

РАЗРАБОТКА НЕЙРОСЕТЕВОГО АЛГОРИТМА ДЛЯ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Воробьева Р.А., Сатина М.М.¹

Научный руководитель – PhD, профессор Смирнов Е.А.¹

¹Университет ИТМО

rovorobey@yandex.ru

Введение

Атомно-силовая микроскопия (АСМ) является одним из ключевых инструментов для изучения топографии материалов с нанометровым разрешением. Однако стандартные режимы АСМ обладают ограниченной химической чувствительностью [1]. Актуальной задачей является разработка методик АСМ, позволяющих получать информацию не только о топографии, но и о химическом составе поверхности. Перспективным направлением становится использование методов машинного обучения для обработки получаемых данных.

Основная часть

Для апробации методики анализа кремниевых поверхностей были подготовлены два образца: чистый кремний и кремний, модифицированный дихлорметилвинилсиланом. Поверхность образцов очищалась последовательной промывкой и плазменной обработкой в среде кислорода. Модификация проводилась выдерживанием подложки в растворе силана в этиловом спирте (1:9) в течение 30 минут с последующей сушкой в эксикаторе.

Сканирование выполнялось на АСМ в контактном режиме с одновременной регистрацией кривых подвода с помощью осциллографа. АСМ-изображения показали увеличение среднеквадратичной шероховатости с 23 нм до 46 нм после модификации. Кривые подвода для двух образцов существенно различались по амплитуде и форме колебаний. ИК-спектроскопия подтвердила наличие характерных полос Si–CH₃ и CH₃ на модифицированной поверхности [2].

Для автоматизации обработки данных была разработана свёрточная нейросеть, предсказывающая параметры нормализации кривых подвода. Обучение проводилось на 644 окнах реальных кривых. Сеть обучалась с оптимизатором Adam, функцией потерь MSE, на протяжении 100 эпох. Нейросетевой подход показал точность, сопоставимую с алгоритмическим методом, при этом обеспечивая мгновенную обработку данных после обучения [3].

Выводы

Полученные данные продемонстрировали, что комплексное использование АСМ в сочетании с ИК-спектроскопией позволяет идентифицировать химически модифицированные поверхности. Впервые для обработки кривых подвода применена свёрточная нейросеть, что позволяет автоматизировать предобработку больших массивов

данных. Предложенная методика может быть востребована в областях контроля защитных покрытий, аналитической химии и разработке материалов для солнечной энергетики.

Литература

1. Garcia R. Amplitude modulation atomic force microscopy. Hoboken : Wiley, 2020. 247 p.
2. Butt H. J., Cappella B., Kappl M. Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and applications // Surface Science Reports. 2005. Vol. 59, no. 1–6. P. 1–152.
3. Krull A., Helmi S., Bharat T. A. M. [и др.] Deep learning for automated analysis of force curves in atomic force microscopy // ACS Nano. 2024. Vol. 18, no. 3. P. 2145–2156.