

# Coherent Diffraction Imaging

## 無透鏡繞射顯微術

指導教授：陳明彰 組別：B153

組員：李奕學

### 摘要

Coherent diffraction imaging (CDI) 即同調光繞射顯微術，又稱為無透鏡繞射顯微術。最常見的光學顯微鏡因其解析度會受到透鏡尺寸、繞射極限、像差等因素所限制，因而衍生出無透鏡繞射顯微術，此技術重點在於不需要使用透鏡，因此可以屏除光學像差，提高分辨率，成像分辨率可達奈米等級，在生物、醫學、材料與物理領域都有極大用處。

繞射是光在行進過程中，遇障礙物時會偏離原先直線傳播的物理現象，而在後方屏幕產生繞射圖案。在符合遠場條件時，將遠場條件代入後的電場形式可近似為被繞射障礙物的幾何分布在空間上的傅立葉變換。使用 CCD 在遠場偵測繞射圖案，再由傅立葉逆轉換可得所求的障礙物圖案，即無透鏡繞射顯微術。CDI 技術精妙之處在於設備所測量到的繞射圖案僅為強度資訊，而相位資訊不復存在，應無法完整還原樣品，但是如果經由過取樣、掃描式等方法搜集繞射圖案，就能達成還原樣品的目的。一種過取樣 CDI 相位演算法，及另一種掃描式 CDI 稱為 ptychography，本專題針對兩種方法進行分析、模擬及實作。

### I. 原理

#### 過取樣 CDI 相位恢復演算法

已知遠場繞射情況近似傅立葉轉換情況下，real space 與 k-space 有下列關係

$$\begin{cases} \Delta x_{\min} * \Delta k_{\max} = z\lambda \\ \Delta x_{\max} * \Delta k_{\min} = z\lambda \end{cases}$$

如果在固定  $\Delta k_{\max}$  下兩倍取樣，即  $\Delta k_{\min}$  變為一半的情況，則  $\Delta x_{\max}$  變為兩倍， $\Delta x_{\min}$  不變，換一種說法就是提升繞射圖案解析度可以把還原實空間擴大。因此如果確定欲還原樣品小於可還原空間，則定義 over-sampling ratio  $\sigma$ ，可以證明只有當  $\sigma > 2$  時，過取樣相位恢復演算法才可行。

$$\sigma = \frac{\text{density region} + \text{no\_density region}}{\text{density region}}$$

定義  $O_j(x)$  為實空間、 $I_j(k)$  為 k-space、 $j$  為迭代次數、 $\sqrt{I(k)}$  為過取樣的繞射強度，算法如下

$$\begin{aligned}
\text{Obj}'_j(x) &= \mathcal{F}^{-1}\{\text{Img}_j(k)\} \\
\text{Obj}_{j+1}(x) &= \begin{cases} \text{Obj}'_j(x), & x \in S \text{ 且 } |\text{Obj}'_j(x)| > 0, \angle \text{Obj}'_j(x) > 0 \\ \text{Obj}_j(x) - 0.9 * \text{Obj}'_j(x), & x \in S \text{ 且 } |\text{Obj}'_j(x)| \neq 0, \angle \text{Obj}'_j(x) \neq 0 \\ \text{Obj}_j(x) - 0.7 * \text{Obj}'_j(x), & x \in S_1 \text{ or } S_2 \end{cases} \\
\text{Img}'_{j+1}(k) &= \mathcal{F}\{\text{Obj}_{j+1}(x)\} \\
\text{Img}_{j+1}(k) &= \sqrt{I(k)} \frac{\text{Img}'_{j+1}(k)}{|\text{Img}'_{j+1}(k)|}
\end{aligned}$$

## 掃描式 CDI ePIE 演算法

掃描式 CDI 透過每次改變雷射光入射的位置，獲取多張繞射圖案當作重建影像時的已知條件，而調整入射光斑在不同位置仍具有重疊區域則可以解決前一個方法需要過取樣的不足。這裡用 extended ptychographical iterative engine (ePIE) 演算法如下

$$\psi_j(r) = O_j(r)P_j(r - R_{s(j)}) \quad (1)$$

$$\Psi_j(u) = \sqrt{I_{s(j)}(u)} \frac{\mathcal{F}\{\psi_j(r)\}}{|\mathcal{F}\{\psi_j(r)\}|} \quad (2)$$

$$\psi'_j(r) = \mathcal{F}^{-1}\{\Psi_j(u)\} \quad (3)$$

$$O_{j+1}(r) = O_j(r) + \alpha \frac{P_j^*(r - R_{s(j)})}{|P_j(r - R_{s(j)})|_{\max}^2} (\psi'_j(r) - \psi_j(r)) \quad (4-1)$$

$$P_{j+1}(r) = P_j(r) + \beta \frac{O_j^*(r + R_{s(j)})}{|O_j(r + R_{s(j)})|_{\max}^2} (\psi'_j(r) - \psi_j(r)) \quad (4-2)$$

初始條件 object  $O_0(r)$  強度與相位皆為隨機猜測，probe  $P_0(r)$  直接測量所使用的入射雷射光波前在樣品平面上的強度，相位為隨機猜測。 $s(j)$  是掃描的位置函數，即 object 與 probe 的相對位置， $I_{s(j)}(u)$  是 CCD 偵測雷射光依照  $s(j)$  函數移動所產生的繞射圖案電場強度。 $\mathcal{F}$  與  $\mathcal{F}^{-1}$  為傅立葉轉換與逆轉換。 $\alpha$  與  $\beta$  參數可在 0~1 間調整，值越大代表每次更新迭代所佔的比重越大，此專題設  $\alpha = \beta = 0.9$ 。

步驟一將當前  $O_j(r)$  與猜測  $P_j(r - R_{s(j)})$  相乘得  $\psi_j(r)$ ，為猜測通過的電場。步驟二只保留猜測電場經傅立葉轉換後的相位項，振幅項由實際測量所得的繞射圖案振幅  $\sqrt{I_{s(j)}(u)}$  取代，原因是 CCD 只能測量到電場的強度  $I_{s(j)}(u)$ ，所以已經遺失的相位項由猜測取代。步驟三為傅立葉逆轉換，至此已經將實際繞射圖案帶進原猜測的電場，得到新猜測電場  $\psi'_j(r)$ 。步驟四以更新後的猜測電場與原猜測的電場兩者差異分別更新 object 與 probe。上述每次更新就是依照  $s(j)$  順序，完成  $s(j)$  中所有掃描的點為一次完整的迭代。

## II. 模擬結果

先模擬使用第一種過取樣方法進行還原，第一欄為實空間欲還原之樣品，第四欄為樣品的傅立葉轉換，第二欄為經演算法迭代 100 次後還原樣品結果，第二欄為經演算

法迭代100次後 k-space 結果。由於模擬時直接將樣品的傅立葉轉換帶入為遠場繞射強度，因此在我們在意的 density region 幾乎完美還原（圖1）。

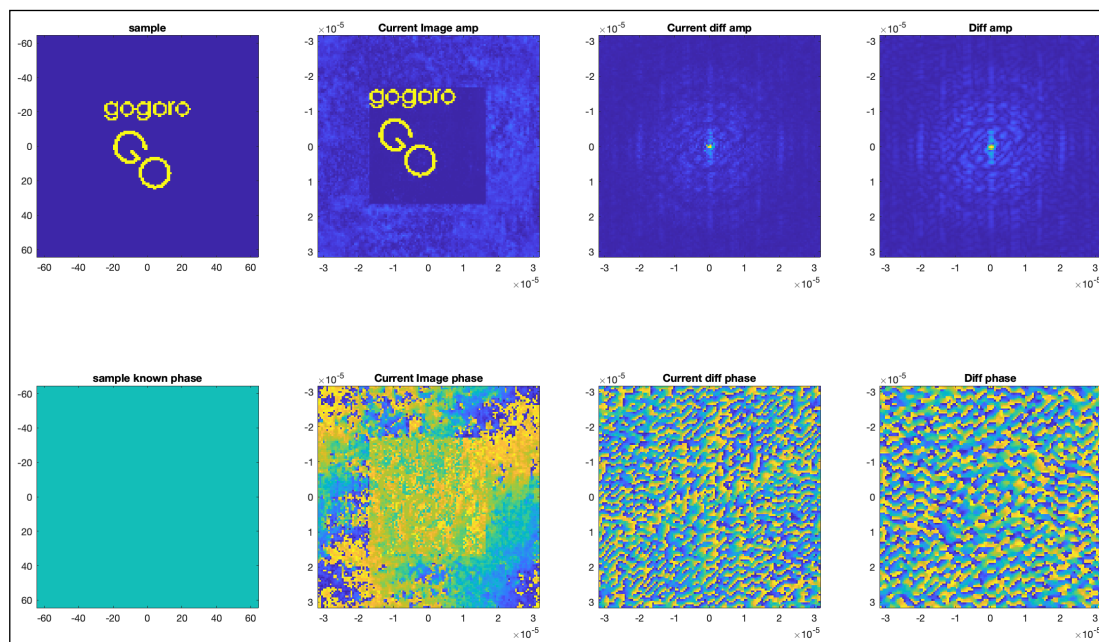


圖1

再來模擬使用第二種掃描式 CDI，模擬使用三種 $s(j)$ 掃描方法，分別為網格、同心圓及費馬螺線。網格生成方式為取一平方數 $c^2$ 為欲生成總點數，垂直與平行方向皆間隔固定step。同心圓生成方式為第 $n$ 圈以 $n * \text{step}$ 為半徑產生 $5 * n$ 點。費馬螺線生成方式是在極坐標系 $(r, \theta)$ ，以第 $n$ 點座標為 $r(n) = c\sqrt{n}$ 及  $\theta(n) = n\phi_0$ ，其中 $\phi_0 = \frac{2\pi}{\varphi^2}$ 、 $\varphi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ ，為黃金比例。為重建 $256 * 256$  pixel的圖案，以三種方法在距中心 $\pm 100$  pixel內取約100點。默認掃描順序為座標的生成順序（圖2）。

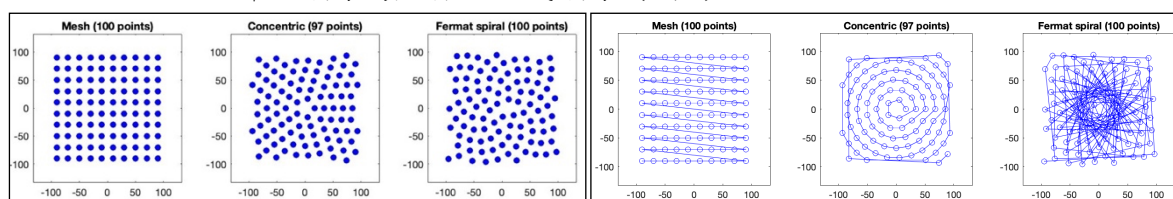


圖2

模擬時以迭代100次為完整一次 loop，前40次只更新 object，再10次以 $s(j)$ 生成順序同時更新 object 與 probe，最後50次以 $s(j)$ 隨機順序同時更新 object 與 probe。三種掃描方法皆執行五次 loop，即迭代500次後為一個重建圖案，因初始強度與相位皆隨機猜測，因此再以總共6個重建圖案再平均得最終結果。

根據模擬結果（圖3），使用網格迭代的結果有明顯格狀，與原圖案相減可以更明顯看出，是為 raster grid pathology，其原因為網格是以規則週期性排列的，會使得上述效應放大。使用同心圓與費馬螺線掃描則幾乎沒有此效應，品質比網格狀高出許多。再細看重建後的三種結果可以得出，除了網格因為有上述效應導致效果不佳，而同心

圓跟比費馬螺線重建得不相上下。

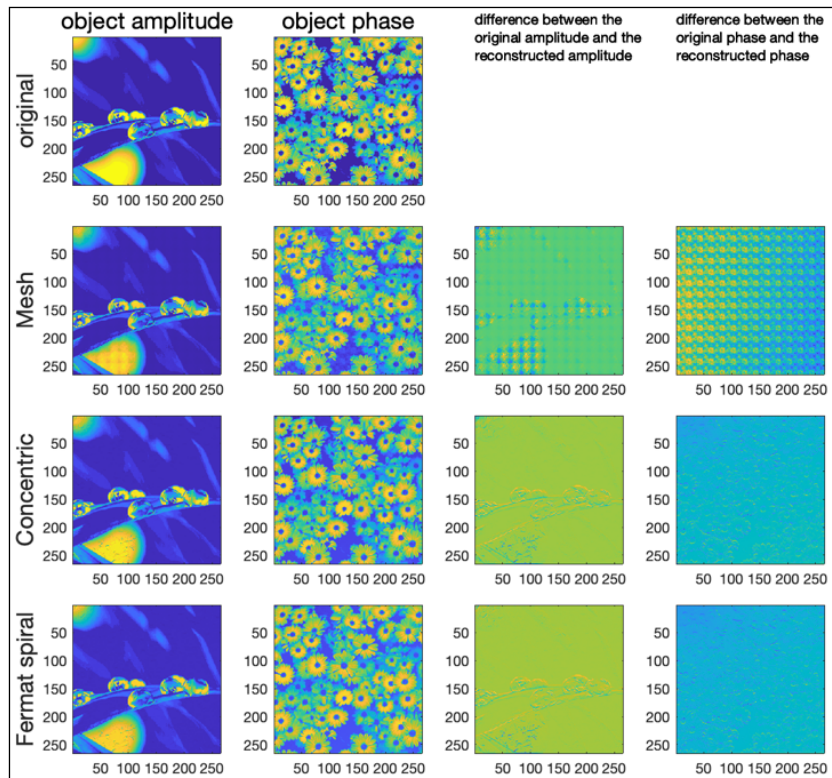


圖3

再以 R factor 與 SNR 兩種標準比較品質較高的同心圓與費馬螺線還原情形。R 用來比較重建圖案與原圖案的強度差異，越小則與原圖案越相似，重建品質越佳。SNR 用來比較每次隨機猜測經迭代後重建圖案之間的相關性，越大則越穩定，重建品質越佳。根據表3-1得知使用費馬螺線不管是 R 或者 SNR，在重建圖案的振幅與相位所得出的數據都略比同心圓佳。

$$R = \sqrt{\frac{(I_0 - I_{recon})^2}{(I_0 + I_{recon})^2}} \quad SNR = \sqrt{\frac{r_{cc}}{1 - r_{cc}}} \quad r_{cc} = \frac{\langle (I_{recon1} - \langle I_{recon1} \rangle)(I_{recon2} - \langle I_{recon2} \rangle) \rangle}{\sqrt{(\langle (I_{recon1} - \langle I_{recon1} \rangle)^2 \rangle)(\langle (I_{recon2} - \langle I_{recon2} \rangle)^2 \rangle)}}$$

表3-1

Object	amplitude		phase	
	R	SNR	R	SNR
Concentric	0.0438	30.94	0.0203	16.89
Fermat spiral	0.0386	38.31	0.0188	17.65

### III. 實驗

#### 實驗系統設計

從繞射公式得知，實空間，即 sample plane 座標定為 r，傅立葉轉換後的 k-space，即 diffraction plane 座標定為 u，兩平面間隔距離為 z，所用雷射波長為 λ。其關係為下式。

$$\begin{cases} \Delta r_{\min} * \Delta u_{\max} = z\lambda \\ \Delta r_{\max} * \Delta u_{\min} = z\lambda \end{cases}$$

為了在實驗室空間滿足遠場條件，可以加入凸透鏡強制將遠場繞射提前至焦平面，凸透鏡焦距為  $f$ 。其關係為下式。

$$\begin{cases} \Delta r_{\min} * \Delta u_{\max} = f\lambda \\ \Delta r_{\max} * \Delta u_{\min} = f\lambda \end{cases}$$

因擺放 CCD 位置是收集繞射圖案的平面，即 CCD chip 平行於凸透鏡焦平面，所以將 CCD pixel size 代入  $\Delta u_{\min}$ ，CCD chip size 代入  $\Delta u_{\max}$ ，即可以換算出偵測之繞射圖案可描述實空間樣品的大小  $\Delta r_{\max}$  與解析度  $\Delta r_{\min}$ 。需注意理論模擬時是假設移動雷射光源，而樣品與 CCD 不動，實作時，實驗室三軸控制器只適合移動輕薄的樣品，雷射光源與 CCD 需固定不宜移動，因此 CCD 取樣結果要在經過裁切， $\Delta u_{\max}$  縮小也造成可還原的實空間解析度  $\Delta r_{\min}$  下降。接著架設器材將雷射光通過衰減片與反射鏡後再垂直射入樣品，樣品後方需緊接凸透鏡將繞射圖案呈現於焦平面，CCD 即架設在焦平面收集繞射圖案（圖4）。再撰寫 LabVIEW 控制三軸平台以  $s(j)$  序列調整樣品與雷射光相對位置，同時控制 CCD 取樣繞射圖案，將繞射圖案轉換成矩陣送入 Matlab 還原。

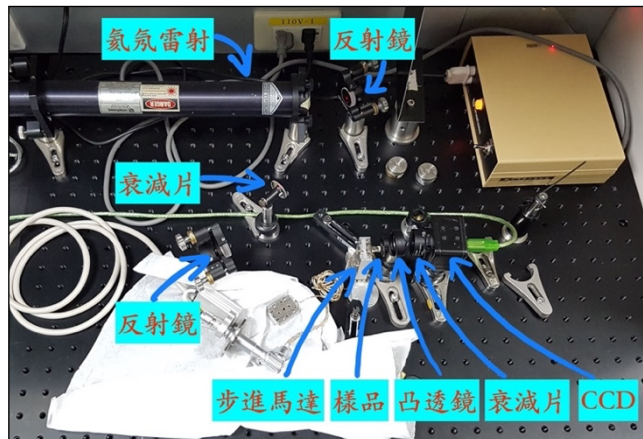


圖4

## 實驗結果

這次專題所使用的樣品為 THORLABS 的 R1L1S1N，其中包含 Grid Patterns、USAF 1951 Target、Star Sector 等。如圖5，利用所架設的器材對 USAF 1951 Target 中最大方格取樣繞射圖形。利用 Matlab 撰寫過取樣相位恢復演算法重建圖形，經約100次迭代後可還原出方塊，圖中第一欄為還原的樣品強度與相位，第二欄為還原的樣品傅立葉轉換後強度與相位，第三欄為取樣的繞射圖形。

可以發現還原程度與模擬有一段差距，是因為模擬時我們可以直接將樣品的傅立葉轉換帶入為已知條件，但實驗時 CCD 所取樣的圖案則受其他限制。第一是因為使用凸透鏡將遠場提前至焦平面，因此 CCD 元件需與焦平面完全平行才能取到正確的繞射圖案。第二是受限 CCD 感光能力，曝光時間長雖可以取得更完整的繞射圖案，包含越靠中心的低頻成分與邊緣的高頻成分，但是如此低頻成分易飽和，因此所得繞射圖案會失真，若要確認所有成分未飽和則可以縮短曝光時間，但高頻成分會未被偵測。

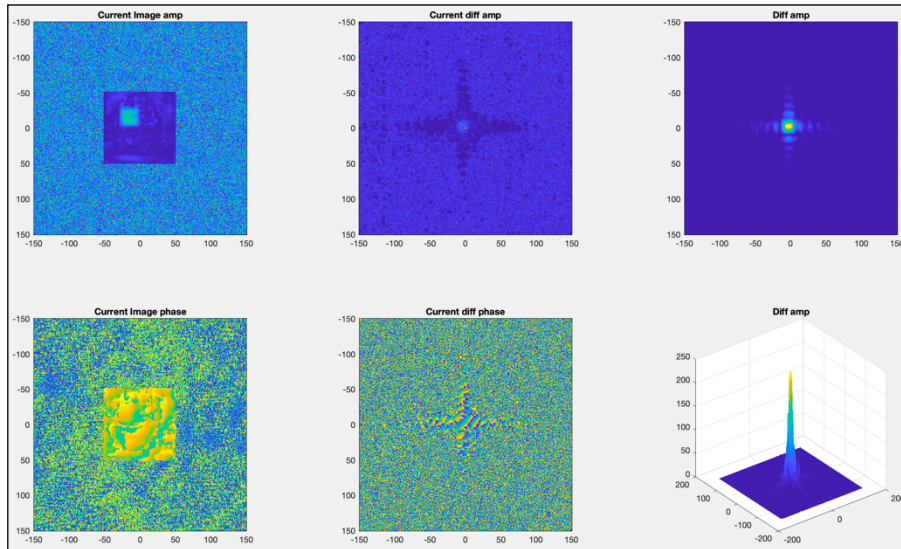


圖5

此次專題原著重在使用掃描式 CDI ePIE 演算法，但是實際在測量欲猜測的 probe  $P_0(r)$  時不盡理想，在調整曝光時間、增加衰減片、取下 CCD chip 前罩玻璃後，雖可以解決飽和、多次反射干擾等因素，但所取的光斑仍不理想（圖6）。

另外與模擬時不同的是此實驗過程需移動樣品，連帶所取樣的繞射圖形也須切割，對於實驗室所備有限的 CCD chip 大小，難以讓掃描式 CDI 的精髓發揮。因在 Matlab 進行還原還未有結果，目前仍在調整設備。因此改以不需要測量雷射光斑強度且不牽涉移動的第一種過取樣 CDI 進行驗證。

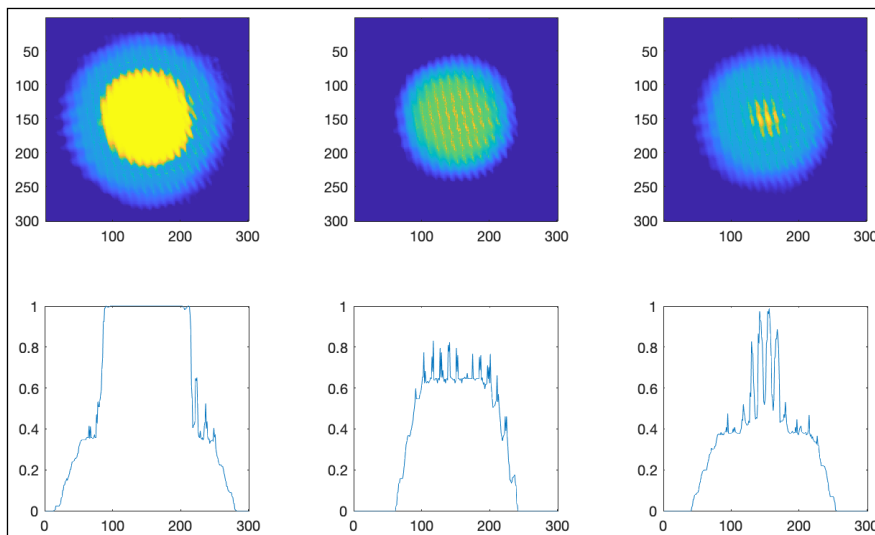


圖6

#### IV. 心得

根據此次專題，成功以兩種 CDI 技術在 Matlab 模擬還原。且過取樣技術可以透過基礎器材架設就可以在實際實驗達成是其優點，缺點是欲還原樣品、光束及可解析大小都有條件限制。而 ptychography 技術在模擬時效果良好，不但可以還原樣品強度與相位，

連雷射光斑強度與相位也能還原，但是其初始條件猜測必須根據實際狀況做調整，也是因為這方面限制，在實作時在猜測初始條件碰上問題，目前已初步排除影響雷射光的器材部分，仍然還在持續取樣還原，並找尋問題點。

經過此次專題，除了學習了基礎光學和影像處理的知識，對模擬軟體更上手，也接觸可以自動化控制設備的軟體，對未來更深度的實驗有基礎的了解。除了電腦模擬之外，透過實驗時做親自設計與架設光路，不斷修正與改良，在數十次失敗後仍成功從繞射圖案還原一簡單圖形，我認為這次專題經驗對我未來研究路上提供了許多幫助。

## V. 參考文獻

- [1] J. Miao and D. Sayre, “Acta Cryst. (2000). A56, 596-605”
- [2] J. M. Rodenburg and H. M. L. Faulkner, “Applied Physics Letters 85, 4795 (2004)”
- [3] J. M. Rodenburg, A. C. Hurst, A. G. Cullis, “Hard-X-Ray Lensless Imaging of Extended Objects”
- [4] Andrew M. Maiden, John M. Rodenburg, “An improved ptychographical phase retrieval algorithm for diffractive imaging”