

ВИКОРИСТАННЯ ШТУЧНОГО ІНТЕЛЕКТУ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОСТРУКТУР

Олексієнко К. Р., Стрілкова Т. О.

e-mail: kyrylo.oleksiienko@nure.ua tetiana.strilkova@nure.ua

Харківський національний університет радіоелектроніки, каф. МЕЕПП
м. Харків, Україна

The development of nanotechnology and materials science has significantly influenced approaches to the creation of new materials and devices. The complexity of nanostructured materials requires accurate methods for predicting their properties, which is possible through the use of artificial intelligence (AI) methods. Theoretical studies show the effectiveness of AI in modeling the physical and chemical characteristics of nanostructures, which allows optimizing the process of developing new materials.

Розвиток нанотехнологій та матеріалознавства значно вплинув на підходи до створення нових матеріалів і пристроїв. Складність наноструктурованих матеріалів вимагає точних методів прогнозування їхніх властивостей, що можливо завдяки застосуванню методів штучного інтелекту (ШІ). Теоретичні дослідження свідчать про ефективність ШІ у моделюванні фізико-хімічних характеристик наноструктур, що дозволяє оптимізувати процес розробки нових матеріалів.

Теоретичний аналіз охоплює методи машинного та глибинного навчання для прогнозування механічних, оптичних та електронних властивостей наноматеріалів [1]. До основних підходів належать регресійні моделі, нейронні мережі (глибокі, згорткові, рекурентні) та методи кластеризації для оцінки міцності, електропровідності та оптичних характеристик наноструктур.

Генеративно-змагальні мережі (GAN) демонструють потенціал у створенні нових наноматеріалів із заданими властивостями, а глибокі нейронні мережі використовуються для прогнозування міжатомних взаємодій та стабільності наноструктур.

Сучасні наукові спільноти активно застосовують спеціалізовані системи ШІ, такі як AlphaFold, MatDeepLearn та Materials Project AI, які прогнозують структури та властивості наноматеріалів. Використання таких платформ, як IBM Watson Materials Discovery, дозволяє аналізувати молекулярні взаємодії, що сприяє розробці наноматеріалів із покращеними характеристиками [2].

Оптимізація технологічних процесів, зокрема методів осадження тонких плівок та синтезу наночастинок, є важливою складовою досліджень у цій галузі. Аналіз прогнозування відгуку наноструктурованих пристроїв, таких як фотоприймачі, дозволяє встановити залежності між матеріалами

та їх експлуатаційними характеристиками, що розширює можливості проектування ефективних наноструктурованих пристроїв [3].

Застосування інформаційних технологій для моделювання наноматеріалів забезпечує можливість аналізу технічних характеристик наноструктурованих пристроїв, таких як фотоприймачі при реєстрації оптичного випромінювання різних просторово-енергетичних властивостей. Стохастичне моделювання відгуків фотоприймачів показало ефективність врахування випадкових флуктуацій при аналізі та прогнозуванні стабільності роботи напівпровідникових структур [4, 5].

Метою роботи є використання інформаційних технологій для аналізу точності та чутливості фотоприймачів при реєстрації оптичних сигналів в залежності від властивостей напівпровідникової структури фотоприймача. В доповіді представлено розроблену структуру інформаційної моделі дослідження чутливості фотоприймачів. Враховано властивості фотоприймачів: розмір фоточутливих елементів, рівень внутрішніх завад та нерівномірність чутливості. Для порівняння статистичних характеристик відгуків фотоприймачів обрано матеріали: Si, GaAs та структура CdHgTe. Розраховані значення темного струму в залежності від характеристик матеріалу, концентрації носіїв заряду та їх рухливості.

Проведене моделювання процесу реєстрації та виявлення оптичних сигналів з використанням різноманітних приймачів показало, що виявна здатність фотоприймачів суттєво залежить від властивостей наноструктур та може бути підвищена в декілька разів при зменшенні ймовірності помилки.

Список використаних джерел

1. Zhang Y., Chen H., Liu K., et al. Machine Learning for Materials Design and Discovery // *J. Mater. Sci.*, 2021. Vol. 56. P. 123–145.
2. Butler K. T., Davies D. W., Cartwright H., et al. Machine Learning for Molecular and Materials Science // *Nature*, 2018. Vol. 559. P. 547–555.
3. Lu S., Zhou Q., Ouyang R., et al. Accelerated Discovery of Metallic Glasses Using Machine Learning // *Nature Communications*, 2018. Vol. 9. P. 2405.
4. Пятайкина М. І., Стрілкова Т. О. Дослідження дефектів дислокації в напівпровідникових матеріалах оптичними методами // XXII Міжнародна науково-технічна конференція “ПРИЛАДОБУДУВАННЯ: стан і перспективи”. Секція 2. Оптичні та оптико-електронні прилади системи. Фотоніка. 16-17 травня 2023 року, КПІ ім. Ігоря Сікорського, Київ, Україна. С. 45-48.
5. Стрілкова Т.О., Калмиков О.С., Бендеберя Г.М., Пятайкина М.І., Поліщук О.В. Стохастичні моделі вихідних сигналів в оптико-електронних системах // Колективна монографія «Сучасні технології в науці та освіті». 2021. Сєверодонецьк. С. 256-259.