



فصلنامه علمی دفاع هوایی

دوره ۴ شماره ۴
زمستان ۱۴۰۴
صفحات ۹۷ - ۷۴



Research Paper;



Application of Machine Learning Techniques for the Optimization of Synthesis Parameters of GaN Quantum Dots for Utilization in Ultraviolet Photodetectors

Bahram Abedi Ravan✉, Bahram Daalwand

Faculty of Basic Sciences, Shahid Sattari University of Aeronautical Sciences and Technology, Tehran, Iran

Article Information

Abstract

Accepted:
2026/04/30

Received:
2025/12/31

Keywords:

*Machine learning;
Quantum Dots;
Gallium Nitride;
Ultraviolet Photodetector*

Corresponding Author:

Bahram Abedi
Ravan

Email:
*abedi@modare
s.ac.ir*

Ultraviolet (UV) photodetection is a critical issue in the development of optoelectronic technologies. Conventional semiconductor materials commonly used in UV photodetectors suffer from limitations in terms of response speed, cost, and fabrication complexity. In contrast, UV photodetectors based on quantum dots (QDs), owing to their unique optical and electronic properties, can potentially overcome these limitations. In this study, using machine learning models and information extracted from the scientific literature, we investigate and predict the most influential variables governing the synthesis of gallium nitride (GaN) QDs applicable to UV photodetectors. The results obtained from the AdaBoost algorithm indicate that the Ga/N molar ratio, the aluminum-to-metal flux ratio, time, and growth temperature are the most important variables affecting the bandgap of GaN QDs. The AdaBoost algorithm is employed to predict the potentially optimal regions of the key reaction variables within the desired GaN QD bandgap ranges.

مقاله پژوهشی 

کاربرد روش‌های یادگیری ماشین برای بهینه‌سازی پارامترهای سنتز ذرات نقاط کوانتومی GaN قابل کاربرد در آشکارسازهای نوری فرابنفش

بهرام عابدی روان[✉]، بهرام دال‌ووند

تهران، دانشگاه علوم و فنون هوایی شهید ستاری، دانشکده علوم پایه

چکیده

اطلاعات مقاله

آشکارسازی نور فرابنفش (UV) یک مسئله‌ی مهم در توسعه‌ی فناوری‌های نوری - الکترونیکی به‌شمار می‌رود. مواد نیمه‌هادی مرسوم که به‌طور معمول در ساخت آشکارسازهای نوری فرابنفش به کار برده می‌شوند دارای محدودیت‌هایی به لحاظ سرعت پاسخ، هزینه و پیچیدگی‌های ساخت می‌باشند. این در حالی است که آشکارسازهای نوری فرابنفش مبتنی بر ذرات نقاط کوانتومی (QDs) به دلیل ویژگی‌های نوری و الکترونیکی منحصر به فرد می‌توانند بر این محدودیت‌ها غلبه کنند. در این پژوهش، با استفاده از مدل‌های یادگیری ماشین و اطلاعات استخراج شده از مقالات علمی به بررسی و پیش‌بینی مهم‌ترین متغیرهای تاثیرگذار بر سنتز GaN QDs قابل کاربرد در ساخت آشکارسازهای نوری فرابنفش پرداخته شده است. نتایج بدست آمده از الگوریتم AdaBoost نشان می‌دهد که متغیرهای نسبت مولی Ga/N، نسبت شار آلومینیوم به فلز، زمان و دمای رشد، مهم‌ترین متغیرهای موثر بر پهنای باند GaN QDs به‌شمار می‌روند. الگوریتم AdaBoost برای پیش‌بینی نواحی محتمل بهینه‌ی متغیرهای کلیدی واکنش در دامنه‌های دلخواه از پهنای باند GaN QDs به کار برده شده است.

تاریخ دریافت:

۱۴۰۴/۱۰/۱۰

تاریخ پذیرش:

۱۴۰۵/۰۲/۱۰

کلیدواژه‌ها:

یادگیری ماشین، ذرات نقاط کوانتومی، گالیوم نیتريد، آشکارساز نوری فرابنفش

نویسنده مسئول:

بهرام عابدی روان

ایمیل:

abedi@modares.ac.ir

عابدی روان، بهرام؛ دال‌ووند، بهرام؛ (۱۴۰۵). کاربرد روش‌های یادگیری ماشین برای بهینه‌سازی پارامترهای سنتز ذرات نقاط کوانتومی GaN قابل کاربرد در آشکارسازهای نوری فرابنفش. دفاع هوافضایی، دوره ۴ (شماره ۴)، صفحه ۷۴-۹۷.

۱- مقدمه

امروزه آشکارسازهای نوری در زمینه‌های مختلف از جمله تصویربرداری، ارتباطات، هوافضا و صنایع نظامی مورد استفاده قرار می‌گیرند. بر اساس مشخصه‌ی پهنای باند می‌توان از مواد نیمه‌هادی مختلف برای ساخت آشکارسازهای نوری استفاده کرد. چشم بینای اکثر سامانه‌های هشدار شلیک و تقرب موشک که امروزه در ارتش‌های پیشرفته جهان تولید می‌شوند آشکارسازهای فرابنفشی هستند که در ناحیه‌ی الکترومغناطیسی اصطلاحاً کور خورشیدی^۱ کار می‌کنند. ناحیه‌ی کور خورشیدی (Solar-blind) به بازه‌ی طول‌موجی ۲۴۰ تا ۲۸۰ نانومتر اطلاق می‌شود که نور خورشید در این ناحیه به زمین نمی‌رسد و به همین دلیل نویز کاهش یافته و فرآیند پردازش تصویر راحت‌تر صورت می‌گیرد. آشکارسازهای نوری مبتنی بر مواد با ابعاد پایین (از جمله ذرات نقاط کوانتومی^۲ (QDs)) به دلیل برخورداری از مزیت‌های ویژه‌ای هم‌چون عملکرد کوانتومی، مقیاس کوچک، مصرف کم انرژی و کارایی بالا توجهات زیادی را به خود جلب کرده‌اند [۱، ۲]. با این حال، در اغلب موارد توسعه‌ی QDs از طریق تعداد بسیار زیاد آزمایش‌های مبتنی بر آزمون و خطا انجام می‌شود که باعث زمان‌بر بودن و عدم قطعیت در نتایج می‌شود [۳]. با پیشرفت‌های سریع در زمینه‌ی فناوری اطلاعات، پژوهشگران به دنبال مسیرهای علمی جایگزین برای روش‌های مرسوم مبتنی بر آزمون و خطا می‌باشند. یادگیری ماشین^۳ (ML) به عنوان یکی از زمینه‌های تحقیقاتی پیشرفته در هوش مصنوعی^۴ (AI)، با استفاده از توانایی پردازش داده‌ی قدرتمند خود، پتانسیل حل مسائل در زمینه‌ی تحقیق و توسعه‌ی نانوساختارها را دارد [۴]. در این پژوهش، از رویکرد یادگیری ماشین برای شناسایی متغیرهای موثر بر پهنای باند GaN QDs استفاده شده است.

¹ Solar Blind

² Quantum Dots

³ Machine Learning

⁴ Artificial Intelligence

۱-۱ آشکارسازهای نوری

با استفاده از ابزارهای نوری-الکترونیکی هم‌چون آشکارسازهای نوری می‌توان فوتون‌ها را به سیگنال الکتریکی تبدیل کرد [۵]. هدف همه‌ی آشکارسازهای نوری شناسایی یک طول‌موج خاص یا یک باند گسترده از انرژی تابشی و تولید یک سیگنال خروجی متناسب با کمیت انرژی جذب شده است [۶]. برای آشکارسازی نواحی طول‌موجی مختلف می‌توان از مواد نیمه‌هادی مختلف متناسب با پهنای باند آنها استفاده کرد [۷]. آشکارسازهای مبتنی بر نیمه-هادی‌های حجیم سه‌بعدی هم‌چون سیلیکون با وجود مزیت‌هایی که دارند، کاربرد آنها به-دلیل بالا بودن هزینه‌ی ساخت، انعطاف‌پذیری ضعیف، پردازش پیچیده، پردازش با دمای بالا و جریان تاریک بزرگ محدود شده است [۸، ۹]. این در حالی است که مواد با ابعاد پایین هم‌چون QDs به‌دلیل ویژگی‌های کوانتومی، سنتز راحت و رفتار قابل تنظیم به عنوان یک گزینه‌ی مناسب برای ساخت آشکارسازهای نوری با کیفیت بالا به شمار می‌روند.

در سال‌های اخیر آشکارسازهای نوری فرابنفش (UV) به‌دلیل کاربردهای گسترده در زمینه-های مختلف هم‌چون تشخیص شلیک موشک و ارتباطات فضایی توجهات فراوانی را به خود جلب کرده‌اند [۱۰]. با وجود این که سیلیکون متداول‌ترین ماده برای ساخت آشکارسازهای نوری UV به شمار می‌رود ولی دارای برخی محدودیت‌های ذاتی از جمله انتخاب‌گری ضعیف در برابر فوتون‌های مرئی و فروسرخ و تخریب تحت تابش UV می‌باشد [۱۱]. ویژگی‌های منحصر به فرد نیمه‌هادی‌های با پهنای باند گسترده از جمله مقاومت بالا در برابر تابش، پایداری شیمیایی و دمایی بالا و شفافیت در برابر نور مرئی این مواد را به یک جایگزین مناسب برای سیلیکون در زمینه‌ی آشکارسازهای نور UV تبدیل کرده است [۱۲]. بسیاری از مواد با پهنای باند گسترده هم‌چون GaN، SnO₂، TiO₂ و ZnO به عنوان ماده سازنده‌ی آشکارسازهای نوری فرابنفش مورد استفاده قرار می‌گیرند [۱، ۱۳]. آشکارسازهای نوری UV مبتنی بر نانو ساختارهای با ابعاد پایین هم‌چون QDs به‌دلیل نسبت سطح به حجم بالا و انتقال حامل محدود در مقیاس نانو، عملکرد مناسبی دارند [۱۱].

۲-۱ ذرات نقاط کوانتومی

ترکیب نیتريد گالیوم (GaN) و آلیاژهای مرتبط با آن به‌دلیل ویژگی‌هایی از جمله پهنای باند گسترده، هدایت گرمایی و پایداری شیمیایی بالا (در هر دو محیط اسیدی و بازی) و مصرف

پایین انرژی کاربردهای فراوانی پیدا کرده‌اند [۱۴-۱۶]. ترکیب GaN دارای پهنای باند مستقیم حدودا ۳/۴ الکترون ولت (eV) است که باعث می شود به نور UV حساس باشد ولی نسبت به طول موج های مرئی و بالاتر پاسخ ضعیفی داشته باشد. بنابراین، GaN دارای ویژگی Solar-blind بودن است که باعث می شود این ترکیب بدون نیاز به فیلترهای نوری اضافی، تابش UV را تشخیص دهد [۱۷]. علاوه بر این، GaN به دلیل پایداری نوری و حرارتی بالا و جریان تاریک پایین برای کاربردهای مختلف نظامی، فضایی و صنعتی مورد استفاده قرار می گیرد [۱۸-۲۰]. این در حالی است که تغییر ابعاد در مواد GaN، تغییرات ساختاری و الکتریکی را به همراه دارد که منجر به خواص متنوع و حتی کاربردهای متمایز می شود [۲۱-۲۳]. به دلیل محصور شدن کوانتومی^۱، GaN های با ابعاد پایین ویژگی های جدیدی را از خود نشان می دهند که می تواند بر مشکلات موجود در GaN های سه بعدی (حجیم) غلبه کند و منجر به بهبود در عملکرد فوتونی، جذب طیفی، جداسازی حامل ها و پایداری در شرایط سخت شود [۲۴].

۳-۱ یادگیری ماشین

یادگیری ماشین (ML) یکی از سریع ترین زمینه های علمی در حال رشد است که در نقطه ی تلاقی علوم کامپیوتر و آمار و در هسته ی مرکزی هوش مصنوعی (AI) و علم داده قرار دارد [۲۵]. هدف یادگیری ماشین استفاده از الگوریتم هایی است که به طور مکرر از داده های آموزشی یاد می گیرند و براساس آن الگوهای پیچیده و روندهای پنهان در داده ها را تشخیص می دهند [۲۶]. به این ترتیب، یادگیری ماشین به عنوان یک ابزار قدرتمند می تواند برای درک سیستم های شیمیایی و بدست آوردن یک بینش عمیق در مورد داده های بدست آمده از مقالات علمی منتشر شده و آزمایشگاه ها مورد استفاده قرار گیرد [۲۷]. در همین راستا، در سال ۲۰۱۷ زارع و همکاران با استفاده از الگوریتم های یادگیری تقویتی عمیق به بهینه کردن واکنش های شیمیایی پرداختند. مدل استفاده شده در این تحقیق به صورت متناوب نتایج یک واکنش شیمیایی را ثبت کرده و شرایط تجربی جدیدی را برای بهبود خروجی واکنش انتخاب

¹ Quantum Confinement

می‌کند [۲۸]. هم‌چنین، در سال ۲۰۱۹ سارگنت^۱ و همکاران از یادگیری ماشین برای تسریع در کشف شرایط بهینه برای سنتز QDs استفاده کردند. در این کار از داده‌های تجربی موجود برای یادگیری ماشین استفاده شده است [۲۹]. علاوه بر این، در سال ۲۰۲۰ بائوم^۲ و همکاران از ابزارهای یادگیری ماشین برای پیش‌بینی شرایط سنتز تزریق داغ برای QDs گروه‌های (II-VI) و (IV-VI) استفاده کردند. آنها با استفاده از الگوریتم‌های یادگیری ماشین همراه با اطلاعات استخراج شده از مقالات علمی به شناسایی مهم‌ترین متغیرها در سنتز QDs پرداختند. براساس نتایج بدست آمده، پارامترهای زمان واکنش، دما و غلظت پیش‌ماده-ی فلزی به عنوان موثرترین پارامترها بر روی قطر نهایی QDs بدست آمدند. علاوه بر این، مدل‌های مورد نظر برای تخمین بهینه‌ترین پارامترهای واکنش برای یک QD با اندازه‌ی مشخص مورد استفاده قرار گرفتند [۴]. در سال ۲۰۲۲ نیز واجیره^۳ و همکارانش با به‌کارگیری الگوریتم‌های پیشرفته، مدلی را توسعه داده‌اند که قادر است رابطه پیچیده بین بار و تغییر شکل (load-deformation) را در فرآیند نانوفروفتگی^۴ با دقت بالایی پیش‌بینی کند. این تحقیق نشان می‌دهد که ادغام داده‌های تجربی با مدل‌های محاسباتی هوشمند نه تنها سرعت طراحی قطعات الکترونیکی را افزایش می‌دهد، بلکه ابزاری کارآمد برای تحلیل خواص مکانیکی مواد در مقیاس نانو فراهم می‌آورد که در بهینه‌سازی تولید لایه‌های نازک GaN بسیار حیاتی است [۳۰]. این مطالعات پیشگامانه، استفاده از یادگیری ماشین را برای بررسی شرایط سنتز و بهینه‌سازی سنتز QDs در مواد رایج به اثبات رسانده‌اند. با این وجود، از رویکردهای بررسی و بهینه‌سازی مبتنی بر یادگیری ماشین برای QDs GaN به شکل محدودی استفاده شده است. بر اساس بررسی‌های انجام شده، تاکنون مطالعه‌ی جامعی مبتنی بر داده‌کاوای مقالات علمی و الگوریتم‌های یادگیری ماشین برای شناسایی متغیرهای کلیدی سنتز QDs GaN با تمرکز بر کاربردهای آشکارسازی فرابنفش گزارش نشده است.

¹ Sargent

² Baum

³ Vajire

⁴ Nanoindentation

۲- روش‌ها

۲-۱ استخراج داده

برای بدست آوردن یک ماتریس داده از متغیرهای موثر بر سنتز GaN QDs جهت آموزش مدل‌های یادگیری ماشین، ابتدا یک جست و جو بر روی موتورهای جست و جوی علمی عمومی و تخصصی در اینترنت با کلمات کلیدی گالیوم نیتريد (GaN)، ذرات نقاط کوانتومی (QDs)، آشکارسازهای نوری فرابنفش (UV) و سنتز انجام گرفت. در این فرآیند، در مجموع تعداد ۴۳ مقاله‌ی مرتبط مورد ارزیابی قرار گرفت. معیارهای ورود داده‌ها به شرح زیر تعیین گردید: مقاله باید پارامترهای سنتز GaN QDs را به‌صراحت گزارش کرده باشد، شرایط سنتز و آزمایش به‌صورت دقیق مستند شده باشد، و مقادیر پهنای باند حاصل از شرایط سنتز به‌صورت کمی گزارش شده باشد. مقاله‌هایی که فاقد این شرایط بودند از مجموعه داده نهایی کنار گذاشته شدند. پس از پالایش و استانداردسازی داده‌ها، یک ماتریس داده شامل ۱۰۴ نمونه تشکیل گردید و به‌عنوان ورودی برای آموزش و ارزیابی مدل‌های یادگیری ماشین مورد استفاده قرار گرفت.

متغیرهای موثر بر شرایط سنتز GaN QDs گزارش شده در مقالات علمی از بخش‌های تجربی و نتایج مقالات استخراج شد و در یک جدول اکسل^۱ قرار داده شد. متغیرهای مورد نظر شامل فشار (Torr)، مقدار گالیوم (g)، غلظت گالیوم (M)، مقدار نیتريد (g)، غلظت نیتريد (M)، نسبت مولی گالیوم به نیتريد (Ga/N)، مقدار حلال (ml)، کسر حجمی GaN، pH، دمای رشد (°C)، نسبت مولی آب به سورفکتانت، زمان (h) و نسبت شار آلومینیوم به فلز (Φ_{Al}/Φ_{Metal}) می‌باشند. در اینجا، داده‌ها به نحوی سازمان‌دهی شدند که هر ردیف از ماتریس داده مربوط به شرایط سنتز ذرات نقاط کوانتومی استخراج شده از یک مقاله می‌باشد و هر ستون مقادیر استخراج شده برای هر متغیر موثر بر سنتز GaN QDs را در بر می‌گیرد. اندازه‌ی QDs و در نتیجه پهنای باند آنها با تغییر پارامترهای موثر بر شرایط سنتز نانوذرات هم‌چون دمای رشد و نسبت مولی Ga/N می‌توانند تغییر کنند [۳۱، ۳۲]. بنابراین، با توجه به این که GaN QDs در ساخت آشکارسازهای نوری فرابنفش قابل کاربرد می‌باشند، بنابراین

¹ Excel

پاسخ بدست آمده برای هر یک از شرایط سنتز نانوذرات در ماتریس داده‌ی مورد نظر شامل مقادیر پهنای باند نانوذرات می‌باشد.

۲-۲ ابزارهای یادگیری ماشین

در این بخش، از مدل‌های یادگیری ماشین هم‌چون رگرسیون خطی، Extra Trees، Gradient Boosting، Random Forest، K-Nearest Neighbors (KNN) و AdaBoost برای مدل کردن ماتریس داده‌ی استخراج شده از مقالات علمی و بررسی متغیرهای موثر بر سنتز GaN QDs استفاده شده است. به منظور تضمین پایداری^۱ مدل‌های یادگیری ماشین و جلوگیری از بیش‌برازش، مجموعه‌ی داده به طور تصادفی به زیرمجموعه‌های آموزشی (۸۰٪) و آزمایشی (۲۰٪) تقسیم شد. برای ارزیابی دقیق‌تر و افزایش قابلیت اطمینان مدل‌ها، از رویکرد اعتبارسنجی متقاطع^۲ Repeated-k-fold CV (با $k=5$ و $Nrep=5$) استفاده شده است. این رویکرد این امکان را می‌دهد که مدل بر روی چندین توزیع مختلف از داده‌ها آزموده شود تا خطای پیش‌بینی به‌طور واقعی‌تری تخمین زده شود. هم‌چنین، برای ارزیابی عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین از معیارهای ضریب تعیین^۳ (R^2) و میانگین مربعات خطا^۴ (MSE) استفاده شده است. معیار R^2 نشان‌دهنده‌ی نسبت واریانس پیش‌بینی‌شده توسط مدل نسبت به واریانس کل داده‌ها است و توانایی مدل در توصیف تغییرات پارامترهای خروجی را نشان می‌دهد. از طرف دیگر، معیار MSE جهت سنجش دقت مدل و محاسبه میانگین مربع تفاضل بین مقادیر پیش‌بینی‌شده توسط مدل و مقادیر واقعی تجربی استفاده شده است. کاهش MSE نشان‌دهنده‌ی همگرایی بالای مدل و دقت پیش‌بینی مناسب در فضای پارامترهای بهینه است. در این پژوهش، مسئله یادگیری ماشین به‌صورت یادگیری نظارت‌شده از نوع رگرسیون می‌باشد. هدف مدل یادگیری ماشین، برقراری ارتباط میان پارامترهای موثر بر سنتز GaN QDs و مقدار پهنای باند حاصل از این شرایط سنتز می‌باشد. بر این اساس، پارامترهای سنتز به‌عنوان متغیرهای ورودی مدل در نظر

¹ Robustness

² Cross-Validation

³ Coefficient of Determination

⁴ Mean Square Error

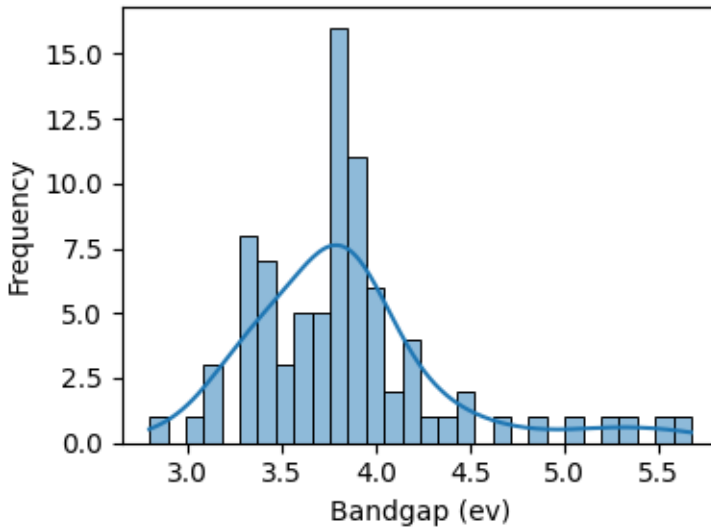
گرفته می‌شوند و مقدار پهنای باند نانوذرات به عنوان متغیر خروجی توسط مدل پیش‌بینی می‌شود. در این تحقیق، از زبان برنامه نویسی پایتون^۱ نسخه‌ی 0. 12. 3 برای انجام محاسبات استفاده شده است.

۳- نتایج و بحث

۳-۱ استخراج و ساخت داده

ماتریس داده‌ی استخراج شده شامل ۱۰۴ مورد شرایط سنتز نانوذرات است که از ۴۳ مقاله‌ی علمی استخراج شده است. حجم داده مورد استفاده با مطالعات یادگیری ماشین مبتنی بر داده‌های استخراج شده از مقالات در حوزه‌ی نانومواد قابل مقایسه است [۴]. علاوه بر این، از رویکرد اعتبارسنجی متقاطع تکرارشونده برای کاهش بیش‌برازش و افزایش پایداری نتایج استفاده شده است. در ماتریس داده‌ی استخراج شده، برای متغیرهایی که در واکنش حضور ندارند مقدار عددی صفر در نظر گرفته شده است. این نوع کدگذاری به مدل‌های یادگیری ماشین این امکان را می‌دهد تا بین حضور و عدم حضور پارامترها تمایز قائل شوند. همچنین، پاسخ بدست آمده برای هر یک از شرایط سنتز GaN QDs، مقادیر پهنای باند نانوذرات می‌باشد. شکل ۱ نمودار میله‌ای مربوط به توزیع مقادیر پهنای باند GaN QDs بدست آمده از ماتریس داده‌ی استخراج شده را نشان می‌دهد.

¹ Python



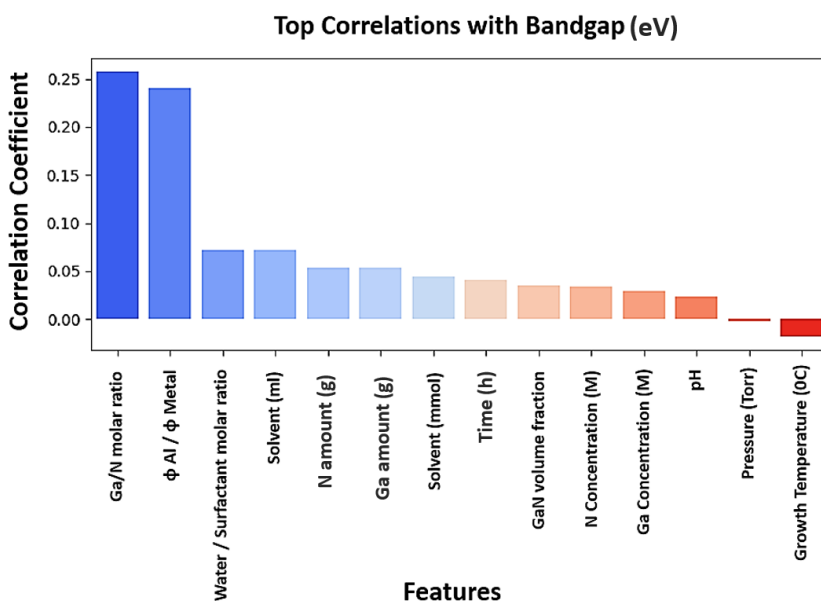
شکل ۱: توزیع مقادیر پهنای باند ذرات نقاط کوانتومی GaN بدست آمده از مقالات علمی.

همان‌طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، تنها بخش کمی از مقادیر پهنای باند (۲/۵ تا ۳ الکترون ولت (eV)) در نواحی مرزی طول‌موج‌های فرابنفش و مرئی قرار می‌گیرند و بیشتر مقادیر پهنای باند (۳ تا ۶ eV) مربوط به ناحیه‌ی طول‌موجی فرابنفش می‌باشند. بیش‌ترین فراوانی برای مقادیر پهنای باند، مربوط به بازه‌ی ۳/۴ تا ۴ eV بدست آمده است که معادل دامنه‌ی طول‌موجی فرابنفش ۳۰۰ تا ۳۵۰ نانومتر می‌باشد. علاوه بر این، مقادیر پهنای باند ۴/۵ تا ۵ eV متناظر با بازه‌ی طول‌موجی تقریباً ۲۴۰ تا ۲۸۰ نانومتر می‌باشند که ناحیه‌ی طول‌موجی Solar-blind می‌باشد.

شکل ۲ نشان‌دهنده‌ی متغیرهایی است که بیش‌ترین میزان همبستگی با متغیر هدف (پهنای باند GaN QDs) را دارند. ضریب همبستگی یک مقدار عددی بین -۱ تا +۱ را بدست می‌دهد که نشان‌دهنده‌ی میزان ارتباط بین متغیرها است. ضریب همبستگی مثبت نشان می‌دهد که دو متغیر دلخواه ارتباط مستقیم با هم دارند، به این معنا که با افزایش یک متغیر، متغیر دیگر نیز افزایش می‌یابد. از طرف دیگر، ضریب همبستگی منفی نشان‌دهنده‌ی وجود یک ارتباط معکوس بین دو متغیر مورد نظر است، به نحوی که افزایش یک متغیر منجر به کاهش متغیر دیگر می‌شود. هر چقدر مقدار ضریب همبستگی به مقادیر +۱ و -۱ نزدیک‌تر باشد ارتباط (همبستگی) بین متغیرها قوی‌تر است.

همان‌طور که در شکل ۲ نشان داده شده است، پهنای باند GaN QDs ضریب همبستگی بالاتری با متغیرهایی هم‌چون نسبت شار آلومینیوم به فلز (Φ_{Al}/Φ_{Metal}) و نسبت مولی

Ga/N نشان می‌دهد. همان‌طور که قبلاً هم اشاره شد، با کاهش اندازه (قطر) ذرات نقاط کوانتومی ترازهای انرژی لایه‌های ظرفیت^۱ و هدایت^۲ فشرده‌تر می‌شوند که باعث بیشتر شدن اثر محصورشدن کوانتومی و در نتیجه افزایش فاصله‌ی بین ترازهای ظرفیت و هدایت (پهنای باند) می‌شود. بنابراین، با تغییر پارامترهای موثر بر سنتز QDs می‌توان قطر نانوذرات و پهنای باند آنها را کنترل کرد. علاوه بر این، افزایش نسبت Φ_{Al}/Φ_{Metal} می‌تواند منجر به تغییر در ترکیب و خواص ساختاری QDs شود و در نتیجه بر پهنای باند نانوذرات تاثیرگذار می‌باشد. این پدیده اغلب به دلیل وجود مقادیر بیشتر آلومینیوم (Al) در شبکه GaN است که می‌تواند پهنای باند را گسترش دهد، زیرا AlN پهنای باند گسترده‌تری نسبت به GaN دارد [۳۳]. این در حالی است که در فرآیند سنتز GaN QDs، نسبت مولی Ga/N نقش مهمی در تعیین خواص ساختاری و نوری این نانوذرات (هم‌چون پهنای باند) ایفا می‌کند. به همین دلیل، نسبت بهینه‌ی Ga/N منجر به رشد استوکیومتری QDs می‌شود، نقص‌ها را به حداقل می‌رساند و منجر به یک پهنای باند معین برای نانوذرات می‌شود [۳۴].



شکل ۲: ضریب همبستگی بین متغیرهای موثر بر سنتز ذرات نقاط کوانتومی GaN و پهنای باند نانوذرات.

¹ Valence band

² Conduction band

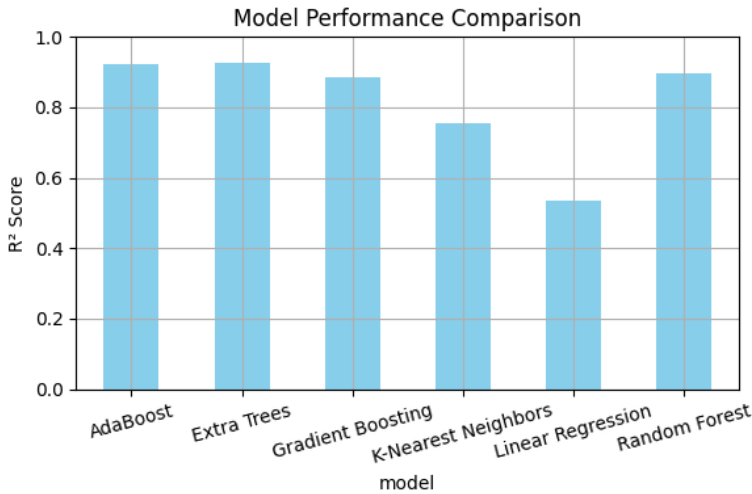
۳-۲ مدل‌های یادگیری ماشین

در این پژوهش، از روش‌های یادگیری ماشین مختلف همراه با اطلاعات استخراج شده از مقالات علمی برای بررسی مهم‌ترین متغیرهای تاثیرگذار (از بین متغیرهای گزارش شده در مقالات علمی) بر سنتز GaN QDs قابل کاربرد در ساخت آشکارسازهای نوری فرابنفش استفاده شده است. با استفاده از الگوریتم یادگیری ماشین AdaBoost (به عنوان مدل انتخابی) متغیرهای نسبت مولی Ga/N، نسبت $\Phi Al/\Phi Metal$ ، زمان و دمای رشد به عنوان مهم‌ترین متغیرهای موثر بر مقادیر پهنای باند GaN QDs انتخاب شدند. علاوه بر این، مدل‌های یادگیری ماشین برای بدست آوردن نواحی محتمل بهینه سنتز GaN QDs برای مقادیر دلخواه پهنای باند (در ناحیه‌ی طول موجی فرابنفش) به کار برده شدند.

۳-۲-۱ بررسی عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین

در این بخش، از الگوریتم‌های یادگیری ماشین هم‌چون AdaBoost، Extra Trees، Random Forest، Gradient Boosting، KNN و رگرسیون خطی برای توسعه‌ی یک مدل که بتواند به طور صحیح شرایط سنتز GaN QDs را توصیف کند، استفاده شده است. همان‌طور که در شکل ۳ نشان داده شده است، یک مقایسه بین عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین برای پیش‌بینی مقادیر پهنای باند GaN QDs صورت گرفته است. در اینجا، عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین با استفاده از معیارهایی هم‌چون ضریب تعیین (R^2) و میانگین مربعات خطا (MSE) ارزیابی شده است. همان‌طور که از شکل ۳ مشخص است، با در نظر گرفتن معیار R^2 ، مدل‌های AdaBoost، Extra Trees، Random Forest و Gradient Boosting نسبت به سایر مدل‌ها عملکرد بهتری از خود نشان داده‌اند (مقادیر R^2 بزرگتر از ۰/۸). هم‌چنین، مقدار ضریب تعیین برای مدل‌های AdaBoost و Extra Trees تقریباً برابر و بزرگتر از مدل‌های Random Forest و Gradient Boosting می‌باشد. از طرف دیگر، مدل رگرسیون خطی شامل پایین‌ترین مقدار R^2 است (R^2 کمتر از ۰/۶) که نشان‌دهنده‌ی وجود ارتباطات غیرخطی بین متغیرهای داده و متغیر هدف (پهنای باند) است. به همین دلیل، مدل رگرسیون خطی عملکرد قابل قبولی در توصیف تغییرات مرتبط با مقادیر پهنای باند GaN QDs نشان نداده است و یک بخش قابل ملاحظه از تغییرات موجود در داده توسط مدل رگرسیون خطی توصیف نشده است. بنابراین، مدل‌های یادگیری جمعی (Ensemble learning) توانایی بالاتری در پیش‌بینی دقیق پارامترهای سنتز نسبت به مدل‌های خطی پایه دارند. این تفاوت معنادار در دقت پیش‌بینی، تاییدکننده‌ی این است که روابط حاکم بر سنتز GaN QDs دارای ماهیت غیرخطی پیچیده‌ای است که تنها با استفاده

از الگوریتم‌های Ensemble قابل مدل‌سازی و استخراج است. این در حالی است که با وجود عملکرد تقریباً مشابه مدل‌های AdaBoost و Extra Trees، به دلیل ماهیت یادگیری ترتیبی، استفاده‌ی موثر از نمونه‌های محدود و کاهش تصادفی‌سازی غیرضروری، مدل AdaBoost در مقایسه با مدل Extra Trees عملکرد بهتری در پردازش داده‌های کم‌حجم آزمایشگاهی از خود نشان می‌دهد [۳۵].

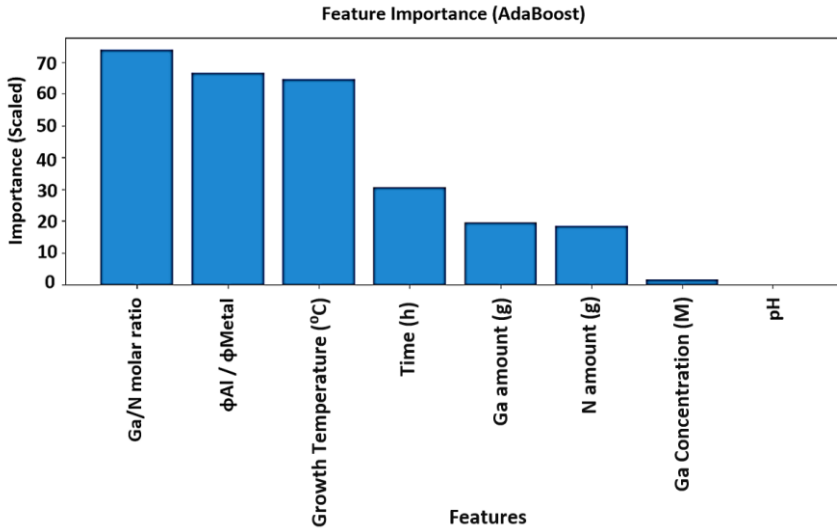


شکل ۳: بررسی عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین برای توصیف تغییرات مرتبط با پهنای باند ذرات نقاط کوانتومی GaN در داده‌ی استخراج شده.

شکل ۴ مهم‌ترین متغیرهای موثر بر سنتز GaN QDs که توسط مدل یادگیری ماشین AdaBoost پیش‌بینی شده است را نشان می‌دهند. با توجه به شکل ۴، از بین همه‌ی متغیرهای در نظر گرفته شده، متغیرهای نسبت مولی Ga/N، نسبت Φ_{Al}/Φ_{Metal} ، دمای رشد و زمان، مهم‌ترین متغیرهای تاثیرگذار بر سنتز GaN QDs می‌باشند و بیش‌ترین تاثیر را بر مقادیر پهنای باند این نانوذرات دارند. به‌منظور ارزیابی پایداری و قابل اطمینان بودن اهمیت ویژگی‌ها، از رویکرد Repeated-k-fold CV (با $k=5$ و $Nrep=5$) استفاده شد. در این بررسی، مدل در تکرارهای مختلف (۲۵ تکرار) آموزش دید تا نوسانات احتمالی اهمیت پارامترها مشخص گردد. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که چهار پارامتر (ویژگی) نسبت مولی Ga/N (0.339 ± 0.077)، دمای رشد (0.311 ± 0.069)، نسبت شار آلومینیوم به فلز (0.277 ± 0.048) و زمان (0.042 ± 0.016) به طور پایداری بیش‌ترین سهم را در پیش‌بینی مقادیر پهنای باند نانوذرات توسط مدل دارند. با توجه به این که امتیاز اهمیت ویژگی‌ها یک

معیار نسبی است و مجموع آن برابر با ۱ می‌باشد، پوشش بیش از ۹۷٪ از اهمیت کل مدل توسط این چهار پارامتر، بیانگر نقش غالب آن‌ها در فرآیند سنتز و تعیین ویژگی‌های نوری نانوذرات می‌باشد. همچنین، پایین بودن انحراف معیار نسبت به میانگین در تمامی این موارد، حاکی از پایداری نتایج است و ثبات رتبه‌بندی ویژگی‌ها را در برابر تقسیم‌بندی‌های مختلف داده‌ها تایید می‌کند.

متغیرهایی هم‌چون نسبت مولی Ga/N و دمای رشد از نظر فیزیکی با مکانیسم‌های ترمودینامیکی و سینتیکی حاکم بر هسته‌زایی و رشد GaN QDs سازگار می‌باشند. تغییرات در این پارامترها بر کیفیت کریستال‌ها و اثرات محصور شدن کوانتومی تاثیرگذار است و در نتیجه پهنای باند نانوذرات را نیز تحت تاثیر قرار می‌دهد. به عنوان مثال، اندازه (پهنای باند) QDs با تنظیم شرایط رشد می‌تواند به‌طور قابل ملاحظه‌ای تغییر کند، به نحوی که افزایش دمای رشد باعث تشکیل QDs بزرگ‌تر با چگالی کمتر می‌شود که این امر ناشی از افزایش نفوذ سطحی فلز Ga می‌باشد [۳۲]. همچنین، با تغییر نسبت مولی Ga/N می‌توان به QDs با اندازه‌های مختلف دست یافت [۳۱]. از طرف دیگر، وجود مقادیر بیشتر Al نسبت به فلز Ga در شبکه AlGaIn می‌تواند پهنای باند را گسترش دهد، بنابراین بر روی خواص نوری نانوذرات تاثیرگذار می‌باشد [۳۳]. در گزارش‌های تجربی مربوط به رشد جزیره‌ای ذرات نقاط کوانتومی (از جمله رویکردهای رایج مانند Stranski-Krastanov)، رقابت بین تشکیل لایه‌ی ترشوندگی و گذار به رشد سه‌بعدی، به تعادل بین شار مواد ورودی، دمای رشد، نسبت مولی Ga/N و زمان وابسته است. بنابراین، این پارامترها می‌توانند با تاثیر بر سینتیک هسته‌زایی، تحرک سطحی و نرخ رشد، تعیین‌کننده‌ی اندازه، چگالی و یکنواختی QDs باشند. در نهایت، تغییرات ایجاد شده در اندازه و یکنواختی می‌تواند به تغییر در میزان محصور شدن کوانتومی و در نتیجه تغییر در پهنای باند نانوذرات منجر شود. مطابق نتایج بدست آمده از مدل یادگیری ماشین، نسبت مولی Ga/N، دمای رشد، نسبت Φ_{Al}/Φ_{Metal} و زمان بالاترین اهمیت را در پیش‌بینی پهنای باند نانوذرات دارند که با نقش فیزیکی مورد انتظار این پارامترها در کنترل مورفولوژی و ویژگی‌های نوری QDs سازگار می‌باشد. این در حالی است که در سنتز QDs توجه کردن به متغیرهای دیگر هم‌چون نوع و غلظت پیش‌ماده‌ها و حلال نیز برای سنتز QDs با کیفیت بالا حائز اهمیت می‌باشد.



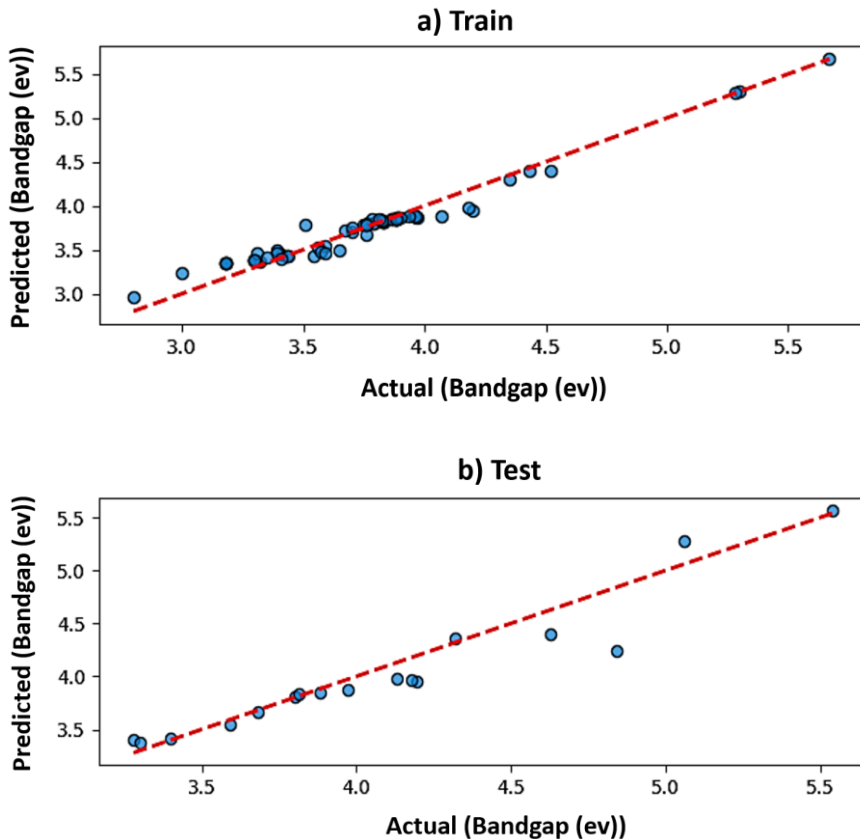
شکل ۴: اهمیت متغیرهای موثر بر سنتز ذرات نقاط کوانتومی GaN با استفاده از مدل یادگیری ماشین AdaBoost.

علاوه بر عملکرد مناسب، الگوریتم AdaBoost در مقایسه با سایر روش‌ها از پیچیدگی محاسباتی کمتری برخوردار بوده و در مجموعه داده‌های با حجم محدود، پایداری مناسبی در استخراج روابط غیرخطی میان متغیرهای فرآیند سنتز و پهنای باند نانوذرات از خود نشان داده است.

۳-۲-۲ الگوریتم یادگیری AdaBoost

با توجه به نتایج بدست آمده از بررسی عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین مختلف (شکل ۳)، می‌توان نتیجه گرفت که مدل‌های AdaBoost و Extra Trees نسبت به سایر مدل‌ها عملکرد بهتری دارند و مقدار ضریب R^2 برای آنها بیش‌تر از بقیه‌ی مدل‌ها است. بر این اساس، مدل یادگیری AdaBoost به عنوان مدل انتخابی برای توصیف تغییرات مرتبط با پهنای باند GaN QDs در داده‌ی مورد نظر و بررسی مهم‌ترین متغیرهای تاثیرگذار بر سنتز این نانوذرات به کار برده شده است. در اینجا، رویکرد Repeated-k-fold-CV (با $k=5$ و $N_{rep}=5$) برای کاهش بیش‌برازش احتمالی و بهبود تعمیم‌پذیری مدل یادگیری استفاده شده است. با استفاده از رویکرد اعتبارسنجی متقاطع، مقدار $R^2=0.831 (\pm 0.130)$ برای مدل یادگیری ماشین بدست آمد. در ادامه، برای ارزیابی تعمیم‌پذیری و پایداری مدل ML،

ماتریس داده‌ی اولیه به صورت تصادفی به دو بخش آموزش (۸۰٪) و آزمایش (۲۰٪) تقسیم شد و مدل AdaBoost برای پیش‌بینی مقادیر پهنای باند به کار برده شد. ابر پارامترهای^۱ اصلی مدل AdaBoost شامل تعداد تخمین‌زننده‌ها (estimators)، نرخ یادگیری (learning rate) و مقدار اولیه‌ی مولد اعداد تصادفی (random seed) با استفاده از ۸۰٪ داده (مربوط به بخش آموزش) و مستقل از مجموعه داده‌ی آزمایش بهینه‌سازی شدند تا عملکردی پایدار برای مدل ML حاصل شود. شکل ۵ نتایج مربوط به استفاده از الگوریتم AdaBoost برای مدل کردن و پیش‌بینی مقادیر پهنای باند GaN QDs را نشان می‌دهد.



شکل ۵: مقادیر پهنای باند واقعی برحسب مقادیر پهنای باند پیش‌بینی شده توسط مدل AdaBoost در مراحل یادگیری (a) و پیش‌بینی (b).

¹ Hyperparameters

همان‌طور که در شکل ۵ (a) نشان داده شده است، برای مدل AdaBoost و در مرحله‌ی یادگیری (آموزش) مقادیر $R^2 = ۰/۹۶۰۶$ و $MSE = ۰/۰۰۱۹$ بدست آمده است که نشان‌دهنده‌ی برآزش خوب مدل به داده‌ی یادگیری است. همچنین، مقادیر بدست آمده $R^2 = ۰/۹۰۲۳$ و $MSE = ۰/۰۳۶۶$ در مرحله‌ی آزمایش (شکل ۵ (b)) مشاهده می‌شود که مدل توسعه داده شده توانایی پیش‌بینی قابل قبول برای مقادیر پهنای باند GaN QDs دارد.

در ادامه، از مدل AdaBoost (به عنوان مدل یادگیری ماشین انتخابی) برای پیدا کردن نواحی محتمل بهینه‌ی مهم‌ترین متغیرهای موثر بر شرایط سنتزی که منجر به بدست آمدن پهنای باند در دامنه‌های مورد نظر (۲/۵ تا ۳/۵ و ۴/۵ تا ۵/۰ eV) می‌شود، استفاده شده است. با توجه به عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین در پیش‌بینی پهنای باند GaN QDs در بخش‌های پیشین، مدل یادگیری AdaBoost برای پیش‌بینی شرایط سنتز GaN QDs در نظر گرفته شد. جدول ۱ شرایط واکنش پیشنهاد شده توسط مدل یادگیری AdaBoost برای سنتز نانوذرات GaN با دامنه‌ی پهنای باند مورد نظر را نشان می‌دهد.

جدول ۱: نواحی محتمل بهینه سنتز پیش‌بینی شده توسط مدل AdaBoost برای GaN QDs با پهنای باند در بازه ۲/۵ تا ۳/۵ الکترون ولت (eV).

پارامتر	پهنای باند (۳/۵ - ۲/۵ eV)
مقدار گالیوم (g)	۱/۳۹۸
دمای رشد (°C)	۸۴۳
زمان (h)	۷/۰۰
نسبت شار آلومینیوم به فلز	۰/۰۰
نسبت مولی Ga/N	۰/۰۵۵

در این مطالعه، مدل AdaBoost برای پیش‌بینی نواحی محتمل بهینه سنتز GaN QDs در بازه‌های پهنای باند ۲/۵ تا ۳/۵ eV (ناحیه فرابنفش A/B) و ۴/۵ تا ۵/۰ eV (ناحیه فرابنفش Solar-blind) به کار گرفته شد. برای هر بازه، پارامترهای کلیدی سنتز شامل دما، زمان، نسبت مولی Ga/N، نسبت $\Phi Al/\Phi Metal$ و مقدار Ga با استفاده از روش AdaBoost تحلیل و میانگین و بازه اطمینان ۹۵٪ برای هر پارامتر محاسبه گردید. برای بازه‌ی پهنای باند ۲/۵ تا ۳/۵ eV، مدل با استفاده از ۲۰ نمونه داده معتبر، پیش‌بینی‌هایی با ثبات آماری مناسب ارائه داد. نتایج نشان می‌دهد که دمای بهینه در این

محدوده 843°C با فواصل اطمینان $951-734^{\circ}\text{C}$ است که حاکی از پراکندگی در داده‌های تجربی می‌باشد. زمان سنتز بهینه حدود 7h با فواصل اطمینان $1/12-1/7\text{h}$ برآورد شده است که نشان‌دهنده تنوع قابل توجه در رویکردهای سنتز گزارش شده است. همچنین، نسبت $\Phi\text{Al}/\Phi\text{Metal}$ تقریباً صفر محاسبه شد. مقدار نزدیک به صفر پیش‌بینی شده برای این پارامتر می‌تواند ناشی از محدود بودن داده‌های موجود در این بازه‌ی پهنای باند یا سهم کمتر این پارامتر نسبت به سایر متغیرهای کلیدی باشد. برای مقدار Ga نیز مقدار $1/398\text{g}$ با فواصل اطمینان $2/292-0/503\text{g}$ بدست آمد. همچنین، برای نسبت مولی Ga/N، مقدار $0/055$ با فواصل اطمینان $0/150-0/000$ پیش‌بینی شده است. به طور کلی، با وجود پراکندگی نسبتاً بالا در برخی پارامترها، مدل توانسته است الگوهای معناداری را از داده استخراج کرده و نواحی محتمل بهینه سنتز را با سطح اطمینان قابل قبول پیش‌بینی نماید. پراکندگی نسبتاً بالای برخی پارامترها را می‌توان به ناهمگنی داده‌های استخراج شده از منابع مختلف نسبت داد. داده‌های مورد استفاده در این مطالعه از مقالات متعدد با روش‌های سنتز متفاوت و روش‌های اندازه‌گیری گوناگون گردآوری شده‌اند.

اگرچه محاسبات برای هر دو بازه‌ی پهنای باند انجام شد، اما نتایج مربوط به بازه‌ی $4/5$ تا $5/0\text{eV}$ از اعتبار آماری کافی برخوردار نبود. بررسی داده‌ها نشان داد که در مجموعه داده اولیه، تعداد نمونه‌های کافی با پهنای باند در این محدوده وجود ندارد (تعداد نمونه‌ها کمتر از ۳ می‌باشد). به همین دلیل، مدل قادر به ارائه تخمین‌های قابل اعتماد برای این بازه نبوده و مقادیر پیش‌بینی شده دارای عدم قطعیت بالایی بودند. در مقابل، بازه‌ی $2/5$ تا $3/5\text{eV}$ با ۲۰ نمونه داده معتبر، نتایج آماری قابل قبولی ارائه داد. بنابراین، جدول نهایی تنها شامل شرایط بهینه برای بازه‌ی $2/5$ تا $3/5\text{eV}$ می‌باشد. بدیهی است که برای دستیابی به پیش‌بینی‌های معتبر در بازه $4/5$ تا $5/0\text{eV}$ ، لازم است داده‌های تجربی بیشتری جمع‌آوری گردد.

رویکرد به کار رفته در این پژوهش می‌تواند به طراحان آزمایش در انتخاب مهم‌ترین متغیرهای موثر بر سنتز نانوذرات و پیش‌بینی نواحی محتمل بهینه‌ی متغیرها در سنتز QDs کمک کند. در این پژوهش، تمرکز بر پهنای باند نانوذرات به‌عنوان یکی از پارامترهای تعیین‌کننده‌ی ناحیه‌ی طیفی آشکارسازی بوده است و سایر عوامل عملکردی آشکارساز خارج از دامنه‌ی مطالعه‌ی حاضر قرار دارند.

۴- نتیجه‌گیری و کارهای آینده

در این پژوهش، الگوریتم‌های یادگیری ماشین بر روی داده‌های استخراج شده از مقالات علمی (شامل متغیرهای موثر بر شرایط سنتز GaN QDs) به کار برده شد تا مهم‌ترین متغیرهای موثر بر سنتز GaN QDs پیش‌بینی شوند. مقایسه‌ی مدل‌های یادگیری ماشین مختلف نشان داد که مدل AdaBoost نسبت به سایر مدل‌ها عملکرد بهتری در توصیف تغییرات مرتبط با پهنای باند نانوذرات دارد. نتایج بدست آمده از مدل AdaBoost (به عنوان مدل یادگیری ماشین انتخابی) نشان داد که متغیرهای نسبت مولی Ga/N، نسبت Φ_{Al}/Φ_{Metal} ، زمان و دمای رشد، مهم‌ترین متغیرهای تاثیرگذار بر سنتز GaN QDs می‌باشند و بیش‌ترین تاثیر را بر مقادیر پهنای باند این نانوذرات دارند. همچنین، با استفاده از مدل AdaBoost، نواحی محتمل بهینه‌ی متغیرهای تاثیرگذار بر سنتز GaN QDs قابل کاربرد در ناحیه‌ی طول موجی فرابنفش پیش‌بینی شد. از محدودیت‌های این پژوهش می‌توان به حجم نسبتاً محدود مجموعه داده استخراج شده از مقالات علمی، ناهمگنی شرایط آزمایشگاهی در منابع مختلف و عدم انجام اعتبارسنجی تجربی مستقل برای شرایط پیشنهادی اشاره کرد. بنابراین، نتایج ارائه شده باید به‌عنوان ابزاری جهت هدایت طراحی آزمایش و شناسایی روندهای حاکم بر سنتز GaN QDs تفسیر شوند.

برای مسیرهای پژوهشی آینده، چندین راهکار برای ارتقای دقت و کاربرد این مطالعه پیشنهاد می‌گردد. نخست، گسترش مجموعه داده‌های اولیه با در نظر گرفتن شرایط متنوع‌تر سنتز می‌تواند منجر به بهبود قابلیت تعمیم‌پذیری مدل در پیش‌بینی ویژگی‌های نوری مورد نظر شود. همچنین، بررسی و مقایسه عملکرد سایر الگوریتم‌های نوظهور در حوزه یادگیری ماشین و الگوریتم‌های یادگیری ماشین کوانتومی با نتایج فعلی، درک عمیق‌تری از روابط پیچیده میان پارامترهای ساخت و خواص GaN QDs فراهم می‌کند. علاوه بر این، به‌کارگیری خروجی‌های این مدل جهت هدایت فرآیندهای سنتز در آزمایشگاه و مقایسه نتایج تجربی با پیش‌بینی‌های انجام شده، می‌تواند در جهت اعتبارسنجی نهایی و عملیاتی کردن مدل‌های محاسباتی در حوزه نانو فناوری موثر باشد.

۵- تعارض منافع

نویسندگان اعلام می‌دارند که در مورد انتشار این مقاله تضاد منافع وجود ندارد. علاوه بر این، موضوعات اخلاقی شامل سرقت ادبی، رضایت آگاهانه، سوء رفتار، جعل داده‌ها، انتشار و ارسال مجدد و مکرر توسط نویسندگان رعایت شده است.

۶- دسترسی آزاد

این نشریه دارای دسترسی باز است و اجازه اشتراک (تکثیر و بازآرایی محتوا به هر شکل) و انطباق (بازترکیب، تغییر شکل و بازسازی بر اساس محتوا) را می‌دهد.

۷- منابع

- [۱] Kumar, D.S., B.J. Kumar, & H. Mahesh. (2018). Quantum nanostructures (QDs): an overview. *Synthesis of inorganic nanomaterials*, 59-88.
- [۲] Li, Z., T. Yan, & X. Fang. (2023). Low-dimensional wide-bandgap semiconductors for UV photodetectors. *Nature Reviews Materials*. 8(9), 587-603.
- [۳] Braham, E.J., J. Cho, K.M. Forlano, D.F. Watson, R. Arròyave, & S. Banerjee. (2019). Machine learning-directed navigation of synthetic design space: A statistical learning approach to controlling the synthesis of perovskite halide nanoplatelets in the quantum-confined regime. *Chemistry of Materials*. 31(9), 3281-3292.
- [۴] Baum, F.b., T. Pretto, A. Köche, & M.J.L. Santos. (2020). Machine learning tools to predict hot injection syntheses outcomes for II-VI and IV-VI quantum dots. *The Journal of Physical Chemistry C*. 124(44), 24298-24305.
- [۵] Chetia, A., J. Bera, A. Betal, & S. Sahu. (2022). A brief review on photodetector performance based on zero dimensional and two dimensional materials and their hybrid structures. *Materials Today Communications*. 30, 103224.
- [۶] Dennis, P. (2012). *Photodetectors: an introduction to current technology*. Springer Science & Business Media.

- [٧] Ding, M., Z. Guo, X. Chen, X. Ma, & L. Zhou. (2020). Surface/Interface engineering for constructing advanced nanostructured photodetectors with improved performance: A brief review. *Nanomaterials*. 10(2), 362.
- [٨] Huo, N.& G. Konstantatos. (2018). Recent progress and future prospects of 2D- based photodetectors. *Advanced Materials*. 30(51), 1801164.
- [٩] Yadav, P.K., B. Ajitha, Y.A.K. Reddy, & A. Sreedhar. (2021). Recent advances in development of nanostructured photodetectors from ultraviolet to infrared region: A review. *Chemosphere*. 279, 130473.
- [١٠] Adinolfi, V., O. Ouellette, M.I. Saidaminov, G. Walters, A.L. Abdelhady, O.M. Bakr, & E.H. Sargent. (2016). Fast and sensitive solution-processed visible-blind perovskite UV photodetectors. *Adv. Mater*. 28(33), 7264-7268.
- [١١] Nasiri, N., D. Jin, & A. Tricoli. (2019). Nanoarchitectonics of visible- blind ultraviolet photodetector materials: critical features and nano- microfabrication. *Advanced Optical Materials*. 7(2), 1800580.
- [١٢] Östling, M. (2011). High power devices in wide bandgap semiconductors. *Science China Information Sciences*. 54, 1087-1093.
- [١٣] Jiawei, L., Y. Zhizhen, & N. Nasser. (2003). GaN-based quantum dots. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 16(2), 244-252.
- [١٤] Qiu, H., J. Wu, M. Li, Z. Hu, S. Yang, Y. Li, Y. Gu, H. Cheng, & Y. Zheng. (2024). Oxygen-doped colloidal GaN quantum dots with blue emission. *Materials Today Chemistry*. 35, 101888.
- [١٥] Kobayashi, Y., K. Kumakura, T. Akasaka, & T. Makimoto. (2012). Layered boron nitride as a release layer for mechanical transfer of GaN-based devices. *Nature*. 484(7393), 223-227.
- [١٦] Daudin, B., C. Adelmann, N. Gogneau, E. Sarigiannidou, E. Monroy, F. Fossard, & J. Rouvière. (2004). GaN quantum dots by molecular beam epitaxy. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 21(2-4), 540-545.

- [۱۷] Zhang, R., G. Wang, Q. Zhang, S. Wang, X. Hu, L. Liu, S. Lv, W. Chen, X. Xu, & L. Zhang. (2025). Recent progress in GaN-based ultraviolet photodetectors. *Journal of Materials Chemistry C*. 13(22), 10972-10996.
- [۱۸] Chen, Y., J. Liu, K. Liu, J. Si, Y. Ding, L. Li, T. Lv, J. Liu, & L. Fu. (2019). GaN in different dimensionalities: Properties, synthesis, and applications. *Materials Science and Engineering: R: Reports*. 138, 60-84.
- [۱۹] Tchernycheva, M., A. Messanvi, A. de Luna Bugallo, G. Jacopin, P. Lavenus, L. Rigutti, H. Zhang, Y. Halioua, F. Julien, & J. Eymery. (2014). Integrated photonic platform based on InGaN/GaN nanowire emitters and detectors. *Nano letters*. 14(6), 3515-3520.
- [۲۰] Gyger, F., P. Bockstaller, H. Gröger, D. Gerthsen, & C. Feldmann. (2014). Quantum-confined GaN nanoparticles synthesized via liquid-ammonia-in-oil-microemulsions. *Chemical Communications*. 50(22), 2939-2942.
- [۲۱] Yue, Y., Z. Hu, J. Guo, B. Sensale-Rodriguez, G. Li, R. Wang, F. Faria, T. Fang, B. Song, & X. Gao. (2012). InAlN/AlN/GaN HEMTs with regrown ohmic contacts and f_{T} of 370 GHz. *IEEE Electron Device Letters*. 33(7), 988-990.
- [۲۲] Tanaka, A., W. Choi, R. Chen, & S.A. Dayeh. (2017). Si complies with GaN to overcome thermal mismatches for the heteroepitaxy of thick GaN on Si. *Advanced Materials*. 29(38), 1702557.
- [۲۳] Goswami, L., N. Aggarwal, P. Vashishtha, S.K. Jain, S. Nirantar, J. Ahmed, M.M. Khan, R. Pandey, & G. Gupta. (2021). Fabrication of GaN nano-towers based self-powered UV photodetector. *Scientific Reports*. 11(1), 10859.
- [۲۴] Wu, H., J. Pan, J. Wang, C. Guo, S. Du, D. Xiao, D. Guo, & J. Hu. (2025). Pyro-phototronic-enhanced self-powered broadband UV photodetector based on GaNQDs/GaN homojunction for deep-UV imaging applications. *Materials Today Physics*, 101876.
- [۲۵] Jordan, M.I. & T.M. Mitchell. (2015). Machine learning: Trends, perspectives, and prospects. *Science*. 349(6245), 255-260.

- [۲۶] Janiesch, C., P. Zschech, & K. Heinrich. (2021). Machine learning and deep learning. *Electronic Markets*. 31(3), 685-695.
- [۲۷] Günemann, S. (2017). Machine learning meets databases. *Datenbank-Spektrum*. 17(1), 77-83.
- [۲۸] Zhou, Z., X. Li, & R.N. Zare. (2017). Optimizing chemical reactions with deep reinforcement learning. *ACS central science*. 3(12), 1337-1344.
- [۲۹] Voznyy, O., L. Levina, J.Z. Fan, M. Askerka, A. Jain, M.-J. Choi, O. Ouellette, P. Todorovic, L.K. Sagar, & E.H. Sargent. (2019). Machine learning accelerates discovery of optimal colloidal quantum dot synthesis. *Acs Nano*. 13(10), 11122-11128.
- [۳۰] Vajire, S.L., A.P. Singh, D.K. Saini, A.K. Mukhopadhyay, K. Singh, & D. Mishra. (2022). Novel machine learning-based prediction approach for nanoindentation load-deformation in a thin film: Applications to electronic industries. *Computers & Industrial Engineering*. 174, 108824.
- [۳۱] Simeonov, D., E. Feltin, J.-F. Carlin, R. Butté, M. Ilegems, & N. Grandjean. (2006). Stranski-Krastanov GaN/AlN quantum dots grown by metal organic vapor phase epitaxy. *Journal of applied physics*. 99(8).
- [۳۲] Pelekanos, N., G. Dialynas, J. Simon, H. Mariette, & B. Daudin. *GaN quantum dots: from basic understanding to unique applications*. in *Journal of Physics: Conference Series*. 2005. IOP Publishing.
- [۳۳] Ghobadi, N., Daqiq, R. & Moradi, S.A.H. Layer-resolved berry curvature and Rashba spin-orbit control of quantum transport in magnetic tunnel junctions. *Sci Rep* 16, 9066 (2026). <https://doi.org/10.1038/s41598-026-39901-w>
- [۳۴] Seyed Ali Hosseini Moradi, Nader Ghobadi, Sajad Esfandiyari, Reza Daqiq, Enhanced spin-transfer torque in asymmetric uperlattice magnetic tunnel junctions with engineered barrier profiles, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Volume 29, 2025, 173276, ISSN 0304-8853, <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2025.173276>

[۳۵] Chen, H., K. Chen, D. Drabold, & M. Kordesch. (2000). Band gap engineering in amorphous Al x Ga 1- x N: Experiment and ab initio calculations. *Applied Physics Letters*. 77(8), 1117-1119.

[۳۶] Rouf, P., N.J. O'Brien, S.C. Buttera, I. Martinovic, B. Bakhit, E. Martinsson, J. Palisaitis, C.-W. Hsu, & H. Pedersen. (2020). Epitaxial GaN using Ga (NMe₂)₃ and NH₃ plasma by atomic layer deposition. *Journal of Materials Chemistry C*. 8(25), 8457-8465.

[۳۷] Freund, Y. & R.E. Schapire. (1997). A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting. *Journal of computer and system sciences*. 55(1), 119-139.