

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕЛЕКТИВНОЙ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ЗОЛЬГЕЛЬСЛОЕВ ZnMgO С ПОМОЩЬЮ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

<sup>1</sup>Никитюк Ю. В., <sup>1</sup>Семченко А. В.,

<sup>1</sup>Сидский В. В., <sup>1</sup>Данильченко К. Д.

<sup>1</sup>Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины,  
Гомель, Беларусь, [Nikitjuk@gsu.by](mailto:Nikitjuk@gsu.by)

В последние годы в мире активно изучаются материалы для датчиков ультрафиолетового (УФ) излучения [1–2]. Данные датчики позволяют решать ряд задач промышленного, медицинского и экологического характера. Широкое применение УФ-датчиков обусловлено отсутствием реакции на солнечное излучение и отсутствием влияния излучения от нагретых частей оборудования. Поиск и создание новых материалов для таких датчиков является актуальной задачей. Известно, что тонкие пленки на основе ZnO наряду с другими свойствами обладают фоточувствительностью, что делает возможным их применение при создании солнечных элементов и светоизлучающих диодов [3–6]. Перспективными для последующего применения являются пленки с селективной фоточувствительностью состава ZnMgO, полученные золь-гель методом. Одной из основных характеристик полупроводниковых материалов является ширина запрещенной зоны. Для варьирования ее ширины тонкие пленки ZnO легируют различными металлами, в том числе магнием [7–9]. 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 облегчения увеличения запрещенной зоны [7, 8].

Искусственные нейронные сети получили широкое применение в различных областях науки техники [9–14]. В данной работе искусственные нейронные сети использовались для определения селективной фоточувствительности полупроводниковых зольгельслоев ZnMgO.

Параметры тестовой выборки представлены в таблице 1. Для моделирования были использованы полносвязанные нейронные сети. Сети формировались в программной библиотеке для машинного обучения TensorFlow [14]. При создании сетей использовалась функ-

ция активации ReLu (Rectified Linear Unit), оптимизатор Adam, являющийся расширением алгоритма стохастического градиентного спуска.

**Таблица 1 – Тестовый набор данных**

N	Эквивалентные части насыщенных растворов		Напряжение смещения	Длина волны оптического излучения	Сила тока
	Zn	Mg			
1	1	5	14,4	402,8	-0,00024
2	1	2	-6,6	314,4	-0,00432
3	1	2	-14,4	280,6	-0,00588
4	1	2	-3,6	327,4	-0,00372
5	1	5	-12,0	291,0	-0,00540
6	1	2	-3,0	330,0	-0,00360
7	1	5	-14,4	280,6	-0,00588
8	1	5	7,8	374,2	-0,00156
9	1	5	7,2	371,6	-0,00168

На рисунке 1 представлена блок-схема процедуры моделирования с помощью искусственной нейронной сети (ИНС).

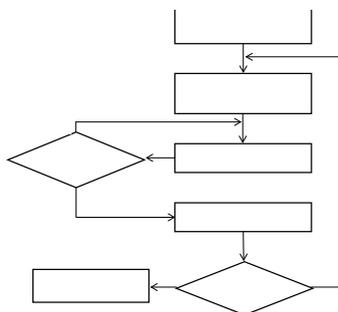


Рисунок 1 – Блок-схема процедуры моделирования с использованием нейронной сети

Для оценки эффективности работы нейронных сетей были использованы следующие критерии:

коэффициент детерминации

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

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)

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

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

Результаты тестирования созданных нейронных сетей приведены в таблице 2.

**Таблица 2 – Результаты тестирования нейронных сетей**

N	Архитектура сети	$R^2$	MAE	RMSE	MAPE
1	[3-10-4-2-1]	0,99793	$4,059 \cdot 10^{-5}$	$8,311 \cdot 10^{-5}$	11,1
2	[3-10-3-3-1]	0,99989	$1,501 \cdot 10^{-5}$	$1,870 \cdot 10^{-5}$	1,1
3	[3-10-4-3-1]	0,99997	$0,713 \cdot 10^{-5}$	$0,923 \cdot 10^{-5}$	0,8
4	[3-10-6-3-1]	0,99960	$2,501 \cdot 10^{-5}$	$0,359 \cdot 10^{-5}$	0,9
5	[3-10-8-3-1]	0,99977	$2,248 \cdot 10^{-5}$	$2,744 \cdot 10^{-5}$	1,3
6	[3-20-6-3-1]	0,99740	$3,720 \cdot 10^{-5}$	$9,289 \cdot 10^{-5}$	12,5
7	[3-20-8-3-1]	0,99977	$2,138 \cdot 10^{-5}$	$2,756 \cdot 10^{-5}$	1,5
8	[3-20-10-3-1]	0,99923	$3,516 \cdot 10^{-5}$	$5,073 \cdot 10^{-5}$	2,1
9	[3-20-12-3-1]	0,99830	$6,642 \cdot 10^{-5}$	$7,545 \cdot 10^{-5}$	4,1

Лучшие результаты при тестировании показал вариант 3 конфигурации нейронных сетей с тремя скрытыми слоями, обеспечивающий значения  $R^2$  и MAPE, равные 0,99997 и 0,8 % соответственно.

В работе показана возможность определения селективной фоточувствительности полупроводниковых зольгельслоев ZnMgO с использованием нейронных сетей. В результате численного эксперимента определена архитектура нейронной сети, обеспечивающая лучший результат.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. ZnO-Based Ultraviolet Photodetectors K. Liu, M.Sakurai, M. Aono // *Sensors* 2010, 10, 8604-8634.

2. Gradient bandgap narrowing in severely deformed ZnO nanoparticles / Yuanshen Qi [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*. – 2020; doi: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. – 128416.

5. Baig, F. 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. – 164534.

6. Magnesium-doped zinc oxide nanorod–nanotube semiconductor/p-silicon heterojunction diodes / Y. Caglar [et al.] // *Applied Physics A*. – Vol. 122. – 733; doi: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. – 104646. doi:10.1016/j.mssp.2019.104646.

8. Magnesium-doped zinc oxide nanorod–nanotube semiconductor/p-silicon heterojunction diodes / Y. Caglar [et al.] // *Applied Physics A*. – Vol. 122. – 733; doi:10.1007/s00339-016-0251-0.

9. 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. – 104646. doi:10.1016/j.mssp.2019.104646.

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:10.1016/j.apsusc.2012.02.088.

12. Головки В. А. Нейросетевые технологии обработки данных : учеб. пособие / В. А. Головки, В. В. Краснопрошин. – Минск : БГУ, 2017. – 263 с.

13. A. N. Bakhtiyari, Z. Wang, L. Wang, H. Zheng. “A review on applications of artificial intelligence in modeling and optimization of laser beam machining”, Optics & Laser Technology., Vol.135, pp 1–18 (2021).

14. Кирьянов И. И. Искусственные нейронные сети в установлении структуры производных фуллерена C60 – перспективных элементов наноэлектроники / Кирьянов И. И., Мукминов Ф. Х., Халилов Л. М. // Актуальные проблемы микро- и наноэлектроники – 2018. – С. 72–73.

15. Ю. В. Никитюк, А. Н. Сердюков, В. А. Прохоренко, И. Ю. Аушев. Применение искусственных нейронных сетей и метода конечных элементов для определения параметров обработки кварцевых золь-гель стекол эллиптическими лазерными пучками Проблемы физики, математики и техники, № 3 (48), 2021 С. 30–36.

16. F. Chollet. Deep Learning with Python / Manning Publications Co., 2018, pp. 400.