

# Прогнозирование структурных свойств сегнетоэлектрических тонких пленок титанатов-цирконатов бария с использованием моделей машинного обучения

Е.Н. Сапего, И.Н. Закасовский

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»

**Аннотация:** В рамках работы проведен отбор моделей машинного обучения для решения задачи предсказания структурных свойств тонких сегнетоэлектрических пленок титаната-цирконата бария, в зависимости от параметров синтеза. В процессе работы, особое внимание уделено сбору данных и последующей их обработке. В результате работы отобранные модели продемонстрировали точные предсказания структурных свойств тонких пленок титанатов-цирконатов бария.

**Ключевые слова:** Машинное обучение; сегнетоэлектрики; титанаты-цирконаты бария; рентгеноструктурный анализ; магнетронное осаждение.

## 1. Введение

Твердые растворы титаната бария стронция (BST) и титаната цирконата свинца (PZT) активно применяются в управляемых компонентах СВЧ, таких как вариконды, микроэлектромеханические системы (МЭМС) [1-2]. Однако сильная температурная зависимость электрофизических свойств BST, а также токсичность свинца, стимулируют поиск новых сегнетоэлектрических материалов для использования в СВЧ.

Перспективной альтернативой для BST и PZT являются твердые растворы титанатов-цирконатов бария (BZT), выделяющихся за счет большей термической стабильности и высокой управляемости [3]. Однако для достижения материалом характеристик пригодных для применения в СВЧ, необходим поиск оптимальных технологических параметров синтеза. Данный поиск можно осуществить с помощью методов машинного обучения (МО). Подобный подход широко применяется для решения прикладных задач материаловедения таких как предсказания свойств материалов и поиска новых соединений [4-5].

Целью исследования является подбор, обучение и отладка моделей машинного обучения, способных точно предсказывать структуру тонких сегнетоэлектрических пленок BZT, в зависимости от набора технологических параметров синтеза, состава мишени и подложки.

## 2. Методы эксперимента и результаты

Тонкие сегнетоэлектрические пленки BZT получены методом ВЧ магнетронного распыления на подложки различного состава при различных параметрах синтеза, составах мишени твердых растворов. Рентгеновский структурный анализ образцов проведен на дифрактометре ДРОН-6 на эмиссионной спектральной линии  $\text{CuK}\alpha 1$  ( $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$ ). Созданная на основе экспериментов, база данных (БД), включает в себя 128 уникальных образцов. Целевая переменная (предсказываемая) – интенсивность рентгеновского излучения. Для повышения точности предсказаний проведена нормировка целевой величины, устранен дисбаланс классов для различных подложек

и составов мишени, проведено удаление малозначимых признаков из БД. Обработанные данные разделены на тренировочную, тестовую и валидационную выборки. Доля тренировочной выборки составила 80% от общего числа образцов, доля тестовой выборки 20%.

Предсказание структурных свойств образцов проводилось с использованием следующих регрессионных моделей МО: Random Forest (RF), Extra Trees (ET), Bagging Regressor (BR), XGBoost (XGB), LightGBM (LGB), CatBoost. Оценка точности моделей осуществлялась по среднеквадратичной ошибке (RMSE), средней абсолютной ошибке (MAE), коэффициенту детерминации ( $R^2$ ), критерию Пирсона для тестовой и валидационной выборок.

Отбор моделей осуществлялся по показателям функций ошибок на тестовой выборке. Дальнейшим шагом для отобранных моделей было предсказание структуры валидационных образцов, осажденных на различных подложках при разных условиях синтеза.

### 3. Заключение

В ходе исследования создана база данных образцов тонких сегнетоэлектрических пленок VZT, включающая в себя: экспериментальные данные структурного анализа образцов, технологические параметры синтеза на разных подложках для различных составов мишени. Наиболее точный результат по показателям метрик ошибок на тестовой выборке был достигнут моделями: RF, ET, BR. Результат предсказания структуры валидационных образцов показал, что проделанная обработка данных положительно сказалась на обобщающей способности отобранных моделей.

Модели Random Forest, Extra Trees и Bagging Regressor способны совершать точные прогнозы структуры тонких сегнетоэлектрических пленок VZT, в зависимости от условий синтеза, упрощая процесс поиска оптимальных параметров ВЧ магнетронного распыления.

Исследование выполнено за счет **гранта Российского научного фонда государственного задания FSEE -2025-0010.**

#### Список литературы

1. Тумаркин А. В. и др. Планарные емкостные структуры на основе сегнетоэлектрических пленок титаната-станната бария на сапфире для сверхвысокочастотных применений // Письма в Журнал технической физики. – 2019. – Т. 45. – №. 13. – С. 3-6.
2. Smith G. L. et al. PZT-based piezoelectric MEMS technology // Journal of the American Ceramic Society. – 2012. – Т. 95. – №. 6. – С. 1777-1792.
3. Gao L., Zhai J., Yao X. Low dielectric loss and enhanced tunability of Ba (Zr<sub>0.3</sub>Ti<sub>0.7</sub>) O<sub>3</sub>-based thin film by sol-gel method // Ceramics international. – 2008. – Т. 34. – №. 4. – С. 1023-1026.
4. Torrisi S. B. et al. Random forest machine learning models for interpretable X-ray absorption near-edge structure spectrum-property relationships // npj Computational Materials. – 2020. – Т. 6. – №. 1. – С. 109.
5. Anil A. J. et al. A machine learning based electronic property predictor of Cu<sub>2</sub>SnS<sub>3</sub> thin film synthesized by ultrasonic spray pyrolysis // Journal of Alloys and Compounds. – 2024. – Т. 1002. – С. 175365.