

無透鏡繞射顯微術

指導教授:陳明彰 組別:A216

組員:吳炯霖、陳彥亨、彭士瑄

摘要

一直以來，顯微技術在材料、生物、醫學等領域上扮演著重要的角色，然而，傳統的成像方法仍存在著缺點。在使用透鏡顯微時，實際想觀察的是透過樣本的光。當光通過樣本會產生繞射，此時透鏡的作用是蒐集繞射的光，並將其聚焦於屏幕上，使其出現原來透過樣本的光。若要得到解析度高的影像時，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因為品質管控不佳而造成相差，使得解析度受限。若直接利用較大的感光元件取代透鏡，使其蒐集通過樣本後繞射的光，再交由電腦運算還原出樣本，便可避開透鏡周圍產生像差造成失真的問題，提高解析度，此方法稱為無透鏡繞射顯微術(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:超取樣同調繞射顯微術(Coherent Diffraction Imaging using oversampling technique)和重疊關聯成像技術(Ptychography)。

在超取樣同調繞射顯微術中，採用了超取樣技術搭配相位恢復演算法對單一繞射遠場圖形進行相位恢復和圖像重建。此演算法利用傅立葉轉換，來回轉換於實空間樣本資訊與倒易空間中繞射遠場的資訊之間，並使用2個邊界條件，使轉換過程中，假想的遠場繞射資訊最後會收斂到實際遠場的繞射資訊。至於在Ptychography技術中，透過在多個位置照射樣本，可以得到多張部分重疊的遠場繞射圖形，接著運用PIE(Ptychography Iterative Engine)相位恢復演算法，來回轉換於實空間與倒易空間。此技術依靠著重疊處的相關信息，協助改善超取樣技術中相位恢復收斂慢的問題，且亦有提高圖形解析度，對大面積樣本放大等優點。

本專題便是運用上述兩種CDI相位恢復演算法，透過Matlab成功模擬還原樣本的光場強度以及相位資訊。

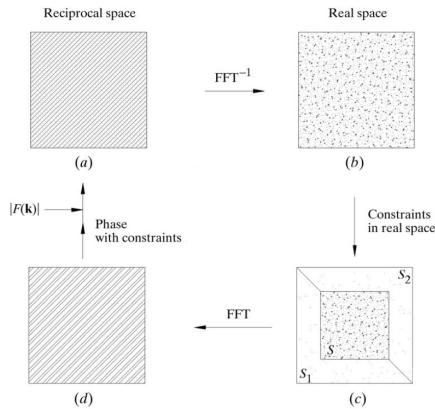
超取樣CDI相位恢復演算法

一、 原理

在傅立葉光學中，當平面光波照射到樣本時，會在遠場產生繞射現象，是為遠場繞射(Fraunhofer Diffraction)。當把屏幕至於焦點上時，其所呈現的繞射

圖形的光場分布由光場強度和相位所組成。但因偵測器(Detector)在偵測時，無法記錄到相位資訊，導致樣本圖形因缺少資訊而無法完整還原。此時就須藉由超取樣技術(Oversampling technique)來解決問題。在僅知道繞射圖形的情況下，以高於Nyquist frequency的頻率對繞射圖形做超取樣時，可以在實空間樣本周圍產生無密度區域(No-density region)，此區域可以透過相位恢復演算法來還原原先記錄不到的相位。

因此，我們透過「相位恢復演算法」(Phase Retrieval Algorithm)還原通過樣本的入射光源，包含其光場強度(Amplitude)以及相位資訊(Phase)。利用傅立葉轉換，來回轉換於實空間(Real Space)樣本資訊與倒易空間(Reciprocal Space)中的繞射遠場的資訊，而過程中使用2個邊界條件，使得轉換過程中假想的遠場繞射的資訊收斂到實際遠場繞射資訊。其演算法步驟[1]如下：



圖一 傳立葉轉換流程[1]

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

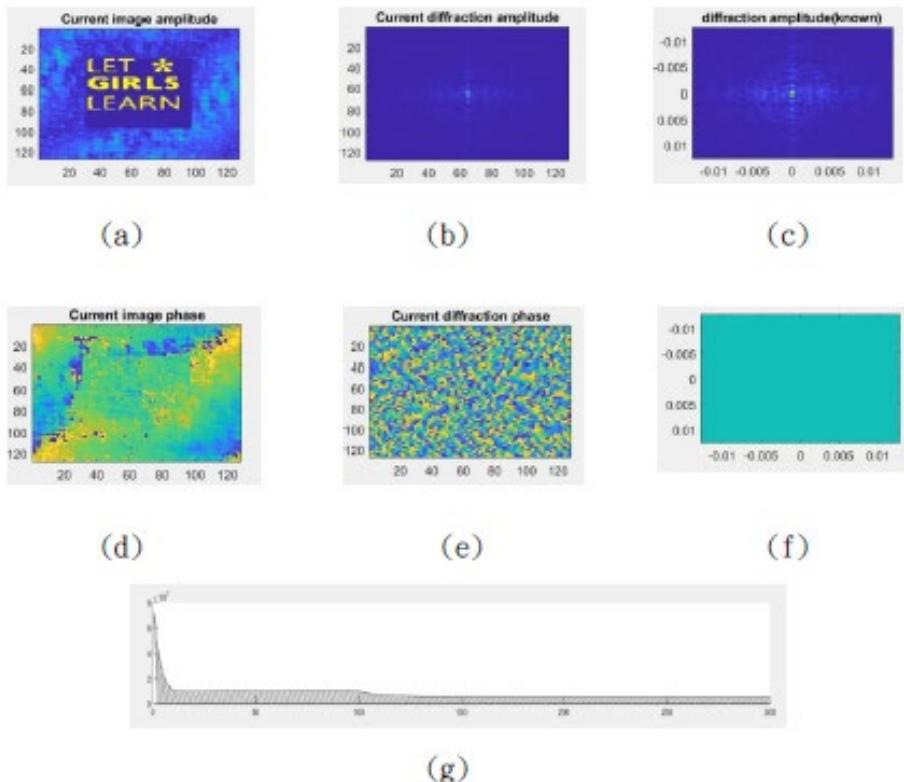
$$\text{式 2.2: } \rho_{j+1}(x) = \begin{cases} \rho_j(x) - 0.9 \rho'_j(x), & x \in S_1 \\ \rho_j(x) - 0.3 \rho'_j(x), & x \in S_2 \end{cases}$$

- 匯入模擬實驗室中感光元件蒐集得到的矩陣。開根號得到已知的光場強度資訊。
- 製作一個相位矩陣，內容隨機，範圍由 $-\pi \sim \pi$ 。利用已知的光場強度，以及製作的相位，得到倒易空間的圖 1(a)。
- 對圖 1(a)進行反傅立葉轉換。得到圖 1(b)矩陣(其中的值以 $\rho'_j(x)$ 表示第j代中，在x位置的值)。
- 取出圖 1(b)內部的值以(即圖 1(c)中的 s)，以及外部的值(圖 1(c)的 s1, s2)。內部的值中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。(其中的值以 $\rho_j(x)$ 表示第 j 代中，在 x 位置的值。 ρ_{j+1} 為下一代的 ρ_j)，利用式(2.2)將外部(x 屬於 s1, s2)更新。
- 此時我們持續用 ρ_j 的值，對圖 1(c)進行傅立葉轉換。得到圖 1(d)
- 套入邊界條件 2: 保留第 4 步所得圖 1(d)的相位資訊，光場強度以已

知的繞射遠場光場強度替換。得回圖 1(a)。

7. 計算誤差: $\Sigma |(\text{感光元件的遠場繞射光場強度}) - (\text{假想繞射遠場光場強度})|^2$
8. 回到第三步。直到圖 1(a)的光場強度平方，與感光元件蒐集得到的矩陣相當，最終完成收斂。

二、Matlab模擬結果



圖二 模擬結果

註1:模擬一開始時，僅知道繞射圖形的光亮度(intensity)，是為128X128的實數矩陣，接著，針對其取絕對值和開根號，最後得到繞射圖形的光場強度(圖c)。

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。

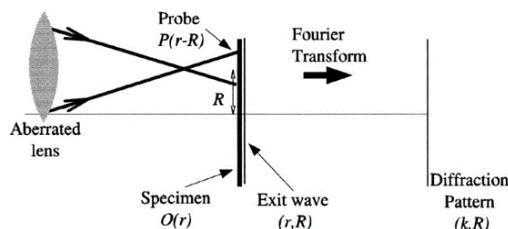
- (a)當時迭代次數的繞射圖形的光場強度資訊，本次模擬迭代次數共300次，此圖呈現的是迭代第300次的圖形。
- (b)原先已知繞射圖形的光場強度資訊(註1)
- (c)圖(a)對應的相位資訊
- (d)圖(b)對應的相位資訊
- (e)原先已知繞射圖形所缺失的相位資訊
- (f)迭代運算從0到300次時，圖(b)與圖(c)繞射圖形的誤差。由圖可見誤差在

大約迭代 120、130 次後逐漸收斂穩定。

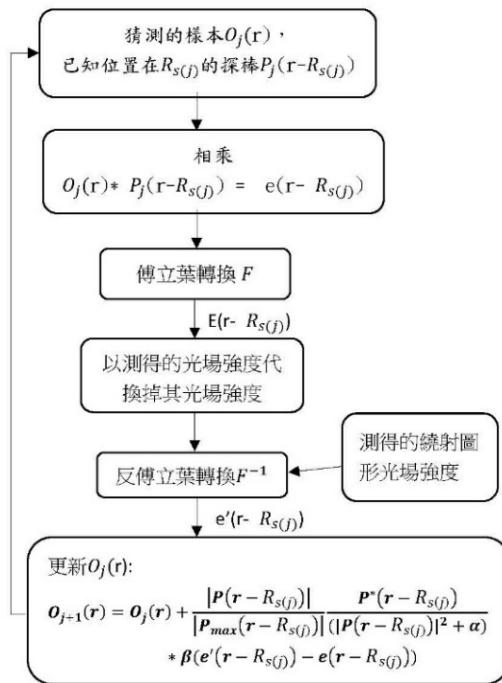
重疊關聯成像技術(Ptychography)

一、原理

重疊關聯成像技術(Ptychography)，又稱「掃描式無透鏡繞射顯微術」，與無透鏡繞射顯微數(CDI)同樣利用遠場繞射圖形還原出樣本的光場強度以及相位，差別在於使用的繞射圖形由一張，變成多張有部分資訊重疊的遠場繞射圖形。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，裝置如圖三。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，如圖四，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。Ptychography 由於相鄰探棒照射的區域有部分重疊，使得所蒐集到的遠場繞射圖形的資訊有重複的部分，這多出來的資訊能夠加快收斂的速度，以及使得解析度高過瑞力判據(Rayleigh Criterion)對於解析度的限制。另外，在可以收斂的情況下，由於可還原的位置可以隨著探棒在移動過程中所照射的總面積決定，因此可以照射的區域面積可以大過僅使用一張繞射圖形的 CDI[3]。



圖三 Ptychography 實驗裝置圖[2]



圖四 PIE 演算法流程[3]

二、Ptychographical Iterative engine (PIE) 演算法步驟[2]:

項目	符號
探棒(Probe, 又稱 illumination function)	$P(r)$
樣本(Object function)	$O(r)$
透過樣本的光(Exit Wave)	$e(r)$
已知的繞射遠場圖形	$E_{\text{known}}(r-R)$

註 1. 模擬實驗室情況: 透過已知的探棒在不同位置照射樣本，得到若干個 (ex. 5*5) 繞射遠場圖形 $E_{\text{known}}(r-R)$ 。

註 2. 探棒 $P(r)$ 與樣本 $O(r)$ 皆為複數函數，皆有其強度與相位資訊，由矩陣表示。

註 3. $R_{s(j)}$: 表第 J 次 iteration，位置 R 的值為 $s(j)$

- I. 隨機創立一個樣本矩陣 $O(r)$ ，如 $256*256$ 矩陣，為猜想的樣本
- II. 將 $O(r)$ 與移動到特定位置的探棒 $P(r-R_{s(j)})$ 相乘。得到在位置 R 透過樣本的光 $e(r-R) = O(r) * P(r-R_{s(j)})$ 。
- III. 對 R 位置透過樣本的光，進行傅立葉轉換得到遠場繞射的圖形 $E(r-R_{s(j)})$
- IV. 遠場繞射的圖形 $E(r-R_{s(j)})$ 為複數矩陣，找出其光場強度，與其相位。
- V. 保留步驟 4 中的相位，利用已知的位置 $R_{s(j)}$ 的繞射遠場光場強度，與經傅立葉轉換後的繞射遠場圖形 $E(r-R)$ 的相位，得到

$$E_{\text{improve}}(r - R_{s(j)}) = \text{amp}\left(E_{\text{known}}(r - R_{s(j)})\right) * \text{phase}\left(E(r - R_{s(j)})\right)$$

VI. 反傳立葉轉換回到實空間中在位置 R 的更新後 Exit Wave, $e'(r - R_{s(j)})$ 。

VII. 利用以下更新樣本：

$$O_{j+1}(r) = O_j(r) + \frac{|P(r - R_{s(j)})|}{|P_{\max}(r - R_{s(j)})|} \frac{P^*(r - R_{s(j)})}{(|P(r - R_{s(j)})|^2 + \alpha)} * \beta(e'(r - R_{s(j)}) - e(r - R_{s(j)}))$$

VIII. 將探棒移到下個位置 $P(r - R')$ ，變作下一輪的 $P(r - R_{s(j)})$

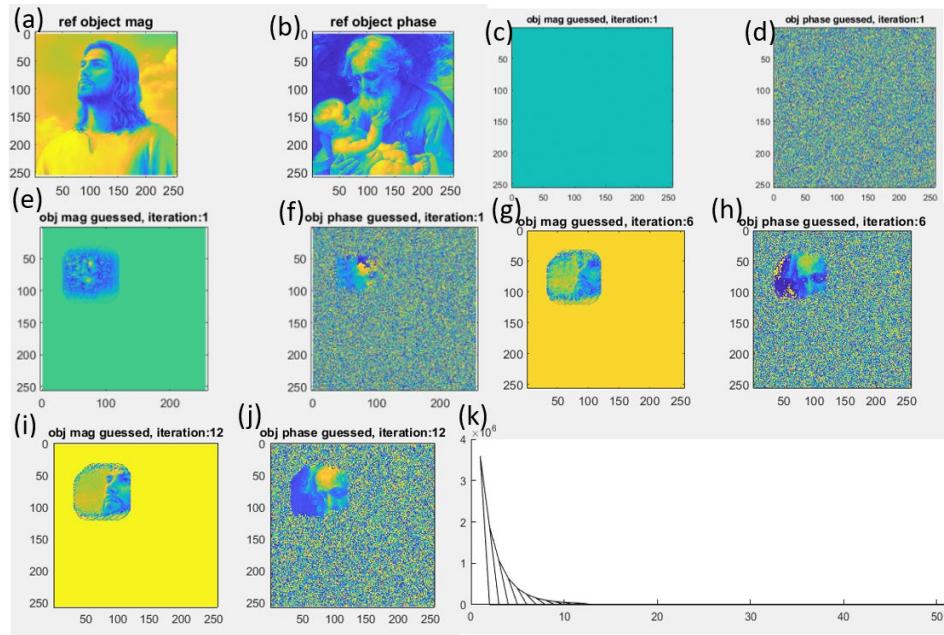
IX. 計算已知在位置 R 的遠場繞射圖形的光亮度 $|E_{\text{known}}(r - R_{s(j)})|^2$ ，與位置 R 的猜想遠場繞射圖形的亮度 $|E(r - R)|^2$ 的差異。其中，誤差公式為：

$$\text{error} = \frac{(|E_{\text{known}}(r - R_{s(j)})|^2 - |E(r - R_{s(j)})|^2)^2}{N}, \quad N: \text{Exit wave 矩陣像素總數}$$

X. 重複步驟 2 到 8，直到 error 降至不再浮動

三、模擬結果：

我們在已知探棒(Probe)光場強度及相位的情況下，照射 25 個位置(總照射面積如圖五(i)顯現圖像的區域)，得到 25 張繞射圖形，還原一開始為亂數的樣本資如圖五(c)(d)。當經過 PIE 演算法後，整張樣本更新一次的資訊如圖五(e)(f)，6 次更新後得樣本資訊如圖五(g)(h)，12 次更新後如圖五(i)(j)，還原部分已經接近原圖像圖五(a)(b)。利用遠場繞射的光場強度與實際繞射遠場的差異觀察收斂程度如圖五(k)，可以發現更新 1 次後及 6 次後的遠場繞射的光場強度與實際繞射遠場的差異仍大，直到第 12 次時接近零，表示收斂。如圖五(i)(j)已經接近圖五(a)(b)。



圖五 Ptychography 模擬結果

(a) 欲還原的樣本光場強度 (b) 欲還原的樣本相位 (c) 原始猜想樣本光場強度 (d) 原始猜想樣本相位 (e) 更新一次樣本光場強度 (f) 更新一次樣本相位 (e) 更新 6 次後樣本光場強度 (f) 更新 6 次後樣本相位 (i) 更新 12 次後樣本光場強度 (j) 更新 12 次後樣本相位 (k) 遠場繞射的光場強度與實際繞射遠場的差異， $error = \frac{(|E_{known}(r-R)|^2 - |E(r-R)|^2)^2}{N}$ ，N: Exit wave 矩陣像素總數

註 1. 模擬結果是使用: $\alpha = 0.5, \beta = 0.6$ ，更新公式:

$$O_{j+1}(r) = O_j(r) + \frac{|P(r-R)|}{|P_{max}(r-R)|} \frac{P^*(r-R)}{(|P(r-R)|^2 + \alpha)} * \beta(e'(r-R) - e(r-R))$$

註 2. 探棒直徑約 30 pixel，每次移動位置為 10pixel，共移動 25 個位置，相鄰 probe 重疊率為: 58.38%。

心得

藉由這次專題，我們先是去修習了光電工程課程，對光電領域有深一點認識之後，又再鑽研 matlab 的使用方式，最後是將超取樣 CDI, Ptychography 技術用 matlab 實現。首先，我們在光電工程這門課中，了解到使用光學透鏡解析

成像時，若要得到解析度高的影像，需要能夠收集光的角度範圍大的透鏡，但是半徑越大的透鏡，在製作上周圍的部分容易因為品質管控不易造成相差，使得解析度受限，於是我們有了動機去探究繞射顯微術，包含 Ptychography 以及超取樣 CDI 技術，使用感光元件蒐集繞射遠場圖形資料後更電腦運算取得樣本樣貌。但由於時間因素，本次專題還來不及正式進入實驗室架設儀器做實驗，建議學弟妹選專題要提早一年找好有興趣的主題，再詢問該專題教授需要先修習哪些相關課程，提早去修好，不要像我們跟著專題一起修，早點修完先備知識，之後比較有餘裕進實驗室做實驗。感謝老師跟組員一年來的付出，這門課十分扎实，讓我們 matlab 的能力有顯著提升，看到模擬成果成功的喜悅也十分深刻難忘，專題真是帶給我們滿滿回憶跟能力提升。

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 and H. M. L. Faulkner, A phase retrieval algorithm for shifting illumination, *Applied Physics Letters* 85, 4795 (2004).
- [3] J.M. Rodenburg,1, 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)