

INTISARI

IMPLEMENTASI MACHINE LEARNING UNTUK PREDIKSI CELAH PITA ENERGI SEMIKONDUKTOR DENGAN GRAPH NEURAL NETWORKS

Oleh

Zulfikar Irham

21/475393/PA/20574

Celah pita energi merupakan parameter krusial dalam menentukan sifat elektronik dan optik semikonduktor. Perhitungan secara akurat umumnya menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT), tetapi metode ini sangat mahal secara komputasi dan memerlukan waktu lama, terutama pada skala data besar. Penelitian ini bertujuan mengembangkan pendekatan alternatif berbasis *machine learning* menggunakan model *Material Graph Neural Networks* (MEGNet) dan *Crystal Graph Convolutional Neural Networks* (CGCNN) untuk memprediksi celah pita energi secara efisien. Penelitian ini menggunakan database utama Seoul National University Material Data Center (SNUMAT) berukuran kecil dengan perhitungan celah pita energi *Heyd-Scuseria-Ernzerhof* (HSE). Pelatihan dilakukan secara konvensional, *transfer learning* menggunakan model *pre-trained* yang dilatih dengan data berukuran besar Materials Project, serta metode *ensemble* untuk membandingkan peningkatan performa model. Metode *transfer learning* menunjukkan adanya penurunan *mean absolute error* (MAE) MEGNet dari 0.5346 eV menjadi 0.4534 eV dengan peningkatan performa sebesar 15.12% dan untuk CGCNN mengalami penurunan MAE dari 0.4904 eV menjadi 0.4131 eV dengan peningkatan performa sebesar 15.76%. Pelatihan gabungan *transfer learning* dan *ensemble* menunjukkan penurunan MAE hingga 0.4398 eV pada MEGNET dan 0.4027 eV pada CGCNN. Dengan demikian, CGCNN menjadi model terbaik untuk *transfer learning* dan *ensemble*. Selain itu, dilakukan analisis lanjutan berdasarkan rentang nilai celah pita energi, yaitu *narrow band gap* (NBG) dengan $E_g < 0.5 \text{ eV}$, *medium band gap* (WBG) dengan $0.5 \leq E_g \leq 2 \text{ eV}$, *wide band gap* (WBG) dengan $2 < E_g \leq 4 \text{ eV}$, dan *ultra wide band gap* (UWBG) dengan $E_g > 4 \text{ eV}$. Ditunjukkan bahwa pada penelitian ini MEGNet dan CGCNN metode *transfer learning* dan *ensemble* sangat baik dalam memprediksi WBG dengan MAE masing-masing adalah 0.377 eV dan 0.322 eV. Pendekatan *transfer learning* dan *ensemble* terbukti mampu meningkatkan akurasi prediksi, khususnya untuk memprediksi bahan semikonduktor dalam rentang WBG.

Kata kunci : celah pita energi, semikonduktor, *machine learning*, *Material Graph Neural Networks* (MEGNet), *Crystal Graph Convolutional Neural Networks* (CGCNN)

ABSTRACT

MACHINE LEARNING IMPLEMENTATION FOR SEMICONDUCTOR ENERGY BAND GAP PREDICTION USING GRAPH NEURAL NETWORKS

Oleh

Zulfikar Irham
21/475393/PA/20574

The energy band gap is a crucial parameter in determining the electronic and optical properties of semiconductors. Accurate calculations generally use the Density Functional Theory (DFT) method, but this method is very computationally expensive and takes a long time, especially on a large scale. This research aims to develop an alternative machine learning-based approach using Material Graph Neural Networks (MEGNet) and Crystal Graph Convolutional Neural Networks (CGCNN) models to predict energy band gaps efficiently. This study uses the main Seoul National University Material Data Center (SNUMAT) small database with Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE) energy band gap calculation. Training is done conventionally, transfer learning using pre-trained models trained with large-sized Materials Project data, and an ensemble to compare the performance improvement of the model. The transfer learning method shows a decrease in the mean absolute error (MAE) of MEGNet from 0.5346 eV to 0.4534 eV, with an increase in performance of 15.12% and for CGCNN, a decrease in MAE from 0.4904 eV to 0.4131 eV, with an increase in performance of 15.76%. The combined transfer learning and ensemble training shows a decrease in MAE to 0.4398 eV in MEGNET and 0.4027 eV in CGCNN. Thus, CGCNN is the best model for transfer learning and ensemble training. In addition, further analysis is carried out based on the range of energy band gap values, namely, narrow band gap (NBG) with $E_g < 0.5$ eV, medium band gap (MBG) with $0.5 \leq E_g \leq 2$ eV, wide band gap (WBG) with $2 < E_g \leq 4$ eV, and ultra-wide band gap (UWBG) with $E_g > 4$ eV. This study demonstrates that MEGNet and CGCNN transfer learning and ensemble methods are effective in predicting WBG, with MAEs of 0.377 eV and 0.322 eV, respectively. The transfer learning and ensemble approach is proven to be able to improve prediction accuracy, especially for predicting semiconductor materials in the WBG range.

Keywords: *energy band gap, semiconductor, machine learning, Material Graph Neural Networks (MEGNet), Crystal Graph Convolutional Neural Networks (CGCNN)*