

同調繞射顯微術

指導教授：陳明彰

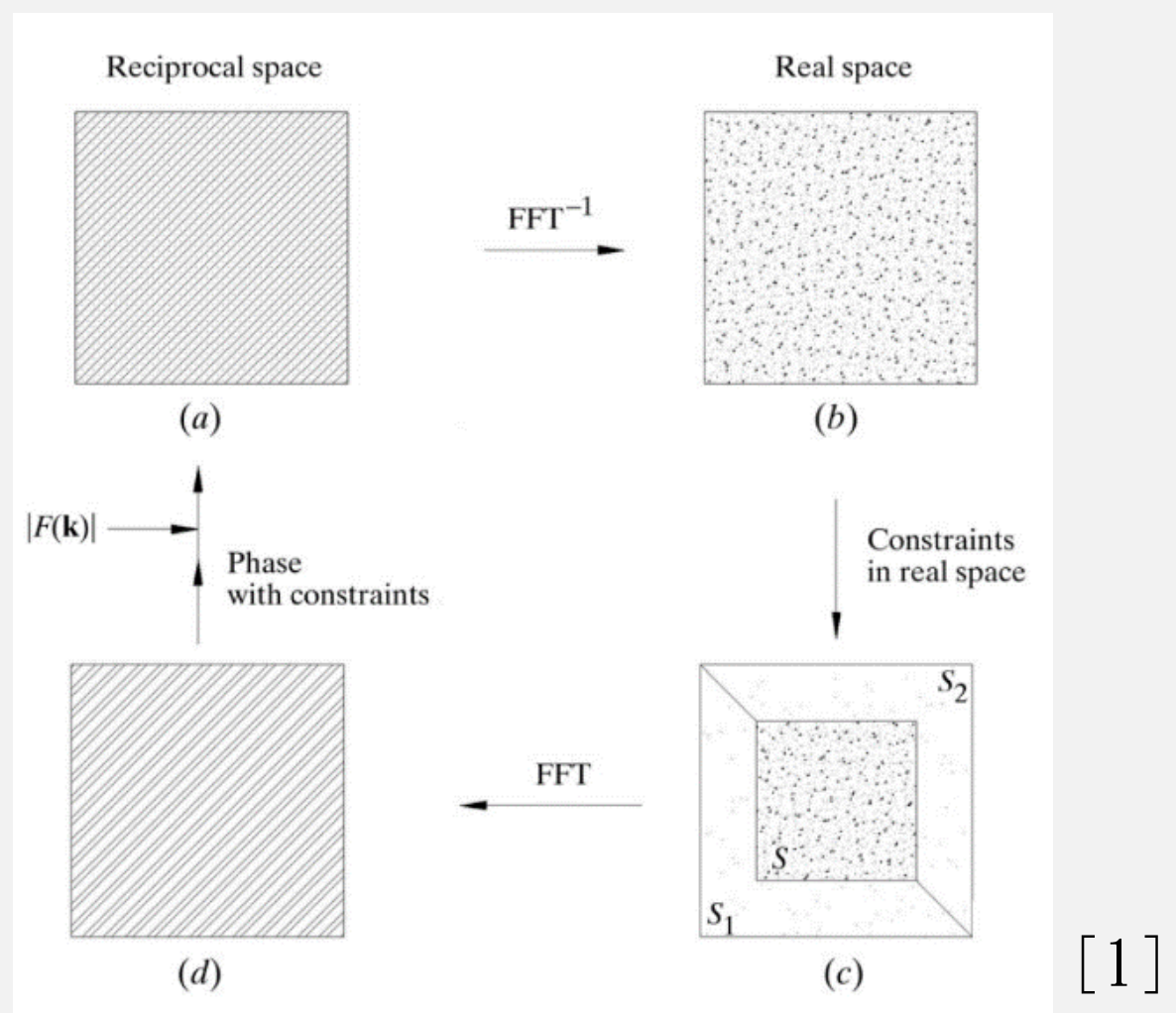
組別：A216

組員：吳炯霖、陳彥亨、彭士瑄

摘要

顯微技術一直以來在各領域上皆扮演著重要的角色，然而，傳統的光學成像方法卻存在著缺點。若要得到解析度高的影像，便需要大透鏡來收集大範圍角度的光，但其在製作時周圍容易造成相差，使得解析度受限。因此，若利用感光元件取代透鏡，使其蒐集通過樣本後繞射的光，再交由電腦運算還原樣本，便可避開像差問題，提高解析度，此方法稱為繞射顯微術(Coherent Diffraction Imaging, CDI)。然而，此技術因設備僅能測量到繞射圖形的強度資訊，而缺失了相位資訊。因此，本專題分析並運用了兩種CDI相位恢復演算法：「超取樣CDI」和「重疊關聯成像技術(Ptychography)」，藉由Matlab成功模擬還原樣本的強度和相位資訊。

超取樣技術及相位恢復演算法步驟

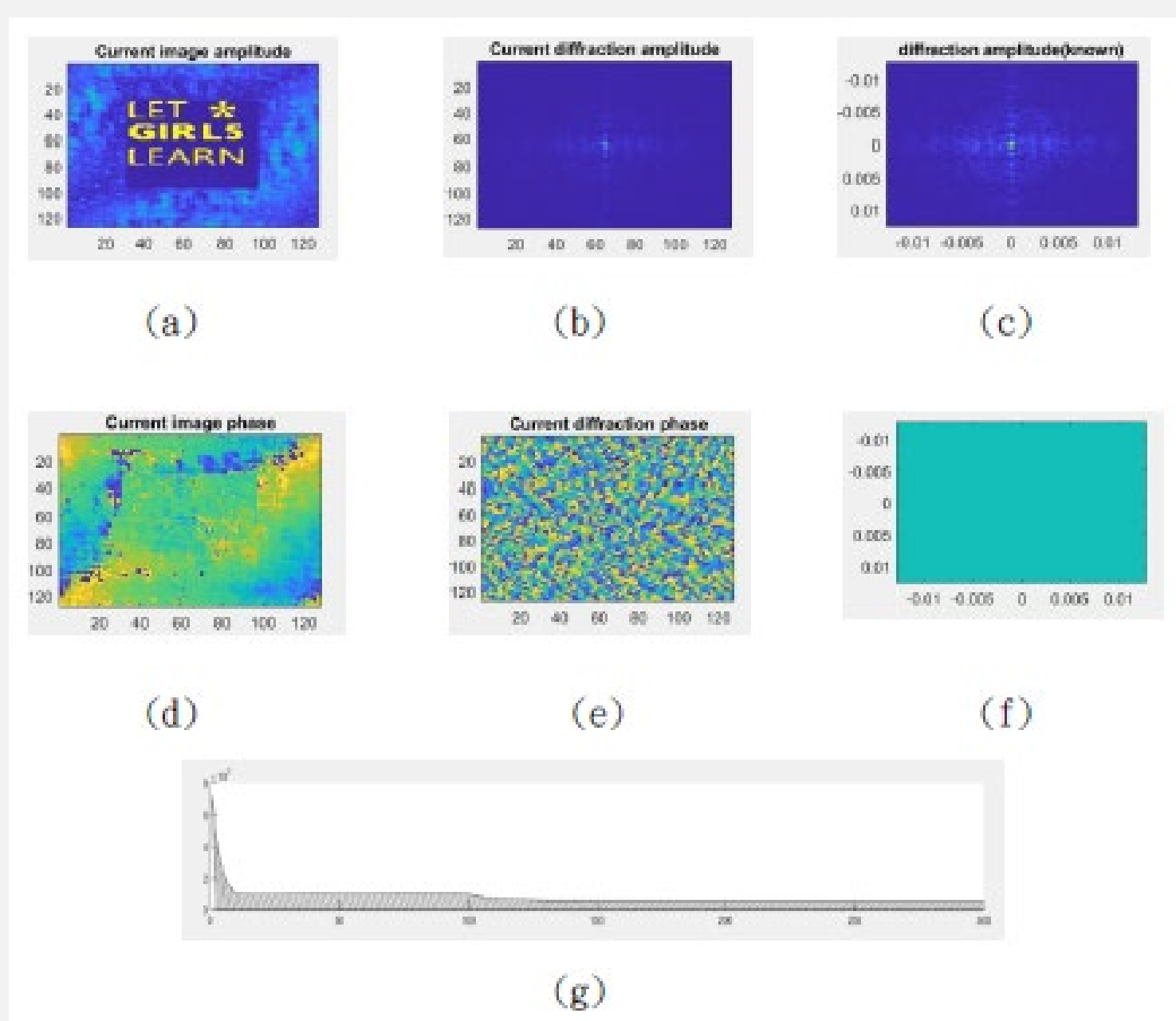


$$\text{式 2.1: } \rho_{j+1}(x) = \rho_j(x) - 0.3 \rho'_j(x), \quad x \in S \text{ and } \rho'_j(x) < 0$$

$$\text{式 2.2: } \rho_{j+1}(x) = \begin{cases} \rho_j(x) - 0.9 \rho'_j(x), & x \in S_1 \\ \rho_j(x) - 0.3 \rho'_j(x), & x \in S_2 \end{cases}$$

- 步驟1. 已知的光場強度，以及一個隨機的相位矩陣組成圖(a)
- 步驟2. 將圖(a)反傅立葉轉換後得到圖(b)
- 步驟3. 取出圖(b)內部的值(即圖(c) s)，以及外部的值(圖(c) s1, s2)。s若非實部及虛部皆為正，則利用式(2.1)，將內部的值更新，其餘不變。利用式(2.2)將外部(x 屬於s1, s2)更新。
- 步驟4. 將圖(c)傅立葉轉換，得圖(d)
- 步驟5. 回到步驟2.，直到圖(a)的光場強度平方，與感光元件蒐集得到的矩陣相當。

超取樣相位恢復演算法-Matlab模擬結果

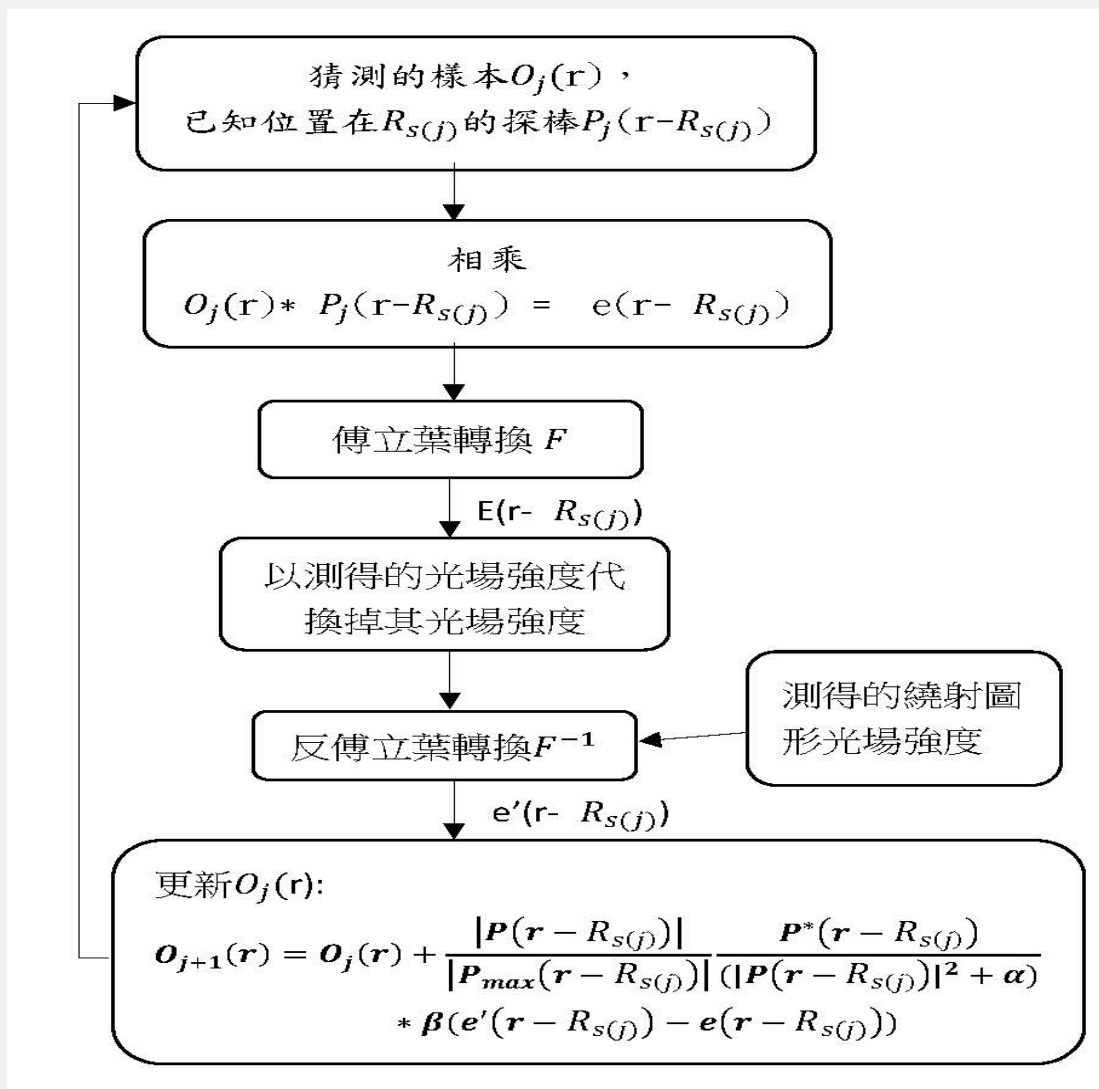


- 依靠繞射圖形的光場強度資訊所還原出的樣本的光場強度，此圖呈現的是經迭代300次後還原出的結果。
- (a)當時迭代次數的繞射圖形的光場強度資訊，本次模擬迭代次數共300次，此圖呈現的是迭代第300次的圖形。
- (b)原先已知繞射圖形的光場強度資訊
- (c)圖(a)對應的相位資訊
- (d)圖(b)對應的相位資訊
- (e)原先已知繞射圖形所缺失的相位資訊
- (f)迭代運算從0到300次時，圖(b)與圖(c)繞射圖形的誤差。由圖可見誤差在大約迭代120、130次後逐漸收斂穩定。

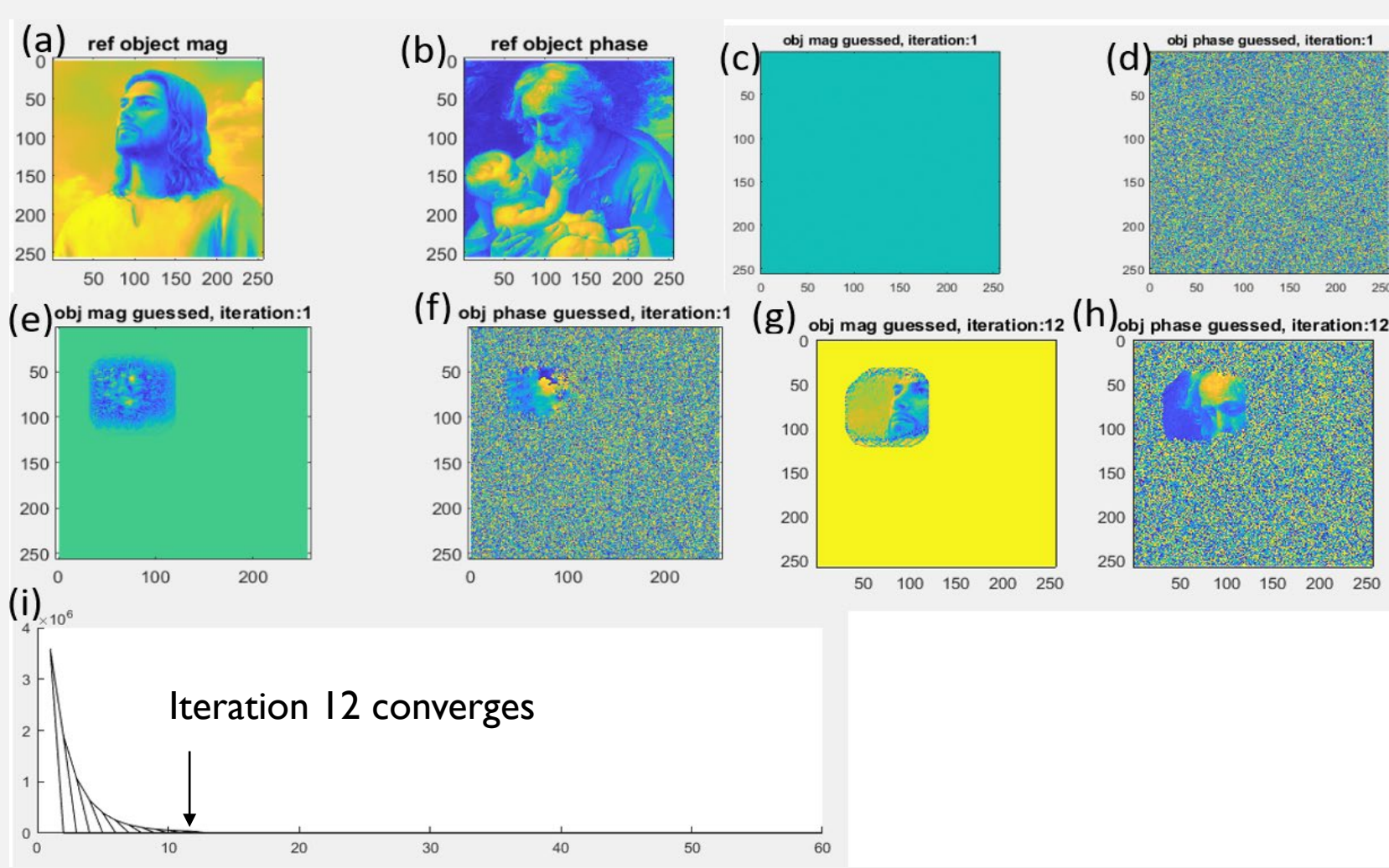
重疊關聯成像技術(Ptychography) 及 PIE演算法模擬

Ptychography利用探棒照射到樣本的不同位置，對每一個位置蒐集在其遠場繞射的圖形。在本專題中我們蒐集25個繞射圖形，針對一開始亂數產生的假想樣本進行更新。依照 Ptychographical Iterative engine (PIE) 演算法，如圖(一)，反覆利用傅立葉轉換與反傅立葉轉換，每次更新樣本被探棒照射的一個區域，直到25個區域被更新，重複演算法直到收斂，樣本被還原出來，模擬結果見圖(二)。

我們在模擬中使用25個探棒位置，探棒的半徑為30pixel，每次移動10pixel，使用 $\alpha=0.5$, $\beta=0.6$ 。



圖一 PIE演算法流程圖



圖二 模擬結果

- (a)欲還原樣本的光場強度
- (b)欲還原樣本的相位
- (c)初始猜測的樣本光場強度
- (d)初始猜測的樣本光場相位
- (e) 1次更新後樣本光場強度
- (f) 1次更新後的樣本光場相位
- (g)12次更新後的樣本光場光場強度
- (h) 12次更新後的樣本光場相位
- (i)假想繞射圖形光場強度與實測繞射遠場光場強度的差異，可以觀察到第1次時差異仍大，直到第12次時非常接近，表示已收斂

結論

在這次專題中，我們透過Matlab模擬重現了使用超取樣技術的無透鏡繞射顯微術(CDI using oversampling technique)，以及使用探棒於不同位置照射樣本得到的多個遠場繞射圖形的重疊關聯成像術(Ptychography)，模擬使用感光元件蒐集到的繞射遠場亮度資訊，藉相位恢復演算法及 PIE演算法的幫忙，找回樣本的光場強度以及相位資訊。無透鏡繞射顯微術在光學的應用中能夠解決光學透鏡品質對於解析度的限制，將解析度往比奈米等級更小的方向推進。利用這項技術高解析度不失真，以及Ptychography可以一次對大面積的樣本進行放大[3]的特性，使得生物樣本(細胞)，以及材料科學的樣本，能夠在天然存在的環境中被放大，對於生物以及材料科學的觀察能夠有實質的幫助。期望在未來發展中，可以將二維的技術延伸向三維。並且隨著演算法的進步使得收斂速度更快，實現即時放大，為3D斷層掃描，以及顯微技術帶來突破性發展[2]。

參考資料

- [1] J.Miao, D.Sayre, On possible extensions of X-ray crystallography through diffraction-pattern oversampling, Acta Cryst. (2000). A56, 596-605.
- [2] J.M. Rodenburg, I. A.C. Hurst, A.G. Cullis, R. Dobson, F. Pfeiffer, Bunk, C. David, K. Jefimovs, and I. Johnson, Hard-X-Ray Lensless Imaging of Extended Objects, PHYSICAL REVIEW LETTERS 98, 034801 (2007)
- [3] M. J. Humphry, B. Kraus, A.C. Hurst, A.M. Maiden & J.M. Rodenburg, Ptychographic electron microscopy using high-angle dark-field scattering for sub-nanometre resolution imaging, Nature Communications vol. 3, 2012