

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ СЛОЕВ Zn_xMg_yO С ПОМОЩЬЮ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ**Ю.В. Никитюк, А.В. Семченко, В.В. Сидский, К.Д. Данильченко, В.А. Прохоренко***Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины***PREDICTION OF THE PROPERTIES OF SEMICONDUCTOR Zn_xMg_yO SOL-GEL LAYERS USING ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS****Y.V. Nikitjuk, A.V. Semchenko, V.V. Sidsky, K.D. Danilchenko, V.A. Prohorenko***Francisk Skorina Gomel State University*

Аннотация. С использованием искусственных нейронных сетей выполнено прогнозирование свойств полупроводниковых золь-гель пленок состава Zn_xMg_yO . Для формирования обучающего массива данных и массива данных для тестирования нейронных сетей золь-гель методом были сформированы пленки $ZnO : Mg$. Измерение фотоэлектрических характеристик золь-гель покрытий было выполнено на автоматизированном базовом лазерном испытательном комплексе в соответствии с ГОСТ-1772-88. Эксперименты были выполнены для 150 вариантов входных параметров, 135 из которых были использованы для обучения нейронных сетей. В работе выполнено исследование влияния архитектуры нейронных сетей на точность прогнозирования свойств полупроводниковых золь-гель пленок Zn_xMg_yO .

Ключевые слова: нейронная сеть, золь-гель метод, тонкие пленки.

Для цитирования: Прогнозирование свойств полупроводниковых золь-гель слоев Zn_xMg_yO с помощью искусственных нейронных сетей / Ю.В. Никитюк, А.В. Семченко, В.В. Сидский, К.Д. Данильченко, В.А. Прохоренко // Проблемы физики, математики и техники. – 2022. – № 1 (50). – С. 28–32. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_1_50_28

Abstract. Using artificial neural networks, the properties of semiconductor sol-gel layers of Zn_xMg_yO were predicted. To form a training data set and a data set for testing neural networks by the sol-gel method, layers were formed based on $ZnO : Mg$ films. The measurement of the photoelectric characteristics of the sol-gel coatings was carried out on an automated basic laser testing complex in accordance with National Standard-1772-88. The experiments were performed for 150 input parameters, 135 of which were used to train neural networks. In this work, we studied the influence of the architecture of neural networks on the accuracy of predicting the properties of Zn_xMg_yO semiconductor sol-gel layers.

Keywords: neural network, sol-gel method, thin films.

For citation: Prediction of the properties of semiconductor Zn_xMg_yO sol-gel layers using artificial neural networks / Y.V. Nikitjuk, A.V. Semchenko, V.V. Sidsky, K.D. Danilchenko, V.A. Prohorenko // Problems of Physics, Mathematics and Technics. – 2022. – № 1 (50). – P. 28–32. – DOI: https://doi.org/10.54341/20778708_2022_1_50_28 (in Russian)

Введение

В последнее время ведется активное изучение материалов для датчиков ультрафиолетового излучения [1]–[2]. УФ-датчики обеспечивают возможность решения ряда задач медицинского, промышленного и экологического направлений. Широкое использование УФ-датчиков определено отсутствием их реакции на солнечное излучение и излучения от нагретых частей оборудования. Таким образом поиск и создание новых материалов для УФ-датчиков является актуальной задачей.

Известно, что тонкие пленки на основе ZnO обладают фоточувствительностью, что делает возможным их использование при формировании солнечных элементов и светоизлучающих диодов [3]–[6]. Перспективными являются пленки с селективной фоточувствительностью состава

Zn_xMg_yO , полученные золь-гель методом. Одной из основных характеристик полупроводниковых материалов является ширина запрещенной зоны. Для варьирования ширины запрещенной зоны тонкие пленки ZnO легируют различными металлами, в том числе магнием. Радиус иона Mg^{2+} (0,57 Å) сравним с радиусом иона Zn^{2+} (0,60 Å), что делает магний подходящим в качестве легирующего элемента для замены Zn в его решетке и изменения ширины запрещенной зоны [7]–[11].

В настоящее время искусственные нейронные сети получили широкое применение в различных областях науки и техники [12]–[17]. В данной статье искусственные нейронные сети были применены для прогнозирования свойств полупроводниковых золь-гель пленок Zn_xMg_yO .

1 Методика получения золь-гель слоев ZnMgO

Золь-гель методом с использованием раздельного гидролиза были получены пленки ZnO : Mg. В качестве метода нанесения применялся метод центрифугирования (spin-coating). В качестве исходных материалов были использованы дигидрат ацетата цинка ($ZnAc$) [$Zn(CH_3COO)_2 \times 2H_2O$], ацетат магния ($Mg(CH_3COO)_2$), изопропиловый спирт, моноэтаноламин (МЕА) [C_2H_7NO]. Плёнкообразующий раствор (ПОР) был приготовлен следующим образом: ацетат цинка и ацетат магния отдельно растворяли в изопропиловом спирте и перемешивали при $60^\circ C$ в течение 10 минут. Затем в него был добавлен моноэтаноламин при молярном соотношении: МЕА / ZnAc 1 : 1 и H_2O / ZnAc 2 : 1 соответственно. Аналогично изготавливался золь на основе ацетата магния. Затем золи смешивались в различных концентрациях для получения пленок с различным соотношением компонентов (1 : 1, 1 : 2 и 1 : 5). В золь дополнительно была добавлена азотная кислота. Осаждение пленки производилось методом центрифугирования со скоростью вращения 2000 об/мин в течение 40 секунд с последующей сушкой каждого слоя при $250^\circ C$ в течение 5 минут. Окончательную термообработку производили при температурах $450^\circ C$ в течение 60 минут. Подложками при осаждении слоев для измерения вольтамперных характеристик служили кремниевые пластины.

2 Методика измерений фотоэлектрических характеристик

Измерение фототока проводилось на автоматизированном базовом лазерном испытательном комплексе (рисунок 2.1) в соответствии с ГОСТ-17772-88 [18].

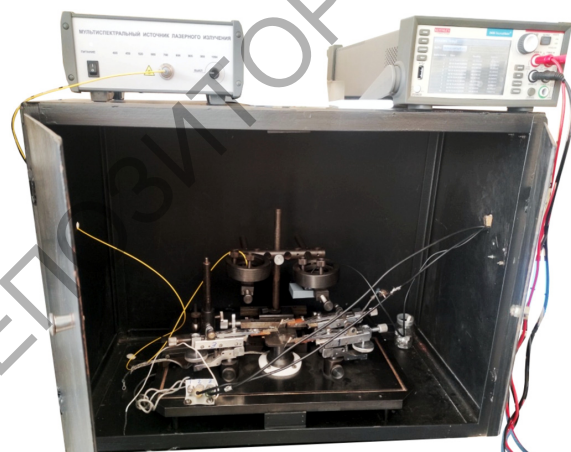


Рисунок 2.1 – Внешний вид светоизолирующего бокса с зондовой системой для измерения электрических и фотоэлектрических характеристик некорпусированных структур

Оптический модуль комплекса включает в себя систему позиционирования испытуемого образца, мультиспектральный источник лазерного излучения, представляющий собой набор из 9 лазерных диодов с длинами волн 405, 450, 520, 660, 780, 808, 905, 980 и 1064 нм с общим оптоволоконным выводом и платами управления, а также с калиброванной мощностью излучения порядка 2 мВт [19]. В качестве источника УФ (278 нм) использовался светодиод ТО-3535BC-UVC265-30-6V-E мощностью 300 мкВт, размещенный в специализированной оснастке.

3 Применение нейронной сети

Искусственные нейронные сети являются адаптивными системами, которые изменяют свою структуру на основе информации, проходящей через них при обучении. Широкое использование искусственных нейронных сетей определяется тем, что они создавались для нахождения нелинейных зависимостей в многомерных массивах данных. Их особенностью является то, что они не программируются, а обучаются на множестве данных [13], [15].

На рисунке 3.1 представлена блок-схема процедуры моделирования с помощью искусственной нейронной сети (ИНС).

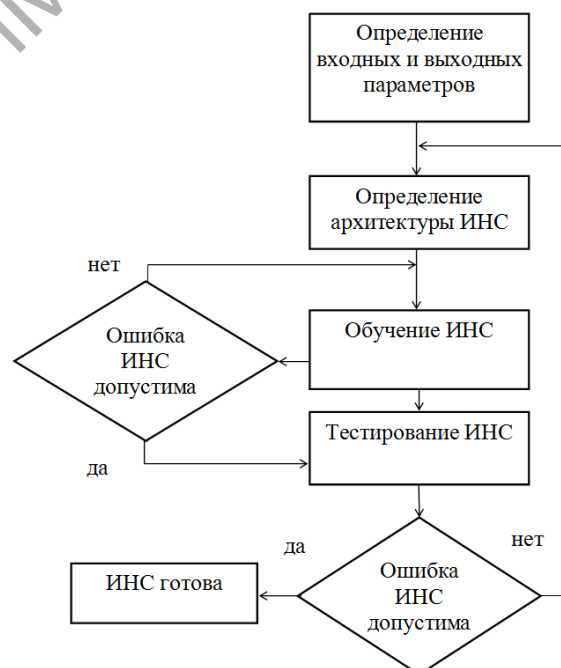


Рисунок 3.1 – Блок-схема процедуры моделирования с использованием нейронной сети

Обучающая и тестовая выборки размером в 135 и 15 наборов данных соответственно были сформированы в результате экспериментальных исследований по методикам, приведенным выше. Параметры тестовой выборки представлены в таблице 3.1.

Таблица 3.1 – Тестовый набор данных

№	Мольное отношение		Напряжение смещения	Длина волны	Сила тока	Ширина запрещенной зоны
	Zn	Mg	U , В	λ , нм	I , А	E_g , эВ
1	1	2	8,4	376,8	-0,00144	3,21
2	1	2	7,2	371,6	-0,00168	3,21
3	1	5	-14,4	280,6	-0,00588	4,77
4	1	2	1,8	348,2	-0,00276	3,21
5	1	5	-6,6	314,4	-0,00432	4,77
6	1	5	-1,2	337,8	-0,00324	4,77
7	1	5	10,8	387,2	-0,00096	4,77
8	1	1	7,8	374,2	-0,00156	3,28 / 4,72
9	1	5	-0,6	340,4	-0,00312	4,77
10	1	1	9,6	382,0	-0,00120	3,28 / 4,72
11	1	5	-11,4	293,6	-0,00528	4,77
12	1	1	-9,6	301,4	-0,00492	3,28 / 4,72
13	1	1	-13,8	283,2	-0,00576	3,28 / 4,72
14	1	1	6,6	369,0	-0,00180	3,28 / 4,72
15	1	1	14,4	402,8	-0,00024	3,28 / 4,72

Таблица 3.2 – Результаты оценки нейросетевой модели для прогнозирования селективной фоточувствительности

№	Архитектура сети	R^2	MAE	$RMSE$	$MAPE$	
1	$\frac{a}{b}$	[3-3-3-1]	0,9998	1,845e-05	2,656e-05	2,6
			0,9997	2,298e-05	2,977e-05	1,8
2	$\frac{a}{b}$	[3-5-3-1]	0,9999	1,036e-05	1,227e-05	0,7
			0,9999	8,770e-06	1,068e-05	0,6
3	$\frac{a}{b}$	[3-10-3-1]	0,9999	1,487e-05	2,042e-05	1,0
			0,9998	1,644e-05	2,149e-05	1,0
4	$\frac{a}{b}$	[3-20-3-1]	0,9997	2,574e-05	3,321e-05	3,3
			0,9999	1,484e-05	2,028e-05	1,3
5	$\frac{a}{b}$	[3-20-10-3-1]	0,9999	1,151e-05	1,424e-05	1,2
			0,9999	9,804e-06	1,129e-05	0,5
6	$\frac{a}{b}$	[3-30-10-3-1]	0,9999	1,752e-05	2,073e-05	0,8
			0,9998	1,958e-05	2,416e-05	1,0
7	$\frac{a}{b}$	[3-40-10-3-1]	0,9999	1,642e-05	2,162e-05	2,3
			0,9999	1,132e-05	1,695e-05	1,3
8	$\frac{a}{b}$	[3-30-20-3-1]	0,9998	2,062e-05	2,479e-05	1,2
			0,9999	1,467e-05	1,856e-05	0,7
9	$\frac{a}{b}$	[3-40-20-3-1]	0,9999	9,133e-06	1,160e-05	0,4
			0,9999	1,119e-05	1,611e-05	0,4
10	$\frac{a}{b}$	[3-50-20-3-1]	0,9998	1,319e-05	2,684e-05	0,6
			0,9999	4,467e-06	6,226e-06	0,3
11	$\frac{a}{b}$	[3-60-20-3-1]	0,9999	1,266e-05	1,491e-05	1,3
			0,9999	1,387e-05	1,528e-05	0,8

Для прогнозирования свойств полупроводниковых золь-гель слоев ZnMgO были применены полносвязанные нейронные сети прямого распространения с различными архитектурами, созданные в открытой программной библиотеке для машинного обучения TensorFlow [14].

При создании сетей для прогнозирования селективной фоточувствительности использовалась функция активации ReLu и оптимизатор Adam. Сети формировались с функцией потерь mse.

Количество эпох при обучении сетей равнялось 100, а их архитектура изменялась (таблица 3.2).

Для оценки эффективности работы нейронных сетей были использованы следующие критерии:

– коэффициент детерминации:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (d_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (d_i - \bar{d})^2},$$

– средняя абсолютная ошибка (англ. Mean Absolute Error, *MAE*):

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |d_i - y_i|,$$

– среднеквадратичная ошибка (англ. Root Mean Square Error, *RMSE*):

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (d_i - y_i)^2},$$

– средняя абсолютная процентная ошибка (англ. Mean Absolute Percentage Error, *MAPE*):

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{d_i - y_i}{d_i} \right| \cdot 100,$$

где d_i – желаемый выход сети, y_i – реальный выход сети.

Результаты оценки созданных нейронных сетей для тестовой и обучающей выборки приведены в таблице 3.2. В таблице 3.2 буквами *a* и *b* обозначены результаты, полученные для тестовой и обучающей выборки соответственно.

При тестировании лучшие результаты показал вариант 7 конфигурации нейронных сетей с тремя скрытыми слоями, обеспечивающий значения R^2 и *MAPE*, равные 0,9999 и 0,4% соответственно.

При формировании нейронных сетей, обеспечивающих прогнозирование ширины запрещенной зоны полупроводниковых золь-гель пленок Zn_xMg_yO , для решения задачи многоклассовой классификации применялся оптимизатор Adam, при этом для скрытых слоев использовалась функция активации ReLu, а для выходного слоя функция активации softmax. Нейронные сети создавались с функцией потерь mse для скрытых слоев и с функцией потерь categorical_crossentropy для выходного слоя. Количество эпох при обучении сетей равнялось 50 и 100. Архитектура искусственных нейронных сетей изменялась (таблица 3.3).

Таблица 3.2 – Результаты оценки нейросетевой модели для прогнозирования ширины запрещенной зоны

N	Архитектура сети	Эпохи	Точность	
1	a	[3-1-3]	50	0,6
	b		50	0,7
2	a	[3-1-3]	100	0,8
	b		100	0,8
3	a	[3-2-3]	50	0,8
	b		50	0,7
4	a	[3-2-3]	100	0,9
	b		100	0,9
5	a	[3-3-3]	50	0,9
	b		50	0,8
6	a	[3-3-3]	100	1
	b		100	1

Для оценки эффективности работы нейронных сетей использовалась доля правильных ответов. Результаты оценки созданных нейронных сетей для тестовой и обучающей выборки приведены в таблице 3.3. В таблице 3.3 буквами *a* и *b* обозначены результаты, полученные для тестовой и обучающей выборки соответственно.

При тестировании лучшие результаты были получены с использованием 6 варианта конфигурации нейронных сетей с количеством эпох обучения равном 100. Нейронная сеть этого варианта без ошибок отработала на тестовой и обучающей выборках.

Заключение

В работе показана возможность определения селективной фоточувствительности и ширины запрещенной зоны полупроводниковых золь-гель пленок Zn_xMg_yO с использованием нейронных сетей. В результате численного эксперимента определены архитектуры нейронных сетей, обеспечивающие лучшие результаты при прогнозировании свойств данного материала. Для прогнозирования ширины запрещенной зоны оказалось достаточным использование нейронной сети с одним скрытым слоем, а для определения селективной фоточувствительности лучшие результаты были получены для нейронных сетей с несколькими скрытыми слоями. При этом средняя абсолютная процентная ошибка при определении силы тока составила 0,4%, а прогнозирование ширины запрещенной зоны выполнено без ошибок при использовании нейронных сетей с архитектурой [3-40-20-3-1] и [3-3-3] соответственно.

ЛИТЕРАТУРА

1. Liu, K. ZnO-Based Ultraviolet Photodetectors / K. Liu, M.Sakurai, M. Aono // Sensors. – 2010. – Vol. 10. – P. 8604–8634.
2. Gradient bandgap narrowing in severely deformed ZnO nanoparticles / Q. Yuanshen [et al.] // Materials Research Letters. – 2021. – Vol. 9. – P. 58–64.
3. Effect of magnesium dopant on the structural, morphological and electrical properties of ZnO nanoparticles by sol-gel method / S.J. Priscilla [et al.] // Materials Today: Proceedings. – 2021. – Vol. 36, Part 4. – P. 793–796. – DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.07.005>
4. Tailoring microstructure and optical properties of MgZnO film on glass by substrate temperature / K. Gu [et al.] // Materials Letters. – 2020. – Vol. 278. – P. 128416.
5. A comparative analysis for effects of solvents on optical properties of Mg doped ZnO thin films for optoelectronic applications / F. Baig, M.W. Ashraf, A. Asif, M. Imran // Optik. – 2020. – Vol. 208. – P. 164534.

6. *Magnesium-doped zinc oxide nanorod-nanotube semiconductor / p-silicon heterojunction diodes* / Y. Caglar [et al.] // *Applied Physics A*. – 2016. – Vol. 122. – Article number 733. – DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-016-0251-0>
7. *Novel sputtering method to obtain wide band gap and low resistivity in as-deposited magnesium doped zinc oxide films* / M. Loeza-Poot [et al.] // *Materials Science in Semiconductor Processing*. – 2019. – Vol. 104. – P. 104646. – DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2019.104646>
8. *Maensiri, S.* Synthesis and optical properties of nanocrystalline ZnO powders by a simple method using zinc acetate dihydrate and poly (vinyl pyrrolidone) / S. Maensiri, P. Laokul, V. Promarak // *Journal of Crystal Growth*. – 2006. – Vol. 289. – P. 102–106.
9. *Beyer, W.* Transparent conducting oxide films for thin film silicon / W. Beyer, J. Hupkes, H. Stiebig // *Thin Sol. Films*. – 2007. – № 516. – P. 147.
10. *Structural and Optical Properties of Mg Doped ZnO Thin Films Deposited by DC Magnetron Sputtering* / A.Sh. Asvarov [et al.] // *Journal of Nano- and Electronic Physics*. – 2016. – Vol. 8. – P. 04053.
11. *Effects of oxygen / argon ratio and annealing on structural and optical properties of ZnO thin films* / B. Zhou [et al.] // *Applied Surface Science*. – 2012. – Vol. 258. – P. 5759–5764. – DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2012.02.088>
12. *A review on applications of artificial intelligence in modeling and optimization of laser beam machining* / A.N. Vakhtiyari [et al.] // *Optics & Laser Technology*. – 2021. – Vol. 135. – P. 1–18.
13. *Головко, В.А.* Нейросетевые технологии обработки данных: учеб. пособие / В.А. Головко, В.В. Краснопрошин. – Минск: БГУ, 2017. – 263 с.
14. *Шолле, Ф.* Глубокое обучение на Python / Ф. Шолле. – СПб.: Питер, 2018. – 400 с.
15. *Кирьянов, И.И.* Прогнозирование химических сдвигов ЯМР ^{13}C производных фуллерена C_{60} с использованием искусственных нейронных сетей: автореферат дис. ... канд. физ.-мат. наук: Уфа, 2021. – 24 с.
16. *Identification of crack-like defects in elastic structural elements on the basis of evolution algorithms* / A.A. Krasnoshchekov [et al.] // *Russian Journal of Nondestructive Testing*. – 2011. – Т. 47, № 6. – С. 412–419.
17. *Применение искусственных нейронных сетей и метода конечных элементов для определения параметров обработки кварцевых золь-гель стекол эллиптическими лазерными пучками* / Ю.В. Никитюк [и др.] // *Проблемы физики, математики и техники*. – 2021. – № 3 (48). – С. 30–36.
18. *Фотоактивные свойства нанокмпозиционных покрытий $\text{ZnO}_x:\text{MgO}$, осажденных в вакууме и методом золь-гель синтеза* / В.В. Малютина-Бронская [и др.] // *Проблемы физики, математики и техники*. – 2021. – № 2 (47). – С. 39–44.
19. *Автоматизированный базовый лазерный испытательный комплекс для тестирования перспективных видов полупроводниковых фотоприемников* / В.В. Малютина-Бронская [и др.] // Сб. материалов 13-й международной научно-технической конференции «Приборостроение – 2020» (18–20 ноября 2020 г., г. Минск, Беларусь). – Минск: БИТУ. – 2020. – С. 391–392.

Поступила в редакцию 26.01.2022.

Информация об авторах

Никитюк Юрий Валерьевич – к.ф.-м.н., доцент
Семченко Алина Валентиновна – к.ф.-м.н., доцент
Сидский Виталий Валерьевич – к.т.н., доцент
Данильченко Константин Дмитриевич – мл. науч. сотр.
Прохоренко Владислав Александрович – старший преподаватель