

## Волновой пакет в фазовой проблеме оптики и птихографии

Н.Л. Попов, И.А. Артюков, А.В. Виноградов, В.В. Протопопов

*Птихография сегодня представляется наиболее естественным и эффективным методом приближения к дифракционному пределу оптического разрешения. Принципиальная схема птихоскопа не содержит преломляющих или фокусирующих элементов и включает в себя источник когерентного освещения, платформу для перемещения (макроскопического) объекта и приёмник для регистрации прошедшего или отражённого объектом излучения, связанного с компьютером для обработки дифрактограмм. В классической оптике главной задачей при достижении высокого пространственного разрешения являются исправление и исключение аберраций оптических систем, тогда как в птихографии пространственное разрешение зависит главным образом от надёжности регистрации и компьютерной обработки дифрактограмм с большими числовыми апертурами. После краткого введения о истории и современном состоянии птихографии подробно рассматривается метод волнового пакета для расчёта волнового поля на детекторе в дальней зоне и при большой числовой апертуре, позволяющий установить соотношения полей на объекте и детекторе, которые лежат в основе алгоритмов восстановления изображений ePIE (extended Ptychography Iterative Engine), применяющихся на практике. Реализация алгоритмов предполагает выполнение операций с функциями, заданными в определённых доменах (координатных сетках) прямого пространства и фурье-пространства, связанных с объектом и детектором. Размеры и шаги таких сеток жёстко связаны с размерами объекта, его расстоянием до детектора и числовой апертурой. Созданные при выполнении данной работы программы использованы для уточнения пределов применимости параксиального приближения (интеграла Френеля) для расчёта поля на детекторе. Приведены результаты моделирования изображений, полученных методом птихографии.*

**Ключевые слова:** птихография, восстановление фазы

PACS numbers: 42.25. – p, 42.30. – d

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2020.05.038775>

## Содержание

1. Введение (820).
  2. Восстановление фазы (и модуля) когерентного поля. Метод волнового пакета (821).
  3. Дискретизация восстановления фазы в методе волнового пакета (822).
  4. Результаты расчётов. Сравнение метода волнового пакета и параксиального приближения (825).
  5. Птихография. Результаты расчётов (825).
  6. Заключение (827).
- Список литературы (828).

## 1. Введение

Термин "фазовая проблема оптики" тесно связан с понятием "безлинзовая оптика". В обоих случаях возникает задача, которая вначале формулировалась так: восстановить фазу волнового поля, создаваемого когерентным лазерным пучком, по измерениям его модуля в

двух параллельных плоскостях: объекта и детектора. При этом используется итерационный процесс, одной из составляющих которого является расчёт распространения когерентного излучения от плоскости объекта к плоскости детектора, а результатом — распределение амплитуды комплексного поля в обеих плоскостях. Впервые подобная задача была рассмотрена ещё в [1] с помощью одного из лучших на тот момент компьютера с памятью  $\sim 1$  мегабайт и производительностью  $\sim 1$  мегафлоп, что позволило анализировать большое число изображений размером  $32 \times 32$ . Развитие идей этой работы и привело к возникновению безлинзовой оптики (lensless imaging)<sup>1</sup> в том виде, в котором она применяется в настоящее время в видимом, вакуумном ультрафиолетовом и рентгеновском диапазонах [2–9]<sup>2</sup>. По мере развития этого направления первоначальный алгоритм [1] неоднократно модифицировался и становился всё более эффективным, в том числе благодаря совершенствованию вычислительной техники. Разработаны алгоритмы, позволившие отказаться от измерений распределения интенсивности на объекте, используя вместо этого априорную информацию. В результате безлинзовые методы получения изображений начали применяться в физических исследованиях и появились коммерческие

Н.Л. Попов<sup>(1)</sup>, И.А. Артюков<sup>(2)</sup>, А.В. Виноградов<sup>(3)</sup>, В.В. Протопопов  
Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,  
Ленинский просп. 53, 119991 Москва, Российская Федерация  
E-mail: <sup>(1)</sup> popovnl@sci.lebedev.ru, <sup>(2)</sup> iart@mail.ru,  
<sup>(3)</sup> vinograd@sci.lebedev.ru

Статья поступила 19 января 2020 г.,  
после доработки 12 мая 2020 г.

<sup>1</sup> Получение изображений без использования оптических элементов, устанавливаемых на пути излучения от объекта к детектору, регистрирующему интенсивность.

<sup>2</sup> Из отечественных работ следует отметить [10–16].

предложения на их основе [17–20]. Из них наиболее распространённым на текущий момент представляется *птихография* [21, 22] — метод восстановления амплитуды и фазы поля на объекте посредством компьютерной обработки его дифрактограмм при последовательном известном смещении объекта относительно освещающего пучка и детектора. При этом соседние поля зрения должны перекрываться не менее чем на половину. Более подробно о птихографии рассказано в разделе 5.

Одним из главных достоинств систем безлинзовой оптики и птихографии является принципиальная возможность избавиться от проблем, связанных с аберрациями изображающих оптических элементов: линз, зеркал, зонных пластинок и пр. — и приблизиться к дифракционному пределу разрешения в микроскопии, атмосферной и астрономической оптике. Очевидно, для того чтобы в полной мере реализовать указанное преимущество безлинзовых систем, необходимо выйти за рамки параксиальных методов моделирования распространения световых пучков от объекта к детектору. Решению этой задачи в рамках скалярного волнового уравнения и посвящена настоящая статья.

## 2. Восстановление фазы (и модуля) когерентного поля. Метод волнового пакета

Большинство современных методов восстановления фазы в той или иной мере является развитием алгоритмов, сформулированных в работах, выполненных 30–40 лет назад (см. литературу, цитированную в [10, 23, 24]). Алгоритмы, которые приведены во многих статьях и монографиях, продолжают совершенствоваться. Эти алгоритмы позволяют найти комплексное поле (интенсивность и фазу) на поверхности объекта по измеренной интенсивности поля на детекторе. Повторим, что оптические элементы между предметом и детектором отсутствуют, однако используется априорная информация о свойствах объекта. Как побочный результат выполнения алгоритма получается распределение фазы на поверхности детектора. На практике при этом применяется наиболее подходящий для данного эксперимента дифракционный интеграл, выражающий поле на детекторе через распределение поля на поверхности объекта. Как правило, в той или иной форме вычисление дифракционного интеграла сводится к вычислению прямых и обратных преобразований Фурье.

В основе алгоритмов лежит *многократное* выполнение четырёх основных операций над комплексной функцией  $f$ : преобразование Фурье —  $F$ ; замена модуля фурье-образа функцией  $A$ , полученной из эксперимента —  $AF[f]/|F[f]|$ ; обратное преобразование Фурье —  $F^{-1}$  и преобразование  $P$  функции  $f$ , отражающее априорную информацию об объекте. Результат этих преобразований — новая функция

$$f' = P \left[ F^{-1} \left[ A \frac{F[f]}{|F[f]|} \right] \right], \quad (1)$$

заданная в том же домене, что и  $f$ . Если  $f'$  и  $f$  совпадают с заданной точностью, то цель достигнута. Априорной информацией ( $P$ ) может служить измерение модуля поля непосредственно за объектом или в какой-либо другой плоскости, форма объекта, т.е. равенство нулю поля в

плоскости объекта вне некоторой области, неотрицательность поля и др.

Поясним вышесказанное на примере алгоритма снижения ошибки (error reduction), с помощью которого требуется определить изображение плоского прозрачного объекта. Предположим, что объект освещён когерентным излучением, проходящим через круглое отверстие, расположенное непосредственно перед его поверхностью. Априорной информацией  $P$  в этом случае является равенство нулю поля в плоскости предмета вне отверстия. Предположим также, что измерено распределение интенсивности поля  $I$  в параллельной плоскости на некотором расстоянии от объекта (в плоскости детектора). Причём для простоты полагаем, что расчёт поля в этой плоскости сводится к преобразованию Фурье от поля в плоскости объекта, так что модуль фурье-образа поля объекта  $A$  тривиально вычисляется из  $\sqrt{I}$ . При этих предположениях работа алгоритма начинается с задания произвольной комплексной функции  $f$  в пределах отверстия, включающего в себя объект. На первом шаге выполняется преобразование Фурье  $F[f]$ , что физически соответствует расчёту распространения поля от объекта к детектору. На втором шаге выполняется преобразование  $AF[f]/|F[f]|$ , которое означает, что в каждой точке обратного пространства Фурье модуль  $F[f]$  заменяется соответствующим значением  $A$ . Фаза  $F[f]$  при этом сохраняется прежней. На третьем шаге проводится обратное преобразование Фурье  $F^{-1}[AF[f]/|F[f]|]$ , что физически соответствует обратному расчёту поля от детектора к объекту. Наконец, последний шаг — преобразование  $P[F^{-1}(AF[f]/|F[f]|)]$ , т.е. значения комплексной функции  $F^{-1}[AF[f]/|F[f]|]$ , находящиеся за пределами отверстия, приравниваются нулю.

Эти четыре операции представляют собой одну итерацию алгоритма, в результате которой получается уточнённое распределение поля  $f'$ , заданное в плоскости объекта. В процессе работы алгоритма эти итерации выполняются до тех пор, пока  $f' \neq f$  в пределах заданной точности. Как показано в [25], этот алгоритм всегда сходится и является эквивалентным методу сопряжённых градиентов для поиска минимума энергии поля за пределами отверстия (положительной величины, так называемой ошибки), в связи с чем и называется алгоритмом снижения ошибки. К сожалению, такой алгоритм почти всегда сходится к локальному минимуму, не позволяя довести собственно ошибку до нуля. Однако существует другие, более сложные, алгоритмы, которые позволяют к этому приблизиться. В случае удачи найденная функция  $f$  рассматривается как решение задачи. Эта функция позволяет найти модуляцию амплитуды и фазы объектом, т.е. то, что можно назвать его изображением.

Схема типичного безлинзового микроскопа (lensless imaging) дифракционного разрешения содержит источник когерентного излучения, освещающий пропускающий излучение объект, расположенный в плоскости  $\tilde{S}$  (рис. 1). В отличие от обычных микроскопов, эта схема не содержит оптических элементов между объектом и детектором. Лазер, освещающий объект слева, и компьютер, обрабатывающий данные с детектора, на схеме не указаны.

Покажем роль преобразования Фурье на примере *волнового пакета*, который описывает распространение когерентного излучения от объекта  $\tilde{S}$  к детектору  $S$  (см. рис. 1) и является точным решением волнового урав-

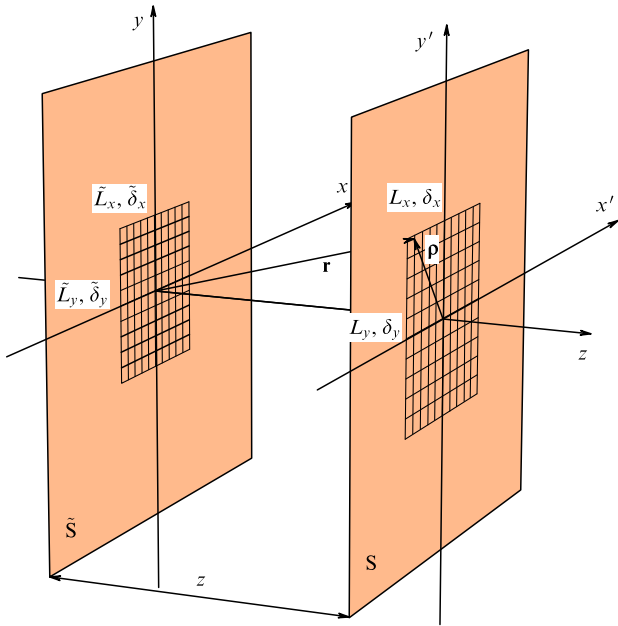


Рис. 1.  $\tilde{S}$  — плоскость объекта,  $S$  — плоскость детектора,  $z$  — расстояние между ними.  $(L_x, \delta_x)$  и  $(L_y, \delta_y)$  — (размер, пиксел) домена детектора в направлении  $x$  и  $y$ .  $(\tilde{L}_x, \tilde{\delta}_x)$  и  $(\tilde{L}_y, \tilde{\delta}_y)$  — (размер, пиксел) домена объекта в направлении  $x$  и  $y$ .

нения, определяющего поле в полупространстве через пространственные гармоники в плоскости предмета:

$$\psi(\mathbf{r}) = \iint_{-\infty}^{\infty} \varphi_0(\mathbf{p}) d^2 \mathbf{p} \exp \left\{ i \mathbf{p} \mathbf{r} + i \sqrt{k^2 - p^2} z \right\},$$

$$\mathbf{r} = (x, y, z) = (\mathbf{p}, z), \quad (2)$$

где  $k = 2\pi/\lambda$  — величина волнового вектора,  $\varphi_0(\mathbf{p})$  — фурье-образ распределения поля  $\psi(\mathbf{p}, z = 0)$  в плоскости предмета. Выводу выражения (2) и его связи с другими формами дифракционного интеграла посвящены работы [26–29]. Здесь рассмотрим только вопросы, связанные с моделированием распространения непараксиальных пучков в задачах восстановления фазы изображений и птихографии. Волновой пакет (2), являющийся точным решением волнового уравнения, свободен от ограничений параксиального приближения, и он может использоваться для исследования эффектов вблизи предела оптического разрешения, связанного с длиной волны.

Считаем, что детектор, регистрирующий интенсивность, находится в дальней зоне, т.е. в фурье-плоскости, где

$$z \gg \frac{a^2}{\lambda}, \quad \rho = z \tan \theta, \quad (3)$$

$a$  — размер объекта, апертурный угол  $\theta$  предполагается фиксированным. Рассматривая (2) при условии (3) и используя метод стационарной фазы [30], легко убедиться в том, что поле на детекторе принимает вид

$$\psi(\mathbf{p}, z) = \frac{2\pi k}{iz} \frac{z^2}{z^2 + \rho^2} \exp \left( ik \sqrt{z^2 + \rho^2} \right) \times \varphi_0 \left( \mathbf{p} = k \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{z^2 + \rho^2}} \right). \quad (4)$$

Выражение (4), полученное из точного решения волнового уравнения Гельмгольца, показывает, что в дальней зоне пространственное распределение поля выражается

через фурье-образ поля на объекте. Причём при изменении координаты  $\rho$  на детекторе от 0 до  $\infty$  соответствующая пространственная гармоника  $p$  изменяется от 0 до  $k$ . Другими словами, гармоники  $p > k$  в дальней зоне не содержатся. Это и выражает в общем случае тот факт, что предельное пространственное разрешение в дальней зоне определяется длиной волны  $\lambda = 2\pi/k$  независимо от типа оптической системы.

На практике в задачах восстановления фазы (см. обзор [23]) из-за сложностей численной реализации алгоритмов на основе точного выражения (4) используется более простое соотношение — следующий из точного выражения (2) при малых углах  $\theta$  интеграл Френеля:

$$\psi(\mathbf{p}, z) = \frac{k \exp(ikz)}{2\pi iz} \iint_{-\infty}^{\infty} \psi(\mathbf{p}', 0) d^2 \mathbf{p}' \exp \left( ik \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2}{2z} \right), \quad (5)$$

который в дальней зоне (3) имеет вид

$$\psi(\mathbf{p}, z) = \frac{2\pi k}{iz} \exp \left[ ikz \left( 1 + \frac{\rho^2}{2z^2} \right) \right] \varphi_0 \left( \mathbf{p} = k \frac{\mathbf{p}}{z} \right). \quad (6)$$

Сопоставим выражение (6) с точной величиной поля в дальней зоне (4). Сравнение аргументов фурье-образа начального распределения  $\varphi_0(\mathbf{p})$  показывает, что применение интеграла Френеля в дальней зоне (6) для расчёта поля на детекторе возможно только при  $\rho \leq z$ , т.е. при  $\theta \leq 45^\circ$  и апертуре  $\text{NA} = \sin \theta \leq 0,71$ . В противном случае речь шла бы о гармониках начального распределения  $p > k$ , которые, согласно (4), в дальней зоне вообще не содержатся. Добавляя, кроме того, требование совпадения фазовых множителей в (4) и (6), получаем условие применимости интеграла Френеля в дальней зоне (3) (см. [31]):

$$\tan \theta \leq 1, \quad \frac{a^2}{\lambda} \ll z \leq \frac{4}{\pi} \frac{\lambda}{\tan^4 \theta}. \quad (7)$$

Более подробное теоретическое рассмотрение вопроса дано в обзоре [32].

Таким образом, приближение волнового пакета, как и параксиальное приближение, в дальней зоне приводит к упомянутой выше связи распределения интенсивности поля на детекторе с модулем преобразования Фурье поля в плоскости объекта. В дальнейшем приближение волнового пакета, т.е., по сути, применение интеграла (2), будем называть методом волнового пакета<sup>3</sup>.

### 3. Дискретизация восстановления фазы в методе волнового пакета

Далее, обращаясь к схеме безлинзового микроскопа на рис. 1, будем считать длину волны  $\lambda$ , размеры детектора  $L_x$  и  $L_y$ , размеры пиксела  $\delta_x$  и  $\delta_y$  и расстояние  $z$  между объектом и детектором заданными условиями эксперимента. Исходя из этого установим размеры объекта  $\tilde{L}_x$  и  $\tilde{L}_y$  (т.е. поле зрения) и пространственное разрешение  $\tilde{\delta}_x$  и  $\tilde{\delta}_y$ . Однако возможны и другие постановки задачи, например, если заданы размеры и масштаб разрешаемых деталей объекта, а расстояние  $z$  используется для оптимизации других параметров схемы, представленной на рис. 1.

<sup>3</sup> Другой термин — метод углового спектра плоских волн (angular spectrum method) ([https://en.wikipedia.org/wiki/Angular\\_spectrum\\_method](https://en.wikipedia.org/wiki/Angular_spectrum_method)).

Для работоспособности алгоритмов восстановления фазы требуется, чтобы был известен модуль фурье-образа, тем самым подразумевается, что имеется равномерная прямоугольная сетка частот (*частотный домен*), на которой он определён. Соответственно, прямоугольная равномерная сетка узлов (*домен*), на которой задано поле объекта, является обратной по отношению к частотному домену, в котором определён модуль фурье-образа. Определим пространственный и частотный домены детектора как множества:

$$\begin{aligned} x|y &\in \left\{ \frac{-L_{x|y}}{2} + j\delta_{x|y} \right\}, \quad j = 0, \dots, N_{x|y}, \\ p_{x|y} &\in \left\{ -\frac{\pi}{\delta_{x|y}} + j\frac{2\pi}{L_{x|y}} \right\}, \quad j = 0, \dots, N_{x|y}, \\ \delta_{x|y} &= \frac{L_{x|y}}{N_{x|y}}, \end{aligned} \quad (8)$$

где  $x|y$  означает направление вдоль  $x$  или вдоль  $y$ ,  $p_{x|y}$  — пространственная частота,  $L_{x|y}$ ,  $N_{x|y}$  и  $\delta_{x|y}$  — соответственно величина домена, число и размер пикселей, определяемые физическими свойствами детектора, которые считаем известными. Предполагается, что начало системы координат расположено по центру (см. рис. 1).

Выбор соответствующего домена в плоскости объекта не так однозначен. Заранее мы не знаем ни его размеров, ни размера его пикселей. Его структуру определим по аналогии с (8), обозначив соответствующие величины  $\tilde{\delta}_{x|y}$ ,  $\tilde{L}_{x|y}$  и  $\tilde{N}_{x|y}$  — пространственное разрешение, поле зрения и число пикселей на объекте. Здесь и далее всё, что относится к объекту, отмечается тильдой. Из результатов раздела 2 следует, что частотный домен объекта может быть найден по известному домену детектора через связывающее их выражение (4). А именно, пространственная частота объекта  $\tilde{\mathbf{p}}$  связана с координатой на детекторе  $\mathbf{p}$  следующим образом:

$$\tilde{\mathbf{p}} = k \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{z^2 + \rho^2}}. \quad (9)$$

Следовательно, максимальная величина выражается как

$$\max(\tilde{p}_{x|y}) = k \frac{L_{x|y}/2}{\sqrt{z^2 + (L_{x|y}/2)^2}}. \quad (10)$$

С другой стороны, как и в (8), эта величина равна  $\pi/\tilde{\delta}_{x|y}$ . Откуда находим оптимальный (наибольший) размер пиксела на объекте:

$$\tilde{\delta}_{x|y} = \frac{\pi}{\max(\tilde{p}_{x|y})} = \frac{\lambda}{L_{x|y}} z \sqrt{1 + \left(\frac{L_{x|y}}{2z}\right)^2}. \quad (11)$$

Величина  $\tilde{\delta}_{x|y}$  — это максимально возможный шаг дискретизации объекта, при котором возможно восстановление объекта. В этом случае апертура излучения, исходящего от части объекта размером  $\tilde{\delta}_{x|y}$ , полностью перекрывается детектором. Если характерный размер деталей объекта меньше (11), то восстановление невозможно (при условии непрерывности объекта) и необходимо выбрать меньшее расстояние  $z$ . В паракиальном приближении  $L_{x|y} \ll z$  формула (11) переходит в следующую:

$$\tilde{\delta}_{x|y} = \frac{\lambda}{L_{x|y}} z.$$

Таким образом, размер пиксела объекта для метода волнового пакета (11) получается больше, чем в паракиальном приближении, и при больших апертурах,  $L_{x|y}/2z \gg 1$ , стремится к  $\lambda/2$ .

Далее, как и при выводе (11), согласно (8), шаг сетки в частотном домене объекта равен  $2\pi/\tilde{L}_{x|y}$ . В то же время из формулы (9) следует, что пиксели частотного домена объекта отображаются в подушкообразную сетку пикселей-образов на детекторе. Поскольку градиент функции  $\tilde{p}(\rho)$  имеет вид

$$\frac{d\tilde{p}}{d\rho} = \frac{kz^2}{(z^2 + \rho^2)^{3/2}}, \quad (12)$$

плотность этих образов  $\sigma_{x|y}(\rho)$  на один пиксел детектора в направлении  $x|y$  выражается как

$$\begin{aligned} \sigma_{x|y}(\rho) &= \frac{d\tilde{p}_{x|y}/(2\pi/\tilde{L}_{x|y})}{d(x|y)/\delta_{x|y}} = \frac{kz^2}{(z^2 + \rho^2)^{3/2}} \frac{\tilde{L}_{x|y}\delta_{x|y}}{2\pi} = \\ m &= \frac{z^2}{(z^2 + \rho^2)^{3/2}} \frac{\tilde{L}_{x|y}\delta_{x|y}}{\lambda}. \end{aligned} \quad (13)$$

Очевидно, что идеальным было бы равенство  $\sigma_{x|y}(\rho) = 1$  при всех  $\rho$ . Это соответствовало бы точному согласованию двух доменов, при котором их информационные ёмкости (количество пикселей) совпадают. Однако плотность  $\sigma_{x|y}(\rho)$  монотонно убывает с возрастанием  $\rho$ , достигая максимального значения в центре детектора  $\rho = 0$ :

$$\sigma_{x|y}(0) = \frac{\tilde{L}_{x|y}\delta_{x|y}}{z\lambda}. \quad (14)$$

Если выбрать размер  $\tilde{L}_{x|y}$  таким, чтобы  $\sigma_{x|y}(0)$  была меньше единицы, то всюду на детекторе плотность образов пикселей объекта окажется недостаточной, что означает меньшую информационную ёмкость домена объекта по сравнению с таковой домена детектора. Поэтому должно быть  $\sigma_{x|y}(0) \geq 1$ , откуда следует, что минимально возможный размер домена объекта

$$\tilde{L}_{x|y} = \frac{\lambda}{\delta_{x|y}} z. \quad (15)$$

В разделе 4 показано, что такой выбор размера домена объекта обеспечивает хорошую численную точность, и в дальнейшем мы будем использовать именно его.

Формулы (11) и (15) определяют пространственное разрешение и поле зрения в плоскости объекта. Для удобства приведём все ключевые формулы в виде таблицы. Вводя обозначения  $\text{NA}_{x|y} = \sin \theta_{x|y}$  и  $\tan \theta_{x|y} = L_{x|y}/(2z)$ , из формулы (11) получаем классическую формулу для дифракционного разрешения:

$$\tilde{\delta}_{x|y} = \frac{\lambda}{2\text{NA}_{x|y}}. \quad (16)$$

Поскольку мы рассматриваем дальнюю зону, должно выполняться условие (3), где  $a = \tilde{L}_{x|y}$ . Учитывая (15), из (3) находим

$$z \leq \frac{\delta_{x|y}^2}{\lambda}. \quad (17)$$

Далее для простоты изложения будем считать, что детектор имеет квадратную форму:  $\delta_x = \delta_y = \delta$ ,  $L_x = L_y = L$ ,  $N_x = N_y = N$ . Тогда из формул (11) и (15) следует, что домен в плоскости объекта также квадратный:  $\tilde{\delta}_x = \tilde{\delta}_y = \tilde{\delta}$ ,  $\tilde{L}_x = \tilde{L}_y = \tilde{L}$ ,  $\tilde{N}_x = \tilde{N}_y = \tilde{N}$ . Согласно

**Таблица.** Формулы для определения пространственного разрешения  $\tilde{\delta}_{x|y}$  и поля зрения  $\tilde{L}_{x|y}$ , в зависимости от детектора  $(L_{x|y}, \delta_{x|y})$ , длины волны  $\lambda$  и расстояния  $z$ . Квадратные скобки означают ближайшее целое снизу

$\tilde{\delta}_{x y}$ (11)	$\tilde{L}_{x y}$ (15)	$\tilde{N}_{x y} = \lfloor \tilde{L}_{x y} / \tilde{\delta}_{x y} \rfloor$
$\frac{\lambda}{L_{x y}} z \sqrt{1 + \left(\frac{L_{x y}}{2z}\right)^2}$	$\frac{\lambda}{\delta_{x y}} z$	$\left\lfloor \left(\frac{L_{x y}}{\delta_{x y}}\right) / \sqrt{1 + \left(\frac{L_{x y}}{2z}\right)^2} \right\rfloor = \left\lfloor N_{x y} / \sqrt{1 + \left(\frac{L_{x y}}{2z}\right)^2} \right\rfloor$

(15) и (17) для квадратного домена существует расстояние

$$z_m = \frac{\delta^2}{\lambda}, \quad (18)$$

при котором поле зрения  $\tilde{L}$  достигает максимальной величины для данного детектора:

$$\tilde{L}_m = \delta. \quad (19)$$

Таким образом, при расположении детектора в дальней зоне поле зрения на объекте определяется размером пиксела детектора. Подставив  $z_m$  в (11), получим размер пиксела и количество пикселов на объекте при максимальном поле зрения:

$$\tilde{\delta}_m = \frac{\delta^2}{L} \sqrt{1 + \left(\frac{\lambda L}{2\delta^2}\right)^2}, \quad (20)$$

$$\tilde{N}_m = \frac{\delta}{\tilde{\delta}_m} = \left\lfloor \frac{L}{\sqrt{\delta^2 + (\lambda L/2)^2 (1/\delta^2)}} \right\rfloor. \quad (21)$$

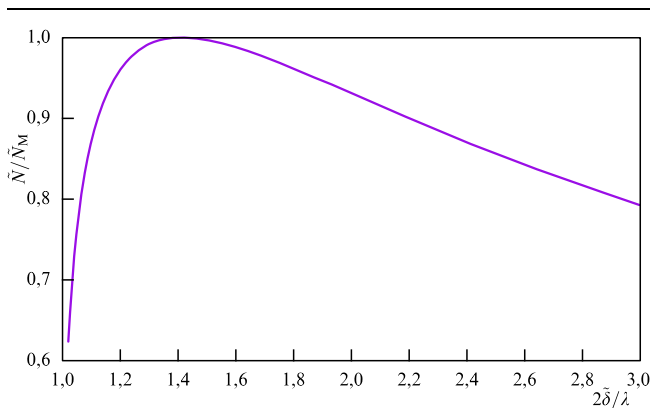
Из (21) следует, что функция  $\tilde{N}_m(\delta)$  имеет максимум при  $\delta = \delta_M = \sqrt{\lambda L/2}$ , так что

$$\tilde{N}_M = \left\lfloor \sqrt{\frac{L}{\lambda}} \right\rfloor, \quad \tilde{\delta}_M = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}, \quad \tilde{L}_M = \sqrt{\frac{\lambda L}{2}}, \quad z_M = \frac{L}{2}. \quad (22)$$

То есть, выбирая  $\delta$  равным  $\delta_M$ , мы максимизируем  $\tilde{N}$  и, соответственно, количество получаемой информации. При этом очевидно, что апертура

$$NA_M = \sin \theta_M = \frac{1}{\sqrt{2}} \approx 0,71, \quad \text{т.е. } \theta_M = 45^\circ. \quad (23)$$

При этой апертуре достигается оптимальное сочетание высокого разрешения и большого поля зрения (рис. 2). Интересно, что максимальное возможное количество пикселов на объекте не зависит от размера пиксела на



**Рис. 2.** Зависимость величины  $\tilde{N}/\tilde{N}_M$  от безразмерной величины  $2\tilde{\delta}/\lambda$ . Максимум достигается при  $\tilde{\delta} = \tilde{\delta}_M = \lambda/\sqrt{2}$ .

детекторе, а определяется лишь размерами детектора и длиной волны.

На практике необходимый размер пиксела детектора может быть достигнут объединением соседних физических пикселов в один виртуальный. Такая операция называется биннинг (от англ. binning или data binning) — суммирование сигналов смежных ячеек детектора в один пиксел. Например, если объединить четыре соседние квадратные ячейки в один виртуальный пиксел, то в соответствии с (19) получим двукратное увеличение поля зрения  $\tilde{L}_m$ . При этом расстояние  $z_m$  (см. (18)) увеличится в четыре раза, а разрешение  $\tilde{\delta}_m$  ухудшится согласно (20). Кроме увеличения поля зрения биннинг позволяет расширить динамический диапазон количества принимаемых квантов на один пиксел и увеличить отношение сигнал/шум.

Из формул (22) следует, что предельно возможное количество пикселов на объекте  $\tilde{N}_M$  возрастает с уменьшением  $\lambda$ . Например, для  $\lambda = 0,5$  мкм и  $L = 1$  см имеем  $\tilde{N}_M = 141$ , а для  $\lambda = 10$  нм —  $\tilde{N}_M = 10^3$ . Таким образом, чтобы в видимой области длин волн получить разрешение, близкое к дифракционному пределу, придётся пожертвовать числом пикселов на объекте и связанным с ним полем зрения  $\tilde{L}_M = \tilde{N}_M \tilde{\delta}_M$ . Однако благодаря птихографии (см. раздел 5) можно увеличить поле зрения за счёт большого количества снимков без потери пространственного разрешения.

Вышеприведённые рассуждения об оптимальном поле зрения применимы к классическому безлинзовому восстановлению объекта по одному снимку. В случае птихографии рассуждения о цифровом домене и оптимальном размере объекта (19) применимы к каждой отдельной экспозиции (скану).

Поскольку связь между  $\tilde{\mathbf{r}}$  и  $\mathbf{r}$  в (9) нелинейна, равномерная решётка в пространстве  $\mathbf{r}$  отображается на неравномерную решётку в пространстве  $\tilde{\mathbf{r}}$ . Но для применения дискретного преобразования Фурье последняя тоже должна быть равномерной. Поэтому необходима интерполяция функции  $|\varphi_0(\tilde{\mathbf{r}}(\mathbf{r}))|$ . К счастью, на практике эта функция является довольно гладкой, поэтому интерполяция не представляет проблемы. Однако если требуется рассчитать комплексную амплитуду  $\psi(\mathbf{r}, z)$  в прямой задаче по формуле (4), как в численном эксперименте, рассмотренном в разделе 4, то требуется полноценная интерполяция, которая может быть выполнена разложением в ряд Тейлора в окрестности узла, ближайшего к  $\mathbf{r}(\tilde{\mathbf{r}})$ . При этом производные могут рассчитываться через быстрое преобразование Фурье  $-\partial_{m_i} \varphi_0(\tilde{\mathbf{r}}(\mathbf{r})) = F^{(-1)}[(i\tilde{p}_x)^m (i\tilde{p}_y)^n F] \varphi_0(\tilde{\mathbf{r}}(\mathbf{r}))$ . Например, для достижения результата, представленного в разделе 4, потребовалось вычислить 20 дополнительных дискретных преобразований Фурье (производные до 5-го порядка включительно). В общем случае очевидно, что необходимость интерполяции приводит к снижению точности и увеличению времени расчёта. Поэтому естественно там, где это возможно, использовать параксиальное приближение, в

котором этап интерполяции отсутствует (так как  $\tilde{\mathbf{p}} = k\mathbf{p}/z$  линейно зависит от  $\mathbf{p}$ ). Очевидно, что это приведёт к некоторой потере пространственного разрешения  $\tilde{\delta}$ .

#### 4. Результаты расчётов. Сравнение метода волнового пакета и параксиального приближения

Для того чтобы оценить точность расчёта по формулам волнового пакета (4) и параксиального приближения (6) при условии, что цифровой домен в плоскости объекта рассчитывается по формулам (11) и (15), было проведено сравнение с функцией точечного источника:

$$\begin{aligned} \psi_s(\mathbf{r}) &= \frac{1}{|\mathbf{r}|} \exp(ik|\mathbf{r}|), \\ \varphi_{0s}(\mathbf{p}) &= \frac{i}{2\pi\sqrt{k^2 - p^2}}. \end{aligned} \quad (24)$$

Нетрудно убедиться в том, что подстановка (24) в (4) приводит к тождеству, т.е. приближение волнового пакета в дальней зоне даёт точный результат.

Для численных расчётов была выбрана длина волны  $\lambda = 10$  нм, а домены в плоскости предмета и детектора выбирались в соответствии с указанными в разделе 3. Размер пикселя детектора  $\delta = 13$  мкм, расстояние до детектора и его размер были выбраны согласно (18) и (22), т.е.  $z = z_m = 1,69$  см,  $L = 2z_m = 3,38$  см. В этом случае разрешение  $\tilde{\delta}_M = 7$  нм.

Результаты численного моделирования показали, что метод волнового пакета даёт относительную погрешность  $|(\psi(\mathbf{r}) - \psi_s(\mathbf{r}))/\psi_s(\mathbf{r})| \sim 10^{-16}$  в интервале углов  $\tan \theta \in [-1; 1]$ , за исключением небольшого количества углов (артефактов), на которых погрешность порядка  $10^{-7}$ . Точность параксиального приближения быстро убывает с возрастанием  $\theta$ , так что уже при  $\tan \theta > 0,01$  относительная погрешность больше 0,013. Согласно оценке применимости параксиального приближения (7), угол  $\theta$  должен быть достаточно малым:  $\tan \theta < \sqrt[3]{4\lambda/(\pi z)} = 0,029$ . Расчёт показал, что относительная погрешность параксиального приближения при  $\tan \theta$ , равном этой максимальной величине (0,029), составляет 0,88.

Таким образом, численный эксперимент с функцией точечного источника (24) показывает, что ошибка параксиального приближения уже при угле  $\theta = 1,66^\circ$  ( $\tan \theta = 0,029$ ) превышает 50 %, в то время как численный расчёт методом волнового пакета (4) даёт практически точный результат. В области  $0 < \theta < 26^\circ$  погрешность находится в пределах  $10^{-16}$ , что соответствует машинному нулю (machine epsilon). В области  $26^\circ < \theta < 45^\circ$  для подавляющего большинства точек погрешность остаётся на том же уровне, а для остальных составляет величину порядка  $10^{-7}$ .

#### 5. Птихография. Результаты расчётов

Птихография — метод получения изображений компьютерной обработкой перекрывающихся интенсивностей поля (сканов), записанных при небольших латеральных смещениях объекта в плоскости  $\tilde{S}$  на рис. 1. При сканировании объекта освещающий пучок и положение детектора предполагаются неизменными. Использование нескольких перекрывающихся сканов вместо одного (как при восстановлении фазы) позволяет отказаться от априорных условий, связанных со свойствами объекта.

Принципы птихографии и сам термин "птихография" были предложены в работах Хоппе [21, 22]. Однако в течение длительного времени этот подход оставался не востребуемым из-за отсутствия эффективного алгоритма его реализации. Первый такой алгоритм был предложен Роденбургом [33, 34] лишь в 2004 г., что явилось результатом его многолетней работы с начала 1990-х годов<sup>4</sup>. Этот алгоритм был назван Ptychography Iterative Engine (PIE). Однако алгоритм имел недостаток — он предполагал, что поле источника, освещающего объект, заранее известно. Через четыре года, в 2008 г., этот недостаток был устранён в другом итеративном алгоритме, основанном на подходе "карт разностей" (difference-map) [35, 36]. Немного позднее, в 2009 г., был предложен улучшенный алгоритм PIE — extended Ptychography Iterative Engine (ePIE) [37], который мы и использовали в данной работе для иллюстрации птихографии.

Опишем идею ePIE — речь идёт о решении системы  $J$  уравнений

$$A_j(\tilde{\mathbf{p}}) = |FFT [P(\tilde{\mathbf{p}} - \tilde{\mathbf{p}}_j)O(\tilde{\mathbf{p}})]|, \quad j = 1, \dots, J. \quad (25)$$

Здесь  $P(\tilde{\mathbf{p}} - \tilde{\mathbf{p}}_j)$  — амплитуда освещающего пучка на поверхности объекта ("функция освещения"),  $O(\tilde{\mathbf{p}})$  — искомая функция пропускания (или отражения) объекта,  $P(\tilde{\mathbf{p}} - \tilde{\mathbf{p}}_j)O(\tilde{\mathbf{p}})$  — амплитуда прошедшей (отражённой) волны на поверхности объекта,  $A_j(\tilde{\mathbf{p}})$  — модуль фурье-образа распространяющейся от объекта волны на его поверхности (ср. с изложенным в начале раздела 2),  $J$  — число используемых в расчёте сканов,  $j$  — порядковый номер скана,  $\{\tilde{\mathbf{p}}_j\}_{j=1}^J$  — известный набор смещений, таких что  $P(\tilde{\mathbf{p}} - \tilde{\mathbf{p}}_j)$  и  $P(\tilde{\mathbf{p}} - \tilde{\mathbf{p}}_{j-1})$  перекрываются на 60–70 %. Последнее необходимо для единственности решения системы уравнений (25). Введение в рассмотрение функции освещения — отличительная особенность птихографии. Функция освещения может быть известна априори, найдена одновременно с объектом  $O(\tilde{\mathbf{p}})$  либо независимо стандартными методами восстановления фазы. Важно, чтобы она не изменялась в процессе измерений [37]. Более подробно, алгоритм ePIE заключается в итеративном одновременном вычислении функций объекта  $O(\tilde{\mathbf{p}})$  и освещения  $P(\tilde{\mathbf{p}})$ :

$$O_{j+1}(\tilde{\mathbf{p}}) = O_j(\tilde{\mathbf{p}}) + \alpha \frac{P_j^*(\tilde{\mathbf{p}} - \tilde{\mathbf{p}}_j)}{|P_j(\tilde{\mathbf{p}} - \tilde{\mathbf{p}}_j)|_{\max}^2} (f_j'(\tilde{\mathbf{p}}) - f_j(\tilde{\mathbf{p}})), \quad (26)$$

$$P_{j+1}(\tilde{\mathbf{p}}) = P_j(\tilde{\mathbf{p}}) + \beta \frac{O_j^*(\tilde{\mathbf{p}} + \tilde{\mathbf{p}}_j)}{|O_j(\tilde{\mathbf{p}} + \tilde{\mathbf{p}}_j)|_{\max}^2} (f_j'(\tilde{\mathbf{p}}) - f_j(\tilde{\mathbf{p}})), \quad (27)$$

$$O_1(\tilde{\mathbf{p}}) = O_0(\tilde{\mathbf{p}}), \quad (28)$$

$$P_1(\tilde{\mathbf{p}}) = P_0(\tilde{\mathbf{p}}), \quad (29)$$

$$f_j(\tilde{\mathbf{p}}) = O_j(\tilde{\mathbf{p}})P_j(\tilde{\mathbf{p}} - \tilde{\mathbf{p}}_j), \quad (30)$$

$$f_j'(\tilde{\mathbf{p}}) = F^{-1} \left[ A_j(\tilde{\mathbf{p}}) \frac{F[f_j(\tilde{\mathbf{p}})]}{|F[f_j(\tilde{\mathbf{p}})]|} \right], \quad (31)$$

$$A_{j+J}(\tilde{\mathbf{p}}) = A_j(\tilde{\mathbf{p}}), \quad \tilde{\mathbf{p}}_{j+J} = \tilde{\mathbf{p}}_j, \quad (32)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  — безразмерные коэффициенты порядка единицы,  $O_0(\tilde{\mathbf{p}})$  — начальный объект,  $P_0(\tilde{\mathbf{p}})$  — начальное освещение,  $j$  — порядковый номер итерации. Сканы

<sup>4</sup> Более подробно история вопроса освещена в обзоре Пфайфера [24].



циклически повторяются с периодом  $J$ . Процесс останавливается, когда  $O_j(\tilde{\rho})$  перестаёт изменяться. Отметим, что в (26)–(32) единственной величиной, непосредственно связанной с показаниями детектора, является модуль амплитуды поля  $A_j(\tilde{\rho})$ . Все остальные величины определяются в процессе вычислений.

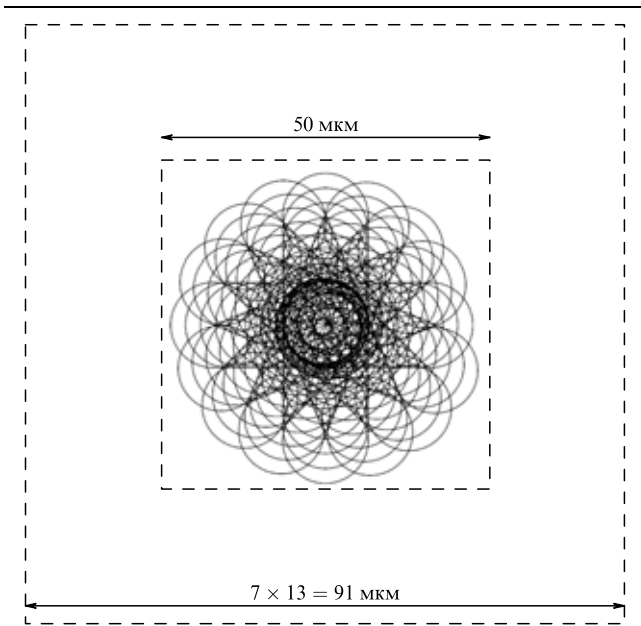
В нашем численном эксперименте полагалось  $\alpha = 1$ ,  $\beta = 1$ . Истинная функция освещения  $P(\tilde{\rho})$  выбиралась равной полю точечного источника, находящегося на расстоянии 10 см в круглом отверстии диаметром  $\tilde{L}$ . Смещения  $\tilde{\rho}_j$  были выбраны по спирали:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_j &= \frac{j}{128} 18,2 (1 + \text{rand}(-0,05, 0,05)) \text{ [мкм]}, \\ \tilde{\varphi}_j &= \frac{2\pi}{16} j (1 + \text{rand}(-0,05, 0,05)), j = 0, \dots, 127, \end{aligned} \quad (33)$$

где  $\text{rand}(-0,05, 0,05)$  — случайное число от  $-0,05$  до  $0,05$ . Всего имеется  $J = 128$  перекрывающихся областей объекта по 13 мкм в диаметре. Суммарное поле зрения по форме близко к кругу диаметром 49,4 мкм (рис. 3).

Цифровой домен  $\tilde{L}, \tilde{\delta}$ , о котором шла речь в разделе 3, должен использоваться только для расчёта (31), именно в нём задана  $A_j(\tilde{\rho})$ . Назовём этот домен фурье-доменом. Поскольку поле зрения в 3,8 раза больше, чем фурье-домен ( $13 \times 13$  мкм<sup>2</sup>), был выбран общий цифровой домен большего размера,  $7 \times \tilde{L}$ , с тем же пикселем  $\tilde{\delta}$ . Такого размера как раз достаточно, чтобы вместить все смещения фурье-домена в формулах (26)–(30), (33). Этот домен использовался для функций  $O_j(\tilde{\rho})$ ,  $P_j(\tilde{\rho})$ ,  $f_j(\tilde{\rho})$  и  $f'_j(\tilde{\rho})$ . Причём начальный объект  $O_0(\tilde{\rho})$  задавался равным 1, а начальная функция  $P_0(\tilde{\rho})$  была выбрана гауссовой с  $\sigma = 2$  мкм.

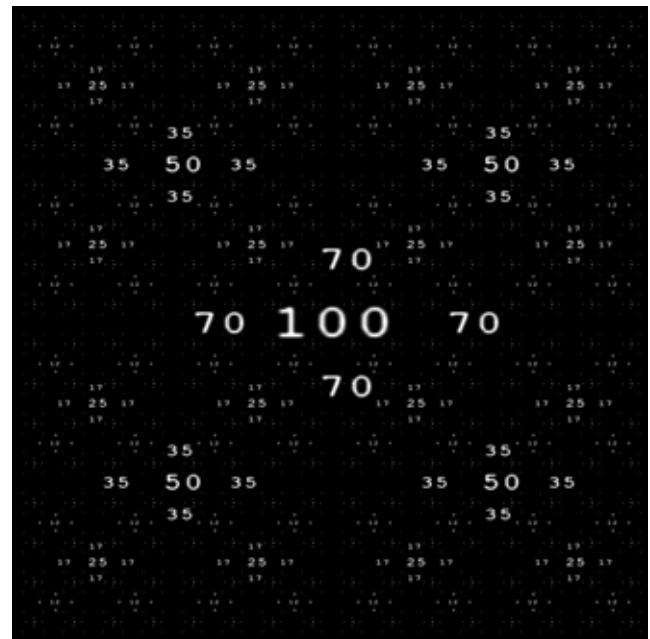
Длина волны составляла 10 нм. В качестве детектора был выбран квадратный детектор с квадратным пикселем  $\delta = 13$  мкм. Объектом служил фрактальный шаблон



**Рис. 3.** Суммарное поле зрения, состоящее из объединения 128 кругов диаметром 13 мкм, расположенных по спирали. Показаны границы кругов. Поле зрения, близкое по форме к кругу диаметром 49,5 мкм, вложено во внутренний квадрат со стороной 50 мкм. Большой квадрат со стороной 91 мкм изображает общий домен, используемый для расчётов.

(рис. 4) размером  $50 \times 50$  мкм<sup>2</sup>. Высота чисел в этом шаблоне равна значению числа, умноженному на 50 нм, т.е. высота самого крупного числа "100" равна 5 мкм, а самого мелкого "2" — 100 нм. Белому цвету соответствует значение 1, чёрному — 0.

Проведём предварительные оценки геометрии и некоторых деталей численного эксперимента. Согласно (18) и (23) для получения максимального количества информации следовало бы выбрать  $z_m = 1,69$  см,  $L = 3,38$  см,  $N = 2600$ . Тогда разрешение и поле зрения, согласно (22), составили бы  $\delta_M = 7$  нм и  $\tilde{L}_M = 13$  мкм. Однако физический пиксел детектора измеряет дискретную величину — количество фотонов, которая не может быть меньше нуля. Это означает, что количество фотонов в одном снимке должно быть достаточно велико, чтобы его хватило для пикселей, удалённых от оси. Первоначальный численный расчёт поля на детекторе по формуле (4) для объекта (см. рис. 4), функции освещения  $P(\tilde{\rho})$  и вышеприведённых геометрических параметров  $z_m, L$  и  $N = 2600$  показал, что количество фотонов, приходящихся на пиксел, возле оси должно быть  $\sim 10^8$ , что намного превышает порог насыщения обычного кремниевого пиксела ( $\sim 10^3$ ) на этой длине волны. Чтобы учесть указанную особенность, мы изменили геометрию численного эксперимента, введя биннинг пикселей детектора  $16 \times 16$  с одновременным увеличением расстояния в 16 раз. Согласно (15) и (16) размер  $\tilde{L}$  остался прежним (13 мкм), а разрешение ухудшилось до  $\tilde{\delta} = 80$  нм. Чтобы иметь возможность "увидеть" "2" на восстановленном объекте, мы увеличили размер детектора, доведя разрешение до  $\tilde{\delta} = 34$  нм. Итого у нас получилось  $z = 27$  см,  $L = 8$  см,  $N = 385$ ,  $\delta = 208$  мкм,  $\tilde{L} = 13$  мкм,  $\tilde{\delta} = 34$  нм. Полученное распределение фотонов на детекторе показано на рис. 5. Максимальное значение равно  $1,75 \times 10^6$ , что соответствует  $\sim 7000$  фотонов на физический пиксел.



**Рис. 4.** Объект в виде фрактального шаблона. Размер  $50 \times 50$  мкм<sup>2</sup>. Высота чисел равна "значение числа"  $\times 50$  нм, т.е. высота самого крупного числа "100" 5000 нм, самого мелкого "2" — 100 нм. Белому цвету соответствует значение 1, чёрному — 0.

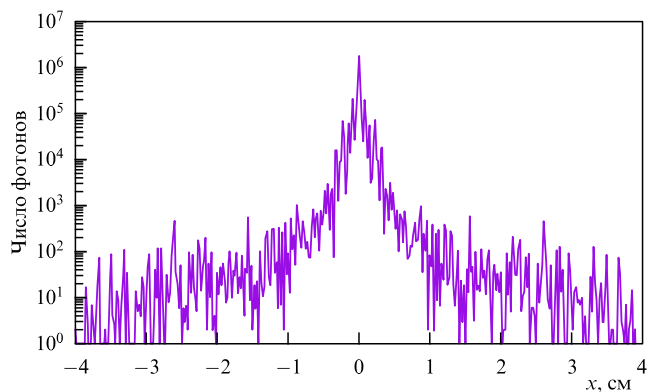


Рис. 5. Распределение фотонов вдоль детектора.

На первом этапе были рассчитаны распределения на детекторе от поля  $O(\vec{p})P(\vec{p} - \vec{p}_j)$  по формуле (4) для всех 128 смещений  $\{\vec{p}_j\}$  (33). Поле освещения  $P(\vec{p})$  было нормировано так, чтобы квадрат его модуля равнялся числу фотонов, упавших на единицу площади, так что интеграл интенсивности поля по пикселу на детекторе давал число упавших на него фотонов. После этого были проведены округление до целого и зашумление по пуассоновскому распределению. Затем по формуле (4) был сделан обратный расчёт модуля фурье-образа объекта  $A_j(\vec{p})$  по распределению фотонов на детекторе (см. рис. 5). При этом использовалась простейшая интерполяция нулевого порядка.

На втором этапе применялся алгоритм птихографии (26)–(32). После 47360-й итерации (370 циклов по 128 сканам) восстановленный объект и функция освещения перестали изменяться и приобрели вид, показанный на рис. 6, где слева изображён объект, а справа — функция освещения. Глядя на функцию освещения, нетрудно заметить, что кусочек нижнего края и кусочек правого слегка "откусаны". Это следствие инвариантности выражений (26)–(32) относительно сдвига системы координат объекта. Поэтому небольшой сдвиг восстановленных объектов и функции освещения относительно их истинных положений вполне ожидаем. Несмотря на это, мы можем считать, что в данном случае задача восстановления объекта успешно решена. На рисунке 7 проведено сравнение центральных частей размером  $10 \times 10$  мкм<sup>2</sup> восстановленного изображения (рис. 7а) и исходного (рис. 7б). Различить наименьшее число "2" на восстановленном изображении можно, но его невозможно прочитать. Это соответствует заявленному разрешению 34 нм, при котором на число "2" приходится  $3 \times 3$  пиксела, что недостаточно для распознавания, но достаточно для обнаружения.

Время, потраченное на собственно восстановление изображения с 1-й итерации по 47360-ю, составило 43 мин, или 0,05 с на одну итерацию. Использовался компьютер с 14-ядерным CPU Intel(R) Core(TM) i9-7940X CPU, 3,10 ГГц и 128 Гб оперативной памяти.

## 6. Заключение

Птихография за последние годы превратилась во всеволновой метод микроскопии, предоставляющий точную фазовую информацию и не требующий использования высокоразрешающих оптических элементов и априорной информации об объекте. Птихография применяется в



Рис. 6. Восстановленные изображения объекта (в левой части рисунка) и функции освещения (в правой части рисунка) после 47360-й итерации (370 циклов по 128 сканам). Диаметр объекта 50 мкм, диаметр функции освещения 13 мкм.

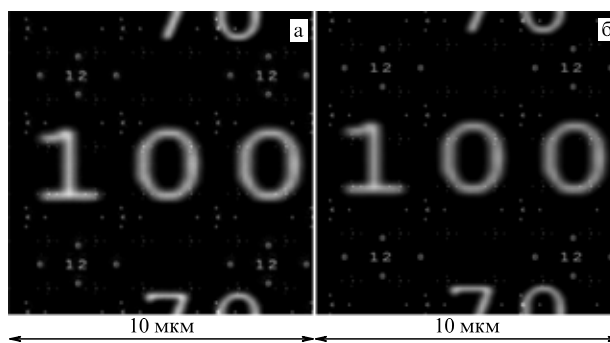


Рис. 7. Сравнение центральных участков восстановленного изображения (а) и оригинала (б).

рентгеновском, вакуумном ультрафиолетовом и видимом диапазонах длин волн. Таким образом, можно сказать, что идея безлинзовой оптики [1], высказанная около полувека назад, получила практическое воплощение. Появились коммерческие "птихоскопы", которые используются в цитологии [17–20]. Экспериментальная схема безлинзового микроскопа в простейшем случае включает в себя четыре элемента: источник когерентного освещения, платформа с объектом, сканирующая его перпендикулярно оптической оси, и детектор с компьютером для обработки сканов (рис. 8).

Настоящая статья служит кратким введением в методику получения птихоизображений. В качестве основного дифракционного интеграла, связывающего распределения полей на объекте и детекторе, выбран волновой пакет в дальней зоне. Благодаря этому сохраняется возможность получения изображений с дифракционным разрешением ( $\delta = \lambda/2$ ). В то же время расчётные алгоритмы по-прежнему сводятся к преобразованиям Фурье полей на объекте и детекторе. Получены теоретически обоснованные формулы, определяющие размеры, шаг дискретизации домена на объекте и пространственное разрешение. При этом расстояние между объектом и детектором, размеры последнего и размеры одного пиксела определяются условиями эксперимента и предполагаются известными. Для квадратного детектора сформулированы критерии выбора оптимальных расстояния и размера пиксела детектора (биннинг).



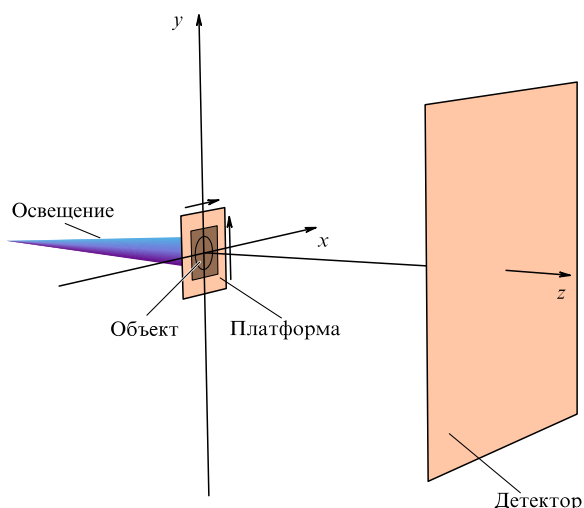


Рис. 8. Схема птихоскопа.

На примере точечного источника продемонстрирована точность формул для выбора домена объекта. Проведены численные птихографические эксперименты по микроскопии, продемонстрировавшие возможность получения изображения объекта в поле зрения  $50 \times 50 \text{ мкм}^2$  с разрешением 34 нм на длине волны 10 нм. Время восстановления одного объекта составляло 43 мин работы персонального компьютера, и оно может быть сокращено на 2–3 порядка программными и аппаратными средствами.

Для дальнейшего развития птихографии очень важны расширение области её применения, а также основанный на эксперименте систематический анализ точности и стабильности алгоритмов восстановления изображений. Это необходимо для реализации возможностей птихографии как уникального метода микроскопии с предельным разрешением, определяемым длиной волны.

Авторы благодарны участникам семинаров, руководимых В.С. Лебедевым и И.В. Сметаниным, за обсуждение работы.

Работа поддержана базовым финансированием в рамках темы 0023-0002-2018, грантами Российского фонда фундаментальных исследований 19-02-00394, 18-08-01066, 18-29-17039, 17-08-01286, а также Программой научных исследований президиума РАН "Актуальные проблемы фотоники, зондирование неоднородных сред и материалов" (ПП РАН № 7).

### Wave packet in the phase problem in optics and ptychography

N.L. Popov<sup>(1)</sup>, I.A. Artyukov<sup>(2)</sup>, A.V. Vinogradov<sup>(3)</sup>, V.V. Protopopov

Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences, Leninskii prosp. 53, 119991 Moscow, Russian Federation

E-mail: <sup>(1)</sup> popovnl@sci.lebedev.ru, <sup>(2)</sup> iart@mail.ru, <sup>(3)</sup> vinograd@sci.lebedev.ru

At present, ptychography seems to be the most natural and efficient method for approaching the diffraction-limited optical resolution. The general setup of a ptychoscope does not contain refracting or focusing elements and includes a coherent illumination source, a translation stage for displacement of a macroscopic object, and a detector for recording transmitted or reflected radiation from the object, which is connected to a computer for processing diffractograms. In classical optics, the main problem with achieving high spectral resolution is the correction and elimination of aberrations in optical systems, whereas the spatial resolution in ptychography mainly depends on the reliability of recording and computer processing of diffractograms with large numerical apertures. After a brief introduction to the history and state-of-the-art of ptychography, the wave-packet method is considered in detail for calculating the wave field on a detector in the far field and for a large numerical aperture. This gives the relation between fields on the object and detector lying in the base of ePIE (extended Ptychography Iterative Engine) algorithms for recovering images used in practice. The realization of algorithms assumes operations with functions specified in certain domains (coordinate networks) of the direct space and Fourier space related to the object and detector. The size of and steps involved in such networks are rigidly coupled to the object size, its distance to the detector, and the numerical aperture. Programs developed in this paper are used to refine the limits of applicability of the paraxial approximation (Fresnel integrals) in calculations of the field on the detector. Simulations of images obtained by the ptychography method are presented.

**Keywords:** ptychography, phase recovery

PACS numbers: 42.25. – p, 42.30. – d

Bibliography — 37 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk 190 (8) 820–828 (2020)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFN.2020.05.038775>

### Список литературы

1. Gerchberg R W, Saxton W O *Optik* **35** 237 (1972)
2. Brady G R, Guizar-Sicairos M, Fienup J R *Opt. Express* **17** 624 (2009)
3. Katkovnik V et al. *Optica* **4** 786 (2017)
4. McDermott S, Maiden A *Opt. Express* **26** 25471 (2018)
5. Sandberg R L et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **105** 24 (2008)
6. Miao J, Sandberg R L, Song C *IEEE J. Select. Topics Quantum Electron.* **18** 399 (2012)
7. Zürich M et al. *Sci. Rep.* **4** 7356 (2015)
8. Chapman H N, Nugent K A *Nat. Photon.* **4** 833 (2010)
9. Robisch A-L et al. *Opt. Lett.* **41** 5519 (2016)
10. Кузнецова Т И *УФН* **154** 677 (1988); Kuznetsova T I *Sov. Phys. Usp.* **31** 364 (1988)
11. Бакут П А и др. *ДАН СССР* **290** 89 (1986); Bakut P A et al. *Sov. Phys. Dokl.* **31** 710 (1986)
12. Устинов Н Д, Матвеев И Н, Протопопов В В *Методы обработки оптических полей в лазерной локации* (М.: Наука, 1983)
13. Бельдюгин И М, Зубарев И Г, Михайлов С И *Квантовая электроника* **31** 539 (2001); Bel'dyugin I M, Zubarev I G, Mikhailov S I *Quantum Electron.* **31** 539 (2001)
14. Котляр В В, Малов А Н *Квантовая электроника* **16** 1072 (1989); Kotlyar V V, Malov A N *Sov. J. Quantum Electron.* **19** 696 (1989)
15. Гончарский А В, Гончарский А А *Компьютерная оптика. Компьютерная голография* (М.: Изд-во МГУ, 2004)
16. Карасик В Е, Стасенко К В, Толстогузов В Л *Вест. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение* (Спец. вып.) 214 (2011) Специальный выпуск "Современные проблемы оптоэлектроники"
17. Suman R et al. *Sci. Rep.* **6** 22032 (2016)
18. Marrison J et al. *Sci. Rep.* **3** 2369 (2013)
19. Rath N et al. *Cancer Res.* **78** 3321 (2018)
20. Phase Focus Limited, <https://www.phasefocus.com/>
21. Hoppe W *Acta Cryst. A* **25** 495 (1969)
22. Hegerl R, Hoppe W *Ber. Bunsen. Phys. Chem.* **74** 1148 (1970)
23. Shechtman Y et al. *IEEE Signal Process. Mag.* **32** (3) 87 (2015)
24. Pfeiffer F *Nat. Photon.* **12** 9 (2018)
25. Fienup J R *Appl. Opt.* **21** 2758 (1982)
26. Lalor E J. *Opt. Soc. Am.* **58** 1235 (1968)
27. Goodman J W *Introduction to Fourier Optics* 2nd ed. (New York: McGraw-Hill, 1996)
28. Onural L J. *Opt. Soc. Am. A* **28** 290 (2011)
29. Kim M K *Digital Holographic Microscopy: Principles, Techniques, and Applications* (Springer Series in Optical Sciences, Vol. 162) (New York: Springer, 2011)
30. Федорюк М В *Метод перевала* (М.: Либроком, 2010)
31. Vinogradov A V et al. *Numerical Simulation of X-ray Diffraction Optics* (Moscow: A and B Publ. House, 1999)
32. Киселев А П *Оптика и спектроскопия* **102** 661 (2007); Kiselev A P *Opt. Spectrosc.* **102** 603 (2007)
33. Faulkner H M L, Rodenburg J M *Phys. Rev. Lett.* **93** 023903 (2004)
34. Rodenburg J M, Faulkner H M L *Appl. Phys. Lett.* **85** 4795 (2004)
35. Thibault P et al. *Science* **321** 379 (2008)
36. Thibault P et al. *Ultramicroscopy* **109** 338 (2009)
37. Maiden A M, Rodenburg J M *Ultramicroscopy* **109** 1256 (2009)

Received 19 January 2020, revised 12 May 2020

Physics – Uspekhi **63** (8) (2020)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFN.2020.05.038775>