

# 大角度倾斜照明条件下的 PIE 迭代重建算法研究

昌成成<sup>1,2,3</sup>, 潘兴臣<sup>1,2</sup>, 陶华<sup>1,2</sup>, 刘诚<sup>1,2\*</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高功率激光物理联合实验室, 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>中国科学院大学, 北京 100049

**摘要** 提出一种大倾角照明条件下的高精度 PIE(ptychographic iterative engine)迭代重建算法。该算法用小角度照明的透射光代替大角度照明的透射光,通过修正角谱传递函数,得到适应大角度迭代的光场传输公式。在非傍轴条件下,该算法能够避免样品面上相位分布欠采样的问题,同时精确计算衍射面上的衍射光斑,为单次曝光 PIE 成像的进一步发展和实际应用解决了最为关键的技术难题。

**关键词** 衍射; 相干衍射成像; 相位测量; 光学传递函数

中图分类号 O436

文献标志码 A

doi: 10.3788/AOS202040.1705001

## Reconstruction Algorithm for Ptychographic Iterative Engine with Highly Tilted Illumination

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

<sup>1</sup>National Laboratory on 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>University of Chinese Academy of Science, Beijing 100049, China

**Abstract** A high-precision reconstruction algorithm is proposed for ptychographic iterative engine (PIE) with highly tilted illumination. By replacing the highly tilted illumination with exiting light field of vertical illumination and modifying the optical transfer function in free space, a computing formula suitable for calculating the large-angle light propagation is obtained together with the corresponding iterative reconstruction algorithm. This proposed method successfully avoids the under-sampling of steep phase ramp of light beam on a sample plane while ensuring the computing accuracy for the diffraction intensity of the non-paraxial light beam on recording plane, overcoming the most significant technique problem that hinders the further improvement in reconstruction accuracy and the applications of single-shot PIE in various research fields.

**Key words** diffraction; coherent diffractive imaging; phase measurement; optical transfer function

**OCIS codes** 050.1940; 110.3010; 120.5050; 110.4850

## 1 引 言

作为一种新近发展起来的相干衍射成像技术<sup>[1-3]</sup>, PIE (ptychographic iterative engine)和 ePIE (extended ptychographic iterative engine)都是利用照明光对样品进行点阵扫描,记录样品在扫描过程

中所形成的衍射光斑列阵,并通过与之相应的迭代算法快速高精度地重建出样品的透射函数。和传统的相干衍射成像技术相比, PIE 具有视场大、成像精度高和收敛速度快等诸多优点<sup>[4-6]</sup>,而且重建的图像在对比度、信噪比和分辨率等各个方面已经可与传统的光学成像技术相比拟。在 PIE 基础上发展起

收稿日期: 2020-05-06; 修回日期: 2020-05-14; 录用日期: 2020-05-20

基金项目: 国家自然科学基金(61905261, 61827816, 11875308, 61675215)、中国科学院科研仪器设备研制项目(YJKYYQ20180024)、中国科学院战略性先导科技专项(A类)(XDA25020306)、上海市青年科技英才扬帆计划(18YF1426600)、上海市“科技创新行动计划”项目(19142202600)

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

来的 ePIE 技术,不仅可以恢复出样品的复振幅分布,还可以恢复出探针光的复振幅分布。关于 PIE 的研究工作已经从最初的电子束<sup>[1]</sup>和 X 射线波段<sup>[2-3]</sup>快速拓展到深紫外<sup>[7]</sup>、可见光<sup>[4-6]</sup>和太赫兹<sup>[8]</sup>波段,并被用于生物样品观测<sup>[5]</sup>、光场在线检测<sup>[9-11]</sup>、三维成像<sup>[12]</sup>、光学元件检测<sup>[13]</sup>和应力测量<sup>[14]</sup>等众多领域。

PIE 在成像速度和成像质量方面的优点,主要源自于高度冗余的记录数据,一般记录的衍射斑数量越多,重建图像的质量就越好。受平移台扫描速度的限制,大部分实验需要数秒到数分钟不等的的数据记录时间,因此普通 PIE 技术不能对等离子体分布<sup>[15]</sup>、激光损伤过程<sup>[16]</sup>和活细胞活动<sup>[17-18]</sup>等动态和瞬态样品进行成像。为缩短 PIE 的数据采集时间,各种单次曝光 PIE 技术<sup>[19]</sup>广受关注,它们用一台 CCD 的单次曝光采集整个衍射斑阵列,并采用相应的算法进行图像重建<sup>[20-21]</sup>。这些技术的具体实现方法各不相同,最简单的方法是用入射角度各不相同的多个光束同时对样品进行照明,并在 CCD 上形成彼此分立的衍射光斑<sup>[19-21]</sup>。为了避免因衍射光斑之间重叠而带来图像重建噪声、导致分辨率降低的问题,相邻的衍射光斑之间必须有足够的距离,相邻照明光束之间的角度差必须足够大。在大多数实际实验中,为了光路排布的方便,相邻光束之间的夹角理论上一般应在 5°左右,但即使记录 7×7 的衍射光斑阵列,边缘照明光束的入射角度将达到 15°。为了满足采样定理对照明光相位分布的采样要求,此时 CCD 单个像素的尺寸要小于一个波长,才可能在迭代过程分辨出透射光复振幅,如果要记录 13×13 的衍射光斑阵列,则要求 CCD 像元的尺寸小于半个波长。对于常用的氦氖激光来说,要求 CCD 的像元尺寸小于 0.3 μm,由于到目前为止还没有如此小像元的 CCD,单次曝光 PIE 成像实验中相邻照明光之间的入射角度一般只能取 1°~2°,但当样品的衍射能力稍强时,相邻衍射光斑之间很容易发生部分重叠,从而产生明显的图像噪声,导致对比度降低<sup>[19-21]</sup>,这是单次曝光 PIE 成像一直没能得到真正应用的根本原因。理论上,我们可以在数据记录时加大相邻照明光间的夹角,并在重建时将每个衍射光斑移到坐标原点(数组中心)后进行计算,但这其实是将边缘衍射斑当作傍轴近似的衍射光斑来处理。在照明光的入射角度大于 10°后,傍轴近似将带来明显的计算误差,简单地将衍射光斑移动到坐标中心,并不能解决记录平面上相位不分辨的问题,

必须研究大角度照明下的 PIE 重建算法。这一算法是决定单次曝光 PIE 成像能否取得实际应用的的最关键因素。

为解决大角度照明条件下的 PIE 精确重建问题,本文对 PIE 的重建算法进行改进,用小角度照明来计算样品在大角度照明时的透射光,并对传递函数进行修正,在保证正确计算衍射光斑强度的同时,避免在透射和衍射光中出现大的相位梯度,从根本上解决大倾斜角度照明情况下 PIE 的迭代重建问题,为单次曝光 PIE 成像的进一步发展和实际应用解决了最为关键的技术难题。本文在进行相关理论分析的同时,利用数值模拟验证和实际实验检验了该方法的可行性,证明即使在 32°入射角的照明情况下,仍然能得到准确的重建图像。

## 2 基本原理

### 2.1 基本原理

图 1(a)所示的是大倾角照明时 PIE 的数据记录光路,其中照明光与  $x$  轴和  $y$  轴的夹角分别为  $\alpha$  和  $\beta$ ,二维平移台拖动样品作二维阵列扫描,探测器在非涅耳衍射区域记录样品在每个位置处的衍射斑,记扫描位置的个数为  $J$ ,探测器和样品的间距为  $d$ 。假设样品的倾斜照明光为  $P(x, y)$ , 则

$$P(x, y) = P'(x, y) \exp \left[ i \frac{2\pi}{\lambda} (x \cos \alpha + y \cos \beta) \right]。 \quad (1)$$

若物体透射函数为  $O(x, y)$ , 则透射光为

$$U(x, y) = O(x, y) P'(x, y) \times \exp \left[ i \frac{2\pi}{\lambda} (x \cos \alpha + y \cos \beta) \right]。 \quad (2)$$

由于  $U(x, y)$  中存在相位倾斜因子  $\exp \left[ i \frac{2\pi}{\lambda} (x \cos \alpha + y \cos \beta) \right]$ , 因此在数值计算过程中,采样定理要求样品平面的采样间隔必须满足  $\Delta x < \frac{\lambda}{2 \cos \alpha}$  和  $\Delta y < \frac{\lambda}{2 \cos \beta}$ 。以氦氖激光为例,如果照明角度达到 60°, 则采样间隔需要 0.6 μm 左右,这是对于任何实际的 PIE 成像光路都无法达到的采样间隔。如果用菲涅耳空间积分来计算光场的传播,则需要探测器的尺寸为  $d\lambda/\Delta x$ , 若样品和探测器之间的间距为  $d = 6$  cm, CCD 的单像素尺寸为 6 μm×6 μm, 则 CCD 芯片的尺寸需要达到 6 cm×6 cm, 计算所需要的数组大小为 10000×10000。用很多个如此大的数组进行 PIE 重建,即使计算机的硬件内存和软件管理能力能够实现,重建速度也将

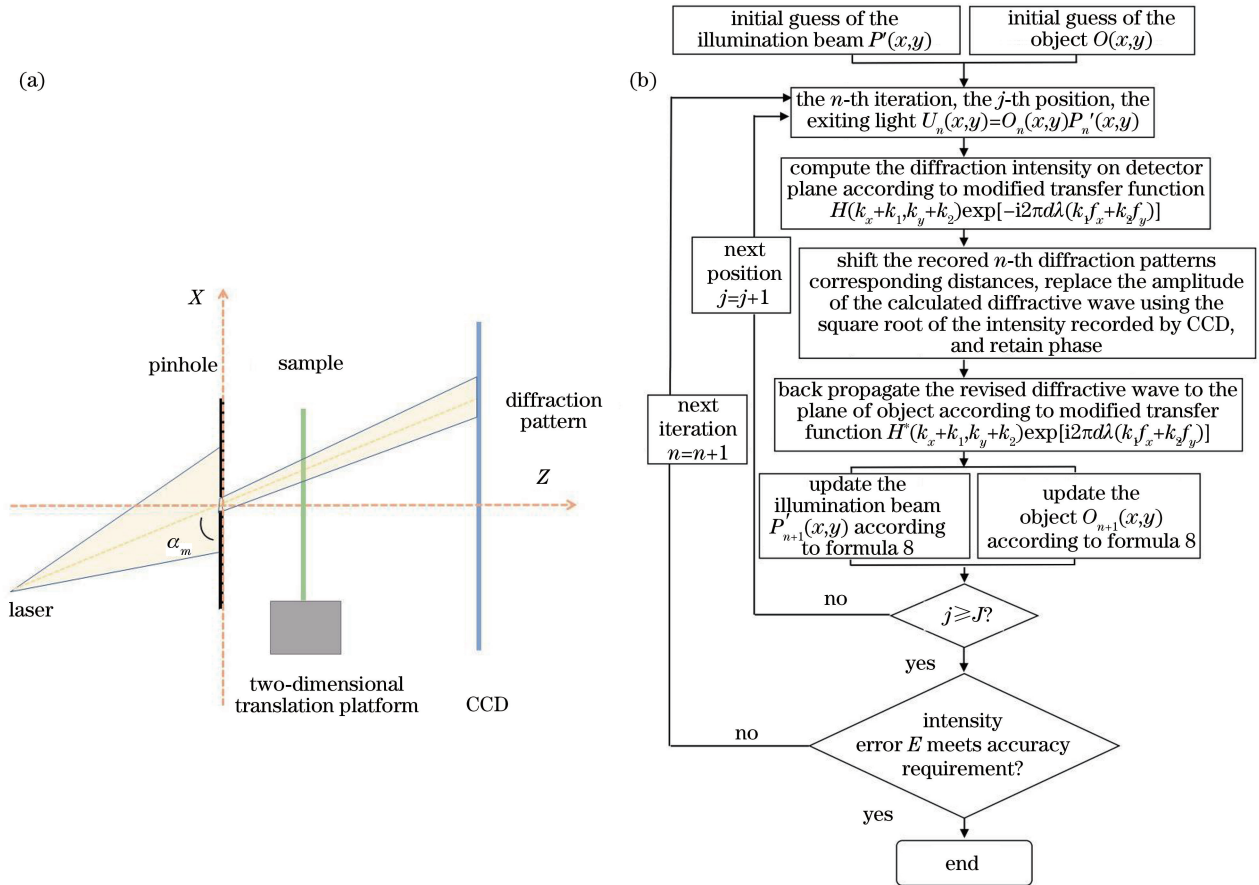


图 1 大角度 PIE 原理示意图。(a)光路原理图；(b)算法流程图

Fig. 1 Schematic diagram of PIE with highly tilted illumination. (a) Optical path schematic; (b) flowchart of the algorithm

慢到无法接受。如果用角谱理论来计算光传输过程,则意味着 CCD 的像元尺寸必须小于  $0.6 \mu\text{m} \times 0.6 \mu\text{m}$ ,到目前为止还没有如此小像元的 CCD。因此,基于多角度同时照明的单次曝光 PIE 成像,一直都无法利用大角度入射光对物体进行照明。(2)式中透射光的傅里叶变换可以表示为

$$\begin{aligned} \tilde{U}(f_x, f_y) &= \tilde{O}(f_x, f_y) \oplus \\ \tilde{P}'\left(f_x - \frac{\cos \alpha}{\lambda}, f_y - \frac{\cos \beta}{\lambda}\right), \end{aligned} \quad (3)$$

其中  $\oplus$  表示卷积。令  $\tilde{U}'(f_x, f_y) = \tilde{O}(f_x, f_y) \oplus \tilde{P}'(f_x, f_y)$ ,  $k_1 = \frac{\cos \alpha}{\lambda}$  和  $k_2 = \frac{\cos \beta}{\lambda}$ , 则(3)式可改写为  $\tilde{U}(f_x, f_y) = \tilde{U}'(f_x - k_1, f_y - k_2)$ 。若样品和探测器之间的轴向距离为  $d$ , 根据角谱传播公式, 探测器平面的光场分布为

$$\begin{aligned} D(x, y) &= \text{FT}^{-1}\{\tilde{U}(f_x, f_y) \times \\ H(f_x, f_y)\} \exp[i(k_1 x + k_2 y)], \end{aligned} \quad (4)$$

其中  $H(f_x, f_y) = \exp(i2\pi d \sqrt{\frac{1}{\lambda^2} - f_x^2 - f_y^2})$ , 令

$k_x = f_x - k_1$  和  $k_y = f_y - k_2$ , 则  $\tilde{U}(f_x, f_y)H(f_x, f_y)$  可以改写为

$$\begin{aligned} \tilde{U}(k_x + k_1, k_y + k_2)H(k_x + k_1, k_y + k_2) &= \\ \tilde{U}'(k_x, k_y)H(k_x + k_1, k_y + k_2). \end{aligned} \quad (5)$$

探测器平面上的光场分布可以写为

$$\begin{aligned} D(x, y) &= \text{FT}^{-1}\{\tilde{U}'(k_x, k_y) \times \\ H(k_x + k_1, k_y + k_2)\}, \end{aligned} \quad (6)$$

其中  $H(k_x + k_1, k_y + k_2)$  的相位项可以用泰勒级数展开, 即

$$\begin{aligned} \sqrt{1 - \lambda^2(f_x + k_1)^2 - \lambda^2(f_y + k_2)^2} &= \\ 1 - \frac{\lambda^2}{2}[(f_x + k_1)^2 + (f_y + k_2)^2] - \\ \frac{\lambda^4}{8}[(f_x + k_1)^2 + (f_y + k_2)^2]^2 + \dots \end{aligned} \quad (7)$$

由于  $(f_x + k_1)^2 + (f_y + k_2)^2 = f_x^2 + k_1^2 + 2f_x k_1 + f_y^2 + k_2^2 + 2f_y k_2$ , 因此(7)式中包含  $2f_x k_1 + 2f_y k_2$  和  $k_1 x + k_2 y$  两个线性相位项。当照明光倾斜引起  $k_1$  和  $k_2$  增大时, 前者  $2f_x k_1 + 2f_y k_2$  可引起

$H(k_x+k_1, k_y+k_2)$  相位欠采样, 故而无法对光场进行正常数字传输, 后者  $k_1x+k_2y$  可引起记录平面上的相位不可分辨, 导致反向传输难以实现。因此必须采用合适的计算方法将二者去除。从上述的数学分析过程可以看出, 只要将 (1) 式中的相位倾斜  $\exp\left[i\frac{2\pi}{\lambda}(x\cos\alpha+y\cos\beta)\right]$  舍去, 并采用  $H(k_x+k_1, k_y+k_2)\exp[-i2\pi d\lambda(k_1f_x+k_2f_y)]$  作为传递函数来进行光场的往复迭代运算, 即可以完全避免两个相位欠采样, 但这样计算会使计算的  $D(x, y)$  发生横向偏移, 变为  $D(x+d\cos\alpha, y+d\cos\beta)$ , 然而其相对分布并不发生变化。对于实际实验来说, 只要将记录的衍射斑平移  $-d\cos\alpha$  和  $-\beta$ , 且忽略照明光中的相位倾斜因子, 并用  $H(k_x+k_1, k_y+k_2)\exp[-i2\pi d\lambda(k_1f_x+k_2f_y)]$  作为传递函数, 即可完全避免相位欠采样问题, 保证大角度照明时迭代重建图像的准确性。

在利用实验数据进行图像重建时, 分别给样品透射函数  $O(x, y)$  和去掉倾斜相位因子后的照明光场  $P'(x, y)$  一个任意的初始值后, 第  $n$  次迭代过程描述如下, 其中样品和照明光对应的分布为  $O_n(x, y)$  和  $P'_n(x, y)$  :

1) 计算其透射光场  $U_n(x, y) = O_n(x, y) \times P'_n(x, y)$ , 并用  $H(k_x+k_1, k_y+k_2) \times \exp[-i2\pi d\lambda(k_1f_x+k_2f_y)]$  作为传递函数, 计算出探测器平面的光场分布  $D_n(x, y)$ 。

2) 将探测器探测的强度分布  $I_n(x, y)$  在  $x$  方向和  $y$  方向分别平移  $d\cos\alpha$  和  $d\cos\beta$  后, 用其平方根代替  $D_n(x, y)$  的振幅并保持其相位不变, 并用  $H^*(k_x+k_1, k_y+k_2)\exp[i2\pi d\lambda(k_1f_x+k_2f_y)]$  作为传递函数, 将其反向传播回样品平面, 得到更新的透射光  $U'_n(x, y)$ , 将样品的透射函数和样品平面的照明光更新为

$$\begin{cases} O_{n+1}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j) = O_n(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j) + \frac{P'_n(\mathbf{r})}{|P'_n(\mathbf{r})|^2 + \eta} [U'_n(\mathbf{r}) - U_n(\mathbf{r})] \\ P'_{n+1}(\mathbf{r}) = P'_n(\mathbf{r}) + \frac{O_n(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)}{|O_n(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j)|^2 + \eta} [U'_n(\mathbf{r}) - U_n(\mathbf{r})] \end{cases} \quad (8)$$

3) 用下一个位置的衍射光斑重复上述 1)、2) 步骤, 直至所有的衍射光斑全部计算完成, 其中  $\eta$  为自选常数, 用来调节更新速度, 取值在 0 到 1 之间, 矢量  $\mathbf{r}=(x, y)$ ,  $\mathbf{r}_j$  为第  $j$  个平移矢量。

4) 实际记录光斑和重建得到光斑之间的误差, 表示为

$$E_n = \frac{\sum_{x,y} |I(x, y) - |D_n(x, y)|^2|}{\sum_{x,y} |I(x, y)|} \quad (9)$$

相应的算法流程如图 1 (b) 所示。

## 2.2 数值仿真

为了说明上述大角度倾斜照明迭代重建和普通傍轴近似条件下的迭代重建公式对 PIE 重建图像质量的影响特性, 首先利用数值模拟方法进行验证。光源波长为 633 nm, 激光点源以  $56^\circ$  入射角穿过一个直径为 2 mm 的小孔后照射到样品上, 点源、小孔、样品和探测器之间的距离分别是 210 mm、9 mm 和 80 mm, 探测器采样间隔为  $9 \mu\text{m}$ , 分辨率为  $2048 \text{ pixel} \times 2048 \text{ pixel}$ 。为了满足采样定理的要求, 并准确计算出照射在样品平面上的照明光分布, 用  $4500 \times 4500$  的数组和  $0.45 \mu\text{m}$  的采样间隔来对

小孔平面的光进行采样, 在衍射面上以  $9 \mu\text{m}$  的采样间隔用惠更斯-菲涅耳叠加积分公式, 计算无样品时的光斑复振幅分布。由于惠更斯-菲涅耳叠加积分不包含任何近似, 可以认为计算所得到的衍射光是完全准确的。计算所得衍射光斑的强度分布在图 2(a) 中给出, 从中可以看出, 在大角度倾斜照明时, 光斑不再具有旋转对称性。由于  $0.45 \mu\text{m}$  的采样间隔和  $4500 \times 4500$  的数组对实际的 PIE 实验来说并不现实, 根据 (6) 式, 用  $1024 \times 1024$  的数组和  $9 \mu\text{m}$  采样间隔重新计算了无样品时的衍射光, 计算所得的强度分布在图 2(b) 中给出, 比较可以发现图 2(a) 和图 2(b) 几乎一样。为了量化比较二者的区别, 对图 2(a) 和图 2(b) 进行相关运算, 得到的最大相关峰值为 0.992, 由此说明图 2(a) 和图 2(b) 高度一致, 但由于图 2(b) 的数组所占内存仅仅是图 2(a) 的 5%, 因此能够实际用于 PIE 成像。图 2(c) 和图 2(d) 分别是在光束传播方向同光轴夹角为  $3^\circ$  和  $0^\circ$  时的衍射光强度分布, 可以发现二者很相似, 但是它们和图 2(a)、图 2(b) 有明显的区别, 故在大角度照明条件下不能简单地将衍射斑平移到数组中心后进行 PIE 迭代重建。



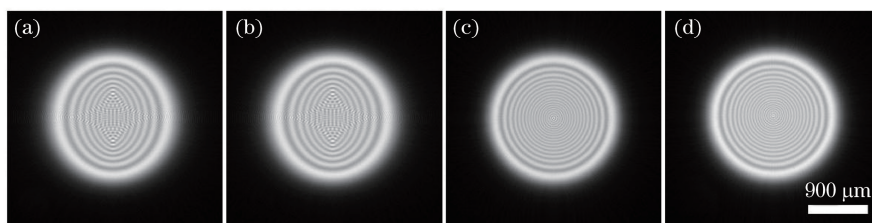


图 2 不同入射角度下的光斑分布图。(a)利用惠更斯-菲涅耳叠加积分计算的大角度衍射光斑；  
(b)利用大角度角谱计算的衍射光斑；(c) 3°时对应的衍射光斑；(d) 0°时对应的衍射光斑

Fig. 2 Diffraction patterns with different incident angles. (a) Diffraction pattern calculated by spherical wave integration based on Huygens-Fresnel principle with large incident angle; (b) diffraction pattern calculated by the revised angular spectrum with the same incident angle; (c) diffraction pattern when the incident angle is 3°; (d) diffraction pattern when the incident angle is 0°

图 3(a)和图 3(b)给出模拟计算中的样品透射函数的振幅和相位,模拟图片的大小为 6.5 mm × 6.5 mm,振幅大小在 1~100 之间,相位大小在 0~0.1π 之间,照明光同光轴的夹角为 56°,x 轴的夹角为 34°,其振幅分布如图 3(c)所示,由于光轴角度较大,存在较大的相位梯度,当乘上其共轭相位梯度

后,得到的照明光相位分布如图 3(d)所示。当样品以 0.378 mm 的间隔进行 7×7 网格状扫描时,用惠更斯-菲涅耳叠加积分公式计算出了 CCD 平面上的衍射光斑,其中代表性的 9 个衍射光斑的强度如图 4 所示,为方便显示,此处都按照光斑光轴中心进行对称选取。

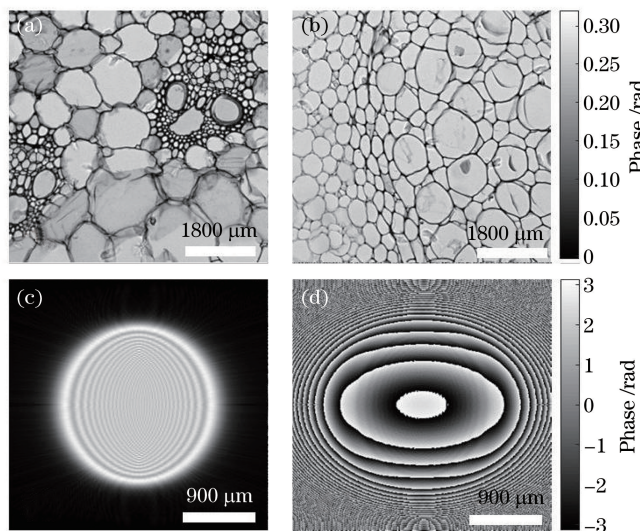


图 3 模拟初始值。(a)样品振幅;(b)样品相位;(c)照明光振幅;(d)照明光相位  
Fig. 3 Simulated initial value. (a) Amplitude of specimen; (b) phase of specimen;  
(c) amplitude of probe light; (d) phase of probe light

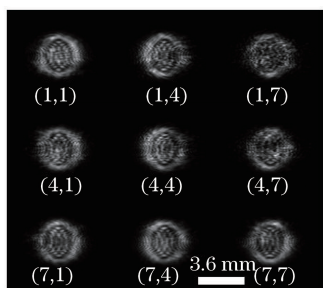


图 4 代表性的 9 幅衍射光斑  
Fig. 4 Representative 9 diffraction patterns of dataset

为了便于比较,首先按照常规傍轴近似方法,将图 4 中所有的衍射光斑全部平移到中心后,直接用普通的角谱传播来进行 ePIE 重建。图 5(a)和图 5(b)中给出 500 次循环后重建的图像振幅和相位,对应的重建得到的照明光振幅和相位如图 5(c)和图 5(d)所示。与图 3 中的原图相比可以发现,重建图像质量较差,仅能够重建出样品结构的轮廓,因此在大角度衍射情况下,普通角谱传播方法是不适用的。采用(6)式的传递函数对图 4 中的衍射斑进

行 ePIE 重建,得到样品的振幅和相位在如图 6(a)和图 6(b)所示,重建得到的照明光振幅和相位分布

如图 6(c)和图 6(d)所示。可以发现重建图像和图 3 中的原图基本一样,肉眼看不出两者的差别。

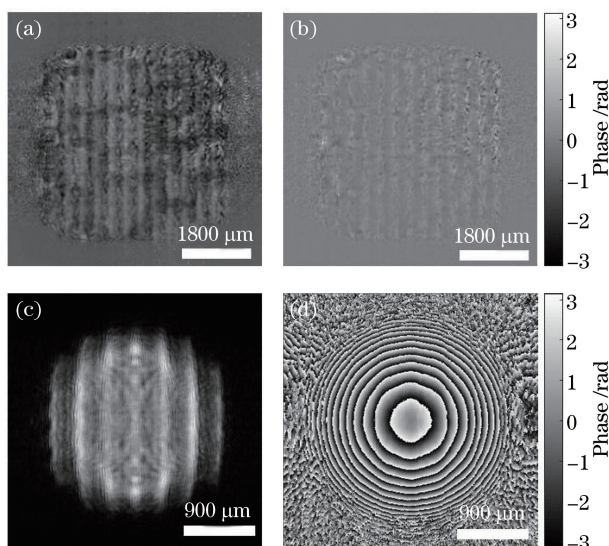


图 5 大角度下普通 ePIE 重建结果(500 次迭代)。(a)物体振幅;(b)物体相位;(c)照明光振幅;(d)照明光相位  
Fig. 5 Reconstructed results based on general ePIE algorithm with highly tilted illumination after 500 iterations.  
(a) Amplitude of specimen; (b) phase of specimen; (c) amplitude of probe light; (d) phase of probe light

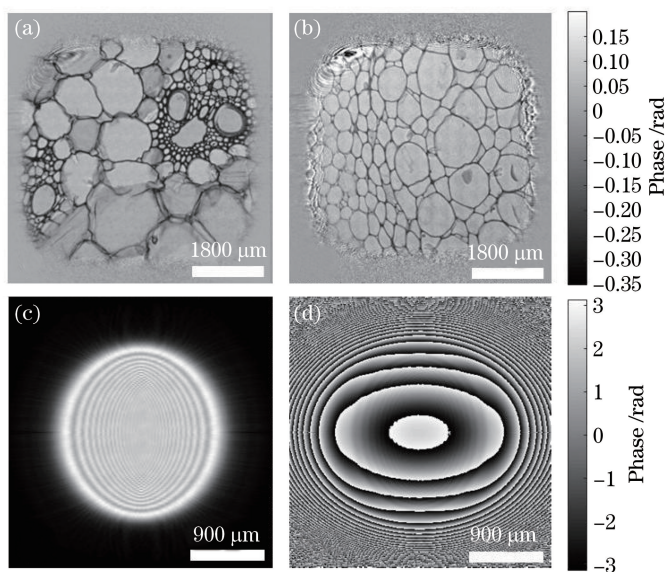


图 6 基于大角度角谱计算方法的 ePIE 重建结果(500 次迭代)。(a)物体振幅;(b)物体相位;(c)照明光振幅;(d)照明光相位  
Fig. 6 Reconstructed results based on revised angular spectrum and ePIE after 500 iterations.

(a) Amplitude of specimen; (b) phase of specimen; (c) amplitude of probe light; (d) phase of probe light

为精确对比两种计算方法的收敛性,其对应的误差曲线如图 7 所示,其中实线表示利用所提大角度角谱算法得到的重建结果,虚线表示利用傍轴近似计算方法得到的误差曲线,可以看出,傍轴近似算法在 100 次迭代后误差基本稳定在 0.13,最终达到 0.12,而大角度角谱算法在 50 次迭代时误差已经降低到 0.004,且 500 次迭代结束时达到 0.003,是传统算法误差的

1/40,因此无论是收敛速度还是最终误差,都要远优于傍轴近似算法,这一结果印证了图 5 和图 6 中的结果,证明本文所提方法有良好的重建精度和重建速度。

在上述讨论的大角度倾斜照明中,入射角的角度被假定为已知,但是实际实验中总存在一定的误差。为讨论简单并不失一般性,可考虑照明光同  $x$  轴夹角为  $\epsilon$  的一维情况,实际形成的衍射光斑强度

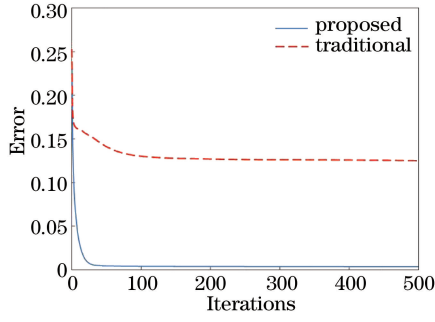


图 7 两种计算方法对应的误差曲线

Fig. 7 Error curves corresponding to the two calculation methods

$$I(x) = |D(x)|^2 = \left| \text{FT}^{-1} \left\{ \tilde{U}(f_x) H \left( f_x + \frac{\cos \epsilon}{\lambda} \right) \exp \left( i \frac{\cos \epsilon}{\lambda} x \right) \right\} \right|^2,$$

当存在角度测量误差  $\Delta\epsilon$  时,认为照明光同  $x$  轴夹角为  $\epsilon + \Delta\epsilon$ ,直接计算所得的衍射光斑的强度为

$$I'(x) = |D'(x)|^2 = \left| \text{FT}^{-1} \left\{ \tilde{U}(f_x) H \left[ f_x + \frac{\cos(\epsilon + \Delta\epsilon)}{\lambda} \right] \times \exp \left[ i \frac{\cos(\epsilon + \Delta\epsilon)}{\lambda} x \right] \right\} \right|^2. \quad (10)$$

实际形成的衍射斑  $I(x)$  和计算所得的衍射斑  $I'(x)$ ,其强度分布和位置都不相同。但用 ePIE 进行迭代重建的过程中,每一步都用  $I(x)$  来代替  $I'(x)$ ,并在此基础上对照明光进行更新,经过足够

多次数的迭代后,  $I'(x)$  的结构分布和空间位置会变得和  $I(x)$  完全相同,但由于截取的位置仍然按照  $\epsilon + \Delta\epsilon$  角度截取,参与计算的衍射斑存在一个位置误差  $\delta_x = [\cos(\epsilon + \Delta\epsilon) - \cos\epsilon]$ ,这个误差会使照明光和样品的位置在样品平面产生同样大小的位置平移,但照明光和样品的结构信息完全不受影响。因此,在样品照明光的角度测量存在误差时,ePIE 算法所得到的照明光和样品仅仅存在一个空间平移,而对重建精度没有任何影响。

为验证上述关于角度误差对重建精度影响的结论,采用和图 6 模拟中相同的光路参数,当入射光同  $z$  轴夹角为  $56^\circ$ ,且角度误差分别为  $-1.5^\circ$ 、 $0^\circ$  和  $1.5^\circ$  时,得到图 8(a) 中的衍射斑,从中可以看出,  $-1.5^\circ$  和  $1.5^\circ$  的偏差所引起的衍射斑间距的偏离分别为  $6.449 \text{ mm}$  和  $6.970 \text{ mm}$ ,二者并不相等。将这 3 组衍射斑按照正确的  $56^\circ$  夹角进行位置截取后并再现,再现所得的图像在图 8(c) 中给出,从中可以看出三个重建图像完全相同,但在物体平面上有和衍射斑相同的偏移量。这个结果和上述的分析完全吻合,因此当采用大角度倾斜照明算法进行 ePIE 迭代计算时,即使存在角度测量偏差,这种偏差也不会影响重建结果收敛性和重建精度,只不过相对于没有角度误差的重建结果,照明光和物体会在空间上产生一个额外的平移。

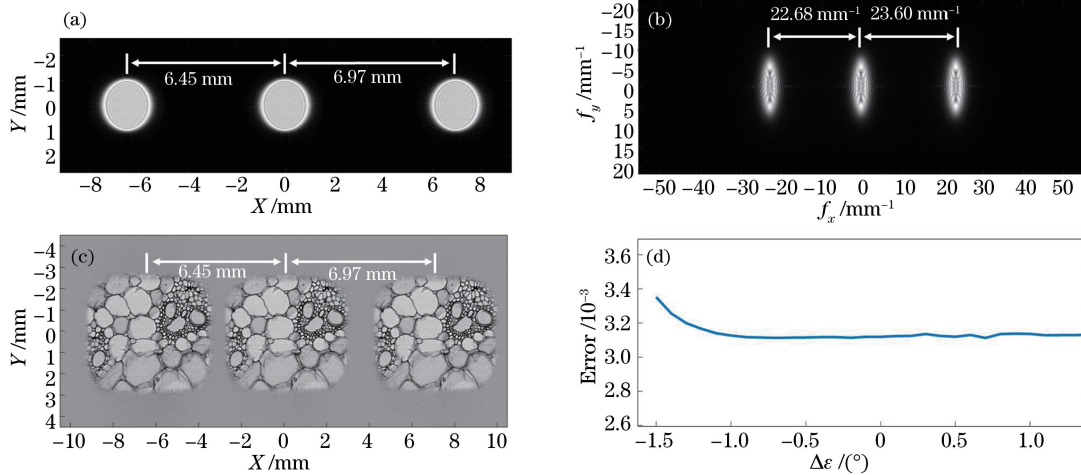


图 8 角度误差分别为  $-1.5^\circ$ 、 $0^\circ$  和  $1.5^\circ$  时的重建结果。(a)照明光振幅;

(b)照明光频谱;(c)物体振幅;(d)角度误差变化时的误差曲线

Fig. 8 Reconstructed results at the angle errors from  $-1.5^\circ$  to  $1.5^\circ$ . (a) Reconstructed amplitude of probe light; (b) spectrum intensity of probe light; (c) amplitude of specimen; (d) error curve with the change of different angle errors

### 2.3 实验验证

为了检验本文所提方法在实验中的可行性,利

用氩氦激光进行了实验验证。光路仍然采用图 1(a) 中的元件排布方案,其中照明光的传播方向



和光轴的夹角为  $32^\circ$ , 小孔到样品的距离为 9 mm, 样品到 CCD 的距离为 80 mm, CCD 型号为 AVT Pike F1100B, 其像元大小为  $9 \mu\text{m} \times 9 \mu\text{m}$ , 总像元数为  $4008 \times 2672$ 。生物切片样品被固定在扫描平台上, 以  $126 \mu\text{m}$  的间隔扫描  $10 \times 10$  个位置, 并记录下所有扫描位置处的衍射光斑, 图 9 中给出了部分记录到的衍射光斑。

利用上文提出的大角度照明条件下的 ePIE 重建方法, 对图 9 中记录的衍射光斑进行重建, 重建所得样品的振幅和相位在图 10(a) 和图 10(b) 中给出, 从中可以看出图像具有很高的信噪比, 生物细胞的细胞壁清晰可见。图 10(c) 和图 10(d) 给出了重建照明光的振幅和相位。通过与图 6 中照明光的复振幅对比, 可以看到实验结果和仿真结果是一致的。

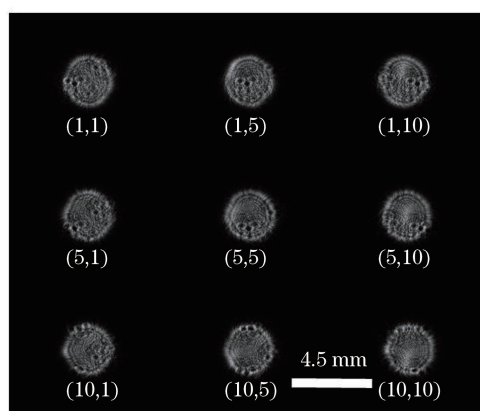


图 9 部分衍射光斑阵列(坐标对应衍射光斑在  $10 \times 10$  阵列中的位置信息)

Fig. 9 Part of diffraction patterns recorded by CCD, in which the coordinates represent the position information among the grid of  $10 \times 10$

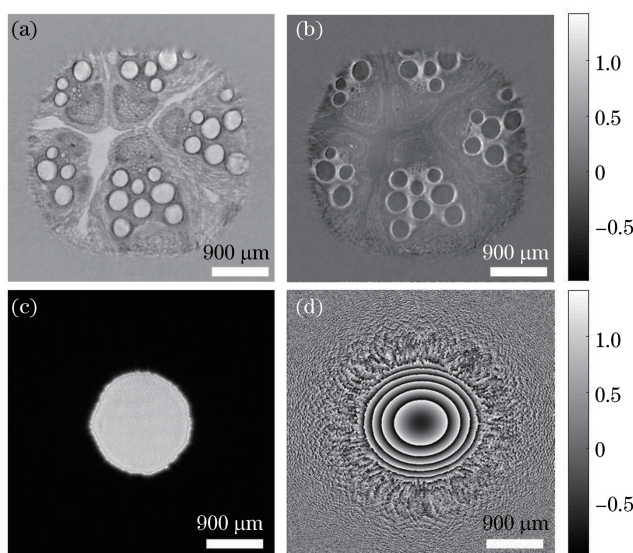


图 10 基于大角度角谱计算方法的 ePIE 实验结果。(a) 物体振幅; (b) 物体相位; (c) 照明光振幅; (d) 照明光相位

Fig. 10 Experimental results based on revised angular spectrum and ePIE with highly tilted illumination.

(a) Amplitude of specimen; (b) phase of specimen; (c) amplitude of probe light; (d) phase of probe light

为了便于比较, 采用傍轴近似方法, 将所有衍射斑移动到数组中心, 重建所得的样品的振幅和相位在图 11(a) 和图 11(b) 中给出, 其与图 10(a) 和图 10(b) 相比有明显的图像扭曲和很高的重建噪声, 图像分辨率有明显的下降。重建得到的照明光振幅和相位分布如图 11(c) 和图 11(d) 所示, 与图 5 相比, 可以看到照明光复振幅分布与理论模拟一致。

图 12 给出了重建过程的收敛曲线, 其中实线表示利用所提大角度角谱算法得到的重建结果, 虚线表示利用傍轴近似方法得到的误差曲线。从中可以看出, 利用(8)式经过 80 次的迭代重建, 可得采用大

角度角谱算法的误差已经降低到 0.08, 采用傍轴近似算法的误差基本稳定在 0.102。实验结果与理论计算趋势一致, 证明了本文所提方法在收敛速度及成像精度方面的优越性。

为了量化衡量本方法对 PIE 图像分辨率的提高效果, 用标准分辨率板 USAF 1951 作为样品重复上述实验, 重建图像在图 13(a) 中给出, 从中可以看出, 能分辨到第 5 组的元素, 表明分辨率达到  $12.4 \mu\text{m}$ 。用普通方法对所记录的衍射阵列进行重建所获得的图像在图 13(c) 中给出, 其中第 3 组的元素可以分辨, 分辨率达到  $49.5 \mu\text{m}$ , 所以在我们的



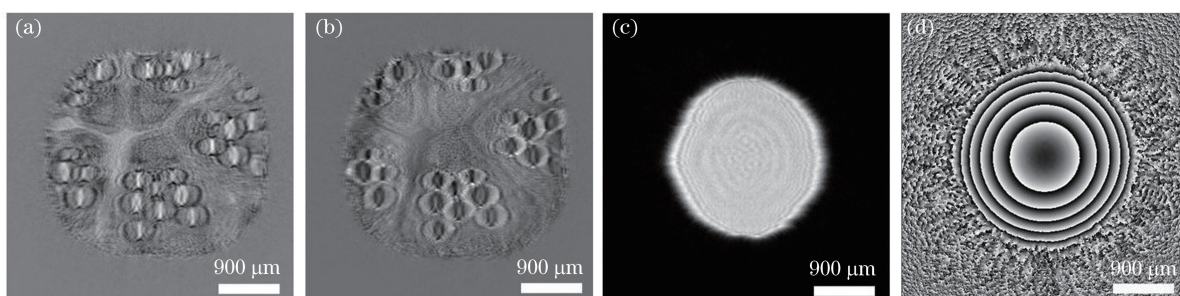


图 11 大角度下普通 ePIE 重建实验结果。(a)物体振幅;(b)物体相位;(c)照明光振幅;(d)照明光相位

Fig. 11 Experimental results based on general ePIE algorithm with highly tilted illumination. (a) Amplitude of specimen; (b) phase of specimen; (c) amplitude of probe light; (d) phase of probe light

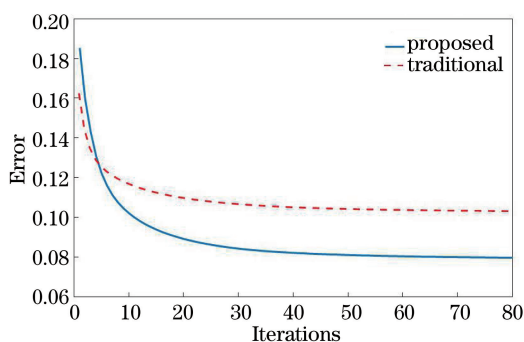


图 12 两种算法对应的误差曲线

Fig. 12 Experimental error curves corresponding to the two calculation methods

实验中,利用本文所提的大角度照明条件下的重建方法,可以将分辨率提高 4 倍,充分说明本方法对大倾角照明 PIE 具有良好的适用性。

### 3 结 论

为解决多角度照明单次曝光 PIE 成像中,照明光的倾角不能超过傍轴近似范围的问题,本文提出一种大倾角照明条件下的 PIE 重建算法。利用小角度照明来计算样品在大角度照明时的透射光,并用修正的传递函数对光束在样品平面和探测器平面之间进行往复传播,不仅可确保衍射光斑强度计算正确,还可避免出现大倾斜相位。本文在给出系统理论分析的同时,进行了数值模拟和实验验证,充分证明了本文方法在实际实验中的可行性,空间分辨率提升了 4 倍。本文所提方法从根本上解决了大倾角照明情况下 PIE 的迭代重建问题,为单次曝光 PIE 成像的进一步发展和实际应用解决了最为关键的技术难题。

### 参 考 文 献

- [1] Humphry M J, Kraus B, Hurst A C, et al. Ptychographic electron microscopy using high-angle dark-field scattering for sub-nanometre resolution imaging[J]. Nature Communications, 2012, 3: 730.
- [2] Brun F, di Trapani V, Batey D, et al. Edge-subtraction X-ray ptychographic imaging with pink beam synchrotron radiation and a single photon-counting detector[J]. Scientific Reports, 2020, 10: 6526.
- [3] Polo C C, Pereira L, Mazzafera P, et al. Correlations between lignin content and structural robustness in plants revealed by X-ray ptychography[J]. Scientific Reports, 2020, 10: 6023.
- [4] Xu W H, Lin H X, Wang H Y, et al. Super-resolution near-field ptychography [J]. Optics

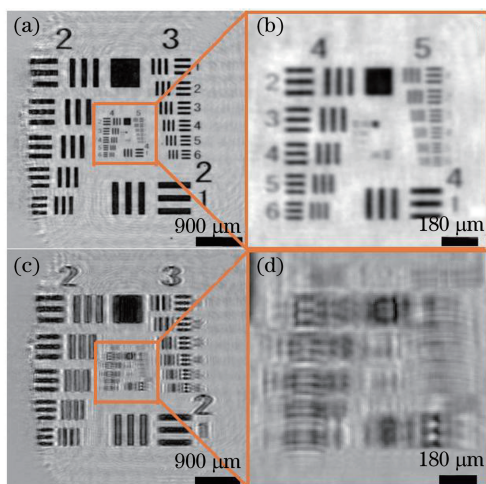


图 13 两种不同方法恢复的标准分辨率板(USAF 1951)。(a)采用本文提出算法的重建结果;(b)图(a)的局部放大;(c)相同数据下利用普通 ePIE 的重建结果;(d)图(c)的局部放大

Fig. 13 Experimental results of USAF 1951 test target. (a) Reconstructed results with the proposed algorithm; (b) locally enlarged view of Fig. 13 (a); (c) reconstructed results with the traditional ePIE algorithm; (d) locally enlarged view of Fig. 13 (c)

- Express, 2020, 28(4): 5164-5178.
- [5] Jiang S W, Zhu J K, Song P M, et al. Wide-field, high-resolution lensless on-chip microscopy via near-field blind ptychographic modulation [J]. Lab on a Chip, 2020, 20(6): 1058-1065.
- [6] Song P M, Jiang S W, Zhang H, et al. Super-resolution microscopy via ptychographic structured modulation of a diffuser [J]. Optics Letters, 2019, 44(15): 3645-3648.
- [7] Seaberg M D, Zhang B S, Gardner D F, et al. Tabletop nanometer extreme ultraviolet imaging in an extended reflection mode using coherent Fresnel ptychography [J]. Optica, 2014, 1(1): 39-44.
- [8] Wang D Y, Li B, Rong L, et al. Multi-layered full-field phase imaging using continuous-wave terahertz ptychography [J]. Optics Letters, 2020, 45(6): 1391-1394.
- [9] Du M Q, Loetgering L, Eikema K S E, et al. Measuring laser beam quality, wavefronts, and lens aberrations using ptychography [J]. Optics Express, 2020, 28(4): 5022-5034.
- [10] Sun J S, Chen Q, Zhang J L, et al. Single-shot quantitative phase microscopy based on color-multiplexed Fourier ptychography [J]. Optics Letters, 2018, 43(14): 3365-3368.
- [11] Dong X, Pan X C, Liu C, et al. Single shot multi-wavelength phase retrieval with coherent modulation imaging [J]. Optics Letters, 2018, 43(8): 1762-1765.
- [12] Godden T M, Suman R, Humphry M J, et al. Ptychographic microscope for three-dimensional imaging [J]. Optics Express, 2014, 22(10): 12513-12523.
- [13] Zhang X J, Cheng B, Liu C, et al. Measurement of mid-frequency wavefront error for large optical components with ptychography [J]. Applied Optics, 2019, 58(2): 264-269.
- [14] Bei C, Zhang X J, Cheng L, et al. Full-field stress measurement based on polarization ptychography [J]. Journal of Optics, 2019, 21(6): 065602.
- [15] Kodama R, Norreys P A, Mima K, et al. Fast heating of ultrahigh-density plasma as a step towards laser fusion ignition [J]. Nature, 2001, 412(6849): 798-802.
- [16] Liu F, Jiao H F, Ma B, et al. Influence of the surface and subsurface contaminants on laser-induced damage threshold of anti-reflection sub-wavelength structures working at 1064 nm [J]. Optics & Laser Technology, 2020, 127: 106144.
- [17] Petty H R. Spatiotemporal chemical dynamics in living cells: from information trafficking to cell physiology [J]. Biosystems, 2006, 83(2/3): 217-224.
- [18] Marrison J, Rätty L, Marriott P, et al. Ptychography: a label free, high-contrast imaging technique for live cells using quantitative phase information [J]. Scientific Reports, 2013, 3: 2369.
- [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] He X L, Liu C, Zhu J Q. Single-shot Fourier ptychography based on diffractive beam splitting [J]. Optics Letters, 2018, 43(2): 214-217.
- [21] He X L, Liu C, Zhu J Q. Single-shot aperture-scanning Fourier ptychography [J]. Optics Express, 2018, 26(22): 28187-28196.