

原子级制造专题

MAED-CNN: 一种原子尺度图像降噪的深度学习模型

詹凌涛 范浩龙 张腾* 王婷婷 曹雄柏 李燕 周贞如 张全震 杨惠霞* 王业亮*

(北京理工大学 集成电路与电子学院 北京理工大学长三角研究院(嘉兴) 低维量子结构与器件重点实验室 北京 100081)

MAED-CNN: A Deep Learning Model for Atomic-Scale Image Denoising

ZHAN Lingtao, FAN Haolong, ZHANG Teng*, WANG Tingting, CAO Xiongbai, LI Yan,

ZHOU Zhenru, ZHANG Quanzhen, YANG Huixia*, WANG Yeliang*

(School of Integrated Circuits and Electronics, Beijing Institute of Technology, Beijing Institute of Technology Yangtze River Delta Research Institute (Jiaxing), Key Laboratory of Low-Dimensional Quantum Structures and Devices, Beijing 100081, China)

Abstract The Scanning Tunneling Microscope (STM), operating under ultra-high vacuum conditions, enables atomic-scale resolution imaging of material surfaces. However, STM images are often affected by various sources of noise, which degrades image quality. This paper proposes a deep learning model for STM image restoration, named MAED-CNN - Multi-scale Attention Encoder-Decoder Convolutional Neural Network. It uses artificially repaired STM images as references. The model leverages manually restored STM images as references and combines multi-scale convolution, attention modules, and an encoder-decoder U-Net architecture to transform noisy input images into high-quality, denoised outputs. Compared with several general deep learning models, the proposed model demonstrates superior performance in metrics such as PSNR, SSIM, and UQI. It effectively restores STM images and holds significant promise for advancing STM image restoration techniques and promoting research in imaging technologies.

Keywords Deep Learning, Image Restoration, Scanning Tunneling Microscope

摘要 工作在超高真空环境下的扫描隧道显微镜(STM)具备原子级分辨率,广泛应用于材料表面结构的精细成像。然而,STM图像易受机械振动、电子噪声、环境扰动等多种因素影响,导致图像质量下降,严重制约其科学研究价值。为提升STM图像的可用性和精度,文章提出一种基于多尺度特征提取与注意力机制的深度学习图像修复模型——MAED-CNN。该模型采用U-Net编码-解码结构,融合多尺度卷积模块与通道注意力机制,并引入人工修复图像作为监督参考,有效增强对图像局部细节与全局结构的重构能力。在多个真实STM图像数据集上进行测试,MAED-CNN在PSNR、SSIM、UQI等评价指标上均优于现有主流图像修复模型,表现出更高的图像还原精度与稳定性。研究为STM图像智能修复提供了新思路,对提升纳米尺度成像技术的应用水平具有重要意义。

关键词 深度学习 图像修复 扫描隧道显微镜

中图分类号: TB79

文献标识码: A

doi: 10.13922/j.cnki.cjvst.202503002

原子尺度的精准表征与调控是材料科学发展的核心驱动力。随着纳米材料制备技术的突破,研究范式正从宏观体系向原子级精准操纵转变^[1]。以石墨烯为代表的二维材料体系的崛起^[2],验证了原子级结构构筑对材料性能的决定性作用。在此背

景下,基于超高真空环境的原子尺度表征技术成为关键研究手段。扫描隧道显微镜(STM)作为表面科学领域的革命性工具,其核心原理基于量子隧穿效应。当导电探针与样品间距缩小至纳米量级时,隧穿电流呈现指数型距离依赖性($I \propto e^{-ks}$)^[3],通过反

收稿日期: 2025-03-13

基金项目: 国家自然科学基金项目(62271048)

* 联系人: E-mail: teng.zhang@bit.edu.cn; yanghuixia@bit.edu.cn; yeliang.wang@bit.edu.cn

馈机制实现表面形貌的高精度探测^[4]。在恒定电流模式下, STM 可达到原子级分辨率, 为表面电子态密度(LDOS)的实空间成像提供了技术基础^[5]。此外, STM 衍生的针尖操控技术^[6]能够实现单原子或分子的精确调控, 在纳米结构构建^[7]以及分子吸附位点调控^[8]等领域展现出独特优势。

然而, STM 测量过程易受多种因素干扰, 包括仪器噪声^[9]、机械震动^[10]、针尖状态^[11]、样品表面杂质^[12]等, 这些因素可能降低成像精度并影响后续分析。由于 STM 输出以图像形式呈现, 图像修复技术已经被应用于复原原子尺度表征信号。该技术通过信号处理去除图像退化和噪声^[13], 已成功应用于医学成像^[14]、卫星图像处理^[15]以及日常图像优化^[16]等领域。将图像修复技术引入 STM 成像, 可有效解决噪声问题, 提升成像质量, 恢复物质表面原始信息, 为精确表征材料表面、研究物理化学性质及开发新型材料提供了重要技术支持。

传统扫描隧道显微镜(STM)成像质量退化通常归因于探针针尖退化与系统噪声引起的图像破损。早期研究认为针尖形状畸变是导致图像退化的主因, 传统修复方法主要依赖针尖盲重构算法通过盲解卷积实现形貌复原^[17-19]。针对外加噪声引起的破损问题, 传统修复技术可分为两类: 基于结构信息的方法通过偏微分方程建模局部梯度与边缘特征, 对破损区域进行扩散填充修复^[20]; 基于纹理信息的方法则采用模式匹配算法实现待修复区域与完好区域的自适应拼接^[21]。然而, 传统方法在亚纳米尺度细节复原中存在显著局限性。盲解卷积算法对针尖先验模型依赖性强, 易导致边缘伪影和结构失真; 结构导向修复易出现边缘断裂, 而纹理匹配修复在处理复杂晶格结构时可能出现周期性失配。此外, 现有方法通常需要针对特定样品表面特性调整算法参数, 缺乏跨平台适用性, 限制了其在多尺度材料表征中的普适应用。

随着人工智能技术的发展, 基于深度学习的图像修复方法在多个领域展现出显著优势, 但其在扫描隧道显微镜(STM)成像中的应用受到成像机制特殊性的限制。STM 成像基于隧道电流的物理机制以及独特的外加噪声特性, 使得传统深度学习模型在 STM 图像修复中的效果受限。针对这一问题, 已有研究提出多种解决方案。例如, Joucken F 等^[22]开发了一种基于卷积神经网络(CNN)的去噪方法,

通过紧束缚电子结构模型生成模拟图像进行训练, 实现了优于传统滤波器的去噪效果。然而, STM 模拟图像的真实性问题仍需解决, 因针尖状态的影响使得纯净无噪声图像难以反映实际观测条件。为克服模拟图像真实性不足的问题, Xie J 等^[23]提出了一种物理增强的深度学习方法, 利用物理模型生成模拟数据, 并结合对抗域适应(PDA-Net)框架实现无监督去噪, 避免了对参考图像的依赖。同时, Oliveira J P 等^[24]开发了一种基于稀疏编码的去噪算法, 通过学习字典表示图像的稀疏线性组合, 将伪影视作缺失数据进行修复, 同样无需依赖参考图像。

尽管上述方法在 STM 图像修复中取得了一定进展, 但现有算法多基于模拟数据或未充分考虑人类视觉系统的需求。为此, 本文提出了一种基于多尺度特征提取与注意力机制的编码-解码原子尺度结构修复网络(MAED-CNN), 通过人工修复的图像数据进行训练, 优化了修复结果的可视化效果, 使其更符合人类研究员的观察需求。实验表明, 该方法在性能上优于经典深度学习模型, 为 STM 原子尺度表征的图像修复提供了创新性解决方案。

1 STM 成像与噪声

本文研究采用 TI 掺杂 TaSe₂ 体系作为实验样品, 所有数据均在 5 K 温度下通过扫描隧道显微镜(STM)获取。由于 STM 对针尖与样品间距的高度敏感性^[25-26], 取得的图像通常是带有比较复杂的噪声的。如图 1(a)所示, 长周期扫描受温漂影响的条纹状干扰, 可认为是低频噪声, 对应图 2 中较大的电流功率谱密度。此外, 高频段(500–1000 Hz)同波动一般被认为是电子元器件产生的噪声。

为提高数据质量, 采用空间域滤波^[27-28]和频域变换^[29]技术对原始图像进行预处理, 获得干净的参考图像。

为进一步增强模型的泛化能力, 基于文献[9]、[10]、[31]中对 STM 噪声来源的分析, 人工添加了三种典型噪声(图 1(b)): 扫描噪声(源于电气波动^[30])、高斯噪声(源于电子元件热波动^[31])和周期噪声(源于机械震动^[9])。这些噪声类型的选择基于其与真实 STM 噪声的统计一致性, 并参考了 Sun L S 等的研究^[32]。通过将这三种噪声随机组合并作用于原始图像, 实现了数据增广, 涵盖了更广泛的噪声类型, 从而为模型训练提供了更具代表性的样本。

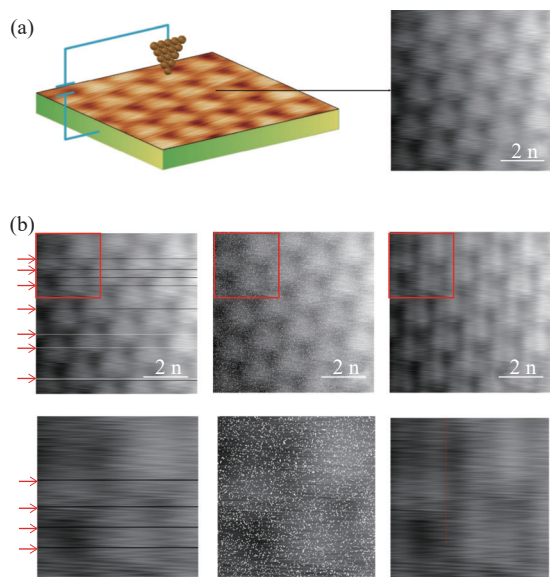


图1 STM获取图像以及人工添加的常见噪声类型。(a)STM获取图像,扫描参数为:偏压4.5 V,设定电流230 pA,图像具有明显的低频条纹噪声。(b)用于数据增广的常见的噪声类型,从左至右分别为扫描噪声、高斯噪声、周期噪声

Fig. 1 Images acquired by STM and common types of artificially added noise. (a) An STM-acquired image with scanning parameters of a bias voltage of 4.5 V and a set current of 230 pA, which has obvious low-frequency stripe noise. (b) Common types of noise used for data augmentation, from left to right are scan noise, Gaussian noise, and periodic noise

2 MAED-CNN 模型

2.1 整体工作流程

本文设计的深度学习模型基于 Python 语言开发,采用 Pytorch 框架作为后端支持。近年来,卷积神经网络(CNN)在图像降噪领域取得了显著进展^[33],其核心优势在于能够通过多层卷积操作学习图像的复杂特征表示^[34-35],包括噪声特征,并实现盲图像去噪^[36-39]。在此基础上,研究者进一步引入感知损失^[40-42]、注意力机制^[43-44]和多尺度学习^[45-47]等多技术,显著提升了CNN的图像修复能力。本文提出的多尺度注意力编码-解码卷积神经网络(MAED-CNN)整体工作流程如图3所示。首先,从STM仪器获取原始图像数据;其次,利用图1(b)所示的数据增强技术对图像进行预处理,通过添加扫描噪声、高斯噪声和周期噪声实现数据集扩展;最后,将增强后的图像输入MAED-CNN模型进行训练。模型以人工修复的干净图像作为参考,采用均方误差

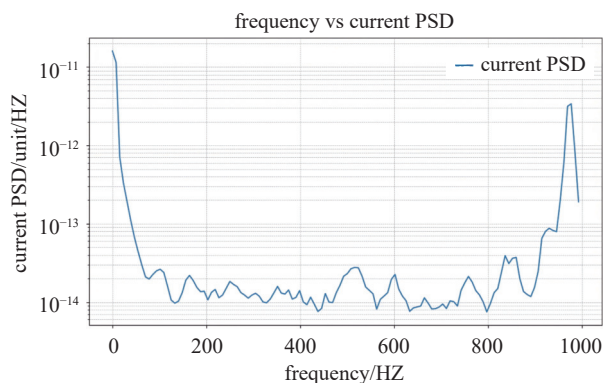


图2 电流信号谱图,由图中可以看出,低频区间(0-100 Hz) PSD 值较大,低频噪声对信号的影响较大;高频区间(500-1000 Hz)PSD 值相对较小,但仍然存在波动,噪声依然存在影响

Fig. 2 The current signal spectrum. It can be seen from the figure that the PSD values in the low-frequency range (0-100 Hz) are relatively large, indicating that low-frequency noise has a significant impact on the signal. In the high-frequency range (500-1000 Hz), although the PSD values are relatively smaller, there are still fluctuations, and the impact of noise cannot be ignored

(MSE)作为损失函数,其表达式如公式(1)所示。

$$L_{\text{MSE}} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (1)$$

其中, N 表示样本数量, $\hat{y}_i$ 表示生成图像, y_i 表示参考图像。MSE 损失函数对异常值较为敏感,平方计算会放大噪声点对损失的贡献,因此特别适合用于修复噪声图像。其计算简单且为平滑函数,有助于算法的收敛。

通过 MAED-CNN 处理后,最终输出的图像清晰度显著改善。为量化评估修复效果,本文采用峰值信噪比(PSNR)、结构相似性指数(SSIM)和普遍图像质量指标(UQI)三项指标结合 FFT 对称性指标对修复质量进行评价。实验结果表明,MAED-CNN 在去除噪声的同时有效保留了图像的关键结构信息,为 STM 图像修复提供了高效解决方案。

2.2 神经网络结构

本文设计的 MAED-CNN 整体结构如图4(a)所示。该网络以带噪声的 STM 图像为输入(STEP 1),通过多尺度卷积核提取不同尺度的图像特征,以增强对噪声图像的大尺度结构和细节特征的同时感知能力(STEP 2)。具体而言,模型采用 1×1 、 3×3 、 5×5 、 7×7 和 9×9 五种不同尺寸的卷积核,针对不同

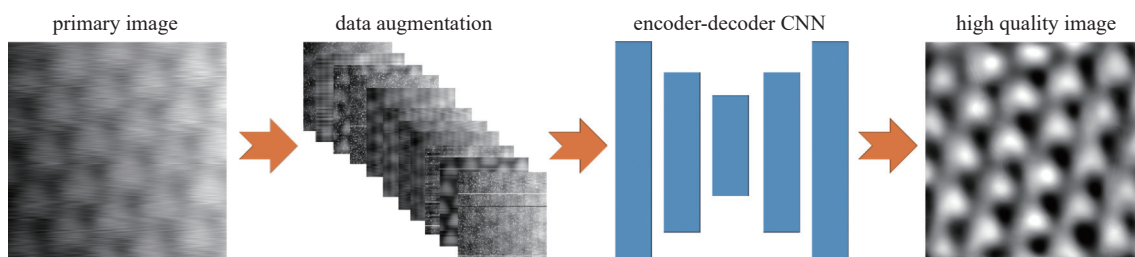


图3 MAED-CNN 整体流程图。原始图像先通过随机添加噪声的方式进行数据增广, 然后送入一个带有编码器-解码器结构的卷积神经网络中处理, 最后输出高质量图像

Fig. 3 The overall flowchart of the MAED-CNN. The original image is first augmented by randomly adding noise, then it is fed into a convolutional neural network with an encoder-decoder architecture for processing, and finally, a high-quality image is output

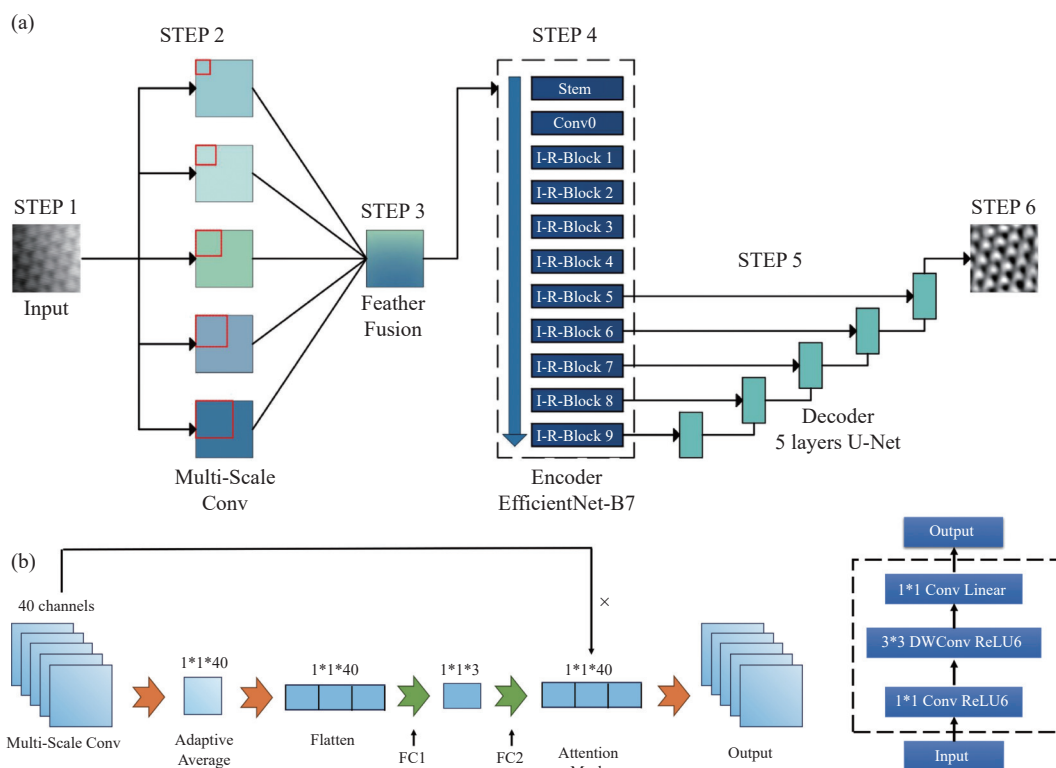


图4 MAED-CNN 结构示意图。(a)为神经网络整体结构, 输入图像经由 5 个不同大小的卷积核提取多尺度特征, 并经过一个通道扩充层丰富特征数量, 然后将所有特征图经由一个特征融合层归纳, 之后由 EfficientNet-B7 作为编码器编码特征, 由 U-Net 作为解码器生成最后的输出图像。(b)特征融合层的具体结构, 运用 SE 通道注意力模块, 通过两次全连接层, 对 40 个通道的不同尺度特征分配权重, 得到注意力掩码, 然后与原始特征图像相乘, 得到最后输出的特征图像。(c)为到残差模块示意图, 由深度可分离卷积层结合 1×1 卷积层构成

Fig. 4 The schematic diagram of the MAED-CNN structure. (a) Illustrates the overall structure of the neural network. The input image is processed through five convolutional kernels of different sizes to extract multi-scale features. These features are then enriched by a channel expansion layer. After that, all feature maps are integrated via a feature fusion layer. Subsequently, EfficientNet-B7 serves as the encoder to encode the features, and U-Net acts as the decoder to generate the final output image. (b) Details the specific structure of the feature fusion layer, which employs the SE (Squeeze-and-Excitation) channel attention module. Through two fully connected layers, it assigns weights to the multi-scale features of 40 channels, obtaining an attention mask. This mask is then multiplied with the original feature images to produce the final output feature images. (c) A residual module diagram, consisting of a combination of depthwise separable convolutional layers and 1×1 convolutional layers

类型的噪声进行特征提取。小尺度卷积核(如 1×1 、 3×3)更适合捕捉高斯噪声和针尖震动等局部噪声的分布特征,而大尺度卷积核(如 7×7 、 9×9)则在学习扫描噪声和周期噪声等宽作用域噪声的分布上更具优势。这种多尺度特征提取策略借鉴了 Lu L P 等^[48]提出的 MixDehazeNet,通过并行多尺度卷积有效提升了特征表达的多样性。之后,作者也对所设计的多尺度卷积模块的计算复杂度进行了详细测试与分析。该模块包含 1000 个参数,浮点运算次数(FLOPs)为 44.16 M,内存占用为 48.37 MB。在处理 $512 \times 512 \times 1$ 尺寸的图像时,平均吞吐量达到 731.82 张图片/秒。这些结果表明,该多尺度卷积模块具有较低的计算复杂度和较高的推理速度,在实际应用中表现出优异的运行效率。这种高效性使其能够在保证修复质量的同时,满足实时处理的需求,为 STM 图像修复提供了高效的技术支持。

在特征融合阶段,将提取到的 5 个尺度共计 40 个通道的特征图像,送入特征融合模块进行处理,以实现特征的归纳与融合,并对每个通道分配相应的权重,从而增强对任务相关特征的关注(STEP 3)。特征融合模块基于 SE(Squeeze-and-Excitation)通道注意力机制^[49],其架构如图 4(b)所示。先通过全局平均池化压缩图像至 1×1 大小,并保持通道数不变,然后将 1×1 大小的 40 个通道展平为 40 维向量,输入到全连接层 FC1,将通道压缩到 3 个,FC1 的目的是为了提取通道之间的高级特征表示,增强全局感受野,同时也减少计算量。再通过全连接层 FC2 恢复到 40 通道,生成注意力掩码,此时是结合 FC1 提取的通道之间高级特征以及图像特征给每个通道分配权重,捕捉通道之间的相关性。最后将输入的 40 个通道的特征图像与注意力掩码相乘,得到归纳总结后的特征图像,使得后续任务中可以更关注对当前任务有更大贡献的通道。

U-Net 编码器在图像修复中至关重要,负责从原始特征中提取高级特征。对于 STM 图像修复,保留噪声下的电子态细节和原子缺陷信息是关键。本文选取 EfficientNet-B7^[50]作为 U-Net 图像修复架构的编码器(STEP 4),在 Hu G 等^[51]研究者的工作中,通过对铁道缺陷的识别任务,发现了 Efficient-B7 优越的特征提取与计算速度性能,并且对于裂纹等小缺陷具有极高的灵敏度,这对于 STM 图像的缺陷细节保留是极具优势的。图像经过特征融合后输入 EfficientNet-B7 编码器。该编码器由输

入部分 Stem、初始卷积层 Conv0 及多个倒残差(I-R-Block)模块构成。倒残差模块通过如图 4(c)所示的深度可分离卷积(DWConv)对各通道运用独立的卷积核计算^[52],不跨通道操作,有效降低计算量,并保持高精度。EfficientNet-B7 借此高效提取深层特征,且参数量与计算量较少^[50]。

编码后的信息输入 U-Net 架构解码器,其最后五层与解码器的五层通过跳跃连接相连(STEP 5),保留低级特征,确保细节和边缘信息的保留^[53]。如图 4(a)STEP 5 所示,U-Net 的对称结构以及跳跃连接,可以保留相对低级的信息特征,有助于原始图像的细节与边缘信息的保留,原有细节的保留对于生成高质量的图像是极为重要的参考与评估指标,跳跃连接的 U-Net 结构有效缓解了模型在去除噪声分布的同时“误伤”原有的图像细节等问题。通过连续五层的 U-Net 结构,对编码信息进行逐步解码与生成,最后得到了输出的高质量 STM 图像(STEP 6)。

3 图像修复结果与分析

MAED-CNN 使用 Adam 优化器,学习率为 1×10^{-4} ,将原始数据集通过随机的方式将 518 张噪声图像划分为 0.9 比例的训练集与 0.1 比例的测试集,于 GTX-3090-24G 上训练完成。

数据集来源于课题组成员运用 STM 扫描的包括 Tl 参杂浓度为 0.6、0.8、1.0 的 TaSe₂ 体系,扫描参数覆盖了 $-3 \sim 3$ V, 30 pA $\sim$ 230 pA 的设定电流。

3.1 可视化质量评估

运用于图像修复的深度学习模型已经十分丰富,但是大多运用于医学成像、老照片修复、视频修复等方面,直接与 STM 图像修复相关的深度学习模型相对欠缺。STM 图像具有其独特的成像体系,其图像的退化以及外加噪声也有其单独的特性,通用的图像修复模型不一定适用于 STM 图像体系。于是,本文选择了 PDA-Net^[9]、HCANet^[54]、CBDNet^[55]、DnCNN^[56]、PMRID^[57]、RIDNet^[58]等图像修复深度学习模型作为对比,以探究开发 STM 原子尺度结构修复网络的必要性。如图 5 所示为不同的深度学习模型在同样的 STM 图像上的修复效果,除了 HCANet 以外的所有模型均训练到损失值完全收敛。从图 5(a)中可以看出,所有的模型能够缓解条纹噪声对图像清晰度的影响,修复出来的图像边缘更加清晰,但 CBDNet、DnCNN、PMRID 以及 RIDNet 修复

出的图像肉眼可见的较“脏”,说明对于 STM 条纹噪声即仪器机械震动所带来的低频噪声分布,这些

通用的图像修复模型并不能很好的适应。PDA-Net 作为专用于 STM 图像的修复模型,具有较好的修

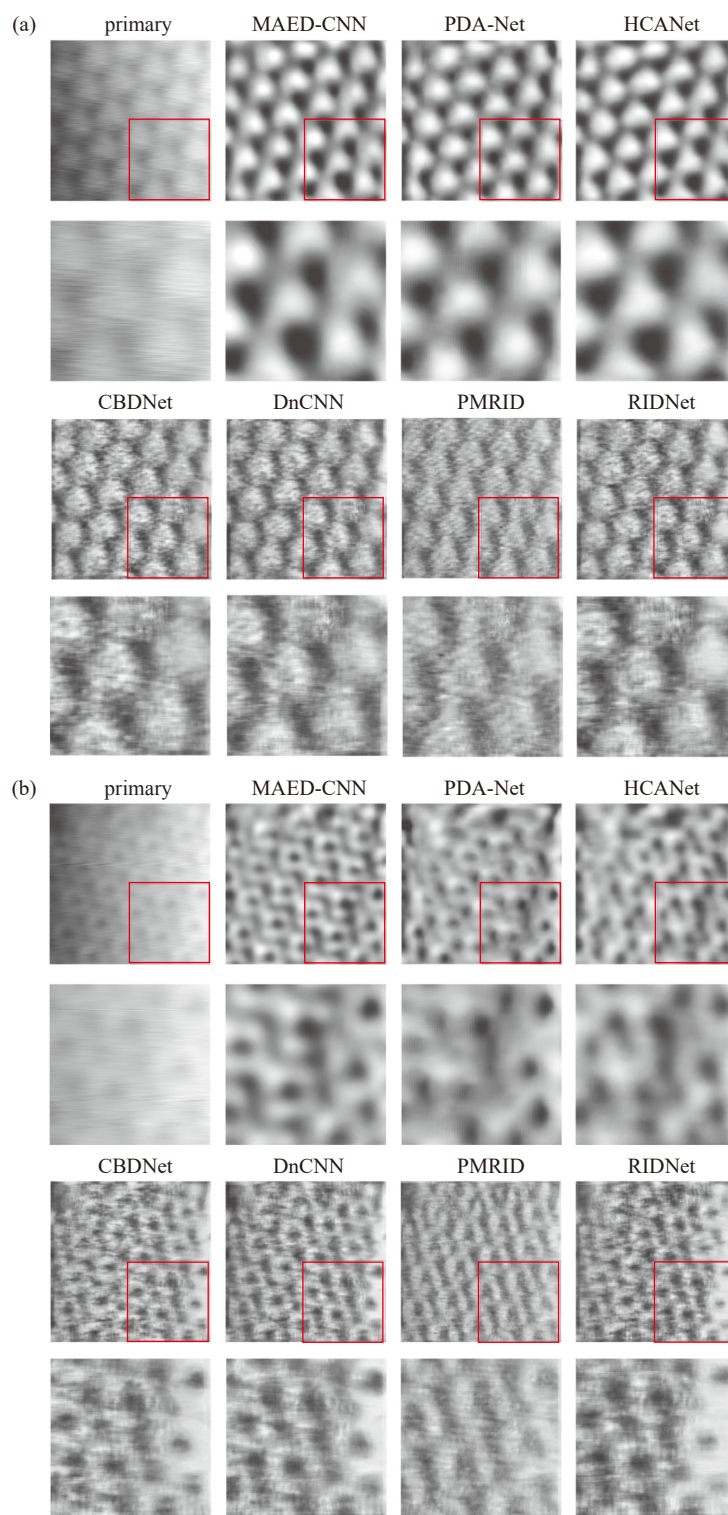


图5 不同深度学习模型的图像修复效果对比。包括了原始图像、MAED-CNN、PDA-Net、HCANet、CBDNet、DnCNN、PMRID 以及 RIDNet, 红色矩形框表示在该图片的下方对该区域局部放大。(a)、(b)图展示了不同偏压下具有不同形貌的同一区域图像

Fig. 5 Comparison of image restoration effects of different deep learning models. This includes the original image, MAED-CNN, PDA-Net, HCANet, CBDNet, DnCNN, PMRID, and RIDNet. The red rectangular boxes indicate local magnification of the corresponding regions below the images. Figures (a) and (b) show images of the same area with different morphologies under different biases

复效果,其分子结构清晰,但具有微小变形。为了维持前提条件的一致,此处的 PDA-Net 并没有通过模拟数据的训练,而是直接用真实数据训练的,从局部放大图来看,其相比于 MAED-CNN 的修复效果依然存在一定的差距,分子结构产生了一定的变形。HCANet 的修复效果在肉眼上与 MAED-CNN 几乎一致,不仅去除了低频的条纹噪声,也保留了原有的细节。为了避免偶然性,测试了另一种偏压下具有不同形貌的 TaSe₂ 图像加入到对比测试中,也就是图 5(b)的图像。在这个过程中发现原本效果与 MAED-Net 效果差不多的 PDA-Net 与 HCANet 在对于具有复杂细节的图像修复上出现了细节模糊、结构破碎的问题。HCANet 虽在仅训练 10 个 epoch 后便取得较好效果,具备进一步提升性能的潜力,但其训练时间已接近其他模型从训练开始到损失收敛所需时间的三分之二。由于其基于复杂的 Transformer 架构,计算资源和训练成本显著高于其他方法,对于结构相对简单的 STM 图像修复任务而言,其高昂的开销在实际应用中难以接受。而 PDA-Net 在没有模拟数据预训练的情况下,同样表现出了相对较差的修复性能,在同样的训练成本上不如 MAED-CNN 的训练效果。综上,MAED-CNN

在综合了训练成本与性能的价格比上,优于其他通用模型或复杂模型。

3.2 数字化指标评估

为了客观评价 MAED-CNN 的修复质量,本节计算了图 5 所示的六种深度学习模型其图像修复质量的数字化指标,如表 1 所示。PSNR 表示峰值信噪比,衡量重建图像与原始图像之间信噪比,PSNR 值越高表示图像质量越好;SSIM 表示结构相似性指数,SSIM 越接近于 1 表示图像的结构恢复越好;UQI 表示通用质量指数,综合考量亮度、对比度以及结构信息,越接近于 1 说明图像质量越高。

三项数字化指标中的最优值均加粗标记,从表中可以看出在考虑训练成本的情况下 MAED-CNN 的 PSNR、SSIM、UQI 指标均高于其他模型,说明无论是在像素级别上或是结构级别以及整体质量上,MAED-CNN 的结构修复质量优于其他模型。

3.3 原子级结构修复分析

为了分析 MAED-CNN 深度学习模型的修复过程是否会导致图像部分失真,即导致晶体结构发生破坏,本文计算并对比了 STM 图像修复前后的快速傅里叶变换图像(FFT),如图 6 所示。从图 6(a)

表 1 图像修复质量的数字化指标
Tab. 1 Digital Metrics for Image Restoration Quality

Evaluation	MAED-CNN	PDA-Net	HCANet	CBDNet	DnCNN	PMRID	RIDNet
PSNR	31.87	21.22	21.74	17.61	17.26	16.23	16.59
SSIM	0.8989	0.7753	0.8162	0.4286	0.4480	0.4394	0.4206
UQI	0.8982	0.8838	0.8327	0.4569	0.4735	0.4788	0.4494

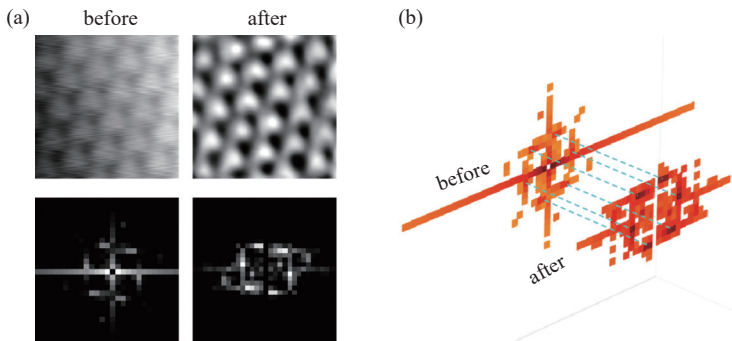


图6 MAED-CNN 修复过程对晶体对称性结构的影响分析示意图。(a)第一行为修复前后的图像,第二行为修复前后的 STM 图像的傅里叶变换图谱。(b)修复前后的 STM 图像的傅里叶图谱映射到三维空间中的对比
Fig. 6 schematic diagram of the impact of the MAED-CNN restoration process on the symmetry structure of crystals.(a) The first row shows the images before and after restoration, and the second row shows the Fourier transform spectra of the STM images before and after restoration.(b) The Fourier spectra of the STM images before and after restoration are mapped into three-dimensional space for comparison

中可以看出,修复前后的 STM 图像,其傅里叶图谱的六方晶格对称性仍然存在,即其晶格对称性并没有发生改变,原子位置几乎没有偏移。图 6(b)的内容更好的说明了这一点,从图像中可以看到两者的六方晶格对称点几乎是重叠的。

4 结论和展望

综上所述,本文提出了一种适用于 STM 图像修复的深度学习模型,其运用人工修复的 STM 图像作为参考图像进行训练,通过多尺度特征提取模块获取了噪声图像的多尺度特征,结合 SE 注意力机制对图像进行特征融合,最后运用了 U-Net 结构并结合 EfficientNet-B7 作为编码器,作为高质量图像的生成部分。最后获取的高质量 STM 图像,将其与多种通用深度学习模型对比,证明了本文所提出的深度学习模型在 STM 图像修复上性能的优越性。STM 图像质量的高低对研究工作的分析以及传播有着深远的影响,高质量的图像更便于分析与传播。

目前直接应用于 STM 图像修复的深度学习模型较少,且通用模型效果不佳,建设 STM 图像体系的深度学习环境十分重要,需要有更多的模型架构加入到 STM 的图像修复中,以适应更多不同的材料体系与仪器。此外,高质量的 STM 图像获取所花费的工作成本较高,通常需要多次调整扫描参数甚至是更新针尖状态才能得到清晰的 STM 图像,深度学习模型可以有效缓解这类问题,通过修复手段避免多次重复的扫描,从而提升研究员的工作效率。相信随着深度学习技术的进步,可以为 STM 的研究工作带来更加广阔的发展前景。

参 考 文 献

- [1] Zhang Q Z, Zhang Y, Hou Y H, et al. Nanoscale control of one-dimensional confined states in strongly correlated homojunctions[J]. *Nano Letters*, 2022, 22(3): 1190–1197
- [2] Yang Y C, Gao Q F, Liang W B, et al. Enhanced stretchable 2D metal - graphene membranes with superior mechanical properties for sieving lithium from brine (Small 15/2025)[J]. *Small*, 2025, 21(15): 2570118
- [3] Li Q F. Scanning tunneling microscope[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2012 (李全锋. 扫描隧道显微镜 [D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2012 (in Chinese))
- [4] Qiu X H, Bai C L. Scanning tunnelling microscopic investigation of organic molecular assembling systems[J]. *Journal of the Graduate School of the Chinese Academy of Sciences*, 2003, 20(1): 107–111
- [5] Ren Y N, Ren H Y, Watanabe K, et al. Realizing one-dimensional moiré chains with strong electron localization in two-dimensional twisted bilayer WSe₂[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2024, 121(45): e2405582121
- [6] Wang D F, Bao D L, Zheng Q, et al. Twisted bilayer zigzag-graphene nanoribbon junctions with tunable edge states[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 1018
- [7] Wang J G, Tang J, Chen Z B, et al. STM tip-induced nanostructuring-replacement method to construct Pt surface nanostructures[J]. *Journal of Electrochemistry*, 2006, 12(4): 357–362 (王金刚, 汤敬, 陈招斌, 等. STM 针尖诱导构筑-置换两步法制备 Pt 表面纳米结构 [J]. *电化学*, 2006, 12(4): 357–362 (in Chinese))
- [8] Shi H, Liu H H, Li Z, et al. Low-temperature STM study on the adsorption of acetylene molecules on the TiO₂(110) Surface[J]. *Chinese Chemical Society*, 2021 (施宏, 刘慧慧, 李喆, 等. 乙炔分子在 TiO₂(110) 表面吸附的低温 STM 研究 [J]. *中国化学会*, 2021 (in Chinese))
- [9] Jiang Y S, Wang X G, Yang N H, et al. Computer correction for distorted STM images caused by piezoceramics[J]. *Vacuum Science and Technology*, 1997, 17(4): 264–268 (江月山, 王晓光, 杨乃恒, 等. 压电陶瓷对 STM 图像的影响及计算机校正 [J]. *真空科学与技术学报*, 1997, 17(4): 264–268 (in Chinese))
- [10] Gao L. Research on improving precision of surface topography by SPM[D]. Changchun: Jilin University, 2004 (高论. 提高 SPM 检测表面形貌精度的研究 [D]. 长春: 吉林大学, 2004 (in Chinese))
- [11] Song Y, Yang K. Research on the relationship between STM probe morphology and image quality[J]. *Journal of Hubei Adult Education Institute*, 2013, 19(2): 82–83, 79 (宋永, 杨阔. STM 探针形貌与图像质量的关系研究 [J]. *湖北成人教育学院学报*, 2013, 19(2): 82–83, 79 (in Chinese))
- [12] Zhang Y P. How to obtain a better STM picture[J]. *Journal of Gansu Normal Colleges*, 2006, 11(5): 14–15 (张颜萍. 怎样获得一幅效果良好的 STM 图像 [J]. *甘肃高师学报*, 2006, 11(5): 14–15 (in Chinese))
- [13] Zhu X C, Tang G J. Advanced digital image processing[M]. Beijing: Posts & Telecom Press, 2020: 473 (朱秀昌, 唐贵进. 现代数字图像处理 [M]. 北京: 人民邮电出版社, 2020: 473 (in Chinese))

- [14] Fan D, Yue T, Zhao X, et al. LIR: A Lightweight Baseline for Image Restoration[J]. *arXiv preprint arXiv: 2402.01368*, 2024
- [15] Toker A, Eisenberger M, Cremers D, et al. SatSynth: Augmenting image-mask pairs through diffusion models for aerial semantic segmentation[C]//2024 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), Seattle: IEEE, 2024: 27685–27695
- [16] Xu X G, Kong S, Hu T, et al. Boosting image restoration via priors from pre-trained models[C]//2024 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), Seattle: IEEE, 2024: 2900–2909
- [17] Bonnet N, Dongmo S, Vautrot P, et al. A mathematical morphology approach to image formation and image restoration in scanning tunnelling and atomic force microscopies[J]. *Microscopy Microanalysis Microstructures*, 1994, 5(4-6): 477–487
- [18] Villarrubia J S. Morphological estimation of tip geometry for scanned probe microscopy[J]. *Surface Science*, 1994, 321(3): 287–300
- [19] Williams P M, Shakesheff K M, Davies M C, et al. Blind reconstruction of scanning probe image data[J]. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures*, 1996, 14(2): 1557–1562
- [20] Li L. Image inpainting algorithms based on partial differential equation[D]. Changchun: Jilin University, 2012 (李亮. 基于偏微分方程的图像修复算法研究 [D]. 长春: 吉林大学, 2012 (in Chinese))
- [21] Zhang Y. Research of digital image inpainting technique [D]. Chengdu: Chengdu University of Technology, 2008 (张燕. 数字图像修复技术研究 [D]. 成都: 成都理工大学, 2008 (in Chinese))
- [22] Joucken F, Davenport J L, Ge Z H, et al. Denoising scanning tunneling microscopy images of graphene with supervised machine learning[J]. *Physical Review Materials*, 2022, 6(12): 123802
- [23] Xie J, Ko W, Zhang R X, et al. Physics-augmented deep learning with adversarial domain adaptation: Applications to STM image denoising[J]. *arXiv preprint arXiv:2409.05118*, 2024
- [24] Oliveira J P, Bragança A, Bioucas-Dias J, et al. Restoring STM images via Sparse Coding: noise and artifact removal[J]. *arXiv preprint arXiv:1610.03437*, 2016
- [25] Hofer W A, Foster A S, Shluger A L. Theories of scanning probe microscopes at the atomic scale[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2003, 75(4): 1287–1331
- [26] Rerkkumsup P, Aketagawa M, Takada K, et al. Highly stable atom-tracking scanning tunneling microscopy[J]. *Review of Scientific Instruments*, 2004, 75(4): 1061–1067
- [27] Kumar B K S. Image denoising based on Gaussian/bilateral filter and its method noise thresholding[J]. *Signal, Image and Video Processing*, 2013, 7(6): 1159–1172
- [28] Wang Z, Tao J. A fast implementation of adaptive histogram equalization[C]//2006 8th international Conference on Signal Processing. IEEE, 2006, 2
- [29] You N, Han L B, Zhu D M, et al. Research on image denoising in edge detection based on wavelet transform[J]. *Applied Sciences*, 2023, 13(3): 1837
- [30] Yu C W. The study on active control of electrical equipment noise and design of output circuit[D]. Harbin: Harbin University of Science and Technology, 2008 (于春伟. 电气设备噪声主动控制的研究及输出电路的设计 [D]. 哈尔滨: 哈尔滨理工大学, 2008 (in Chinese))
- [31] Chen H. Research on noise models and their applications in Nano-scale semiconductor devices[D]. Xi'an: Xidian University, 2010 (陈华. 半导体纳米器件的噪声模型及其应用研究 [D]. 西安: 西安电子科技大学, 2010 (in Chinese))
- [32] Sun L S. Application of improved algorithm in filtering of STM images with mixed noise[J]. *Journal of Shenyang Ligong University*, 2011, 30(6): 86–91 (孙立书. 改进算法在混合噪声 STM 图像滤波中的应用 [J]. *沈阳理工大学学报*, 2011, 30(6): 86–91 (in Chinese))
- [33] LeCun Y, Bottou L, Bengio Y, et al. Gradient-based learning applied to document recognition[J]. *Proceedings of the IEEE*, 1998, 86(11): 2278–2324
- [34] Xie J X, Stavrakis S, Yao B. Automated identification of atrial fibrillation from single-lead ECGs using multi-branching ResNet[J]. *Frontiers in Physiology*, 2024, 15: 1362185
- [35] Wang Z K, Stavrakis S, Yao B. Hierarchical deep learning with generative adversarial network for automatic cardiac diagnosis from ECG signals[J]. *Computers in Biology and Medicine*, 2023, 155: 106641
- [36] Zhang K H, Ren W Q, Luo W H, et al. Deep image deblurring: A survey[J]. *International Journal of Computer Vision*, 2022, 130(9): 2103–2130
- [37] Min C, Wen G Q, Li B R, et al. Blind deblurring via a novel recursive deep CNN improved by wavelet transform[J]. *IEEE Access*, 2018, 6: 69242–69252
- [38] Huang L Q, Xia Y S. Joint blur kernel estimation and

- CNN for blind image restoration[J]. *Neurocomputing*, 2020, 396: 324–345
- [39] Shen Z Y, Lai W S, Xu T F, et al. Deep semantic face deblurring[C]//Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, Salt Lake City: IEEE, 2018: 8260–8269
- [40] Johnson J, Alahi A, Fei-Fei L. Perceptual losses for real-time style transfer and super-resolution[C]//14th European Conference on Computer Vision, Amsterdam: Springer, 2016: 694–711
- [41] Lu B Y, Chen J C, Chellappa R. UID-GAN: unsupervised image deblurring via disentangled representations[J]. *IEEE Transactions on Biometrics, Behavior, and Identity Science*, 2020, 2(1): 26–39
- [42] Zhang K H, Luo W H, Zhong Y R, et al. Deblurring by realistic blurring[C]//Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, Seattle: IEEE, 2020: 2734–2743
- [43] Vaswani A, Shazeer N, Parmar N, et al. Attention is all you need[C]//Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems, Long Beach: ACM, 2017: 6000–6010
- [44] Zhang D Y, Liang Z W, Shao J. Joint image deblurring and super-resolution with attention dual supervised network[J]. *Neurocomputing*, 2020, 412: 187–196
- [45] Nah S, Kim T H, Lee K M. Deep multi-scale convolutional neural network for dynamic scene deblurring[C]//Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, Honolulu: IEEE, 2017: 257–265
- [46] Kim K, Lee S, Cho S. MSSNet: multi-scale-stage network for single image deblurring[C]//European Conference on Computer Vision, Tel Aviv: Springer, 2023: 524–539
- [47] Dong J X, Pan J S, Yang Z B, et al. Multi-scale residual low-pass filter network for image deblurring[C]//Proceedings of the IEEE/CVF International Conference on Computer Vision, Paris: IEEE, 2023: 12311–12320
- [48] Lu L P, Xiong Q, Xu B, et al. Mixdehazenet: Mix structure block for image dehazing network[C]//2024 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN). IEEE, 2024: 1–10
- [49] Hu J, Shen L, Albanie S, et al. Squeeze-and-excitation networks[J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2020, 42(8): 2011–2023
- [50] Tan M X, Le Q V. EfficientNet: Rethinking model scaling for convolutional neural networks[C]//Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning, Long Beach: ICML, 2019: 6105–6114
- [51] Hu G X, Li J, Jing G Q, et al. Rail flaw B-scan image analysis using a hierarchical classification model[J]. *International Journal of Steel Structures*, 2025, 25(2): 389–401
- [52] Sandler M, Howard A, Zhu M L, et al. MobileNetV2: inverted residuals and linear bottlenecks[C]//Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, Salt Lake City: IEEE, 2018: 4510–4520
- [53] Ronneberger O, Fischer P, Brox T. U-Net: convolutional networks for biomedical image segmentation[C]//18th International Conference on Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention, Munich: Springer, 2015: 234–241
- [54] Hu S, Gao F, Zhou X W, et al. Hybrid convolutional and attention network for hyperspectral image denoising[J]. *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, 2024, 21: 5504005
- [55] Guo J, Yan Z F, Zhang K, et al. Toward convolutional blind denoising of real photographs[C]//IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), Long Beach: IEEE, 2019: 1712–1722
- [56] Zhang K, Zuo W M, Chen Y J, et al. Beyond a Gaussian denoiser: residual learning of deep CNN for image denoising[J]. *IEEE Transactions on Image Processing*, 2017, 26(7): 3142–3155
- [57] Wang Y Z, Huang H B, Xu Q, et al. Practical deep raw image denoising on mobile devices[C]//16th European Conference on Computer Vision, Glasgow: Springer, 2020: 1–16
- [58] Zhuo S K, Jin Z, Zou W B, et al. RIDNet: recursive information distillation network for color image denoising[C]//IEEE/CVF International Conference on Computer Vision Workshop, Seoul: IEEE, 2019: 3896–3903