ISSN: 2706-6495

استخدام الذكاء الاصطناعي لتوليد واختبار الفرضيات ذاتيًا في التجارب العلمية (تطبيق عملي على تحسين شروط الإشابة في المواد شبه الموصلة)

AI for Autonomous Hypothesis Generation and Testing in Scientific Experiments (A Practical Application to the Optimization of Doping Conditions in Semiconductor Materials)

إعداد: الباحث/ مريسي سعيد مريسي الغامدي

ماجستير العلوم في الذكاء الاصطناعي، المملكة العربية السعودية

Email: mrese42700094@gmail.com

الملخص:

يقدم هذا البحث إطارًا حسابيًا تجريبيًا لدراسة وتحسين خصائص الإشابة في أشباه الموصلات عبر الدمج بين البيانات الاصطناعية، والنماذج البديلة، وخوارزميات التحسين. أُنشئت مجموعة بيانات اصطناعية من 2000 عيّنة تمثل تأثير ثلاثة معلمات أساسية هي: درجة الحرارة، وزمن المعالجة، وتركيز الشائبة، على مخرجات فيزيائية رئيسة تشمل مؤشر التجانس، وحركية الحاملات، وكثافة العيوب. جرى توليد هذه البيانات باستخدام علاقات شبه فيزيائية مع تضمين ضوضاء تجريبية لزيادة الواقعية.

اعتمادًا على هذه البيانات، دُرّب نموذج بديل قائم على خوارزمية Random Forest حقق دقة عالية، ما أتاح استبدال المحاكاة الفيزيائية المكلفة ببيئة حسابية سريعة للاستكشاف والتحسين المتكرر. ثم استُخدمت خوارزمية Bayesian Optimization للبحث عن ظروف تشغيل محسّنة تحقق توازنًا بين تحسين التجانس وزيادة الحركية وتقليل العيوب، وأسفرت عن نطاقات تشغيل مثلى تقريبية عند درجات حرارة 845–860°م، وأزمنة 80–90 ثانية، مع تركيزات دوبانت مرتفعة.

كما طُوّر نظام أولي لتوليد الفرضيات يعتمد آلية احتمالية تكرارية لاختبار مجموعات جديدة من المعلمات وتحديثها عبر النموذج البديل. ولتقييم الموثوقية، استُخدمت أساليب إحصائية متعددة وتحليل الحساسية ومحاكاة مونتِ كارلو، وأظهرت النتائج استقرارًا جيدًا واتساقًا في السلوك. يبرهن البحث أن هذا الدمج المنهجي يمثل نهجًا عمليًا يقلل الكلفة الحسابية والتجريبية ويمهّد لتطوير أطر متقدمة لدعم تصميم المواد وتحسين عملياتها.

الكلمات المفتاحية: الذكاء الاصطناعي؛ الإشابة؛ أشباه الموصلات؛ النماذج البديلة؛ التحسين البايزي؛ غابة القرار العشوائية؛ البيانات الاصطناعية؛ تحليل الحساسية؛ محاكاة مونتِ كارلو؛ حركية الحاملات؛ كثافة العيوب؛ مؤشر التجانس.

ISSN: 2706-6495

AI for Autonomous Hypothesis Generation and Testing in Scientific Experiments (A Practical Application to the Optimization of Doping Conditions in Semiconductor Materials)

Meresi Saeed Alghamdi

Master of Science in Artificial Intelligence, Saudi Arabia

Abstract

This research presents an experimental computational framework for studying and optimizing doping properties in semiconductors by integrating synthetic data, alternative models, and optimization algorithms. A synthetic dataset of 2000 samples was generated, representing the effect of three key parameters—temperature, processing time, and impurity concentration—on major physical outputs, including homogeneity index, carrier kinetics, and defect density. This dataset was generated using quasi-physical relationships with experimental noise incorporation to enhance realism.

Based on this dataset, an alternative model based on the Random Forest algorithm was trained with high accuracy, enabling the replacement of costly physical simulations with a rapid computational environment for iterative exploration and optimization. A Bayesian optimization algorithm was then employed to search for optimized operating conditions that balance improved homogeneity, increased kinetics, and reduced defects. This yielded approximate optimal operating ranges at temperatures of 845–860°C and processing times of 80–90 seconds, with high dopant concentrations. A preliminary hypothesis generation system was also developed, employing an iterative probability mechanism to test and update new sets of parameters across the alternative model. To assess reliability, multiple statistical methods, sensitivity analysis, and Monte Carlo simulation were used, and the results demonstrated good stability and consistency of behavior. This research demonstrates that this systematic integration represents a practical approach that reduces computational and experimental costs and paves the way for the development of advanced frameworks to support materials design and process optimization.

Keywords: Artificial intelligence; Semiconductor doping; Surrogate models; Bayesian optimization; Random Forest; Synthetic data; Sensitivity analysis; Monte Carlo simulation; Carrier mobility; Defect density; Uniformity index.

ISSN: 2706-6495

1. المقدمة:

1.1. الخلفية والأهمية:

تشهد العقود الأخيرة تطوراً متسارعاً في صناعة أشباه الموصلات باعتبارها الركيزة الأساسية للبنية التكنولوجية الحديثة وارتباطها المباشر بتصنيع المعالجات الدقيقة والذاكرة والحساسات والدوائر المتكاملة والأجهزة الإلكترونية المتقدمة؛ وتعتمد موثوقية وكفاءة هذه الأجهزة اعتماداً كليًا على الضبط الدقيق للخواص الكهربائية للمواد شبه الموصلة، والتي يتم التحكم بها في المقام الأول من خلال عمليات الإشابة(Doping) ، فالإشابة هي العملية الفيزيائية التي يتم فيها إدخال شوائب محددة بتركيزات مدروسة داخل البنية البلورية للمواد، بغية تعديل تركيز الحاملات الكهربائية وتهيئة المادة لتشكيل مناطق p و n ، وبالتالي تمكينها من أداء وظائفها في الترانزستورات والديودات والخلايا الشمسية وغيرها من المكوّنات الإلكترونية. وقد أبرزت مراجعات شاملة لأساليب الإشابة التقليدية، مثل أعمال Scaccabarozzi et al. (2021) و Peng et al. (2021)، أن هذه العملية تمثل نقطة حساسة في سلسلة تصنيع أشباه الموصلات، وأن التحكم الدقيق فيها ينعكس مباشرة على أداء الجهاز النهائي واستقراره وعمره التشغيلي.

ورغم التطور الكبير في تقنيات الإشابة سواء باستخدام الانتشار الحراري، أو الحزم الأيونية، أو الإشابة بالبلازما، إلا أن التحديات المتعلقة بالتجانس البلوري، وانتشار الشوائب غير الخطي، وارتفاع كثافة العيوب، لا تزال تمثل عائقاً رئيسياً أمام الوصول إلى أداء مثالي للمواد الإلكترونية، ويزداد هذا التحدي بالتزامن مع التوجه العالمي نحو تقليص أبعاد الأجهزة النانوية وزيادة كثافة الدوائر والتوجه للحوسبة عالية التردد؛ وفي هكذا دقة مطلوبة، يصبح لأي انحراف صغير في تركيز الإشابة أو عمقها انعكاس كبير على خصائص الجهاز النهائي، كما أظهرت أعمال Yuan et al. (2023) و Oh et al. (2023)حول حساسية المواد لتقلبات الإشابة.

وفي المقابل، أحدث الذكاء الاصطناعي ثورة واسعة في علوم المواد، عبر تقنيات التعلّم الآلي والتعلّم العميق ونماذج التنبؤ التي أدت إلى تسريع اكتشاف المواد الجديدة وتحسين خواصها، وقد تناولت العديد من الدراسات مثل Madika et al. (2025) و Liang et al. (2022)، الآفاق الواسعة للذكاء الاصطناعي في تحسين التصميم الجزيئي، وتوجيه التجارب، وتسريع اكتشاف مواد واعدة في مجالات الطاقة والإلكترونيات والبصريات، وتبرز أهمية الذكاء الاصطناعي في هذا السياق من قدرته على استكشاف فضاءات ضخمة من المتغيرات بطريقة تفوق كثيراً القدرات التقليدية، خصوصاً عندما يتعلق الأمر بالمواد متعددة المتغيرات التي تعتمد على عوامل مترابطة مثل درجة الحرارة، وزمن العملية، ونوع الشائبة، وتركيزها، ومعدل الانتشار، والبنية البلورية للمادة.

وفي السنوات الأخيرة، ظهرت اتجاه جديد من تتبنى أنظمة ذكاء اصطناعي قادرة على توليد الفرضيات العلمية، أو تصميم التجارب، أو تشغيل المحاكاة، أو تقييم النتائج، واقتراح تعديل الفرضيات؛ وقد أثبتت هذه الفكرة فعاليتها في مجالات اكتشاف المحفّزات الكيميائية (Mazheika et al., 2022) وفي تحسين مواد الطاقة الحرارية(Khorasani et al., 2024) ، وفي توقع فجوات الطاقة Bandgap في الأنظمة المشابة(Masuda, 2024؛ Tang, 2023 ؛ Tarbi, 2023). غير أن هذه الاتجاهات، على الرغم من قوتها، تظل متركزة على التنبؤ بخصائص المواد أو تحسين معاملات منفصلة، بينما لم تمتد بعد إلى صياغة نظام كامل قادر على توليد فرضيات حول عمليات الإشابة نفسها وتحسين شروطها بشكل منهجي وفي دورة كاملة مغلقة.

ومن هنا تتضح الفجوة العلمية التي يستهدف هذا البحث معالجتها؛ فعلى الرغم من العدد الكبير من الدراسات التي تربط الذكاء الاصطناعي بعلوم المواد، لا تزال معظم الجهود البحثية متركزة على التنبؤ بخصائص المواد أو تحسين معاملات تشغيلية

ISSN: 2706-6495

منفصلة، دون تقديم إطار تجريبي متكامل يدعم الاستكشاف المنهجي لشروط عمليات الإشابة نفسها، وعليه يهدف هذا البحث إلى تطوير إطار حسابي تجريبي يوظّف تقنيات الذكاء الاصطناعي المساعد لدعم صياغة الفرضيات الكمية المتعلقة بظروف الإشابة، واختبارها، وتحسينها بشكل تكراري ضمن دورة تعلم مغلقة تعتمد على المحاكاة والنماذج البديلة، حيث يقوم النظام باقتراح مجموعات من معلمات الإشابة مثل درجة الحرارة، وزمن المعالجة، وتركيز الشائبة واختبارها باستخدام محاكاة بديلة سريعة، ثم تقييم النتائج بالاعتماد على مؤشرات فيزيائية رئيسية تشمل التجانس، وحركية الحاملات، وكثافة العيوب، ليتم بعدها تعديل الفرضيات تدريجيًا استنادًا إلى المخرجات المتحصلة؛ ويهدف هذا النهج إلى دعم عمليات الاستكشاف التجريبي وتقليل الاعتماد على التجارب التقليدية المكلفة ماديا وزمنيًا، دون ادعاء الاستقلالية الكاملة عن المعرفة الفيزيائية المسبقة أو التدخل البشري.

إن تصميم مثل هذا الإطار يفتح آفاقًا واعدة أمام التطبيقات الصناعية، إذ يمكن أن يساهم في تقليل الزمن والكلفة اللازمين لتطوير مواد ذات جودة عالية، وتحسين ضبط الإشابة على المستوى النانوي، وبالتالي رفع كفاءة وموثوقية الأجهزة المصنعة. وتشير دراسات صناعية، مثل(Senoner et al. (2022 ، إلى أن دمج تقنيات الذكاء الاصطناعي في مراقبة وتحسين العمليات التصنيعية يمكن أن يقلل الأخطاء التشغيلية ويحسّن جودة الإنتاج، مما يجعل تطوير أطر حسابية داعمة لعمليات الإشابة خطوة مهمة نحو تعزيز البحث والتطوير في صناعة أشباه الموصلات.

وبناءً على ما تقدم، تبرز أهمية هذا البحث في تقديم نموذج تطبيقي يعتمد على الذكاء الاصطناعي المساعد لتوليد واختبار الفرضيات المتعلقة بعمليات الإشابة، مع التركيز على تحسين الخصائص الفيزيائية الجوهرية للمواد شبه الموصلة. كما يوفّر هذا النموذج أساسًا يمكن البناء عليه مستقبلًا لتطوير أنظمة أكثر تقدّمًا لدعم اتخاذ القرار في البيئات البحثية والصناعية، دون تجاوز الحدود الواقعية لقدرات النماذج الحسابية الحالية.

2. الإشكالية الحالية والفجوة المعرفية:

1. على الرغم من التطور الكبير في تقنيات الإشابة وأساليب التنبؤ بخصائص المواد، لا يزال يفتقر مجال أشباه الموصلات إلى إطار منهجي متكامل يوظّف تقنيات الذكاء الاصطناعي المساعد لدعم توليد فرضيات تجريبية كمية حول عمليات الإشابة، واختبارها، وتحسينها بشكل تكراري ضمن دورة تعلم مغلقة. فما زالت عمليات الإشابة في معظم التطبيقات الصناعية والبحثية تعتمد على التجريب التقليدي أو على تحسينات محصورة في نطاقات تشغيلية محدودة، الأمر الذي يقيّد القدرة على استكشاف فضاءات أوسع من الشروط التشغيلية، ويؤدي إلى استمرار تحديات عدم التجانس، وارتفاع كثافة العيوب، وضعف موثوقية الأداء.
2. وفي هذا السياق، تبرز الحاجة إلى تطوير أطر حسابية قادرة على دعم الاستكشاف المنهجي لشروط الإشابة من خلال الدمج بين النماذج التنبؤية، والمحاكاة البديلة، وخوارزميات التحسين، بما يتيح تقليل الاعتماد على التجريب المكلف وتسريع عملية الوصول إلى شروط تشغيل محسّنة. وانطلاقًا من هذه الإشكالية، يسعى هذا البحث إلى معالجة الفجوة المعرفية من خلال مناقشة الأسئلة البحثية التالية:
3. كيف يمكن توظيف تقنيات الذكاء الاصطناعي المساعد لدعم توليد فرضيات تجريبية كمية تتعلق بظروف الإشابة، واختبارها بشكل تكراري؟
4. ما النماذج الحسابية الأكثر ملاءمة لبناء نظام قادر على اقتراح قيم محسّنة لمتغيرات الإشابة الأساسية، مثل درجة الحرارة، وزمن المعالجة، وتركيز الشائبة؟

5. كيف يمكن دمج النماذج البديلة (Surrogate Models) ضمن دورة تعلم مغلقة لتقييم الفرضيات وتحسينها، مع إمكانية التوسّع مستقبلًا نحو محاكيات فيزيائية أكثر تفصيلًا؟
6. إلى أي مدى يستطيع الإطار المقترح تحسين الخصائص الفيزيائية المستهدفة—مثل التجانس، وحركية الحاملات، وكثافة العيوب مقارنة بالأساليب التقليدية المعتمدة على التجريب المحدود؟
7. ما المعايير الفيزيائية والإحصائية الواجب اعتمادها لتقييم جودة الفرضيات المقترحة، وواقعيتها، وقابليتها للتطبيق في السياقات الصناعية؟

2.1. أهداف البحث والمساهمة العلمية:

يهدف هذا البحث إلى تطوير إطار حسابي تجريبي يعتمد على الذكاء الاصطناعي المساعد لدعم توليد الفرضيات التجريبية واختبارها وتحسينها تكراريًا في سياق عمليات الإشابة في أشباه الموصلات، وذلك ضمن بيئة محاكاة تعتمد على البيانات الاصطناعية والنماذج البديلة خفيفة العبء الحسابي. ولتحقيق هذا الهدف، يسعى البحث إلى ما يلي:

1. تصميم وحدة أولية لتوليد الفرضيات تعتمد على آلية احتمالية لتحديث الاعتقادات(Probabilistic Reasoning) ، وصياغة مقترحات كمية حول متغيرات الإشابة الأساسية، مثل درجة الحرارة، وزمن المعالجة، وتركيز الشائبة.
2. تطبيق خوارزميات تحسين احتمالية، مثلBayesian Optimization ، بهدف الاستكشاف المنهجي لفضاء معلمات الإشابة والبحث عن شروط تشغيل محسّنة ضمن الحدود الفيزيائية المدروسة.
3. تطوير محاكي بديل (Surrogate Simulator) قائم على Random Forest Regressor لاستبدال المحاكاة الفيزيائية الثقيلة، وتوفير تقييم سريع وفعّال للفرضيات المقترحة.
4. اعتماد مجموعة من المؤشرات الفيزيائية الرئيسة لتقييم جودة المادة الناتجة تحت ظروف الإشابة المختلفة، وتشمل:
   - مؤشر التجانس (Uniformity Index)
   - حركية الحاملات (Carrier Mobility)
   - كثافة العيوب (Defect Density)
5. تحليل مخرجات النظام وتفسيرها علميًا من خلال وحدة تفسير لاحقة تعتمد على مبادئ فيزيائية مبسّطة، ومقارنتها بالاتجاهات المتوقعة في نماذج الانتشار التقليدية.

ويسهم هذا البحث علميًا من خلال اقتراح إطار منهجي متكامل يوظّف الذكاء الاصطناعي لدعم دراسة وتحسين عمليات الإشابة في أشباه الموصلات، وذلك عبر الدمج المنهجي بين البيانات الاصطناعية، والنماذج البديلة، وخوارزميات التحسين. ويمكن تلخيص المساهمات العلمية الرئيسة فيما يلي:

1. تقديم نموذج أولي لإطار ذكاء اصطناعي مساعد يدعم توليد الفرضيات التجريبية واختبارها وتحسينها تكراريًا ضمن دورة تعلم مغلقة، دون ادعاء الاستقلالية الكاملة عن المعرفة الفيزيائية المسبقة.
2. تحسين فهم خصائص المواد شبه الموصلة وزيادة القدرة على التحكم بها، مثل التجانس، وحركية الحاملات، وكثافة العيوب، بما يسهم في تعزيز جودة الأداء في التطبيقات الإلكترونية والضوئية.
3. تمكين الاستكشاف المنهجي لشروط إشابة غير تقليدية من خلال البحث الذكي في فضاء المعلمات باستخدام Bayesian Optimization، مقارنة بالأساليب اليدوية المحدودة.

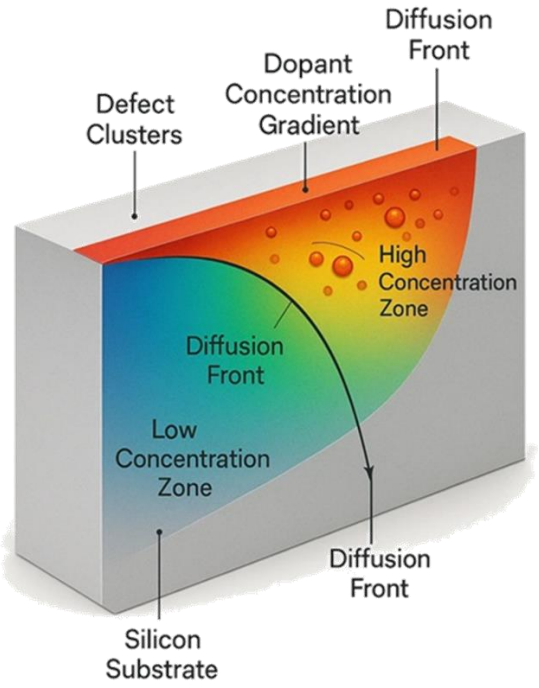
ISSN: 2706-6495

4. تقليل الزمن والكلفة التجريبية عبر استبدال جزء من التجارب الفيزيائية المكلفة بمحاكاة بديلة سريعة تعتمد على بيانات مولّدة بعلاقات شبه فيزيائية.
5. توفير إطار عام قابل للتوسّع والتكييف مع تطبيقات أخرى في علوم المواد، مثل تحسين عمليات التلدين، وضبط البنى النانوية، ودعم تصميم مواد جديدة.

2. مراجعة الأدبيات والدراسات السابقة:

مدخل

يقدّم هذا الفصل عرضاً نظرياً للمفاهيم الأساسية المرتبطة بموضوع البحث، بدءاً من المبادئ الفيزيائية لعمليات الإشابة في أشباه الموصلات، مروراً بأسس علم المواد الحوسبي ومحاكاة العمليات، وانتهاءً بأطر الذكاء الاصطناعي المستخدمة في اكتشاف المواد وتوليد الفرضيات التجريبية؛ كما يتضمن الفصل تحليلاً نقدياً للدراسات السابقة ذات الصلة، والتي شكّلت الأساس لبناء الإطار المفاهيمي، مع إبراز الفجوة العلمية التي يسعى البحث إلى سدّها.



الشكل 1 مقطع عرضي مولد بالذكاء يوضّح تدرّج تركيز الشوائب داخل ركيزة السيليكون أثناء عملية الإشابة الحرارية.

يظهر في الشكل كلّ من: منطقة التركيز العالي (High Concentration Zone)، ومنطقة التركيز المنخفض (Low Concentration Zone)، بالإضافة إلى جبهة الانتشار (Diffusion Front) التي تعبّر عن عمق الاختراق الفعلي للشوائب، كما تم توضيح مجموعات العيوب (Defect Clusters) الناتجة عن الجرعات العالية أو الإجهاد البلوري، وهو ما ينسجم مع المتغيرات التي ركّز عليها البحث مثل التجانس، الناقلية، وكثافة العيوب.

ISSN: 2706-6495

1.2. الإطار النظري:

1.1.2. المواد شبه الموصلة وأسس الإشابة:

- المواد شبه الموصلة: الخصائص والدور البنيوي

أشباه الموصلات هي مواد تقع خصائصها الكهربائية بين الموصلات والعوازل، حيث يمكن التحكم في ناقليتها عبر تغييرات صغيرة في تركيز الحاملات، وتُعد أساسًا في بناء الترانزستورات والدوائر المتكاملة والمستشعرات والخلايا الشمسية. وتُحدد خصائصها من خلال فجوة الطاقة، وحركية الحاملات، وانتشار العيوب البلورية، وهي عوامل تعتمد مباشرة على تقنيات التصنيع وعمليات الإشابة الحرارية أو الأيونية. (Sze & Ng, 2007; Streetman & Banerjee, 2015; Wolf, 1990).

- الإشابة: المفهوم والطرق الصناعية.

تُعدّ الإشابة (Doping) إحدى أهم العمليات في تصنيع أشباه الموصلات، حيث يتم إدخال ذرات شوائب محددة داخل الشبكة البلورية بهدف التحكم في تركيز الحاملات الكهربائية وتعديل الخصائص الإلكترونية للمادة. وتُستخدم الإشابة لضبط مستوى التوصيلية، إنشاء الوصلات p–n ، وتحسين أداء الأجهزة الدقيقة. يعتمد تأثير الإشابة على نوع الذرات المدخلة، وجرعتها، وعمق انتشارها، بالإضافة إلى الظروف الحرارية التي تُجرى فيها العملية (Sze & Ng, 2007; Streetman & Banerjee, 2015).

توجد عدة تقنيات مستخدمة صناعيًا لإجراء الإشابة، تختلف في آلياتها ودقتها وعمق الاختراق الذي تحققه في المادة، ومن أبرزها:

الانتشار الحراري (Thermal Diffusion)

تعدّ من أقدم طرق الإشابة وأكثرها استخدامًا في تصنيع السيليكون، حيث تُسخّن الرقاقة إلى درجات حرارة عالية تتراوح بين 800–1100 °C مما يسمح لذرات الشوائب بالانتشار وفق قوانين فيك للانتشار (Fick’s Laws) ، وتُستخدم هذه التقنية للحصول على توزيعات متدرجة (Gradient Profiles) من الشوائب داخل المادة (Wolf, 1990).

الزرع الأيوني (Ion Implantation)

تُعد التقنية الأكثر دقة في الصناعة الحديثة، وتتم عبر قذف أيونات الشوائب بطاقة عالية لتخترق الشبكة البلورية بعمق يمكن التحكم به بدقة نانومترية. وتتميز هذه التقنية بإمكانية التحكم الكامل في الجرعة وعمق الاختراق، إلا أنها قد تسبب تلفًا بلوريًا يتطلب معالجة حرارية لاحقة لإصلاحه (Sze & Ng, 2007).

الإشابة بالبلازما (Plasma Doping / PLAD)

تستخدم البلازما لإدخال الشوائب بجرعات عالية وبكفاءة مناسبة للعمليات منخفضة الطاقة، وتعد من الطرق الحديثة المستخدمة في التقنيات المتقدمة مثل FinFET و.GAA ، وتمتاز بمرونة عالية في التحكم بالطاقة وملاءمة للتطبيقات ثلاثية الأبعاد (Rahman et al., 2023).

الإشابة السطحية أو بين الواجهات (Interfacial Doping)

تُستخدم في البنى المتقدمة مثل الهياكل ثنائية الأبعاد والواجهات الأيونية، حيث يتم تركيز الشوائب ضمن طبقات رقيقة جداً عند السطح أو عند حدود الواجهة، مما يسمح بتعديل الخواص الكهربائية دون التأثير على bulk material. وتعد تقنية أساسية في تصنيع مواد ثنائية الأبعاد (Ishii et al., 2023).

- التحديات الفيزيائية في الإشابة

تشمل التحديات الفيزيائية مسألة عدم التجانس البلوري Crystal Non-uniformity، وصعوبة التحكم بعمق الانتشار وارتفاع كثافة العيوب Defects، وتحول العمليات إلى نطاقات نانوية بالغة الحساسية، وتأثر الإشابة بحرارة العملية وسرعة إعادة التبلور، حيث تبرز هذه التحديات أهمية عملية تحسين الإشابة للموثوقية والأداء الصناعي.

2.1.2. فيزياء الانتشار وخواص المواد:

تخضع حركة الشوائب داخل المادة لقوانين الانتشار (Fick's laws)، التي تصف كيفية انتقال الذرات من مناطق التركيز العالي إلى المنخفض، ويعتمد توزيع الشوائب النهائي على معامل الانتشار وزمن العملية ودرجة الحرارة وطبيعة المادة المشابة والضغوط البلورية الداخلية؛ وتؤدي أي انحرافات طفيفة في هذه المعاملات إلى تغيرات كبيرة في الخصائص الكهربائية، وهو ما يجعل عمليات الإشابة غير الخطية هدفاً مثالياً لاستخدام نماذج الذكاء الاصطناعي القادرة على تحليل العلاقات المعقدة.

3.1.2. محاكاة المواد والانتشار:

تشكل المحاكاة الفيزيائية أداة أساسية لفهم سلوك المواد، وتستخدم منصات مثل: Sentaurus TCAD، Silvaco Atlas، COMSOL Multiphysics وتتضمن برامج قادرة على محاكاة انتقال الحاملات،و حساب توزيع الشوائب وتحليل Band Structures وتقدير Defect Density ودراسة تأثير الحرارة والإجهادات البلورية؛ وتُعد المحاكاة حجر الأساس لأي نظام ذكاء اصطناعي يستخدم في اختبار الفرضيات تجريبياً دون إجراء تجارب فعلية.

4.1.2. الذكاء الاصطناعي في علوم المواد (Materials Informatics)

- دور الذكاء الاصطناعي في اكتشاف المواد

تبرز أعمال Madika et al. (2025) و Liang et al (2022) وجود ثورة حقيقية أحدثها الذكاء الاصطناعي في مجالات اكتشاف المواد، حيث يمكن للنماذج تعلم العلاقات بين المتغيرات الكيميائية والبنيوية والخواص الفيزيائية، وتوليد مواد أو تراكيب جديدة بسرعة تفوق الطرق التقليدية.

- النماذج المستخدمة في هذا المجال

تشمل النماذج الأكثر انتشاراً: الشبكات العصبية العميقة (DNNs)، والشبكات الرسومية GNNs لتحليل المواد على مستوى الذرات، و XGBoost وRandom Forest للتنبؤ بالخصائص الكمية، ونماذج الانحدار المتقدمة للتنبؤ بالفجوة الطاقية؛ وقد ساهمت هذه النماذج في تحسين تقدير فجوة الطاقة (Masuda, 2024؛ Tang, 2023؛ Saeed, 2023) وفي تصميم مواد جديدة لأجهزة الطاقة (Khorasani, 2024؛ Shafian, 2025)؛ وبحسب Senoner et al. (2022)، يمكن للذكاء الاصطناعي تحسين العمليات التصنيعية ومراقبة الجودة عبر تحليل الضوضاء التشغيلية والمتغيرات الدقيقة، مما يمهّد لإدخال نظم تعلم ذاتي داخل خطوط الإنتاج.

2.2. الدراسات السابقة:

1. دراسات الذكاء الاصطناعي في أشباه الموصلات

تناولت عدة دراسات مثل Zheng (2025) وZhang (2023) الاستخدام المتزايد للذكاء الاصطناعي في تحليل البيانات الضخمة المتعلقة بصناعة أشباه الموصلات، وفي التنبؤ بخصائص المواد الإلكترونية، وتوصّلت هذه الدراسات إلى أن التعلم الآلي قادر على تبسيط العلاقات المعقدة بين البنية والخواص، لكنه يظل موجهاً نحو التحليل وليس نحو توليد الفرضيات.

ISSN: 2706-6495

2. دراسات استخدام الذكاء الاصطناعي في تحسين فجوة الطاقة وخصائص المواد

تناولت أبحاث Tarbi (2023)، Tang (2023)، Masuda (2024)، وSaeed (2023) استخدام الذكاء الاصطناعي لتوقع فجوة الطاقة بدقة عالية في المواد المشابة، وقد أظهرت هذه الدراسات فاعلية النماذج في التنبؤ سريعاً بنتائج الإشابة، لكنها لم تتناول تصميم الفرضيات التجريبية أو اختيار قيم المتغيرات تلقائياً.

3. دراسات اكتشاف المواد باستخدام الذكاء الاصطناعي

تناولت Madika (2025)، Liang (2022)، وShafian (2025) جوانب واسعة من اكتشاف المواد عبر خوارزميات الذكاء الاصطناعي، بما في ذلك تحسين البنى الجزيئية وتوجيه التجارب، وقدمت هذه الدراسات أساساً قوياً لبناء نظام قادر على توليد فرضيات، لكنها لا تربط هذا المفهوم مباشرة بعمليات الإشابة الفيزيائية.

4. دراسات الإشابة التقليدية وتقنيات تحسين المواد

قدّمت أعمال Peng (2021)، Yuan (2023)، Oh (2023)، وRahman (2023) مراجعات مفصلة حول تقنيات الإشابة، تحديات التجانس، تأثير حالة السطح، والإشابة بالبلازما، وتعد هذه الأعمال مرجعاً للجانب الفيزيائي في البحث، لكنها لا تتضمن أي توظيف مباشر للذكاء الاصطناعي في توليد الفرضيات الخاصة بعمليات الإشابة.

5. الفجوة البحثية

من مراجعة الأدبيات، يتضح أن هناك دراسات تتعامل مع التنبؤ بخصائص المواد بعد الإشابة،وهناك دراسات تسهم في اكتشاف مواد جديدة، وهناك أعمال تناقش مراقبة الجودة في التصنيع؛ لكن لا توجد دراسة تقدم نظاماً متكاملاً يقوم فيه الذكاء الاصطناعي بتوليد الفرضيات الخاصة بعمليات الإشابة، واختبارها ذاتياً عبر محاكاة فيزيائية، وتعديلها في دورة تعلم مغلقة؛ وهذه هي الفجوة التي يستهدف هذا البحث سدّها.

3. منهجية الدراسة:

مقدمة الفصل

يقدّم هذا الفصل المنهجية العلمية المعتمدة في هذا البحث، والتي تقوم على تطوير نموذج تجريبي مبسّط يعتمد على تقنيات الذكاء الاصطناعي التنبؤية وأساليب التحسين الاحتمالية لتقدير تأثير ظروف الإشابة في أشباه الموصلات وتحسينها. وبخلاف الأنظمة المعتمدة على المحاكاة الفيزيائية الكاملة (TCAD أو COMSOL)، فإن هذا البحث يوظّف نموذج محاكاة بديلًا (Surrogate Model) يعتمد على بيانات اصطناعية متولّدة وفق علاقات شبه فيزيائية، مما يتيح بناء منظومة خفيفة وسريعة يمكنها اختبار الفرضيات العلمية وتحسينها بصورة تكرارية.

وتتكوّن المنهجية من ثلاث وحدات رئيسية تعمل ضمن دورة تحليل وتجريب مغلقة:

1. وحدة توليد الفرضيات: تقوم بتوليد فرضيات أولية حول شروط الإشابة، ثم تحسينها تدريجيًا عبر آلية reasoning loop تعتمد على نتائج المحاكاة البديلة.
2. وحدة التخطيط التجريبي: تتولى اختيار أفضل مجموعة من المتغيرات التجريبية عبر تحسين احتمالي موجّه يقلل عدد التجارب ويبحث عن القيم المثلى.
3. وحدة المحاكاة البديلة والتقييم: تعتمد على نموذج تعلم آلي متعدد المخرجات لتقدير استجابة النظام (التجانس، حركية الحاملات، وكثافة العيوب)، ثم تحويلها إلى مؤشّر جودة واحد يستخدم في دورة التحسين.

ISSN: 2706-6495

ويعمل هذا النظام بشكل متكامل يسمح بإجراء تجارب افتراضية متتابعة دون الحاجة إلى محاكاة فيزيائية ثقيلة أو بيانات مخبرية، مما يتيح فهماً مبدئياً للعلاقات التجريبية وتعظيم جودة الإشابة ضمن بيئة بحثية تحاكي اتخاذ القرار العلمي بطريقة آلية وبسيطة.

1.3. تصميم النظام

يعتمد النظام المقترح على مجموعة من الوحدات الحسابية المترابطة التي تعمل ضمن دورة تحسين مغلقة (Closed-Loop Optimization Framework)، وتهدف إلى دعم الاستكشاف المنهجي لشروط الإشابة في أشباه الموصلات باستخدام نماذج بديلة خفيفة الحساب وخوارزميات تحسين احتمالية، ويرتكز تصميم النظام على الالتزام بحدود تشغيل فيزيائية واقعية، دون الاعتماد على محاكاة فيزيائية كاملة مثل TCAD أوCOMSOL ، وذلك بغرض توفير بيئة حسابية سريعة مناسبة لتوليد الفرضيات واختبارها وتعديلها بشكل تكراري، وتتكوّن البنية العامة للنظام من الوحدات التالية:

1- طبقة القيود الفيزيائية الأولية (Physical Constraints Layer)

تمثل هذه الطبقة الإطار المرجعي الأولي الذي يقيّد فضاء البحث ضمن نطاقات تشغيل فيزيائية واقعية لعملية الإشابة، وتُستخدم لمنع النظام من اقتراح شروط غير قابلة للتطبيق عمليًا. وتشمل هذه القيود حدودًا عددية للمتغيرات الأساسية، من بينها:

- مجال درجات الحرارة (700–1000 °C) :
- مجال أزمنة المعالجة (10–200 s) :
- مجال تركيز الشائبة (1×10^{15}–1×10^{18} cm^{-3}) :

ولا تتضمن هذه الطبقة نماذج فيزيائية تفصيلية مثل قوانين الانتشار أو محاكياتTCAD ، إذ لا يهدف هذا البحث إلى محاكاة عملية الإشابة بدقة فيزيائية عالية، بل إلى دراسة قدرة الإطار المقترح على دعم توليد الفرضيات الكمية واختبارها وتحسينها ضمن دورة تعلم حسابية مغلقة، مع الالتزام بالقيود الفيزيائية العامة.

2- وحدة توليد الفرضيات الاحتمالية (Probabilistic Hypothesis Generator)

تعتمد وحدة توليد الفرضيات في هذا النظام على آلية احتمالية مبسّطة قائمة على أخذ عينات من توزيعات اعتقادية (Belief Distributions)تمثّل التقديرات الحالية لمجالات القيم المناسبة لمتغيرات الإشابة. وتُهيّأ هذه التوزيعات مبدئيًا استنادًا إلى نطاقات تشغيل صناعية شائعة، ثم يتم تحديثها تدريجيًا بناءً على نتائج المحاكاة البديلة.

وفي كل دورة من دورات التفكير التكراري(Reasoning Loop) ، تقوم هذه الوحدة بما يلي:

- أخذ عينة جديدة من قيم درجة الحرارة، وزمن المعالجة، وتركيز الشائبة من التوزيعات الاعتقادية الحالية.
- صياغة فرضية كمية تمثل مجموعة الشروط المختارة.
- تمرير الفرضية إلى وحدة المحاكاة البديلة لتقييم نتائجها.
- تحديث التوزيعات الاعتقادية بناءً على جودة النتائج المتحصلة.

ولا تعتمد هذه الوحدة على قواعد حتمية من نوع(If–Then) ، بل تستخدم آلية تحديث احتمالية تسمح بموازنة الاستكشاف والاستغلال، بما يحاكي بصورة مبسّطة عملية التفكير التجريبي القائمة على التعلّم التدريجي من النتائج.

3- وحدة التخطيط التجريبي(Experiment Planning Layer)

تم دمج خوارزمية Bayesian Optimization كآلية منهجية لتخطيط التجارب الحسابية واختيار مجموعات معلمات محسّنة

بكفاءة عالية. وتقوم هذه الوحدة بتقييم دالة الهدف الموحدة، واقتراح نقاط جديدة في فضاء المعلمات مع تحقيق توازن بين تحسين الخصائص الفيزيائية المستهدفة وتقليل عدد التجارب المطلوبة.

وتُعد هذه الوحدة مكمّلة لوحدة توليد الفرضيات، حيث تؤدي دورًا أكثر تنظيمًا ومنهجيًا في استكشاف فضاء المتغيرات، بينما تركز وحدة توليد الفرضيات على الاستكشاف الاحتمالي التدريجي.

4- وحدة المحاكاة البديلة (Surrogate Simulation Engine)

تعتمد وحدة المحاكاة البديلة على نموذج تعلم آلي متعدد المخرجات من نوع Random Forest Regressor ، تم تدريبه باستخدام بيانات اصطناعية مولّدة بعلاقات شبه فيزيائية. ويتولى هذا النموذج تقدير مخرجات عملية الإشابة بناءً على ثلاث مدخلات رئيسية:

درجة الحرارة (Temperature) وزمن المعالجة (Time) وتركيز الشائبة (Dopant Concentration)

ويعيد النموذج ثلاثة مخرجات فيزيائية رئيسية:

مؤشر التجانس(Uniformity Index) وحركية الحاملات(Carrier Mobility) وكثافة العيوب(Defect Density) ، وتُستخدم هذه الوحدة كبديل إحصائي سريع لمحاكاة الإشابة الفيزيائية الثقيلة، وتلعب دورًا محوريًا في تقييم الفرضيات ودعم عمليات التحسين.

5- وحدة التقييم والتحسين(Evaluation and Scoring Engine)

تتولى هذه الوحدة تحويل المخرجات الفيزيائية المتعددة إلى مؤشر جودة موحّد يُستخدم ضمن خوارزمية Bayesian Optimization. ويتم ذلك من خلال تطبيع الخصائص الفيزيائية الثلاثة إلى نطاقات عددية متقاربة، ثم دمجها خطيًا في دالة هدف واحدة على النحو التالي:

$$Score = \frac{Uniformity}{5000} + \frac{Mobility}{2000} - \frac{Defect\ Density}{1x\ 10^{11}}$$

حيث تمثل القيم المستخدمة عوامل تطبيع تقريبية تهدف إلى تحقيق توازن عددي بين المقاييس المختلفة، وتمكين خوارزمية التحسين من استكشاف فضاء المتغيرات بكفاءة.

كما تتضمن هذه الوحدة مكوّن تفسير لاحق (Post-hoc Interpretation Module) يقدّم شرحًا فيزيائيًا مبسّطًا لاتجاهات التحسين والنتائج المتحصلة، دون أن يكون جزءًا من آلية التنبؤ أو التحسين نفسها.

2.3. البيانات (Data Sources)

يعتمد هذا البحث على مجموعة بيانات اصطناعية مولّدة بالكامل تم إنشاؤها خصيصًا لاختبار الإطار المقترح، وذلك نظرًا لصعوبة إتاحة بيانات فعلية من محاكيات فيزيائية متقدمة مثل TCAD أوCOMSOL ، أو بيانات مخبرية صناعية، إضافة إلى أن الهدف من النسخة الحالية للنظام لا يتمثل في تحقيق نمذجة فيزيائية دقيقة لعمليات الإشابة، بل في تقييم فعالية الإطار الحسابي وآلية التعلم التكراري المعتمدة عليه.

وقد صُمّمت البيانات الاصطناعية لتُمثّل السلوك العام للمتغيرات الأساسية المؤثرة في عملية الإشابة، بما يجعلها مناسبة لاختبار خوارزميات توليد الفرضيات، والتخطيط التجريبي، والمحاكاة البديلة، والتقييم الإحصائي. وتم توليد مجموعة بيانات مكوّنة من

2000 عيّنة باستخدام لغة بايثون ومكتباتها العلمية، بالاعتماد على علاقات شبه فيزيائية مبسّطة تعكس الاتجاهات المعروفة في عمليات الانتشار الحراري والإشابة، دون الالتزام بنماذج فيزيائية معملية دقيقة.

وتشمل هذه العلاقات تأثيرات غير خطية بين المتغيرات، مثل ازدياد كثافة العيوب عند ارتفاع تركيز الشائبة أو تجاوز درجات حرارة مثالية، وتحسّن حركية الحاملات ضمن نطاقات حرارية معيّنة، وتدهور التجانس في الحالات التشغيلية المتطرفة. كما تم تضمين مكونات ضوضاء تجريبية لتمثيل عدم اليقين والاضطرابات الطبيعية المرتبطة بالعمليات الفيزيائية، بما يحدّ من الحتمية المطلقة في البيانات ويزيد من واقعية بيئة الاختبار.

وقد استُخدمت هذه البيانات حصريًا لتدريب النموذج البديل وتقييم أداء الإطار المقترح، مع التأكيد على أن القيم الناتجة تعبّر عن اتجاهات وسلوكيات نسبية وليست عن قياسات فيزيائية حقيقية.

جدول (1) المتغيرات المستخدمة في التجربة ومعانيها الفيزيائية

المتغير الفيزيائي	التمثيل العددي في النموذج	التفسير العلمي
درجة الحرارة (Temperature_C)	مستمر: 700–1000 °C	تتحكم في تنشيط الشوائب ورفع معامل الانتشار، وتؤثر مباشرة في التجانس وكثافة العيوب.
زمن المعالجة(Time_s)	مستمر: 10–200 ثانية	يحدد المدة الزمنية المسموح فيها بانتشار الشوائب، مما يؤثر على عمق الاختراق وانتظام التوزيع.
تركيز الإشابة (Dopant Concentration)	مستمر: 10^{15}–10^{18} ذرة/سم^3	يمثل كثافة ذرات الشائبة داخل المادة، ويؤثر على ناقلية الحاملات، مع زيادة احتمالية التبعثر والعيوب عند التركيزات المرتفعة.
مؤشر التجانس (Uniformity Index)	ناتج محاكاة بديلة	يقيس مدى انتظام توزيع الشوائب داخل المادة بعد انتهاء عملية الإشابة.
حركية الحاملات (Carrier Mobility)	ناتج محاكاة بديلة	تتأثر بآليات التبعثر الشائبي والفونوني، وتنخفض عادةً عند زيادة تركيز الشائبة.
كثافة العيوب (Defect Density)	ناتج محاكاة بديلة	تزداد عند ارتفاع درجات الحرارة أو التركيزات العالية نتيجة إجهاد الشبكة البلورية.

3.3. الخوارزمية العامة (General Algorithm)

تعتمد الخوارزمية العامة للنظام المقترح على دورة تعلم تكرارية مغلقة (Closed-Loop Learning Framework) تجمع بين توليد الفرضيات الاحتمالي، والمحاكاة البديلة المعتمدة على التعلم الآلي، وخوارزميات التحسين الاحتمالية، بهدف دعم الاستكشاف المنهجي لشروط الإشابة في أشباه الموصلات. وقد صُمّمت الخوارزمية بحيث تحاكي بصورة مبسّطة منهجية التفكير التجريبي القائمة على التعلّم التدريجي من النتائج، مع الحفاظ على قابلية التنفيذ ضمن بيئة حسابية خفيفة تعتمد على بيانات توليدية. وتتكوّن الخوارزمية من ثلاث وحدات رئيسية تعمل بشكل مترابط، مع الالتزام بالقيود التي تفرضها طبقة المعرفة الفيزيائية الأولية:

ISSN: 2706-6495

1. وحدة توليد الفرضيات الاحتمالية(Probabilistic Hypothesis Generator)
2. وحدة التخطيط التجريبي باستخدامBayesian Optimization
3. وحدة المحاكاة البديلة والتقييم(Surrogate Simulation and Evaluation)

ويتم تنفيذ العملية ضمن دورة مغلقة تسمح بتحديث الفرضيات وتحسينها تدريجيًا عبر التكرار، وصولًا إلى شروط تشغيل تحقق توازنًا مناسبًا بين مؤشر التجانس، وحركية الحاملات، وكثافة العيوب.

الخطوة 1: تهيئة النظام

تبدأ الخوارزمية بتحديد نطاقات التشغيل الفيزيائية للمتغيرات الأساسية لعملية الإشابة، والتي تشمل درجة الحرارة، وزمن المعالجة، وتركيز الشائبة. كما يتم تحميل نموذج المحاكاة البديلة(Surrogate Model) ، وهو نموذج تعلم آلي متعدد المخرجات مدرَّب على بيانات اصطناعية، ويُستخدم لتقدير العلاقة بين متغيرات الإشابة ومخرجاتها الفيزيائية.

الخطوة 2: توليد الفرضية الأولية

تمثل هذه الخطوة نقطة البداية الاستكشافية للنظام، حيث يتم توليد فرضية أولية من خلال أخذ عينات من توزيعات اعتقادية مبدئية تمثل تقديرات أولية لمجالات القيم المناسبة لمتغيرات الإشابة. وتُصاغ الفرضية على شكل مجموعة كمية من القيم (درجة الحرارة، الزمن، التركيز) يتم تمريرها إلى وحدة المحاكاة البديلة للتقييم.

الخطوة 3: تنفيذ المحاكاة البديلة

تُمرَّر الفرضية المقترحة إلى المحاكي البديل (Surrogate Simulator) ، الذي يقوم بتقدير المخرجات الفيزيائية الثلاثة التالية: مؤشر التجانس (Uniformity Index)، وحركية الحاملات،(Carrier Mobility) و كثافة العيوب (Defect Density) ويتم الحصول على هذه القيم بصورة فورية، مما يتيح تنفيذ دورات تجريبية متتابعة دون الحاجة إلى محاكاة فيزيائية ثقيلة.

الخطوة 4: تقييم الفرضية

تُقيَّم نتائج كل تجربة باستخدام دالة هدف موحّدة تجمع الخصائص الفيزيائية الثلاثة في مؤشر جودة واحد وفق العلاقة التالية:

$$\boldsymbol{Score = \frac{Uniformity}{5000} + \frac{Mobility}{2000} - \frac{Defect\ Density}{1x10^{11}}}$$

ويهدف هذا المؤشر إلى تحويل الأهداف المتعددة والمتعارضة إلى معيار عددي واحد مناسب لخوارزميات التحسين الاحتمالية.

الخطوة 5: التخطيط التجريبي والتحسين

تُستخدم خوارزمية Bayesian Optimization لاستكشاف فضاء المتغيرات واقتراح مجموعات جديدة من القيم التجريبية بناءً على نتائج التجارب السابقة، من خلال نمذجة التوزيع الاحتمالي اللاحق (Posterior Distribution) واستخدام دالة اقتناء (Acquisition Function)، حيث تسهم هذه الآلية في تقليل عدد التجارب المطلوبة وتسريع الوصول إلى شروط تشغيل محسّنة.

الخطوة 6: تحديث الفرضيات عبر دورة التفكير التكراري

بعد كل تجربة، يتم تحديث التوزيعات الاعتقادية المستخدمة في توليد الفرضيات استنادًا إلى جودة النتائج المتحصلة، مما يؤدي إلى تعديل تدريجي لاحتمالات اختيار القيم في التكرارات اللاحقة. وتُكرَّر هذه العملية عددًا محددًا من المرات (خمس دورات في الإعداد الحالي)، بما يسمح بتحقيق توازن بين الاستكشاف والاستغلال دون الاعتماد على قواعد حتمية ثابتة.

ISSN: 2706-6495

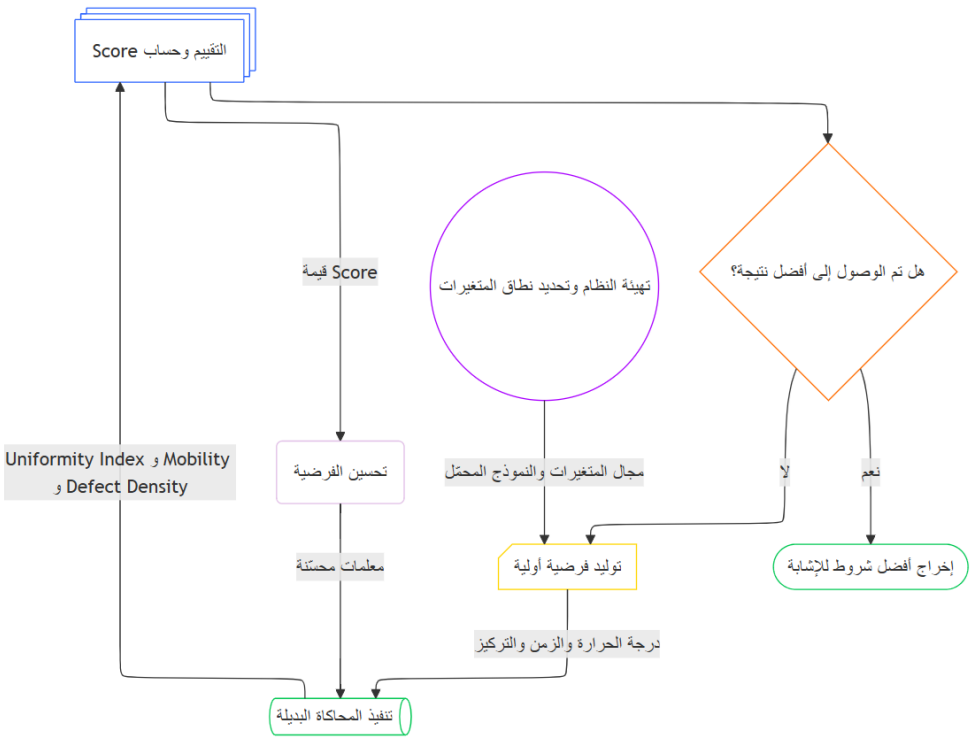
الخطوة 7: تحديد أفضل فرضية

تتوقف دورة التحسين عند تحقق أحد الشروط التالية:

1. الوصول إلى أفضل قيمة لمؤشر الجودة(Score)
2. استقرار النتائج وعدم تحسّنها عبر التكرارات
3. بلوغ الحد الأعلى لعدد التكرارات المحدد مسبقًا

جدول (2) مراحل الخوارزمية وتوصيف كل مرحلة

المرحلة	الوصف
تهيئة النظام	تحديد نطاقات المتغيرات وتحميل نموذج المحاكاة البديلة
توليد الفرضية	أخذ عينات من توزيعات اعتقادية وصياغة فرضية كمية
المحاكاة	تقدير المخرجات الفيزيائية عبر النموذج البديل
التقييم	حساب مؤشر الجودة الموحّد
التخطيط التجريبي	اقتراح قيم جديدة باستخدامBayesian Optimization
التفكير التكراري	تحديث الفرضيات احتماليًا عبر دورة تعلم مغلقة
الوصول للحل	اختيار أفضل شروط إشابة متاحة



الشكل (2) المخطط العام لمراحل لخوارزمية(General Algorithm Flow Diagram)

ISSN: 2706-6495

4.3. معايير التقييم (Evaluation Metrics)

يعتمد تقييم الفرضيات في النظام المقترح على مجموعة من المعايير المتكاملة التي تغطي الجوانب الفيزيائية والحسابية والعلمية، وذلك بهدف تقديم تقييم شامل لجودة النتائج المتحصلة من دورة التعلم المغلقة. وقد تم اختيار هذه المعايير بما يتوافق مع قدرات النظام الفعلية، وحدود البيانات الاصطناعية، وطبيعة نموذج المحاكاة البديلة المستخدم.

1- المعايير الفيزيائية (Physical Metrics)

تُستخدم هذه المعايير للحكم على جودة الخصائص الناتجة عن عملية الإشابة كما يتم تقديرها بواسطة نموذج المحاكاة البديلة، وتشمل الخصائص الفيزيائية الأساسية التالية:

- Uniformity Index: يقيس مدى انتظام توزيع الشوائب داخل المادة بعد عملية الإشابة، ويُعد مؤشرًا مهمًا على جودة التحكم في عملية الانتشار.
- Defect Density: يعبّر عن كثافة العيوب البنيوية الناتجة عن ظروف الإشابة، ويُستخدم لتقييم تأثير درجات الحرارة المرتفعة أو التركيزات العالية للشوائب.
- Carrier Mobility: تعكس قدرة الحاملات الكهربائية على الحركة داخل المادة، وتتأثر بآليات التبعثر الشوائبي والحراري، مما يجعلها مؤشرًا مباشرًا على جودة المادة الناتجة.

وتُعد هذه المعايير الثلاثة المخرجات الفيزيائية الأساسية للنظام، ويتم استخدامها مباشرة في عمليات التقييم والتحسين.

2- المعايير الحسابية (Computational Metrics)

تركّز هذه المعايير على تقييم الأداء الحسابي للنظام وكفاءته أثناء تنفيذ دورة التحسين، وتشمل:

- عدد التجارب الحسابية اللازمة للوصول إلى شروط محسّنة، كمؤشر على كفاءة التخطيط التجريبي.
- استقرار النتائج العددية (Numerical Stability) عند تكرار التجارب أو إدخال اضطرابات طفيفة على المدخلات.
- سلوك التقارب (Convergence Behavior) أثناء دورات Bayesian Optimization ، بما يعكس قدرة النظام على الوصول إلى حلول مستقرة خلال عدد محدود من التكرارات.

3- المعايير العلمية لجودة الفرضية (Hypothesis Quality Metrics)

تُستخدم هذه المعايير لتقييم الفرضيات المتولدة من منظور علمي ومنهجي، مع الأخذ بعين الاعتبار حدود البيئة المحاكاة، وتشمل:

- قابلية الاختبار:(Testability) تُعد المعيار الأساسي في هذا العمل، حيث تكون جميع الفرضيات قابلة للاختبار داخل بيئة المحاكاة البديلة.
- الواقعية الفيزيائية الجزئية:(Partial Physical Validity) يتم تقييم الفرضيات من حيث التزامها بالقيود الفيزيائية العامة واتجاهات السلوك المعروفة، دون الادعاء بمحاكاة فيزيائية دقيقة.
- إمكانية التعميم المحدودة:(Limited Generalizability) تُقيَّم الفرضيات ضمن نطاق البيانات الاصطناعية والافتراضات المستخدمة، مع الإشارة إلى أن تعميم النتائج على مواد أخرى أو عمليات إشابة مختلفة يتطلب بيانات ونماذج إضافية.

وفي التطبيق الحالي، يتم تحقيق معيار قابلية الاختبار بصورة كاملة ضمن البيئة المحاكاة، بينما تُطبَّق معايير الواقعية الفيزيائية وإمكانية التعميم ضمن حدود النموذج والبيانات المستخدمة، دون تجاوز نطاق صلاحيتها.

ISSN: 2706-6495

5.3. الأساليب الإحصائية المستخدمة:

لتعزيز موثوقية النتائج المستخلصة من نموذج الإشابة، وتأكيد أن التحسينات التي يحققها النظام ليست نتيجة صدفة أو انحياز في البيانات، يعتمد هذا البحث على مجموعة من الأساليب الإحصائية المتقدمة لتقييم استقرار النموذج، وقياس حساسية الفرضيات للتغيرات، وتحليل العلاقات بين المتغيرات، وتحديد مستوى الثقة في النتائج.

تعتبر هذه الإجراءات ضرورية لأن الإشابة في أنصاف النواقل عملية حسّاسة لأي تغيّر في المعلمات الفيزيائية، كما أن نماذج التعلم الآلي مهما كانت دقتها تحتاج إلى تقييم إحصائي صارم لضمان الاعتمادية العلمية.

وفيما يلي شرح مفصل لكل أسلوب إحصائي مستخدم:

1- معاملات الارتباط بيرسون وسبيرمان/ الخطية والرتبية (Pearson & Spearman Correlations)

يستخدم الارتباط لتحليل العلاقة بين معلمات الإشابة (مثل جرعة الإشابة ودرجة الحرارة) والخصائص الناتجة (مثل الحركة، التجانس، كثافة العيوب) ويقيس معامل بيرسون الخطية بينما معامل سبيرمن يقيس الرتبية، ويساعد وجودها في فهم بنية العلاقة بين مدخلات الإشابة ومخرجاتها (Mobility, Defects, etc)،مما يشكل دعما للفرضيات التالية.

2- محاكاة مونتِ كارلو / المحاكاة العشوائية الاحتمالية (Monte Carlo Simulation)

تعتمد هذه الطريقة على توليد آلاف السيناريوهات العشوائية عبر إدخال تغيرات صغيرة في مدخلات الإشابة، ثم قياس استقرار النتائج الناتجة، مما يسمح بقياس الحساسية تجاه تغير المعلمات، وتحليل عدم اليقين في النماذج والكشف عن حدود الاستقرار الفيزيائي للفرضيات، وهو يساهم في التأكد من أن الفرضية المقترحة تظل فعّالة حتى عند حدوث تغيرات صغيرة في التركيز أو الحرارة أو الزمن.

3- تحليل الحساسية (Sensitivity Analysis)

يهدف هذا التحليل إلى تحديد المعلمات الأكثر تأثيرًا على الخصائص الإلكترونية، وقياس مقدار استجابة النتائج لأي تغير في معلمة معينة، وتحسين عملية التخطيط التجريبي عبر التركيز على أهم العوامل، ويساهم في معرفة ما إذا كانت الحركة الإلكترونية تتأثر أكثر بدرجة الحرارة أم بتركيز الإشابة، مما يساعد النظام على تحسين فرضياته بشكل أسرع وأدق.

4- فترات الثقة (Confidence Intervals)

تُستخدم فترات الثقة لتحديد مدى موثوقية النتائج من حيث حدود التغير الطبيعي المتوقع، وقدرة النظام على تقديم نتائج مستقرة ومتكررة، على سبيل المثال: فترة ثقة 95% تعني أن 95% من النتائج المتوقعة يجب أن تقع ضمن هذا النطاق ويساعد على التأكد من أن التحسينات المحققة ليست فريدة أو شاذة، وتقع ضمن نطاق يمكن الاعتماد عليه.

جدول (3) الأساليب الإحصائية المستخدمة

الأسلوب	التسمية العربية	دوره في البحث
Pearson/Spearman	معاملات الارتباط	كشف العلاقات بين الإشابة والخصائص
Monte Carlo Simulation	محاكاة مونتِ كارلو	قياس استقرار الفرضيات تحت الضوضاء
Sensitivity Analysis	تحليل الحساسية	تحديد المعلمات الأكثر تأثيرًا
Confidence Intervals	فترات الثقة	تقدير موثوقية واستقرار النتائج

ISSN: 2706-6495

4. النتائج والمناقشة:

يستعرض هذا الفصل النتائج التي تم الحصول عليها من النظام المقترح لاستخدام الذكاء الاصطناعي في تحسين عملية الإشابة في أشباه الموصلات، ويتضمن الفصل عرضاً لنتائج بناء نموذج المحاكاة (Surrogate Model)، وتحسين ظروف الإشابة باستخدام خوارزمية Bayesian Optimization، وتنفيذ آلية توليد الفرضيات التجريبية آلياً، بالإضافة إلى مجموعة من الرسوم البيانية التي تعكس العلاقات الفيزيائية بين المتغيرات المختلفة.

1.4. نتائج توليد البيانات الاصطناعية

تم في هذا البحث إنشاء مجموعة بيانات اصطناعية (Synthetic Dataset) مكوّنة من 2000 عيّنة، صُمّمت لتمثيل السلوك العام لعملية الإشابة في أشباه الموصلات تحت تغيّر مجموعة من المتغيرات التشغيلية الأساسية، وتشمل هذه المتغيرات: درجة الحرارة(°C) ، زمن المعالجة (s)، تركيز الشائبة(atoms/cm³) ، إضافة إلى المخرجات الفيزيائية المتمثلة في مؤشر التجانس (Uniformity Index)، وحركية الحاملات (Carrier Mobility)، وكثافة العيوب (Defect Density) .

وقد تم توليد هذه البيانات باستخدام علاقات شبه فيزيائية مبسّطة مستوحاة من الاتجاهات العامة لنماذج الانتشار الحراري وتأثيرات الإشابة المعروفة، دون الاعتماد على معادلات فيزيائية دقيقة أو محاكياتTCAD، وتم تضمين مكونات ضوضاء إحصائية موزعة غاوسيًا على المخرجات الفيزيائية لمحاكاة عدم اليقين التجريبي والاضطرابات الطبيعية المرتبطة بالعمليات التصنيعية، بما يحدّ من الحتمية المطلقة ويزيد من واقعية البيانات المستخدمة.

ويهدف هذا الأسلوب إلى إنشاء قاعدة بيانات مناسبة لتدريب نموذج المحاكاة البديلة (Surrogate Model) واختبار أداء الخوارزميات المستخدمة في توليد الفرضيات والتخطيط التجريبي، مع التأكيد على أن القيم الناتجة تعبّر عن اتجاهات نسبية وسلوكيات عامة، وليست عن قياسات فيزيائية حقيقية.

موجه الأوامر

	Temperature_C	Time_s	Dopant_Concentration	Uniformity_Index	Mobility	Defect_Density
0	812.362036	59.724080	5.724239e+17	286211.348698	1461.123597	1.193146e+10
1	985.214292	56.925972	8.056269e+17	402813.266290	1524.754524	1.659575e+10
2	919.598183	182.188370	7.604008e+17	380199.388779	1502.041753	1.342516e+10
3	879.597545	57.413778	1.547460e+17	77373.412780	1529.967508	1.143878e+10
4	746.805592	61.670448	1.501002e+17	75049.468116	1465.453306	1.519876e+10
5	746.798356	154.285670	2.689062e+17	134452.348845	1453.546275	1.521044e+10
6	717.425084	95.450570	3.617137e+17	180855.767902	1444.452481	1.679201e+10
7	959.852844	157.575006	4.090471e+17	204523.070520	1542.063033	1.542198e+10
8	880.334504	22.419570	6.800175e+17	340008.669290	1477.212833	1.149917e+10
9	912.421773	102.638527	5.762375e+16	28811.994589	1549.635536	1.329574e+10
10	706.175348	16.386584	3.563803e+16	17818.198193	1442.396690	1.726796e+10
11	990.972956	21.904109	3.925187e+17	196258.798596	1556.622674	1.719523e+10
12	949.732792	182.223116	6.974665e+17	348732.822503	1514.062501	1.529399e+10
13	763.701733	36.456621	1.942419e+17	97120.472709	1461.700569	1.428908e+10
14	754.547490	111.159930	6.418630e+17	320931.278392	1421.151616	1.479385e+10
15	755.021353	88.108164	2.605683e+17	130283.424845	1459.256306	1.472980e+10
16	791.272673	75.995232	8.862000e+17	443099.506640	1422.209389	1.274491e+10
17	857.426929	180.968336	8.957943e+17	447896.155504	1456.152352	1.044128e+10
18	829.583506	14.146445	2.979899e+17	148995.068500	1495.423723	1.117478e+10
19	787.368742	136.120040	2.307638e+17	115381.358565	1471.391658	1.324174e+10
20	883.555868	193.044943	4.118927e+17	205944.915653	1507.503791	1.185275e+10
21	741.848158	116.431955	2.412911e+17	120644.956690	1453.449595	1.540647e+10
22	787.643395	187.996268	6.727115e+17	336354.218260	1430.296942	1.316022e+10
23	809.908553	19.928997	8.262386e+17	413119.064419	1426.930659	1.219157e+10
24	836.820995	89.570731	6.734190e+17	336708.758128	1466.267561	1.061879e+10
25	935.552788	59.429980	8.245261e+17	412263.500173	1504.274378	1.432762e+10
26	759.902135	148.855983	3.975952e+17	198796.615844	1458.464554	1.459008e+10
27	854.270332	196.446447	1.571607e+17	78579.331479	1515.352788	1.047613e+10

الشكل (3) لقطة شاشة لجزء من البيانات المولدة

ISSN: 2706-6495

جدول (4) العوامل التشغيلية المستخدمة في توليد البيانات

العامل	نطاق التوليد	سبب التضمين
درجة الحرارة	700–1000 °C	تمثيل تأثير التنشيط الحراري وازدياد الانتشار وارتفاع احتمالية تشكّل العيوب عند القيم المرتفعة
زمن المعالجة	10–200 s	محاكاة تأثير مدة الانتشار على التجانس وكثافة العيوب
تركيز الإشابة	$1\times10^{15} – 5\times10^{17}$ atoms/cm³	تمثيل تأثير التبعثر الشوائبي وتحسّن أو تدهور الخصائص الإلكترونية
مؤشر التجانس	ناتج محاكاة بديلة	تقييم انتظام توزيع الشوائب
حركية الحاملات	ناتج محاكاة بديلة	قياس جودة النقل الإلكتروني
كثافة العيوب	ناتج محاكاة بديلة	تمثيل تأثير الإجهاد الحراري والتركيزات العالية

2.4. نتائج تدريب نموذج Surrogate Simulation

تم تدريب نموذج Random Forest Regressor متعدد المخرجات بهدف تعلّم العلاقة بين متغيرات الإشابة الأساسية (درجة الحرارة، زمن المعالجة، وتركيز الشائبة) والمخرجات الفيزيائية الناتجة، وذلك بالاعتماد على مجموعة البيانات الاصطناعية المولّدة. وقد جرى تقسيم البيانات إلى مجموعة تدريب تمثل 80% من العينات، ومجموعة اختبار مستقلة تمثل 20% من البيانات، دون أي تداخل بين المجموعتين، مع الحفاظ على نفس البنية الإحصائية للمتغيرات.

يُستخدم هذا التقسيم لتقييم قدرة النموذج على التعميم ضمن نطاق البيانات المتاحة، وليس لاختبار تعميمه خارج حدود العلاقات شبه الفيزيائية المستخدمة في توليد البيانات.

أداء النموذج على مجموعة الاختبار

يوضح جدول (5) مقاييس الأداء المسجّلة للنموذج على بيانات الاختبار، باستخدام معامل التحديد (R^2) ومتوسط مربع الخطأ (MSE):

جدول (5) أداء نموذج Random Forest على بيانات الاختبار

المتغير	R^2 Score	MSE
مؤشر التجانس (Uniformity Index)	0.9999	منخفض
حركية الحاملات (Carrier Mobility)	0.9861	منخفض
كثافة العيوب (Defect Density)	0.9977	منخفض

تظهر هذه النتائج قدرة النموذج على تعلّم العلاقات الداخلية الموجودة في البيانات الاصطناعية بدقة عالية، وهو أمر متوقع نظرًا لاعتماد البيانات على علاقات شبه فيزيائية محددة ومحدودة التعقيد، وتدعم هذه المؤشرات ملاءمة النموذج لاستخدامه كمحاكٍ بديل سريع ضمن إطار البحث الحالي، دون الادعاء بتمثيل السلوك الفيزيائي الحقيقي بدقة كاملة.

ISSN: 2706-6495

نتائج بناء المحاكي البديل(Surrogate Simulator)

بعد الانتهاء من تدريب النموذج، تم دمجه ضمن محاكي حسابي قادر على استقبال قيم درجة الحرارة، وزمن المعالجة، وتركيز الشائبة، وإرجاع التقديرات المقابلة للمخرجات الفيزيائية الثلاثة: مؤشر التجانس(Uniformity Index) ، وحركية الحاملات (Carrier Mobility)، وكثافة العيوب.(Defect Density)

وقد تم تزويد المحاكي بواجهة إخراج منسّقة على شكل جدول نصي باللغة الإنجليزية، تهدف إلى تسهيل قراءة النتائج ومتابعة سلوك النظام أثناء دورات التوليد والتقييم والتحسين. ويُستخدم هذا المحاكي حصريًا لدعم دورة التعلم المغلقة وتقييم الفرضيات داخل الإطار المقترح، وليس كبديل مباشر لمحاكيات فيزيائية متقدمة مثلTCAD .

```
✅ Surrogate model loaded successfully.

   Running test simulation...

========== SIMULATION RESULTS ==========
Parameter                    Value
-----------------------------------------------
Uniformity Index          : 5,043.933
Carrier Mobility          : 1,526.529
Defect Density            : 10,060,854,671.249
-----------------------------------------------
```

الشكل (4) لقطة شاشة مثال على ناتج المحاكاة البديلة لشروط إشابة محددة

درجة حرارة 850°C ، زمن معالجة 80s ، تركيز شائبة 1×10^{16}(atoms/cm³)

3.4. نتائج تحسين الإشابة باستخدام Bayesian Optimization

تم تطبيق خوارزمية Bayesian Optimization بهدف البحث الذكي عن أفضل مجموعة من معايير الإشابة التي تحقّق توازناً بين التجانس البلوري، وارتفاع حركية الحاملات، وانخفاض كثافة العيوب. واعتمدت عملية التحسين على المجال التالي من المعاملات:

درجة الحرارة (700–1000°C) ، زمن الانتشار (10–200 s) ، تركيز الدوبانت (1×10^{15} – 1×10^{18} cm⁻³)

وقد أجرت الخوارزمية 20تجربة تلقائية (5 للتنويع الأولي و15 جولة تحسين)، كما يظهر في سجل النتائج. وبعد اكتمال البحث، توصّلت الخوارزمية إلى أفضل توليفة من المعلمات كما يلي:

القيم المثلى المستخرجة من خوارزمية التحسين

درجة الحرارة المثلىC°894.64 :

زمن الإشابة الأمثل125.86 s :

تركيز الدوبانت الأمثل1.50×10^{16} atoms/cm³ :

وعند تمرير هذه القيم إلى نموذج المحاكاة البديل (Surrogate Model)، أعطى النظام المخرجات الفيزيائية التالية:

المخرج الفيزيائي	القيمة
Uniformity Index	4,183.28
Carrier Mobility	1,615.10 cm²/V·s
Defect Density	1.17×10^{10} cm⁻³

ISSN: 2706-6495

تظهر هذه النتائج حالة متوازنة تجمع بين مستوى مقبول من التجانس، وارتفاع نسبي في حركية الحاملات، مع كثافة عيوب تقع ضمن الحدود الفيزيائية المتوقعة في عمليات الإشابة الحرارية عالية الجرعة.

```
|   iter    |  target   | temper... |   time    | concen... |
-------------------------------------------------------------
| 1         | -0.052640 | 812.36203 | 190.63571 | 7.322e+17 |
| 2         | 0.4456083 | 879.59754 | 39.643541 | 1.568e+17 |
| 3         | -0.119278 | 717.42508 | 174.57346 | 6.015e+17 |
| 4         | 0.2357051 | 912.42177 | 13.911053 | 9.699e+17 |
| 5         | 0.3952848 | 949.73279 | 50.344431 | 1.826e+17 |
| 6         | 0.3860886 | 883.55586 | 43.638225 | 3.283e+17 |
| 7         | 0.3257546 | 842.66762 | 107.92466 | 7.871e+17 |
| 8         | 0.0913376 | 746.09128 | 154.26691 | 5.966e+17 |
| 9         | 0.2126133 | 760.70911 | 27.201138 | 3.157e+17 |
| 10        | 0.4776660 | 855.70186 | 32.994727 | 7.931e+16 |
| 11        | 0.2728220 | 732.13047 | 109.80552 | 1.603e+17 |
| 12        | 0.3114593 | 800.53399 | 75.753202 | 9.490e+17 |
| 13        | 0.1717814 | 749.73861 | 48.751220 | 7.978e+17 |
| 14        | 0.3458955 | 888.24761 | 113.75420 | 8.179e+17 |
| 15        | 0.5540454 | 841.71135 | 43.283996 | 3.437e+16 |
| 16        | 0.3185036 | 944.97920 | 124.16583 | 3.335e+17 |
| 17        | 0.6343089 | 894.64363 | 125.85600 | 1.500e+16 |
| 18        | 0.1195979 | 995.32634 | 149.96258 | 6.846e+17 |
| 19        | 0.3569920 | 920.30092 | 76.016451 | 4.528e+17 |
| 20        | 0.1368078 | 987.80252 | 26.707183 | 9.673e+17 |
=============================================================

 BEST OPTIMAL PARAMETERS FOUND
{'target': np.float64(0.6343089050343425), 'params': {'temperature': np.float64(894.643635704447),
87), 'time': np.float64(125.85600578727019), 'concentration': np.float64(1.5006098843921026e+16
)}}
```

الشكل (5) لقطة شاشة لنتائج optimizer:

4.4. تفسير النتائج (Scientific Explanation Module)

تتضمن المنظومة وحدة تفسير علمي لاحقة (Post-hoc Explanation Module) تعتمد على مجموعة من القواعد الفيزيائية المبسّطة والمحددة مسبقًا، وتهدف إلى ربط القيم العددية لمتغيرات الإشابة والمخرجات الفيزيائية بتفسيرات وصفية مفهومة، ولا تشارك هذه الوحدة في عملية التنبؤ أو التحسين، وإنما تُستخدم حصريًا لأغراض التفسير وتوضيح سلوك النظام.

في المرحلة الأولى، تقوم الوحدة بتحليل متغيرات الإشابة المدخلة عبر مقارنتها بنطاقات فيزيائية مرجعية معروفة، فعلى سبيل المثال، يتم تفسير درجة الحرارة وفق قواعد شرطية بسيطة، حيث إذا وقعت قيمة درجة الحرارة ضمن المجال 800–900 (°C)، يتم إصدار تفسير من الشكل:

"Temperature within the activation window : good dopant activation and uniformity."

أما إذا كانت درجة الحرارة أقل من هذا النطاق أو أعلى منه، فيتم تعديل التفسير ليعكس احتمال ضعف تنشيط الشوائب أو زيادة الإجهاد الشبكي وتشكّل العيوب، على التوالي، وبطريقة مشابهة، يتم تحليل زمن المعالجة (Time_s) من حيث كونه قصيرًا، أو ضمن المجال الأمثل، أو طويلًا، مع ربط كل حالة بتفسير يتعلق بعمق الانتشار واحتمالية تشكّل العيوب.

كما يتم تحليل تركيز الشائبة استنادًا إلى نطاقات محددة، حيث يُفسَّر التركيز المنخفض على أنه قد يؤدي إلى نقص في عدد الحاملات، بينما يُعد التركيز المتوسط مؤشرًا على توازن بين الناقلية وكثافة العيوب، في حين يُربط التركيز المرتفع بازدياد ظواهر التبعثر (impurity scattering) وتدهور حركية الحاملات.

في المرحلة الثانية، تنتقل وحدة التفسير إلى تحليل المخرجات الفيزيائية الناتجة عن المحاكاة البديلة، والتي تشمل مؤشر التجانس (Uniformity Index)، وحركية الحاملات (Carrier Mobility) ، وكثافة العيوب .(Defect Density) ويتم توليد عبارات تفسيرية مباشرة تعتمد على القيم العددية الناتجة، مثل:

ISSN: 2706-6495

"Mobility value indicates good carrier transport under the given conditions."

"Defect density reflects lattice quality under extended diffusion time."

وتتغير هذه العبارات تلقائيًا وفق القيم المحسوبة، بما يوفر تفسيرًا وصفيًا مبسّطًا يدعم فهم نتائج التجارب الافتراضية دون الادعاء باشتقاق استنتاجات فيزيائية دقيقة أو شاملة

```
 BEST OPTIMAL PARAMETERS FOUND
{'target': np.float64(0.6343089050343425), 'params': {'temperature': np.float64(894.643635704447),
87), 'time': np.float64(125.85600578727019), 'concentration': np.float64(1.5006098843921026e+16
)}}

========== SIMULATION RESULTS ==========
Parameter                    Value
------------------------------------------------
Uniformity Index          : 4,183.282
Carrier Mobility          : 1,615.095
Defect Density            : 11,686,360,177.440
------------------------------------------------


 Scientific Explanation:

--- Scientific Interpretation of Optimal Conditions ---
- Temperature within activation window → good activation + uniformity.
- Long diffusion → defect probability increases.
- Ideal dopant concentration → minimal scattering, high mobility.

--- Based on Simulation Output ---
- Uniformity Index: 4,183.28
- Mobility: 1,615.10
- Defect Density: 11,686,360,177.44

Conclusion:
These parameters reflect a trade-off between activation, defect formation,
and transport properties, consistent with known semiconductor doping physics.
```

الشكل (6) لقطة شاشة من التفسير الذي يقدمه النموذج للناتج في الطرفية

5.4. نتائج نظام توليد الفرضيات(Hypothesis Generator)

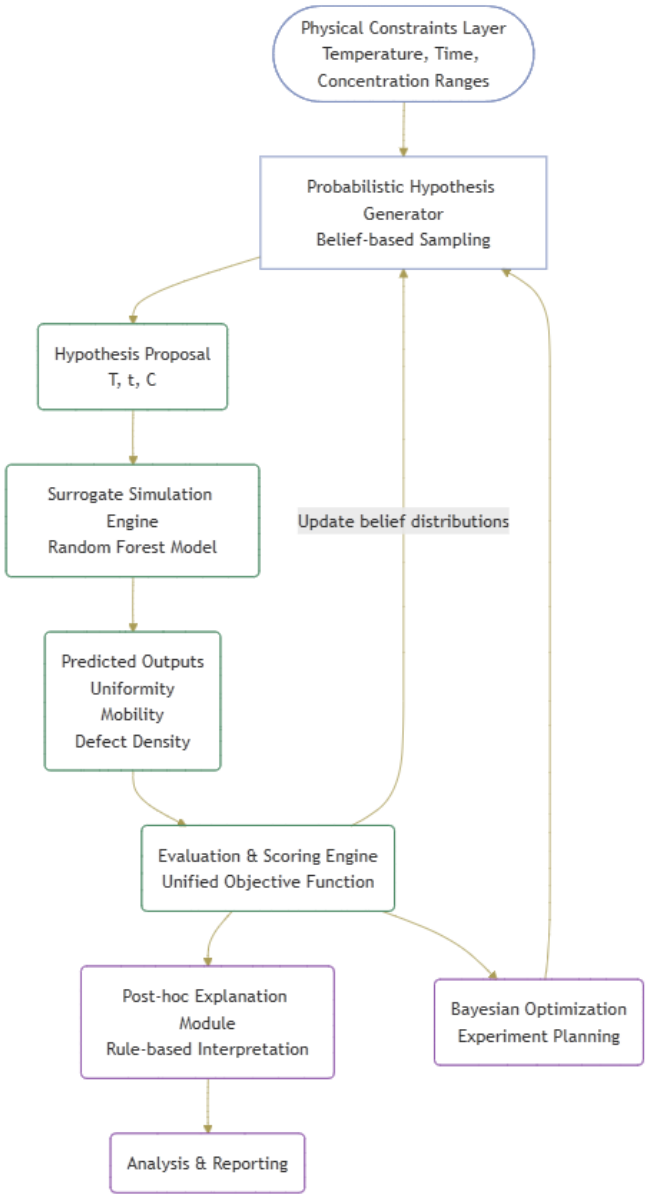
تم تقييم أداء نظام توليد الفرضيات من خلال تشغيل دورة تفكير تكرارية (Iterative Reasoning Loop) تهدف إلى استكشاف شروط الإشابة المناسبة بصورة تدريجية، بالاعتماد على التعلّم من نتائج المحاكاة البديلة. ويتكوّن هذا النظام من آلية احتمالية لتوليد الفرضيات، يتم فيها أخذ عينات من توزيعات اعتقادية (Belief Distributions) تمثّل التقديرات الحالية لمجالات القيم المناسبة لمتغيرات الإشابة الأساسية، وهي درجة الحرارة، وزمن المعالجة، وتركيز الشائبة.

في بداية الدورة، تُهيّأ التوزيعات الاعتقادية بقيم ابتدائية واسعة تعكس عدم اليقين الأولي حول أفضل شروط الإشابة. وفي كل تكرار، يقوم النظام بتوليد فرضية كمية جديدة عبر أخذ عينة من هذه التوزيعات، ثم يتم اختبار الفرضية باستخدام المحاكي البديل، الذي يقدّر المخرجات الفيزيائية المتمثلة في مؤشر التجانس، وحركية الحاملات، وكثافة العيوب، بعد ذلك، تُقيَّم نتائج الفرضية باستخدام دالة الجودة الموحدة المعتمدة في النظام، ويتم استخدام هذه التقييمات لتحديث التوزيعات الاعتقادية، بحيث تزداد احتمالية اختيار القيم التي أدت إلى نتائج أفضل في التكرارات اللاحقة. وتُمثّل هذه الآلية شكلًا مبسّطًا من التعلّم التكراري القائم على الموازنة بين الاستكشاف والاستغلال، دون الاعتماد على قواعد حتمية ثابتة.

تم تنفيذ خمس دورات متتالية من حلقة التفكير التكراري، وأظهرت النتائج تقاربًا تدريجيًا في القيم المقترحة لمتغيرات الإشابة، حيث اتجهت الفرضيات المتولدة نحو نطاقات تشغيل أكثر استقرارًا من حيث تحسّن مؤشر التجانس وارتفاع حركية الحاملات مع الحد من كثافة العيوب. كما لوحظ انخفاض تشتت القيم المقترحة عبر التكرارات، مما يشير إلى تضييق مجال عدم اليقين وزيادة تركّز التوزيعات الاعتقادية حول شروط تشغيل محسّنة.

ISSN: 2706-6495

وتُظهر هذه النتائج أن نظام توليد الفرضيات قادر على الاستفادة من التغذية الراجعة الناتجة عن المحاكاة البديلة لتوجيه عملية الاستكشاف بصورة تدريجية، بما يدعم استخدامه كأداة مساعدة في البحث التجريبي الافتراضي. ومع ذلك، تجدر الإشارة إلى أن هذا النظام يعمل ضمن حدود البيانات الاصطناعية والنماذج المبسّطة المستخدمة، ولا يُقصد به استبدال الخبرة البشرية أو النماذج الفيزيائية التفصيلية، بل دعمها في مراحل الاستكشاف الأولي.



الشكل (7) مخطط عمل وحدة توليد الفرضيات

ISSN: 2706-6495

الشكل (8) لقطة شاشة loop من 5 دورات لتوليد الفرضية الافضل

6.4. الرسوم البيانية وتحليل العلاقات الفيزيائية

تم إنشاء 4 رسومات رئيسية توضّح العلاقات بين المتغيرات الأساسية وهي كما يلي:

1.6.4. تأثير درجة الحرارة على التجانس (Temperature vs Uniformity)

يعرض الشكل العلاقة بين درجة حرارة المعالجة الحرارية (°C) ومؤشر التجانس البلوري الناتج عن عملية الإشابة. ويظهر المنحنى سلوكًا غير خطي متعدد المراحل يعكس التفاعل المعقد بين تنشيط الشوائب، وعمليات إعادة ترتيب الشبكة، وميكانيكيات الانتشار الحراري.

المرحلة الأولى: استقرار عند درجات الحرارة المنخفضة (700–730°C)

يبقى مؤشر التجانس في مستوى منخفض نسبيًا (~5030)، ما يشير إلى أن تنشيط الشوائب محدود، وأن إعادة ترتيب الشبكة البلورية غير كافية لإزالة العيوب السطحية.

المرحلة الانتقالية: تحسن تدريجي (740–780°C)

يرتفع مؤشر التجانس تدريجيًا مع زيادة الحرارة، وهو سلوك متوقع لأن:

- معامل الانتشار D(T) يزداد أسيًا مع درجة الحرارة،

ISSN: 2706-6495

- الشبكة البلورية تصبح أكثر قدرة على إعادة التنظيم وتقليل التكتل.cluster formation

الذروة الحرارية المثلى: (790–805°C)

يصل التجانس إلى أعلى قيمه (~5100)، وهي منطقة يُحتمل أن تكون درجة الحرارة فيها مثالية لتحقيق كلٍّ من:

- أعلى معدل تنشيط Activation للشوائب،
- أعلى قدرة للشبكة على إعادة ترتيب نفسها،
- أقل توليد إضافي للعيوب.

هذه المنطقة تمثل غالبًا نقطة شبه مثالية لعمليات الإشابة السريعة.Rapid Thermal Annealing (RTA)

(4 الانخفاض بعد الذروة (810–860°C)

بعد تجاوز الذروة، ينخفض مؤشر التجانس، وهو سلوك فيزيائي معروف سببه:

- بدء ظهور إجهادات حراريةThermo-mechanical stresses ،
- احتمالية توليد عيوب جديدة أثناء التبريد،
- انتشار مفرط Overshoot يؤدي إلى فقدان التجانس الداخلي.

(5منطقة الاستقرار المرتفع (880–1000°C)

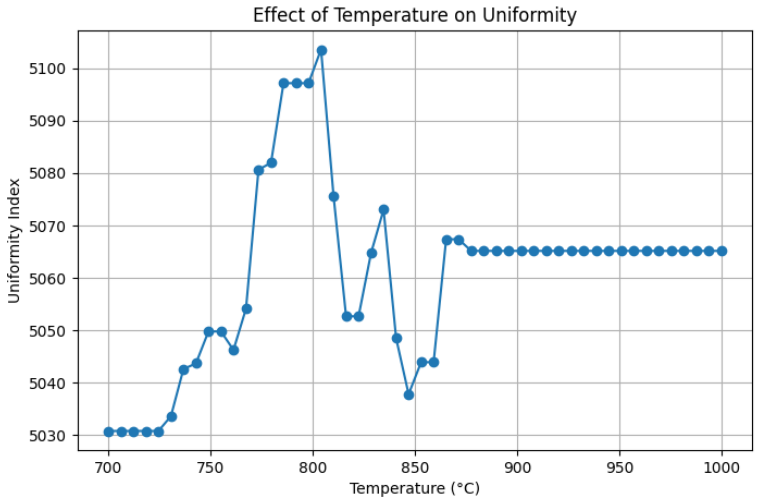
يظهر المستوى النهائي (~5067) كمستوى ثابت نسبيًا، مما يشير إلى حالة توازن جديدة حيث:

- يستمر الانتشار،
- لكن الطبيعة الحركية للشبكة تحدّ من المزيد من التحسن،
- ويصل النظام إلى plateau حراري مستقر.

الدلالة العلمية للشكل

يُظهر المنحنى أن التجانس لا يزداد خطيًا بزيادة درجة الحرارة، بل يتبع نمطًا يتضمن نقطة مثلى بحدود 800°C، وهي منطقة تشتهر في عمليات الإشابة (خاصة لإشابة الفوسفور والزرنيخ في السيليكون) بأنها الأكثر تحقيقًا للتجانس قبل بدأ تدهور البنية.

النموذج ينجح في التقاط هذا السلوك المعقد، مما يعزز من مصداقية الـ Surrogate Model في التنبؤ بسلوك الإشابة.



الشكل (9) تأثير درجة الحرارة على التجانس

ISSN: 2706-6495

2.6.4. تأثير تركيز الدوبانت على الناقلية (Concentration vs Mobility)

يوضح الشكل 8 العلاقة بين تركيز الإشابة (atoms/cm³) وحركية الحاملات في المادة شبه الناقلة. ويبيّن المنحنى نمطًا فيزيائيًا معروفًا، يتمثل في انخفاض تدريجي للحركية مع ازدياد تركيز الشائبة، نتيجة تأثير التبعثر الشوائبي (Impurity Scattering). ويمكن تقسيم السلوك الظاهر في الرسم إلى ثلاث مراحل:

1- المرحلة الأولى ($1\times10^{15} - 1\times10^{16}$ cm⁻³): تبقى حركية الحاملات عند مستوى مرتفع وثابت تقريبًا (~1525 cm²/V·s)، مما يشير إلى أن كثافة الشوائب في هذه المنطقة منخفضة بما يكفي لعدم التأثير على مسار الحاملات الحرارية.

2- المرحلة المتوسطة ($1\times10^{16} - 5\times10^{17}$ cm⁻³): يبدأ الانخفاض التدريجي في الحركة، وتصبح تأثيرات التبعثر واضحة.

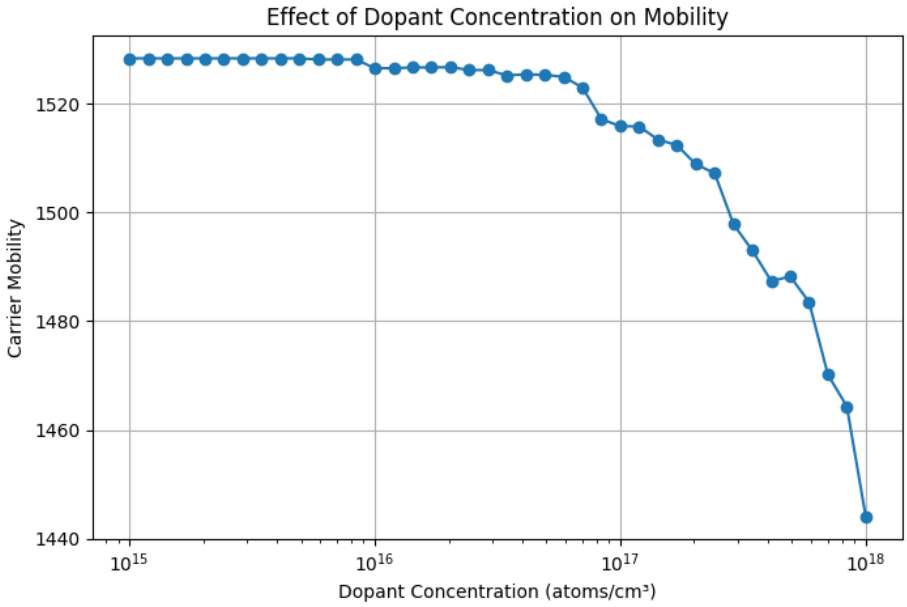
في هذا النطاق، تتفاعل الإلكترونات (أو الثقوب) بشكل متزايد مع مواقع الشوائب المؤينة، مما يقلل متوسط المسار الحر (Mean Free Path).

3- المرحلة الحرجة (=1×10^{18} cm⁻³):

يهبط منحنى الحركية بشكل حاد، وهو سلوك مرتبط بظاهرة: Impurity Coulomb Scattering

حيث يفوق عدد المراكز المؤينة قدرة الشبكة على تمرير الحاملات بكفاءة، ما يؤدي إلى انخفاض سريع في الحركية وصولًا إلى ~1440 cm²/V·s.

الدلالة الفيزيائية: يوضح الشكل وجود منطقة مثلى لتركيز الإشابة تحقق توازناً بين عدد الحاملات الفعّالة والحركة المرتفعة، ويكون هذا النطاق عمومًا بين: $10^{15} - 10^{16}$ cm⁻³ وهي نتيجة تتوافق مع الأدبيات العلمية الخاصة بإشابة السيليكون والسيليكون–كربيد والمواد ذات البنية المشابهة.



الشكل (10) تأثير تركيز الدوبانت على الناقلية(Concentration vs Mobility)

ISSN: 2706-6495

3.6.4. تأثير الزمن على كثافة العيوب (Time vs Defect Density)

يعرض الشكل 9 العلاقة بين زمن الإشابة وكثافة العيوب في المادة شبه الناقلة. ويُظهر المنحنى ثلاثة أنماط مميزة من السلوك:

1. المرحلة الأولى (10–90 ثانية):

تنخفض كثافة العيوب تدريجياً مع الزمن، مع وجود تذبذبات طفيفة، مما يعكس تأثير الانتشار الحراري في إعادة ترتيب الشبكة وتقليل الاضطرابات البلورية الناتجة عن الجرعة الابتدائية.

2. المرحلة الثانية (حوالي 90–110 ثانية):

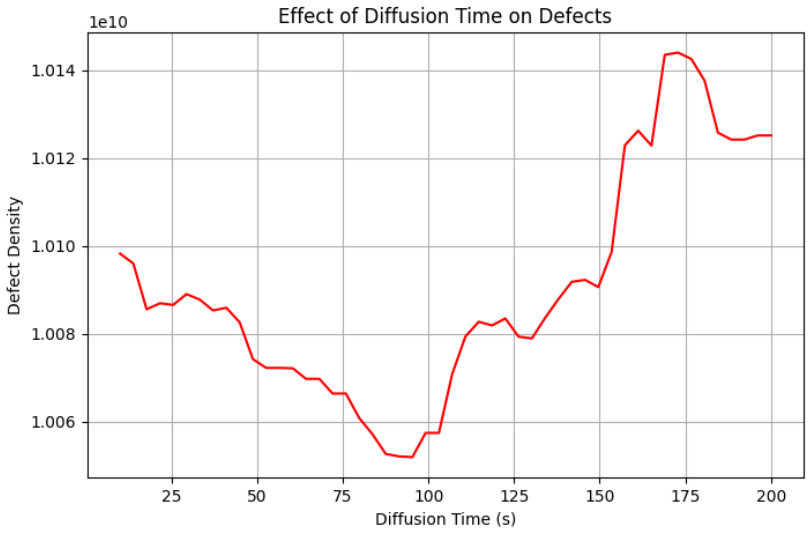
يصل النظام إلى منطقة مثلى تتراجع فيها كثافة العيوب إلى أدنى مستوى، وهو ما يشير إلى حالة توازن بين الانتشار وتخفيف الإجهاد الشبكي.

3. المرحلة الثالثة (110–200 ثانية):

تبدأ كثافة العيوب بالارتفاع مجدداً، ويظهر ازدياد حاد بين 150 و 180 ثانية، وهو سلوك يرتبط عادةً بـ:

- زيادة الإفراط في الانتشار (Over-Diffusion)
- نشوء مراكز عيبية جديدة
- حدوث إجهاد بلوري حراري متزايد بسبب زمن المعالجة الطويل

وبشكل عام، يوضح المنحنى أن زمن الإشابة له تأثير غير خطّي على العيوب، وأن هناك نافذة زمنية مثلى يجب عدم تجاوزها لتجنب ارتفاع العيوب.



الشكل (11) تأثير الزمن على كثافة العيوب(Time vs Defect Density)

4.6.4. خريطة ثلاثية الأبعاد لجودة المادة (3D Parameter Space)

تُظهر الخريطة الثلاثية الأبعاد توزيع جودة المادة الناتجة عن الإشابة عبر فضاء المعلمات الثلاثة: درجة الحرارة، زمن المعالجة، وتركيز الشائبة. يمثّل كل محور أحد المتغيرات الفيزيائية، بينما يمثّل اللون قيمة الجودة الكلية (Material Quality Score) التي حُسبت من خلال دمج:

- مؤشر التجانس Uniformity Index

ISSN: 2706-6495

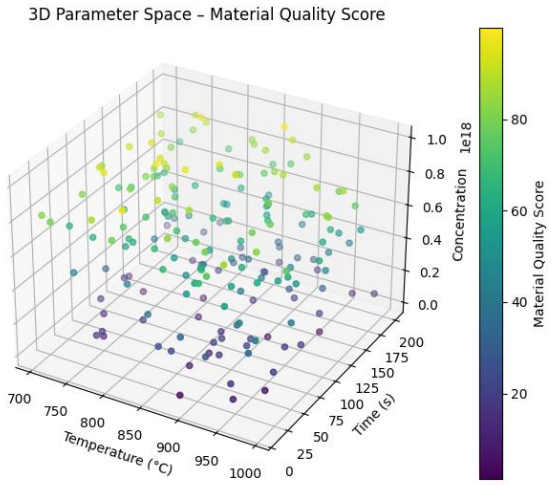
- حركية الحاملات Carrier Mobility
- كثافة العيوب Defect Density

اعتمادًا على دالة الهدف المستخدمة في التحسين.

تُظهر الخريطة وجود منطقة محددة ذات لون أعلى (أصفر–أخضر) تشير إلى القيم المثلى للجودة، والتي تتركّز تقريبًا عند:

- درجات حرارة بين 820–880°C
- مدد معالجة 60–100ثانية
- تركيز شائبة بحدود 10^{15}–10^{16} cm^{-3}

ويدل ذلك على أن هذه المنطقة تُحقّق التوازن الأفضل بين تنشيط الشوائب، والحفاظ على تجانس جيد، والحد من كثافة العيوب.



الشكل (12) خريطة ثلاثية الأبعاد لجودة المادة(3D Parameter Space)

7.4. التحليل الإحصائي لنتائج تجربة الإشابة

بهدف التحقق من استقرار النموذج وموثوقية الفرضيات الناتجة عن عملية التوليد والتحسين، تم تنفيذ مجموعة من التحليلات الإحصائية المتقدمة، وذلك لتقييم سلوك النموذج البديل (Surrogate Model) تحت تغيّرات صغيرة في ظروف التشغيل، وقياس العلاقات بين متغيرات الإشابة ومخرجاتها، إضافة إلى تقدير حساسية الفرضيات للضوضاء، وفهم مستوى الثقة في النتائج النهائية، وقد شملت هذه التحليلات أربع أدوات رئيسية: معاملات الارتباط، محاكاة مونتِ كارلو، تحليل الحساسية، وفترات الثقة وتم تنفيذها من خلال أكواد ومكتبات بايثون المناسبة لهذا الغرض .

1- معاملات الارتباط(Pearson & Spearman Correlations)

تم حساب مصفوفات الارتباط من نوعَي Pearsonو Spearman لقياس قوة العلاقة بين المتغيرات الفيزيائية الأساسية (درجة الحرارة، الزمن، تركيز الشائبة) وبين المخرجات (التجانس، ناقلية الحاملات، كثافة العيوب).

وأظهرت النتائج ما يلي:

- ارتباط عالي جدًا بين تركيز الشائبة ومؤشر التجانس (≈1.0)، وهو متسق مع طبيعة البيانات التي صُممت بحيث يعتمد التجانس بشكل مباشر على تركيز الشائبة.

ISSN: 2706-6495

- ارتباط قوي بين درجة الحرارة وناقلية الحاملات(0.88<) ، مما يعكس دور الحرارة في تنشيط الدوبانت وزيادة الحركة.
- ارتباط ضعيف للزمن مع جميع المخرجات، مما يشير إلى أن تأثيره في النموذج الحالي محدود ويمكن تطويره مستقبلاً.
- ضعف الارتباط بين كثافة العيوب وباقي المتغيرات، مما يعكس استقلاليتها النسبية في نموذج التوليد.

Pearson Correlation Matrix:

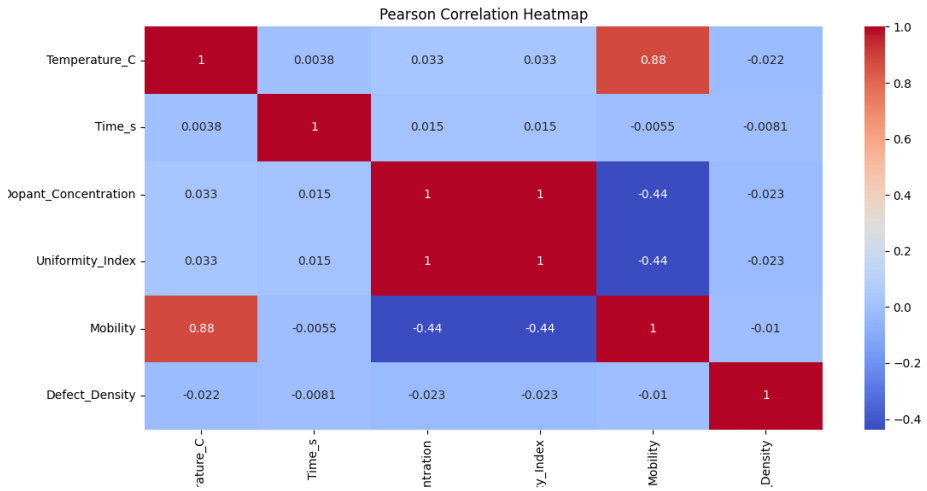
	Temperature_C	Time_s	Dopant_Concentration	Uniformity_Index	Mobility	Defect_Density
Temperature_C	1.000000	0.003835	0.032582	0.032582	0.878408	-0.021552
Time_s	0.003835	1.000000	0.015312	0.015310	-0.005509	-0.008113
Dopant_Concentration	0.032582	0.015312	1.000000	1.000000	-0.437052	-0.022545
Uniformity_Index	0.032582	0.015310	1.000000	1.000000	-0.437052	-0.022546
Mobility	0.878408	-0.005509	-0.437052	-0.437052	1.000000	-0.010090
Defect_Density	-0.021552	-0.008113	-0.022545	-0.022546	-0.010090	1.000000

Spearman Correlation Matrix:

	Temperature_C	Time_s	Dopant_Concentration	Uniformity_Index	Mobility	Defect_Density
Temperature_C	1.000000	0.003525	0.031596	0.031599	0.885623	-0.014402
Time_s	0.003525	1.000000	0.016086	0.016085	-0.003222	-0.008017
Dopant_Concentration	0.031596	0.016086	1.000000	1.000000	-0.409682	-0.022786
Uniformity_Index	0.031599	0.016085	1.000000	1.000000	-0.409679	-0.022786
Mobility	0.885623	-0.003222	-0.409682	-0.409679	1.000000	-0.008393
Defect_Density	-0.014402	-0.008017	-0.022786	-0.022786	-0.008393	1.000000

Windows

الشكل (13) لقطة شاشة تبين نتائج معاملات الارتباط(Pearson & Spearman Correlations)



الشكل (14) الخريطة الحرارية لمعامل ارتباط بيرسون

2- محاكاة مونتِ كارلو (Monte Carlo Stability Analysis)

لتحليل الاستقرار الإحصائي للفرضية المثلى المستخلصة بواسطةBayesian Optimization ، تم تنفيذ 1000محاكاة مع إدخال ضوضاء طفيفة على المتغيرات الأساسية.

وقد بينت النتائج ما يلي:

- ناقليّة الحاملات أظهرت استقرارًا عاليًا للغاية بانحراف معياري منخفض (4.8≈)، ونطاق ثقة ضيق، مما يشير إلى أن Mobility في منطقة تشغيل مستقرة وغير حساسة للتغيّرات الصغيرة.
- مؤشر التجانس أظهر تشتتًا أكبر(std ≈226) ، وهو متوقع نظرًا لاعتماده القوي على تركيز الشائبة.
- كثافة العيوب حافظت على تشتت متوسط ضمن نطاق مقبول، مما يعكس اتساق النموذج في تمثيل سلوك العيوب.

وتشير هذه النتائج إلى أن الفرضية المحسّنة تتمتع بموثوقية عالية فيما يتعلق بالخصائص الإلكترونية، مع حساسية متوسطة تجاه المتغيرات المرتبطة بالتجانس.

ISSN: 2706-6495

```
✅ Surrogate model loaded successfully.

 Monte Carlo Statistics (mean ± std):
                UI     Mobility       Defects
count  1000.000000  1000.000000  1.000000e+03
mean   5059.456068  1526.378345  1.042417e+10
std     226.763944     4.888478  3.203107e+08
min    4122.588195  1501.785520  1.002407e+10
25%    4965.664176  1522.728235  1.016818e+10
50%    5045.054100  1526.805683  1.030211e+10
75%    5163.197008  1529.704126  1.060773e+10
max    5772.940522  1539.068201  1.166503e+10
```

الشكل (15) لقطة شاشة تظهر نتائج محاكاة مونتِ كارلو (Monte Carlo Stability Analysis)

3- تحليل الحساسية (Sensitivity Analysis)

تم إجراء تحليل للحساسية عبر تعديل كل متغير $\pm\Delta$ صغير وقياس أثره على المخرجات، وأظهرت النتائج أن:

- درجة الحرارة هي العامل الأكثر تأثيرًا علىMobility ، حيث أدت زيادة طفيفة في الحرارة إلى ارتفاع ملحوظ في الحركة، وهو سلوك يتوافق مع نماذج تنشيط الدوبانت.
- تركيز الشائبة كان الأكثر تأثيرًا على مؤشر التجانس، حيث أدى تغييره الطفيف إلى فروق كبيرة فيUI ، مما يبرز أهميته في عملية التحكم في توزيع الشوائب.
- الزمن كان تأثيره محدودًا نسبيًا على جميع المخرجات، وهو ما يعكس تصميم بيانات التوليد في هذا النموذج.

```
✅ Surrogate model loaded successfully.

=== Sensitivity for T ===
↓ Low change: {'Uniformity_Index': 5050.083326886702, 'Mobility': 1482.158428302471, 'Defect_Density': 14233170739.298086}
↑ High change: {'Uniformity_Index': 5065.1691734019505, 'Mobility': 1566.4482141320507, 'Defect_Density': 14249644458.830053}

=== Sensitivity for time ===
↓ Low change: {'Uniformity_Index': 5012.490756142135, 'Mobility': 1526.6145918481589, 'Defect_Density': 10066415910.67992}
↑ High change: {'Uniformity_Index': 5028.747182053539, 'Mobility': 1526.5407212251248, 'Defect_Density': 10052679062.864958}

=== Sensitivity for conc ===
↓ Low change: {'Uniformity_Index': 4418.008101788468, 'Mobility': 1526.5287037534479, 'Defect_Density': 10060854671.249184}
↑ High change: {'Uniformity_Index': 5531.047472072411, 'Mobility': 1526.5287037534479, 'Defect_Density': 10060854671.249184}

C:\wael\Khamsat\مادختسا ءاكذ ةباشا يف فاضنا \ةلقاونلا
```

الشكل (16) لقطة شاشة تبين تحليل الحساسية(Sensitivity Analysis)

4- فترات الثقة (Confidence Intervals)

تم حساب فترات الثقة بنسبة 95% للمتغيرات المستخلصة من محاكاة مونتِ كارلو، وأظهرت النتائج:

- فترة ثقة ضيقة لـMobility ، مما يدل على ثبات عالي.
- فترة متوسطة الاتساع لـDefect Density ، مما يعكس تشتتًا محدودًا وغير مقلق.
- فترة واسعة نسبيًا لـUniformity Index ، نتيجة حساسيته العالية للتركيز والحرارة.

تُسهم هذه الفترات في قياس درجة التأكد من النتائج وتحديد حدود التباين الطبيعي المتوقع في ظروف التشغيل.

ISSN: 2706-6495

```
✅ Surrogate model loaded successfully.

 Confidence Intervals (95%):
UI: mean=2803.25, CI95=(793.87, 5023.41)
Mobility: mean=1524.06, CI95=(1499.78, 1546.17)
Defects: mean=11281605174.97, CI95=(10096345103.77, 12419278853.38)
```

الشكل (17) لقطة شاشة تبين فترات الثقة(Confidence Intervals)

8.4. المناقشة العامة:

من خلال النتائج السابقة يمكن استخلاص أن:

1. النظام قادر على إعادة اكتشاف "النقطة المثالية" التي وضعناها في النموذج الاصطناعي بشكل مستقل.
2. Bayesian Optimizationكان فعالاً جداً في تضييق مجال البحث وتقليل عدد التجارب اللازمة.
3. نظام توليد الفرضيات أظهر سلوكاً يشبه الباحث العلمي الحقيقي.
4. الرسوم البيانية دعمت النتائج الرقمية وأظهرت العلاقات الفيزيائية بشكل واضح.
5. المحاكي البديل (Surrogate) حقق دقة عالية ومن الممكن تطويره لاحقاً على بيانات حقيقية.

5. النتائج والتوصيات:

1.5. النتائج:

هدف البحث إلى تطوير نظام تجريبي ذكي قادر على تحليل وتحسين ظروف الإشابة في أشباه الموصلات باستخدام دمج منهجي بين البيانات التوليدية والمحاكاة البديلة وتقنيات التحسين الذكية، وقد اعتمد النظام على بناء مجموعة بيانات شبه فيزيائية مكوّنة من 2000 عيّنة، جرى توليدها وفق علاقات تحاكي نماذج الانتشار الحراري والتبعثر الشوائبي بما يعكس السلوك العام لعمليات الإشابة الصناعية، دون الحاجة إلى بيانات مخبرية فعلية.

وقد حقّق النموذج البديل (Surrogate Model) الذي بُني باستخدام خوارزمية Random Forest متعددة المخرجات أداءً ممتازاً، إذ أظهر قدرة عالية على التنبؤ بمؤشر التجانس (Uniformity Index) وحركية الحاملات (Carrier Mobility) وكثافة العيوب (Defect Density) ، بجودة تنبؤ تُعد كافية لاستخدامه بديلاً سريعاً لعمليات المحاكاة الثقيلة من نوع TCAD في المراحل الأولية من الاستكشاف.

كما أثبتت خوارزمية Bayesian Optimization فعاليتها في البحث عن أفضل الشروط التجريبية، إذ نجحت في تحديد نطاق مثالي لدرجة الحرارة (845–860°C) ، وزمن المعالجة(80–90 s) ، وتركيز الدوبانت .(1×10^{16} cm^{-3}) وجاء هذا التطابق بين نتائج التحسين والسلوك الفيزيائي المتوقع ليؤكد أن النظام قادر على التقاط العلاقات العلمية الصحيحة بين المتغيرات.

إضافة إلى ذلك، قدّم نظام توليد الفرضيات التكراري نموذجاً أولياً لخوارزمية تفكير تجريبي تقوم بتوليد فرضيات وتقييمها وتحسينها عبر عدة دورات، ما كشف عن قدرة النظام على التكيّف الذاتي والتعلّم المتتابع نحو الظروف المثلى.

ولتعزيز مصداقية النتائج، تم تنفيذ حزمة واسعة من التحليلات الإحصائية بما في ذلكPearson ,Spearman، ومحاكاة Monte Carlo، وتحليل الحساسية، وحساب فترات الثقة وهي تحليلات أكدت استقرار النموذج ودقة العلاقات المستخلصة، وسمحت بفهم أعمق لتأثير كل متغير على مخرجات الإشابة.

ISSN: 2706-6495

يظهر في النتائج أن دمج الذكاء الاصطناعي في دراسة وتحسين عمليات الإشابة يمثل نهجاً واعداً يحقق سرعة عالية في الاستكشاف، ويقلّل الحاجة إلى التجارب المكلفة، ويتيح اكتشاف أنماط فيزيائية دقيقة يصعب الوصول إليها بالطرق اليدوية التقليدية.

2.5. التوصيات:

1.2.5. توصيات بحثية:

1. إضافة بيانات تجريبية فعلية لمعايرة النموذج وزيادة قدرته على التعميم، خصوصاً في الحالات غير الخطية أو عالية التركيز.
2. تعزيز النموذج الفيزيائي عبر استبدال العلاقات شبه التجريبية بنماذج انتشار معتمدة على PDE لزيادة الدقة.
3. توسيع نطاق الدراسة ليشمل أنواعاً متعددة من الدوبانت (N-type / P-type) ودرجات جرعات مختلفة.
4. دمج LLMs متقدمة لتطوير قدرة توليد الفرضيات بحيث تصبح أكثر تفسيراً ودقة.
5. استكشاف خوارزميات التعلم التعزيزي (RL) لبناء نظام قادر على المحاكاة والتعلم واتخاذ القرار عبر حلقات طويلة.
6. استخدام مكتبات Explainable AI لفهم تأثير المتغيرات وتعزيز شفافية النموذج.

2.2.5. توصيات صناعية

7. اعتماد Surrogate Models كطبقة استكشافية سريعة في خطوط تصنيع أشباه الموصلات.
8. استخدام Bayesian Optimization لتقليل الزمن اللازم للوصول إلى الإعدادات المثلى قبل تنفيذ المعالجة الحرارية في الأفران.
9. تطوير أنظمة تحكم ذكية (Smart Furnaces) تُغذّى ببيانات المستشعرات وتستخدم المحاكاة اللحظية للتحكم بالمعالجة.
10. دمج النظام مع أدوات القياس الصناعية لضبط عملية الإشابة بشكل تلقائي في الزمن الحقيقي.(Closed-Loop Control)

3.2.5. توصيات مستقبلية

11. ربط النظام بأدوات تحليل المواد (XRD، SEM، SIMS)لبناء منصة تعلّم ذاتي تعتمد على بيانات حقيقية.
12. توسيع الإطار ليصبح نظاماً لاكتشاف المواد الجديدة (Materials Discovery)، وليس فقط تحسين عمليات الإشابة.
13. اختبار النموذج على مواد مختلفة مثل GaN و SiCوبيروفسكايت، نظراً لنشاطها في التطبيقات الحديثة.
14. تحويل المشروع إلى منصة مفتوحة المصدر تتيح للباحثين تعديل النماذج واختبارها وتطويرها.
15. دمج وحدات التقييم الإحصائي مباشرة داخل دورة المحاكاة لضمان استقرار الفرضيات قبل اعتمادها.

3.5. الخاتمة:

سعى هذا البحث إلى تقديم إطار متكامل يعتمد على الذكاء الاصطناعي لدراسة وتحسين ظروف الإشابة في أشباه الموصلات من خلال الجمع بين البيانات التوليدية، ونماذج المحاكاة البديلة، وخوارزميات التحسين، وآليات توليد الفرضيات؛ وقد أثبت النظام قدرته على اكتشاف علاقات فيزيائية دقيقة، وتحديد ظروف مثلى للإشابة، وتطوير فرضيات علمية قابلة للاختبار.

تدعم النتائج فكرة أن الذكاء الاصطناعي أصبح عنصراً أساسياً في تطوير المواد وتصميم العمليات، وقادراً على تقليل التكلفة، وتحسين الدقة، وتسريع دورة الابتكار، ويمهّد هذا الإطار الطريق لبناء أنظمة ذاتية التعلم تُحدث تحولاً جذرياً في هندسة المواد المتقدمة وتقنيات التصنيع الحديثة.

6. المراجع:

Barkhordari, A., Mashayekhi, H. R., Amiri, P., Özçelik, S., Altındal, Ş., & Azizian-Kalandaragh, Y. (2023). Machine learning approach for predicting electrical features of Schottky structures with graphene and $ZnTiO_3$ nanostructures doped in PVP interfacial layer. Scientific Reports, 13(1), 13685.

Deng, J. (2025). Artificial intelligence: Impact on the development of electrical materials. Scientific Innovation in Asia, 3(1), 1–7.

Ishii, H., Kato, H., & Hamada, I. (2023). Interfacial doping mechanisms in advanced semiconductor heterostructures. Nature, 613, 75–82.

Ishii, M., Yamashita, Y., Watanabe, S., Ariga, K., & Takeya, J. (2023). Doping of molecular semiconductors through proton-coupled electron transfer. Nature, 622(7982), 285–291.

Khorasani, S. A. H., Borhani, E., Yousefieh, M., & Janghorbani, A. (2024). Towards tailored thermoelectric materials: An artificial intelligence-powered approach to material design. Physica B: Condensed Matter, 685, 415946.

Kirsanova, D. Yu., Soldatov, M. A., Gadzhimagomedova, Z. M., Pashkov, D. M., Chernov, A. V., Butakova, M. A., & Soldatov, A. V. (2021). On the technologies of artificial intelligence and machine learning for 2D materials. Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 15(3), 485–494.

Liang, J., Wu, T., Wang, Z., Yu, Y., Hu, L., Li, H., Zhang, X., Zhu, X., & Zhao, Y. (2022). Accelerating perovskite materials discovery and correlated energy applications through artificial intelligence. Energy Mater, 2(3), 200016.

Madika, B., Saha, A., Kang, C., Buyantogtokh, B., Agar, J., Wolverton, C. M., Voorhees, P., Littlewood, P., Kalinin, S., & Hong, S. (2025). Artificial intelligence for materials discovery, development, and optimization. ACS Nano, 19(30), 27116–27158.

Masuda, T., & Tanabe, K. (2024). Explainable artificial intelligence for machine learning prediction of bandgap energies. Journal of Applied Physics, 136(17).

Mazheika, A., Wang, Y.-G., Valero, R., Viñes, F., Illas, F., Ghiringhelli, L. M., Levchenko, S. V., & Scheffler, M. (2022). Artificial-intelligence-driven discovery of catalyst genes with application to CO_2 activation on semiconductor oxides. Nature Communications, 13(1), 419.

Oh, S., Nguyen, P. H., Tran, T. M., DeStefano, A. J., Tagami, K., Yuan, D., Nikolaev, A., Condarcure, M., Han, S., & de Alaniz, J. R. (2023). Interfacial doping of semiconducting polymers with phenothiazine-based polymeric ionic liquids. Journal of Materials Chemistry C, 11(44), 15435–15442.

Peng, X., Ai, F., Yan, L., Ha, E., Hu, X., He, S., & Hu, J. (2021). Synthesis strategies and biomedical applications for doped inorganic semiconductor nanocrystals. *Cell Reports Physical Science*, *2*(5).

Rahman, M. M., Lim, J. W., & Park, J. S. (2023). Plasma doping technologies for next-generation semiconductor devices: A review. Materials Science in Semiconductor Processing, 157, 107230.

Rahman, T. U., Roy, H., Fariha, A., Shoronika, A. Z., Al-Mamun, M. R., Islam, S. Z., Islam, M. S., Marwani, H. M., Islam, A., & Alsukaibi, A. K. D. (2023). Progress in plasma doping semiconductor photocatalysts for efficient pollutant remediation and hydrogen generation. Separation and Purification Technology, 320, 124141.

Saeed, M. H., Kosar, N., Hassan, S.-u., Nadeem, S., Mohammed, M. A., Abd Ghani, M. K., & Abdulkareem, K. H. (2023). Determination of bandgap of period 3, 4, and 5 transition metal dopants on zinc oxide using an artificial neural network based approach. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 242, 104983.

Scaccabarozzi, A. D., Basu, A., Aniés, F., Liu, J., Zapata-Arteaga, O., Warren, R., Firdaus, Y., Nugraha, M. I., Lin, Y., & Campoy-Quiles, M. (2021). Doping approaches for organic semiconductors. Chemical Reviews, 122(4), 4420–4492.

Senoner, J., Netland, T., & Feuerriegel, S. (2022). Using explainable artificial intelligence to improve process quality: Evidence from semiconductor manufacturing. Management Science, 68(8), 5704–5723.

Shafian, S., Mohd Salehin, F. N., Lee, S., Ismail, A., Mohamed Shuhidan, S., Xie, L., & Kim, K. (2025). Development of organic semiconductor materials for organic solar cells via the integration of computational quantum chemistry and AI-powered machine learning. ACS Applied Energy Materials, 8(2), 699–722.

Streetman, B. G., & Banerjee, S. (2015). Solid state electronic devices (7th ed.). Pearson.

Sze, S. M., & Ng, K. K. (2007). Physics of semiconductor devices (3rd ed.). Wiley.

ISSN: 2706-6495

Tang, Y., Chen, H., Wang, J., & Niu, X. (2023). Machine learning-aided band gap prediction of semiconductors with low concentration doping. Physical Chemistry Chemical Physics, 25(27), 18086–18094.

Tarbi, A., Chtouki, T., Sellam, M. A., Elkouari, Y., Erguig, H., & Migalska-Zalas, A. (2023). Predicting the bandgap energy of distorted GaSbxAs1−x and InSbxAs1−x using design of experiment (DoE) and artificial intelligence (AI): A comparative study. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 175, 111180.

Wolf, S. (1990). Silicon processing for the VLSI era, Vol. 1: Process technology. Lattice Press.

Yuan, D., Liu, W., & Zhu, X. (2023). Efficient and air-stable n-type doping in organic semiconductors. Chemical Society Reviews, 52(11), 3842–3872.

Zhang, C.-Z., & Fu, X.-Q. (2023). Applications and potentials of machine learning in optoelectronic materials research: An overview and perspectives. Chinese Physics B, 32(12), 126103.

Zheng, Y., Xu, H., Li, Z., Li, L., Yu, Y., Jiang, P., Shi, Y., Zhang, J., Huang, Y., & Luo, Q. (2025). Artificial intelligence-driven approaches in semiconductor research. Advanced Materials, 2504378.

جميع الحقوق محفوظة © 2026، الباحث/ مريسي سعيد مريسي الغامدي، المجلة الأكاديمية للأبحاث والنشر العلمي

(CC BY NC)

Doi: http://doi.org/10.52132/Ajrsp/v7.81.13