

# STM 三维图象处理在微机上的实现

孙 红 白春礼 华 军 马颂德  
(中科院化学所) (中科院自动化所)

**摘 要** 本文介绍了可在微机上的扫描隧道显微镜三维图象处理程序。程序运用平移、比例、旋转、透视等几何变换将样品表面形貌以适当的位置、大小和角度显示在二维屏幕上,经消隐和明暗处理加强图象的立体感、真实感和清晰度,通过颜色模型转换将图象以灰度或混合过渡颜色绘制在高分辨显示终端上,实现 STM 数据的三维立体显示,进一步加强仪器的数据处理和显示功能。

**关键词:** 扫描隧道显微镜 三维图象处理

## 一、引 言

扫描隧道显微镜 (STM) 是 80 年代发展起来的一种新型表面分析仪器,对表面科学、材料科学、生命科学和微电子技术的有着重大的意义和广阔的应用前景<sup>(1)</sup>。

仪器采集到的是反映样品表面态密度分布或表面原子排列状况的平面三维数据,为使样品的表面形貌以三维立体的形式真实地展现在显示屏上,我们在 VAX 780 机上编制的 STM 三维图象处理软件的基础上,经过改进和处理,使程序可在 386 型和 286 型微机运行,方便了普通 STM 实验室的使用。程序采用 C 语言编写,输入数据点可达  $200 \times 200$ , 输出数据点达  $512 \times 512$ 。

## 二、程 序 设 计

### 2.1 几何变换

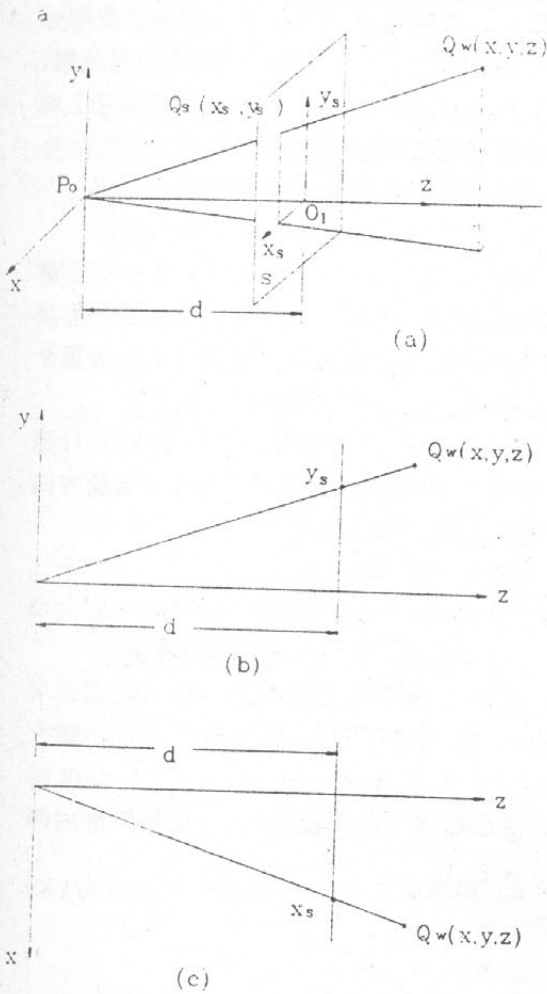
几何变换是 STM 三维图象处理中的重要内容,包括平移、比例、旋转和透视。平移、比例、旋转使得用户窗口中的真实形体以最佳位置、大小和角度出现在视图区中,透视变换实现样品的三维表面形貌投影在二维显示屏上。在三维坐标系中,假设变换前的各点坐标为  $(x, y, z)$ , 变换后的各点坐标为  $(u, v, w)$ , 各变换公式如下:

#### 2.1.1 平移

$x_0, y_0, z_0$  分别为  $x, y, z$  方向的平移步长。

---

本文于1991年1月收到。



$$\begin{cases} u = x + x_0 \\ v = y + y_0 \\ w = z + z_0 \end{cases} \quad (1)$$

2.1.2 比例

a, b, c 分别为 x, y, z 方向的比例因子。

$$\begin{cases} u = ax \\ v = by \\ w = cz \end{cases} \quad (2)$$

2.1.3 旋转

三维旋转变换指空间立体绕一轴旋转  $\theta$  角,  $\theta$  角的正负按右手定则决定, 在程序中主要用到绕 x, y 轴的旋转。

绕 x 轴旋转  $\theta$  角:

$$\begin{cases} u = x \\ v = y \cos \theta - z \sin \theta \\ w = y \sin \theta + z \cos \theta \end{cases} \quad (3)$$

绕 y 轴旋转  $\theta$  角:

$$\begin{cases} u = x \cos \theta + z \sin \theta \\ v = y \\ w = -x \sin \theta + z \cos \theta \end{cases} \quad (4)$$

2.1.4 透视变换

从某一点观察样品, 投影平面置于视点和投射样品之间, 投影平面平行于投射样品的一个坐标平面, 假设投影平面在距离原点 d 处, 图 1 的 a), b), c) 给出了一个左手坐标系中的三个视图, 有一点

图 1. a) 中心透视投影

b) 沿 y 轴方向俯视图

c) 沿 x 轴方向俯视图

$Q(x, y, z)$  被投射到投影平面上。

根据图中三角形的相似性, 得计算  $x_s, y_s$  的公式:

$$\begin{cases} x_s = x.d / z \\ y_s = y.d / z \end{cases} \quad (5)$$

将观察样品上各点的透视依次连接, 即可得到该样品的透视图<sup>(2)</sup>。

2.2 消隐

在透视投影后, 程序采用 z 深度缓冲器算法, 其思想是: 显示屏幕上每个象素的灰度以位于此象素内最靠近观察者的那个景物面的灰度值代替<sup>(3)</sup>, 从而实现消去投影后样品的不可见部分。

2.3 明暗处理

为了立体化地得到显示的物体, 考虑了物体表面由于照射所产生的明暗效应, 用一明

暗公式近似地计算和显示该物体可见面的亮度和颜色, 其真实感将会进一步提高。在明暗公式中有两个基本要素: 即表面性质和落在表面上的光照性质。主要的表面性质是反射, 它决定了有多少入射光线被表面反射。表面的另一个性质是透明度, 即允许光线从它上面穿射过去的程度。明暗公式通过上述属性去决定形体表面上某一点的明暗程度。

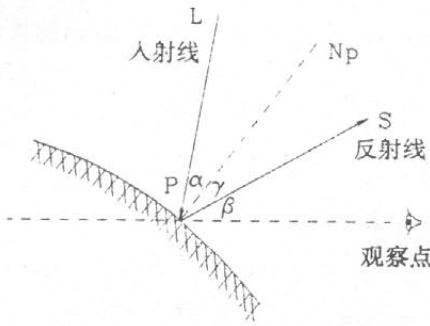


图 2. 点 P 的明暗度是由反射光线和透射光线决定的,  $N_p$  是 P 处的法向量。

明暗度的一般计算公式为:

$$E = E_{pd} + \sum E_{ps} + E_{pt}$$

其中明暗效应项  $E$  表示光线照射在一个形体上的光能总和, 正是这个能量使样品的图形具有真实感;  $E_{pd}$  为漫射照度能量;  $E_{ps}$  为每个光源的照度;  $E_{pt}$  表示表面透明度<sup>(4)</sup>。

在程序中我们只考虑一个光源的平行照射, 样品表面的明暗度随光照在它上面的方向的变化而变化。如图 2 所示

明暗公式具体为:

$$E = 0.5 \cos \alpha + 0.45 (\cos \beta)^6 + 0.05 \quad (6)$$

式中的  $\alpha$  为光源入射线与 P 处法向量  $N_p$  的夹角,  $\beta$  为观察者和反射光线间的夹角。

计算  $E$  值的关键在求得 P 点的法向量  $N_p$ 。STM 三维图象处理程序的输入数据表示的是样品表面的起伏。扫描数据  $z = f(x, y)$ , 是  $x, y$  的离散函数, 根据数学原理曲面方程  $z$  在  $(x_0, y_0)$  处的法向量为:  $\vec{n} = \{f'x(x_0, y_0), f'y(x_0, y_0), -1\}$ , 为得到  $f'x(x_0, y_0), f'y(x_0, y_0)$  我们采用三次样条插值函数  $S(x)$  构造求出。根据附加的两个已知条件:  $S'(x_0) = f'_0 = 0, S'(x_n) = f'(n) = 0$ , 得求解方程:  $S(x) = \sum_{j=0}^n [y_j \alpha_j(x) + f'_j \beta_j(x)]$ , 经整理 (过程略)<sup>(5)</sup> 得矩阵:

$$\begin{bmatrix} 2 & \mu_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_2 & 2 & \mu_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_3 & 2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ & & & \cdots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda_{n-2} & 2 & \lambda_{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \lambda_{n-1} & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S'(x_0) \\ S'(x_1) \\ S'(x_2) \\ \vdots \\ S'(x_{n-2}) \\ S'(x_{n-1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 - \lambda_1 f'_0 \\ g_2 \\ g_3 \\ \vdots \\ g_{n-2} \\ g_{n-1} - \mu_{n-1} f'_n \end{bmatrix}$$

此系数矩阵为对角占优的对三角线方程组, 用追赶法可解此方程组<sup>(5)</sup>。

在求导数的三次样条函数构造中, 离散点之间的步长, 对曲面的光滑度、曲率及图象的大小较大的影响。

### 2.4 颜色转换

彩色显示器通常采用 RGB 加色系统, 但这工程模型与直观颜色概念没有直接联系。模拟画家通过对颜色的色泽、明暗和色调的感受而建立的主观颜色模型, 可产生与真实物体相似的色调层次。在 VAX 780 机上程序使用 HLS 主观颜色模型转换到 RGB 颜色模

型的算法<sup>[2]</sup>，将光能值  $E$  换算为 RGB 模型的三基色亮度值，从而在屏幕上画出灰度的三维物体。在微机利用颜色转换算法，我们总结出一种适用于 DS-GCB (6) 彩色高分辨显示器的调色板快速配制方法，此方法可调制单色灰度或混合过渡色彩，画出单色或混合色的图象。这种方法也同样适用于所有与 DS-GCB (6) 绘图方式相似的图形控制卡。

### 2.5 坐标轴及标度绘制

在微机程序中我们增加了绘制坐标轴及标度的功能，使图象的立体效果更强，方便对图象的分析解释。要准确地画出坐标轴，需要得到图象三个顶点在显示屏上的位置坐标，方法是在透视投影时，计算三个顶点所在投影面的平均投影坐标。坐标轴标度的计算关键在于确定单位长度，在实践中我们总结出一计算公式：

$$\text{单位长度} = ((int)(\frac{A}{b}[A - 1])) \times 10^B \quad (A = 2, 3, \dots, 9) \quad (7)$$

$A = 1$  时，单位长度取  $0.5 \times 10^B$

$A$  为输入坐标长度值的第一个有效数字， $B$  为该有效数字相对于小数点的位置， $b$  为一数组。

用户输入  $x, y, z$  方向的图象总长度，程序自动计算并画出坐标轴及标度。

### 3. 参数选择

执行 STM 三维图象处理程序，得到一幅较理想的图象关键在于参数值的选取。影响图象质量的主要因素见表 1。

表 1.

参数名	作用
光源坐标	影响图象的灰度层次感
$x, y$ 旋转角度	影响图象的灰度层次感和图象外形
$z$ 轴增益	影响图象的空间起伏度
$x, y$ 增益	影响图象的曲面曲率和图象大小
聚焦	影响图象的大小和清晰度

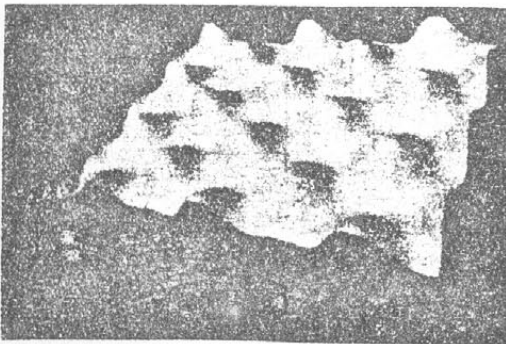


图 3. STM 采集到的石墨立体形貌图

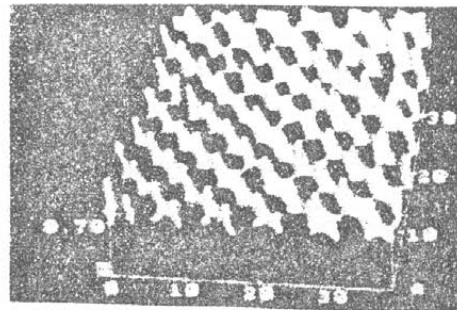


图 4. AFM 探测的有机铁磁体立体形貌

## 参 考 文 献

1. 白春礼, 扫描隧道显微镜在表面化学中的应用, 大学化学, 4(3), 1~4(1989)
2. (美) James D. Foley, Andries Van Dam, 《交互式计算机图形学基础》, (2), 清华大学出版社, 北京, (1987): 203页
3. 许隆文, 《计算机绘图》, 机械出版社, (1989)
4. 孙家广, 许隆文, 《计算机图形学》, 清华大学出版社
5. 李庆扬, 王能超, 易大义, 《数值分析》, 华中工学院出版社

## Three Dimensional STM Images Processing Program Based on a Microcomputer

Sun Hong Bai Chunli

(*Institute of Chemistry, Academia Sinica*)

Hua Jun Ma Songde

(*Institute of Automatic Technology, Academia Sinica*)

### ABSTRACT

This paper describes a program based on an IBM PC / AT or IBM 386 microcomputer for three-dimensional representation of scanning tunneling microscopy (STM) images developed in our laboratory. The STM topographic images can be displayed on a high resolution graphics monitor both in color with different color lookup tables, which can be chosen interactively, and in gray scale. The surface is rotated and then projected onto a viewing plane. This makes it possible to view the surfaces from different points of view. Light sources illuminate the surface to get shading which can be combined with perspective and hidden surface removal. The use of the three-dimensional image processing is of great help to get satisfying results with scanning tunneling microscopy and atomic force microscopy.

**Keywords:** Scanning tunneling microscopy (STM) Three dimensional image processing