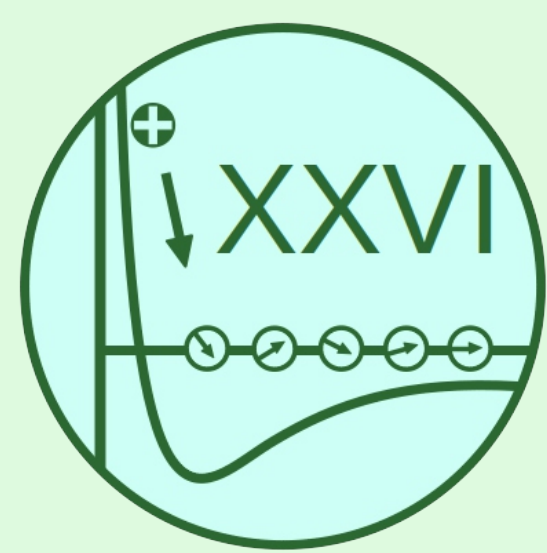




MODELING OF Al-Si SPUTTERING USING MACHINE LEARNING



Y.D. Belov, A.N.Kupriyanov, K.N. Lobzov, V.I. Bachurin, I.I.Amirov
¹Valiev Institute of Physics and Technology of Russian Academy of Sciences,
 Yaroslavl Branch
 e-mail:ildamirov@yandex.ru

A neural network (NN) has been developed to predict the sputtering coefficient of an Al-Si alloy based on a modified database of sputtering coefficients of Al and Si alloy components determined by the TRIDYN method. The data of Al-Si sputtering coefficients obtained as a result of NN training were in good agreement with the test dataset. Using NN, the sputtering coefficients of Al-Si were determined at different contents of components in the alloy.

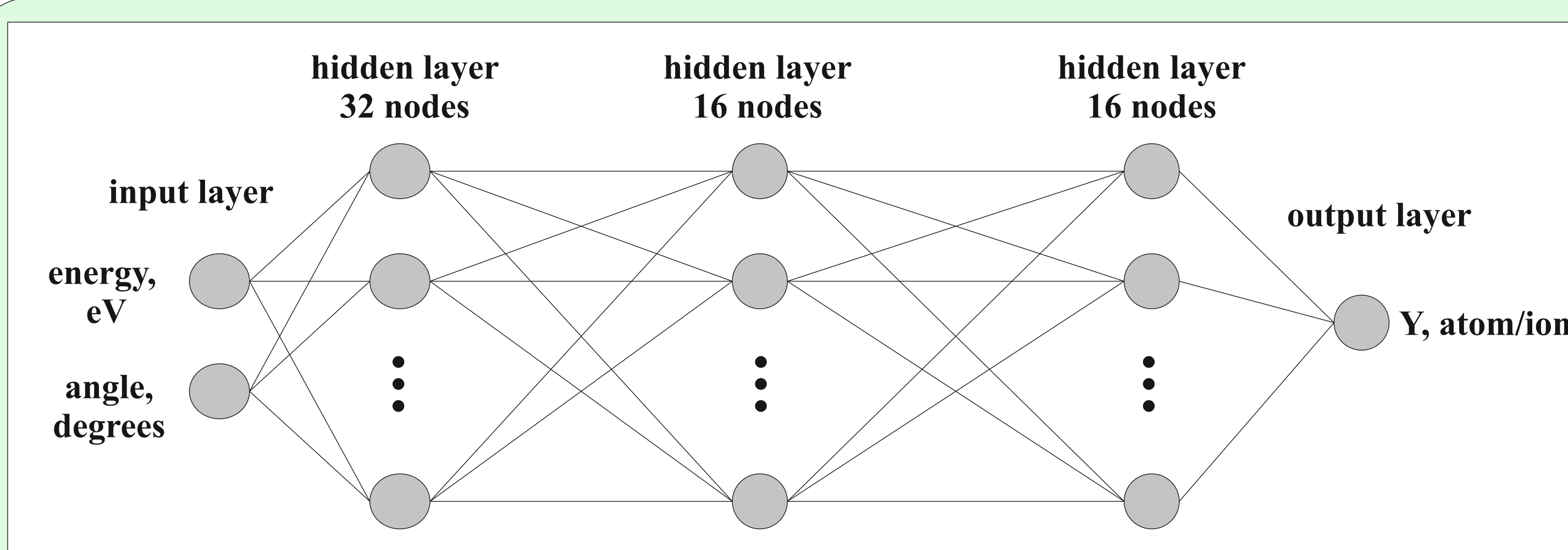


Fig. 1 Schematic of the utilized ANN

Метод машинного обучения (МО) начинает активно применяться для исследования процессов в плазме и ионного распыления материалов [1,2]. Целью данной работы была разработка нейросети для прогнозирования коэффициента распыления сплава Al-Si при бомбардировке поверхности ионами аргона низкой энергии (<1 кэВ). Обучение нейросети (НС) для расчета интегрального коэффициента распыления композитного материала Al-Si было произведено на основе баз данных коэффициентов распыления моноатомных мишеней Al и Si при энергии ионов <1 кэВ и углов 0-90°. Данные получены посредством расчета программы TRIDYN [3]. Для двухкомпонентного сплава коэффициент распыления записывали в виде:

$$Y_{\Sigma} = Y_a c_a + Y_b (1 - c_a), \quad (1)$$

где c_a – доля Si в сплаве, Y_a – коэффициент распыления Si, Y_b – коэффициент распыления Al.

Данные группировались для обучения нейросети в виде: угол падения, энергия иона, подаваемые на вход, и коэффициент распыления на выходе (рис. 1). Обучение проходило на 574 комбинациях. Шаг по энергии составлял 20 эВ, по углу – 10 градусов.

Нейросеть была написана на языке программирования Python с использованием библиотеки Tensorflow с модулем keras который обладает инструментами для работы со слоями, функциями, относящимися к нейронным сетям. Для визуализации полученных данных используются библиотеки Matplotlib и pylab.

References

- [1] A. Mesbah, D.B Graves. J. Phys. D: Appl. Phys. 52(2019) 30LT02
- [2] F. Krüger, T. Gergs, J. Trieschmann. Plasma Sources Sci. Technol. 28 (2019) 035002
- [3] W Möller, W Eckstein. Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 2 (1984) 814

Обучение НС на данных по моноатомным мишеням

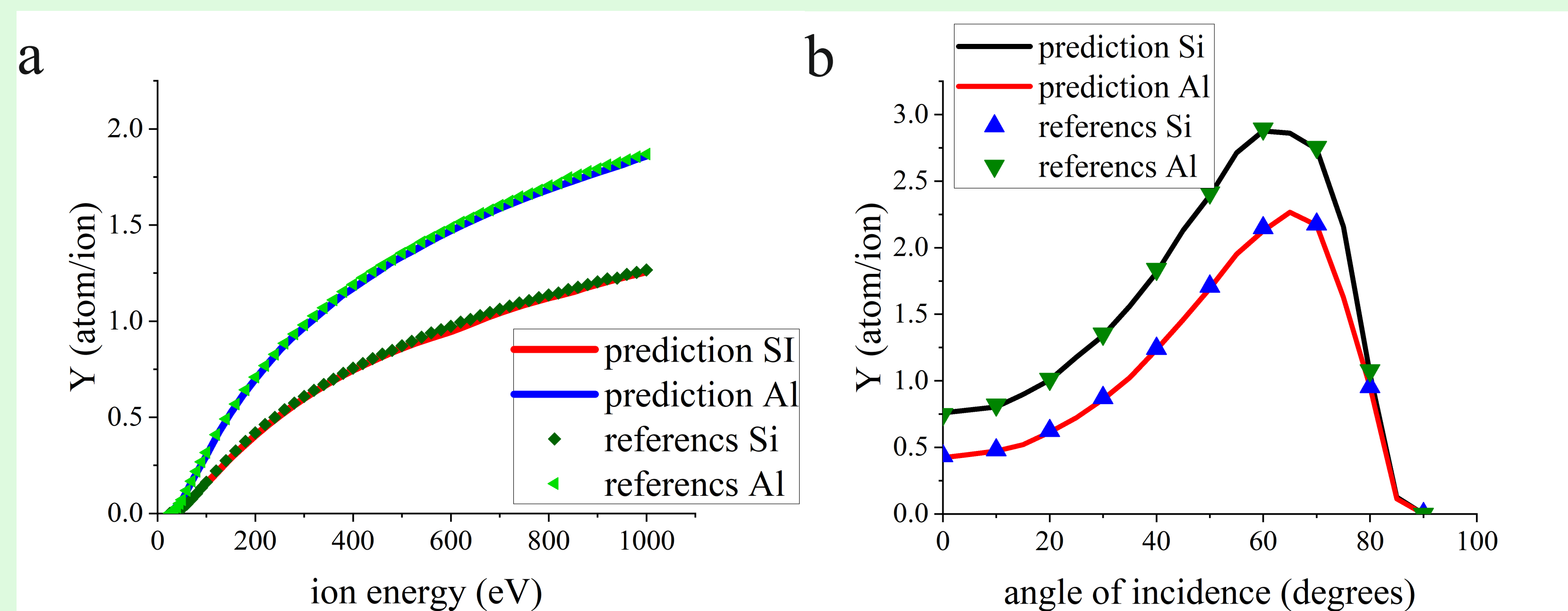


Fig. 2 Dependence of the sputtering yield on energy for 30 degrees (a) and angle for 500 eV (b) for predicted data in comparison with TRIDYN

На рисунках 2 а, б показано хорошее согласие результатов моделирования НС для Al и Si с данными TRIDYN. Для определения качества обученной НС применяется среднеквадратичная ошибка между обучающими и предсказанными НС. Для нашей модели с двумя слоями средняя квадратичная ошибка составляла 0.0027, с тремя слоями – 0.0019, для четырех слоев 0.0025. В дальнейшем использовали обучение с тремя слоями.

Обучение НС на сгенерированных данных сплавов

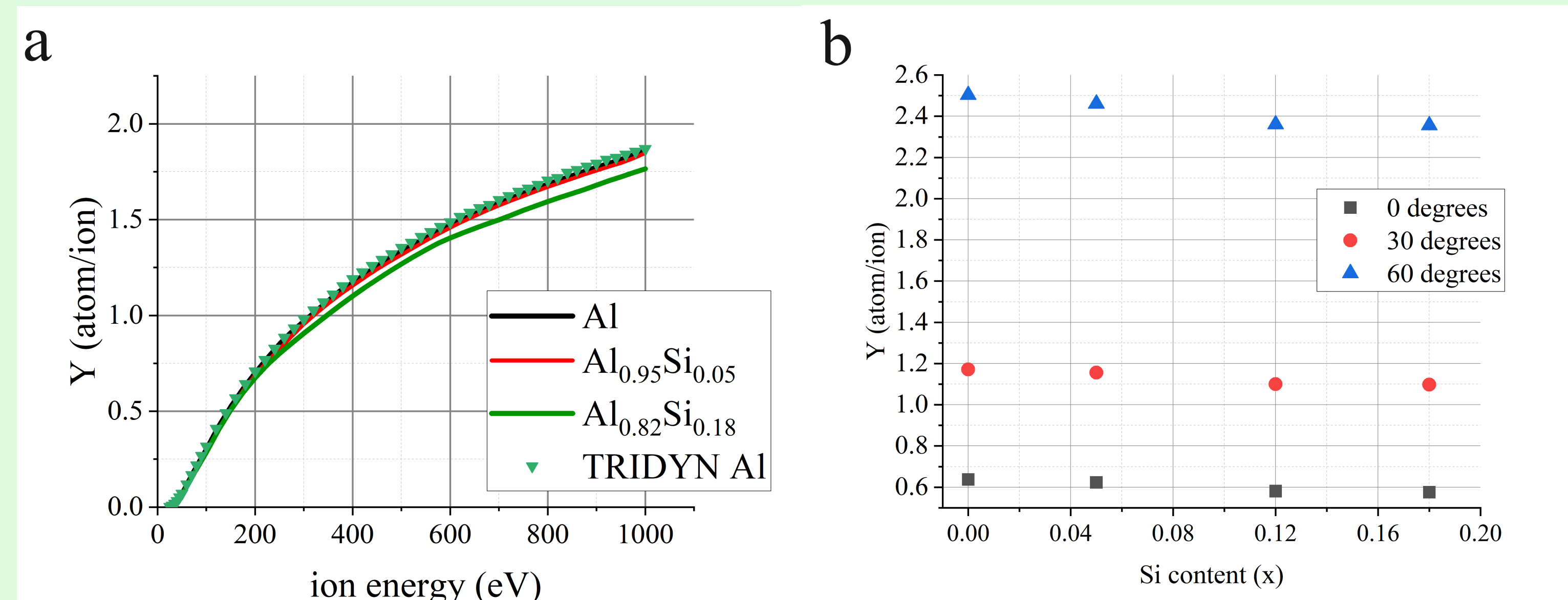


Fig. 3 Dependence of alloy sputtering yield on energy for 30 degrees (a) and angle of incidence 0, 30, 60 deg. for 400 eV (b) for predictive data

База данных для обучения сети на системе сплавов была создана с учетом содержания компонентов в сплаве по формуле (1). Нейросеть была обучена на полученных данных с конфигурацией, как для моноатомных мишеней. Результаты обучения представлены на рис. 3а. Коэффициенты распыления сплавов лежат ниже коэффициента распыления Al. С увеличением содержания Si в сплаве интегральный коэффициент распыления уменьшался (рис. 3б). Таким образом, созданная нейросеть, обученная на сгенерированных данных для двухкомпонентной системы, имеет тоже низкую погрешность. Для трех слоев ошибка была минимальной, среднеквадратичная ошибка равнялась 0.002. Генерация данных на одно значение занимает 45 мс.