

# 1 Theorie Simulation

**MSFT**

$$\phi \propto \int \delta\eta(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (1)$$

$$k^2 = (k - q_{\parallel})^2 + q_{\perp}^2 \Leftrightarrow q_{\parallel} = k - \sqrt{k^2 - q_{\perp}^2}. \quad (2)$$

$$\phi \approx \sum_n \mathcal{F}[\delta\eta] e^{-in\delta_z(k - \sqrt{k^2 - q_{\perp}^2})}. \quad (3)$$

**Multislice Propagation**

$$\bar{\phi}(q_x, q_y, z + \Delta z) = \bar{\phi}(z) e^{i\Delta z \sqrt{k^2 - (q_x + q_y)^2}}, \quad (4)$$

$$\phi(x, y, z + \Delta z) = \phi e^{i\delta n(z)\Delta z}. \quad (5)$$

**Thibault**

$$\bar{\Phi}(z) = \bar{G} *_z [\bar{\delta\eta} *_{q_{\perp}} \bar{\Phi}] \quad (6)$$

mit

$$\bar{G} = \frac{1}{2\pi} \frac{ik^2}{\sqrt{k^2 - q_{\perp}^2}} e^{iz(\kappa - k)} \quad (7)$$

Faltungsintegral aufspalten:

$$\bar{\Phi}(z + \Delta z) = \int_{\Delta z}^{\infty} \bar{G}(z') [\bar{\delta\eta} *_{q_{\perp}} \bar{\Phi}] (z + \Delta z - z') dz' + \int_0^{\Delta z} \bar{G}(z') [\bar{\delta\eta} *_{q_{\perp}} \bar{\Phi}] (z + \Delta z - z') dz' \quad (8)$$

1. Summand: Substitution ( $z' \rightarrow z'' + \Delta z$ )

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta z}^{\infty} \bar{G}(z') [\bar{\delta\eta} *_{q_{\perp}} \bar{\Phi}] (z + \Delta z - z') dz' \\ & \stackrel{z' \rightarrow z'' + \Delta z}{=} \int_0^{\infty} \bar{G}(z'' + \Delta z) [\bar{\delta\eta} *_{q_{\perp}} \bar{\Phi}] (z - z'') dz'' \\ & = e^{i\Delta z(\kappa - k)} \int_0^{\infty} \frac{1}{2\pi} \frac{ik^2}{\sqrt{k^2 - q_{\perp}^2}} e^{iz''(\kappa - k)} [\bar{\delta\eta} *_{q_{\perp}} \bar{\Phi}] (z - z'') dz'' \\ & = e^{i\Delta z(\kappa - k)} \bar{\Phi}(z), \end{aligned}$$

2. Summand: Riemann-Obersumme mit einem einzigen Stützpunkt bei  $\Delta z$  ( Fehler von der Ordnung  $\Delta z$ ):

$$\int_0^{\Delta z} \bar{G}(z') [\bar{\delta\eta} *_{q_{\perp}} \bar{\Phi}] (z + \Delta z - z') dz' \approx \Delta z \bar{G}(\Delta z) [\bar{\delta\eta} *_{q_{\perp}} \bar{\Phi}] (z) \quad (9)$$

Näherung für die Welle bei  $z + \Delta z$ :

$$\bar{\Phi}(z + \Delta z) \approx e^{i\Delta z(\kappa - k)} \left( \bar{\Phi}(z) + \frac{\Delta z}{2\pi} \frac{ik^2}{\sqrt{k^2 - q_{\perp}^2}} [\bar{\delta\eta} *_{q_{\perp}} \bar{\Phi}] (z) \right) \quad (10)$$

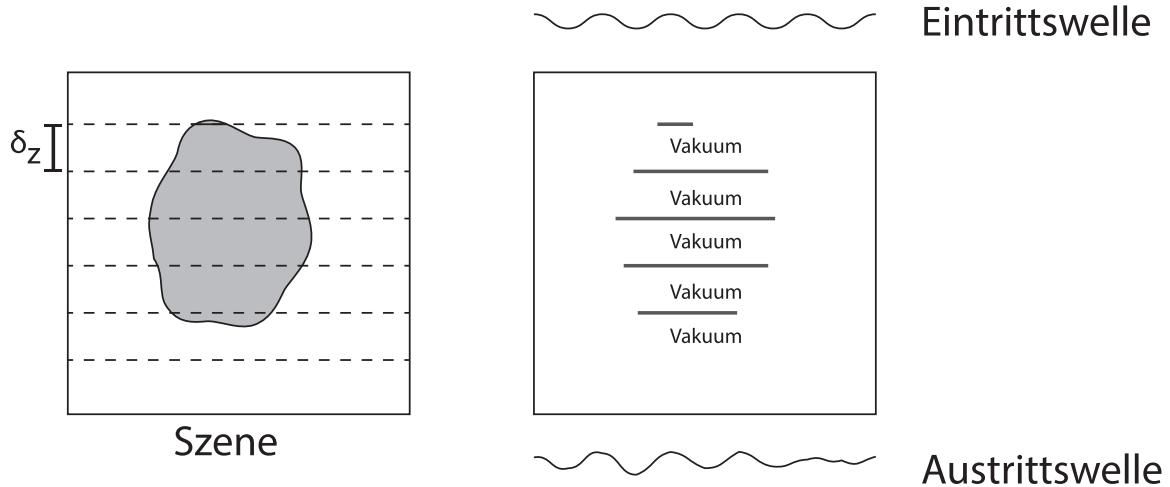


Abbildung 1: Prinzip Multislice Propagation: Die Szene wird in einzelne Schichten zerlegt und die Wechselwirkung mit der Materie jeder einzelnen Schicht in auf eine in dieser Schicht liegenden Ebene reduziert. Zwischen diesen Ebenen wird eine Vakuumpropagation angewendet.

## 2 Problem mit Minima bei Diskretisierung

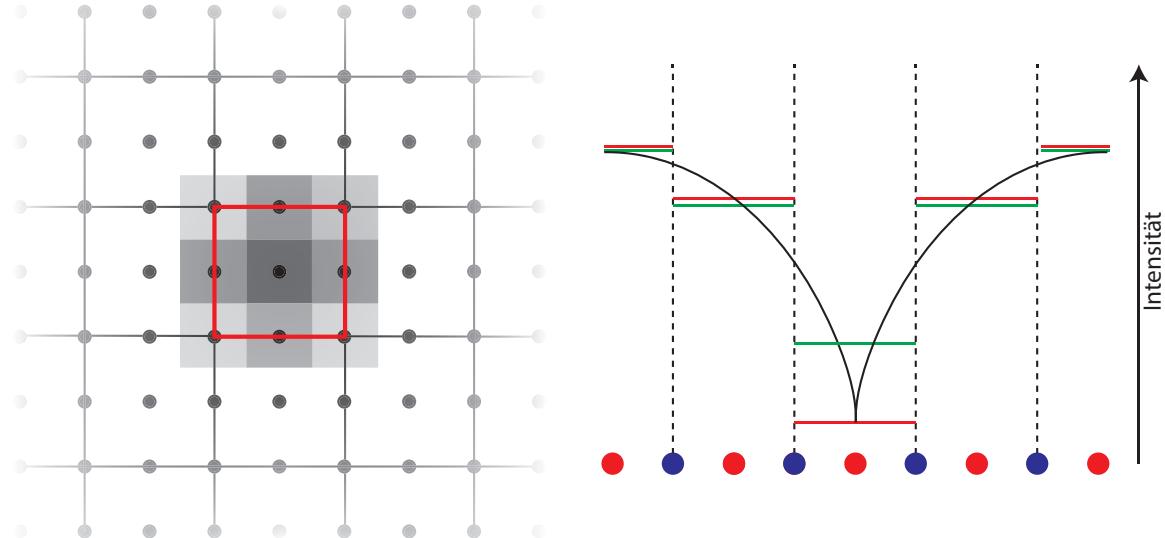


Abbildung 2: Die Verwendung von Überabtastung und gewichteten Mittelwertes bei den Streubildern: Um die Intensität im links rot umrandeten Bereich zu bestimmen, wird die Intensität an den Schwarzen Punkten berechnet und ein gewichteter Mittelwert gebildet, indem die Intensität der vier Randwerte zur Hälfte, die der vier Eckpixel zu einem Viertel in dem umrandeten Bereich mitberücksichtigt werden. Der Effekt gegenüber einer Berechnung nur in den Zentren der Pixel zeigt sich rechts: Wird die Intensität bei einem schwarz dargestellten wahren Intensitätsverlauf nur an den roten Punkten bestimmt, dominiert das Minimum den Intensitätsverlauf. Eine geringere Abweichung ergibt sich bei Berechnung auch an den blauen Punkten und Bildung des gewichteten Mittelwert (grün).

### 3 Ergebnisse Simulation

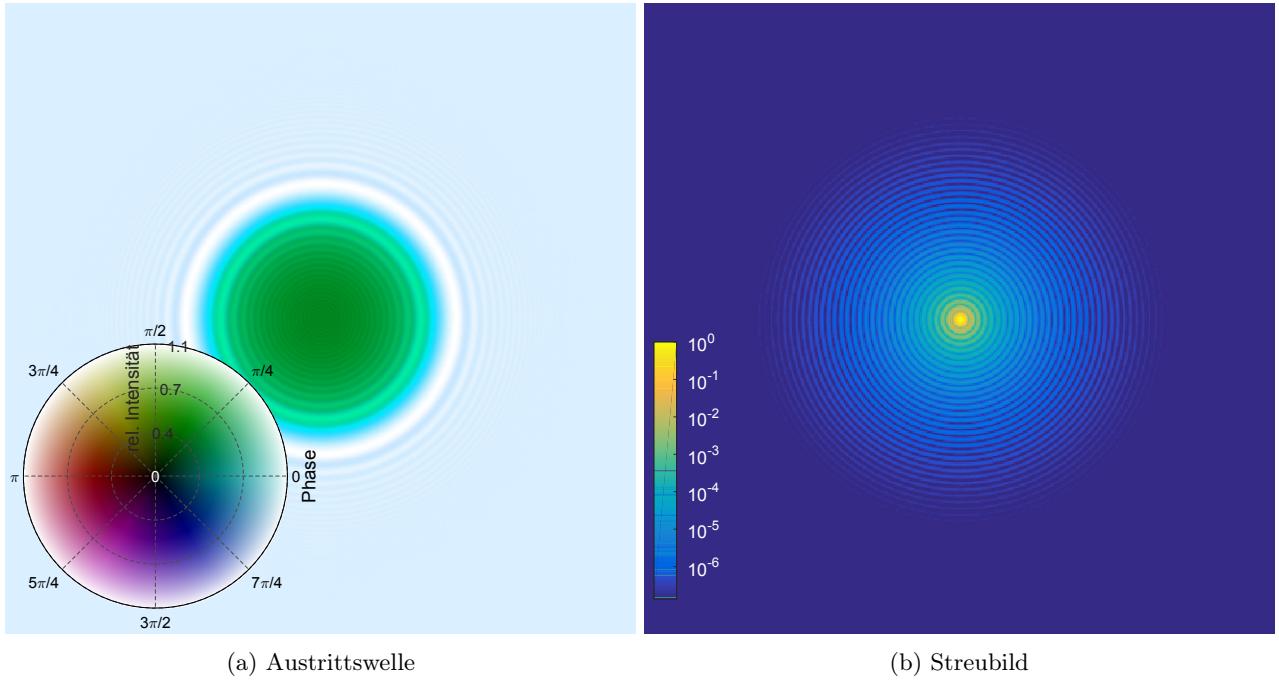
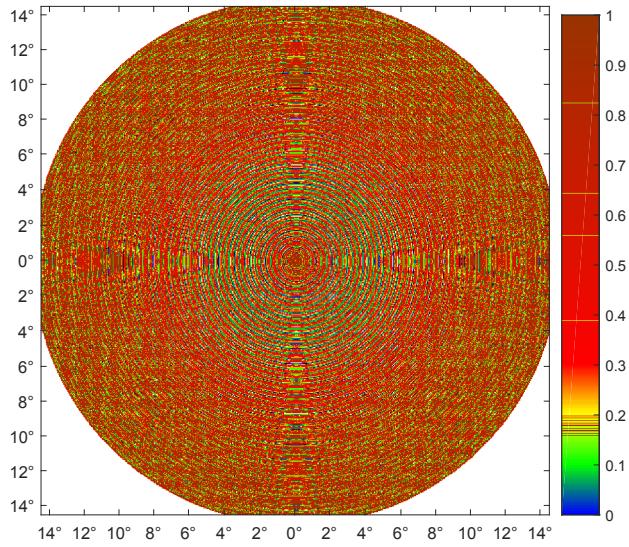
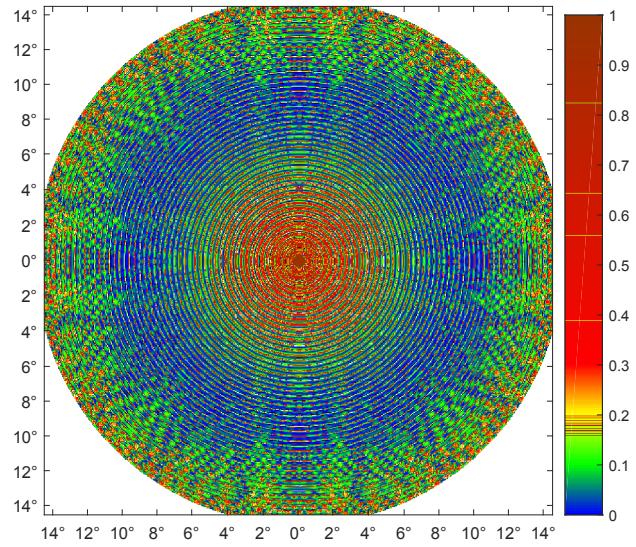


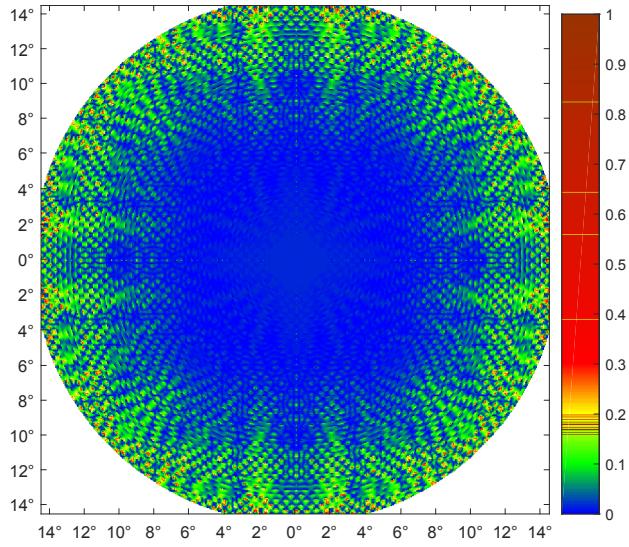
Abbildung 3: Exemplarische Multislice-Propagations Austrittswelle (a) und (logarithmiertes) Streubild (b) einer Kugel mit Radius 100 nm bei  $\beta, \delta=10^{-3}$ . Die relative Intensität der Austrittswelle bezüglich der Eintrittswelle ist über die Helligkeit dargestellt, die Phase über den Farbton. Das Streubild zeigt einen Bereich bis  $15^\circ$ .



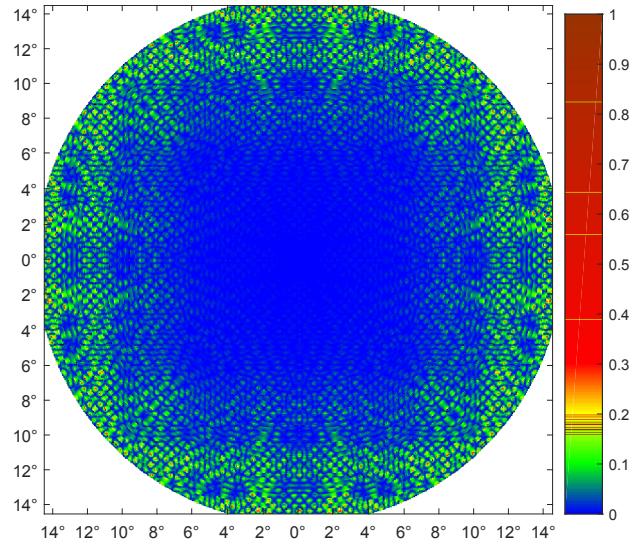
(a) Projektion



(b) MSFT



(c) Thibaults Multislice



(d) Multislice Propagation

Abbildung 4: Relative Abweichungen von Mie der simulierten Streubilder einer Kugel mit Radius 100 nm bei  $\beta = \delta = 10^{-3}$ .

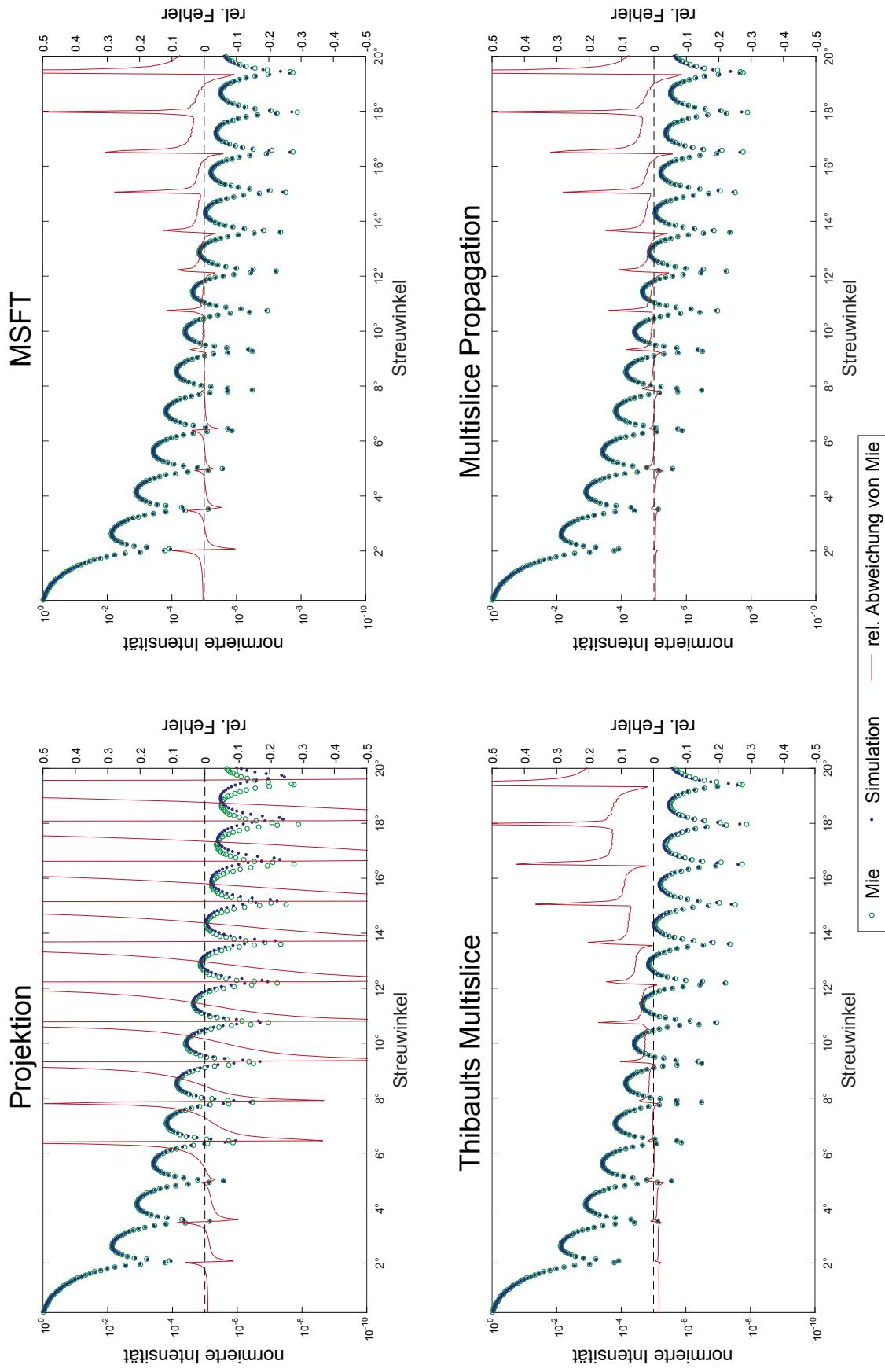


Abbildung 5: Radiale logarithmierte Intensitätsprofile berechnet mit den verschiedenen Algorithmen sowie die relative Abweichung von Mie für eine Kugel mit Radius 20 nm und  $\beta, \delta = 10^{-4}$ . Es ist bei kleinen Streuwinkeln eine gute Übereinstimmung aller Algorithmen zu erkennen, bei höheren Winkeln versagt die Projektion. Über den gesamten Bereich besitzt bei diesen Parametern die Multislice Propagation die beste Übereinstimmung. Die relativen Fehler der Simulationen sind in den Intensitätsminima aufgrund der dort deutlich abfallenden Referenzintensität bei allen Verfahren deutlicher ausgeprägt.

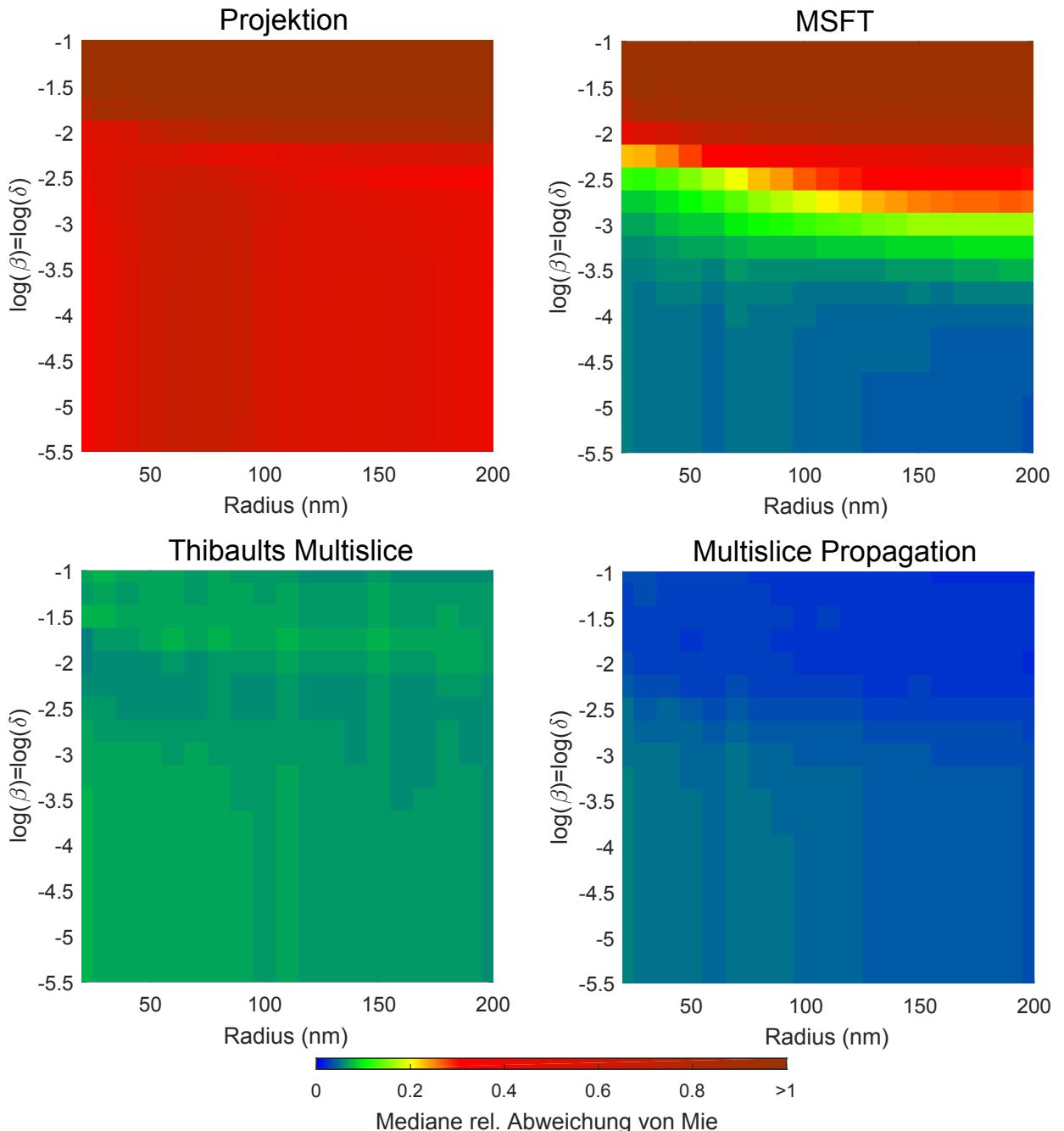


Abbildung 6: Zur Entscheidung bei welchen Radien und welchen Abweichung der Brechzahl vom Vakuum die Simulationen noch valide sind, ist die mediane, relative Abweichung bis  $20^\circ$  von Mie über den Parametern aufgetragen. Es somit die Bereiche erkennbar, in denen der jeweilige Simulationsalgorithmus valide Ergebnisse liefert. Parameter:  $\Delta x = \lambda/2$ ,  $\Delta z$  als  $\lambda/8$  und  $N=2048$ .

## 4 komplexeres Objekt

Material	Brechzahl bei 1 nm [?]
Lecithin ( $\text{C}_{44}\text{H}_{82}\text{NO}_8\text{P}$ ) [?]	$1 - (1.69 - 0.12i) \times 10^{-4}$
Wasser	$1 - (1.55 - 0.18i) \times 10^{-4}$
Protein ( $\text{H}_{86}\text{C}_{52}\text{N}_{13}\text{O}_{15}\text{S}$ ) [?]	$1 - (2.03 - 0.16i) \times 10^{-4}$
Xenon-Cluster	$1 - (2.54 - 1.46i) \times 10^{-4}$

Tabelle 1: Brechzahlen der verwendeten Materialien

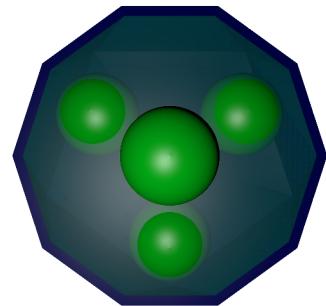


Abbildung 7: 3D-Modell

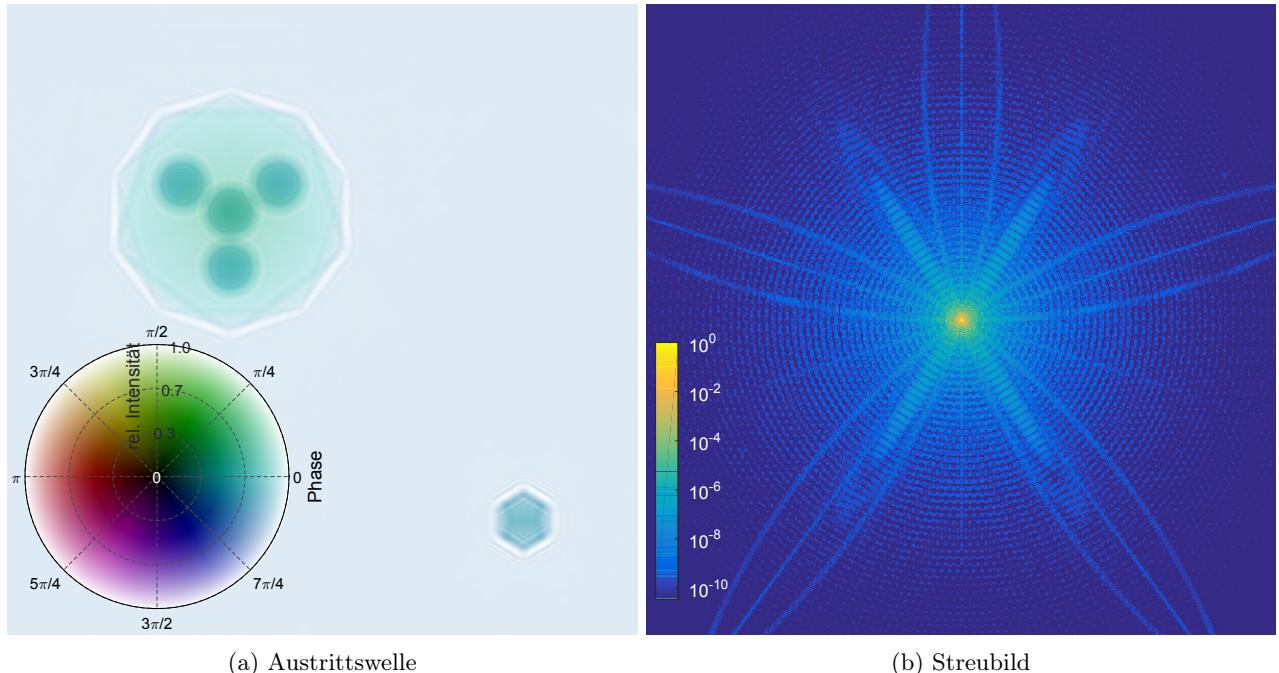
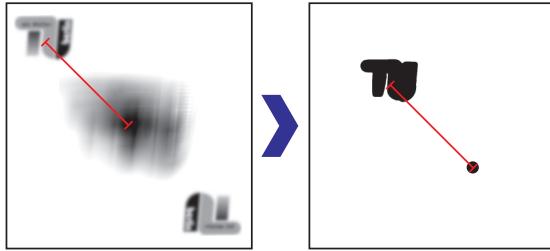


Abbildung 8: Austrittswelle und logarithmiertes Streubild eines komplexen Objektes. Bei der Austrittswelle ist die relative Intensität bezüglich der Eintrittswelle über die Helligkeit dargestellt, die Phase über den Farbton.

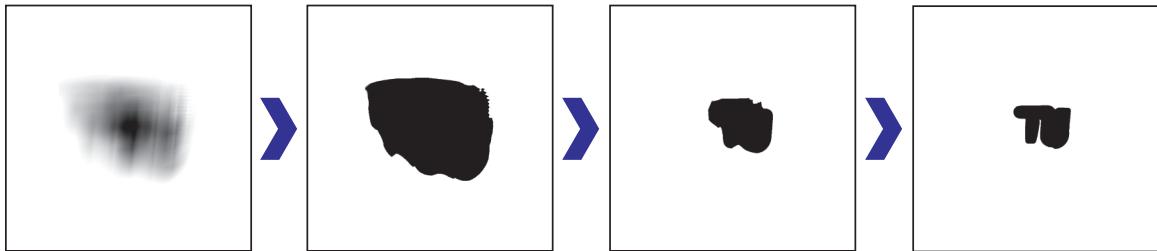
## 5 Rekonstruktion

### 5.1 Phasenrekonstruktion:Support

Holographie: Kreuzkorrelation aus Referenz und Objekt als Support. Shrink-Wrap: Autokorrelation als initialem Support und Anpassung im Laufe der Rekonstruktion.



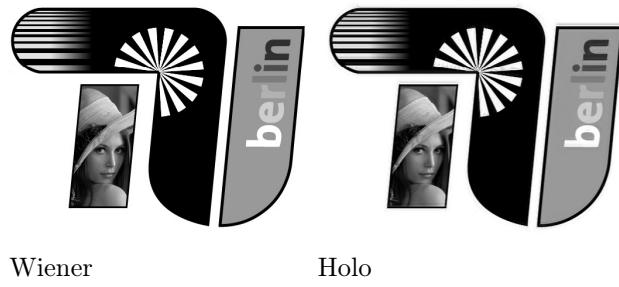
(a) Holographie



(b) Shrink-Wrap

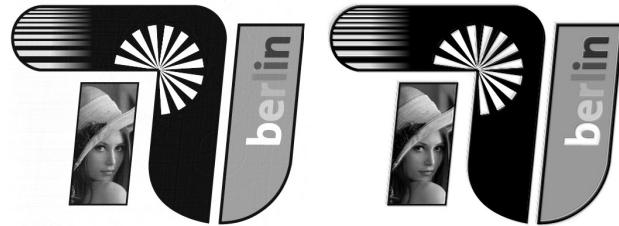
### 5.2 Vergleich in 2D

Ideal Rekonstruktion mit Zentralstrahl ohne Rauschen.  
Original IPR



Wiener

Holo



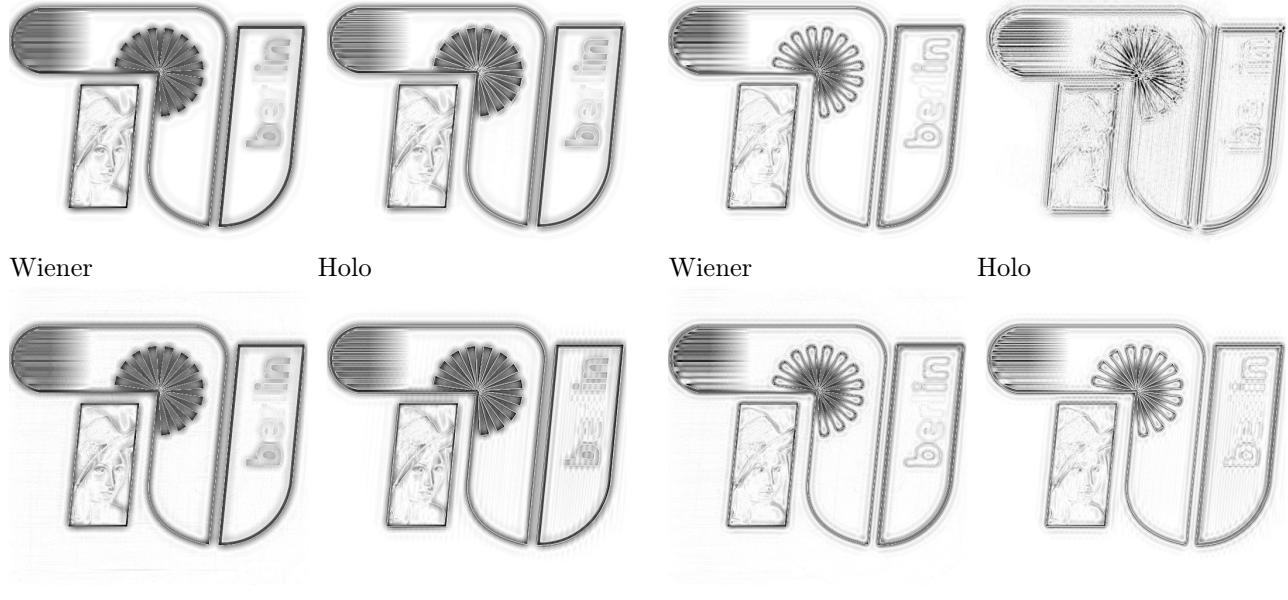
**Einfluss Zentralmaske** Einfluss einer zentralen Maskierung des Streubildes mit Radius 16 Pixel bzw. 64 Pixel von 2048 Pixeln

Original

IPR

Original

IPR



(a) kleine Maske

(b) große Maske

**Einfluss Rauschen** Einfluss des Rauschen: Das gering maskierte Streubild wurde mit 16 Bit bzw 14 Bit diskretisiert und Poisson-Shot-Rauschen hinzugefügt.

Original

IPR

Original

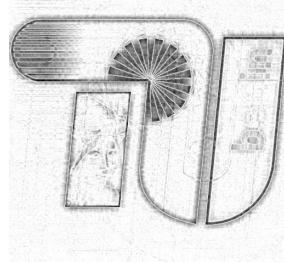
IPR

Wiener

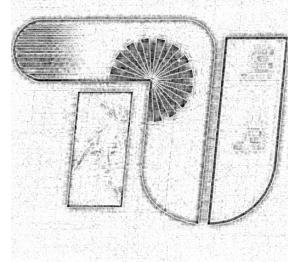
Holo

Wiener

Holo



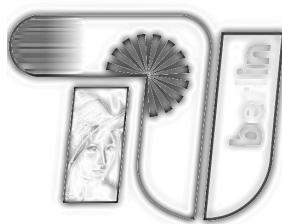
(a) wenig Rauschen



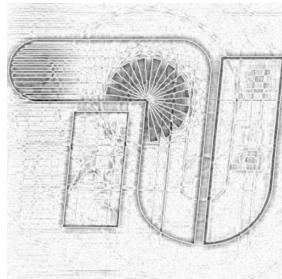
(b) viel Rauschen

**Einfluss Referenzabschätzung** Das gering verrauschte und maskierte Streubild wird mit einem andren Radius der kreisförmigen Referenz rekonstruiert. Dies hat nur einen Einfluss auf die Entfaltung.

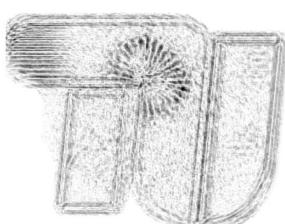
Original



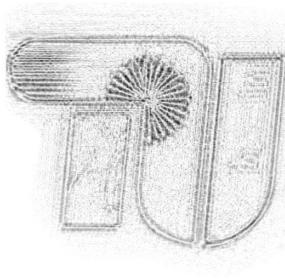
Wiener



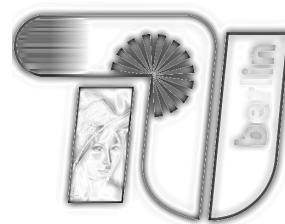
IPR



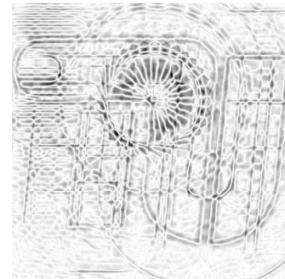
Holo



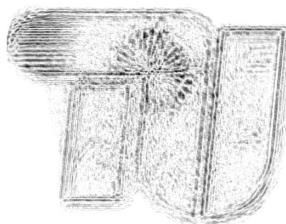
Original



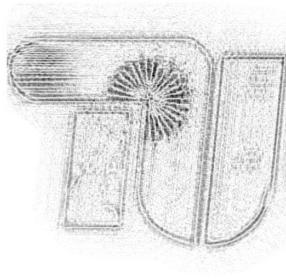
Wiener



IPR



Holo



(a) 1% Abweichung des Radius

(b) 5% Abweichung des Radius

**Rekonstruktion 3D Austrittswelle** Dargestellt ist jeweils das Ergebnis normiert auf das optimale Ergebnis mit der aus 8 bekannten Farbskala.

