

· 特邀综述 ·

# Ptychography 相位成像及其关键技术进展

潘兴臣<sup>1,2\*</sup>, 刘诚<sup>1,2</sup>, 陶华<sup>1,2</sup>, 刘海岗<sup>3</sup>, 朱健强<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>中国科学院上海光学精密机械研究所, 中国科学院高功率激光物理重点实验室, 上海 201800;

<sup>2</sup>中国科学院中国工程物理研究院高功率激光物理联合实验室, 上海 201800;

<sup>3</sup>中国科学院上海高等研究院, 上海同步辐射光源, 上海 201204

**摘要** Ptychography 是近些年快速发展起来的一种新型相位恢复技术, 通过对待测样品以小于照明光直径的步长扫描后, 利用迭代计算可以重建出照明光和样品复振幅分布, 是一种理论分辨率为衍射极限的非透镜相位成像技术。虽然其提出初期受限于基本假定条件, 但近些年随着相关研究的跟进, 人们对 Ptychography 算法特性的理解逐渐深入, 算法也日趋成熟, 在可见光、X 射线和电子束等领域已被广泛应用于相位成像、波前诊断和光学计量, 因此针对影响重建过程和精度的关键因素, 如模态多样化、扫描误差、光斑误差、距离误差、样品厚度不可忽略等进行了总结, 并讨论了针对上述问题的关键技术进展。

**关键词** 成像系统; 相位恢复; 相干衍射成像; 层叠扫描相干衍射成像; 迭代计算

中图分类号 O438

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202040.0111010

## Phase Imaging Based on Ptychography and Progress on Related Key Techniques

Pan Xingchen<sup>1,2\*</sup>, Liu Cheng<sup>1,2</sup>, Tao Hua<sup>1,2</sup>, Liu Haigang<sup>3</sup>, Zhu Jianqiang<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Key Laboratory of High Power Laser and Physics, Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China;

<sup>2</sup>National Laboratory on High Power Laser and Physics, China Academy of Engineering Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China;

<sup>3</sup>Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China

**Abstract** Ptychography is a newly developed phase-retrieval technique based on lighting-probe scanning of a specimen in which the scanning step is smaller than the probe diameter. By using an iterative calculation, the complex-amplitude distributions of the probe and the specimen could be reconstructed simultaneously. Ptychography is a non-lens phase imaging technique with theoretically diffraction-limited resolution. Initially, the performance of Ptychography is limited by its basic assumptions. With the development of related researches in recent years, its characteristics have been gradually understood, and it has become increasingly mature as well. Nowadays, Ptychography has been applied to phase imaging, wavefront diagnostics, and optical metrology in the fields of visible, X-ray, and electrons. This paper discusses key factors that affect the reconstruction process and accuracy, including multiple modes, scanning errors, light-spot errors, distance errors, and non-negligible specimen thickness, and summarizes a development of key techniques to help overcome these factors.

**Key words** imaging systems; phase retrieval; coherent diffractive imaging; Ptychography; iterative calculation

**OCIS codes** 110.3010; 100.5070; 120.5050

## 1 引 言

相干衍射成像(CDI)是一类利用衍射光斑并通

过迭代计算重建波前信息的相位恢复技术,其基本概念于 1969 年<sup>[1-3]</sup>被提出。G-S (Gerchberg-Saxton) 算法由 Gerchberg 等<sup>[4-5]</sup>提出,后来

收稿日期: 2019-09-30; 修回日期: 2019-11-03; 录用日期: 2019-11-26

基金项目: 国家自然科学基金(61827816, 11875308, 61675215)、中国科学院科研仪器设备研制项目(YJKYYQ20180024)

\* E-mail: xchpan@siom.ac.cn

Fienup<sup>[6]</sup>对其进行了改进,提出了被广泛应用的ER (Error-Reduction)、HIO (Hyrid Input-Output)等算法,这些算法属于非透镜相位成像技术,对透镜的要求不高,且理论上能够达到衍射极限精度,是X射线和电子束成像领域中的重要成像手段,但由于其成像范围有限和收敛性问题,这类技术发展相对缓慢。但2004年Ptychography算法<sup>[7-8]</sup>的提出,改变了这一趋势,相位恢复技术得到了快速发展。Ptychography这个词是由Hoppe<sup>[1]</sup>提出来的,用以表示通过卷积定理来解决相位恢复问题的方法,最初用于解决X射线和电子束成像中的晶体测量问题。Ptycho来自希腊语“πτυξ”,意思是“重叠”,因此Ptychography算法的特点之一就是相邻两次扫描位置的扫描区域部分重叠,国内也有人将其翻译为层叠扫描相干衍射成像<sup>[9]</sup>。在层叠和扫描过程引入较高的数据冗余性,可以显著提升收敛性,而且理论上成像范围也可以无限拓展,特别地,将传统的扫描电子显微镜进行简单改装后就可以实现Ptychography测量光路,且其抗噪能力和成像精度都明显优于传统的透射电子显微镜<sup>[10-11]</sup>。虽然扫描过程意味着数据量和计算量的显著增加,但随着计算机硬件性能的显著提升,计算负载已不是关键问题。在基础迭代引擎PIE(ptychographic iterative engine)<sup>[8]</sup>的基础上,已衍生出大量的核心算法,例如:可以同时重建照明光的ePIE (extended ptychographic iterative engine)<sup>[12]</sup>,可以解决多模式问题的多状态Ptychography<sup>[13]</sup>,位置修正算法pcPIE(position-correcting ptychographical iterative engine)<sup>[14-15]</sup>,可以分层成像的3PIE (three-dimensional ptychographic iterative engine)<sup>[16]</sup>,SR-PIE (super resolution ptychographic iterative

engine)<sup>[17]</sup>,快速扫描的fly-PIE(fly ptychographic iterative engine)<sup>[18]</sup>,单次曝光Ptychography<sup>[19-20]</sup>以及拓展到频域的超分辨率显微成像技术FPM (Fourier ptychographic microscopy)<sup>[21]</sup>等。这些算法解决了限制Ptychography算法性能的诸多关键因素,已进入实用化阶段。借助其较强的波前重建能力和数值反演特性,这些算法不仅可用于解决可见光、X射线、电子束等不同波段的相位成像、波前参数诊断和光学计量等问题,而且易与现有技术,如荧光成像<sup>[22-23]</sup>、X射线断层成像技术<sup>[24-26]</sup>、FROG (frequency-resolved optical gating)<sup>[27]</sup>、深度学习<sup>[28]</sup>等相结合,在生物医学<sup>[22, 29-30]</sup>、化学<sup>[31-32]</sup>、材料学<sup>[33-36]</sup>、光谱学<sup>[37]</sup>、计量学<sup>[38-40]</sup>和超快激光<sup>[27, 41]</sup>等领域正逐步成为标准成像和测量技术之一。

Ptychography从最开始被提出到现在已经有15年时间,它所面临的基本问题大部分已得到解决,因此本文针对所有Ptychography算法都会面临的核心问题及其解决方案,包括光源相干性、位置扫描误差、距离误差、光斑探测误差、采样要求、厚样品成像等,进行了总结和讨论。

## 2 Ptychography基本算法

Ptychography核心算法对应的光路如图1所示,照明光 $P$ 的具体分布形式对算法实现没有影响,因此图1光路以发散球面波为例。待测样品 $O$ 固定于二维平移台上,照明光 $P$ 经过待测样品 $O$ 传播距离 $D$ 后的散射光斑强度图 $I$ 由CCD记录,当二维平移台在 $(x, y)$ 平面内平移 $M$ 行 $N$ 列后,就可以获得 $M \times N$ 幅衍射光斑,从而可以实现对待测样品 $O$ 整个测量区域的扫描。在此过程中,最重要的一点是相邻两次扫描之间的扫描区域必须有部分

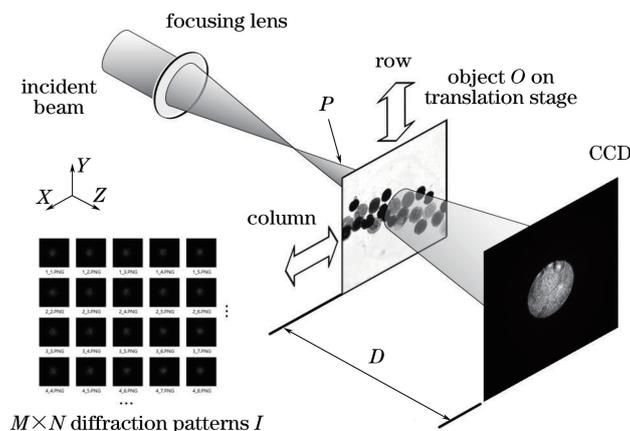


图1 Ptychography基本光路图

Fig. 1 Schematic of basic optical path of Ptychography

重叠,即扫描步长小于照明光  $P$  的直径,效果如图 2 左上角待测样品扫描示意图所示,其中实线圆为第  $j$  个照明区域,相对于原点位置,其扫描位置的平移向量为  $\mathbf{R}_j=(x_j, y_j)$ ,虚线圆表示相邻三次扫描对应的照明区域。

当数据记录完成后,需要通过迭代计算进行重建。以可以同时重建照明光和待测样品的 ePIE 算法为例进行说明,首先对待测样品和照明光分布进行初始猜测,分别为  $O_0$  和  $P_0$ ,下标为迭代次数,第  $k$  次迭代过程如图 2 所示。

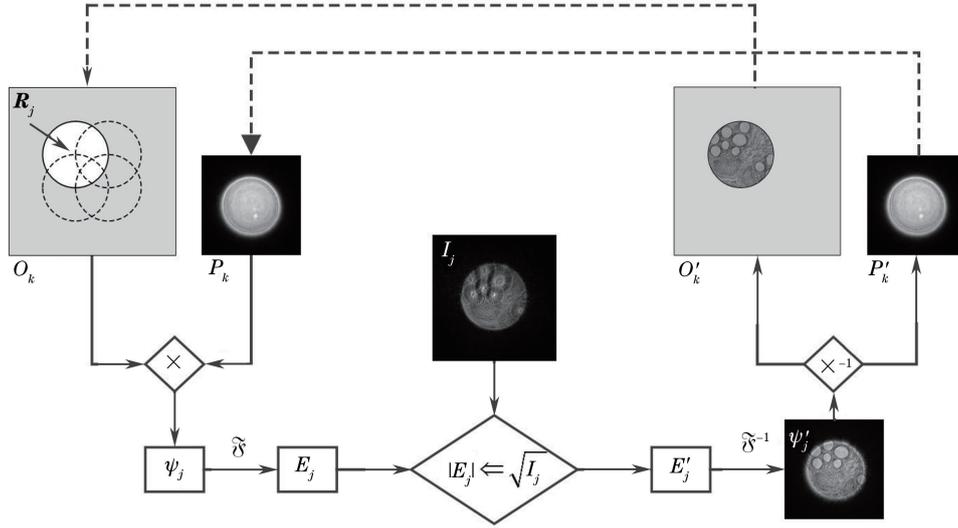


图 2 单层 Ptychography 基本迭代流程图

Fig. 2 Flow chart of primary iteration for single-layer Ptychography

1) 计算第  $j$  个扫描位置对应的出射光  $\psi_j = P_k \cdot O_k(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ , 并计算其传播距离  $D$  后的衍射光  $E_j = \mathfrak{S}(\psi_j, D) = |E_j| \exp(i\varphi_j)$ , 其中  $\mathbf{r} = (x, y)$  表示空间坐标,  $\mathfrak{S}$  表示正向传播,  $E_j$  对应的振幅和相位分别为  $|E_j|$  和  $\varphi_j$ ;

2) 利用对应的衍射光斑  $I_j$  对  $E_j$  进行修正获得  $E'_j = \sqrt{I_j} \exp(i\varphi_j)$ , 即替换振幅, 保持相位不变;

3) 将  $E'_j$  逆向传播到待测样品面, 得到修正后的出射光  $\psi'_j = \mathfrak{S}^{-1}(E'_j, D)$ , 其中  $\mathfrak{S}^{-1}$  表示逆向传播过程;

4) 按照如下公式将照明光和待测样品的分布进行分离, 得到更新后的  $O'_k(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  和  $P'_k$  为

$$O'_k(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = O_k(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) + \alpha \frac{\text{conj}(P_k)}{|P_k|_{\max}^2} (\psi'_j - \psi_j), \quad (1)$$

$$P'_k = P_k + \beta \frac{\text{conj}[O_k(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)]}{|O_k(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)|_{\max}^2} (\psi'_j - \psi_j), \quad (2)$$

式中,  $\text{conj}(\cdot)$  表示共轭,  $\alpha$  和  $\beta$  为自选常数。将  $O'_k(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  进行反向平移, 就可以得到完整的  $O'_k$ , 将  $O'_k$  和  $P'_k$  作为下一个扫描位置处的初始猜测进行迭代计算;

5) 顺次改变扫描位置并重复步骤 1)~4), 完成

一次完整的迭代过程, 重建得到最终的  $O'_k$  和  $P'_k$ , 并

$$\text{计算误差 } Q_k = \frac{\sum_j^{M \times N} \sum_{\text{Matrix}} ||E_j|^2 - I_j|^2}{M \times N}, \text{ 其中 } \sum_{\text{Matrix}}$$

示对计算矩阵求和,  $\sum_j^{M \times N}$  表示对所有扫描位置的误差求和;

6) 令  $k = k + 1$ , 且此次迭代的初始猜测设为  $O_{k+1} = O'_k$  和  $P_{k+1} = P'_k$ ;

7) 重复迭代计算过程 1)~6), 直到误差函数  $Q_k$  足够小, 完成迭代过程。

需要指出的是, 更新(1)式和(2)式有多种形式, 包括 PIE<sup>[8]</sup>、mPIE (momentum-accelerated PIE)<sup>[42]</sup> 等, 不同的更新方法的性能和适用范围有所区别, 图 3 为利用 ePIE 重建得到的一个典型实验结果, 图 3(a)、图 3(b)分别为重建的振幅和相位分布, 其中右上角插图分别为重建得到的照明振幅和相位分布。Ptychography 除了可以用于对样品进行可拓展视场成像外, 还可将照明光作为待测量, 用于确定波前分布以及进行波前参数诊断和光学计量, 具有非常广阔的应用前景。

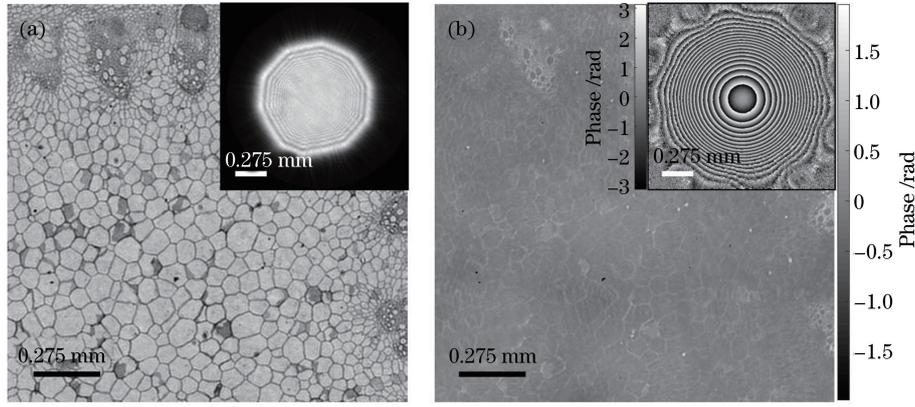


图 3 利用 ePIE 重建得到的待测样品的振幅和相位分布。(a)振幅;(b)相位

Fig. 3 Amplitude and phase distributions of specimen reconstructed by ePIE. (a) Amplitude; (b) phase

### 3 Ptychography 关键技术进展

作为 CDI 技术的一种, Ptychography 的基本迭代过程决定了其需要满足以下几个基本假设: 1) 测量系统模态唯一, 即光源为完全相干光或者照明光模态单一, 测量过程物体的分布恒定不变, 光斑探测器性能稳定无扰动; 2) 二维平移过程没有任何误差; 3) 衍射距离准确无误差; 4) 光斑探测器无测量误差, 即不受背景噪声、高斯噪声、暗电流噪声、量化噪声等的影响; 5) 待测样品无厚度; 6) 扫描时间无限制。显然, 上述假设在实际过程中都不可能完全达到, 因此在发展前期, 关于 Ptychography 成像技术, 最重要的研究内容之一就是上述假设同实际相悖时, 如何克服障碍, 达到或接近理想的收敛速度及成像精度。

#### 3.1 模态不唯一

虽然随着下一代同步辐射光源的快速发展, X 射线和电子束相干性得到了明显提升, 但光源相干性仍然是影响相位恢复技术的一个关键因素。同时, 同步辐射装置中光源的抖动现象难以避免, 在曝光时间范围内, 照明光模态也变得多样化, 这成为获得理论衍射极限精度的关键障碍。在数据测量过程中, 若待测样品结构发生了变化(如在长时间 X 射线扫描下, 生物样品结构会发生改变甚至碳化)、探测器抖动等都会和基本模型相悖, 影响重建质量。上述过程都可以统一理解为测量系统模态的不唯一性问题。随着模态数量增多, 实际记录的光斑是多个模态的非相干叠加, 衍射光斑被匀滑, 细节信息丢失, 必然会影响重建质量。为解决这一问题, 目前主要采用多模态相位恢复算法, 假定照明光、待测物体、衍射光斑都存在  $F$  个相互对应的模态, 同一模拟式内为理想的相干衍射过程, 不同模态之间非相

干叠加, 即存在  $F$  个模态对:  $[P^1, O^1, I^1], [P^2, O^2, I^2], \dots, [P^F, O^F, I^F]$ 。实际记录的衍射光斑为多个模态的线性强度的叠加, 即  $I = \sum_{q=1}^F I^q$ , 上标表示模态编号。有时在照明光波长单一的情况下,  $F$  个待测样品分布  $O^F$  可以合并为一个模态, 此处考虑最复杂的情况。在此条件下, 需要对 Ptychography 算法进行改进, 同样以 ePIE 算法为例, 在对照明光和待测样品的  $F$  个模态分布进行初始猜测后, 得到  $F$  个照明光  $P^q$  和对应的  $F$  个待测物体  $O^q$ , 其中  $q=1, 2, \dots, F$ 。第  $k$  次迭代第  $j$  个位置处的迭代过程如图 4 所示。

具体描述为:

1) 计算第  $j$  个扫描位置对应的  $F$  个出射光  $\psi_j^q = P_k^q \cdot O_k^q(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ ,  $q=1, 2, \dots, F$ , 并计算其传播距离  $D$  后的衍射光  $E_j^q = \mathfrak{S}(\psi_j^q, D) = |E_j^q| \exp(i\varphi_j^q)$ , 对其强度求和得到光斑强度猜测  $I'_j = \sum_{q=1}^F |E_j^q|^2$ , 计算误差函数  $Q_j = \sum_{\text{Matrix}} |I'_j - I_j|^2$ ;

2) 利用对应的衍射光斑  $I_j$  对每个模态的  $E_j^q$  进行修正获得  $E_j'^q = \sqrt{I_j / \sum_{q=1}^F |E_j^q|^2} E_j^q$ , 用它替换振幅, 保持相位不变;

3) 分别将  $F$  个模态对应的  $E_j'^q$  逆向传播到待测样品面, 得到修正后的  $F$  个出射光  $\psi_j'^q = \mathfrak{S}^{-1}(E_j'^q, D)$ ;

4) 按照如下公式将照明光和待测样品的分布进行分离, 得到  $F$  个更新后的  $O_k'^q(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  和  $P_k'^q$  为  $O_k'^q(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = O_k^q(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) + \alpha \frac{\text{conj}(P_k^q)}{|P_k^q|_{\max}^2} (\psi_j'^q - \psi_j^q)$ , (3)

$$P_k'^q = P_k^q + \beta \frac{\text{conj}[O_k^q(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)]}{|O_k^q(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)|_{\max}^2} (\psi_j'^q - \psi_j^q). \quad (4)$$

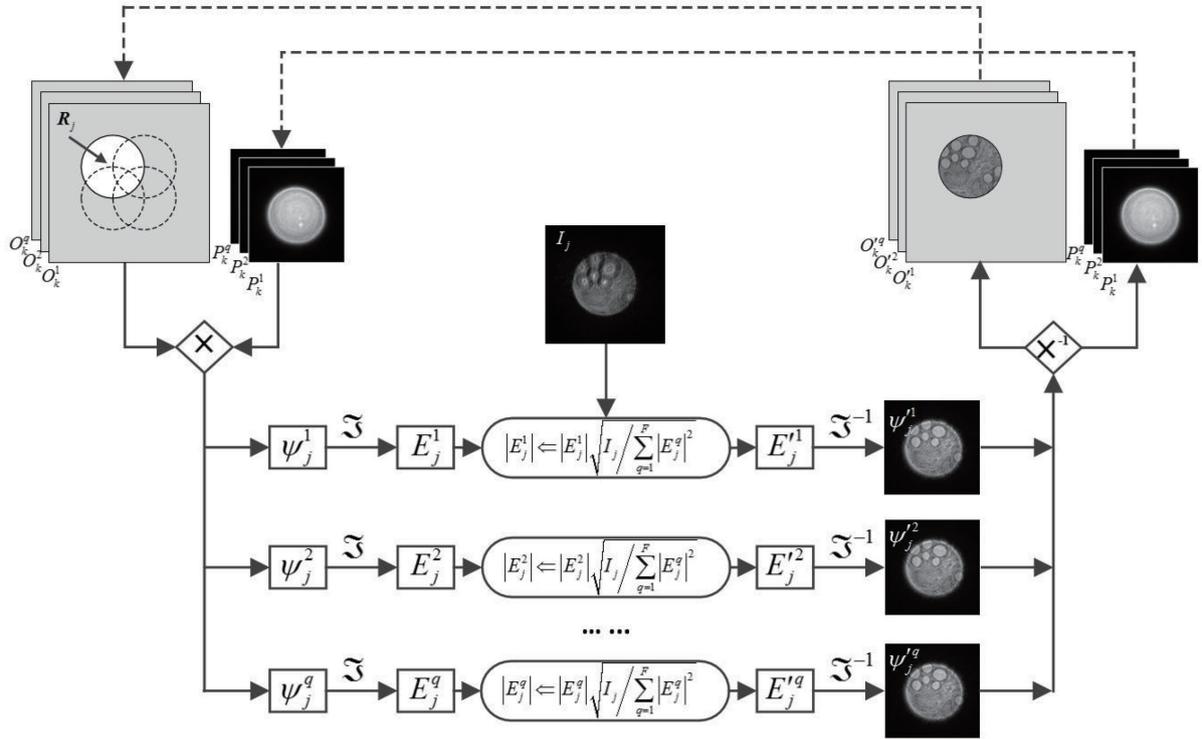


图 4 多模态 Ptychography 算法流程图

Fig. 4 Flow chart of multi-mode Ptychography algorithm

将  $O_k^q(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  进行反向平移, 得到  $F$  个完整的  $O_k^q$ , 并将  $O_k^q$  和  $P_k^q$  作为下一个扫描位置处的初始猜测进行迭代计算;

5) 顺次改变扫描位置并重复步骤 1)~4), 完成一次完整的迭代过程, 重建得到最终的  $F$  个  $O_k^q$  和  $P_k^q$ , 并计算  $M \times N$  个位置处的平均误差  $Q_k = \sum_j^{M \times N} Q_j / (MN)$ ;

6) 令  $k = k + 1$ , 且此次迭代的  $F$  个初始猜测设为  $O_{k+1}^q = O_k^q$  和  $P_{k+1}^q = P_k^q$ ;

7) 重复迭代计算过程 1)~6), 直到误差函数  $Q_k$  足够小, 完成迭代。

其他更新方式同样适用于多模态 Ptychography 算法。单模态与多模态 Ptychography 算法的主要区别在于振幅更新时按照猜测的强度比例进行更新, 其他过程基本相同。将系统模态量化成有限个非相干的理想模态, 可以更加接近于实际状态, 很好地解决部分相干条件下的波前重建。在降低 X 射线相干性的条件下, 利用标准 Ptychography 算法重建的结果如图 5(a) 所示, 可以看出重建质量较差, 当引入 12 个模态的照明光进行重建后, 结果如图 5(b) 所示, 可以看出重建效果得到明显提升。占主要能量的 5 个代表性的照明

光分布如图 5(c) 所示, 可以看出, 重建质量得到显著提升, Ptychography 算法能够有效解决部分相干性带来的问题。此外, 基于该特性还可以实现彩色成像<sup>[43]</sup>、多波长相位解包裹<sup>[43]</sup> 和不同的偏振态分布测量<sup>[44]</sup> 等。除了采用上述迭代算法进行模态分解外, Liu 等<sup>[45]</sup> 针对由外界不稳定性导致的照明光部分相干问题, 提出了一种补偿方案, 并认为成像系统在高频振动下记录的衍射光斑  $I_v$  可等效为对理想光斑  $I_0$  的低通滤波。通过理论推导可证明, 若人为引入振动后的光斑为  $I'_v$ , 则可获得接近理想分布的衍射光斑  $I'_0 = I_v + \chi [I_v - I'_v]$ , 其中  $\chi$  为修正系数, 利用  $I'_0$  进行重建后, 成像质量可以得到显著改善, 不过其普适性相对多模态 Ptychography 算法有所降低。

### 3.2 平移精度误差修正

在重建过程中, 平移位置的整体平移并不会影响重建过程, 而相对误差或者位置相对旋转则会显著影响成像质量<sup>[46]</sup>, 通过 Ptychography 算法重建得到的结果很容易出现类似图 6(a) 右上角照明光所示的周期性网格效应, 相应的相位分布也存在误差, 如图 6(b) 所示, 严重时会导致不收敛或者重建结果模糊。误差消除后的重建振幅和相位分布如图 6(c)、(d) 所示, 可以看出重建质量得到了显著改善。

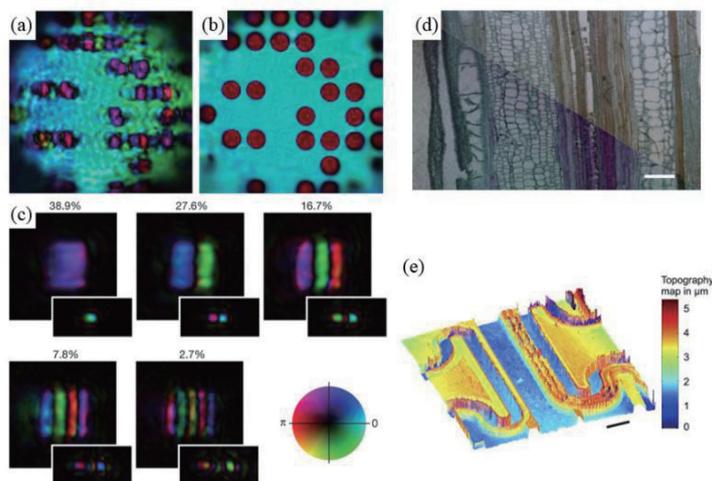


图 5 波前重建结果。(a)~(c)X 射线实验结果<sup>[13]</sup>,其中(a)为单模态 Ptychography 重建结果;(b)(c)分别为 12 模态 Ptychography 重建得到的样品和照明光分布;(d)左下角为多模态彩色成像结果,右上角为白光显微镜下成像结果<sup>[43]</sup>; (e)结合多波长相位解包裹测量得到的反射式元件的形貌图<sup>[43]</sup>

Fig. 5 Reconstructed results of wavefront. (a)–(c) Experimental results with partially coherent X-rays<sup>[13]</sup>. (a) is result reconstructed by single-mode Ptychography and (b) (c) are distributions of specimen and lighting probes reconstructed by 12-mode Ptychography, respectively<sup>[43]</sup>; (d) left-bottom inset is reconstructed results of multi-mode color imaging and top-right inset is imaging result under white-light microscope; (e) topography of reflective element measured by multi-wavelength phase unwrapping<sup>[43]</sup>

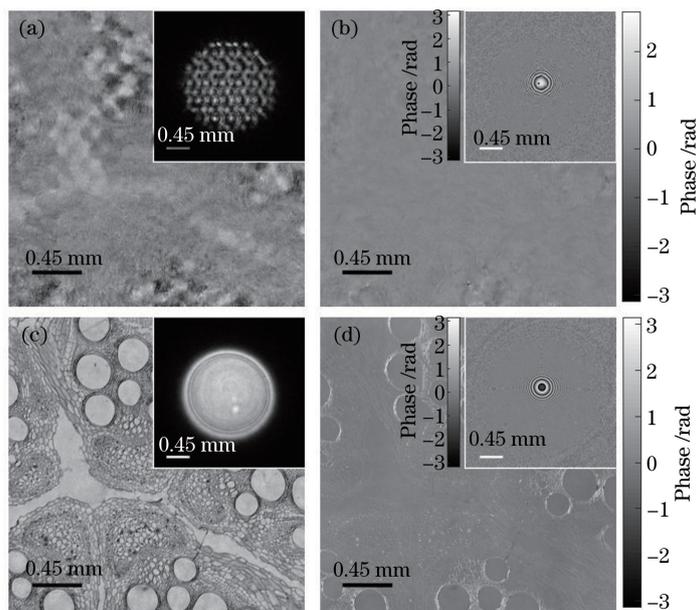


图 6 平移误差对重建结果的影响。(a)(b)存在扫描误差时,重建得到的待测物体、照明光的振幅和相位分布;  
(c)(d)位置准确时重建得到的待测物体、照明光的振幅和相位分布

Fig. 6 Influence of translation error on reconstructed results. (a)(b) Reconstructed amplitude and phase of specimen and lighting probe with scanning errors; (c)(d) reconstructed amplitude and phase of specimen and lighting probe with accurate positions

在实际过程中,虽然 nm 量级的精密平移系统已经很容易实现,但考虑到实验成本、照明光尺寸(如 X 射线照明光的直径可在  $\mu\text{m}$  量级)、平移方向和探测器像素排列方向夹角等问题,特别是在大扫描范围

情况下,位置误差仍然是影响成像质量的一个重要因素。如何精确校正位置误差成为关键。目前用于校正位置误差的算法主要有两类:一类是基于相关系数的位置校正算法,如在物平面的亚像素相关匹

配算法<sup>[14]</sup>以及在衍射面的基于电子束领域阴影成像(Ronchigram)<sup>[47]</sup>和光斑梯度<sup>[48]</sup>的相关算法等;另一类是基于方均根误差的位置搜索算法,如退火算法<sup>[15]</sup>、遗传算法<sup>[49]</sup>等,本次以常用的相关匹配算法和退火算法为例进行说明。

### 3.2.1 相关匹配算法

相关匹配算法的核心思想可以用图 7 进行解释,假定在第一个位置处更新完成后得到的物体振幅分布如图 7(a)所示。随后利用第二个位置进行更新,得到的结果如图 7(b)所示,白色虚线表示照明区域,假设位置 2 相对位置 1 有一定的位置偏差,在对第二个位置的重建过程中发现重叠区域,如图 7(b)中黑色实线所示。更新前后,重建结构发生了平移,平移方向则指明位置误差修正方向,即得到相对平移矢量,将其乘以修正倍率  $\kappa_j^k$  后作为实际位置修正量。在确定一个基准点后,可以依次得到相对前一个位置的平移矢量,需要指出的是  $\kappa_j^k$  整体是随着迭代次数而逐渐减小的,但局部会有振荡起伏变化,通过指向性地增加、缩短相对位置量,可以更快速地对位置进行修正。图 8 为引入相关匹配算法进行位置校正前后的重建结果。

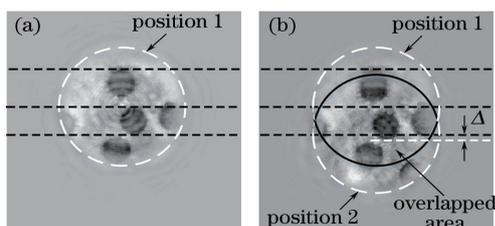


图 7 相关匹配算法原理图。(a)在第一个位置处重建得到的物体振幅;(b)在两个位置重建得到的物体振幅  
Fig. 7 Principle of correlation matching algorithm. (a) Reconstructed amplitude of object at first position; (b) reconstructed amplitudes of object at two positions

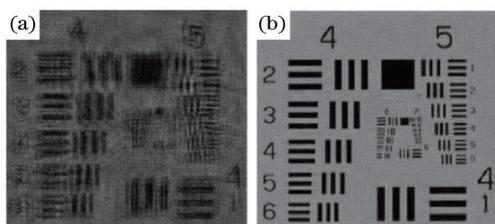


图 8 实验结果<sup>[14]</sup>。(a)位置无校正时重建得到的分辨率板;(b)通过相关匹配算法进行校正后的重建结果  
Fig. 8 Experimental results<sup>[14]</sup>. (a) Resolution plate reconstructed without position correction; (b) reconstructed result of correlation matching algorithm with position correction

除此之外,不同于上述方案中利用相关计算指明位置修正方向,相关匹配算法还可以与 HIO 算法相结合直接计算位置误差<sup>[50]</sup>,其基本思路是经过几次标准 ePIE 迭代后,每个位置独立使用 HIO 算法进行重建,采用亚像素相关匹配算法计算照明光重叠区域内物体结构的相对平移量,将其作为位置修正依据,即可实现扫描位置的修正,不过该方法的适用性受限于照明光的分布特点。

### 3.2.2 退火算法

与相关匹配算法相比,退火算法相对简单,其核心思想是随机生成一定范围内的位置偏移量,计算不同偏移量下衍射光斑的误差,保留误差最小时的偏移量,将其作为实际的位置修正值,基本原理如图 9 所示,其中的白色圆圈代表认为的扫描位置,黑色三角形表示实际位置,当迭代到扫描位置  $j$  时,认为当前的平移向量为  $\mathbf{R}_j$  (存在误差)。在进行位置搜索时,首先产生  $[-1, 1]$  之间的  $c$  组包含  $(0, 0)$  的随机数  $\Delta_s = (\delta_x, \delta_y)$ ,  $s = 1, 2, \dots, c$ ,  $s$  表示随机数标号,确定一个随迭代次数减小的搜索半径  $r_0(k)$ ,  $r_0(k)\Delta_s$  即为生成的随机偏移。对于每一个随机偏移位置(由图 9 中白色三角形表示),比较对应衍射光斑的误差

$$Q_s = \sum_{\text{Matrix}} \left| \Im \{ P_k^* \cdot O_k [ \mathbf{r} - \mathbf{R}_j - r_0(k)\Delta_s ] \cdot D \} \right|^2 - |I_j|^2, \quad (5)$$

搜索误差最小时对应的  $\Delta_s$ ,并将平移向量更新为  $\mathbf{R}_j \leftarrow \mathbf{R}_j + r(k)\Delta_s$ ,利用更新后的  $\mathbf{R}_j$  作为实际位置继续进行迭代更新,完成后,对下一个位置进行同样的操作,当所有位置都按照上述步骤更新后,就完成了单次迭代过程。上述迭代算法被称为 pcPIE<sup>[15]</sup>,它同样可以用于全局误差的修正,比如整体位置的旋转、位置线性缩放等。通过图 10 所示的电子显微镜下金/石墨颗粒的成像结果的对比可以看出,利用退火算法同样可以显著改善扫描位置抖动时的

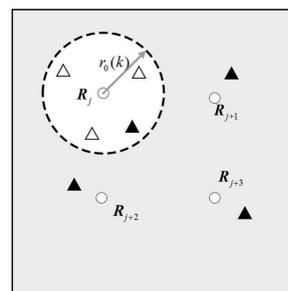


图 9 退火算法原理示意图  
Fig. 9 Basic schematic of annealing algorithm

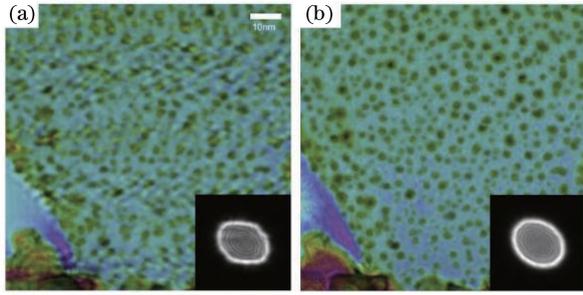


图 10 电子束显微镜下金/石墨颗粒的成像结果<sup>[15]</sup>。(a)位置校正前;(b)利用退火算法进行位置校正后的结果

Fig. 10 Imaging results of gold/graphite particles under electron beam microscopy<sup>[15]</sup>. (a) Reconstructed result before position corrections; (b) reconstructed result after position corrections by annealing algorithm

成像质量。

### 3.3 衍射距离误差的影响

在实际操作中可以发现,Ptychography 算法对传输距离误差并不是非常敏感的,存在距离误差时,仍然可以重建得到较好的收敛结果,这可以通过标量衍射理论来解释。以图 11(a)所示的测量光路为例,假设衍射距离为  $z$ ,待测样品所在的平面为  $(\xi, \eta)$ ,待测物体出射光为  $\psi(\xi, \eta) = P(\xi, \eta) \cdot O(\xi, \eta)$ ,其中  $P(\xi, \eta)$ 为照明光分布; $O(\xi, \eta)$ 为待测物体分布,根据标量衍射理论,CCD 所在平面对应的衍射光斑的复振幅分布为

$$f(x, y) = A(x, y) \iint_{\infty} \psi(\xi, \eta) \exp \left[ \frac{jk}{2z} (\xi^2 + \eta^2) \right] \exp \left[ \frac{-j2\pi}{\lambda z} (x\xi + y\eta) \right] d\xi d\eta, \quad (6)$$

式中:  $A(x, y) = \exp(jkz) \exp \{jk [(x^2 + y^2)/2] / z\} (j\lambda z)$ 。若认为传播距离为  $z' = z/\epsilon$ ,  $\epsilon$  为大于 0 的正实数,即  $z = z'\epsilon$ ,将其代入(6)式后令  $u = \xi/\epsilon, v = \eta/\epsilon$ ,则可得到

$$f(x, y) = \epsilon^2 A(x, y) \cdot \iint_{\infty} \psi(\epsilon u, \epsilon v) \exp \left[ \frac{jk(\epsilon - 1)}{2z'} (u^2 + v^2) \right] \times \exp \left[ \frac{jk}{2z'} (u^2 + v^2) \right] \exp \left[ \frac{-j2\pi}{\lambda z'} (xu + yv) \right] du dv, \quad (7)$$

其等效为平面  $(u, v)$  上分布为  $\psi(\epsilon u, \epsilon v) \exp \left[ \frac{jk(\epsilon - 1)}{2z'} (u^2 + v^2) \right]$  的出射波传播距离  $z'$ ,相当于对实际出射波进行缩放的同时引入了一

个等效焦距为  $f = -z'/(z/z' - 1)$  的透镜。考虑到待测样品在平移过程中不可能包含固定的透镜相位,只能是包含到其照明光中,因此等效的照明光和待测物体分别为  $P(\xi, \eta) \exp \left[ \frac{jk(\epsilon - 1)}{2z'} \left( \frac{\xi^2}{\epsilon} + \frac{\eta^2}{\epsilon} \right) \right]$  和  $O(\xi, \eta)$ 。即当认为衍射距离为  $z'$  时,重建得到的照明光相对真实分布而言将会额外引入一个球面相位因子,而待测物体的分布不变,效果如图 11(b)所示。图 12 所示的模拟结果<sup>[51]</sup>对此进行了验证,上述等效模式成立的根本原因是两种模式的衍射光斑相同,而衍射光斑是相位恢复算法的唯一数据来源,在衍射距离存在误差的条件下,其“等效”模式分布能够满足衍射光斑的约束条件,因而能够得到一个收敛的结果。

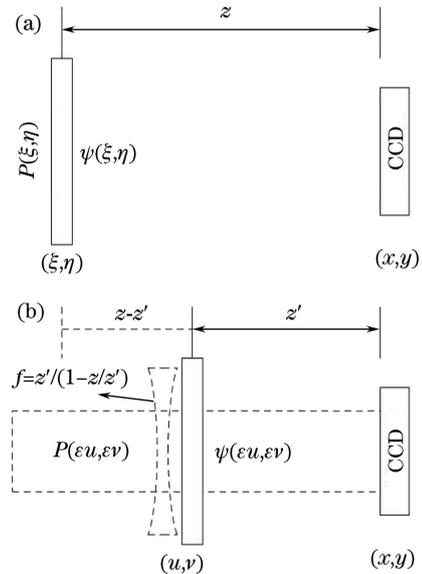


图 11 距离误差的影响。(a)实际光路示意图;(b)存在误差时,距离测量的等效光路

Fig. 11 Influence of distance errors. (a) Schematic of actual optical path; (b) equivalent optical path for distance measurement with error

除此之外,同样可以对轴向误差进行有效修正<sup>[52]</sup>。

### 3.4 光斑误差及采样精度

衍射光斑是 Ptychography 算法的主要数据来源,光斑探测器的硬件性能会显著影响重建水平,主要限制因素有:1)探测器的噪声水平,如背景噪声、高斯噪声、量化噪声等;2)有效数值孔径;3)探测器位深,常见的有 8, 12, 16 bit;4)采样精度。在实际应用中可以发现,Ptychography 算法对探测器噪声具有较强的鲁棒性<sup>[53]</sup>。由于数据存在冗余性,即使在存在光斑噪声的情况下,Ptychography 算法仍能

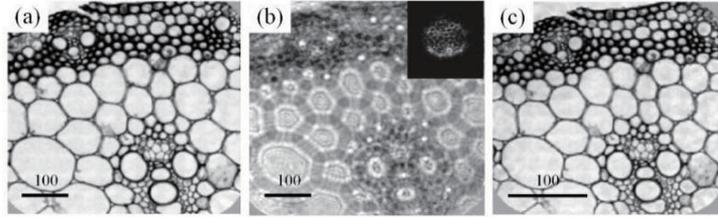


图 12 模拟结果<sup>[51]</sup>(比例尺表示 100 pixel)。(a)样品的真实分布;(b)将距离缩小一半后的重建结果;  
(c)在距离缩小一半的情况下,照明光乘上透镜因子后的重建结果

Fig. 12 Simulation results<sup>[51]</sup>(unit of scale bar is 100 pixel). (a) Real distribution of specimen; (b) reconstructed result when distance is reduced by half; (c) reconstructed result after lighting probe multiplies lens factor when distance is reduced by half

够很好地进行重建,通过选择制冷高性能探测器可以很好地降低噪声对重建结果的影响,因此本节主要考虑其他三个限制因素的影响。

### 3.4.1 高频信息的丢失及超分辨率

光斑探测器的数值孔径有限,当光斑散射角较大时,部分高阶衍射光斑信息将会丢失,类似于图 13(a)中所示的情况,其中虚线方框表示光斑探测器的探测范围,原则上在光斑不完整的条件下,是无法得到收敛结果的,但实际上采用改进的算法是可行的,其基本思路如图 13(b)所示。在数值孔径有限的情况下,假定探测器的采样点数为  $L \times L$ ,而实际上的光斑大于该尺寸,因此将计算矩阵的大小调整为  $L' \times L'$ ,且  $L' > L$ ,以保证光斑能够在矩阵范围以内。在第 2 节 Ptychography 算法的基础上,需要对第 2)步的更新方法  $E'_j = \sqrt{I_j} \exp(i\varphi_j)$  进行调整,即改为

$$E'_j = \begin{cases} \sqrt{I_j} \exp(i\varphi_j), & (x, y) \in F_0 \\ E'_j, & (x, y) \in F_1 \\ 0, & (x, y) \in F_2 \end{cases} \quad (8)$$

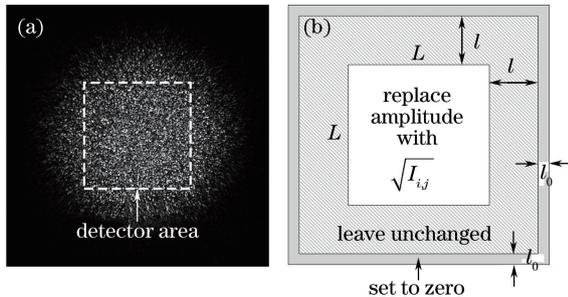


图 13 超分辨率原理图。(a)光斑探测器的数值孔径有限时的光斑;(b)振幅更新算法示意图

Fig. 13 Schematic of super resolution. (a) Light spot recorded by facular detector with limited numerical aperture; (b) schematic of amplitude updating algorithm

式中: $F_0$ 、 $F_1$ 、 $F_2$  分别表示图 13(b)中白色、斜线填充和灰色区域,且  $L' = L + 2l + 2l_0$ ,  $l$ 、 $l_0$  为自定义像素宽度,即不更新探测器探测范围外的光斑,同时保留一个宽度为  $l_0$  的全零包边,选择不同的宽度  $l_0$  可以对噪声进行不同程度的抑制。

根据标量衍射理论,记录的衍射光斑实际上是照明光频谱和待测样品频谱的卷积,衍射光斑的每一点都可以认为是包含了待测物体的所有信息,通过迭代计算可以将丢失的高频信息解调出来,这也意味着有效数值孔径增大,最终的分辨率将会得到提升,即实现超分辨率 Ptychography(SR-PIE)。图 14 所示的实验结果很好地验证了该算法的可行性。不过这种能力是有限的,适当增大照明光频谱的宽度有助于增大卷积过程带来的影响,进而提高对丢

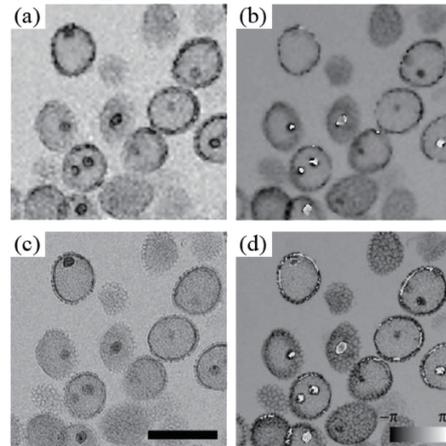


图 14 超分辨率实验结果<sup>[17]</sup>。(a) (b)采用标准 PIE 重建得到的花粉的振幅和相位分布;(c) (d)采用 SR-PIE 重建得到的振幅和相位分布

Fig. 14 Experimental results of super resolution<sup>[17]</sup>. (a)(b) Amplitude and phase distributions of pollens reconstructed by standard PIE; (c)(d) amplitude and phase distributions of pollens reconstructed by SR-PIE

失信息的重建能力,因此在图 14 所示的实验光路的照明光中额外引入了调制信息,以增大频谱的宽度。

### 3.4.2 丢失的低频信息的重建

通过调整衍射距离,光斑探测器数值孔径有限的问题基本上可以得到解决,但当探测器的动态范围有限时,如 8 bit 的动态范围仅为 0~255,为记录更多的高频信息,较强的低频光斑的饱和问题就会不可避免,这在 X 射线和电子束成像中尤为常见。图 15(a)为没有饱和时的衍射光斑,在这种情况下进行重建,结果如图 15(e)所示,只能分辨到第 5 组,当逐渐增大光强或者延长曝光时间后,如图 15(b)~(d)所示,能够发现较弱的高频信息,但低频信息发生饱和并丢失,在此条件下,同样可以获得收敛的结果。在这种情况下进行有效迭代重建

的基本迭代思路与高频信息丢失的情况相同,即在第 2 节 Ptychography 算法的基础上,需要对第 2)步的更新方法  $E'_j = \sqrt{I_j} \exp(i\varphi_j)$  进行调整,将其改为

$$E'_j = \begin{cases} \sqrt{I_j} \exp(i\varphi_j), & (x, y) \in F_u \\ E'_j, & (x, y) \in F_s \end{cases} \quad (9)$$

式中:  $F_u$ 、 $F_s$  分别表示没有饱和、饱和的点。其他迭代过程完全相同,在一定迭代次数之后,饱和区域的信息同样可以得到重建,重建结果如图 15(f)、(g)所示,不仅保证了收敛性,重建精度也得到了明显提升,能够有效克服探测器动态范围有限的问题。不过,继续增加曝光区域,结果将不再收敛,图 15(h)即为饱和区域过多情况下的重建结果。

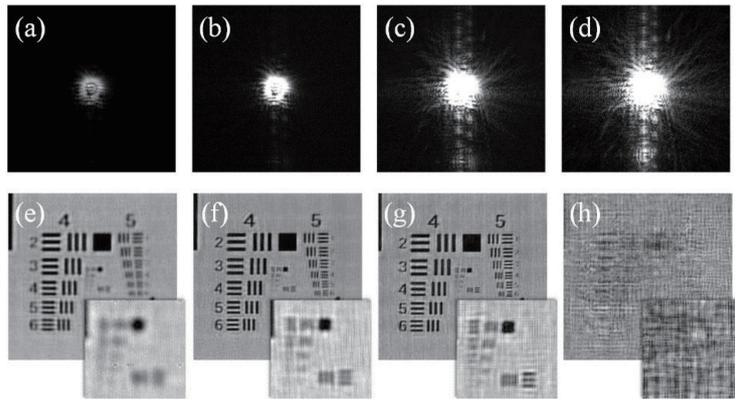


图 15 光斑部分饱和时的重建实验结果<sup>[54]</sup>。(a)~(d)光斑饱和面积从 0 逐渐增大;  
(e)~(h)利用(a)~(d)进行重建得到的分辨率板分布

Fig. 15 Results of reconstruction experiments when light spots are partially saturated<sup>[54]</sup>. (a)–(d) Light spots with increasing saturated area from 0; (e)–(h) resolution-plate distributions reconstructed by corresponding saturated light spots in Figs. 15(a)–(d)

### 3.4.3 欠采样下的相位重建

采样定理是现有 Ptychography 算法需要满足的基本要求之一,但有时受硬件的限制,或者进行隔行采样,如探测器中的 binning 和 skipping 模式,光斑采样并不能满足采样要求,采样能力将会影响重建精度<sup>[55]</sup>。如何在此条件下进行重建是波前重建过程中的一个基本问题,可以利用 sPIE 算法<sup>[56]</sup>进行重建。为了描述方便,以图 16 所示的像元尺寸为

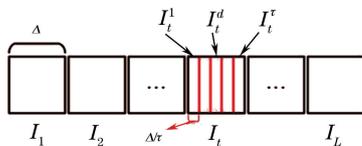


图 16 欠采样时振幅更新方法示意图

Fig. 16 Schematic of amplitude updating algorithm for under-sampling

$\Delta$  的一维情况为例,将每个原始像元虚拟化为  $\tau$  个宽度为  $\Delta/\tau$  的子像元,虽然每个子像元的光斑强度未知,但总能量是已知的,即  $I_t = \sum_{d=1}^{\tau} I_t^d, t=1, 2, \dots, L$ ,其中  $I_t$  表示第  $t$  个原始像元记录的强度值,  $I_t^d$  表示第  $t$  个原始像元虚拟化出来的第  $d$  个子像元强度,  $d=1, 2, \dots, \tau, L$  为硬件决定的采样点数,此时计算矩阵的宽度变为  $\tau L$ 。重建过程与标准 Ptychography 算法类似,只不过在对衍射光斑进行更新时需要进行改进,假设计算出来的衍射光分布矩阵中第  $\tau(t-1)+d$  个像素的复振幅为  $E_t^d$ ,是通过振幅进行更新后得到的结果,更新公式为

$$E_t^{\prime d} = \sqrt{\frac{I_t}{\sum_{d=1}^{\tau} |E_t^d|^2}} E_t^d \quad (10)$$

每个像素值都进行更新后,逆向返回待测样品面,进行下一步迭代。经过一定迭代次数后,就可以重建得到每个虚拟子像元位置的光强分布,从而满足采样要求。

图 17(a)是人为欠采样后的一个衍射光斑,将记录的衍射光斑像元尺寸从实际的  $9\ \mu\text{m}$  合并为  $72\ \mu\text{m}$ ,即每 64 个像素求和合并为一个像素,采用标准 Ptychography 算法重建后不收敛,结果如图 17(b)~(d)所示。若将衍射光斑进行线性插值,如图 17(e)所示,标准 Ptychography 算法虽然可以重建得到收敛结果,但精度较差,若采用上述改进算法进行重建,得到的结果如图 17(i)~(l)所示,不仅可以得到收敛的结果,而且精度得到了显著改善,同时

也可以重建出高精度的衍射光斑。图 18 为利用 X 射线( $0.778\ \text{KeV}$ )对 Pt-Co 纳米颗粒进行成像的结果,实际记录的一个光斑如图 18(a)所示,通过 ePIE 算法重建得到的照明光振幅、样品振幅、样品相位分布分别如图 18(b)~(d)所示,当探测器像元宽度增大为 8 倍和 16 倍后,衍射光斑分别如图 18(e)和图 18(i)所示。上述改进算法的重建结果分别如图 18(f)~(h)和图 18(j)~(l)所示。与原始数据相比,虽然重建得到的照明光随着像元尺寸的增大,会出现更多的噪声,但重建得到的样品分布没有明显区别,因此在实际应用中可以降低 Ptychography 算法对硬件的性能要求,在光路参数选择上具有更多的灵活性。

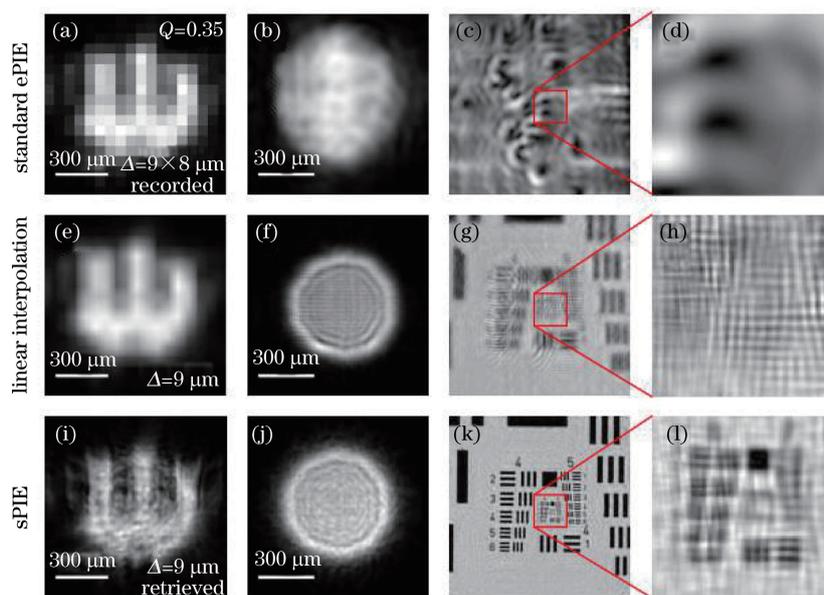


图 17 实验结果。(a)~(d)欠采样下的衍射光斑和重建结果;(e)~(h)对光斑(a)线性插值后得到的衍射光斑和重建结果;(i)~(l)利用欠采样 Ptychography 算法重建得到的光斑和照明光、分辨率板

Fig. 17 Experimental results. (a)~(d) Under-sampled diffraction spots and corresponding reconstructed results; (e)~(h) diffraction spots after linear interpolation for spot in Fig. 17(a) and corresponding reconstructed results; (i)~(l) diffraction spot, lighting probe, and resolution plate reconstructed by under-sampled Ptychography algorithm

### 3.5 厚样品分层成像

在基本的 Ptychography 算法中,待测样品的出射光可简化为照明光和样品透过率函数的乘积,此时样品被认为没有厚度,但如果待测样品在轴向分布不可忽略时,标准算法只能得到一个模糊的结果,需要采用 3PIE 算法<sup>[16,57]</sup>进行重建,其基本思路是将厚样品在轴向进行离散分层化,如图 19 所示。厚样品可以等效为  $\sigma$  层间距为  $\Delta$  的切片( $O_1, O_2, \dots, O_\sigma$ ),每个切片厚度为  $\theta$ ,前一层出射光传播距离  $\Delta$  后的衍射光作为当前层的照明光,乘上当前层分布

后再传播距离  $\Delta$  作为下一层的照明光,如此直到最后一层得到最终出射光,其传播距离  $D$  后到达光斑探测器,进行振幅的更新;逆向传播时采用相同的策略,每向前传播一层都采用(1)式和(2)式对当前层分布和当前层照明光进行更新,直到第一层。经过一定的迭代过程后,可以得到第一层照明光、每个切片的复振幅分布,从而实现了对厚样品的分层成像。图 20 为样品分层后的成像结果,将其与显微镜成像对比后可知,3PIE 能够有效对待测样品进行分层成像,且无串扰。

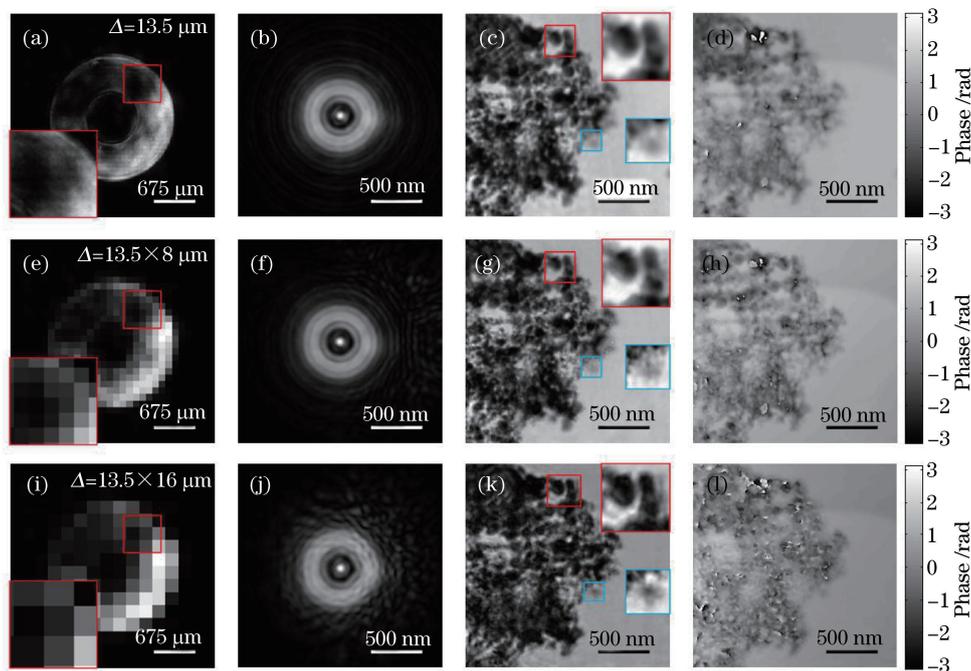


图 18 X 射线下的实验结果。(a)~(d) 正常采样;(c)~(h) 采样率降低为 1/8;(i)~(l) 采样率降低为 1/16  
 Fig. 18 Experimental results with X-rays. (a)~(d) Normal sampling; (c)~(h) sampling rate decreased to 1/8; (i)~(l) sampling rate decreased to 1/16

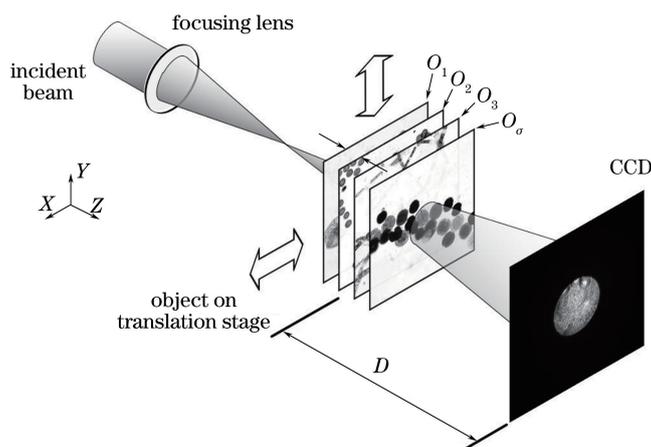


图 19 3PIE 基本光路示意图  
 Fig. 19 Schematic of basic optical path of 3PIE

### 3.6 快速扫描 Ptychography

样品平移和多次测量为数据冗余性和算法收敛性提供了保障,但由于每次记录光斑前需要等待当前平移完成,数据记录时间通常在几到几十分钟。特别是基于 Ptychography 的层析成像技术,数据记录时间甚至会花费 10 h,若扫描过程中样品的分布发生了变化,标准 Ptychography 算法的重建精度将会大大降低,缩短数据记录时间对于降低样品稳定性要求和提升测量时间具有重要的实际意义。目前,缩短数据记录时间的方式主要有两种:一种是 fly-PIE,即样品在平移过程中探测器持续曝光,记

录具有“残影”的模糊衍射光斑,利用多状态的思想进行重建;另外一种是通过改变测量光路,利用单次测量实现标准 Ptychography 的多次扫描过程,通过标准 Ptychography 进行重建。

#### 3.6.1 fly-PIE

标准 Ptychography 的扫描过程如图 21(a)所示,圆圈表示相邻的三个扫描位置,当样品以速度  $\mathbf{V}$  进行平移时,经过  $\Delta t$  时间平移到下一个位置,此过程一直处于探测器曝光时间以内,其效果如图 21(b)所示,实际记录衍射光斑的过程是不同时刻波前强度的叠加<sup>[18, 58]</sup>,即

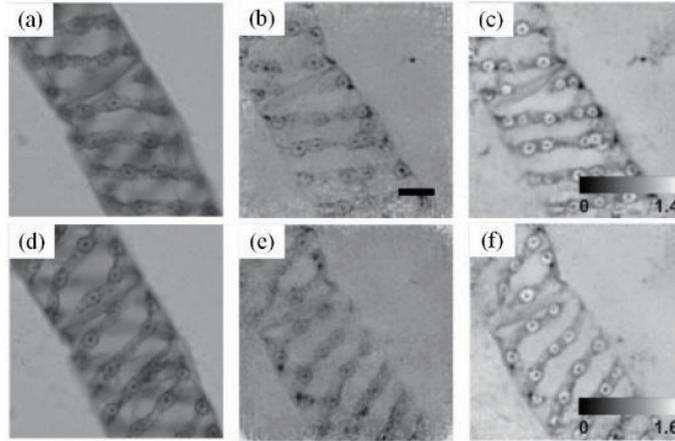


图 20 3PIE 分层成像实验结果<sup>[16]</sup>。(a)(d)显微镜下不同聚焦面的像;(b)(c)利用 3PIE 重建得到的振幅;(e)(f)利用 3PIE 重建得到相位

Fig. 20 Experimental results of 3PIE stratified imaging<sup>[16]</sup>. (a)(d) Images of different focusing slices recorded by microscope; (b)(c) amplitude reconstructed by 3PIE; (e)(f) phase reconstructed by 3PIE

$$I' = \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} |\mathfrak{F}[P \cdot O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j - \mathbf{V}t)]|^2 dt, \quad (11)$$

若将其离散化为  $\gamma$  个模态的照明光和一个模态的待测样品,则变为

$$I' = \sum_{M_{od}=1}^{\gamma} |\mathfrak{F}[P_{M_{od}} \cdot O(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j - M_{od} \cdot \mathbf{V} \cdot \Delta t)]|^2. \quad (12)$$

分解效果如图 21(c)所示,此时假定记录的每个衍射光斑为  $\gamma$  个照明光经过同一个样品后衍射光斑的非相干叠加,利用多状态相位恢复的思想,就可以重建得到  $\gamma$  个等效的照明光和清晰的样品透过率函数。

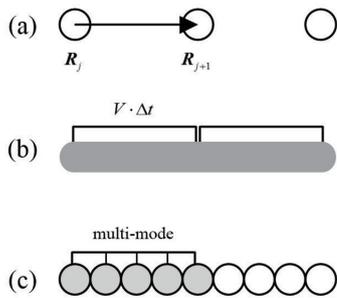


图 21 标准 Ptychography 的基本原理。(a)传统的逐位置扫描方式;(b)连续采集模式;(c)将连续采集过程分解为多个独立模式

Fig. 21 Basic principal of standard Ptychography. (a) Traditional position-by-position scanning mode; (b) continuous recording mode; (c) decomposition of continuous recording process into multiple independent modes

Fly-PIE 实验结果<sup>[59]</sup>如图 22 所示。图 22(a)~(d)为电机移动速度分别为 600, 450, 300, 150  $\mu\text{m/s}$  时记录的衍射光斑,随着移动速度增大,光斑逐渐变得模糊,利用标准的 Ptychography 进行重建后,得到的结果如图 22(e)第一列所示。重建效果是随着速度增大明显变差,若采用多模态算法进行重建,重建结果将会得到显著改善,如图 22(e)第二列和图 22(f)所示,即使在速度为 600  $\mu\text{m/s}$  的条件下,依然能够得到清晰的重建结果,同时也可以分解得到多个模态下的照明光分布。

除此之外, fly-PIE 技术也可以与 3PIE 相结合<sup>[60]</sup>,在缩短扫描时间的同时,可以实现样品的分层成像。

### 3.6.2 单次曝光 Ptychography

标准 Ptychography 耗费大量的数据记录时间的原因是它采用了逐次扫描,若能够通过单次测量记录得到光斑阵列,同时保留 Ptychography 的扫描特性,即相邻两个扫描区域有部分重叠,就可以实现标准的数据记录过程,因此该思路主要体现在光路创新方面。目前主要有基于光栅分光和  $4f$  系统的单次曝光两种方案。

基于光栅分光的方式如图 23 所示,在标准 Ptychography 测量光路的基础上,在待测样品之前引入一块二维光栅<sup>[19]</sup>,照明光经过光栅后分为具有不同散射角的多束子照明光,在不考虑额外引入的相位倾斜因子的情况下认为子照明光的分布是相同的,将待测物体和探测器放到光栅之后的合适位置处,使各个子照明光在待测样品上的照明区域有部

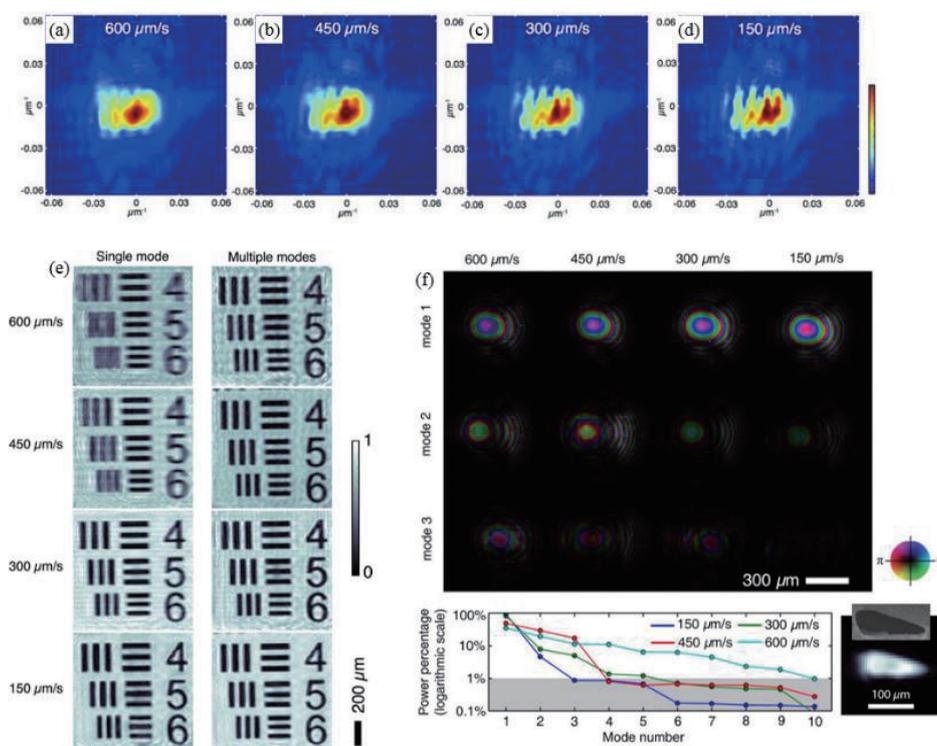


图 22 Fly-PIE 实验结果<sup>[59]</sup>。(a)~(d)不同移动速度下,连续曝光记录的衍射光斑;  
(e)单模式和多模式下重建结果;(f)多模式下重建得到的照明光

Fig. 22 Experimental results of Fly-PIE<sup>[59]</sup>. (a)–(d) Diffraction spots recorded by continuous exposure when specimen is translated with different speeds; (e) reconstructed results with single and multiple modes; (f) reconstructed lighting probes with multiple modes

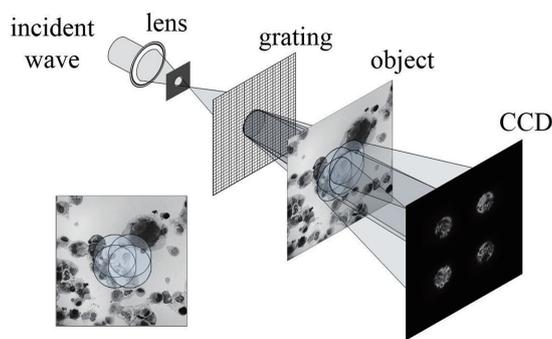


图 23 基于光栅分光的单次曝光 Ptychography

Fig. 23 Schematic of single-exposure Ptychography based on grating splitting

分重叠的同时,各个子衍射光斑能够相互分离,效果如图 23 所示,完成数据的记录过程。在迭代计算之前,需要将每个子衍射光斑截取出来,利用常规 Ptychography 算法进行迭代计算,进而重建得到待测物体的复振幅透过率和照明光分布。图 24 为两次实验结果,其中第一列为记录的光斑图,第二列和第三列为重建得到的样品的振幅和相位分布图,由于普通振幅光栅各个级次衍射光的光强不同,因此可以考虑采用达曼光栅。

基于  $4f$  系统的单次曝光 Ptychography 的基本

光路如图 25 所示, $4f$  系统由焦距分别为  $f_1$  和  $f_2$  的两个透镜 L1 和 L2 组成,入射平行光经过小孔阵列后,产生多个子照明光,它们依次经过 L1、待测样品和 L2 后到达光斑探测器。由于小孔阵列和光斑探测器的位置共轭,因此对于弱散射物体,探测器记录的光斑阵列分布和小孔阵列的分布基本相同,即各个子衍射光斑之间在空间上相互独立,此时若将待测样品放置于子照明光部分交叠处,如图 24 所示的物体所在平面,就可以达到类似光栅分光 Ptychography 光路的效果,采用相同的迭代算法就

可以进行相位重建<sup>[20]</sup>。图 26 为重建得到的实验结果,可以看出上述方案是可行的。此外,该方案还可

以与多状态相位恢复技术相结合<sup>[61]</sup>,实现两个偏振态的同时恢复。

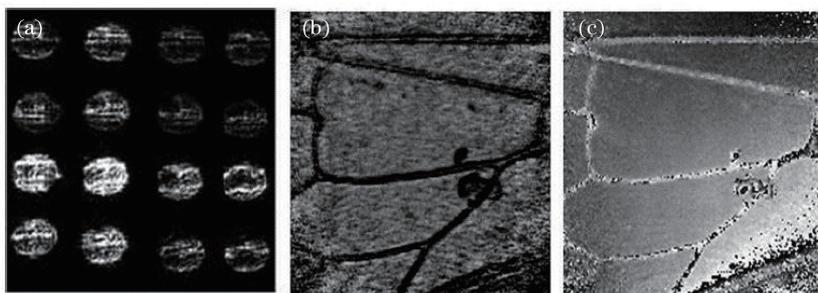


图 24 基于光栅分光 Ptychography 算法的实验结果<sup>[19]</sup>。(a)光斑图;(b)重建得到的样品的振幅;(c)重建得到的样品的相位  
Fig. 24 Experimental results reconstructed by Ptychography based on grating splitting<sup>[19]</sup>. (a) Light spots; (b) reconstructed amplitude of specimen; (c) reconstructed phase of specimen

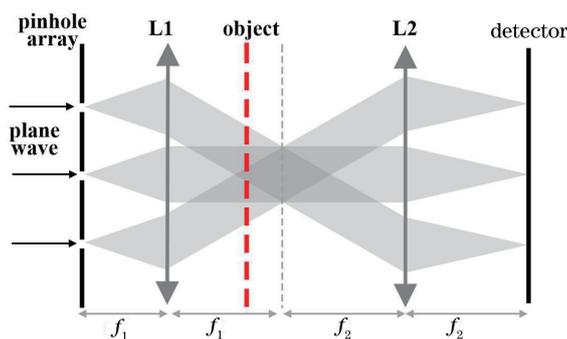


图 25 基于  $4f$  系统的单次曝光 Ptychography 光路示意图  
Fig. 25 Schematic of single-exposure Ptychography based on  $4f$  system

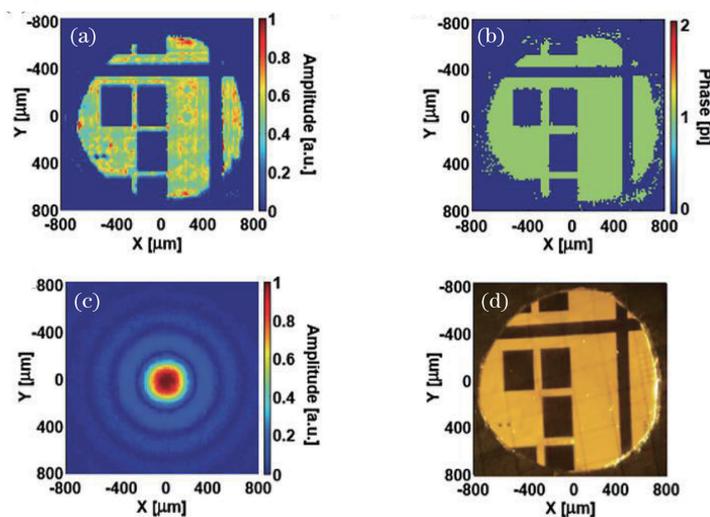


图 26 基于  $4f$  系统的单次曝光 Ptychography 实验结果<sup>[20]</sup>。(a)(b)重建得到的待测物体的振幅和相位;  
(c)重建得到的照明光;(d)直接成像结果

Fig. 26 Experimental results with single-exposure Ptychography based on  $4f$  system<sup>[20]</sup>. (a) (b) Reconstructed amplitude and phase of specimen; (c) reconstructed lighting probe; (d) direct-imaging result

两种单次曝光 Ptychography 的测量光路虽然不同,但基本核心原理类似,理论上能够解决 Ptychography 数据记录时间的问题,同时有望用于

解决时间尺度上的相位测量问题<sup>[62-63]</sup>。然而,光斑阵列的形式会显著降低光斑探测器的有效数值孔径,且相邻两个子衍射光斑之间的弱干涉不可避免,

虽然可以通过两两结合的方式弱化该问题带来的影响<sup>[64]</sup>,但数值孔径和数据记录速度难以同时兼顾。同时,Ptychography 光路简单的特性也得到了弱化,因此现有方案的测量精度、信噪比和实用性还有待提升。

#### 4 结束语

数据的高冗余性是 Ptychography 算法的重要特性,主要体现在:1)相邻扫描区域部分重叠带来的数据冗余性。在单光斑 CDI 算法中,样品出射光  $\psi(x, y)$  与其共轭反转  $\psi^*(-x, -y)$  具有相同的衍射光斑强度分布,  $|\text{FFT}[\psi(x, y)]|^2 = |\text{FFT}[\psi^*(-x, -y)]|^2$ , FFT 表示傅里叶变换,因此实际重建得到的是  $\psi(x, y)$  和  $\psi^*(-x, -y)$  的随机组合,这会导致收敛停滞不前,但通过多次扫描和部分重叠,当前位置处的计算结果能够传递到相邻位置的重建过程,孪生像问题<sup>[65]</sup>将不复存在,进而能够显著提升收敛性,避免出现停滞不前的问题。2)同一位置处的波前信息体现在所有相邻扫描位置的衍射光斑中,数据冗余性进一步提升,基于菲涅耳衍射理论,若样品出射光频谱分布为  $\tilde{\psi}(x, y) = \text{FFT}[\psi(\xi, \eta)]$ , 菲涅耳衍射传递因子的频谱为  $\tilde{H}(x, y)$ , 则衍射光可以表示为两者的卷积,即  $E(x, y) = \tilde{\psi}(x, y) \otimes \tilde{H}(x, y) \approx \sum_{\alpha, \beta} \tilde{\psi}(\alpha, \beta) \times \tilde{H}(x - \alpha, y - \beta)$ ,  $\otimes$  表示卷积,此时相位恢复问题变为解方程  $\left| \sum_{\alpha, \beta} \tilde{\psi}(\alpha, \beta) \tilde{H}(x - \alpha, y - \beta) \right|^2 - I(x, y) = 0$  的过程。随着衍射光斑数量增多,照明光和物体需要满足的有效方程个数也会增加,即使增加了未知量,如更多模态、更多噪声、更多光斑信息的丢失,理论上依然可以得到唯一解。因此,相比于传统 CDI 算法,Ptychography 算法除了保留光路简单、不需要高质量透镜、理论分辨率为衍射极限等优势外,还具有极好的收敛性、较高的误差容忍度、可无限拓展的视场范围,以及同时测量照明光和物体的能力,适用范围非常广。结合波前反演能力,理论上任何相干或部分相干光波段的成像和测量问题都能得以解决。特别是随着光源相干性、环境抖动、平移误差、衍射距离误差、探测器硬件噪声、样品厚度不可忽略等关键问题的逐步解决,Ptychography 算法将成为一种性能优越、易于拓展的相位成像和光学计量新技术。

#### 参 考 文 献

- [1] Hoppe W. Diffraction in inhomogeneous primary wave fields. 1. Principle of phase determination from electron diffraction interference [J]. Acta Crystallographica Section A, 1969, 25: 495-501.
- [2] Hoppe W, Strube G. Diffraction in inhomogeneous primary wave fields. 2. Optical experiments for phase determination of lattice interferences[J]. Acta Crystallographica Section A, 1969, 25: 502-507.
- [3] Hoppe W. Diffraction in inhomogeneous primary wave fields. 3. Amplitude and phase determination for nonperiodic objects [J]. Acta Crystallographica Section A, 1969, 25: 508-515.
- [4] Gerchberg R W. A practical algorithm for the determination of phase from image and diffraction plane pictures[J]. Optik, 1972, 35(2): 237-246.
- [5] Saxton W O, Cowley J M. Computer techniques for image processing in electron microscopy[J]. Physics Today, 1979, 32(3): 74-76.
- [6] Fienup J R. Phase retrieval algorithms: a comparison [J]. Applied Optics, 1982, 21(15): 2758-2769.
- [7] Faulkner H M L, Rodenburg J M. Movable aperture lensless transmission microscopy: a novel phase retrieval algorithm [J]. Physical Review Letters, 2004, 93(2): 023903.
- [8] Rodenburg J M, Faulkner H M L. A phase retrieval algorithm for shifting illumination [J]. Applied Physics Letters, 2004, 85(20): 4795-4797.
- [9] Zhang F C, Xu W H, He Z F, et al. Progress in coherent diffraction imaging: ptychography and coherent modulation imaging [J]. Infrared and Laser Engineering, 2019, 48(6): 0603011.  
张福才, 许文慧, 何振飞, 等. 相干衍射成像研究进展: 叠层扫描相干衍射成像和相干调制成像 [J]. 红外与激光工程, 2019, 48(6): 0603011.
- [10] Pennycook T J, Martinez G T, Nellist P D, et al. High dose efficiency atomic resolution imaging via electron ptychography [J]. Ultramicroscopy, 2019, 196: 131-135.
- [11] Cao S, Maiden A M, Rodenburg J M. Image feature delocalization in defocused probe electron ptychography [J]. Ultramicroscopy, 2018, 187: 71-83.
- [12] Maiden A M, Rodenburg J M. An improved ptychographical phase retrieval algorithm for diffractive imaging [J]. Ultramicroscopy, 2009, 109(10): 1256-1262.
- [13] Thibault P, Menzel A. Reconstructing state mixtures from diffraction measurements [J]. Nature, 2013, 494(7435): 68-71.
- [14] Zhang F C, Peterson I, Vila-Comamala J, et al. Translation position determination in ptychographic coherent diffraction imaging [J]. Optics Express, 2013, 21(11): 13592-13606.

- [15] Maiden A M, Humphry M J, Sarahan M C, et al. An annealing algorithm to correct positioning errors in ptychography [J]. *Ultramicroscopy*, 2012, 120: 64-72.
- [16] Maiden A M, Humphry M J, Rodenburg J M. Ptychographic transmission microscopy in three dimensions using a multi-slice approach [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2012, 29(8): 1606-1614.
- [17] Maiden A M, Humphry M J, Zhang F C, et al. Superresolution imaging via ptychography [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2011, 28(4): 604-612.
- [18] Clark J N, Huang X J, Harder R J, et al. Continuous scanning mode for ptychography [J]. *Optics Letters*, 2014, 39(20): 6066-6069.
- [19] Pan X C, Liu C, Zhu J Q. Single shot ptychographical iterative engine based on multi-beam illumination [J]. *Applied Physics Letters*, 2013, 103(17): 171105.
- [20] Sidorenko P, Cohen O. Single-shot ptychography [J]. *Optica*, 2016, 3(1): 9-14.
- [21] Zheng G A. Breakthroughs in photonics 2013: Fourier ptychographic imaging [J]. *IEEE Photonics Journal*, 2014, 6(2): 0701207.
- [22] Jones M W M, Elgass K D, Junker M D, et al. Molar concentration from sequential 2-D water-window X-ray ptychography and X-ray fluorescence in hydrated cells [J]. *Scientific Reports*, 2016, 6: 24280.
- [23] Deng J J, Vine D J, Chen S, et al. X-ray ptychographic and fluorescence microscopy of frozen-hydrated cells using continuous scanning [J]. *Scientific Reports*, 2017, 7: 445.
- [24] Shahmoradian S H, Tsai E H R, Diaz A, et al. Three-dimensional imaging of biological tissue by cryo X-ray ptychography [J]. *Scientific Reports*, 2017, 7: 6291.
- [25] Kahnt M, Becher J, Brückner D, et al. Coupled ptychography and tomography algorithm improves reconstruction of experimental data [J]. *Optica*, 2019, 6(10): 1282-1289.
- [26] Gürsoy D. Direct coupling of tomography and ptychography [J]. *Optics Letters*, 2017, 42(16): 3169-3172.
- [27] Sidorenko P, Lahav O, Avnat Z, et al. Ptychographic reconstruction algorithm for frequency-resolved optical gating: super-resolution and supreme robustness [J]. *Optica*, 2016, 3(12): 1320-1330.
- [28] Sinha A, Lee J, Li S, et al. Lensless computational imaging through deep learning [J]. *Optica*, 2017, 4(9): 1117-1125.
- [29] Shemilt L, Verbanis E, Schwenke J, et al. Karyotyping human chromosomes by optical and X-ray ptychography methods [J]. *Biophysical Journal*, 2015, 108(3): 706-713.
- [30] Giewekemeyer K, Beckers M, Gorniak T, et al. Ptychographic coherent X-ray diffractive imaging in the water window [J]. *Optics Express*, 2011, 19(2): 1037-1050.
- [31] Hoppe R, Reinhardt J, Hofmann G, et al. High-resolution chemical imaging of gold nanoparticles using hard X-ray ptychography [J]. *Applied Physics Letters*, 2013, 102(20): 203104.
- [32] Wise A M, Weker J N, Kalirai S, et al. Nanoscale chemical imaging of an individual catalyst particle with soft X-ray ptychography [J]. *ACS Catalysis*, 2016, 6(4): 2178-2181.
- [33] Torrance A T J, Abbey B, Putkunz C T, et al. Using coherent X-ray ptychography to probe medium-range order [J]. *Optics Express*, 2013, 21(23): 28019-28028.
- [34] Takahashi Y, Suzuki A, Zettsu N, et al. Multiscale element mapping of buried structures by ptychographic X-ray diffraction microscopy using anomalous scattering [J]. *Applied Physics Letters*, 2011, 99(13): 131905.
- [35] Civita M, Diaz A, Bean R J, et al. Phase modulation due to crystal diffraction by ptychographic imaging [J]. *Physical Review B*, 2018, 97(10): 104101.
- [36] Truong N X, Safaei R, Cardin V, et al. Coherent tabletop EUV ptychography of nanopatterns [J]. *Scientific Reports*, 2018, 8: 16693.
- [37] Thibault P, Dierolf M, Kewish C M, et al. Contrast mechanisms in scanning transmission X-ray microscopy [J]. *Physical Review A*, 2009, 80(4): 043813.
- [38] Seiboth F, Schropp A, Scholz M, et al. Perfect X-ray focusing via fitting corrective glasses to aberrated optics [J]. *Nature Communications*, 2017, 8: 14623.
- [39] Huang X J, Yan H F, Nazaretski E, et al. 11 nm hard X-ray focus from a large-aperture multilayer Laue lens [J]. *Scientific Reports*, 2013, 3: 3562.
- [40] Wang H Y, Liu C, Veetil S P, et al. Measurement of the complex transmittance of large optical elements with ptychographical iterative engine [J]. *Optics Express*, 2014, 22(2): 2159-2166.
- [41] Wang H Y, Liu C, Pan X C, et al. The application of ptychography in the field of high power laser [J]. *Proceedings of SPIE*, 2015, 9255: 925534.
- [42] Maiden A, Johnson D, Li P. Further improvements to the ptychographical iterative engine [J]. *Optica*,

- 2017, 4(7): 736-745.
- [43] Batey D J, Claus D, Rodenburg J M. Information multiplexing in ptychography[J]. *Ultramicroscopy*, 2014, 138: 13-21.
- [44] Ferrand P, Allain M, Chamard V. Ptychography in anisotropic media[J]. *Optics Letters*, 2015, 40(22): 5144-5147.
- [45] Yao Y D, Liu C, Zhu J Q. Compensation for the setup instability in ptychographic imaging[J]. *Optics Express*, 2017, 25(10): 11969-11983.
- [46] Hüe F, Rodenburg J M, Maiden A M, et al. Extended ptychography in the transmission electron microscope: possibilities and limitations [J]. *Ultramicroscopy*, 2011, 111(8): 1117-1123.
- [47] Hurst A C, Edo T B, Walther T, et al. Probe position recovery for ptychographical imaging [J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2010, 241(1): 012004.
- [48] Dwivedi P, Konijnenberg A P, Pereira S F, et al. Lateral position correction in ptychography using the gradient of intensity patterns [J]. *Ultramicroscopy*, 2018, 192: 29-36.
- [49] Shenfield A, Rodenburg J M. Evolutionary determination of experimental parameters for ptychographical imaging [J]. *Journal of Applied Physics*, 2011, 109(12): 124510.
- [50] Dwivedi P, Konijnenberg A P, Pereira S F, et al. Position correction in ptychography using hybrid input-output (HIO) and cross-correlation[J]. *Journal of Optics*, 2019, 21(3): 035604.
- [51] Zheng C, He X L, Liu C, et al. A study on the influence of the axial distance error to the image quality of the ptychographic iterative engine[J]. *Acta Optica Sinica*, 2014, 34(10): 1011003.  
郑晨, 何小亮, 刘诚, 等. 关于轴向距离误差对 PIE 成像质量影响的研究[J]. *光学学报*, 2014, 34(10): 1011003.
- [52] Dou J T, Gao Z S, Ma J, et al. Correction of axial distance error in ptychography based on image information entropy[J]. *Acta Physica Sinica*, 2017, 66(16): 164203.  
窦健泰, 高志山, 马骏, 等. 基于图像信息熵的 ptychography 轴向距离误差校正 [J]. *物理学报*, 2017, 66(16): 164203.
- [53] Faulkner H M L, Rodenburg J M. Error tolerance of an iterative phase retrieval algorithm for moveable illumination microscopy[J]. *Ultramicroscopy*, 2005, 103(2): 153-164.
- [54] Pan X C, Veetil S P, Wang B S, et al. Ptychographical imaging with partially saturated diffraction patterns [J]. *Journal of Modern Optics*, 2015, 62(15): 1270-1277.
- [55] Edo T B, Batey D J, Maiden A M, et al. Sampling in X-ray ptychography [J]. *Physical Review A*, 2013, 87(5): 053850.
- [56] Batey D J, Edo T B, Rau C, et al. Reciprocal-space up-sampling from real-space oversampling in X-ray ptychography [J]. *Physical Review A*, 2014, 89(4): 043812.
- [57] Pan A, Yao B L. Three-dimensional space optimization for near-field ptychography [J]. *Optics Express*, 2019, 27(4): 5433-5446.
- [58] Odstrčil M, Holler M, Guizar-Sicairos M. Arbitrary-path fly-scan ptychography [J]. *Optics Express*, 2018, 26(10): 12585-12593.
- [59] Huang X J, Lauer K, Clark J N, et al. Fly-scan ptychography [J]. *Scientific Reports*, 2015, 5: 9074.
- [60] Öztürk H, Yan H F, He Y, et al. Multi-slice ptychography with large numerical aperture multilayer Laue lenses [J]. *Optica*, 2018, 5(5): 601-607.
- [61] Chen B K, Sidorenko P, Lahav O, et al. Multiplexed single-shot ptychography [J]. *Optics Letters*, 2018, 43(21): 5379-5382.
- [62] Sidorenko P, Lahav O, Cohen O. Ptychographic ultrahigh-speed imaging [J]. *Optics Express*, 2017, 25(10): 10997-11008.
- [63] Hu C Y, Du Z M, Chen M H, et al. Single-shot ultrafast phase retrieval photography [J]. *Optics Letters*, 2019, 44(17): 4419-4422.
- [64] Liu C, Pan X C, Zhu J Q. Coherent diffractive imaging based on the multiple beam illumination with cross grating [J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, 62(18): 184204.  
刘诚, 潘兴臣, 朱健强. 基于光栅分光法的相干衍射成像 [J]. *物理学报*, 2013, 62(18): 184204.
- [65] Guizar-Sicairos M, Fienup J R. Understanding the twin-image problem in phase retrieval [J]. *Journal of the Optical Society of America A*, 2012, 29(11): 2367-2375.