

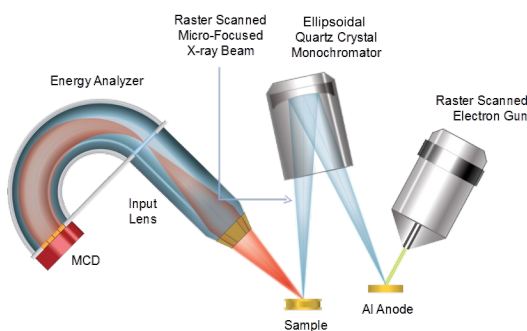


Masterarbeit

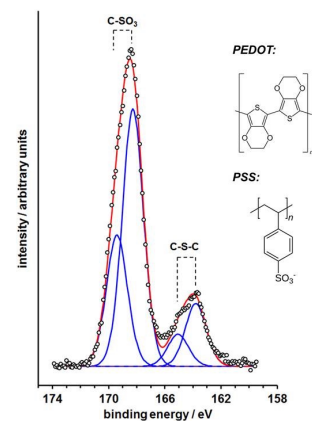
Erkennung von fehlerhaften XPS-Messungen mittels neuronaler Netze

In der Röntgenphotoelektronenspektroskopie (engl. X-ray photoelectron spectroscopy, XPS) werden Materialien anhand der durch Röntgenstrahlung ausgelösten Photoelektronen auf ihre chemische Zusammensetzung untersucht. Hierbei können je nach Material und Prüfaufbau Effekte wie Aufladung (engl. Charging) [1] auftreten, was zu einer Verfälschung der Messergebnisse führt. In dieser Arbeit sind diese Effekte mittels neuronaler Netzwerke zuverlässig zu erkennen, um den ausführenden Wissenschaftler darauf hinzuweisen und so zeitaufwendige Interpretationen des fehlerhaften Spektrums zu vermeiden.

Die Arbeit wird in Kooperation mit dem IAM-ESS durchgeführt, welches sich mit Messdaten und Expertise aus der Materialwissenschaft einbringt.



Messaufbau einer XPS-Messung [2]



Spektrum einer XPS-Messung [3]

Aufgaben:

- Recherche zu bisheriger ML-gestützter Forschung in Verbindung mit XPS-Messungen
- Grundlegendes Verständnis über den ablaufenden Messprozess und mögliche Fehler, die hierbei auftreten können
- Datenbeschaffung und zusätzliche Untersuchung der Möglichkeit zur Erstellung von synthetischen Trainingsdaten
- Erzeugung und Training von Netzwerken zur zuverlässigen Erkennung definierter Fehler

Ausbildung, Erfahrung und Fähigkeiten:

Analytisches Denken, Fähigkeit zu selbstständigem Arbeiten

Kenntnisse und praktische Erfahrung im Bereich Datenanalyse/Machine Learning

Programmiererfahrung mit Python, Versionskontrolle über Git

Vorzugsweise Erfahrung mit einem Deep Learning Framework (TensorFlow, PyTorch)

[1] Yu et al.: Some aspects of the charging effect in monochromatized focused XPS, Fresenius J Anal Chem, 1993

[2] Physical electronics: XPS/ESCA, <https://www.phl.com/surface-analysis-techniques/xps-esca.html>

[3] KNMFi (KIT): Non-degraded S 2p XPS spectrum of a PEDOT:PSS thin layer, <https://www.knmf.kit.edu/XPS.php>