and the intensity of the diffraction pattern as the vector (\mathbf{B}). Hence, the sample can be recovered by solving this linear system. In PIE, the detector (such as Pike F-100, AVT) has a large resolution, meaning that 1000×1000 linear equations can be generated by recording a single pattern. It is still the case, however, that the number of obtained equations is smaller than the number of unknowns, leading to the inability to obtain a unique solution about the sample. Relative motions of sample and illumination, can generate more diffraction patterns to construct a sufficient number of linear independent equations. For coefficient (\mathbf{A}), since the initial illumination is known, the illumination after shifting can still be obtained by recording its shifting distance. Hence the unique solution for the sample can be directly obtained by solving this linear independent system of equations. Simultaneously, the photoelectric parameters of the detector have a significant influence on the imaging quality of PIE. Using this linear system, the photoelectric parameters of the detector can be characterized by the number of linear equations and unknowns in each equation. According to the conditions that there is a unique solution in the system of equations and the requirements of the photoelectric parameters (such as pixel sampling interval, width of target surface, pixel size, sensitivity and dynamic range), the influence of the reconstruction for PIE is quantified theoretically. Obviously, the numerical simulation results based on this theory not only verify the correctness of the theoretical analysis and predictions, but also reveal the physical mechanism of recovering high-quality results in imperfect photoelectric parameters of detector, which can contribute to improving the quality of their reconstruction and optimizing the experimental setup.

Keywords: detector photoelectric parameters, phase retrieval, coherent diffractive imaging, ptychographic iterative engine

PACS: 42.25.Fx, 42.25.Kb, 42.30.Rx, 42.79.Pw

DOI: 10.7498/aps.72.20230603

† Corresponding author. E-mail: chengliu@siom.ac.cn

探测器光电特性对叠层相干衍射成像的影响

齐乃杰 何小亮 吴丽青 刘诚 朱健强

Effect of detector photoelectric parameters on ptychographic iterative engine

Qi Nai-Jie He Xiao-Liang Wu Li-Qing Liu Cheng Zhu Jian-Qiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 154202 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230603

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230603>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于相干调制成像的光学检测技术

Technique of detecting optical components based on coherent modulation imaging

物理学报. 2020, 69(17): 174202 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200224>

基于高次谐波X射线光源的三维纳米相干衍射成像技术

Three-dimensional nano-coherent diffraction imaging technology based on high order harmonic X-ray sources

物理学报. 2022, 71(16): 164205 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220976>

部分相干衍射成像综述

Review of partially coherent diffraction imaging

物理学报. 2021, 70(21): 214201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211020>

上海光源硬X射线相干衍射成像实验方法初探

Preliminary exploration of hard X-ray coherent diffraction imaging method at SSRF

物理学报. 2020, 69(3): 034102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191586>

基于分数阶螺旋相位片的定量相位显微成像

Quantitative phase microscopy imaging based on fractional spiral phase plate

物理学报. 2021, 70(15): 158702 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201884>

一种基于图像融合和卷积神经网络的相位恢复方法

Phase retrieval wavefront sensing based on image fusion and convolutional neural network

物理学报. 2021, 70(5): 054201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201362>