

# 化合物半导体禁带宽度和 熔点的人工神经网络预报

张兆春 彭瑞伍 陈念贻 郭 进

(中国科学院上海冶金所 上海 200050)

**摘要** 利用经标志样本集训练的人工神经网络对 III-V、II-VI 族二元化合物和 I-III-V<sub>2</sub>、II-IV-V<sub>2</sub> 族三元化合物半导体的禁带宽度和熔点进行了预报, 计算结果与实验结果符合较好。

**PACC:** 0650, 7125T, 6590

## 1 引言

III-V 和 II-VI 族二元化合物是制造微波、光电及红外探测器件的重要半导体材料; 而 I-III-V<sub>2</sub> 和 II-IV-V<sub>2</sub> 族三元化合物则已被广泛用作非线性光学和太阳能电池材料。禁带宽度( $E$ )和熔点( $T_M$ )是决定这些化合物性质的两个重要参量, 虽然这些参数已由实验测定, 且对禁带宽度与化学组成的关系进行了许多研究<sup>[1-3]</sup>, 但是到目前为止, 人工神经网络(artificial neural network, ANN)尚未被应用于预报这些参量。ANN 是一类试图模拟人脑神经网络结构的新型数据处理系统, 具有自学习、自适应功能。ANN 可以从大量的实验数据中直接提取隐含的、有用的信息, 因而特别适应于解决涉及非线性及复杂系统的问题。ANN 理论是 80 年代中后期在世界范围内迅速发展起来的一个前沿研究领域, 其发展已对计算机科学、人工智能、认知科学等领域产生了重要影响。ANN 在文字识别、图象处理、智能控制以及专家系统等方面的应用研究成果也不断涌现。作为 ANN 在化合物半导体材料中应用<sup>[4-6]</sup>的一个例子, 并尝试将 ANN 和数据库与知识库相结合, 从而对建立可用于将化合物半导体材料进行优化设计的专家系统的可行性作出初步研究, 本文拟报道采用训练好的 ANN 对 III-V、II-VI 族二元化合物和 I-III-V<sub>2</sub>、II-IV-V<sub>2</sub> 族三元化合物禁带宽度和熔点的计算结果。

## 2 计算

### 2.1 计算方法

ANN 由许多相互连接的基本处理单元(神经元)构成<sup>[7]</sup>, 单个神经元的结构如图 1(a)。

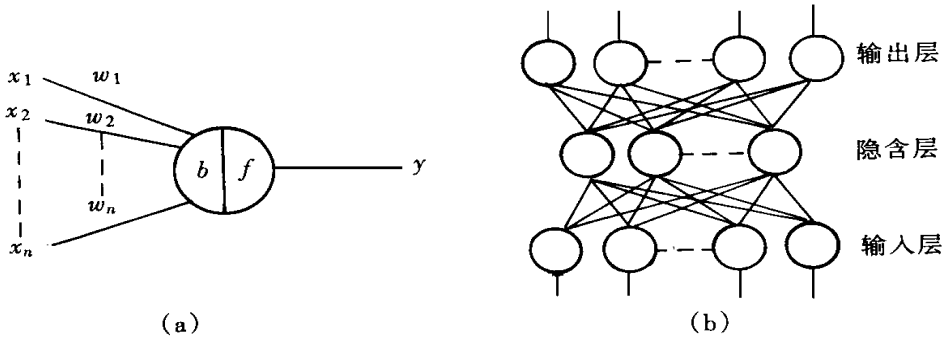


图1 神经元与人工神经网络结构简图

其中  $x_1, x_2, \dots, x_n$  表示神经元的输入参数;  $w_1, w_2, \dots, w_n$  表示连接权重;  $b$  为神经元阈值;  $y$  则表示神经元的输出值 该神经元的净输入( $X$ )与输出分别为:

$$X = \sum x_i w_i + b \quad y = f(X)$$

其中  $f$  是神经元的输入传递函数(或称响应函数), 常取  $f$  为 S 函数(Sigmoid 函数)或双曲正切函数( $\tanh(X)$  函数)。

单个神经元的信息处理功能是非常有限的, 只有将多个神经元按一定规则连接成网络, 并让网络中各神经元的连接权也按一定规则变化, 才能实现对输入模式的学习训练和识别预报 一个典型的三层分层 ANN 的结构如图 1(b) 所示 ANN 工作时, 首先需要按有教师示教的方式进行学习或训练, 常用的训练方法为误差反向传递法(error back-propagation, BP)<sup>[8]</sup> 具体过程可简述如下: 当将一对学习模式提供给网络后, 网络中各神经元的激活值, 从输入层经隐含层向输出层传播, 并在输出层神经元获得网络的输入响应 此后按减小希望输出与实际输出误差的方向, 从输出层经隐含层至输入层逐层修正各连接权 随着学习模式的不断提供以及误差逆传播修正连接权的不断进行, ANN 对输入模式响应的正确率也不断上升, 这样最终可完成对 ANN 的训练过程, 训练好的 ANN 便可以用于预报未知

本文选用三层分层连接网络结构 输入层和输出层神经元数分别等于输入-输出模式的特征值数, 而隐含层神经元数则采用“逐次逼近法”(trial-and-error method)加以确定, 即按照网络中总连接权重数小于训练集样本数这一经验规则<sup>[9]</sup>, 预先确定几个值分别训练 ANN, 按使全局累积误差最小的原则, 最终确定隐含层神经元数 ANN 输入层传递函数选用线性函数, 而对隐含层和输出层则选用对称的双曲正切函数 所有计算选用 BP 算法在 586 机上进行, 而终止训练过程的方法则选用固定迭代次数法

## 2.2 计算结果

### 2.2.1 $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ 和 $A^{\text{II}}B^{\text{VI}}$ 二元化合物

计算时, ANN 训练集由 8 种 III-V 族和 8 种 II-VI 族二元化合物组成, 包括 AlP, AlAs, AlSb, GaP, GaSb, InP, InAs, InSb 以及 ZnS, ZnSe, ZnTe, CdSe, CdTe, HgS, HgSe 和 HgTe GaAs 和 CdS 被随机抽出作为预报集 根据半导体结晶化学规律<sup>[10, 11]</sup>, 在 III-V 族和 II-VI 族二元化合物半导体中, 同时存在共价键和离子键, 该混合键的键能直接决定了化合物的物理性质 影响化学键键能的基本原子参数主要包括表征电学因素的电负性和原子序数以及表征几何因素的原子半径等, 考虑到玻恩指数<sup>[12]</sup>是决定离子晶体物理性质的一个重要参数, 故此将 III-V 族和 II-VI 族二元化合物半导体的平均原子序数( $Z = (1/2)(Z_A +$

$Z_B$ )), Pauling 电负性差 ( $\Delta X = |X_A - X_B|$ )、玻恩指数 ( $\bar{n} = (1/2)(n_A + n_B)$ ) 和晶格常数 ( $a$ )<sup>[13, 14]</sup> 组成一个四参数模型, 作为 ANN 的输入特征量; 输出特征量分别是禁带宽度<sup>[13, 14]</sup> 和熔点<sup>[15, 16]</sup>. 采用“留一法”, 分别用训练好的 ANN 对 GaAs 和 CdS 的  $E_g$  和  $T_M$  进行预报, 结果见表 1.

表 1 GaAs, CdS 和 AgInS<sub>2</sub>, CdSiAs<sub>2</sub> 禁带宽度和熔点的 ANN 预报结果

化合物	$E/eV, 300K$		$T_M/K$	
	预报值	实验值	预报值	实验值
GaAs	1.21	1.42	1459	1513
CdS	2.50	2.40	1693	1748
AgInS <sub>2</sub>	1.82	1.87	1201	1118~1138 <sup>[20]</sup>
CdSiAs <sub>2</sub>	1.49	1.55	1163	> 1123 <sup>[17]</sup>

### 2.2.2 A<sup>I</sup>B<sup>III</sup>C<sub>2</sub><sup>VI</sup> 和 A<sup>II</sup>B<sup>IV</sup>C<sub>2</sub><sup>V</sup> 三元化合物

对三元化合物, ANN 训练集由 17 种 I-III-VI<sub>2</sub> 和 12 种 II-IV-V<sub>2</sub> 化合物构成, 包括 CuAs<sub>2</sub>, CuGaS<sub>2</sub>, CuInS<sub>2</sub>, CuAsSe<sub>2</sub>, CuGaSe<sub>2</sub>, CuInSe<sub>2</sub>, CuAsTe<sub>2</sub>, CuGaTe<sub>2</sub>, CuInTe<sub>2</sub>, AgAs<sub>2</sub>, AgGaS<sub>2</sub>, AgAsSe<sub>2</sub>, AgGaSe<sub>2</sub>, AgInSe<sub>2</sub>, AgAsTe<sub>2</sub>, AgGaTe<sub>2</sub>, AgInTe<sub>2</sub> 和 Zn-SiP<sub>2</sub>, ZnSiAs<sub>2</sub>, ZnGeP<sub>2</sub>, ZnGeAs<sub>2</sub>, ZnSnP<sub>2</sub>, ZnSnAs<sub>2</sub>, ZnSnSb<sub>2</sub>, CdSiP<sub>2</sub>, CdGeP<sub>2</sub>, CdGeAs<sub>2</sub>, CdSnP<sub>2</sub>, CdSnAs<sub>2</sub>. 但是, 在预报熔点时, 由于 CuAsTe<sub>2</sub>, AgAs<sub>2</sub>, AgAsSe<sub>2</sub>, AgAsTe<sub>2</sub> 和 ZnSnSb<sub>2</sub> 熔点数据的缺乏, 训练集由 29 个减至 24 个, AgInS<sub>2</sub> 和 CdSiAs<sub>2</sub> 被随机选作预报集. 同计算 III-V 族和 II-VI 族二元化合物半导体的禁带宽度和熔点时相似, 对以上 I-III-VI<sub>2</sub> 和 II-IV-V<sub>2</sub> 三元化合物, 仍采用四参数模型, 即将三元化合物的平均原子序数 ( $\bar{Z} = (1/4)(2Z_C + Z_A + Z_B)$ ), Pauling 电负性差 ( $\Delta X = |2X_C - X_A - X_B|$ ),  $u$ <sup>[17]</sup> 值 ( $u$  值由晶格常数  $a$ ,  $c$  决定) 和玻恩指数 ( $\bar{n} = (1/4)(2n_C + n_A + n_B)$ ) 作为输入特征量; 而将禁带宽度<sup>[18, 19]</sup> 和熔点<sup>[17, 20]</sup> 作为输出值. 选用“留一法”对 AgInS<sub>2</sub> 和 CdSiAs<sub>2</sub> 的  $E_g$  和  $T_M$  进行 ANN 预报, 结果见表 1.

文献[18]曾给出了 21 种迄今为止大多数未合成出的三元化合物的  $E$  计算值. 我们利用 ANN 对这 21 种三元化合物的  $E$  值进行了预报, 结果见表 2.

## 3 讨论

表 1 结果表明, 对于 III-V 族和 II-VI 族二元化合物,  $E$  和  $T_M$  的 ANN 预报值与实测值符合较好. ANN 方法与其

表 2 21 种三元化合物  $E$  的计算值和 ANN 预报值

化合物	$E/eV, 300K$	
	预报值(ANN)	计算值 <sup>[18]</sup>
ZnSiSb <sub>2</sub>	1.07	0.9
ZnGeSb <sub>2</sub>	0.85	0.5
CdSiSb <sub>2</sub>	1.18	0.8
CdGeSb <sub>2</sub>	1.03	0.2
MgGeP <sub>2</sub>	2.17	2.1
MgSnP <sub>2</sub>	1.56	1.8
MgSiAs <sub>2</sub>	2.08	2.0
MgGeAs <sub>2</sub>	1.60	1.6
MgSnAs <sub>2</sub>	0.93	1.2
MgSiSb <sub>2</sub>	1.39	1.4
MgSeSb <sub>2</sub>	1.20	0.9
MgSnSb <sub>2</sub>	0.62	0.6
HgSiP <sub>2</sub>	1.58	1.6
HgGeP <sub>2</sub>	1.36	1.2
HgSnP <sub>2</sub>	0.87	0.8
HgSiAs <sub>2</sub>	1.24	0.7
HgGeAs <sub>2</sub>	1.08	0.2
CuTlTe <sub>2</sub>	0.42	0.9
AgTlS <sub>2</sub>	1.11	1.1
AgTlSe <sub>2</sub>	0.63	0.7
AgTlTe <sub>2</sub>	0.51	0.6

它经验方法相比, 它仅利用基本原子或结构参数作为输入特征量, 在具有适当样本集的条件下, 便可以对目标函数值进行拟合或预报。既不需要事先建立某种数学模型, 也不需要计算时, 由于化合物的组成、结构不同而需要引入可调经验参数。本文采用的BP网络结构的突出优点就是它具有很强的柔性和非线性映射能力。在其训练过程中, 网络输入层、隐含层和输出层之间的连接权起着“传递特征”的作用, 即通过对样本的学习, 网络不断获取知识并将其分布存贮在网络的连接权上。由于具有自组织能力, BP网络可以最终达到能够表征输入模式特征的状态, 此时输入特征量与目标函数之间的复杂关系便以ANN特有的方式——以连接权数字矩阵的形式被记录下来, 从而完成由输入模式到输出模式的非线性映照。然而从表2结果可以看出, 虽然21种三元化合物的 $E$ 值可由ANN预报, 且结果令人满意, 但是仍有几种化合物, 如 $\text{CuTiTe}_2$ ,  $\text{HgSiAs}_2$ , 特别是 $\text{CdGeSb}_2$ 和 $\text{HgGeAs}_2$ , 其禁带宽度预报值与报道的计算值偏差仍较大。从ANN自身角度分析, 这可能是由网络“过拟合”所致, 避免“过拟合”的一种方法是考虑适当增加输入特征量, 但是这往往导致连接权重数增加, 进而需要增加样本数这一矛盾; 另一方面, 这也会使得输入-输出之间的关系变得复杂。由此看来, 选择合适的输入特征量以及搜集尽可能多的样本, 并注意优化网络结构, 将有助于提高预报精度。

## 4 结 论

利用经过训练的ANN对III-V、II-VI族二元化合物以及I-III-VI<sub>2</sub>、II-IV-V<sub>2</sub>族三元化合物的禁带宽度和熔点进行预报, 结果令人满意。但是应注意尽可能优化网络结构, 否则预报值和实测值会产生较大的偏差。

## 参 考 文 献

- [1] A. K. Vijh, *J. Phys. Chem. Solids*, 1968, **29**: 2233.
- [2] W. B. Pearson, *Canad. J. Chem.*, 1957, **37**: 1191.
- [3] R. H. Bube, *Photoconductivity of solids*, Wiley, New York, 1960.
- [4] Wu Wei, Yan Liuming, Wei Guangyu *et al.*, *J. Appl. Phys.*, 1995, **78**: 897.
- [5] Wu Wei, Yan Liuming, Peng Ruiwu *et al.*, *Materials Science and Engineering*, 1995, **B31**: 305.
- [6] Zhang Zhaochun, Peng Ruiwu, *Proc. of 7th China-Japan Symposium on Science and Technology of Crystal Growth and Material* Shanghai, China, 1996, 118.
- [7] 王伟, *人工神经网络原理-入门与应用*, 北京: 北京航空航天大学出版社, 1995.
- [8] J. J. Hopfield, *Proc. Natl. Acad. Sci., USA*, 1982, **79**: 2554; 1984, **81**: 3088.
- [9] 许祿, *化学计量学*, 北京: 科学出版社, 1995.
- [10] 莫党, *半导体材料(下册)*, 北京: 高等教育出版社, 1965.
- [11] 叶良修, *半导体物理学(上册)*, 北京: 高等教育出版社, 1996.
- [12] 谢有畅, 邵美成, *结构化学(下册)*, 北京: 高等教育出版社, 1984.
- [13] H. C. Casey, Jr., M. B. Panish, *Heterostructure Lasers, Part B*, Academic Press, Inc. New York, 1986.
- [14] S. Ignatowicz, K. Andrzej, *Semiconducting Thin Films of A<sup>II</sup>B<sup>VI</sup> Compounds*, Ellis Horwood Ltd., New York, 1990.
- [15] B. W. Wessels, G. Y. Chin, *Advances in Electronic Materials*, American Society for Metal, Ohio, 1986.
- [16] S. J. Moss, A. Ledwith, *The Chemistry of the Semiconductor Industry*, Blackie and Son Ltd., Glasgow, 1987.

- [17] A. Zunger, Appl Phys Lett , 1987, **50**: 164  
[18] J. E. Jeffe, A. Zunger, Phys Rev. , 1984, **B29**: 1882  
[19] 叶式中, 杨树人, 康昌鹤, 半导体材料及其应用, 北京: 机械工业出版社, 1986  
[20] H. Matsushita, S. Endo, T. Irie, Jpn J. Appl Phys , 1991, **30**: 1181.

## ANN Prediction of Band Gap and Melting Point of Binary and Ternary Compound Semiconductors

Zhang Zhaochun, Peng Ruiwu, Chen Nianyi and Guo Jin

(Shanghai Institute of Metallurgy, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050)

Received 6 November 1996, revised manuscript received 28 April 1997

**Abstract** Artificial neural network trained by experimental data has been used to predict the values of the band gap and melting point of III-V, II-VI binary compound and I-III-VI<sub>2</sub>, II-IV-V<sub>2</sub> ternary compound semiconductors. The calculated results are in good agreement with the experimental ones.

**PACC:** 0650, 7125T, 6590