

KRÓTKIE STRESZCZENIE

Niniejsza rozprawa doktorska pt. *Predicting and Analyzing the Thermal and Electrical Properties of Materials Using Advanced Machine Learning Models* opracowuje ramy korekcji i predykcji dla charakteryzacji przewodności cieplnej (TC) oraz przewodności elektrycznej (EC) w cienkich warstwach poprzez połączenie metodologii eksperymentalnej, modelowania opartego na prawach fizyki oraz zaawansowanego uczenia maszynowego (ML). Praca jest podzielona na dwie główne części. Pierwsza koncentruje się na wyznaczaniu TC z wykorzystaniem Scanning Thermal Microscopy (SThM), rozwiązując problem artefaktów indukowanych chropowatością poprzez jednoczesne mapowanie termiczno-topograficzne, normalizację z odniesieniem do kwarcu oraz regresję ML. Druga koncentruje się na wyznaczaniu EC przy użyciu pomiarów Four-Point Probe (4PP) i ogranicza zniekształcenia indukowane geometrią zarówno poprzez symulacje metodą elementów skończonych (FEM), jak i w pełni eksperymentalne ramy korekcji oparte na ML.

Rozprawa opiera się na dwóch hipotezach. Pierwsza zakłada, że integracja mapowania termicznego SThM ze szczegółową analizą topografii powierzchni oraz modelami ML trenowanymi na deskryptorach o znaczeniu fizycznym może przewyżżyć ograniczenia konwencjonalnej analizy SThM i umożliwić dokładną oraz powtarzalną estymację TC cienkich warstw. Druga zakłada, że zarówno FEM, jak i ML mogą generować skuteczne współczynniki korekcyjne dla pomiarów przewodności metodą 4PP poprzez kompensację zniekształceń geometrycznych, takich jak efekty brzegowe oraz wrażliwość na położenie sond, gdzie FEM zapewnia korekcje oparte na fizyce, a ML oferuje skalowalną alternatywę niewymagającą symulacji o porównywalnej dokładności.

W części dotyczącej TC rozprawa podkreśla ograniczenia optycznych metod pump-probe, takich jak TDTR/FDTR, które są dokładne, lecz przestrzennie ograniczone przez dyfrakcję optyczną i nie są w stanie rozdzielić submikronowych zmian TC. W przeciwieństwie do tego, SThM zapewnia rozdzielczość submikronową, lecz cierpi z powodu silnej zależności od interakcji sonda-próbka, chropowatości powierzchni oraz zmienności kontaktu. Wykazano, że zmierzony sygnał termiczny jest konwolucją intrinsic TC, efektów kontaktowych zależnych od topografii, termicznej rezystancji kontaktowej (TCR) oraz wkładu podłoża, szczególnie dla warstw cieńszych niż ~ 100 nm. Aby temu przeciwdziałać, rozprawa opracowuje zintegrowaną metodologię TC łączącą normalizację oraz deskryptory ML oparte na topografii.

Kluczowym wkładem jest procedura normalizacji z odniesieniem do kwarcu, definiująca bezwymiarowy stosunek termiczny Γ_i na podstawie statycznych i dynamicznych rezystancji sondy mierzonych na próbce oraz na referencji kwarcowej. Procedura ta redukuje zmienność zależną od sondy i poprawia porównywalność pomiędzy próbkami. Ramy eksperymentalne wykorzystują strategię mapowania wieloskalowego: każda próbka jest mapowana w obszarze $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ podzielonym na siatkę 16×16 , a każdy region obejmuje lokalne podokna $375 \times 375 \text{ nm}^2$ podzielone na siatki 3×3 , co umożliwia tworzenie przestrzennie skorelowanych zbiorów danych łączących odpowiedź termiczną z

topografią. Deskryptory w skali mikro obejmują chropowatość RMS oraz skośność powierzchni, natomiast deskryptory submikronowe obejmują nachylenie powierzchni, zmienność peak-to-valley oraz lokalną zmienność rozkładu wysokości. Wprowadzono również współczynnik podłoże-grubość C jako kluczowe wejście ML pozwalające rozróżniać transport typu bulk od zachowania cienkowarstwowego zdominowanego przez podłoże

Zamiast bezpośrednio przewidywać TC, rozprawa definiuje ciągłą zmienną celu $\chi = \kappa^S / \sigma^{Si}$, gdzie σ^{Si} reprezentuje lokalną zmienność wysokości, co poprawia stabilność regresji i uogólnianie. Analiza istotności cech wykorzystująca korelację Spearmana identyfikuje Γ_i jako dominujący predyktor, z silnym wkładem deskryptorów topografii submikronowej oraz C , podczas gdy różnica fazowa wnosi pomijalny wkład. Zbiór danych dla TC obejmuje 3,332 pomiary, z czego 2,352 przeznaczono na rozwój modelu, a 980 na niezależną walidację; dane obejmują układy cienkowarstwowe (wyżarzane ITO na szkło, ZnO na Si) oraz odniesienia objętościowe od 0.17 do 450 W m⁻¹ K⁻¹. Rozwój modeli ML obejmuje porównanie Random Forest oraz Gradient Boosting regression, przy rozbudowanym strojeniu hiperparametrów w ramach 279 modeli. Random Forest konsekwentnie osiąga najlepsze wyniki, uzyskując silną zgodność z wartościami referencyjnymi TC w zakresie wielu rzędów wielkości, szczególnie dla materiałów o niskiej i umiarkowanej TC, z akceptowalnymi odchyleniami dla skrajnych zakresów TC.

W części dotyczącej EC rozprawa omawia ograniczenia metod vdP oraz 4PP. Choć vdP zapewnia wiarygodny opór powierzchniowy przy spełnieniu rygorystycznych warunków, jest czasochłonna i wymaga wykonania kontaktów. Metoda 4PP jest bardziej praktyczna, jednak silnie wrażliwa na geometrię, rozstaw sond oraz pozycję pomiaru, co wymaga korekcji zniekształceń prądu indukowanych przez krawędzie. Zbiór danych elektrycznych obejmuje 553 pomiary wykonane przy użyciu autorskiego stanowiska 4PP z aparaturą Keithley. Pomiary obejmują nieregularne warstwy ITO oraz próbki metaliczne, z użyciem wielu pozycji sond i systematycznych rotacji próbki w celu uchwycenia różnorodnych reżimów efektów brzegowych. Zmienne wejściowe obejmują wymiary próbki, przekątne, współrzędne sond oraz przyłożony prąd.

Trójwymiarowy model FEM w COMSOL waliduje zniekształcenia geometryczne i generuje współczynniki korekcyjne na podstawie przewodności symulowanej względem intrinsic, prowadząc do FEM-skorygowanej EC. Równolegle, rozprawa wprowadza ramy korekcji ML oparte wyłącznie na eksperymencie poprzez zdefiniowanie ciągłej zmiennej regresyjnej Θ wyprowadzonej z analitycznej zależności 4PP. Model ML przewiduje Θ na podstawie geometrii i prądu, umożliwiając wyliczenie skorygowanej przewodności bez użycia symulacji. Korelacja Spearmana potwierdza, że prąd jest najbardziej dominującym czynnikiem wpływającym na Θ , a Random Forest regression zoptymalizowano w ramach 170 kombinacji hiperparametrów. Porównania wydajności z użyciem Relative Difference (RD%) pokazują, że zarówno FEM, jak i ML skutecznie korygują EC w warunkach silnych zniekształceń brzegowych. Dla metali FEM daje średnie RD% równe +5.66%, a ML -3.15%, natomiast dla warstw ITO FEM daje -4.30%, a ML -2.93%, przy czym ML wykazuje węższe rozkłady reszt. Końcowe wyniki pokazują, że predykcje ML zazwyczaj

mieszczą się w granicach $\pm 15\%$ względem wartości referencyjnych oraz wykazują wysoką spójność dla próbek ITO.