

СОЗДАНИЕ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ ОБРАБОТКИ И АНАЛИЗА ОЖЕ-ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ

Хаметова Элина Фанилевна

Студент, инженер-исследователь

Институт математики, информационных технологий и физики УдГУ

ФТИ УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

E-mail: elinaphanilevna851@gmail.com

Научный руководитель — Бакиева Ольга Ринатовна

Одним из методов исследования элементного состава поверхности материалов является Оже-электронная спектроскопия (ОЭС). В результате проведения эксперимента формируется спектр, который содержит в себе информацию о химических элементах в пределах точки анализа. Однако при обработке и анализе экспериментальных данных исследователь сталкивается с рядом трудностей. В Оже-электронных спектрах присутствует фоновая составляющая. Поскольку амплитуда сигналов может быть сравнима с фоновыми помехами, то существует проблема определения полезного сигнала на фоне шума. Сигнал может быть смещен по энергетическому положению в сравнении с табличным значением. Данная проблема была решена введением доверительного интервала в шкале кинетических энергий, по которому определяются предполагаемые химические элементы. К тому же может происходить перекрытие сигналов разных химических элементов, что может усложнить анализ. Кроме того, существует фактор трудоемкости процесса обработки, поскольку для одного образца количество экспериментальных данных может достигать более 100 спектров.

В ходе анализа литературных источников была выявлена уже имеющаяся программная база по обработке и анализу Оже-электронных спектров, состоящая из программных продуктов от компаний Jeol (Япония) и Omicron (США). Однако использование данного программного обеспечения (ПО) подразумевает работу на конкретном лабораторном оборудовании, поскольку ПО поставляется исключительно в комплекте со спектрометром. На сегодняшний день в России отсутствует специализированное официально зарегистрированное ПО, поэтому все операции проводятся вручную. Выше перечисленные факторы обуславливают необходимость в разработке соответствующего программного обеспечения.

Таким образом, данная работа посвящена разработке автоматизи-

зированной программного комплекса по обработке и анализу экспериментальных Оже-электронных спектров. На сегодняшний день разработаны модули количественного и качественного анализа химического состава. Пользователь имеет возможность по экспериментальному спектру определить химический состав поверхности и провести расчет процентного содержания идентифицированных химических элементов. Работа модулей была апробирована на экспериментальных данных с различным содержанием химических элементов.

На данный момент ведутся работы по реализации возможности вычитания фона в нескольких вариантах, а также разработке графического интерфейса пользователя. Кроме того, рассматриваются возможности применения искусственных нейронных сетей для автоматизации работы разрабатываемого программного комплекса.

Исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (№ гос. регистрации 121030100002-0)