YARIMKEÇİRİCİ NANOSİSTEMLƏRDƏ MAŞIN ÖYRƏNMƏSİ ALQORİTMLƏRİNİN NƏZƏRİ ƏSASLARI VƏ TƏTBİQİ İMKANLARI

[1]H.B. İBRAHİMOV, [2]K.V. TANRIVERDİLİ
[1]ARETN-nin Fizika İnsititutu, H. Cavid pr.131, AZ-1073, Bakı, Azərbaycan
[2]Azərbaycan Texniki Universiteti,
E-mail: [2]kenan.tanriverdili@gmail.com

Bu məqalədə yarımkeçirici nanostrukturların mürəkkəb fiziki və kimyəvi xüsusiyyətlərinin öyrənilməsi və modelləşdirilməsi üçün süni neyron şəbəkələrinin (SNS) nəzəri əsasları və tətbiq sahələri geniş şəkildə təhlil edilir. Yarımkeçirici nanostrukturların kvant ölçülü təsirləri, səth hadisələri və elektron dinamikasının qeyri-xətti xarakteri səbəbindən ənənəvi modelləşdirmə metodları kifayət qədər effektiv olmaya bilər. SNS isə mürəkkəb verilənləri təhlil etmək, nümunələri aşkar etmək və proqnozlar vermək imkanlarına görə bu sahədə geniş tətbiq tapır. Məqalədə SNS-in texniki prinsipləri, öyrənmə metodları, yarımkeçirici nanostrukturlara tətbiq sahələri və gələcək perspektivləri ətraflı müzakirə olunur.

Açar sözlər: Yarımkeçirici, nanostrukturlar, neyron şəbəkələri, maşın öyrənmə
DOI:10.70784/azip.2.2025241

1. Giriş

Yarımkeçirici nanostrukturlar son illərdə nanoölçülü texnologiyalar və materialşünaslıq sahəsində sürətlə inkişaf edən və tədqiq olunan obyektlərdən biridir. Yarımkeçirici nanostrukturlar elektronların və deşiklərin hərəkətinə məhdudiyyət qoymaqla, onların enerji səviyyələrinin diskretləşməsinə və kvant məhdudiyyəti effektlərinin yaranmasına səbəb olur. Bu səbəbdən, nanostrukturların fiziki, kimyəvi və optik xassələri massiv yarımkeçiricilərdən fundamental şəkildə fərqlənir [1,2].

Yarımkeçirici nanostrukturların mürəkkəb kvant və səth effektləri səbəbindən onların davranışlarının dəqiq proqnozlaşdırılması böyük çətinliklər yaradır. Nanostrukturun ölçüsü, forması, material tərkibi, ətraf mü

hit şərtləri və digər parametrlər onun elektrik, optik və termal xassələrinə mürəkkəb şəkildə təsir edir. Bu parametrik komplekslik ənənəvi analitik modellərin və hesablama üsullarının tətbiqində limitlərə gətirib çıxarır [3]. Məsələn, kvant mexanikası tənliklərinin həlli çox vaxt böyük hesablama resursları tələb edir və real vaxt tətbiqlərində səmərəsizdir.

Bu problemlərin öhdəsindən gəlmək üçün süni neyron şəbəkələri və daha geniş mənada maşın öyrənməsi metodları son illərdə getdikcə daha çox diqqət cəlb edir. Süni neyron şəbəkələri mürəkkəb, çoxölçülü və qeyri-xətti verilənlərdə nümunələri aşkar etmək, təhlil etmək və proqnozlaşdırmaq qabiliyyətinə malikdir. Bu xüsusiyyətləri sayəsində SNS yarımkeçirici nanostrukturların xüsusiyyətlərinin modelləşdirilməsi və optimallaşdırılmasında effektiv vasitə kimi istifadə olunur [4].

SNS-in tətbiqi ilə nanomaterialların təhlili, dizaynı və istehsalında yeni yanaşmalar mümkün olur. Məsələn, eksperimental və simulyasiya məlumatlarının öyrənilməsi əsasında material xassələrinin proqnozu, defekt aşkarlanması, proseslərin avtomatlaşdırılması kimi sahələrdə yüksək dəqiqlikli modellər yaradılır. Bu isə nəticədə nanoelektron cihazların inkişaf sürətini və keyfiyyətini artırır. Nəticə etibarilə, yarımkeçirici nanostrukturların xüsusiyyətlərinin dərin anlaşılması və onların təsirli şəkildə modelləşdirilməsi müasir elm və exnologiyanın inkişafında kritik əhəmiyyət kəsb edir. Bu məqsədlə süni neyron şəbəkələrinin tətbiqi nanoölçülü materialların tədqiqi və yeni nəsil texnoloji həllərin yaradılması üçün perspektivli istiqamətdir.

2. Yarımkeçirici nanosistemlərin modelləşdirilməsində maşın öyrənməsi

Yarımkeçirici nanosistemlərin fiziki və kimyəvi xüsusiyyətlərinin dəqiq modelləşdirilməsi müasir nanotexnologiya sahəsində mühüm problem kimi qalmaqdadır [5]. Bu sistemlərin mürəkkəbliyi və yüksək ölçülü verilənlər bazasının mövcudluğu klassik modelləşdirmə üsullarının tətbiqini məhdudlaşdırır. Belə şəraitdə, maşın öyrənməsi (MÖ) alqoritmləri verilənlərdən nümunələr çıxarmaq və kompleks sistemlərin davranışını proqnozlaşdırmaq üçün effektiv yanaşma kimi ön plana çıxır.

MÖ-nin tətbiqi nanosistemlərin müxtəlif fiziki parametrlərinin — məsələn, elektrik keçiriciliyi, termal xassələr və optoelektronika göstəricilərinin — modelləşdirilməsində məlumatların təhlili və nümunələrin aşkarlanması proseslərini avtomatlaşdırmağa imkan verir [6]. Bunun üçün ilkin mərhələdə nanosistemlərdən toplanan verilənlərin keyfiyyətli toplanması və öncədən işlənməsi zəruridir. Bu prosesdə səs-küyün azaldılması, anomaliyaların aşkarlanması və verilənlərin normallaşdırılması kimi addımlar həyata keçirilir ki, nəticədə alqoritmlərin dəqiqliyi artır. Fiziki xüsusiyyətlərin öyrənilməsində əsasən nəzarətli öyrənmə alqoritmlərindən istifadə edilir. Bunlar arasında süni neyron şəbəkələri, dəstək vektor maşınları (SVM) və qərar ağacları mühüm yer tutur. Məsələn, neyron şəbəkələri mürəkkəb, qeyri-xətti asılılıqları modelləşdirmək üçün geniş tətbiq edilir [7]. Bu alqoritmlər verilənlərdəki nümunələri və əlaqələri öyrənərək nanosistemlərin davranışını yüksək dəqiqliklə proqnozlaşdıra bilir.

Modelin qurulması mərhələsində xüsusiyyətlərin seçilməsi (feature selection) vacib rol oynayır. Bu, verilənlərdəki mühüm dəyişənlərin müəyyən olunmasına və modelin sadələşdirilməsinə imkan verir. Eyni zamanda, modellərin hiperparametr optimallaşdırılması metodları tətbiq edilərək proqnozların dəqiqliyi artı-

rılır. MÖ alqoritmlərinin tətbiqi nanosistemlərin tədqiqat və dizayn proseslərini sürətləndirir, həmçinin eksperimental xərcləri azaldır. Bununla yanaşı, modellərin ümumiləşdirilməsi və daha mürəkkəb nanosistemlərə tətbiqi üçün gələcəkdə yeni metodların işlənib hazırlanması zəruridir.

3.Tətbiq imkanları və praktiki nümunələr

MÖ alqoritmlərinin yarımkeçirici nanosistemlərin modelləşdirilməsində tətbiqi geniş sahə vəd edir. Bu yanaşma nanosistemlərin elektrik, optik və termal xüsusiyyətlərinin dəqiq və sürətli təhlilinə imkan verərək, həm elmi tədqiqatlarda, həm də sənaye tətbiqlərində əhəmiyyətli nəticələr əldə etməyə şərait yaradır. Elektrik keçiriciliyinin proqnozlaşdırılması nanosistemlərin əsas parametrlərindən biri olmaqla, bu sahədə MÖ modellərinin tətbiqi mühüm rol oynayır. Məsələn, neyron şəbəkələri və dəstək vektor maşınları nanosistemlərin material tərkibi, quruluşu və ölçüləri əsasında keçiricilik xüsusiyyətlərini yüksək dəqiqliklə təxmin edə bilir. Bu, eksperimental işlərin sayını azaltmaqla, vaxt və resurs qənaətinə səbəb olur.

Optoelektronik sahədə isə MÖ alqoritmləri fotonların davranışını, işıq udma və yayılma xüsusiyyətlərini modelləşdirmək üçün istifadə edilir. Bu yanaşma sayəsində yeni nanosistemlərin dizaynı və optimallaşdırılması prosesi asanlaşır. Belə modellər nanosistemlərin fotonik cihazlarda istifadəsini optimallaşdırmağa, həmçinin onların effektivliyini artırmağa imkan verir.

Bundan əlavə, maşın öyrənməsi nanosistemlərin keyfiyyət idarəetməsi və qüsur aşkarlanması sahəsində də geniş tətbiq tapır. Verilənlərə əsaslanan modellər materiallarda olan anomaliyaları və struktur qüsurlarını aşkar edərək, məhsulun keyfiyyətini təmin edir və istehsal prosesinin təkmilləşdirilməsinə kömək edir.

Ədəbiyyatda mövcud tədqiqatlar göstərir ki, maşın öyrənməsi nanosistemlərin müxtəlif parametrlərinin proqnozlaşdırılmasında yüksək dəqiqliklə işləyir [8, 9]. Məsələn, Tarasevich Y. Yu. və başqaları pyezoelektrik yarımkeçirici nanotrubaların ölçü effektləri və parametrlərinin təhlilində fizika məlumatlı neyron şəbəkələrinin tətbiq etmişlər [10]. Həmçinin, Kumar və işçiləri optoelektronik xassələrin öyrənilməsində MÖ alqoritmlərinin effektivliyini sübut etmişlər [11].

Yuxarıda qeyd olunan tətbiq nümunələri göstərir ki, maşın öyrənməsi yarımkeçirici nanosistemlərin dizaynı və təkmilləşdirilməsində mühüm alət kimi istifadə oluna bilər. Bu yanaşma tədqiqatçı və mühəndislərə yeni materialların xüsusiyyətlərini əvvəlcədən qiymətləndirmək, həmçinin tətbiq sahələrini genişləndirmək imkanı yaradır.

4. Mümkün Problemlər və Gələcək İnkişaf Yolları

Yarımkeçirici nanosistemlərin maşın öyrənməsi alqoritmləri vasitəsilə modelləşdirilməsi bir çox üstünlüklərə baxmayaraq, qarşıda duran bir sıra çətinliklər və məhdudiyyətlər mövcuddur. Bu problemlərin həlli tədqiqatların effektivliyini artırmaq və metodların daha geniş tətbiqinə zəmin yaratmaq baxımından mühüm əhəmiyyət kəsb edir. Əvvəlcə, modellərin ümumiləşdirmə qabiliyyəti — yəni müxtəlif nanosistem tiplərinə və şərtlərinə uyğun proqnozlar vermə bacarığı — əsas çətinliklərdən biridir. Verilənlər bazasının məhdudluğu və yüksək ölçülü xüsusiyyətlər alqoritmlərin aşırı uyğunlaşmasına (overfitting) səbəb ola bilər, nəticədə model yalnız öyrədildiyi nümunələrdə yaxşı nəticə verir, yeni verilənlərdə isə performansı zəifləyir. Bu, xüsusilə nanosistemlərin müxtəlifliyinin çox olduğu hallarda ciddi problem yaradır. Digər mühüm problem verilənlərin keyfiyyəti və miqdarı ilə bağlıdır. Nanosistemlərin təcrübi məlumatlarının toplanması baha başa gəlir və zaman alır, həmçinin bəzən məlumatlarda səsküy və ölçmə səhvləri mövcuddur. Bu kimi hallarda maşın öyrənməsi modellərinin təlimi və sınağı üçün kifayət qədər etibarlı verilənlər tapmaq çətinləşir.

Bundan əlavə, hazırda mövcud olan maşın öyrənməsi alqoritmləri nanosistemlərin bütün mürəkkəb fiziki proseslərini tam şəkildə əks etdirə bilmir. Məsələn, kvant mexanikası və termodinamik təsirlərin modelləşdirilməsi üçün daha xüsusi və optimallaşdırılmış yanaşmalar tələb olunur. Bu sahədə yeni alqoritmlərin işlənməsi və ya mövcud metodların hibridləşdirilməsi perspektivlidir.

Gələcək inkişaf istiqamətlərindən biri multimodal və multidissiplinar modelləşdirmə yanaşmalarının tətbiqidir. Burada maşın öyrənməsi üsulları fizikadan, kimyadan və materialşünaslıqdan əldə olunan biliklərlə birləşdirilərək daha dəqiq və geniş diapazonda proqnozlar verə biləcək sistemlərin yaradılması məqsəd qoyulur [12]. Eyni zamanda, dərin öyrənmə, genetik alqoritmlər və gücləndirməli öyrənmə kimi qabaqcıl metodların nanosistemlərin modelləşdirilməsində tətbiqi də aktiv tədqiq olunur.

5. Nəticələr

Bu məqalədə yarımkeçirici nanosistemlərin modelləşdirilməsində maşın öyrənməsi alqoritmlərinin nəzəri əsasları və tətbiqi imkanları ətraflı şəkildə təhlil edilmişdir. MÖ alqoritmlərinin mürəkkəb və yüksək ölçülü verilənlərdəki nümunələri aşkar etmək, fiziki xüsusiyyətləri dəqiq proqnozlaşdırmaq və nanosistemlərin davranışlarını modelləşdirmək sahəsində effektiv alət olduğu göstərilmişdir.

Tədqiqat nəticələri sübut edir ki, maşın öyrənməsi nanosistemlərin elektrik keçiriciliyi, optoelektronika və termal xüsusiyyətlərinin təhlilində və optimallaşdırılmasında mühüm rol oynayır. Eyni zamanda, MÖ modelləri eksperimental işlərin sayını azaldaraq, tədqiqat proseslərini sürətləndirir və xərcləri minimuma endirir. Bununla belə, verilənlərin məhdudluğu, modellərin ümumiləşdirmə problemləri və nanosistemlərin mürəkkəb fiziki proseslərinin tam əks olunmaması kimi çətinliklər qalmaqdadır. Gələcək tədqiqatlar üçün verilənlərin zənginləşdirilməsi, alqoritmlərin optimallaşdırılması və multidissiplinar yanaşmaların tətbiqi prioritet istiqamətlər olaraq müəyyən edilmişdir.

Nəticə olaraq, maşın öyrənməsi metodlarının yarımkeçirici nanosistemlər sahəsində tətbiqi həm fundamental elmi tədqiqatlar, həm də sənaye praktikası üçün geniş perspektivlər açır. Bu sahədə aparılacaq inkişaflar nanosistemlərin dizaynı, keyfiyyət nəzarəti və funksional xüsusiyyətlərinin optimallaşdırılması sahəsində mühüm töhfələr verəcəkdir.

[1] *J. Xu, X. Wang, Y. Li* (2021). Recent advances in semiconductor nanostructures for optoelectronic applications. Nano Today, 36, 101054. https://doi.org/10.1016/j.nantod.2020.101054

[2] *X. Liang, S. Zhang, G. Chen.* Surface chemistry impact on semiconductor nanocrystals. Advanced Materials, 2022, 34(12), 2108903. https://doi.org/10.1002/adma.202108903

[3] *M. Schmitt, M. Heyl.* Quantum simulations and computational complexity: Limits and opportunities. Nature Reviews Physics, 2022, 4, 689–700. https://doi.org/10.1038/s42254-022-00476-4

[4] *G. Carleo, M. Troyer.* Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. Science, 2017, 355(6325), 602-606. https://doi.org/10.1126/science.aag2302

[5] *L. Wang, A. Zunger*. Accurate modeling of semiconductor nanostructures: Challenges and perspectives. Journal of Applied Physics, 2020, 127(8), 080901. https://doi.org/10.1063/1.5143612

[6] *T. Xie, J.C. Grossman.* Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties. Physical Review Letters, 2018, 120(14), 145301. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.145301

[7] *G. Carleo, I. Cirac, K. Cranmer, L. Daudet, M. Schuld, N. Tishby, L. Zdeborova.* Machine learning and the physical sciences. Reviews of Modern Physics, 2019, 91(4), 045002. https://doi.org/10.1103/RevModPhys.91.045002

[8] *K. T. Butler, D. W. Davies, H. Cartwright, O. Isayev, A. Walsh.* Machine learning for molecular and materials science. Nature, 2018, 559(7715), 547–555. https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2

[9] *T. Xie, J. C. Grossman.* Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties. Physical Review Letters, 2018, 120(14), 145301. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.145301

[10] *Y. Yu. Tarasevich, A. V. Eserkepov, I. V. Vodolazskaya.* Physics-informed neural networks for analyzing size effect and identifying parameters in piezoelectric semiconductor nanowires. Journal of Applied Physics, 2022, 137(2), 024303. https://doi.org/10.1063/5.0248278

[11] *R. Kumar, et al*. Tuning optoelectronic properties of semiconductors with first principles modeling and machine learning. Materials Research Society Fall Meeting, 2021. https://doi.org/10.1557/adv.2021.324

[12] *T. Xie, J. C. Grossman.* Crystal graph convolutional neural networks for an accurate and interpretable prediction of material properties. Physical Review Letters, 2018, 120(14), 145301. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.145301

H.B. Ibrahimov, K.V. Tanriverdili

THEORETICAL FOUNDATIONS AND APPLICATION POSSIBILITIES OF MACHINE LEARNING ALGORITHMS IN SEMICONDUCTOR NANOSYSTEMS

This article provides a comprehensive analysis of the theoretical foundations and application areas of artificial neural networks (ANNs) for studying and modeling the complex physical and chemical properties of semiconductor nanostructures. Due to quantum size effects, surface phenomena, and the nonlinear nature of electron dynamics in semiconductor nanostructures, traditional modeling methods may be insufficiently effective. ANNs, on the other hand, find broad application in this field because of their capability to analyze complex data, detect patterns, and make predictions. The paper discusses in detail the technical principles of ANNs, learning methods, their application in semiconductor nanostructures, and future perspectives.

Qəbul olunma tarixi: 26.05.2025