

Einzelplatz-Detektion im optischen Gitter unterhalb des Beugungslimits

BACHELORARBEIT IN PHYSIK

von
Jonathan Zopes

angefertigt im
Institut für Angewandte Physik

vorgelegt der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Universität Bonn

Juni 2012

1. Gutachter: Prof. Dr. Dieter Meschede
2. Gutachter: Dr. Frank Vewinger

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Modellierung des Aufzeichnungsprozesses	2
2.1. Das Entfaltungsproblem	3
3. Experimentelle Realisierung	4
3.1. Optischer Aufbau	4
3.2. Klassifizierung der dominanten Rauschquellen	5
3.3. EMCCD-Detektor	5
4. Numerische Einzelplatzdetektion	6
4.1. Modellierung des verwendeten bildgebenden Systems	6
4.2. Parametrische Entfaltung	7
4.2.1. Modellbildung	7
4.2.2. Positionsbestimmung durch Fitting	8
4.3. Richardson-Lucy Entfaltung	10
4.3.1. Positionsbestimmung	11
4.3.2. Erhöhung der Berechnungsgeschwindigkeit	11
5. Implementation	12
6. Performancevergleich der implementierten Algorithmen	13
6.1. Detektion isolierter Atome	13
6.2. Detektion von Atompaaaren	15
7. Zusammenfassung	16
Literatur	17
A. Herleitung der Richardson-Lucy Iteration	18

1. Einleitung

Die Fluoreszenzmikroskopie stellt ein weitverbreitetes Hilfsmittel in der Quanteninformationsverarbeitung dar, welches zur Detektion einzelner Atome in einem optischen Gitter genutzt werden kann. Dies stellt die Voraussetzung zur Umsetzung einer Vielzahl von Experimenten dar, die Atome abhängig von internen Freiheitsgraden im Gitter bewegen. Ein Beispiel ist die Realisierung des quantenmechanischen Random Walks [14].

Während bei Gitterabständen im Bereich einiger Mikrometer einzelne Gitterpositionen optisch aufgelöst werden konnten [11], ist dies für Abstände im Bereich der optischen Wellenlänge ($\lambda \leq 0,8\mu\text{m}$) nur unter Verwendung von Mikroskopen mit hoher numerischer Apertur ($NA > 0,7$) möglich. Die Einbindung dieser Mikroskope in bestehende Experimente ist aufgrund der räumlichen Einschränkungen im Aufbau, beispielsweise durch Vakuumkomponenten, mit technischen Hürden verbunden [13].

Eine alternative Möglichkeit besteht darin, die Aufnahme, welche mit einem Mikroskop mit moderater numerischer Apertur aufgezeichnet wurde, numerisch zu verarbeiten und dadurch die beugungsbedingte Auflösungsgrenze zu überwinden.

In der vorliegenden Arbeit wird die Eignung von zwei numerischen Verfahren für die möglichst zuverlässige Lokalisation von Atomen untersucht. Das erste Verfahren wurde in der Veröffentlichung von L. Li und T. Speed [6] entwickelt und bereits in der Dissertation von M. Karski [4] genutzt. Das zweite Verfahren wurde 1972 von H.W. Richardson und B. Lucy für Anwendungen in der Astronomie beschrieben [7, 8] und in der vorliegenden Arbeit erstmalig für die Atomlokalisierung verwendet. Um die Genauigkeit und Verlässlichkeit beider Verfahren zu untersuchen, werden sowohl experimentelle Laboraufnahmen als auch mit einer eigenständig entwickelten Simulation erstellte Aufnahmen verwendet.

Für die Anwendung beider numerischer Verfahren wird in dieser Arbeit ein neues selbstständig entwickeltes Programm vorgestellt, welches in zukünftigen Experimenten zur Auswertung genutzt werden kann. Dieses ermöglicht die Atomlokalisierung innerhalb einer intuitiv bedienbaren Benutzeroberfläche in Echtzeit.

Im Folgenden sind diskrete Funktionen durch eckige (bspw. $I[x_i, y_j]$) und kontinuierliche Funktionen durch runde (bspw. $O(x, y)$) Klammern gekennzeichnet.

2. Modellierung des Aufzeichnungsprozesses

Innerhalb dieser Arbeit soll mit numerischen Verfahren aus einer Fluoreszenzaufnahme von Cs-Atomen deren Position in einem optischen Gitter bestimmt werden. Es ist daher sinnvoll, die Entstehung der Aufnahme vom ursprünglichen Signal der Atome zur aufgezeichneten Signalverteilung zu untersuchen. Dazu betrachten wir zunächst die theoretischen Aspekte des Entstehungsprozesses. Informationen zur experimentellen Realisierung finden sich in Abschnitt 3.

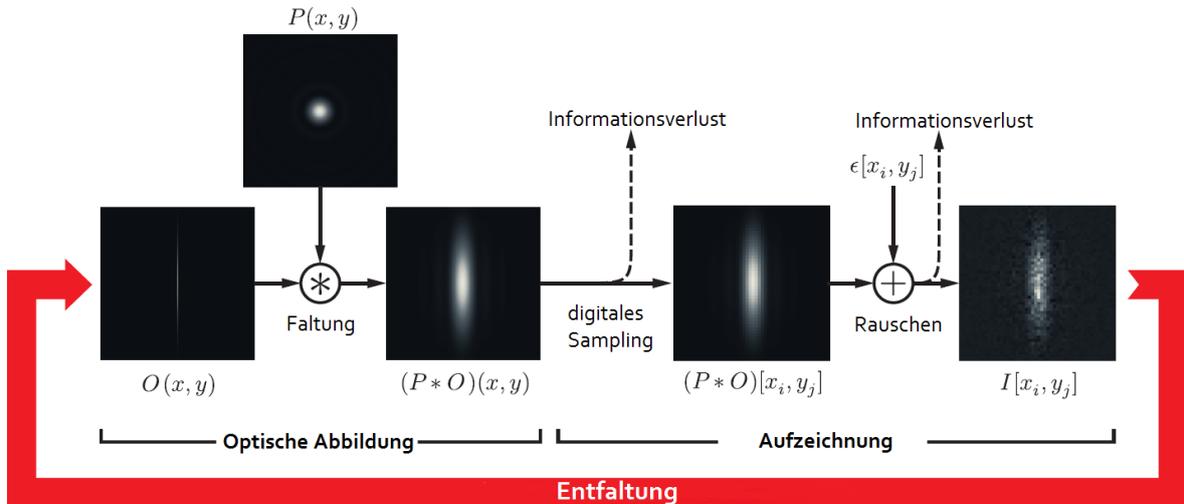


Abb. 1: schematische Darstellung des Aufzeichnungsprozesses, Abbildung abgewandelt aus [12]

Der Aufzeichnungsprozess kann, wie in Abbildung 1 schematisch dargestellt, in 3 Teilschritte unterteilt werden.

- 1. Optische Abbildung:** Ein Mikroskop sammelt die Fluoreszenzphotonen und bildet sie auf den CCD-Detektor ab. Dieser Prozess transformiert das Ursprungssignal aufgrund von Beugungs- und Abberationseffekten zu einer aufgeweiteten unscharfen Verteilung I . Mathematisch entspricht dies der Faltung der Quellverteilung O mit einer sogenannten *Point-Spread-Funktion* P (PSF). Die PSF entspricht der Ausgabeverteilung einer idealen Punktquelle und ist insofern vom verwendeten Mikroskop abhängig. Die Faltung lässt sich in zwei Dimensionen folgendermaßen schreiben:

$$I(x, y) = (P * O)(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} P(x - u, y - v) O(u, v) du dv \quad (1)$$

- 2. Aufzeichnung:** Ein CCD-Detektor, bestehend aus einem zweidimensionalen Pixelfeld, zeichnet die Verteilung I auf.

Dabei kommt es aufgrund der endlichen Zahl von Pixeln zu einem Informationsverlust durch Sampling und Digitalisierung. Man erhält eine Intensitätsverteilung $I[x_i, y_j]$, welche diskret in Ort- und Wertangabe ist.

- 3. Rauschen:** Die aufgezeichnete Intensitätsverteilung beinhaltet Effekte aus verschiedenen Rauschquellen (vgl. Abschnitt 3.2). Wir nehmen an, dass sich diese am Ende des Aufzeichnungsprozesses hinzuaddieren lassen, so dass die finale Intensitätsverteilung folgendermaßen aufgebaut ist:

$$I[x_i, y_j] = (P * O)[x_i, y_j] + \epsilon[x_i, y_j] \quad (2)$$

2.1. Das Entfaltungsproblem

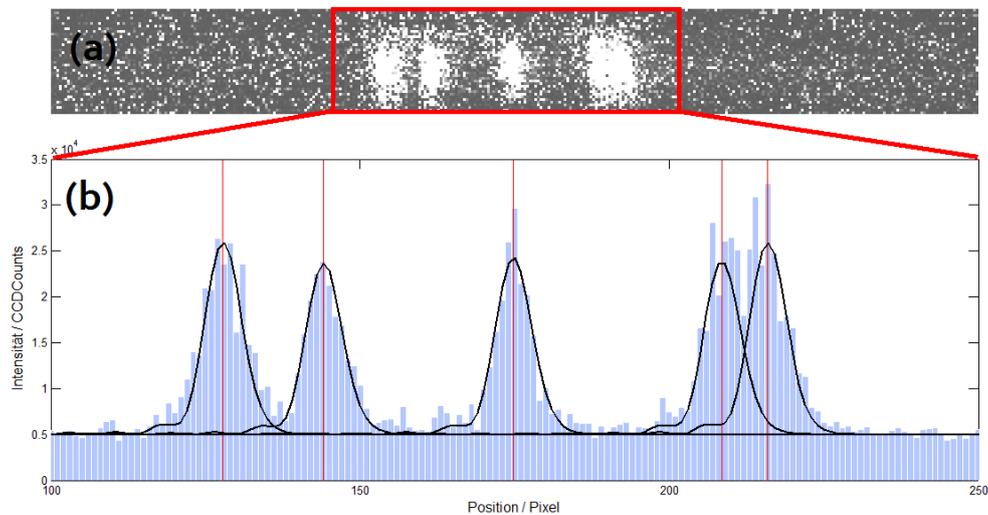


Abb. 2: (a): Abbildung einer typischen Fluoreszenzaufnahme. (b): eindimensionale Intensitätsverteilung mit den mittels des entwickelten Programms ermittelten Positionen (rot) und Faltung der berechneten Verteilung vor dem Mikroskop mit der PSF (schwarz).

Um die Atompositionen mit einer möglichst hohen Genauigkeit aufzulösen, muss aus der aufgezeichneten Intensitätsverteilung $I[x_i, y_j]$ mit numerischen Verfahren die Ursprungsverteilung $O(x, y)$ berechnet werden. Die Umkehrung der Faltungsoperation ist jedoch im Allgemeinen nicht möglich, da die Faltungstransformation nicht eineindeutig ist. Dies wird zusätzlich durch den additiven Rauschterm erschwert, so dass eine elementare Lösung unmöglich wird und Näherungsverfahren verwendet werden müssen.

Da Entfaltung in einem breiten Spektrum von wissenschaftlichen Forschungsgebieten (Astronomie, Biologie, Medizin) von Interesse ist, existiert eine große Bandbreite von möglichen Verfahren. Ein guter Überblick findet sich in [2]. In dieser Arbeit sollen zwei Verfahren implementiert und verglichen werden. In beiden Verfahren wird die PSF als bekannt vorausgesetzt. Es existieren aber auch Algorithmen, die ohne die Kenntnis der PSF funktionieren (blinde Entfaltung). Die PSF kann aus mehreren Aufnahmen isolierter Atome durch einen Fit bestimmt werden.

3. Experimentelle Realisierung

3.1. Optischer Aufbau

Die im folgenden betrachteten Fluoreszenzaufnahmen stammen von Caesium-Atomen in einem eindimensionalen optischen Gitter. Das Gitter wird von zwei gegenläufigen linear polarisierten Laserstrahlen ($\lambda = 865,9 \text{ nm}$) erzeugt. Die Strahlen interferieren mit einem Phasenunterschied von $\frac{\pi}{4}$. Folglich beträgt die Potentialbreite $d = \frac{\lambda}{2} = 432,95 \text{ nm}$. Die Potentialtiefe beträgt $\frac{U}{k_B} = 0,4 \text{ mK}$, so dass Tunneleffekte vernachlässigt werden können. Die Atome werden in einer magneto-optischen Falle (MOT) vorgekühlt und anschließend in das Gitter transferiert. Dort werden sie von drei Raumrichtungen mit rotverstimmten Melasse-Lasern bestrahlt. Diese regen die Fluoreszenz an ($\lambda_f = 852 \text{ nm}$) und dopplerkühlen die Atome im Laufe des Aufzeichnungsprozesses. Dies wirkt einem thermischen Aufwärmen der Atome entgegen.

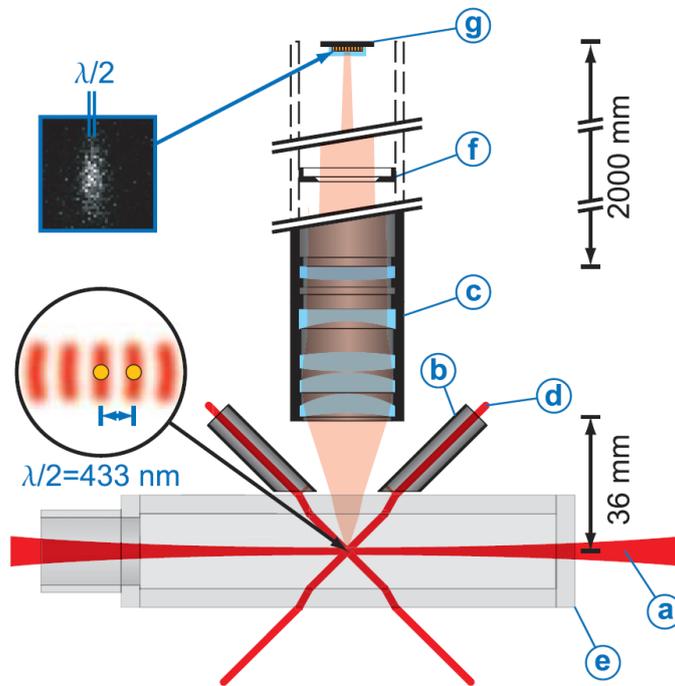


Abb. 3: Gegenläufige Laserstrahlen erzeugen das eindimensionale Gitter (a). Beam Tubes (b) schirmen das Objektiv (c) vor Reflexionen der Melasse-Laser (d) am Glasgehäuse (e) ab. Blenden (f) schwächen das verbleibende Streulicht ab. Vor dem Detektor (g) befindet sich zudem ein schmalbandiger Frequenzfilter. Abbildung aus [5].

Das Fluoreszenzlicht wird mit einem beugungsbegrenzten Mikroskopobjektiv mit einer numerischen Apertur $NA = 0,29$ auf den Detektor abgebildet. Der Abbildungsmaßstab ist dabei so gewählt, dass ein Pixel auf dem CCD-Chip (Breite: $16 \mu\text{m}$) einer Breite von $294,6 \text{ nm}$ in der Objektebene entspricht. Dies bedeutet, dass der Abstand von zwei Gitterplätzen etwa 1,5 Pixeln entspricht. Die Belichtungszeit des EMCCD-Detektors beträgt 1 s.

3.2. Klassifizierung der dominanten Rauschquellen

Eine genaue Kenntnis der dominanten Rauschquellen ist für eine zuverlässige Bestimmung der Atompositionen unabdingbar und macht eine Simulation von Fluoreszenzaufnahmen erst möglich. Es lassen sich drei verschiedene Klassen von Rauschquellen unterscheiden [12]:

- **Schrotrauschen:** Die statistischen Fluktuationen in der Zahl der detektierten Photonen begründet in der Quantennatur des Lichts wird als Schrotrauschen bezeichnet. Es ist poissonverteilt und somit ist die Standardabweichung proportional zur Wurzel der Signalintensität S . In einem idealen bildgebenden System ist das Schrotrauschen die einzige Rauschquelle.
- **Dunkelstrom:** Aufgrund von thermischen Effekten entstehen freie Elektronen im Detektor und erzeugen ein Signal ohne Belichtung (Dunkelstrom) D . Das resultierende Rauschen ist ebenfalls poissonverteilt und hängt von der Betriebstemperatur des Detektors ab.
- **Ausleserauschen:** Die auslesende Elektronik (charge-to-voltage, analog-to-digital, Verstärker, etc.) verursacht ein Rauschen, welches von den Spezifikationen der verwendeten Bauteile abhängt. Es wird im Folgenden vereinfacht als konstant angenommen ($\sigma_{aus} = \text{const}$), da es näherungsweise nicht vom Signal abhängt.

3.3. EMCCD-Detektor

Die Fluoreszenzphotonen werden mit einem *Electron Multiplied Charge Coupled Device* - Detektor nachgewiesen. Dieser verfügt über einen 512×512 Pixel CCD-Chip mit einer Pixelfläche von $16 \times 16 \mu\text{m}^2$. Die Modifikation eines EMCCD gegenüber einem klassischen CCD-Detektor besteht im Elektronen-Multiplikationsregister, welches die Elektronen aus dem Transferregister durch vielfache Stoßionisation im Halbleitermaterial (im verwendeten Detektor : $N = 536$ Multiplikationsstufen) verstärkt.

Dazu wird zwischen den Multiplikationsstufen eine geeignete Spannung angelegt.

Trotz der geringen Einzelwahrscheinlichkeit für eine Stoßionisation ($p_{\text{ion}} = 1.5\%$) wird dadurch ein mittlerer Verstärkungsfaktor von $M = (1 + p_{\text{ion}})^N \approx 2922$ erreicht.

Durch diesen Verstärkungsmechanismus der Photoelektronen ist es im Bereich kleiner Signalintensitäten überhaupt erst möglich, das Signal vom Rauschen der dahinter angeschlossenen Analyseelektronik zu unterscheiden. Dies wird bei Betrachtung des effektiven rauschäquivalenten Signals NES (*noise-equivalent-signal*) nach [1] besonders deutlich:

$$NES = \sqrt{\mathcal{F}^2(S + D) + \frac{\sigma_{aus}^2}{M^2}} \quad (3)$$

Dabei ist \mathcal{F} der excess noise-Faktor, welcher die stochastische Natur des Multiplikationsprozesses berücksichtigt. Dieser hängt vom Verstärkungsfaktor M ab und konvergiert für große M gegen $\sqrt{2}$ (siehe [1]).

4. Numerische Einzelplatzdetektion

Die Bestimmung der Atompositionen im eindimensionalen optischen Gitter aus einem zweidimensionalen Fluoreszenzbild kann deutlich vereinfacht werden, wenn statt der zweidimensionalen Intensitätsverteilung $I[x_i, x_j]$ eine eindimensionale Intensitätsverteilung verwendet wird. Daher summiert man zunächst die zweidimensionale Intensitätsverteilungen vertikal auf und erhält eine eindimensionale Verteilung $J[x_i] = \sum_j I[x_i, y_j]$.

4.1. Modellierung des verwendeten bildgebenden Systems

In diesem Abschnitt sollen die theoretischen Vorüberlegungen aus Abschnitt 2 auf die konkrete experimentelle Situation angewendet werden.

Die horizontale $\frac{1}{\sqrt{e}}$ -Breite der Fluoreszenzpeaks eines Atoms entspricht (810 ± 19) nm in der Objektebene. Diese Aufweitung wird hauptsächlich durch Beugung im Objektiv verursacht (theoretische beugungsbedingte Breite: 647 nm, [5]). Die thermische Bewegung der gekühlten Atome ($\Delta x_{th} = 23$ nm) sowie das Driften der Potentialstruktur (≤ 20 nm/s) sind dagegen vernachlässigbar [12]. Die Atome befinden sich im Rahmen der optischen Auflösbarkeit folglich in Ruhe. Daher können wir die Quellverteilung vor dem Objektiv durch eine Summe von Delta-Distributionen und einem konstanten/homogenen Untergrund beschreiben:

$$O(x) = a_0 + \sum_{j=1}^N a_j \delta(x - \xi_j) \quad (4)$$

wobei ξ_j die Position und a_j den Fluoreszenzbeitrag des j -ten von N Atomen angibt. Der Abbildungsvorgang des ursprünglichen Signals auf die Detektor-Chips wird, wie in Abschnitt 2 erläutert, durch eine diskrete Faltung von O mit der *Point-Spread-Funktion* P beschrieben:

$$J[x_i] = (P * O)[x_i] \quad (5)$$

Die Faltung mit einer Delta-Distribution ist trivial und daher erhalten wir als Intensitätsverteilung unter der Annahme, dass alle Rauschquellen additiv eingehen:

$$J[x_i] = a_0 + \sum_{j=1}^N a_j P(x_i - \xi_j) + \epsilon[x_i] \quad (6)$$

Die PSF wurde für den vorliegenden Aufbau in [4] bestimmt und hat aufgrund von neben dem Beugungseffekt auftretendem Koma folgende analytische Form:

$$P(x) = \begin{cases} \frac{1}{c_0} \left[c_1 e^{-x^2/(2c_2^2)} + \text{sinc}^2(c_3 x) \right], & \text{für } x < 0 \\ \frac{1}{c_0} \left[c_1 e^{-x^2/(2c_2^2)} + e^{-x^2/(2c_3^2)} \right], & \text{für } x \geq 0. \end{cases} \quad (7)$$

4.2. Parametrische Entfaltung

Die parametrische Entfaltung (PDPS, Akronym nach [6]) führt unter Modellannahmen einen Fit an die Messdaten nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate durch. Die Fitparameter entsprechen dabei den Positionen und den Fluoreszenzbeiträgen der entsprechenden Atome. Der Algorithmus setzt eine präzise Kenntnis der Point-Spread-Funktion und der Rauschgrößen voraus.

Um eine detaillierte Beschreibung des Algorithmus möglichst übersichtlich zu gestalten, unterteilen wir diesen zunächst in vier Schritte:

1. Auswahl von Regionen, in denen Atome vorhanden sind
 2. Bestimmung der Zahl der Atome in dieser Region
 3. Approximation der Fitparameter für den Folgenden
 4. Fit nach Levenberg-Marquardt-Algorithmus
- } Modellbildung
} Fitting

4.2.1. Modellbildung

1. Ausgehend von den Intensitätsverteilungen werden zunächst die Pixelbereiche in einem Bild ausgewählt, in denen die Intensitäten eine gewisse Schwelle über eine minimale Breite nicht unterschreiten. Die Wahl der Schwelle und der minimalen Breite hat dabei so zu erfolgen, dass die Regionen möglichst schmal sind, dabei aber alle Informationen des Peaks enthalten. Aus diesem Grund werden die auf diese Weise ausgewählten Bereiche um eine konstante Breite erweitert (üblicherweise 10 Pixel), so dass auch die Randbereiche der Peaks berücksichtigt werden. Falls sich zwei oder mehr ausgewählte Bereiche überlappen, werden diese zu einem Bereich verbunden. Die nicht auf diese Weise ausgewählten Regionen werden zur Berechnung der Grundlinie a_0 , die durch Rauscheinflüsse und Offsets in der verarbeitenden Elektronik zustande kommt, eingesetzt. Dazu wird der Mittelwert dieser Einträge genommen.

2. Anschließend wird die Zahl der Atome in den ausgewählten Regionen bestimmt. Zunächst werden dazu die Intensitäten überhalb der Grundlinie für eine (unter gleichen experimentellen Parametern) aufgezeichnete Sammlung von Fluoreszenzbildern aufsummiert und in einem Histogramm (Abbildung 4) dargestellt.

Anschließend wird folgende Summe von Normalverteilungen F an die Daten angepasst:

$$F(x) = \sum_{i=1}^5 h_i e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x - \mu_i}{\sigma_i} \right)^2} \quad (8)$$

Die Schwerpunkte der Normalverteilungen μ_i entsprechen den mittleren Gesamtbeiträgen für i Atome pro Bereich, die durch dieses Verfahren mit einer Standardabweichung von σ_i genau bestimmt werden. Es ergibt sich für ein Atom ein mittlerer Gesamtbeitrag von $I_A = (\mu_1 \pm \sigma_1) = (143800 \pm 11940)$ CCD Counts.

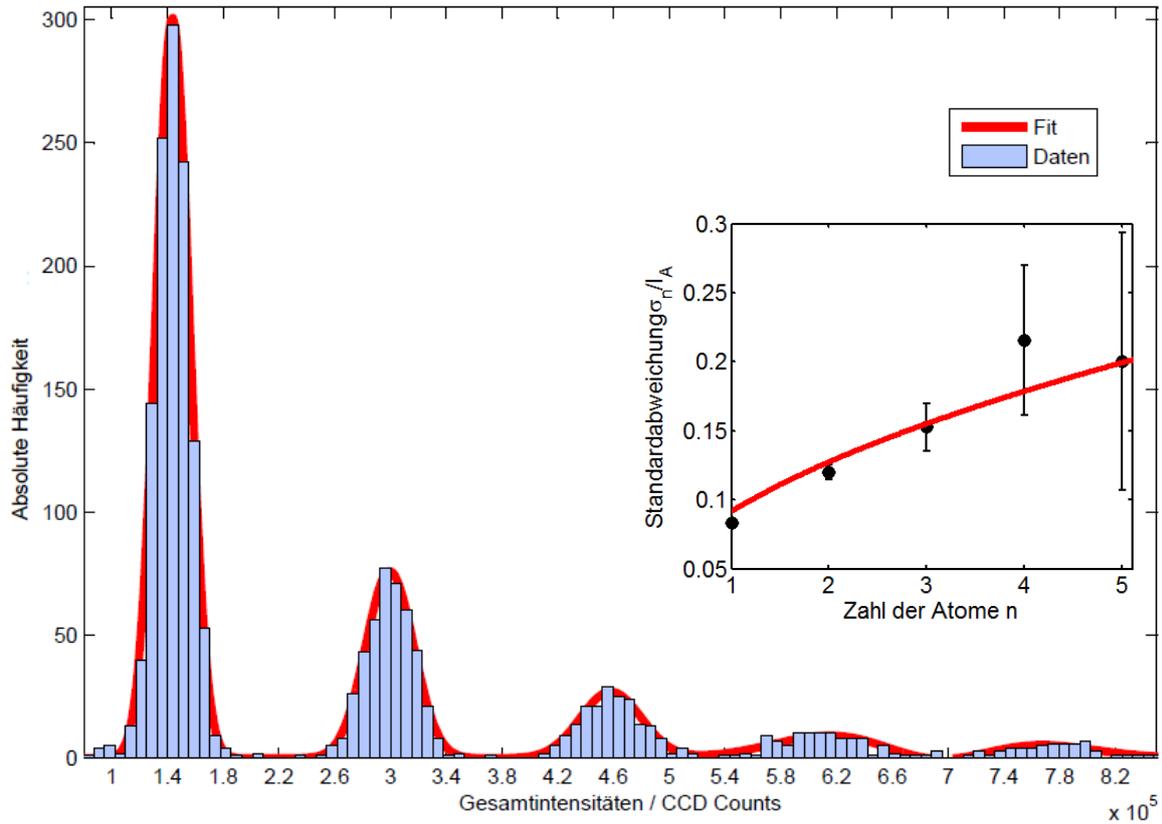


Abb. 4: Histogramm der Gesamtintensitätsbeiträge von Bereichen mit zunehmender Atomanzahl, mit Fit nach Gleichung 8. Eingebettetes Diagramm: Standardabweichung σ_n der Gesamtbeiträge von n Atome pro Bereich (nach Gleichung 8 berechnet). Der eingefügte Fit entspricht dem Rauschmodell aus Gleichung 3 und bestätigt dieses. Das Histogramm wurde mit Hilfe der Bildanalyse-Funktion erstellt (vgl. Abschnitt 5).

Die Zahl der Atome im gewählten Bereich kann berechnet werden, indem die Gesamtbeiträge in diesem Bereich durch I_A geteilt werden. Dies ist möglich, da die darauffolgenden Schwerpunkte im Rahmen der statistischen Schwankungen Vielfachen von I_A entsprechen. Die Toleranz ist dabei auf 30 % eingestellt (vgl. eingebettetes Diagramm in Abbildung 4).

4.2.2. Positionsbestimmung durch Fitting

3. Die Konvergenz des im nächsten Schritt verwendeten Levenberg-Marquardt-Algorithmus ist nur für ausreichend gute Startwerte $\{\xi, a\}$ gewährleistet. Diese werden daher in einem Zwischenschritt abgeschätzt. Wir betrachten dazu einzeln die ausgewählten Bereiche. Sei also der ausgewählte Bereich M Pixel breit und enthalte N Atome. Zuerst werden die Atompositionen ξ_j mit der Methode der trigonometrischen Momente bestimmt¹. Der Abstand der Pixel ist konstant Δ und die PSF sei in analytischer Form im Intervall $[-\beta, \beta]$ gegeben mit $\beta = \frac{M\Delta}{2}$.

¹Details und Beweise finden sich in [6]

Die Fourier-Koeffizienten der PSF:

$$\hat{v}_j = \frac{1}{2\pi} \int_{-\beta}^{\beta} P(x) e^{ij\pi x/\beta} dx \quad (9)$$

müssen für $j = 0, \dots, N$ die Bedingung erfüllen, ungleich Null zu sein. Außerdem werden die Fourier-Koeffizienten der Intensitätsverteilung benötigt:

$$\hat{f}_j = \frac{1}{M} \sum_{l=1}^M J[x_l] e^{ij\mathcal{T}(x_l)} \quad (10)$$

wobei $\mathcal{T}(x) = -\pi + \frac{\pi(x-x_1)}{\beta}$. Aus den Fourier-Koeffizienten lässt sich die Toeplitz-Matrix $G_N = (g_{m-j})_{j,m=0,\dots,N}$ durch $g_0 = f_0$ und $g_j = f_j v_0 / v_j$ sowie $g_{-j} = g_j^*$ konstruieren.

Nach einem Satz aus [6] erfüllt die Toeplitz-Matrix dann folgende Eigenschaften:

- Der kleinste Eigenwert entspricht der Grundlinie a_0 von $O(x)$ (vgl. Gleichung 4).
- Der zugehörige Eigenvektor $\alpha = (\alpha_0, \dots, \alpha_N)$ führt auf die Polynomgleichung:

$$\sum_{j=0}^N \alpha_j z^j = \prod_{j=1}^N (z - e^{i\tau_j}) = 0$$

Aus deren Lösungen $\{e^{i\tau_j}\}$ ergeben sich die abgeschätzten Atompositionen durch $\xi_j = \mathcal{T}^{-1}(\tau_j)$ mit $\mathcal{T}^{-1}(t) = x_1 + \frac{\beta(t+\pi)}{\pi}$.

Anschließend werden die Fluoreszenzbeiträge a_j durch eine lineare Minimierung der Fehlerquadrate von:

$$\min_{\{a_j | j=1,\dots,N\}} \sum_{l=1}^M \left\{ J[x_l] - a_0 - \sum_{j=1}^N a_j P(x_l - \xi_j) \right\}^2$$

bestimmt.

4. Die Bestimmung der Atompositionen ξ und Fluoreszenzbeiträge a werden unter Verwendung eines nicht-linearen Least-Squares Algorithmus (Levenberg-Marquardt) darauffolgend weiter verbessert. Dabei wird nun auch eine Gewichtung durch die Varianz der Messgrößen aufgrund der Rauschquellen (vgl. Abschnitt 3.2) vorgenommen, so dass die Optimierungsbedingung folgende Form hat ($\sigma_l^2 = \text{Var}(\epsilon[x_l])$):

$$\min_{\{a_j, \xi_j | j=0,\dots,N\}} \sum_{l=1}^M \frac{1}{\sigma_l^2} \left\{ J[x_l] - a_0 - \sum_{j=1}^N a_j P(x_l - \xi_j) \right\}^2 \quad (11)$$

Die Fluoreszenzbeiträge der Atome a sind nach Abbildung 4 mit einer Toleranz von etwa 30 % bekannt. Dieses Wissen kann ausgenutzt werden, um die Wahrscheinlichkeit, dass der nicht-lineare Least-Squares Algorithmus konvergiert zu erhöhen. Dazu wird die zusätzliche Randbedingung eingeführt, dass die Fluoreszenzbeiträge a im Bereich der zuvor bestimmten Werte liegen (siehe Abschnitt 4.2.1). In diesem Fall wird statt des Levenberg-Marquardt Algorithmus ein Trust-Region Algorithmus verwendet, da dieser Randbedingungen dieser Art berücksichtigen kann.

4.3. Richardson-Lucy Entfaltung

Unter der Annahme eines idealen Detektionssystems ist die einzige Rauschquelle das poissonverteilte Schrotrauschen (vgl. Abschnitt 3.2) und die gemessene Intensitätsverteilung kann daher pixelweise als Poisson-Zufallsvariable \mathcal{P} mit Erwartungswerten $\Lambda = P * O$ geschrieben werden:

$$J[x] = \mathcal{P}(\Lambda[x]) = \mathcal{P}((P * O)[x]) \quad (12)$$

Aus der Poissonverteilung:

$$p_\lambda(X = k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda} \quad (13)$$

folgt dann mit $\lambda = (P * O)[x]$ und $k = I[x]$:

$$p_\lambda(X = J[x]) = \frac{((P * O)[x])^{J[x]} e^{-(P * O)[x]}}{J[x]!} \quad (14)$$

Die Gleichung gibt die Wahrscheinlichkeit an, dass an der Position x der Detektor $I[x]$ Ereignisse zählt und zwar unter der Annahme, dass O die ungestörte Verteilung ist. Da die Zählraten der verschiedenen Pixel im Detektor voneinander unabhängig sind, faktorisieren die Einzelwahrscheinlichkeiten für jeden Pixel und wir erhalten als (bedingte) Gesamtwahrscheinlichkeit:

$$p(J|O) = \prod_{i=1}^N \frac{[(P * O)[x_i]^{J[x_i]} e^{-(P * O)[x_i]}}{J[x_i]!} \quad (15)$$

Nach dem Satz von Bayes und den in [8] erläuterten Überlegungen entspricht $p(J|O)$ hier $p(O|J)$. Mit diesem Funktional $p(O|J)$ haben wir einen sogenannten Schätzer für die Wahrscheinlichkeit erhalten, dass O die ungestörte Verteilung ist, wenn J die detektierte rauschbehaftete Verteilung ist. Das Ziel ist jetzt das Maximum des Schätzers unter Variation von O zu finden, um die wahrscheinlichste ungestörte Verteilung zu finden. Dieses Variationsproblem ist im Anhang gelöst und führt auf folgende Iterationsformel für O :

$$O^{(n+1)} = \left(P' * \frac{J}{P * O^{(n)}} \right) O^{(n)} \quad (16)$$

wobei $O^{(n)}$ die im n-ten Schritt berechnete Näherung für O darstellt und P' die adjungierte PSF ist.

4.3.1. Positionsbestimmung

Aufgrund der endlichen Sampling-Rate konvergiert der Richardson-Lucy-Algorithmus nicht gegen die theoretisch zu erwartende Delta-Distribution. Zusätzlich werden ab einer gewissen Zahl von Iterationen Rauscheffekte verstärkt [8], so dass die Zahl der durchführbaren Iterationen begrenzt ist. Mit Hilfe des physikalischen Hintergrundes und der daher bekannten Form der Quellverteilung $O(x)$ kann jedoch trotzdem eine genaue Bestimmung der Atompositionen erreicht werden. Die berechnete Näherung $O^{(n)}$ ist monoton wachsend vor und monoton fallend nach dem Peak, so dass die Auswahl des Maximums und des linken und rechten Nachbarn mit einem quadratischen Fit an diese drei Punkte auf eine gute Näherung der Peak-Position führt. Dies wird in Abschnitt 7 sowohl für Aufnahmen aus dem Labor als auch mit simulierten Daten nachgewiesen.

4.3.2. Erhöhung der Berechnungsgeschwindigkeit

Die Berechnungsgeschwindigkeit der Richardson-Lucy Iterationen skaliert aufgrund der nötigen Faltungen quadratisch mit der Gesamtzahl der Pixel, aus denen die Aufnahme besteht. Die relevante Information steckt jedoch nur in den im PDPS-Algorithmus ausgewählten Bereichen. Wenn man zunächst den Algorithmus zur Auswahl der Bereiche laufen lässt und dann auf diese Bereiche den Richardson-Lucy-Algorithmus anwendet, lässt sich die Berechnungsdauer stark reduzieren.

Dies führt dazu, dass im Bereich von 10 Iterationen, in denen der Richardson-Lucy Algorithmus im Folgenden angewendet wird, die Berechnungsdauer für bis zu 8 Atome unterhalb von 700 ms liegt (siehe Abbildung 5).

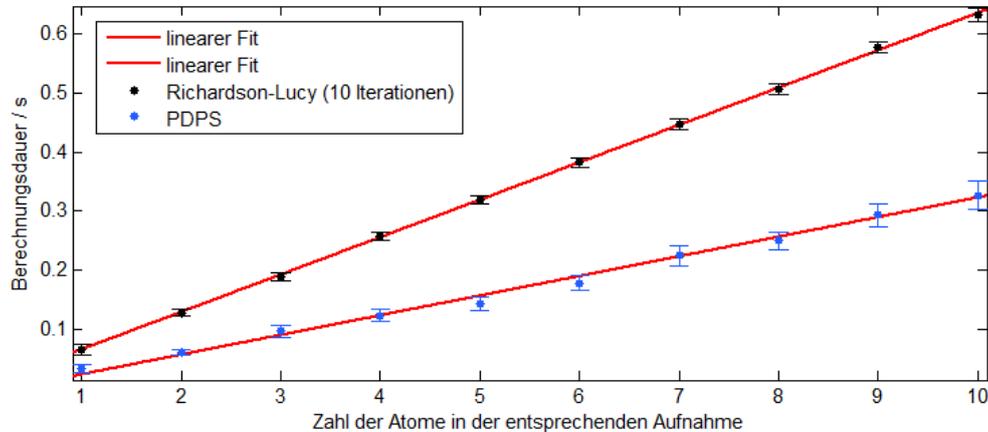


Abb. 5: Darstellung der mittleren Berechnungsdauer der Positionsbestimmung abhängig von der Zahl der Atome in der entsprechenden Aufnahme. Die roten Funktionen sind lineare Fitgeraden.

Der PDPS-Algorithmus ist trotz dieser Laufzeitoptimierung die schnellere Methode zur Bestimmung der Atompositionen. Die Berechnungsdauer beider Algorithmen liegt unterhalb von einer Sekunde, welches der typischen Aufzeichnungsdauer für eine Aufnahme entspricht. Insofern sind beide Algorithmen in der Lage, die Auswertung von Messdaten in Echtzeit zu bewerkstelligen.

5. Implementation

Die Implementation erfolgte in *Matlab* und unter Verwendung der dadurch verfügbaren vorgefertigten Algorithmen (Levenberg-Marquardt, Eigenwertberechnung, etc.). Im Folgenden sollen kurz die neben den Algorithmen selbstständig entwickelten Funktionen aufgelistet werden:

- **Import-Schnittstelle:** Der Import der Fluoreszenzbilder in *Matlab* erfolgt über ein Skript, welches auf einer vom Kamerahersteller veröffentlichten Befehlsbibliothek basiert.
- **Benutzeroberfläche:** Es wurde eine graphische Benutzeroberfläche entwickelt, die der leichteren und schnelleren Anwendung der Analysesoftware von Fluoreszenzaufnahmen dient.

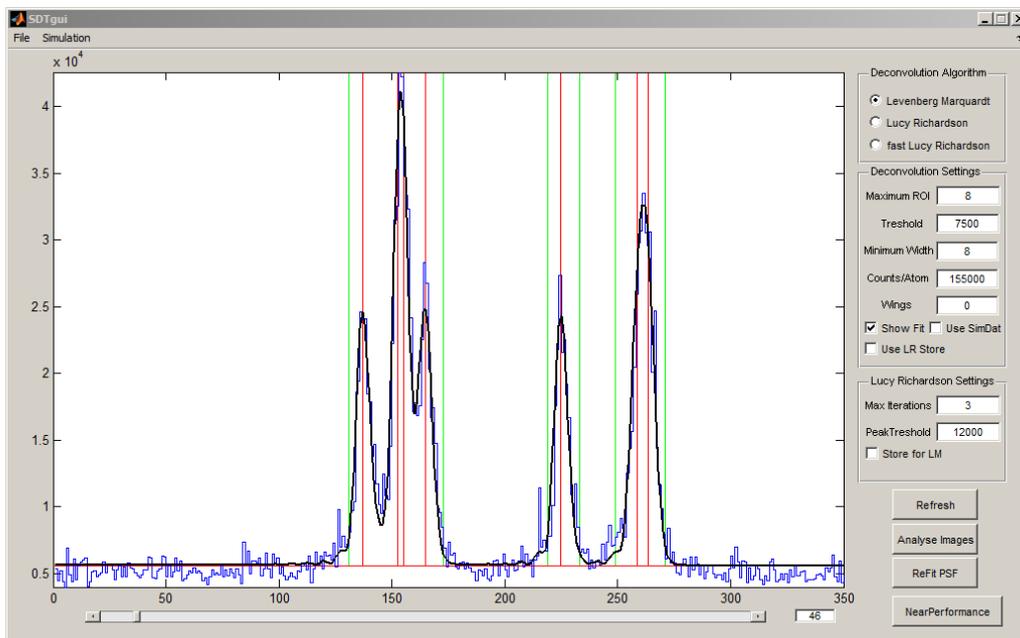


Abb. 6: Bildschirmaufnahme der entwickelten Benutzeroberfläche.

- **Bildanalyse:** Die Zahl der Intensitätsbeiträge pro Atom hängt von verschiedenen experimentellen Parametern ab, wie beispielsweise der Leistung der anregenden Fluoreszenzlaser. Daher ist eine Funktion implementiert, die für eine Sammlung von Aufnahmen das Histogramm aus Abbildung 4 ermittelt und so eine Anpassung der Entfaltungparameter ermöglicht.
- **Simulation:** Die entwickelte Software bietet die Möglichkeit, Fluoreszenzaufnahmen zu simulieren. Basierend auf der PSF wird eine rauschfreie Aufnahme erzeugt, welche anschließend pixelweise mit dem Rauschmodell aus Gleichung 3 bearbeitet wird. Die Simulation wird in Abschnitt 6 zum Test des Auflösungsvermögens der Algorithmen verwendet.

6. Performancevergleich der implementierten Algorithmen

6.1. Detektion isolierter Atome

Die implementierten Algorithmen sollen zuerst hinsichtlich ihres Auflösungsvermögens der Position von isolierten Atomen untersucht und verglichen werden. Als isolierte Atome bezeichnen wir dabei jene Atome, die einen Mindestabstand von etwa 25 Pixeln ($\hat{=}$ ca. 17 Gitterplätze) zu weiteren Atomen aufweisen.

Im Experiment können 5 Bilder mit einer Belichtungszeit von 1 s aufgezeichnet werden, ohne dass die Zahl der verlorenen Atome durch Kollisionen mit dem Hintergrundgas die Messung verfälscht. Wir nehmen an, dass die Atome sich im Zentrum des Potentials befinden, dies ist aufgrund der großen Potentialtiefe im Vergleich zur thermischen Anregung der Atome gerechtfertigt [4].

Unter Verwendung von 500 Fluoreszenzaufnahmen (100 Atomverteilungen mit jeweils 5 Aufnahmen) wurden 121 isolierte Atome ausgewählt und die Position mit Hilfe der beiden zuvor beschriebenen Algorithmen fünfmal bestimmt. Anschließend wurden die Mittelwerte aus den 5 Messungen jeder Position berechnet. Dann wurden die Abweichungen der bestimmten 5 Positionen vom jeweils zugehörigen Mittelwert ermittelt und in Form von Histogrammen dargestellt (s. Abbildung 7).

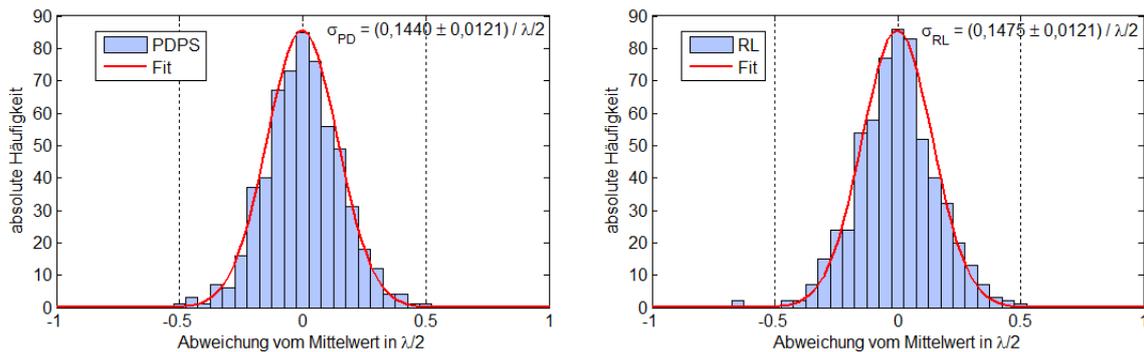


Abb. 7: Abweichung der einzelnen bestimmten Positionen vom zugehörigen Mittelwert aus jeweils 5 Aufnahmen für den parametrischen Entfaltungsalgorithmus (links) bzw. das Richardson-Lucy Verfahren (rechts). Die Fitfunktionen sind Normalverteilungen. Der Stichprobenumfang beträgt jeweils 605 Messungen.

Die Atome konnten auf eine Gitterposition genau aufgelöst werden, wenn die Abweichung maximal einen halben Gitterplatz ($\lambda/4$) beträgt. Dies ist, wie in den Histogrammen zu sehen, für nahezu alle berechneten Positionen der Fall.

Beim parametrischen Entfaltungsverfahren wurden die Messungen von zwei isolierten Atomen - also insgesamt 10 von 605 Positionen - nicht im Histogramm berücksichtigt. Der Grund ist, dass diese Abweichungen von mehr als zehn Gitterplätzen innerhalb der Werte aufwiesen. Dies kann auf fehlerhafte Abschätzungen der Atompositionen vor dem eigentlich Fit zurückgeführt werden. Beim Richardson-Lucy Algorithmus überschreiten 2 von 605 Positionen die Abweichung von $\lambda/4$.

Der prozentuale Anteil F der korrekt bestimmten Positionen liegt damit bei:

$$F_{PDPS} = \frac{595}{605} = 98,35\% \quad F_{RL} = \frac{603}{605} = 99,67\%$$

Die bisherigen Ergebnisse über die Verlässlichkeit der Lokalisation der Atome basieren auf der Annahme, dass die berechneten Mittelwerte den tatsächlichen Atompositionen entsprechen.

Da dies bei 5 Messungen nur näherungsweise der Fall ist, unterliegen die Abweichungen in Abbildung 7 einem systematischen Fehler. Der Einfluss dieses systematischen Fehlers kann mit Hilfe von simulierten Aufnahmen abgeschätzt werden, da dann die Position der Atome a-priori bekannt ist.

Dies wird an dieser Stelle exemplarisch für den PDPS-Algorithmus durchgeführt.

Zunächst wurden 15000 Aufnahmen von isolierten Atomen simuliert und wie zuvor die Abweichungen der daraus bestimmten Positionen vom Mittelwert aus 5 Positionsbestimmungen in einem Histogramm aufgetragen (siehe Abbildung 8).

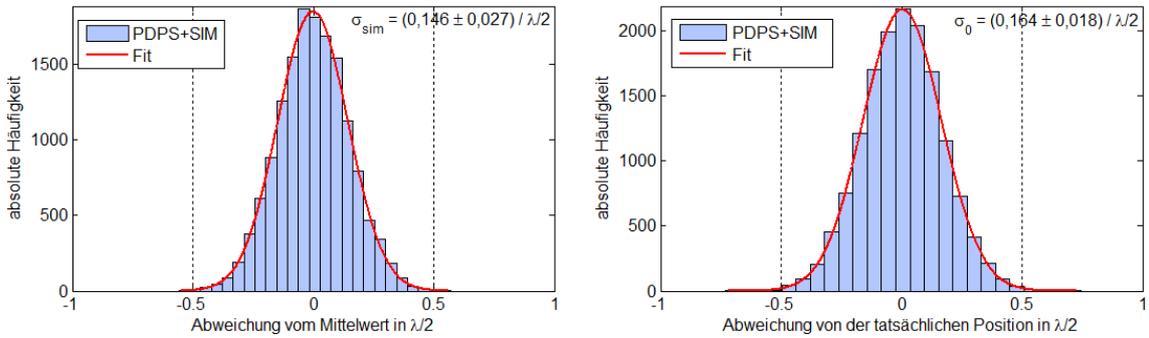


Abb. 8: Abweichung der einzelnen bestimmten Positionen vom zugehörigen Mittelwert aus jeweils 5 Aufnahmen (links) und von der tatsächlichen Position (rechts). Erstellt unter Verwendung von 15000 simulierten Aufnahmen und des PDPS-Algorithmus. Die Fitfunktionen sind Normalverteilungen.

Wie in Abbildung 8 (links) zu sehen, entspricht die Verteilung der Abweichungen für simulierte Daten mit guter Übereinstimmung, denen der realen Aufnahmen aus Abbildung 7 (links). Die Abweichungen sind in beiden Fällen normalverteilt und die Standardabweichungen der Fitfunktionen sind annähernd gleich ($\frac{\sigma_{PD}}{\sigma_{sim}} \approx 0,99$).

Daher kann die Simulation als gute Näherung der tatsächlichen Aufnahmen betrachtet werden. Anschließend wurden erneut 15000 Aufnahmen von isolierten Atomen simuliert und dieses Mal wurde die Abweichung der einzelnen Positionen von der tatsächlichen Position der Atome bestimmt. Die erhaltene Verteilung der Abweichungen ist in Abbildung 8 (rechts) dargestellt. Da hier die tatsächlichen Positionen der Atome als Bezugspunkt gewählt wurden, liegt hier kein systematischer Fehler vor. Die Standardabweichung σ_0 der Verteilung ist aber nur unwesentlich gegenüber jener mit systematischem Fehler σ_{sim} verändert und die Zunahme des Anteils der Abweichungen $\lambda/4$ ist vernachlässigbar:

$$\sigma_{sim} = (0,1456 \pm 0,027) / \frac{\lambda}{2} \quad \sigma_0 = (0,1635 \pm 0,018) / \frac{\lambda}{2}$$

Demnach hat der systematische Fehler nur eine untergeordnete Bedeutung.

6.2. Detektion von Atompaaren

Als Atompaare werden zwei Atome bezeichnet, deren Intensitätsverteilungen auf dem Detektor überlappen. Zu einem Überlappen kommt es ab einem Mindestabstand von ca. 20 Pixeln ($\hat{=}$ ca. 13 Gitterplätze). Die Algorithmen wurden unter Verwendung von simulierten Aufnahmen auf die Detektionsgenauigkeit in diesen Situationen überprüft. Der Vorteil in der Verwendung von simulierten Daten liegt sowohl in der besseren Kontrollmöglichkeit der Resultate - der Abstand der Atome ist a-priori gegeben - als auch im größeren Stichprobenumfang. Außerdem hat der letzte Abschnitt gezeigt, dass die Detektionsgenauigkeit der simulierten Aufnahmen vergleichbar mit der von realen ist. Es wurden zunächst Abstände von einem bis acht Gitterplätzen mit jeweils 1000 simulierten Atomverteilungen jeweils mit fünf Aufnahmen untersucht. Dabei wurden zwei Atome in dem gegebenen Abstand im Zentrum einer Aufnahme positioniert und deren Abstand numerisch bestimmt. Das Richardson-Lucy Verfahren kann nur zur Auflösung von Atompaaren in Abständen von mehr als 5 Gitterplätzen verwendet werden. Für kleinere Abstände unterscheidet das Verfahren nicht mehr zwischen den Atomen und gibt nur eine Position aus. Außerdem wurde festgestellt, dass die Positionsbestimmung des PDPS-Algorithmus für Atome im Abstand von zwei oder weniger Gitterplätzen mit einer nicht vernachlässigbaren Wahrscheinlichkeit fehlerhaft ist.

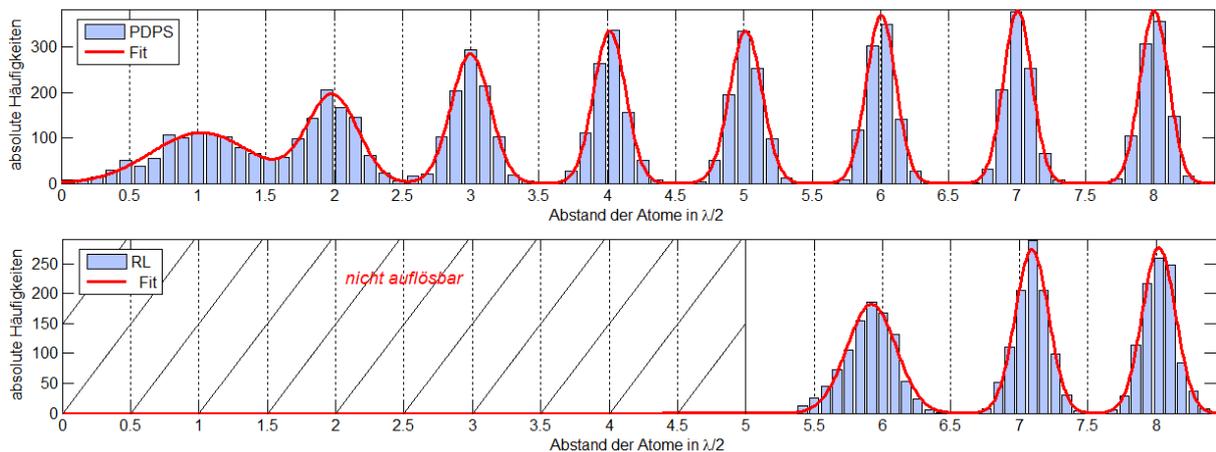


Abb. 9: Verteilung der aus 3 bis 5 Messungen bestimmten Abstände von zwei Atomen. Unter Verwendung des PDPS-Algorithmus (oben) bzw. Richardson-Lucy Algorithmus (unten).

Allerdings sind diese Fehler des Algorithmus leicht erkennbar und filterbar, da bei Auftreten des Fehlers auffallend große unrealistische Abstände ($> 10 \cdot \frac{\lambda}{2}$) ermittelt werden. Bei der Abstandsbestimmung mit 5 simulierten Aufnahmen wurden daher bis zu zwei als fehlerhaft identifizierte Messungen verworfen.

Durch diese Vorgehensweise konnte die hohe Fehlerrate der Lokalisation in diesem Bereich deutlich verringert werden. Der berechnete Abstand der Atome wurde durch Mittelung der verbleibenden drei bis fünf Werte bestimmt.

Diese Abstände sind in Abbildung 9 in Form von Histogrammen dargestellt.

Die Zahl der korrekt bestimmten Abstände kann über den Vergleich der berechneten Abstände mit den a-priori bekannten Abständen ermittelt werden.

Der Richardson-Lucy Algorithmus bestimmt Atome im Abstand von 7 und 8 Gitterplätzen in allen Fällen korrekt und bei 6 Gitterplätzen in 98,5 % der Fälle.

Mit dem PDPS-Verfahren wurden alle Abstände von drei oder mehr Gitterplätzen korrekt bestimmt. Abstände von zwei Gitterplätzen wurden in 97,8 % der Fälle korrekt ermittelt und für Abstände von einem Gitterplatz wurde dies in 82,9 % der Fälle erreicht. Da in der Realität die tatsächlichen Atomabstände unbekannt sind, ist deren Bestimmung bei 1 oder 2 Gitterplätzen Abstand nicht zuverlässig. Dies wird auch in Abbildung 9 deutlich, da hier die zugehörigen Verteilungen überlappen.

7. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden zwei numerische Verfahren entwickelt, welche die Detektion einzelner Atome in einem optischen Gitter mit einer Genauigkeit von einer Gitterposition mit hoher Verlässlichkeit ermöglichen. Die beugungsbedingte Auflösungsgrenze von ca. 4 Gitterplätzen konnte somit deutlich unterschritten werden.

Das parametrische Entfaltungsverfahren zeigt dabei die vielfältigeren Anwendungsmöglichkeiten, da es auch zur Detektion von Atompaaren in naher Nachbarschaft geeignet ist. Nur bei Abständen von ein oder zwei Gitterplätzen ist eine fehlerfreie Auflösung bisher noch nicht mit ausreichender Sicherheit gegeben.

Der Richardson-Lucy-Algorithmus stellt im Bereich von isolierten Atomen eine präzise Methode dar und ist hier eine sinnvolle Alternative zum parametrischen Entfaltungsalgorithmus. Zur Untersuchung nah benachbarter Atome ist dieser Algorithmus allerdings nicht geeignet.

Die Berechnungsdauer beider Algorithmen liegt auf einem Mittelklasse-Notebook unterhalb von 700 ms für Aufnahmen mit durchschnittlich 8 Atomen. Die Geschwindigkeit könnte außerdem durch das Auslagern von rechenintensiven Teilschritten in eine performantere Programmiersprache erhöht werden. Mit dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programm ist es dementsprechend möglich, Experimente zu realisieren, bei denen Atompositionen in optischen Gittern in Echtzeit lokalisiert werden. Zum Beispiel ist ein Einsatz in quantenmechanischen Random Walk Experimenten möglich.

Für die zuverlässigere Bestimmung von direkt benachbarten Atomen ist eine weitere Optimierung des parametrischen Entfaltungsverfahrens wünschenswert. Dies könnte durch Ausnutzung bisher ungenutzter physikalischer Informationen über das System, wie beispielsweise der Gitterperiodizität, erreicht werden.

Literatur

- [1] P. Seitz, Albert J.P. Theuwissen (Herausgeber) : *Single-Photon Imaging* , Springer, Heidelberg, 2011.
- [2] J. Starck, F. Murtagh : *Handbook of Astronomical Data Analysis*, Springer, 2002.
- [3] M. Laasmaa : *The Analysis of Richardson-Lucy Deconvolution Algorithm with Application to Microscope Images*, Master Thesis, University of Technology Tallinn, 2009.
- [4] M. Karski : *State-selective transport of single neutral atoms*, Dissertation, Universität Bonn, 2010.
- [5] M. Karski, L. Förster, J. Choi, W. Alt, A. Widera, D. Meschede : *Nearest-Neighbor Detection of Atoms in a 1D Optical Lattice by Fluorescence Imaging*, Phys. Rev. Lett. **102**, 053001, 2009.
- [6] L. Li, T. Speed: *Parametric deconvolution of positive spike trains*, Annals of Statistics 2000, Seite 1279-1301.
- [7] W.H. Richardson: *Bayesian-Based Iterative Method of Image Restoration*, Journal of the optical society of America, **62** No. 1, 1972.
- [8] L.B. Lucy: *An iterative technique for the rectification of observed distributions*, The Astronomical Journal, **79**, No. 6, 1974.
- [9] A. Gripshöfer: *Rekonstruktionsbasierte Partialvolumenkorrektur in der Positronen-Emissions-Tomographie*, Diplomarbeit, Münster, 2010.
- [10] D. Schrader, I. Dotsenko, M. Khudaverdyan, Y. Miroschnyenko, A. Rauschenbeutel, D. Meschede: *Neutral Atom Quantum Register*, Phys. Rev. Lett **93**, 150501, 2004.
- [11] R. Scheunemann, F. S. Cataliotti, T. W. Hänsch, M. Weitz: *Resolving and addressing atoms in individual sites of a CO₂-laser optical lattice*, Phys. Rev. A **62**, 051801, 2000.
- [12] M. Karski, R. Reimann, A. Alberti, L. Förster, D. Meschede: *Site-resolved fluorescence detection of neutral atoms in a sparsely filled 1D optical lattice*, unpublished.
- [13] W.Alt: *An objective lens for efficient fluorescence detection of single atoms*, Optik **113**, 142, 2002.
- [14] M. Karski, L. Förster, J.-M. Choi, A. Steffen, W.Alt, D. Meschede, A. Widera: *Quantum Walk in Position Space with single optically trapped Atoms*, Science, **325**,174 , 2009.

A. Herleitung der Richardson-Lucy Iteration

Die Herleitung ist im Wesentlichen aus [3] entnommen und auf die vorliegende Situation übertragen worden.

Die Optimierung von $p(O|J)$ ist äquivalent zur Optimierung von $\ln p(O|J)$, da das Logarithmieren eine monotone Transformation ist. Wir führen eine Variation des folgenden Funktionals $L(O)$ mit einer Testfunktion T und einem Parameter $\theta \ll 1$ durch:

$$L(O) = \ln(p(O|J)) = \int_x P * O - J \ln P * O + \ln J! dx \quad (17)$$

Der letzte Term hängt nicht von O ab und kann im Folgenden vernachlässigt werden, da er das Ergebnis der Variation daher nicht beeinflusst:

$$\begin{aligned} L(O + \theta T) &= \int_x P * (O + \theta T) - J \ln(P * (O + \theta T)) dx \\ &= \int_x P * O + \theta(P * T) - J \ln \left((P * O) \left(1 + \theta \frac{P * T}{P * O} \right) \right) dx \\ &= \int_x P * O + \theta(P * T) - J \ln(P * O) - J \ln \left(1 + \theta \frac{P * T}{P * O} \right) dx \\ &= L(O) + \int_x \theta(P * T) - J \ln \left(1 + \theta \frac{P * T}{P * O} \right) dx \\ &= L(O) + \int_x \theta(P * T) - J \cdot \theta \frac{P * T}{P * O} dx + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= L(O) + \theta \int_x \left(1 - \frac{J}{P * O} \right) (P * T) dx + \mathcal{O}(\theta^2) \end{aligned}$$

wobei die Taylorentwicklung des natürlichen Logarithmus ausgenutzt wurde. Aus der Definition der Faltungsoperation folgt direkt die folgende Identität:

$$\int_x f g * h dx = \int_x g f * h' dx \quad (18)$$

mit h' als Adjungiertes von h . Angewendet auf die hergeleitete Variation ergibt sich:

$$L(O + \theta T) = L(O) + \theta \int_x T P' * \left(1 - \frac{J}{P * O} \right) dx + \mathcal{O}(\theta^2)$$

Diese Beziehung muss für beliebige Testfunktionen gelten und daher erhalten wir ($P' * 1 = 1$, da P auf 1 normiert ist und durch erweitern mit O):

$$O = \left(P' * \frac{J}{P * O} \right) O \quad (19)$$

Dies ist eine Fixpunktgleichung, deren Lösung näherungsweise durch folgende Fixpunktiteration bestimmt werden kann:

$$O^{(n+1)} = \left(P' * \frac{J}{P * O^{(n)}} \right) O^{(n)} \quad (20)$$

Danksagung

Ich danke Herrn Prof. Dr. Dieter Meschede für die Überlassung des sehr interessanten Themas, Herrn Dr. Frank Vewinger für die Übernahme des Zweitgutachtens und Herrn Dr. Andrea Alberti für fachliche Anregungen und wertvolle Diskussionen.

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie die Zitate kenntlich gemacht habe.

Bonn, den

Unterschrift