technische universität dortmund

Lehrstuhl für Mikro- und Nanoelektronik

Entwicklung einer Analysesoftware zur Auswertung von Raman-Messaufnahmen

von der
Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik
der
Technischen Universität Dortmund
genehmigte

Projektarbeit

vorgelegt von

Eric Lukei
Matrikelnummer [redacted]

Prüfer:	*Prof. Dr.-Ing. Stefan Tappertzhofen*
Zweitprüfer:	*Leon Becker*

Datum der Abgabe: 26. August 2025

Abstract

In dieser Projektrbeit werden drei MATLAB-Skripte zur automatisierten Auswertung von Raman-Daten aus WITec-Messungen vorgestellt. Ziel ist es, Graphenproben effizient hinsichtlich Bedeckungsgrad, Strukturqualität und spektraler Eigenschaften zu analysieren. Die Skripte ermöglichen die Erkennung intakter Flächen, die Bestimmung von Flake-Anzahl und -Größe sowie die spektrale Peak-Analyse. Alle Ergebnisse können in einem strukturierten PDF-Bericht ausgegeben werden. Die entwickelten Werkzeuge sind modular aufgebaut und lassen sich leicht auf andere Materialien und Messparameter anpassen.

This project work presents three MATLAB scripts for automated evaluation of Raman data from WITec measurements. The aim is to efficiently analyze graphene samples with respect to coverage, structural quality, and spectral properties. The scripts enable the detection of intact areas, determination of flake count and size, and spectral peak analysis. All results can be compiled into a structured PDF report. The developed tools have a modular design and can be easily adapted to other materials and measurement parameters.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis **III**

1 Einleitung **1**

2 Beschreibung der Software zur Auswertung von Raman-Aufnahmen **2**

2.1 Verwendete Programme und Toolboxen 2

2.2 Analyse der Graphen-Oberflächenbedeckung 3

2.3 Analyse von WS_2-Flake-Strukturen 9

2.4 Spektrale Charakterisierung von Raman-Messdaten 14

3 Zusammenfassung und Ausblick **18**

Literaturverzeichnis **19**

Abbildungsverzeichnis

2.1 Ablauf der Graphenanalyse im Überblick 4
2.2 Originalaufnahme der Probe nach PMMA-Entfernung 5
2.3 Erzeugte Binärmaske der intakten Graphenbereiche 6
2.4 Markierte Messregionen mit Kreisen (rot) und Stichprobenpunkten (grün) 7
2.5 Rekonstruierte Gesamtmaske der Probe zur Flächenanalyse 8
2.6 Ablauf der WS_2-Flake-Analyse im Überblick 10
2.7 Originalbild einer WS_2-Probe 11
2.8 Erzeugte Binärmaske der WS_2-Probe nach Hintergrundkorrektur und Segmentierung 12
2.9 Flakes herausgestellt 13
2.10 Ablauf der spektralen Bild- & Maskenerzeugung für Graphen-Proben . . . 14
2.11 Originalbild (Summenintensität über die Spektralachse) 15
2.12 Graphen-Spektrum eines Pixels mit markiertem Peak im Indexbereich . . 16
2.13 Binärmaske aus spektraler Peakintensität: Weiß = intakte Bereiche 17

1 Einleitung

Diese Projektarbeit, welche im Rahmen des Masterstudiums Elektrotechnik und Informationstechnik am Lehrstuhl für Mikro- und Nanotechnologie absolviert wurde, befasst sich mit der automatisierten Auswertung von Raman-Spektren zur Charakterisierung von 2D-Materialien wie Graphen und Wolframdisulfid (WS_2). Die Untersuchung von 2D-Materialien ist aufgrund ihrer außergewöhnlichen physikalischen Eigenschaften, wie hohe elektrische Leitfähigkeit und mechanische Stabilität, von großem Interesse für moderne Anwendungen in der Elektronik, wie z.B. Transistoren, Sensoren und flexible elektronische Bauelemente.

Graphen wird in der Regel durch chemische Gasphasenabscheidung (CVD) auf metallischen Substraten wie Kupfer hergestellt. Für technologische Anwendungen muss es jedoch auf geeignete Substrate übertragen werden. Wie in der Übersicht von [1] gezeigt wird, bringt dieser Transferprozess häufig Defekte, Risse, Rückstände und Verunreinigungen mit sich, etwa durch das verwendete Trägermaterial PMMA oder Ätzmittel, was die Qualität und Analyse von Graphen erheblich beeinflusst. Dadurch entsteht ein besonderer Bedarf an Methoden, mit denen sich die Struktur und Reinheit der übertragenen Graphenschichten zuverlässig bewerten lassen.

Die Raman-Spektroskopie stellt hierfür eine wertvolle Analysemethode dar, da sie nicht nur die chemische Zusammensetzung von Materialien untersucht, sondern auch tiefe Einblicke in deren strukturelle und elektronische Eigenschaften erlaubt. Im Rahmen dieses Projekts werden Raman-Daten aus WITec-Bilddaten mittels einer speziell entwickelten Toolbox automatisiert ausgewertet. Dadurch können intakte Bereiche auf Graphen-Proben hervorgehoben und der Bedeckungsgrad quantifiziert werden. Ergänzend wird die Spektralanalyse genutzt, um Aussagen über strukturelle Eigenschaften und Defekte zu treffen.

Die nachfolgende Dokumentation geht genauer auf die drei entwickelten Programmskripte ein, die den Analyseprozess abbilden. Diese werden hinsichtlich Aufbau und Funktionsweise beschrieben.

2 Beschreibung der Software zur Auswertung von Raman-Aufnahmen

In diesem Kapitel werden drei zentrale MATLAB-Skripte beschrieben, die im Rahmen dieser Arbeit zur automatisierten Auswertung von Raman-Messdaten entwickelt wurden. Jedes Skript erfüllt einen spezifischen Aufgabenbereich innerhalb der Probencharakterisierung:

1. **Analyse der Graphen-Oberflächenbedeckung**
   Zur Bestimmung der Bedeckung einer Probe mit Graphen und zur Identifikation qualitativ hochwertiger Bereiche.

2. **Analyse von WS_2-Flake-Strukturen**
   Zur Detektion und statistischen Auswertung einzelner Flakes von Wolframdisulfid (WS_2) auf der Probenoberfläche.

3. **Spektrale Charakterisierung von Raman-Messdaten**
   Zur detaillierten Auswertung der Raman-Spektren, um somit strukturelle Eigenschaften der Probe zu bestimmen.

2.1 Verwendete Programme und Toolboxen

Die Entwicklung und Ausführung der Software erfolgte in **MATLAB** (Version 2024b). Für die Umsetzung der einzelnen Verarbeitungsschritte wurden weitere spezialisierte Toolboxen eingesetzt:

- **WITio Version 2.1.1** – eine frei verfügbare MATLAB-Toolbox zur Verarbeitung und Analyse von WITec-Datenformaten. Sie ermöglicht das direkte Einlesen und Interpretieren von Raman-Messungen und Bilddaten aus WITec-Mikroskopen.
- **Image Processing Toolbox Version 24.2** – stellt eine Vielzahl an Funktionen zur Verfügung, die für die Bildvorverarbeitung, Segmentierung und morphologische Analyse der Raman-Aufnahmen verwendet werden.

- **MATLAB Report Generator Version 24.2** – dient der automatisierten Erstellung von Berichten im PDF-Format. In diesem Projekt werden damit Analyseergebnisse, Abbildungen und Messstatistiken strukturiert dokumentiert.

Durch die Kombination dieser Werkzeuge ist es möglich, den gesamten Prozess von der Rohdatenextraktion bis zur fertigen Analyseausgabe in einem automatisierten Programmdurchlauf abzubilden.

2.2 Analyse der Graphen-Oberflächenbedeckung

Dieses Skript dient der automatisierten Bestimmung der Bedeckung von Graphen auf einer Probe sowie der Identifikation großflächiger, intakter Messregionen. Grundlage sind Raman-Messungen, deren Farbintensitätsbilder aus WITec-Daten extrahiert werden. Die Auswertung erfolgt vollständig automatisiert: vom Laden der Rohdaten bis zum optionalen PDF-Bericht mit Bildern, Messpunkten und Kennzahlen.
Abbildung 2.1 zeigt den Gesamtprozess. Im Folgenden werden die einzelnen Schritte detaillierter beschrieben.

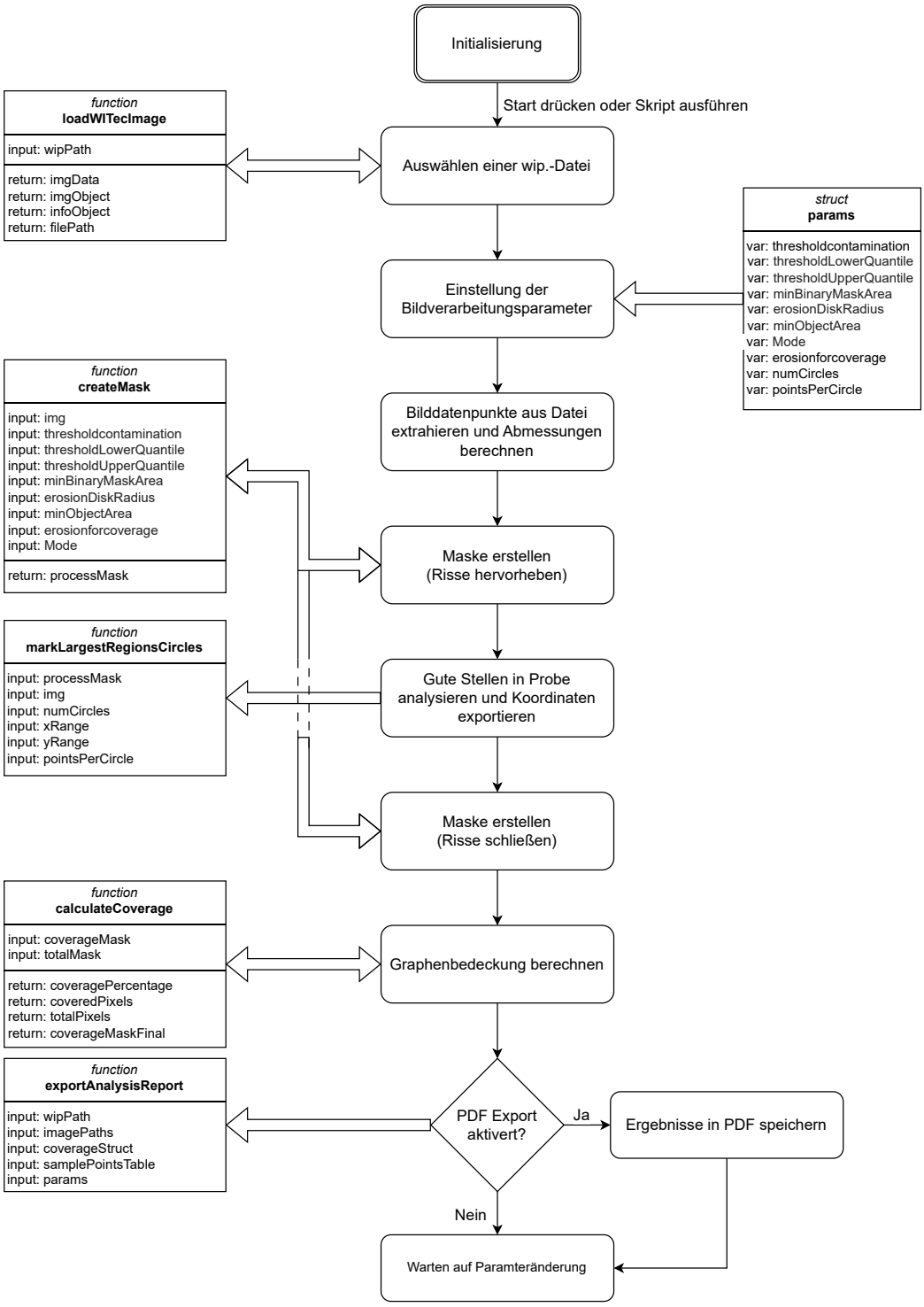


Abbildung 2.1: Ablauf der Graphenanalyse im Überblick

1. Initialisierung Das Skript prüft beim Start, ob die WITio-Toolbox geladen ist, und fragt den Nutzer bei Bedarf nach einer `.wip`-Datei. Zusätzlich kann hier über den Parameter `pdfexport` gesteuert werden, ob am Ende ein Bericht erstellt wird. Dieser Schritt bereitet die gesamte Verarbeitung vor, ohne bereits Bilddaten zu verändern.

2. Laden der Bild- und Metadaten (`loadWITecImage`) Diese Funktion lädt die WITec-Bilddaten und die zugehörigen Metadaten. Dazu wird vom Benutzer zunächst die wip.-Datei und im sich daraufhin öffnenden Menü die gewünschte Aufnahme ausgewählt. Es werden:

- das Bildobjekt (`imgObject`),
- die Bildmatrix (`imgData`),
- das Info-Objekt (`infoObject`) mit physikalischen Abmessungen

zurückgegeben. Aus den Metadaten (Pixelanzahl und physikalische Größe) werden die x- und y-Achsen in μm berechnet, sodass spätere Koordinaten real skaliert sind. In Abbildung 2.2 ist die Aufnahme einer Graphenprobe dargestellt, die durch das Raman Mikroskop erstellt worden ist.

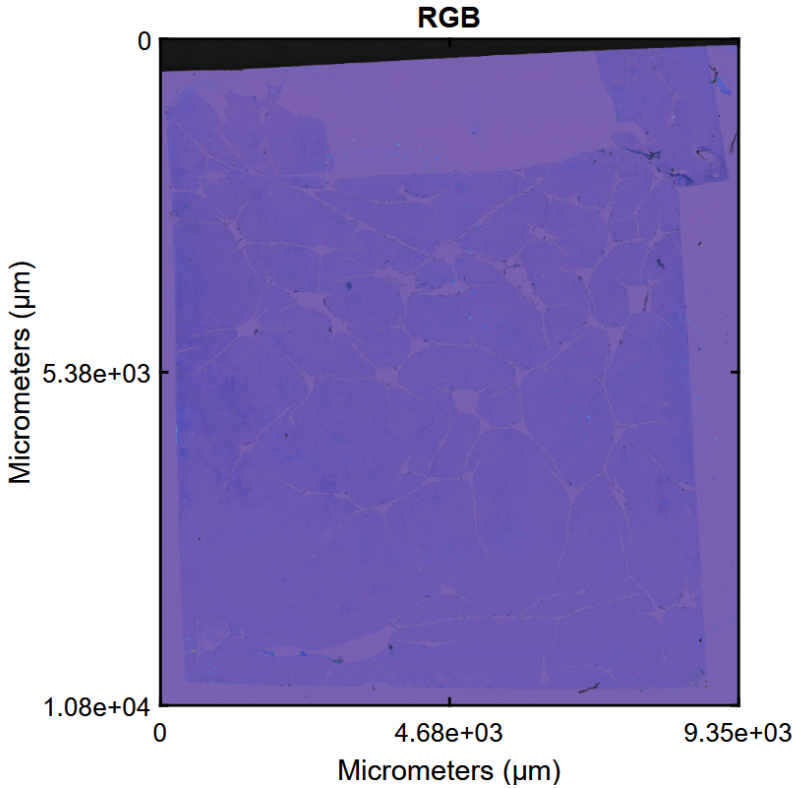


Abbildung 2.2: Originalaufnahme der Probe nach PMMA-Entfernung

3. Festlegen der Bildverarbeitungsparameter Die Parameter (Thresholds, minimale Objektflächen, Erosionsradien etc.) werden in einer `struct` gespeichert. Diese dienen als Steuerung für alle folgenden Schritte. Beispiel: `thresholdcontamination` gibt den Intensitätswert an, unterhalb dessen Pixel als Verunreinigung interpretiert werden.

4. Erstellen der Binärmaske (`createMask`) Aus dem Originalbild wird zunächst eine normalisierte Intensitätsmatrix gebildet, aus der per Quantilsanalyse ein geeigneter Schwellenwert berechnet wird. Diese Methode stellt sicher, dass sehr helle und sehr dunkle Pixel, wie beispielsweise schwarze Bildränder, die automatische Bestimmung des Schwellwertes nicht verfälschen.
Der Ablauf umfasst:

1. Entfernen von Verunreinigungen (dunkle Pixelbereiche),
2. Bildung eines Schwellwertes durch Quantilsanalyse,
3. Binärisierung der Probe (Weiß = intakter Bereich, Schwarz = beschädigter Bereich),
4. Entfernen zu kleiner Objekte,
5. Morphologische Erosion zur Reduzierung von Randartefakten.

Das Ergebnis dieses Schritts ist in Abbildung 2.3 dargestellt. Hier sind die erkannten intakten Graphenbereiche in Weiß und die defekten Bereiche in Schwarz zu sehen.



Abbildung 2.3: Erzeugte Binärmaske der intakten Graphenbereiche

5. Auswahl geeigneter Messregionen (`markLargestRegionsCircles`) Nachdem die Binärmaske der intakten Graphenbereiche erstellt wurde, werden die größten zusammenhängenden Flächen innerhalb der Maske ermittelt. Dazu wird eine Distanztransformation angewendet, die die Abstände der Pixel zu den nächstgelegenen Rändern berechnet. Die größten Abstandsbereiche entsprechen dabei möglichst unbeschädigten Regionen. Aus diesen werden die größten Kreise ausgewählt, wobei sich die Kreise nicht überschneiden dürfen und Bereiche am Bildrand ausgeschlossen werden.
Innerhalb der ausgewählten Kreise werden Stichprobenpunkte gleichmäßig verteilt. Die Koordinaten dieser Punkte werden sowohl im Bild markiert als auch in CSV- und TXT-Dateien gespeichert, um sie später für weitere Messungen nutzen zu können. Ein Beispiel für die markierten Kreise (rot) und die darin verteilten Stichprobenpunkte (grün) ist in Abbildung 2.5 dargestellt.

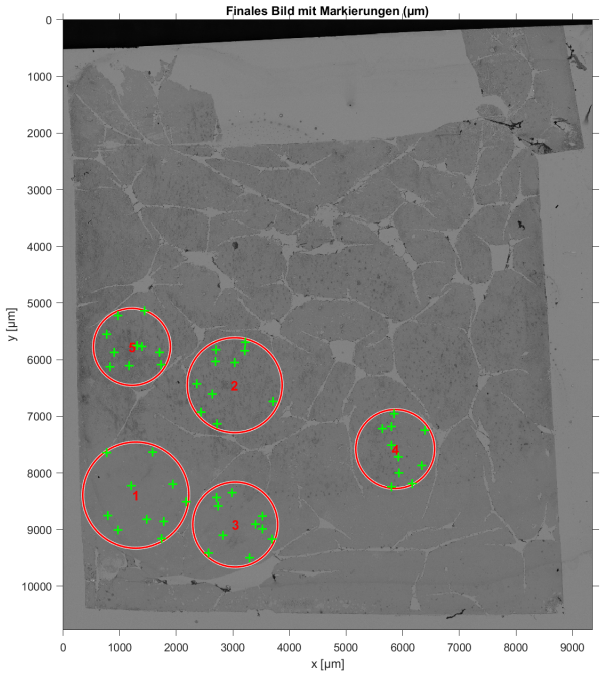


Abbildung 2.4: Markierte Messregionen mit Kreisen (rot) und Stichprobenpunkten (grün)

6. Erstellung der Gesamtmaske Für die Flächenanalyse wird eine zweite Maske mit der Funktion `createMask` im Modus `reconstruct` erzeugt. Im Gegensatz zur zuvor erstellten Binärmaske liegt hier der Fokus darauf, die vollständige Kontur der Probe zu rekonstruieren.
Dabei werden folgende Schritte durchgeführt:

- Morphologisches Schließen, um Risse in der Graphenschicht zu überbrücken,

- Füllen von Löchern innerhalb der Probe, um zusammenhängende Flächen zu erhalten,
- Auswahl nur des größten zusammenhängenden Objekts, um die eigentliche Probe von möglichen Artefakten oder Randbereichen zu trennen.

Das Ergebnis ist in Abbildung 2.5 dargestellt. Hier ist die rekonstruierte Gesamtfläche der Probe in Weiß zu sehen, wobei kleinere Störbereiche entfernt wurden. Diese Maske dient als Referenzfläche, um den prozentualen Bedeckungsgrad des Graphens in einem späteren Schritt zu berechnen.

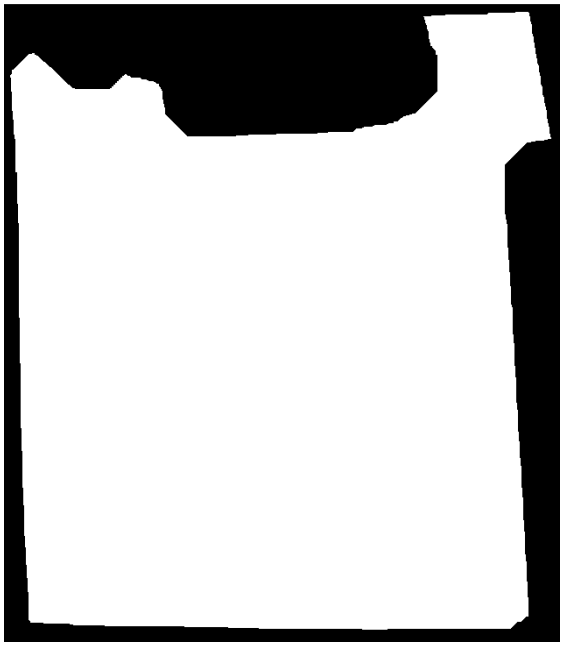


Abbildung 2.5: Rekonstruierte Gesamtmaske der Probe zur Flächenanalyse

7. Berechnung der Graphenbedeckung Die Bestimmung der Graphenbedeckung erfolgt mit der Funktion `calculateCoverage`, bei der die zuvor erstellte Binärmaske der intakten Graphenbereiche mit der rekonstruierten Gesamtmaske verglichen wird.
Der Ablauf ist wie folgt:

- Überlappung der Binärmaske (intakte Bereiche) mit der Gesamtmaske (gesamte Probenfläche),
- Zählen der von Graphen bedeckten Pixel,
- Ermitteln der Gesamtpixelzahl der Probe,
- Berechnung des prozentualen Bedeckungsgrades als Verhältnis von bedeckten zu gesamten Pixeln.

Das Ergebnis dieser Analyse gibt an, wie viel Prozent der Gesamtfläche von Graphen bedeckt ist. Ein hoher Wert deutet auf einen erfolgreichen Transfer mit wenigen Defekten hin, während ein niedriger Wert auf größere Risse oder Fehlstellen in der Graphenschicht schließen lässt.

8. Optionaler PDF-Export Falls der PDF-Export aktiviert ist, fasst die Funktion `exportAnalysisReport` alle relevanten Analyseergebnisse in einem strukturierten Bericht zusammen. Der Export dient nicht nur der Dokumentation, sondern auch der Archivierung und erleichtert den Vergleich verschiedener Proben in späteren Auswertungen. Der erzeugte Bericht enthält:

- Abbildungen der Probe: Originalbild, Binärmaske und finales Analysebild mit markierten Messregionen und Stichprobenpunkten,
- Ergebnisse der Flächenanalyse einschließlich prozentualer Graphenbedeckung und absoluten Pixelwerten,
- eine Tabelle mit allen generierten Stichprobenkoordinaten in μm,
- eine Übersicht der verwendeten Bildverarbeitungsparameter.

Die PDF-Datei wird automatisch im dafür vorgesehenen Auswertungsordner gespeichert, wobei der Dateiname aus der Probenbezeichnung und dem Erstellungsdatum generiert wird. Dies ermöglicht eine eindeutige Zuordnung und einen schnellen Zugriff auf vergangene Analysen.

2.3 Analyse von WS_2-Flake-Strukturen

Dieses Skript dient der automatisierten Auswertung von WITec-Bilddaten zur Charakterisierung von Wolframdisulfid-(WS_2)-Proben. Ziel ist es, die Flächenbedeckung zu bestimmen sowie die Anzahl und mittlere Größe einzelner Flakes zu ermitteln. Hierzu wird das Bildmaterial segmentiert, um intakte und nicht bedeckte Bereiche zu unterscheiden, und anschließend eine quantitative Auswertung durchgeführt. Optional kann ein PDF-Bericht erstellt werden, der alle relevanten Ergebnisse sowie Abbildungen zusammenfasst.
Der schematische Ablauf ist in Abbildung 2.6 dargestellt.

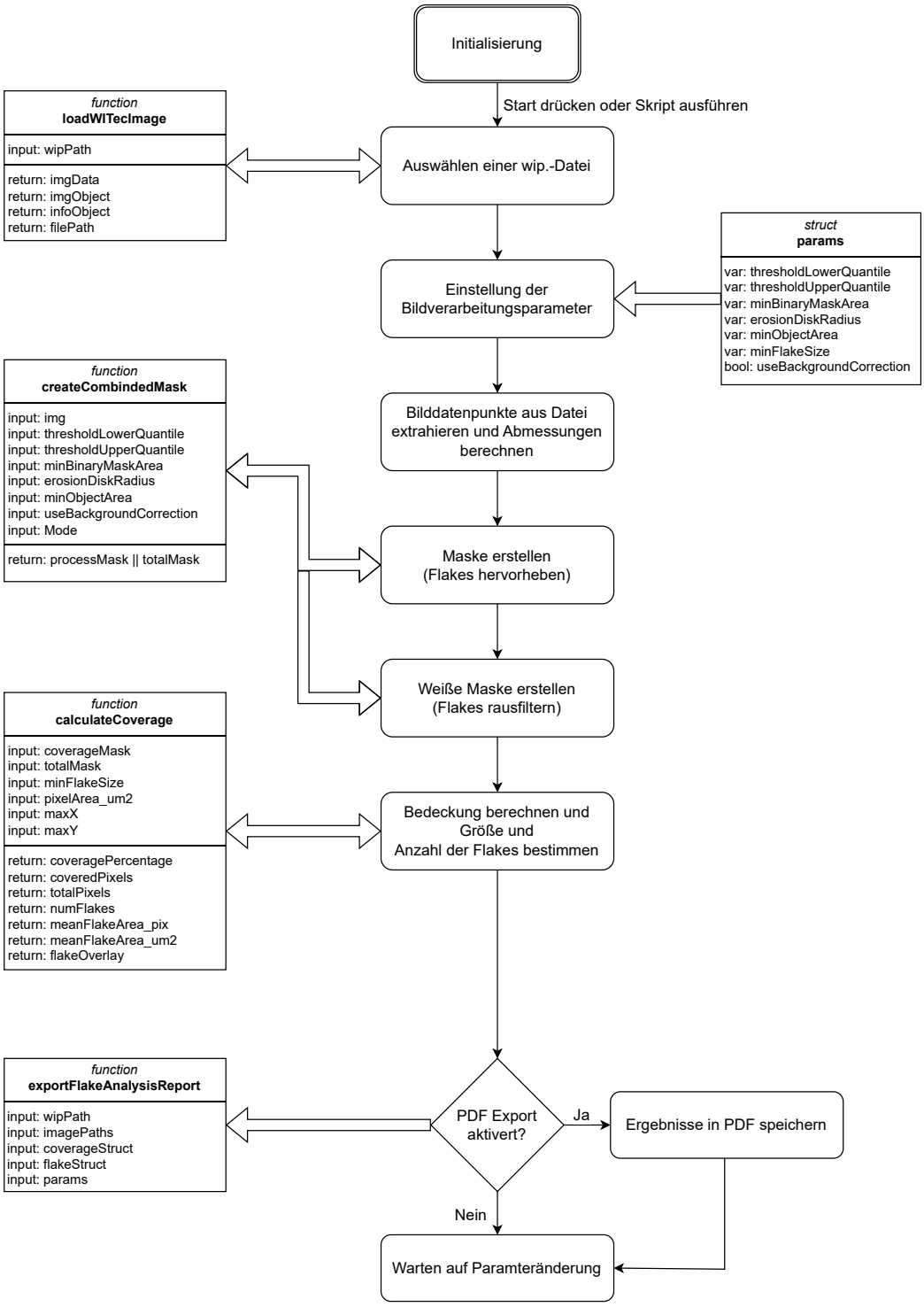


Abbildung 2.6: Ablauf der WS_2-Flake-Analyse im Überblick

1.–3. Initialisierung, Laden der Bilddaten und Festlegen der Parameter Die Schritte zur Initialisierung, zum Laden der WITec-Bilddaten sowie zur Festlegung der Bildverarbeitungsparameter entsprechen im Wesentlichen dem Vorgehen bei der Analyse der Graphen-Oberflächenbedeckung (Abschnitt 2.2, Punkte 1–3). Auch hier werden die WITio-Toolbox für den Datenimport, eine `struct`-basierte Parameterverwaltung sowie die physikalische Skalierung der Bilddaten eingesetzt.
Abbildung 2.7 zeigt ein typisches Originalbild einer WS_2-Probe, wie es nach dem Import aus den WITec-Daten vorliegt. Es ist erkennbar, dass der Gesamtkontrast gering ist und sich ein Helligkeitsgradient von links nach rechts abzeichnet.

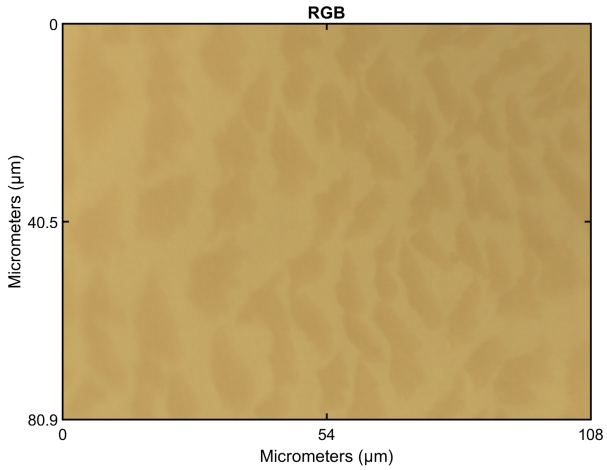


Abbildung 2.7: Originalbild einer WS_2-Probe

4. Erstellung der Binärmaske (`createCombinedMask`, Modus `default`) Im Unterschied zur Graphen-Analyse weist das Ausgangsbild bei der WS_2-Flake-Analyse einen insgesamt sehr geringen Kontrast auf, wobei der Kontrast von links nach rechts deutlich abnimmt (vgl. Abbildung 2.7). Um diesen Helligkeitsgradienten zu kompensieren, wird vor der eigentlichen Schwellenwertberechnung eine Hintergrundkorrektur mittels großflächiger Gauß-Glättung durchgeführt. Anschließend erfolgt eine Quantilsanalyse, um einen geeigneten Schwellwert für die Segmentierung zu bestimmen. Kleine Störstrukturen werden entfernt, und eine Erosion reduziert Randartefakte.
Das Ergebnis dieser Verarbeitung ist in Abbildung 2.8 dargestellt. Hier sind die von WS_2 bedeckten Bereiche deutlich von den freiliegenden Flakes zu unterscheiden.

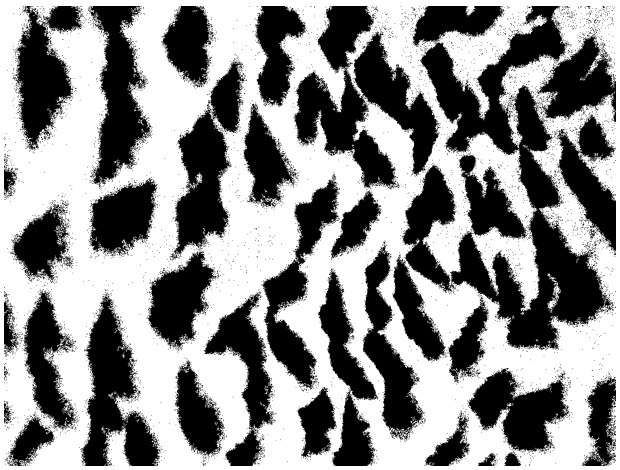


Abbildung 2.8: Erzeugte Binärmaske der WS_2-Probe nach Hintergrundkorrektur und Segmentierung

5. Erstellung der Gesamtmaske (`createCombinedMask`, Modus `reconstruct`) Zur Bestimmung der Gesamtfläche wird eine zweite Maske erstellt, in der die Probe vollständig rekonstruiert ist. Diese dient als Referenz, um die Bedeckung zu berechnen und Flakes innerhalb der Probenfläche zu identifizieren.

6. Bedeckungs- und Flake-Analyse (`calculateGrapheneCoverageAndFlakes`) Die Funktion `calculateGrapheneCoverageAndFlakes` vergleicht die zuvor erstellte Binärmaske der bedeckten Bereiche mit der Gesamtmaske der Probe, um eine quantitative Flächenanalyse durchzuführen. Dabei werden folgende Kennwerte ermittelt:

- **Bedeckungsgrad** – Anteil der von WS_2 bedeckten Fläche in Prozent, berechnet als Verhältnis von bedeckten Pixeln zur Gesamtfläche der Probe.
- **Anzahl der Flakes** – Anzahl der einzelnen, nicht bedeckten Inseln innerhalb der Gesamtprobe, die als Defekte oder unbedeckte Bereiche interpretiert werden.
- **Mittlere Flakefläche** – durchschnittliche Größe der detektierten Flakes, sowohl in Pixeln als auch in μm^2 (unter Verwendung der aus den Metadaten bestimmten physikalischen Pixelgröße).

Die Erkennung der Flakes erfolgt, indem alle nicht bedeckten Bereiche innerhalb der Gesamtmaske als potenzielle Flakes markiert werden. Zu kleine Strukturen (unterhalb einer einstellbaren Mindestgröße) werden entfernt, und verbleibende Objekte werden mithilfe der `regionprops`-Funktion hinsichtlich ihrer Fläche ausgewertet.
Zusätzlich wird ein farbiges Overlay-Bild erzeugt, in dem:

- bedeckte Bereiche **weiß**,

- Flakes **rot**

dargestellt sind. Dieses Overlay ermöglicht es, die in Abbildung 2.7 gezeigte Probe mit den erkannten Flakes visuell zu vergleichen und so die Qualität der WS_2-Bedeckung intuitiv zu beurteilen.

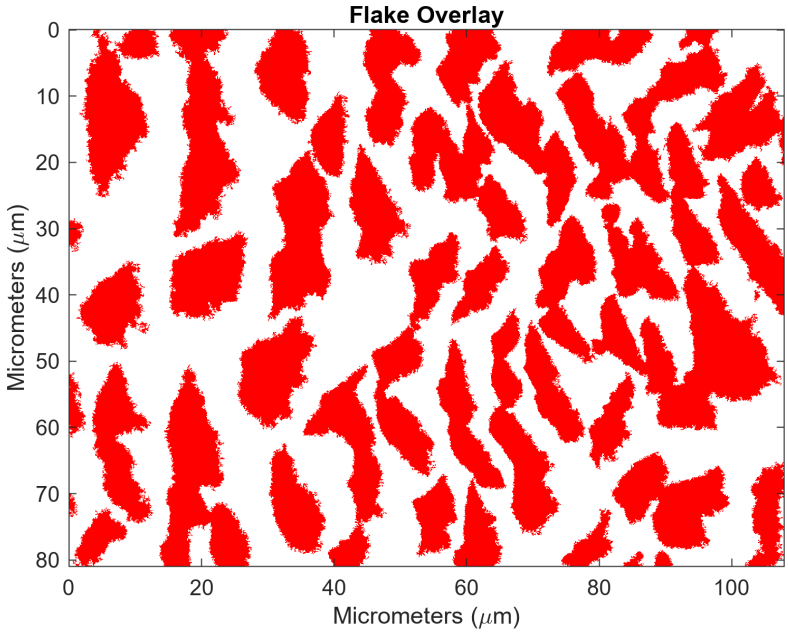


Abbildung 2.9: Flakes herausgestellt

7. PDF-Export (`exportFlakeAnalysisReport`) Der abschließende Schritt der WS_2-Flake-Analyse entspricht im Wesentlichen dem PDF-Export der Graphen-Oberflächenanalyse (siehe Abschnitt 2.2, Schritt 8). Auch hier wird mit Hilfe des `MATLAB Report Generator` ein automatisch erstellter Bericht generiert, der alle wesentlichen Analyseergebnisse in strukturierter Form zusammenfasst.
Der Bericht enthält:

- das Originalbild der Probe,
- die erzeugte Binärmaske,
- das farbige Flake-Overlay,
- Tabellen mit den Kennwerten der Bedeckungs- und Flake-Analyse,
- sowie die bei der Auswertung verwendeten Bildverarbeitungsparameter.

Die Struktur und das Layout des Berichts sind analog zum vorherigen Skript, jedoch wurden die Tabellen- und Bildbeschriftungen an die spezifischen Metriken der Flake-Analyse angepasst.

2.4 Spektrale Charakterisierung von Raman-Messdaten

Dieses Skript wertet WITec-Projektdateien (`*.wip`) aus, um anhand der spektralen Intensität im (vorgegebenen) Graphen-Peakbereich eine binäre Maske zu erzeugen und daraus den Bedeckungsgrad zu bestimmen. Der schematische Ablauf ist in Abbildung 2.10 zusammengefasst.

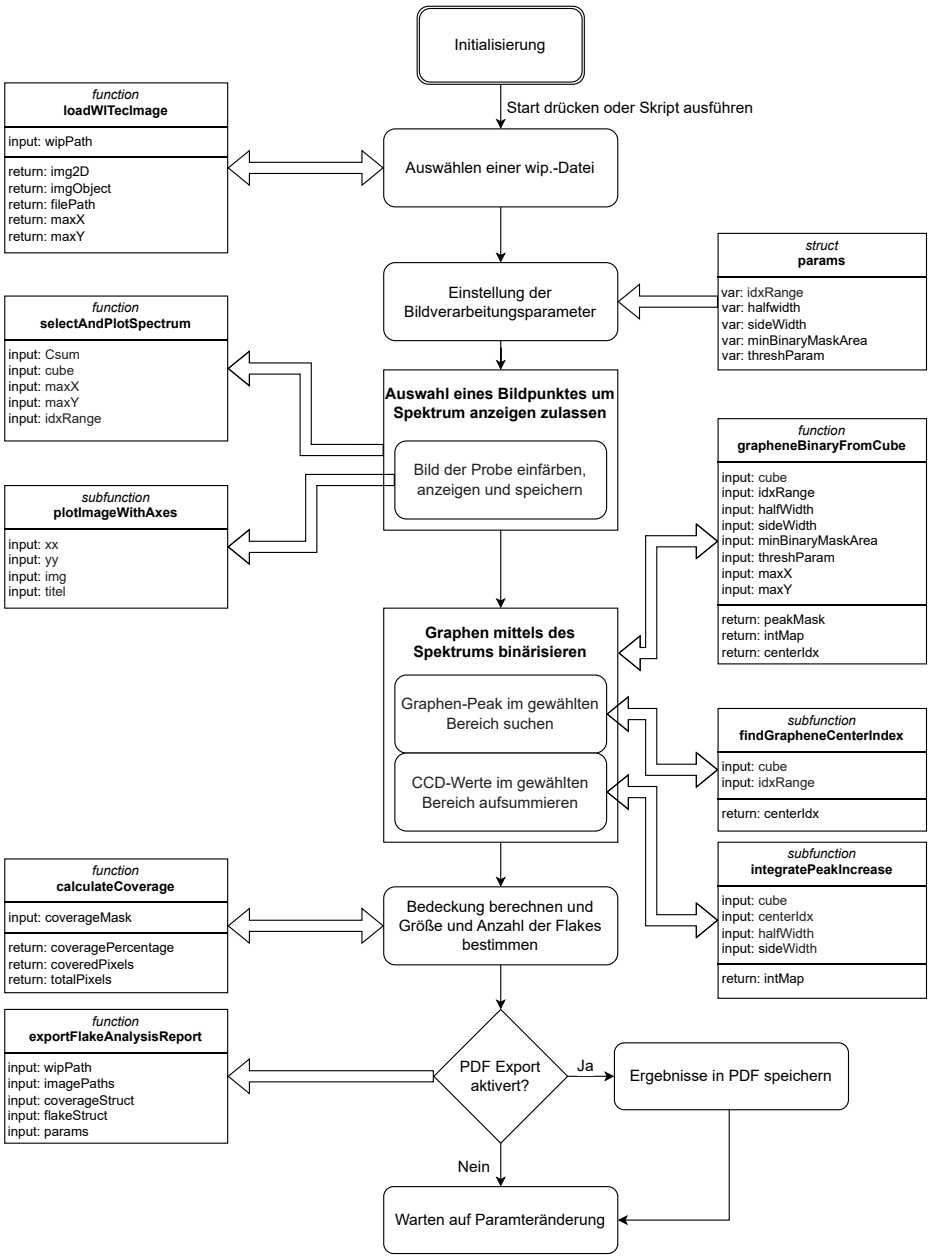


Abbildung 2.10: Ablauf der spektralen Bild- & Maskenerzeugung für Graphen-Proben

1 bis 3 Initialisierung, Laden der Daten und Parameterwahl Die Schritte orientieren sich am Vorgehen der vorherigen Skripte, unterscheiden sich jedoch in wichtigen Punkten: Es wird ein dreidimensionaler Datenwürfel $H \times W \times K$ geladen und korrekt orientiert, wobei K die spektrale Achse repräsentiert. Nach der Prüfung der WITio Toolbox und der Auswahl einer `.wip` Datei über den Projektmanager werden die physikalischen Skalen in x und y (in μm) wie zuvor aus den Metadaten bestimmt. Die spektrale Achse liegt in diesem Skript nicht als Raman Shift in cm^{-1} vor, sondern als Index.
Die Parameter werden in einer `struct` gespeichert und enthalten sowohl bildbezogene als auch spektrale Einstellungen, wie etwa den Indexbereich des erwarteten Graphen Peaks und den Schwellwert für die Maskenerstellung. Damit wird nicht nur der Datenimport vorbereitet, sondern auch die spätere spektrale Auswertung der einzelnen Bildpunkte über alle Spektralkanäle hinweg.

4. Vorschau und Spektrenprüfung (`selectAndPlotSpectrum`) Zur Überprüfung der korrekten Peaklage wird zunächst ein Summenbild (Integration über die Spektralachse) erzeugt und als Originalbild dargestellt. Durch Klicken auf einen Bildpunkt kann das zugehörige Spektrum eingeblendet werden. Dies ermöglicht dem Anwender zu prüfen, ob der im Skript definierte Indexbereich (`idxRange`) tatsächlich den gesuchten Graphen Peak umfasst. Die x-Achse kann hier nicht als Raman Shift in cm^{-1} dargestellt werden, da die Skalierung in den Datensätzen nur als einheitsloser Index vorliegt. Abbildung 2.11 zeigt ein typisches Originalbild, während Abbildung 2.12 ein typisches Graphen-Spektrum darstellt, bei dem der gesuchte Peak (2D-Band) im Indexbereich hervorgehoben ist.

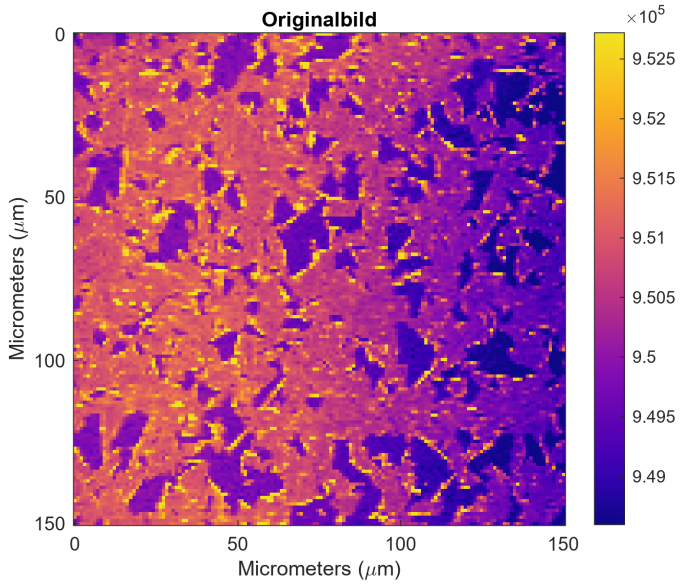


Abbildung 2.11: Originalbild (Summenintensität über die Spektralachse)

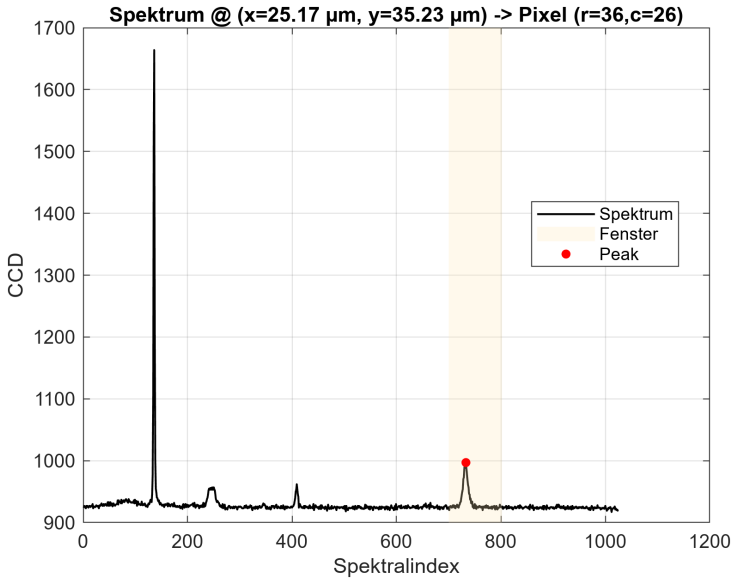


Abbildung 2.12: Graphen-Spektrum eines Pixels mit markiertem Peak im Indexbereich

5. Peakzentrierung und Erstellung der Intensitätskarte Die nachfolgende Binärbildung basiert auf einer präzisen Bestimmung der Lage und Stärke des Graphen-Peaks im gewählten Indexbereich:

- **Bestimmung des Peakzentrums** (`findGrapheneCenterIndex`): Aus allen Spektren wird zunächst ein globales Mittelspektrum berechnet, um Rauscheffekte einzelner Pixel zu unterdrücken. Innerhalb des vom Anwender vorgegebenen Indexbereichs (`idxRange`) wird dieses Spektrum geglättet und das Maximum gesucht. Der gefundene Index entspricht der zentralen Lage des 2D-Peaks von Graphen und dient als Referenz für die Integration.
- **Erstellung der Integrationskarte** (`integratePeakIncrease`): Für jedes Pixel im Bild wird die Spektralintensität in einem Fenster um das Peakzentrum (Breite $2 \cdot$`halfWidth`$+1$) summiert. Zur Unterdrückung des Untergrundes wird die mittlere Intensität zweier Seitenbereiche (`sideWidth` links und rechts vom Peak) berechnet und skaliert vom Peaksignal abgezogen. Das Resultat ist die Intensitätskarte `intMap`, die an jedem Ort die Netto-Peakstärke (über der Baseline) wiedergibt und damit eine Grundlage für die spätere Segmentierung bildet.

6. Maskenerzeugung aus Spektren (`grapheneBinaryFromCube`) Die Intensitätskarte `intMap` wird auf $[0, 1]$ normiert und mittels eines globalen Schwellwerts `threshParam` binarisiert. Kleine Inseln werden durch `bwareaopen` entfernt (`minBinaryMaskArea`). Das Ergebnis ist die Binärmaske `peakMask`, in der *intakte* Graphenbereiche weiß sind. Abbildung 2.13 zeigt ein Beispiel der resultierenden Maske.

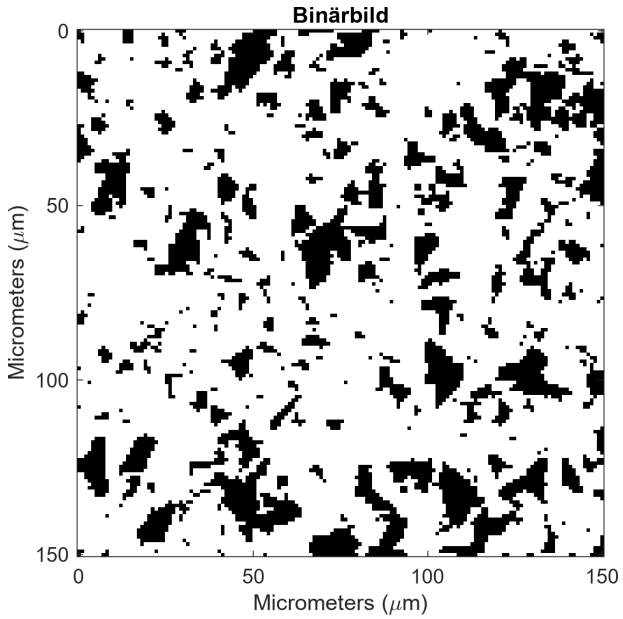


Abbildung 2.13: Binärmaske aus spektraler Peakintensität: Weiß = intakte Bereiche

7. Bedeckungsanalyse (`calculateCoverage`) Die Vorgehensweise entspricht grundsätzlich der im ersten Skript verwendeten Funktion, jedoch ist hier keine gesonderte Randbehandlung notwendig. Die berechnete Binärmaske wird direkt mit einer rein weißen Referenzfläche gleicher Größe verglichen. Aus dem Verhältnis der weißen Pixel in der Maske zur Gesamtzahl der Pixel ergibt sich der prozentuale Bedeckungsgrad.

8. PDF-Export (`exportCoverageReport`) Der PDF-Export entspricht in Struktur und Zweck den vorherigen Berichten: Er enthält eine Titelseite mit Originalbild, ein Kapitel mit Abbildungen (Original und Binärmaske), eine Tabelle mit den Ergebnissen der Bedeckungsanalyse sowie die verwendeten Auswertungsparameter. Unterschiede ergeben sich vor allem durch die spezifische Terminologie dieses Skripts, wie etwa das Peakfenster oder die Baseline-Seitenbänder.

3 Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde eine modulare Softwareumgebung zur automatisierten Auswertung von Raman-Messdaten aus WITec-Systemen entwickelt. Der Schwerpunkt lag auf der Analyse von Graphen- und WS_2-Proben hinsichtlich Oberflächenbedeckung, struktureller Integrität und spektraler Eigenschaften. Dazu wurden drei zentrale MATLAB-Skripte realisiert:

- **Analyse der Graphen-Oberflächenbedeckung:** Erkennung intakter Graphenbereiche, Markierung geeigneter Messregionen sowie quantitative Flächenanalyse.
- **Analyse von WS_2-Flake-Strukturen:** Identifikation einzelner Flakes, statistische Auswertung ihrer Anzahl und Größe sowie visuelle Hervorhebung im Bild.
- **Spektrale Charakterisierung:** Peakzentrierung im Graphen-spezifischen Spektralbereich, Erstellung einer Intensitätskarte und Ableitung der Bedeckung auf Basis der spektralen Signatur.

Alle Skripte nutzen einheitliche Grundfunktionen (z. B. Laden der WITec-Daten, PDF-Export), unterscheiden sich jedoch in den angewendeten Bild- und Spektralverarbeitungsmethoden. Durch die modulare Struktur können neue Analyseverfahren vergleichsweise einfach integriert werden.

Ausblick

Künftige Erweiterungen der Software könnten eine automatische Anpassung der Verarbeitungsparameter, die Integration einer benutzerfreundlichen Oberfläche sowie die Auswertung zusätzlicher Raman-Banden umfassen. Dadurch ließe sich neben der Bedeckung auch die Materialqualität noch präziser erfassen.
Die vorgestellte Lösung bildet bereits eine robuste Grundlage für die reproduzierbare Analyse von Raman-Daten und kann mit den genannten Erweiterungen zu einem flexiblen Werkzeug für verschiedene Materialien weiterentwickelt werden.

Literaturverzeichnis

[1] S. Ullah, X. Yang, H. Q. Ta, M. Hasan, A. Bachmatiuk, K. Tokarska, B. Trzebicka, L. Fu, and M. H. Rummeli, "Graphene transfer methods: A review," *Nano Research*, vol. 14, no. 11, pp. 3756–3772, 2021.