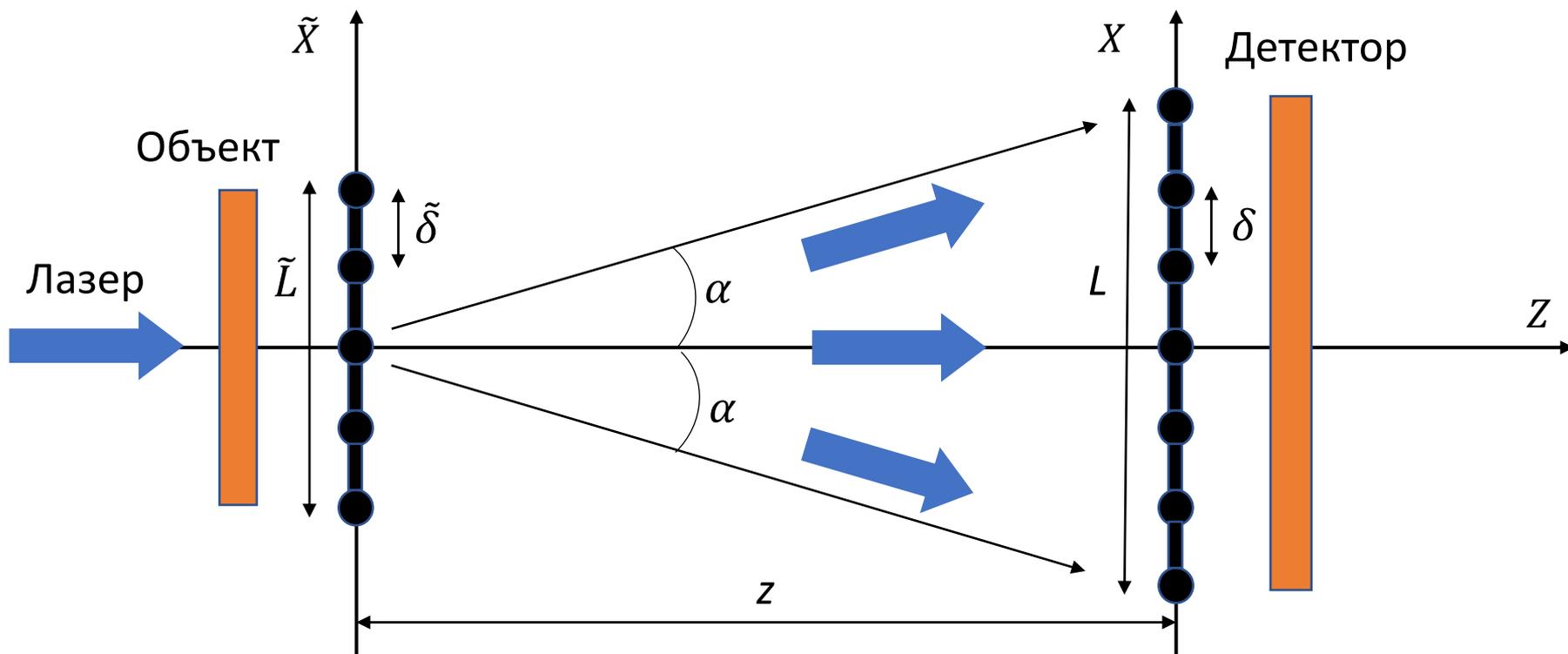


РЕНТГЕНОВСКИЕ ДИФРАКЦИОННЫЕ
ИЗОБРАЖЕНИЯ
НЕКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ:
ПРИНЦИПЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ.

Попов Н.Л.

ФИАН

Основные понятия безлинзовой микроскопии



\tilde{L} - размер домена объекта

$\tilde{\delta}$ - размер пиксела объекта

L - размер домена объекта

δ - размер пиксела объекта

α - апертурный угол $NA = \sin \alpha$ - числовая апертура

z - расстояние до детектора

$z \geq \tilde{L}^2 / \lambda$ - дальняя зона

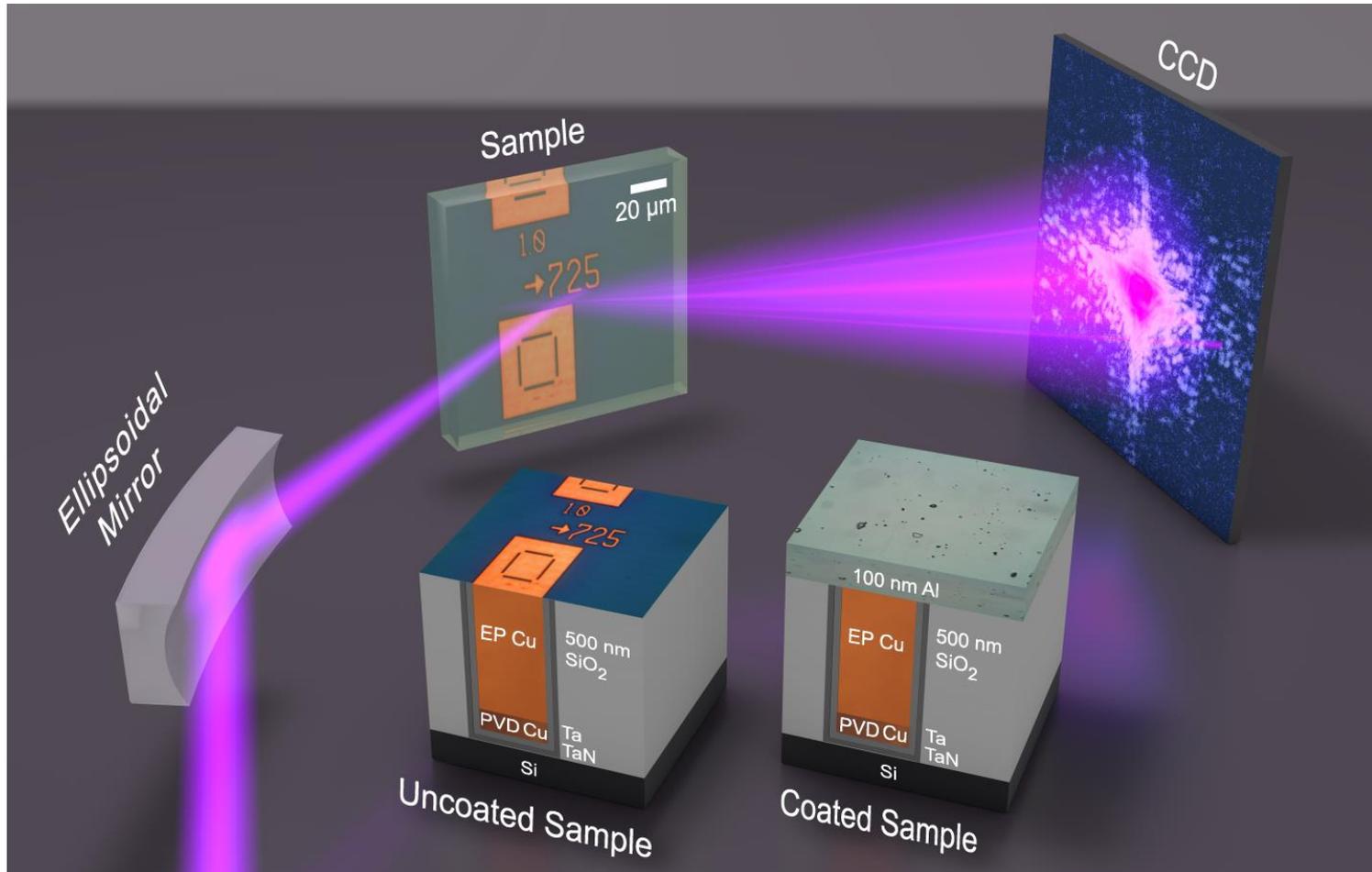
$\tilde{\delta} \geq 0.5\lambda / NA$ - дифракционный предел разрешения

Существующие применения когерентной безлинзовой микроскопии

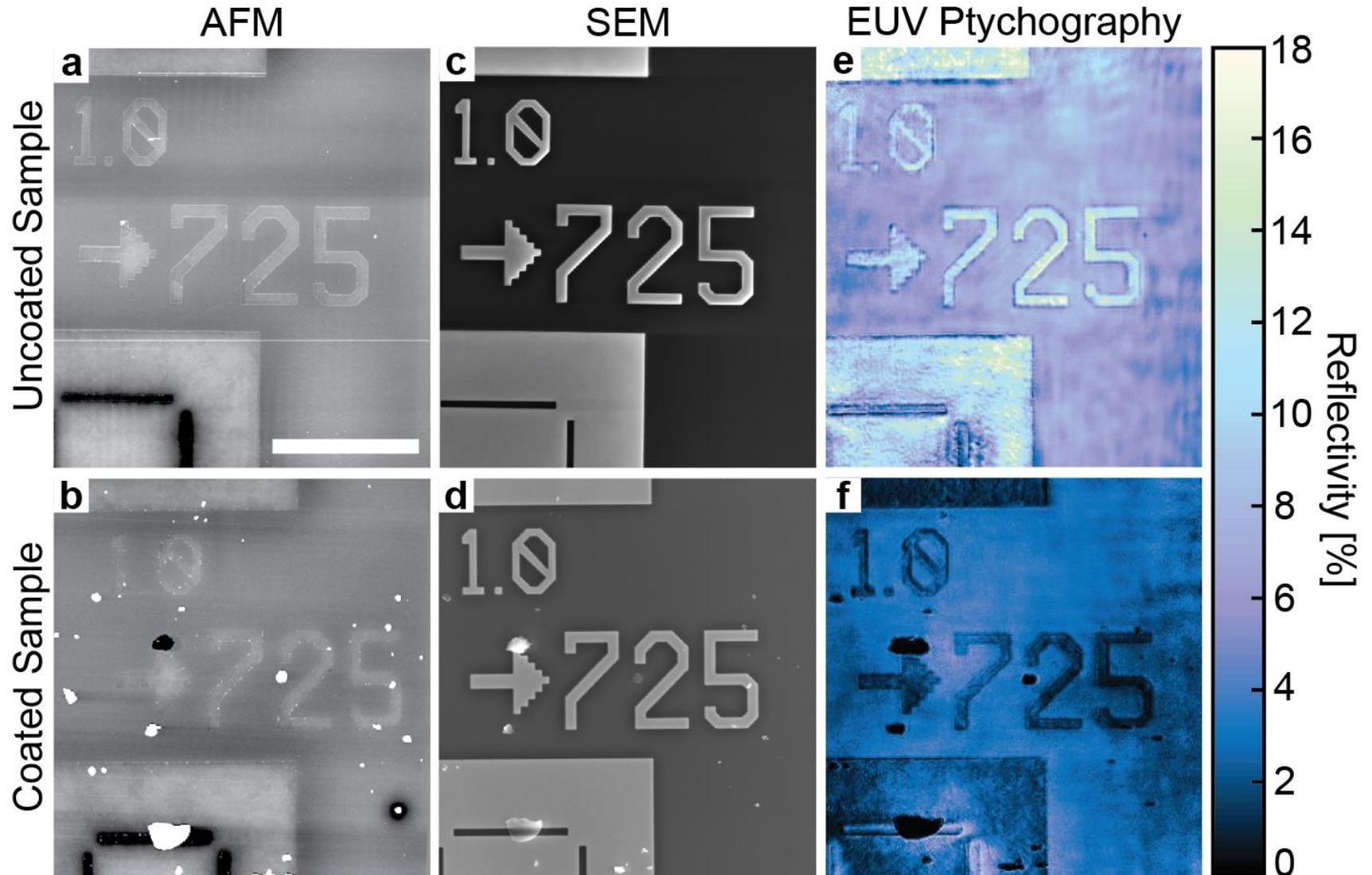
- Valzania, L.; Feurer, T.; Zolliker, P.; Hack, E. Terahertz ptychography. *Opt. Lett.* **2018**, *43*, 543–546.
- Bhartiya, A.; Batey, D.; Cipiccia, S.; Shi, X.; Rau, C.; Botchway, S.; Yusuf, M.; Robinson, I.K. X-ray Ptychography Imaging of Human Chromosomes After Low-dose Irradiation. *Chromosome Res.* **2021**, *29*, 107–126.
- www.Phasefocus.com
 1. "Root Extracts of Two Cultivars of Paeonia Species: Lipid Composition and Biological Effects on Different Cell Lines: Preliminary Results". Calonghi, N. et al., *Molecules*, (2021). [doi: 10.3390/molecules26030655](https://doi.org/10.3390/molecules26030655)
 2. "Viscoelastically active sutures - A stitch in time?". France, L. A. & Fancey, K. S., *Materials Science and Engineering: C*, (2020). [doi: 10.1016/j.msec.2020.111695](https://doi.org/10.1016/j.msec.2020.111695)
 3. "Cytotoxic (cis,cis-1,3,5-triaminocyclohexane)ruthenium(II)-diphosphine complexes; evidence for covalent binding and intercalation with DNA". Wise, D.E. et al., *Dalton Trans.*, (2020). [doi: 10.1039/D0DT02612C](https://doi.org/10.1039/D0DT02612C)
 4. "p53-dependent polyploidisation after DNA damage in G2 phase". Middleton, A. et al., *bioRxiv* 2020.06.09.141770, (2020). [doi: 10.1101/2020.06.09.141770](https://doi.org/10.1101/2020.06.09.141770)
 5. "MicroRNAs Restrain Proliferation in BRAF^{V600E} Melanocytic Nevi". McNeal, A. S. et al., *bioRxiv* 2020.05.21.109397, (2020). [doi: 10.1101/2020.05.21.109397](https://doi.org/10.1101/2020.05.21.109397)

“Quantitative Chemically-Specific Coherent Diffractive Imaging of Buried Interfaces using a Tabletop EUV Nanoscope”, Optical Society of America, 2016, paper CT4C.1, Elisabeth R. Shanblatt, ...

$NA=0.09$, $\lambda=29.1$ nm, $\theta=32^\circ$, $z=3.85$ cm, $L\sim 30$ μm



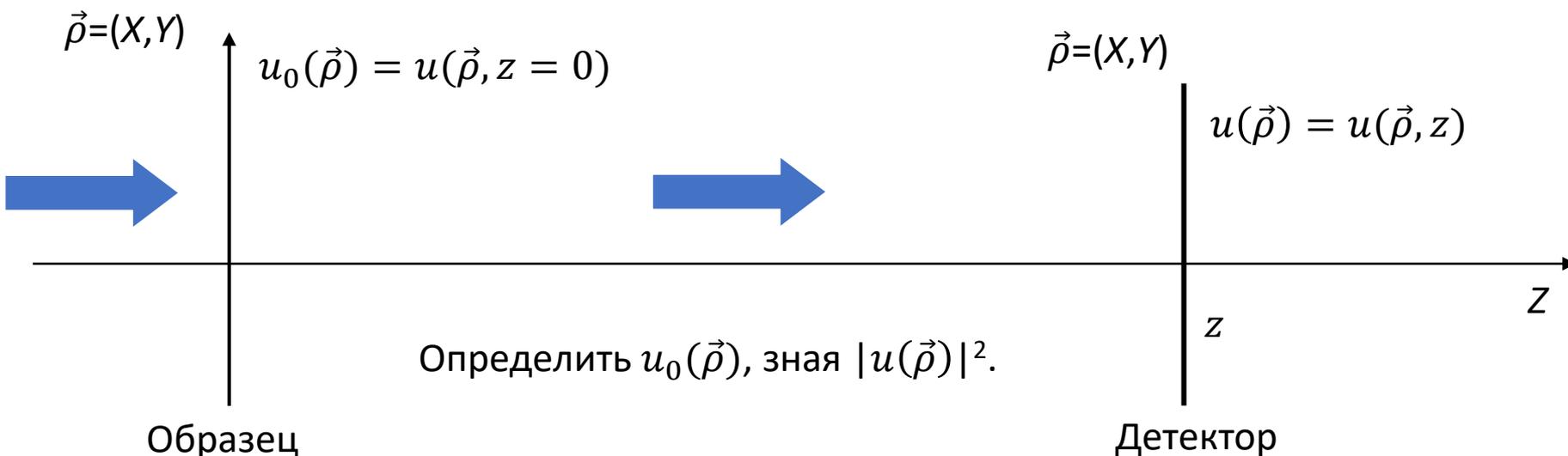
“Quantitative Chemically-Specific Coherent Diffractive Imaging of Buried Interfaces using a Tabletop EUV Nanoscope”, Optical Society of America, 2016, paper CT4C.1, Elisabeth R. Shanblatt, ...



Преимущества когерентной безлинзовой микроскопии

- Не требуется дорогостоящая оптика для больших числовых апертур.
- Нет aberrаций, присущих оптическим системам.
- Возможность использовать мощные пучки, разрушающие оптику.
- Возможность получать изображение фазовых объектов. Фаза сама по себе является дополнительной информацией об объекте.

Когерентная безлинзовая микроскопия



1. Определить фазу $u_0(\vec{\rho})$, зная $|u_0(\vec{\rho})|^2$ и $|u(\vec{\rho})|^2$. Предложен алгоритм итеративный алгоритм. *Gerchberg R.W., Saxton W.O., Optik, Bd. 35, S. 237, 1972.*
2. Определить фазу $u_0(\vec{\rho})$, зная $|u(\vec{\rho})|^2$ и точный размер объекта. Предложен алгоритм НЮ. *J. R. Fienup, 'Phase retrieval algorithms: a comparison', APPLIED OPTICS / Vol. 21, No. 15 / 1 August 1982.*
3. Определить фазу $u_0(\vec{\rho})$, по $|u(\vec{\rho})|^2$ используя птихографию. Предложен алгоритм PIE. *Rodenburg J.M., Faulkner H. M. L., 'A phase retrieval algorithm for shifting illumination', Appl. Phys. Lett. 85, 4795–4797 (2004).*

Восстановление фазы; $|f|$ и $|F|$ известны.

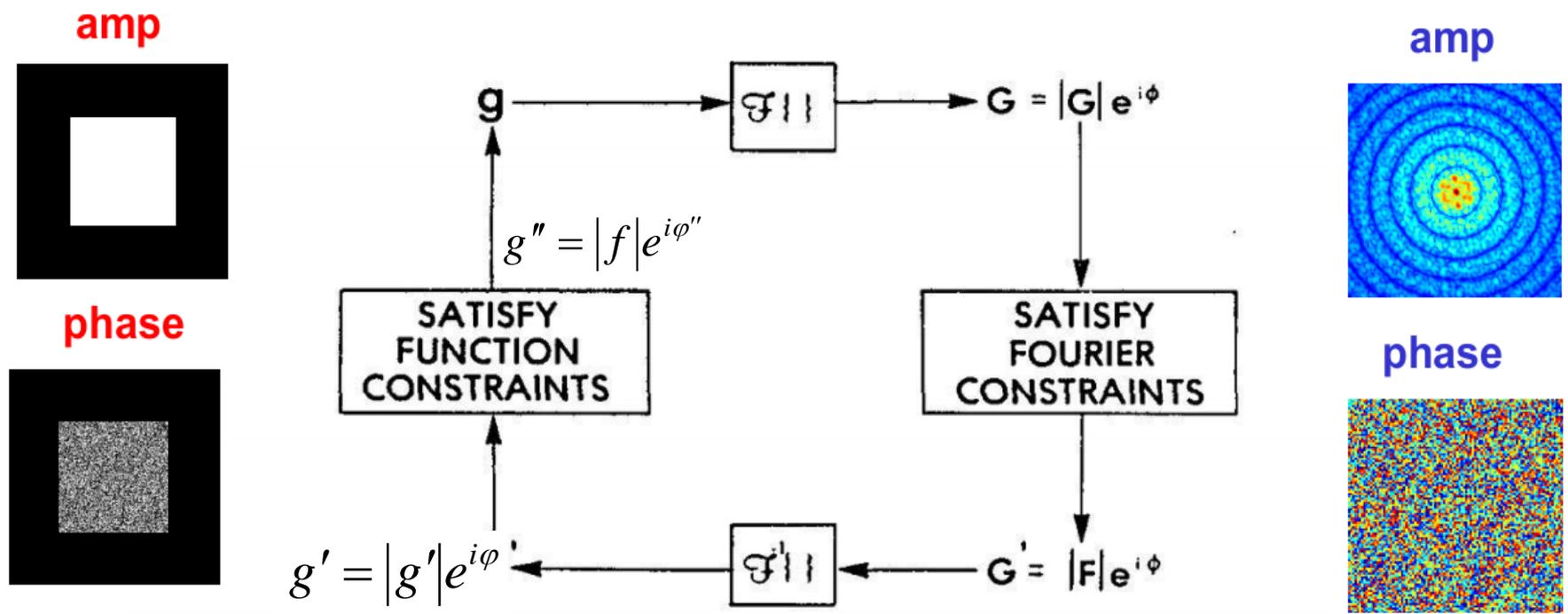


Fig. 1. Block diagram of the error-reduction (Gerchberg-Saxton) algorithm.

D. R. Luke, Inverse Probl. **21**, 37–50 (2005).

J.R. Fienup, J. Opt. Soc. Am. **3** 27(1978).

J. R. Fienup, Appl. Opt. **21**, 2758 (1982).

R. W. Gerchberg and W.O. Saxton, Optik **35**, 237 (1972).

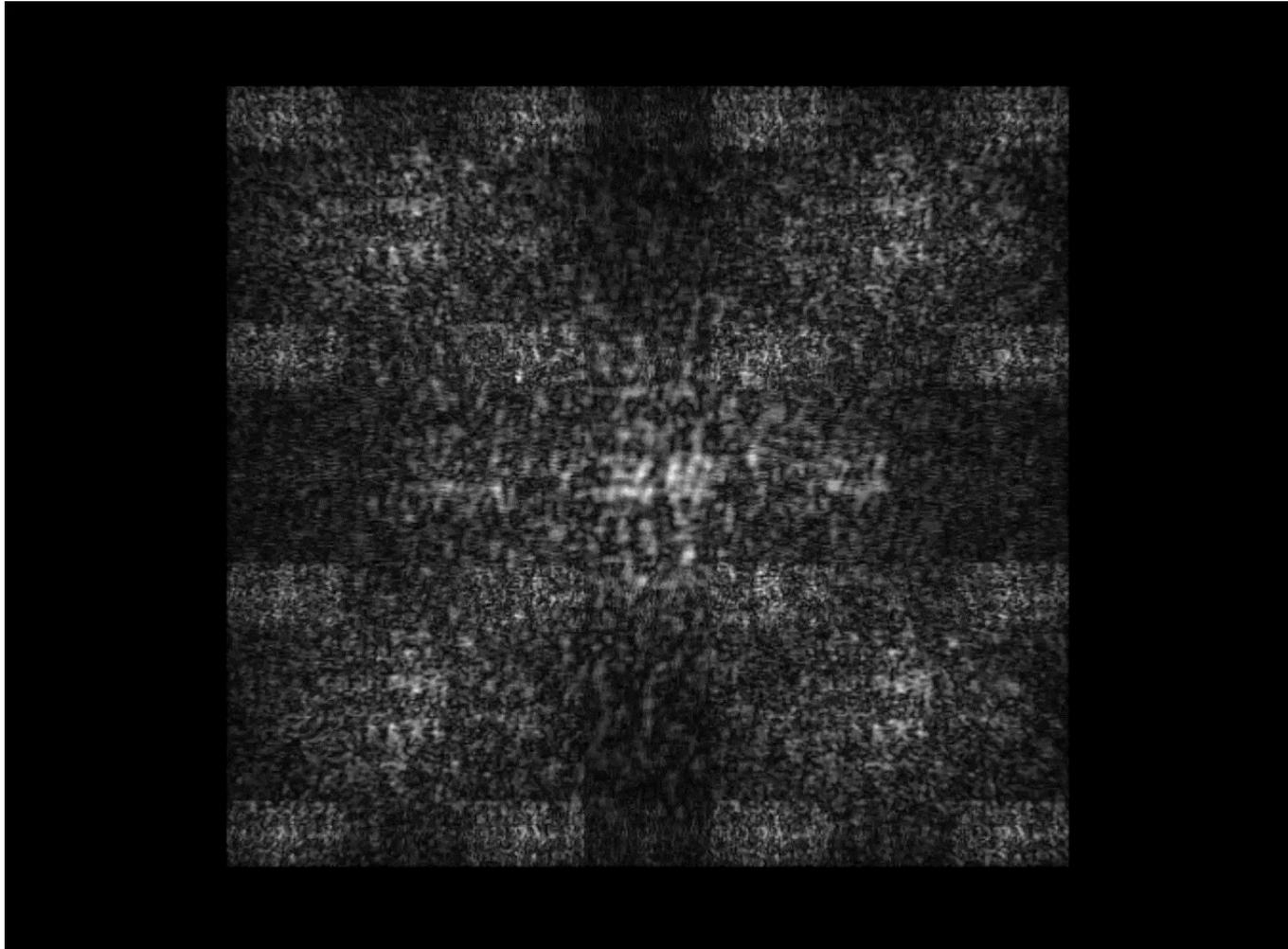
real space

$|f|$

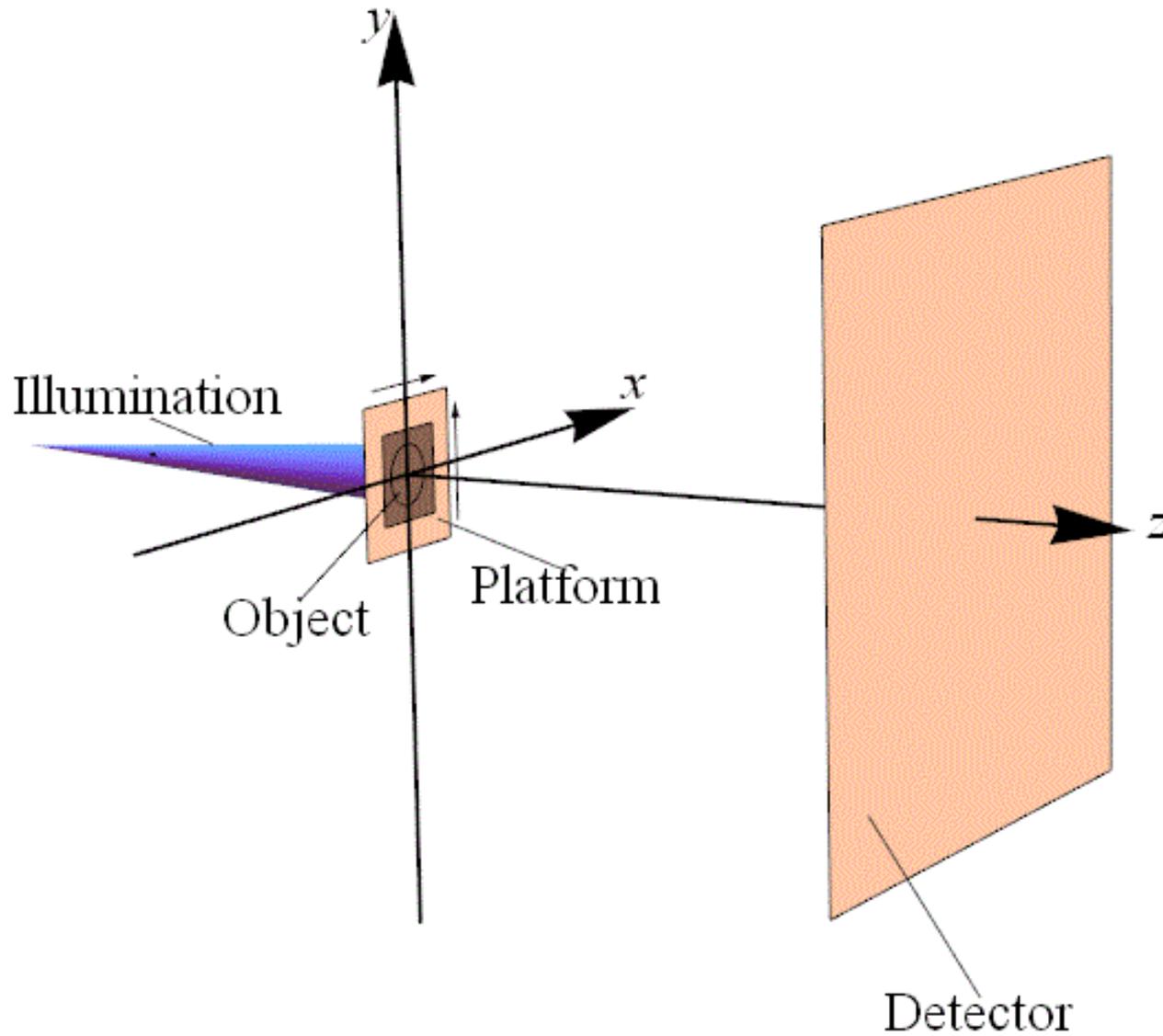
Fourier space
(Fresnel)

$|F|$

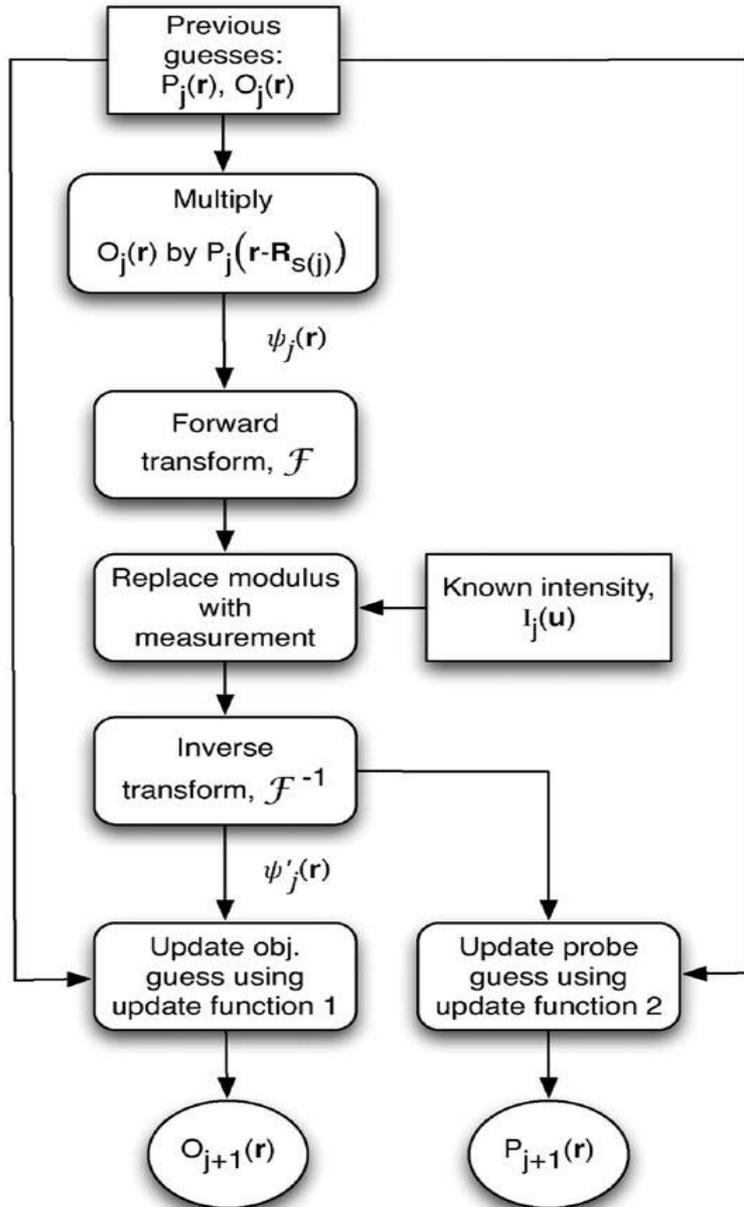
Восстановленное изображение,
 $\lambda=10$ нм, $L=50$ мкм, $d=30$ см, $\theta=90^\circ$



Птихография. Схема микроскопа.



Птихография. Алгоритм ePIE.



Andrew M. Maiden , John M. Rodenburg, 'An improved ptychographical phase retrieval algorithm for diffractive imaging', Department of Electrical and Electronic Engineering, University of Sheffield, S1 3JD, UK, A.M. Maiden, J.M. Rodenburg / Ultramicroscopy 109 (2009) 1256–1262.

$$O_{j+1}(\vec{\rho}) = O_j(\vec{\rho}) + \alpha \frac{P_j^*(\vec{\rho} - \vec{\rho}_j)}{|P_j(\vec{\rho} - \vec{\rho}_j)|_{max}^2} (\psi'_j(\vec{\rho}) - \psi_j(\vec{\rho})),$$

$$P_{j+1}(\vec{\rho}) = P_j(\vec{\rho}) + \beta \frac{O_j^*(\vec{\rho} + \vec{\rho}_j)}{|O_j(\vec{\rho} + \vec{\rho}_j)|_{max}^2} (\psi'_j(\vec{\rho}) - \psi_j(\vec{\rho})),$$

$$\psi_j(\vec{\rho}) = O_j(\vec{\rho}) P_j(\vec{\rho} - \vec{\rho}_j),$$

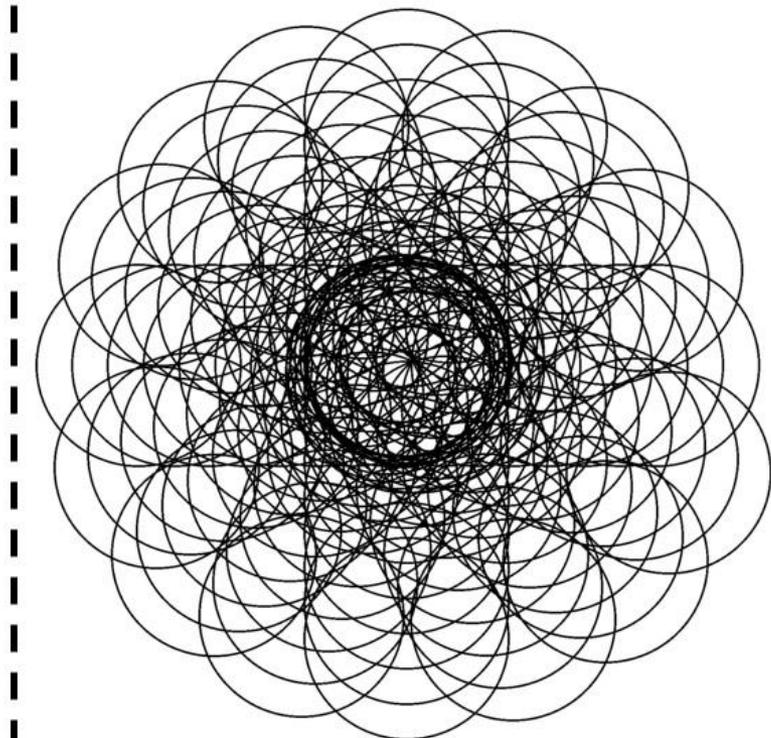
$$\psi'_j(\vec{\rho}) = \mathcal{F}^{-1} \left[A_j(\vec{\rho}) \frac{\mathcal{F}[\psi_j(\vec{\rho})]}{|\mathcal{F}[\psi_j(\vec{\rho})]|} \right],$$

$$A_{j+J}(\vec{\rho}) = A_j(\vec{\rho}), \quad \vec{\rho}_{j+J} = \vec{\rho}_j,$$

α и β – безразмерные коэффициенты
порядка единицы

Птихография. Поле зрения.

50 мкм



$7 \times 13 = 91$ мкм

Птихография. Объект

Высота чисел равна «значение числа» * 50 нм.

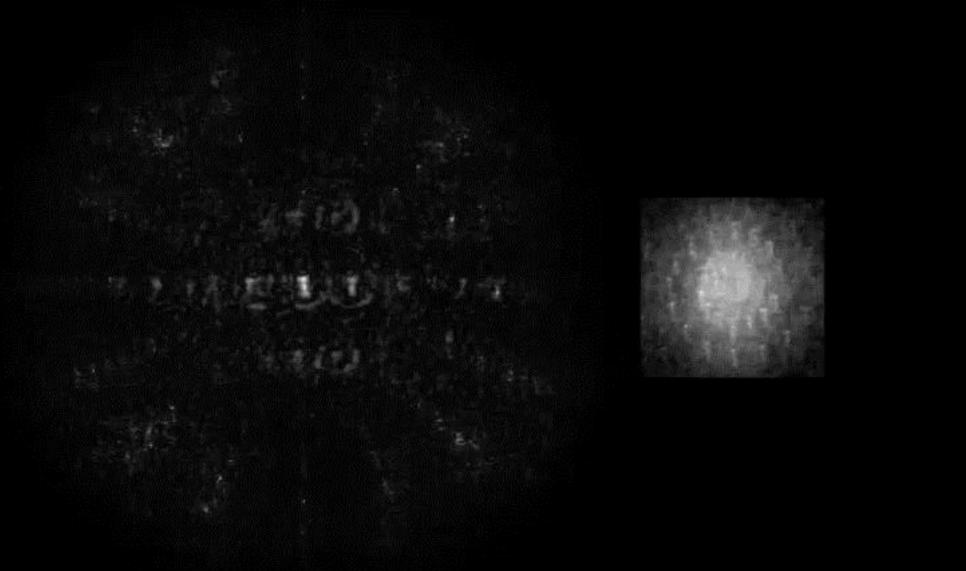
50 мкм



50 мкм

Птихография. Результаты расчётов.

11520-ой итераций (90 циклов по 128 дифрактограмм) за 9 секунд.



Время расчета 9 минут на 14 ядерном

CPU Intel(R) Core(TM) i9-7940X CPU @ 3.10GHz.

Заключение.

Когерентное освещение объектов позволяет исключить применение дорогостоящей рентгеновской оптики и приблизиться к дифракционному пределу разрешения.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ