

## 1.2. Моделі для опису рухливості носіїв заряду у кремнії

Задача оцінки рухливості електронів  $\mu_n$  та дірок  $\mu_p$  у напівпровіднику за певних умов є достатньо поширеною у різноманітних фізичних дослідженнях. Один з варіантів її вирішення полягає у використанні загального підходу, згідно з яким

$$\mu = \frac{e\tau_p}{m_\sigma}, \quad (1.1)$$

де  $e$  — елементарний заряд,  $\tau_p$  — середній час вільного пробігу носія заряду,  $m_\sigma$  — ефективна маса електропровідності.

Час вільного пробігу обмежується розсіянням носіїв заряду, яке може бути викликане декількома причинами, пов'язаними з порушеннями періодичності потенціалу. Зокрема видаляють розсіяння на коливаннях гратки (акустичних та оптических фононах), заряджених та нейтральних домішках, дислокаціях, границях зерен та інших неоднорідностях структури, поверхнях та межах розділу, інших носіях. Кожен із цих механізмів має свою залежність від температури, рівня легування та розміру напівпровідникової структури і може бути визначальним для величини рухливості за певних умов. Проте найчастіше необхідно враховувати декілька можливих шляхів розсіяння носіїв заряду. В такому випадку для оцінки рухливості використовується правило Маттісена:

$$\mu^{-1} = \sum_i \mu_i^{-1}, \quad (1.2)$$

де сумування відбувається за механізмами розсіяння,  $\mu_i$  — рухливість носіїв за наявності лише  $i$ -го механізму розсіяння. Для оцінки  $\mu_i$  можна використовувати вирази, аналогічні формулі (1.1), розрахувавши відповідний час вільного пробігу.

Для переважної більшості механізмів розсіяння вирази для оцінки рухливості відомі. Так, при розсіянні на іонізованих домішках нерідко використовується вираз Brooks & Herring [1]:

$$\mu_I = \frac{3,68 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}}{N_I Z^2} \left( \frac{\varepsilon}{16} \right)^2 \left( \frac{T}{100 \text{ K}} \right)^{1,5} \frac{(m_0/m)^{0,5}}{\left[ \lg(1 + \beta_{BH}^2) - \frac{0,434 \beta_{BH}^2}{1 + \beta_{BH}^2} \right]}, \quad (1.3)$$

де  $N_I$  — концентрація домішок із зарядом  $Ze$ ,  $\varepsilon$  — діелектрична проникність напівпровідника,  $T$  — температура,  $m$  — ефективна маса носія,  $m_0$  — маса вільного електрону, а величина  $\beta_{BH}$  має вигляд

$$\beta_{BH} = \left( \frac{\varepsilon}{16} \right)^{0,5} \frac{T}{100 \text{ K}} \left( \frac{m}{m_0} \right)^{0,5} \left( \frac{2,08 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}}{n_c} \right)^{0,5}, \quad (1.4)$$

$n_c$  — концентрація носіїв заряду. Іншим наближенням для такого випадку є формула Conwell & Weisskopf [1]:

$$\begin{aligned} \mu_I &= \frac{3,68 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}}{N_I Z^2} \left( \frac{\varepsilon}{16} \right)^2 \left( \frac{T}{100 \text{ K}} \right)^{1,5} \frac{(m_0/m)^{0,5}}{\lg(1 + \beta_{CW}^2)}, \\ \beta_{CW} &= \frac{1}{Z} \frac{\varepsilon}{16} \frac{T}{100 \text{ K}} \left( \frac{2,35 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}}{N_I} \right)^{1/3}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Для іншого механізму, розсіяння носій-носій, застосовується підхід, розвинутий Fletcher [2]:

$$\mu_{cc} = \frac{\left( \frac{T}{T_{ref}^{Fl}} \right)^{3/2} F_1}{(np)^{1/2} \ln \left[ 1 + \left( \frac{T}{T_{ref}^{Fl}} \right)^2 (np)^{-1/3} F_2 \right]}, \quad (1.6)$$

Табл. 1. Коефіцієнти для розрахунку рухливості відповідно до моделі Caughey–Thomas (1.8)

Тип носіїв	Параметр			
	$\mu_{\max}$ , см <sup>2</sup> /(B · c)	$\mu_{\min}$ , см <sup>2</sup> /(B · c)	$\alpha$	$N_{ref}$ , см <sup>-3</sup>
Електрони	1330	65	0,72	$8,5 \cdot 10^{16}$
Дірки	495	47,7	0,76	$6,3 \cdot 10^{16}$

де  $n$  та  $p$  — концентрації електронів та дірок, відповідно;  $T_{ref}^{Fl}$ ,  $F_1$  та  $F_2$  — певні константи, які залежать від матеріалу. Як показано в роботах [3, 4], для кремнію доцільно застосовувати  $T_{ref}^{Fl} = 300$  К,  $F_1 = 1,04 \cdot 10^{21}$  см<sup>-1</sup>В<sup>-1</sup>с<sup>-1</sup>,  $F_2 = 7,45 \cdot 10^{12}$  см<sup>2</sup> і тоді вираз (1.6) перетворюється на наступний

$$\mu_{cc} = \frac{2 \cdot 10^{17} T^{3/2}}{\sqrt{n p} \ln \left[ 1 + 8,28 \cdot 10^8 T^2 (np)^{-1/3} \right]}. \quad (1.7)$$

Проте в більшості випадків для більш-менш точного опису рухливості реального матеріалу необхідно враховувати значну кількість механізмів. Як наслідок, більше поширення отримав підхід оцінки величини  $\mu$  з використанням апроксимаційної функції, яка часто базується на результатах експериментальних вимірювань. Як правило, для кожного матеріалу вигляд функції або наявні в ній коефіцієнти відрізняються.

Розглянемо декілька подібних підходів до опису рухливості носіїв заряду у монокристалічному кремнії, обмежуючись випадками об'ємного напівпровідника (без врахування впливу поверхні) та слабких полів. Одним з перших подібних наближень був вираз, запропонований Caughey & Thomas [5]:

$$\mu^{\text{CT}} = \mu_{\min} + \frac{\mu_{\max} - \mu_{\min}}{1 + (N/N_{ref})^{\alpha}}, \quad (1.8)$$

де  $N$  — концентрація легантів, а значення констант для випадків, коли розглядаються рухливості електронів та дірок, наведені у Табл. 1. Вираз насамперед призначений для оцінки залежності рухливості основних носіїв від концентрації легуючої домішки поблизу 300 К. З іншого боку, формула (1.8) не дозволяє оцінити рухливості неосновних носіїв та не враховує температурну залежність  $\mu$ .

Модифікований варіант такого підходу був запропонований Masetti [6]:

$$\begin{aligned} \mu_n^M &= \mu_0 + \frac{\mu_{\max} - \mu_0}{1 + \left(\frac{n}{C_r}\right)^a} - \frac{\mu_1}{1 + \left(\frac{C_s}{n}\right)^b}, \\ \mu_p^M &= \mu_0 \exp \left( -\frac{p_c}{p} \right) + \frac{\mu_{\max}}{1 + \left(\frac{p}{C_r}\right)^a} - \frac{\mu_1}{1 + \left(\frac{C_s}{p}\right)^b}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Як видно з виразу (1.9), в такому випадку передбачено застосування різних виразів для опису рухливості електронів та дірок. Більше того, коефіцієнти мають залежати від того, які атоми були використання для легування — у Табл. 2 приведені їхні значення для бору та фосфору, які є найбільш типовими домішками для отримання кремнію з дірковою та електронною провідностями, відповідно. Теорія Masetti краще описує експериментальні дані, ніж підхід Caughey–Thomas, проте так само не дозволяє отримати інформацію для неосновних носіїв та температур, відмінних від кімнатної.

Спроба взяти до уваги температурні залежності була зроблена N. Arora зі співавторами [7]. При цьому розглядалися розсіяння на фононах та іонізованих домішках і було запропоновано використання узагальненого виразу Caughey–Thomas

$$\mu^A = \mu_{\min} + \frac{\mu_0}{1 + \left(\frac{N_I}{N_0}\right)^{\alpha}}, \quad (1.10)$$

**Табл. 2.** Коефіцієнти для розрахунку рухливості відповідно до моделі Masetti (1.9)

Параметр	Легант	
	Фосфор	Бор
$\mu_0, \text{ см}^2/(\text{B} \cdot \text{с})$	68,5	44,9
$\mu_{\max}, \text{ см}^2/(\text{B} \cdot \text{с})$	1414	470,5
$\mu_0, \text{ см}^2/(\text{B} \cdot \text{с})$	56,1	29,0
$C_r, \text{ см}^{-3}$	$9,2 \cdot 10^{16}$	$2,23 \cdot 10^{17}$
$C_s, \text{ см}^{-3}$	$3,41 \cdot 10^{20}$	$6,10 \cdot 10^{20}$
$a$	0,711	0,719
$b$	1,98	2,00
$p_c, \text{ см}^{-3}$	—	$9,23 \cdot 10^{16}$

де  $N_I = N_a^- + N_d^+$  — загальна концентрація іонізованих легантів ( $N_a^-$  та  $N_d^+$  — кількості іонізованих акцепторів та донорів у одиниці об'єму, відповідно), а решта коефіцієнтів у виразі (1.10) залежать від температури схожим чином:

$$\begin{aligned} \mu_{\min} &= \mu_{\min}^{ref} \left( \frac{T}{T_{ref}} \right)^{\beta_1}, \\ \mu_0 &= \mu_0^{ref} \left( \frac{T}{T_{ref}} \right)^{\beta_2}, \\ N_0 &= N_0^{ref} \left( \frac{T}{T_{ref}} \right)^{\beta_3}, \\ \alpha &= \alpha^{ref} \left( \frac{T}{T_{ref}} \right)^{\beta_4}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Тобто, відбулося повернення до ситуації, коли вираз для опису рухливості не залежить від типу носіїв, проте різними є константи, що мають бути використані під час розрахунків. Зауважимо, що у оригінальній роботі [7] вирази отримані (та визначені значення констант) на основі аналізу експериментальних даних щодо рухливості основних носіїв при різних значеннях температури та ступеню легування. Проте нерідко вирази (1.10)-(1.11) поширяють і для неосновних носіїв, використовуючи значення констант, отримані в роботах [8] (для неосновних електронів) та [9] (для неосновних дірок). Проте у вказаних роботах приведені дані лише для однієї температури і тому поширення виразів на широкий температурний діапазон дещо самовпевнено. Значення констант для всіх випадків наведено у Табл. 3.

Проте найбільш точним з точки зору збіжності з експериментальними даними вважається підхід до оцінки рухливості, розвинутий Klaassen [10] (на який в літературі також посилаються як на модель Philips). В цьому випадку вважається, що визначальними для рухливості є процеси розсіяння на коливаннях ґратки, іонізованих домішках та інших носіях, а температурну та концентраційні залежності  $\mu$  як для основних, так і неосновних носіїв заряду можна описати наступними виразами:

$$\mu^K = \frac{\mu_L \mu_{DA}}{\mu_L + \mu_{DA}}, \quad (1.12)$$

де

$$\mu_L = \mu_{\max} \left( \frac{300}{T} \right)^{2,25} \quad (1.13)$$

$$\mu_{DA} = \frac{\mu_{\max}^2}{\mu_{\max} - \mu_{\min}} \cdot \frac{N_{sc}}{N_{eff}} \cdot \left( \frac{N_{ref}}{N_{sc}} \right)^\alpha \cdot \left( \frac{T}{300} \right)^{3\alpha-1,5} + \frac{\mu_{\max} \mu_{\min}}{\mu_{\max} - \mu_{\min}} \cdot \frac{n+p}{N_{eff}} \cdot \left( \frac{300}{T} \right)^{0,5} \quad (1.14)$$

Табл. 3. Коефіцієнти для розрахунку рухливості відповідно до моделі Arora (1.10)-(1.11)

Параметр	Тип носіїв			
	електрони		дірки	
	основні [7]	неосновні [8]	основні [7]	неосновні [9]
$T_{ref}$ , K	300	295	300	292
$\mu_{min}^{ref}$ , см <sup>2</sup> /(B · c)	88	232	54.3	130
$\mu_0^{ref}$ , см <sup>2</sup> /(B · c)	1252	1180	407	370
$N_0^{ref}$ , см <sup>-3</sup>	$1,26 \cdot 10^{17}$	$8 \cdot 10^{16}$	$2,35 \cdot 10^{17}$	$8 \cdot 10^{17}$
$\alpha^{ref}$	0,88	0,9	0,88	1,25
$\beta_1$		-0,57		
$\beta_2$		-2,33		-2,23
$\beta_3$			2,4	
$\beta_4$			-0,146	

Табл. 4. Коефіцієнти для розрахунку рухливості відповідно до моделі Klaassen, формули (1.13)-(1.14)

Тип носіїв	Параметр			
	$\mu_{max}$ , см <sup>2</sup> /(B · c)	$\mu_{min}$ , см <sup>2</sup> /(B · c)	$\alpha$	$N_{ref}$ , см <sup>-3</sup>
Електрони	1414	68,5	0,711	$9,2 \cdot 10^{16}$
Дірки	495	44,9	0,719	$2,23 \cdot 10^{17}$

а константи, що входять до рівнянь (1.13)-(1.14) наведені у Табл. 4. Величини  $N_{sc}$  та  $N_{eff}$  є функціями, вигляд яких залежить від типу носіїв:

$$\text{електрони: } N_{sc} = N_d^+ + N_a^- + p, \quad (1.15a)$$

$$\text{дірки: } N_{sc} = N_a^- + N_d^+ + n, \quad (1.15b)$$

$$\text{електрони: } N_{eff} = N_d^+ + N_a^- \cdot G_n(P_n, T) + \frac{p}{F_n(P_n, T)}, \quad (1.16a)$$

$$\text{дірки: } N_{eff} = N_a^- + N_d^+ \cdot G_p(P_p, T) + \frac{n}{F_p(P_p, T)}. \quad (1.16b)$$

В свою чергу, для функцій  $G_{n(p)}$ ,  $F_{n(p)}$  та  $P_{n(p)}$  справедливі наступні вирази:

$$G_n = 1 - \frac{S_1}{\left[ S_2 + \left( \frac{m_0}{m_e} \frac{T}{300} \right)^{S_4} P_n \right]^{S_3}} + \frac{S_5}{\left[ \left( \frac{m_e}{m_0} \frac{300}{T} \right)^{S_7} P_n \right]^{S_6}}, \quad (1.17a)$$

$$G_p = 1 - \frac{S_1}{\left[ S_2 + \left( \frac{m_0}{m_h} \frac{T}{300} \right)^{S_4} P_p \right]^{S_3}} + \frac{S_5}{\left[ \left( \frac{m_h}{m_0} \frac{300}{T} \right)^{S_7} P_p \right]^{S_6}}, \quad (1.17b)$$

$$F_n = \frac{r_1 P_n^{r_6} + r_2 + r_3 \frac{m_e}{m_h}}{P_n^{r_6} + r_4 + r_5 \frac{m_e}{m_h}}; \quad F_p = \frac{r_1 P_p^{r_6} + r_2 + r_3 \frac{m_h}{m_e}}{P_p^{r_6} + r_4 + r_5 \frac{m_h}{m_e}}, \quad (1.18)$$

$$P_n = (P_{bn} + P_{cn})^{-1}; \quad P_p = (P_{bp} + P_{cp})^{-1}, \quad (1.19)$$

де  $m_e$  та  $m_h$  — ефективні маси електрона та дірки, відповідно, а константи, що входять до виразів (1.17) та (1.18), наведені в Табл. 5. У випадку, коли мова йде про неосновні носії, то  $P_{cn} = 0$  ( $P_{cp} = 0$ ). При розрахунках для основних носіїв

**Табл. 5.** Коєфіцієнти для розрахунку рухливості відповідно до моделі Klaassen, формули (1.17) та (1.18)

Параметр	$S_1$	$S_2$	$S_3$	$S_4$	$S_5$	$S_6$	$S_7$
Значення	0,89233	0,41372	0,19778	0,28227	0,005978	1,80618	0,72169
Параметр	$r_1$	$r_2$	$r_3$	$r_4$	$r_5$	$r_6$	
Значення	0,7643	2,2999	6,5502	2,3670	-0,01552	0,6478	

$$P_{cn} = \frac{2,46}{3,97 \cdot 10^{19} \left[ \left( \frac{T}{300 Z_n} \right)^3 \frac{1}{N_d^+} \right]^{2/3}}; \quad P_{cp} = \frac{2,46}{3,97 \cdot 10^{19} \left[ \left( \frac{T}{300 Z_p} \right)^3 \frac{1}{N_a^-} \right]^{2/3}}, \quad (1.20a)$$

$$Z_n = 1 + \frac{1}{0,21 + \left( \frac{4 \cdot 10^{20}}{N_d^+} \right)^2}; \quad Z_p = 1 + \frac{1}{0,5 + \left( \frac{7,2 \cdot 10^{20}}{N_a^-} \right)^2}, \quad (1.20b)$$

$$P_{bn} = \frac{3,83}{\frac{1,36 \cdot 10^{26}}{N_d^+ + p} \left( \frac{T}{300} \right)^2 \frac{m_e}{m_0}}; \quad P_{bn} = \frac{3,83}{\frac{1,36 \cdot 10^{26}}{N_a^- + n} \left( \frac{T}{300} \right)^2 \frac{m_h}{m_0}}. \quad (1.20b)$$

Як можна бачити, підхід Klaassen (1.12)-(1.20) передбачає застосування достатньо комплексних виразів та більше двадцяти констант. Це, звичайно, не створює непереборних складностей, але призводить до того, що на практиці для оцінки рухливості носіїв заряду в кремнії нерідко використовується більш простий підхід Arora (1.10)-(1.11), незважаючи на його меншу точність.

Зазначимо, що питання опису рухливості продовжує привертати увагу і періодично з'являються нові моделі. Наприклад, пропонуються вирази, які дозволяють врахувати додаткові механізми розсіяння за рахунок модифікації моделі Masetti [11], або використовують апроксимаційні поліноми [12].

## 2. Методика обчислень

### 2.1. Створення тренувального та тестового наборів

Метою цієї роботи було створення моделей для оцінки рухливості носіїв заряду у кремнії при певних температурі  $T$  та рівні легування  $N_D$  з використанням алгоритмів машинного навчання (МН). Іншими словами, з точки зору МН, ми вирішували задачу у якій набір ознак (дескрипторів) складався з двох величин  $(T, N_D)$ , а цільовим результатом була величина  $\mu$ . Зрозуміло, що для досягнення поставленої мети насамперед необхідні дані і для їх отримання ми використовували модель Klaassen. Тобто, передбачення моделі Klaassen вважалися істинними і ми намагалися створити регресійні моделі, передбачення яких максимально узгоджуються з підходом, запропонованим у роботі [10].

У роботі ми розглядали наступні діапазони температур та рівнів легування:

$$T \in [200, 500] \text{ K}; \quad N_D \in [10^{13}, 10^{19}] \text{ см}^{-3}. \quad (2.1)$$

Під час створення тренувального набору даних випадковим чином вибиралися 500 пар значень  $(T, N_D)$  з діапазону (2.1) і обчислювалися значення  $\mu$ , використовуючи вирази (1.12)-(1.20) та дані таблиць 4 та 5. Тестовий набір, який використовувався для оцінки якості передбачень моделей, складався з 2550 зразків, що відповідали всім комбінаціям 51 значень температури (від 200 К до 500 К з кроком 6 К) та 50 значень рівня легування, рівномірно розподіленим в логарифмічному масштабі від  $10^{13} \text{ см}^{-3}$  до  $10^{19} \text{ см}^{-3}$ . У роботі розроблялися моделі, здатні передбачати рухливість як основних так і неосновних електронів та дірок у кремнії і для кожного з цих чотирьох випадків створювалися окрім тренувальний та тестові набори. Надалі рухливість електронів у n-Si позначатиметься  $\mu_{n,n}$ , у p-Si —  $\mu_{n,p}$ . Аналогічно,  $\mu_{p,p}$  та  $\mu_{p,n}$  позначатимуть рухливості дірок, коли вони є основними та неосновними носіями заряду, відповідно.

Під час розрахунків величини рухливості вважалося, що: 1) у кристалі наявні легуючі домішки лише одного типу (випадок компенсованого напівпровідника не розглядався); 2) концентрація нерівноважних (інжектованих) носіїв набагато менша концентрації електронів у n-Si та дірок у p-Si.

У випадку електронного напівпровідника для обчислення концентрацій носіїв заряду використовувався вираз

$$n = \frac{N_d^+}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_d^+}{2}\right)^2 + n_i^2}, \quad (2.2)$$

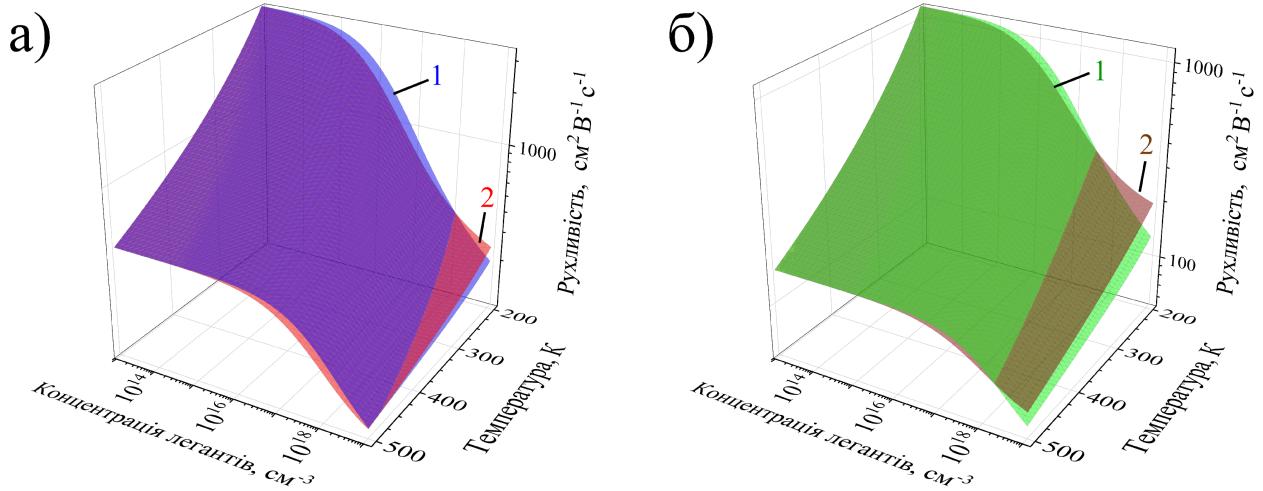
$$p = \frac{n_i^2}{n}, \quad (2.3)$$

де  $n_i$  — концентрація електронів у власному напівпровіднику, для обчислення температурної залежності якої, використовувався підхід з роботи [13]. В свою чергу, кількість іонізованих донорів у одиниці об'єму обчислювалася з урахуванням статистики Фермі-Дірака:

$$N_d^+ = N_d \left( 1 - \frac{1}{1 + 0,5 \exp \left[ \frac{E_F - E_d}{kT} \right]} \right), \quad (2.4)$$

де  $E_F$  — положення рівня Фермі,  $E_d$  — енергія розташування донорного рівня. Оцінка розташування рівня Фермі здійснювалася з використанням умови електронейтральності

$$n = p + N_d^+, \quad (2.5)$$



**Рис. 2.1.** Залежності рухливості електронів (а) та дірок (б) у випадку, коли вони є основними (поверхні 1) та неосновними (поверхні 2) носіями заряду від температури та концентрації легуючої домішки. Розрахунки виконані відповідно до теорії Klaassen.

при цьому вважалося, що

$$n = N_C F_{1/2} \left( -\frac{E_F}{kT} \right), \quad (2.6)$$

$$p = N_V F_{1/2} \left( -\frac{E_G - E_F}{kT} \right), \quad (2.7)$$

де  $N_C$  та  $N_V$  — ефективні густини станів біля дна зони провідності та вершини валентної зони, обчислювалися відповідно до [13];  $E_G$  — ширина забороненої зони, яка розраховувалася згідно з наближенням Passler [14];  $F_{1/2}$  — інтеграл Фермі–Дірака ступеня 1/2, для обчислення якого використовувався підхід [15].

У випадку p–Si розрахунки проводилися аналогічно.

І для електронного, і для діркового напівпровідника вважалося, що енергія активації легуючої домішки складає 45 мeВ. Ця величина відповідає енергіям іонізації атомів бору та фосфору, які є основними легуючими домішками для кремнію.

Результати розрахунків істинних значень рухливості представлені на Рис. 2.1.

## 2.2. Налаштування Symbolic Regression

Символьна регресія (Symbolic Regression, SR) — це достатньо новий алгоритм МН, який апроксимує залежності між вхідними та вихідними параметрами та дозволяє отримати аналітичний зв’язок між ними у вигляді математичної формули [16]. При побудові функціональної залежності та пошуку числових параметрів використовуються еволюційні алгоритми. SR є одним із методів, які об’єднують дані, моделі машинного навчання та наукові теорії, дозволяючи отримати аналітичні вирази, які можуть бути інтерпретовані, дозволяють отримати передбачення дешевши з точки зору обчислень порівняно з класичними моделями МН та легше інтегруються у вирішення різноманітних фізичних проблем.

При реалізації цього алгоритму використовувався open source пакет PySR, орієнтований на використання мови Python. Для побудови рівнянь використовувалися стандартні математичні функції ( $+$ ,  $-$ ,  $\times$ ,  $\div$ ,  $\exp$ ,  $\ln$ ,  $x^y$ ,  $\tanh$ ,  $\sin$ ) та дійсні константи. Крім того використовувалися спеціально сконструйовані оператори  $f_1(x) = \frac{1}{1+x}$  та  $f_2(x, y) = \frac{x-y}{x+y}$ . Ці оператори відповідають функціям, які часто зустрічаються в існуючих моделях для опису рухливості носіїв заряду — див. Розділ 1.2.

SR може привести до складних виразів, які важко інтерпретувати через те, що вони, що містить небажані ознаки, такі як, наприклад, вкладені операції. Щоб запобігти цьому застосовувалися обмеження, які забороняли дві послідовні операції  $\sin$  (тобто  $\sin(\sin(\bullet))$ ),  $f_1$ ,  $f_2$  та  $\tanh$ , а також вкладеність  $\tanh$  в  $f_1$  та  $f_2$ , та  $\ln$  і  $x^y$  в  $\exp$ . Також було заборонено комплексність (складність) показника експоненти вище 3 та показника функції  $x^y$  вище 5.

Попередня обробка даних полягала у їхній нормалізації, тобто на вхід SR моделі надходили величини  $T_n$   $N_{Dn}$ , пов'язані з реальними температурою та концентрацією легуючої домішки наступним чином:

$$T_n = \frac{T}{300 \text{ K}}, \quad (2.8a)$$

$$N_{Dn} = \frac{N_D}{10^{17} \text{ cm}^{-3}}. \quad (2.8b)$$

## 2.3. Класичні регресійні моделі

Окрім символної регресії, в роботі для оцінки рухливості також були реалізовані декілька моделей, які базуються на використанні більш класичних алгоритмів МН. А саме, були використані:

1) *Random Forest* (RF) — алгоритм, який досягає покращення точності прогнозування завдяки навчанню декількох дерев рішень на різних підмножинах тренувального набору даних; RF агрегує прогнози всіх дерев, використовуючи голосування під час класифікації або усереднення у випадку вирішення регресійних завдань (як в нашому випадку), що дозволяє зменшити перенавчання та підвищуючи стійкість до шуму [17];

*Gradient Boosting* (GB) — об'єднує декілька слабких моделей, як правило, дерев рішень, з метою покращення ефективності прогнозування; кожна нова модель виправляє помилки по-передньої, тим самим підвищуючи загальну точність; остаточний прогноз отримують шляхом агрегування прогнозів, зазвичай за допомогою зважено суми [18];

*Support Vector Regression* (SVR) — передбачає знаходження функції, яка наближує залежність між вхідними змінними та цільовими значеннями з максимально допустимою похибкою, водночас забезпечуючи якнайменшу складність моделі; може використовувати різні функції ядра (наприклад, радіально-базисні чи поліноміальні), щоб працювати з нелінійними залежностями [19];

*Deep Neural Network* (DNN) — складається з декількох шарів взаємопов'язаних нейронів, які обробляють вхідні дані шляхом послідовних нелінійних перетворень [20].

Підкреслимо, що хоча подібні моделі також дозволяють передбачати певні величини (наприклад, рухливість носіїв, як це відбувалося в нашому випадку), проте вони є фактично чорною скринькою, що суттєво утруднює обґрунтування отриманих результатів і поступово перестає задовольняти дослідників.

Вказані моделі були імплементовані на мові Python, використовуючи пакети Keras (для DNN) та Scikit-learn (для RF, GB та SVR).

Розглядалися два варіанти кожного типу моделей, які відрізнялися попередньою обробкою даних. В одному випадку як вхідні ознаки використовувалися нормовані значення температури та концентрації легуючої домішки (визначені відповідно до (2.8)), а прогнози були орієнтовані на отримання величини  $\mu$ . Відповідні моделі надалі позначатимуться шляхом додавання до абревіатури використаного алгоритму суфіксу “\_N” (RF\_N, DNN\_N тощо). Проте ознаки достатньо сильно відрізняються за величиною між собою, а  $N_D$  ще й змінюється у межах шести порядків, що може бути перепоною для точних прогнозів. Тому для другого типу моделей проводилася попередня обробка вхідних ознак, яка передбачала нормалізацію (Z-стандартизацію, вже вибачте за усталений термін) як значень температури  $T$ , так і логарифмів ступеню легування  $\lg N_D$  (здійснювалися лінійні перетворення, в результаті

**Табл. 6.** Пошуковий простір гіперпараметрів для RF моделей

Гіперпараметр	Можливі значення (діапазон пошуку)
# estimators	100 $\div$ 700
max depth	10 $\div$ 70
min samples leaf	1, 2, 3, 4, 5
min samples split	2, 3, 4, 5
bootstrap	True, False
max features	0,5, 0,8, 1

ті яких тренувальні набори кожної з ознак характеризувалися нульовим середнім і одиничним стандартним відхиленням). Моделі були орієнтовані на передбачення нормалізованих значень  $lg \mu$ . Процес нормалізації був реалізований за допомогою функції StandartScaler з пакету Scikit-learn і позначення відповідних моделей міститиме суфікс “\_S”.

Відомо, що налаштування гіперпараметрів є надзвичайно важливим для оптимізації продуктивності моделі [21]. Перелік гіперпараметрів, які налаштовувалися дляожної з моделей, а також діапазони пошуку вказані в Таблицях 6-9.

**Табл. 7.** Пошуковий простір гіперпараметрів для GB моделей

Гіперпараметр	Можливі значення (діапазон пошуку)
# estimators	200 $\div$ 900
max depth	2 $\div$ 40
min samples leaf	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7
min samples split	2, 3, 4, 5, 6, 7
learning rate	$10^{-3} \div 1$
max features	0,5, 0,6, 0,7, 0,8, 0,9, 1

**Табл. 8.** Пошуковий простір гіперпараметрів для SVR моделей

Гіперпараметр	Можливі значення (діапазон пошуку)
kernel	linear, poly, rbf, sigmoid
degree*	2, 3, 4, 5, 6
$C_0$	0 – 8
Tolerance	$10^{-5} \div 10^{-2}$
$C$	$10^{-2} \div 15$
$\varepsilon$	$10^{-4} \div 0,5$

\* лише для kernel=poly

**Табл. 9.** Пошуковий простір гіперпараметрів для DNN моделей

Гіперпараметр	Можливі значення (діапазон пошуку)
# nodes for first hidden layer	5 $\div$ 150
batch size	1, 4, 16
activation function	ReLU, sigmoid, tanh, SELU, ELU
optimizer	SGD, RMSprop, Adam, Adadelta, Adagrad, Adamax, Nadam, Ftrl
learning rate	$10^{-4} \div 10^{-2}$
weight initializer	Xavier Normal, Xavier Uniform, He Normal, He Uniform, Random Normal, Random Uniform

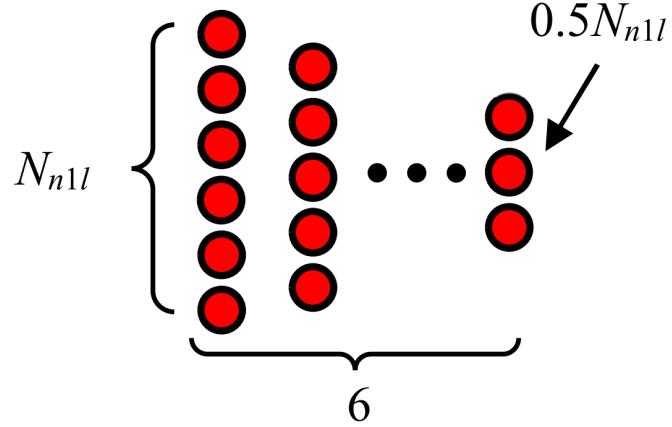


Рис. 2.2. Конфігурація схованих шарів для використаних DNN моделей.

Зазначимо, що у випадку DNN вхідний шар складався з двох вузлів, вихідний містив один вузол, а структура схованих повнозв'язних шарів наведена на Рис. 2.2. Як видно з рисунку, використовувалося шість схованих шарів, кількість вузлів у яких поступово зменшувалося: від шару до шару на 10% від кількості вузлів у першому схованому ( $N_{n1l}$ ), яка була одним із гіперпараметрів, що налаштовувалися.

Налаштування моделей здійснювалося за допомогою пакету Optuna [22] з використанням TPE самплера та Hyperband пронера для ефективного вибору гіперпараметрів. Під час налаштування використовувалась 5-кратна крос-валідація, яка передбачала почергове використання кожних 20% тренувального набору як валідаційних даних для оцінки ефективності моделей, навчених з використанням решти 80%.

## 2.4. Метрики оцінювання

При побудові регресійних моделей надзвичайно важливо використовувати різні метрики, що дозволяють оцінити якість навчання та точність прогнозів. В роботі були використані декілька кількісних показників для оцінювання створених моделей. Одним з них була середня квадратична похибка (the mean squared error, MSE):

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2, \quad (2.9)$$

де  $\hat{y}_i$  — прогнозоване моделлю значення для  $i$ -го зразка (набору вхідних параметрів),  $y_i$  — відоме цільове значення для  $i$ -го зразка,  $N$  — кількість зразків у наборі даних. У нашому випадку для символної регресії та \*\_N моделей  $y_i$  збігалося зі величиною рухливості, для \*\_S моделей при обчисленні  $y_i$  проводилися логарифмування та стандартизація (див. розділ 2.3). MSE є однією з найбільш популярних метрик і в нашему випадку переважно використовувалося для оцінки якості навчання моделей, зокрема під час налаштування гіперпараметрів та в процесі безпосереднього навчання (середня квадратична похибка розглядалася як цільова функція для мінімізації під час навчання). Певним виключенням був лише випадок SR, коли під час навчання мінімізувалося середнє значення зваженої суми, причому вагові коефіцієнти мали вигляд

$$\omega_i = \frac{\log N_{D,i}}{\mu_i}. \quad (2.10)$$

Використання  $\omega_i$  дозволяло врахувати, що рухливість у вибраних діапазонах температури та ступеня легування змінюються у достатньо широких межах, і перешкоджало тому, щоб

остаточний аналітичний вираз орієнтувався переважно на відтворення великих значень рухливості.

Для оцінки якості прогнозів використовувалися декілька показників. Один з них — середня відносна похибка (mean absolute percentage error, MAPE):

$$\text{MAPE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|\mu_i^{\text{PRED}} - \mu_i^{\text{TRUE}}|}{\mu_i^{\text{TRUE}}} \times 100\%, \quad (2.11)$$

де  $\mu_i^{\text{PRED}}$  — передбачене значення рухливості (після застосування операцій, обернених до нормування та нормалізації),  $\mu_i^{\text{TRUE}}$  — істинне значення рухливості (отримане в результаті розрахунків відповідно до теорії Klaassen). У випадку, коли частина прогнозів за своєю точністю суттєво відрізняється від інших, MAPE не дозволяє отримати повну картину щодо акуратності передбачень. Тому ми також використовували медіанне значення відносної похибки APE<sub>MED</sub>, яке відображає величину помилки не більше якої мають 50% передбачень у наборі даних. Водночас для характеризації максимального відхилення від істини ми використовували максимальне значення відносної похибки APE<sub>MAX</sub>,

Нарешті, ми розглядали середнє значення абсолютної похибки (mean absolute error, MAE):

$$\text{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\mu_i^{\text{PRED}} - \mu_i^{\text{TRUE}}|. \quad (2.12)$$

### 3. Отримані результати

#### 3.1. Символьна регресія

У випадку опису рухливості електронів, коли вони є основними носіями у монокристалічному кремнії в результаті застосування SR був отриманий наступний вираз:

$$\mu_{n,n} = \frac{N_{Dn} + 1413,2}{T_n^{2,2508} + \frac{a_{n,n} \cdot b_{n,n}}{a_{n,n} + b_{n,n}}}, \quad (3.1a)$$

$$a_{n,n} = \left( \frac{N_{Dn}}{0,873T_n + 0,0727} \right)^{0,7212}, \quad (3.1b)$$

$$b_{n,n} = 0,215N_{Dn}^{0,58} + 10,5T_n - 1,342. \quad (3.1b)$$

Нагадаємо, що нормовані величини температури та концентрації донорів описуються співвідношеннями (2.8). Звертає на себе увагу наявність складової, яка містить  $T_n^{2,2508}$ , що надзвичайно близько до температурної залежності рухливості, пов'язаної з розсіянням на фонах. Загалом, вираз містить всього 9 параметрів і є набагато простішим ніж той, який пропонується в теорії Klaasen. Розподіл похибки формули (3.1) порівняно з теорією Klaasen залежно від температури та ступеню легування представлений на Рис. 3.1,а. Як видно з представлених даних, найбільші відхилення спостерігаються при  $T = 200$  К та  $N_d$  в околі  $10^{18}$  см<sup>-3</sup>. Проте навіть в цьому випадку похибка не перевищує 1.2 %. Для більшості ж значень аргументів у тих діапазонах, що розглядалися абсолютна відносна похибка не перевищує 0,15 %.

Наступна формула (3.2) ілюструє отриманий аналітичний вираз для опису рухливості неосновних електронів у монокристалічному кремнії. Розподіл АРЕ як функції температури та концентрації акцепторів представлений на Рис. 3.1,б. В цьому випадку максимальні розбіжності між (3.2) та теорією (1.12)-(1.20) спостерігаються при концентрації легуючої домішки  $10^{19}$  см<sup>-3</sup> та температурі близько 500 К. Інші "проблемні" області це  $T = 230 - 270$  К і  $N_a = (3 - 6) \cdot 10^{17}$  см<sup>-3</sup> і  $T \simeq 200$  К і  $N_a = 10^{19}$  см<sup>-3</sup>. Проте загалом помилки при оцінці рухливості електронів, коли вони є неосновними носіями заряду, дещо нижчі ніж коли вони є основними.

$$\mu_{n,p} = 26,3 \cdot \left( \frac{N_{Dn}}{N_{Dn} + 192} \right)^{0,62} + \frac{1412,3}{T_n^{2,25} + \frac{a_{n,p} \cdot b_{n,p}}{a_{n,p} + b_{n,p}}}, \quad (3.2a)$$

$$a_{n,p} = 1,92 \cdot \left( \frac{N_{Dn}}{T_n + 0,071} \right)^{0,717}, \quad (3.2b)$$

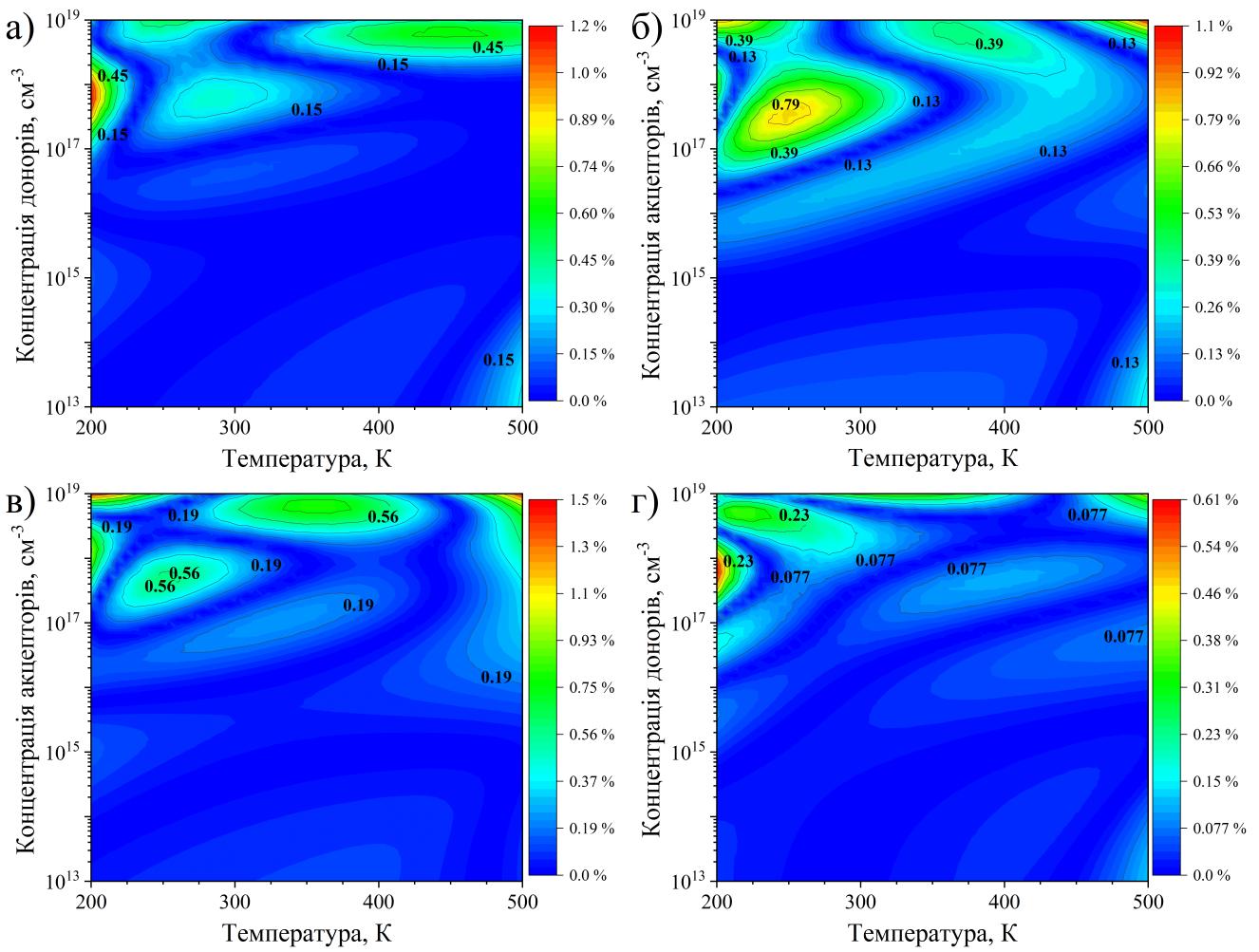
$$b_{n,p} = 5,7N_{Dn}^{0,103} \cdot T_n, \quad (3.2b)$$

Вираз для опису рухливості дірок у p-Si (формула (3.3)) містить найменшу кількість параметрів з усіх отриманих виразів. Проте і максимальні похибки в цьому випадку найбільші, хоча вони спостерігаються у достатньо вузькому діапазоні параметрів — див. Рис. 3.1,в.

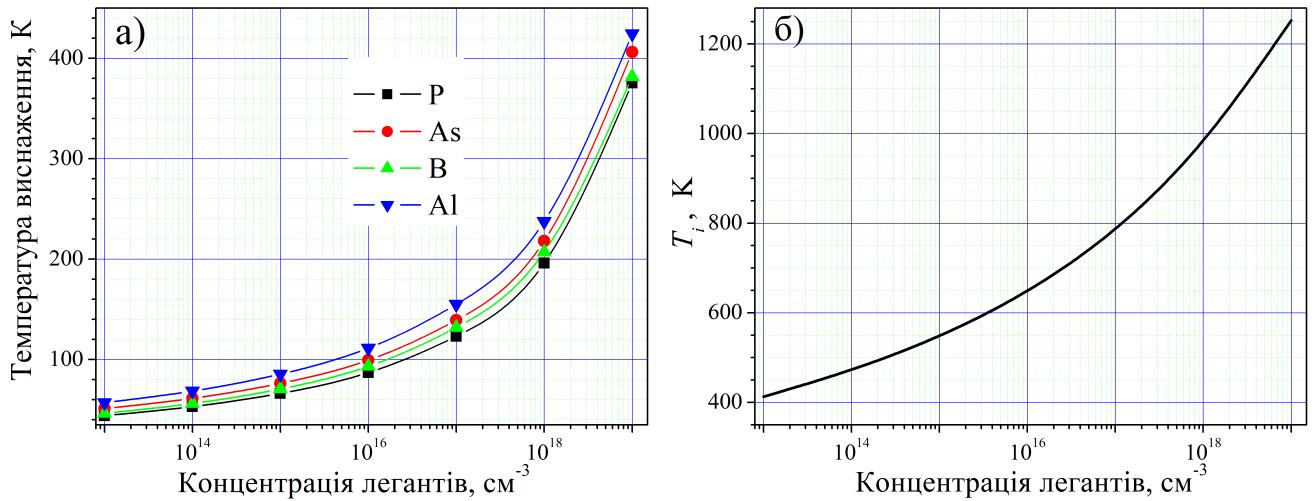
$$\mu_{p,p} = N_{Dn}^{0,448} + \frac{470}{T_n^{2,2505} + \frac{a_{p,p} \cdot b_{p,p}}{a_{p,p} + b_{p,p}}}, \quad (3.3a)$$

$$a_{p,p} = 2,652N_{Dn}^{0,1669} \cdot T_n, \quad (3.3b)$$

$$b_{p,p} = 0,578N_{Dn}^{0,7587} \cdot T_n^{-0,755}, \quad (3.3b)$$



**Рис. 3.1.** Залежності величини відносної похибки при оцінці рухливості носіїв заряду у кремнії за допомогою виразів (3.1) – (3.4), отриманих за допомогою символової регресії, від температури та рівня легування. Представлені випадки оцінки рухливості електронів (а, б) та дірок (в, г), коли вони є основними (а, в) та неосновними (б, г) носіями заряду.



**Рис. 3.2.** Залежності виснаження (а) та температури початку власної провідності (б) від концентрації легуючих домішок. У частині а наведено результати розрахунків для декількох типів легуючих домішок.

У випадку неосновних дірок вдалося досягти найбільшого збігу значень, що обчислюються відповідно до отриманої формули (3.4) та теорії Klaassen — див. Рис. 3.1,г. Зокрема з рисунку видно, що для переважної частини значень температури та рівня легування помилка менше 0.08%.

$$\mu_{p,n} = \frac{0,0226N_{Dn} \cdot \ln T_n}{\ln T_n + 0,63} + \frac{113,56}{\left[ 0,15617T_n^{2,94} + \left( \frac{a_{p,n} \cdot b_{p,n}}{1,151a_{p,n} + 4,21b_{p,n}} \right)^{1,177} \right]^{0,76547}}, \quad (3.4a)$$

$$a_{p,n} = N_{Dn}^{0,6085}, \quad (3.4b)$$

$$b_{p,n} = T_n^{1,143}. \quad (3.4c)$$

Зазначимо, що порівняно з теорією Klaassen запропоновані вирази (3.1)–(3.4) зручніші для використання не лише через свою меншу ускладненість. У формулах (1.12)–(1.20) фігурують концентрації носіїв та іонізованих домішок, тоді як запропоновані в цій роботі вирази дозволяють використовувати концентрацію легуючої домішки, що є паспортною характеристикою матеріалу. Умови  $n = N_d$ ,  $N_d^+ = Nd$  (для n-кремнію та  $p = N_a$ ,  $N_a^- = Na$  для p-кремнію) виконуються лише для певного температурного діапазону. А саме  $T$  має бути достатньо високою, щоб виконувалась умова повної іонізації легуючої домішки, коли рівень Фермі знаходиться на декілька  $kT$  близьче до середини забороненої зони ніж енергетичний рівень домішкового атому. Зокрема температура при якій  $E_F = E_d$  називається температурою виснаження і може бути визначена наступним чином

$$n - \text{тип} : T_s = \frac{E_d}{k \ln(N_C/N_d)}; \quad p - \text{тип} : T_s = \frac{E_d}{k \ln(N_V/N_a)}. \quad (3.5)$$

На Рис. 3.2,а представлена залежність  $T_s$  від рівня легування для різних типових легантів. Як видно з представлених даних, при низьких рівнях легування температура виснаження не потрапляє у діапазон температур, для якого знаходилися аналітичні вирази. Проте при  $N_D > 10^{18} \text{ см}^{-3}$  умова повної іонізації виконується не завжди.

З іншого боку, температура має бути не занадто високою для того, щоб концентрацією власних носіїв заряду можна було знехтувати у порівнянні з кількістю носіїв, зобов'язаних своїм утворенням легуванню. Температура початку власної провідності оцінюється за допомогою наступного співвідношення:

$$T_i = \frac{E_G}{k \ln \left( \frac{N_C N_V}{N_D^2} \right)}. \quad (3.6)$$

Відповідна концентраційна залежність наведена на Рис. 3.2,б. В цьому випадку при  $N_D < 5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$  в діапазоні  $200 \div 500 \text{ К}$  може реалізуватися ситуація, коли наявність вільних носіїв заряду не пов'язана лише з легантами.

При  $T < T_s$  або  $T > T_i$  у випадку застосування виразів (1.12)–(1.20) необхідно додатково враховувати відмінності  $n$  та  $N_d^+$  від  $N_d$  ( $p$  та  $N_a^-$  від  $N_a$ ). У формулах (3.1)–(3.4) подібні ефекти вже враховані. Звичайно, так як при розрахунках використовувалося значення енергії іонізації домішки 0,045 еВ, то отримані вирази мають певне обмеження до застосування лише у випадках саме такого розташування енергетичного рівня леганта відносно дозволених зон напівпровідника. Проте враховуючи, що саме таку енергетичну структуру мають найпопулярніші під час забезпечення домішкової провідності у кремнії атоми бору та фосфору, обмеження не є надто жорстким. Крім того, величина енергії іонізації відіграватиме роль лише у випадку неповної іонізації леганта. Тобто при інших температурах (а при  $N_D < 10^{18} \text{ см}^{-3}$  практично завжди) запропоновані формули будуть справедливі і для інших варіантів легування.

**Табл. 10.** Використані значення гіперпараметрів для RF моделей

Модель	RF_N				RF_S			
Цільова величина	$\mu_{n,n}$	$\mu_{n,p}$	$\mu_{p,p}$	$\mu_{p,n}$	$\mu_{n,n}$	$\mu_{n,p}$	$\mu_{p,p}$	$\mu_{p,n}$
Гіперпараметр	Значення							
# estimators	468	500	658	510	278	564	304	204
max depth	19	58	37	19	30	15	55	55
min samples leaf	1	1	1	1	1	1	1	1
min samples split	2	2	2	2	2	2	2	2
bootstrap	True							
max features	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0

### 3.2. Класичні регресійні моделі

Значення гіперпараметрів, отримані в результаті налаштування і в наступному використанні під час навчання та тестування RF, GB, SVR та DNN моделей наведені в Таблицях 10-13.

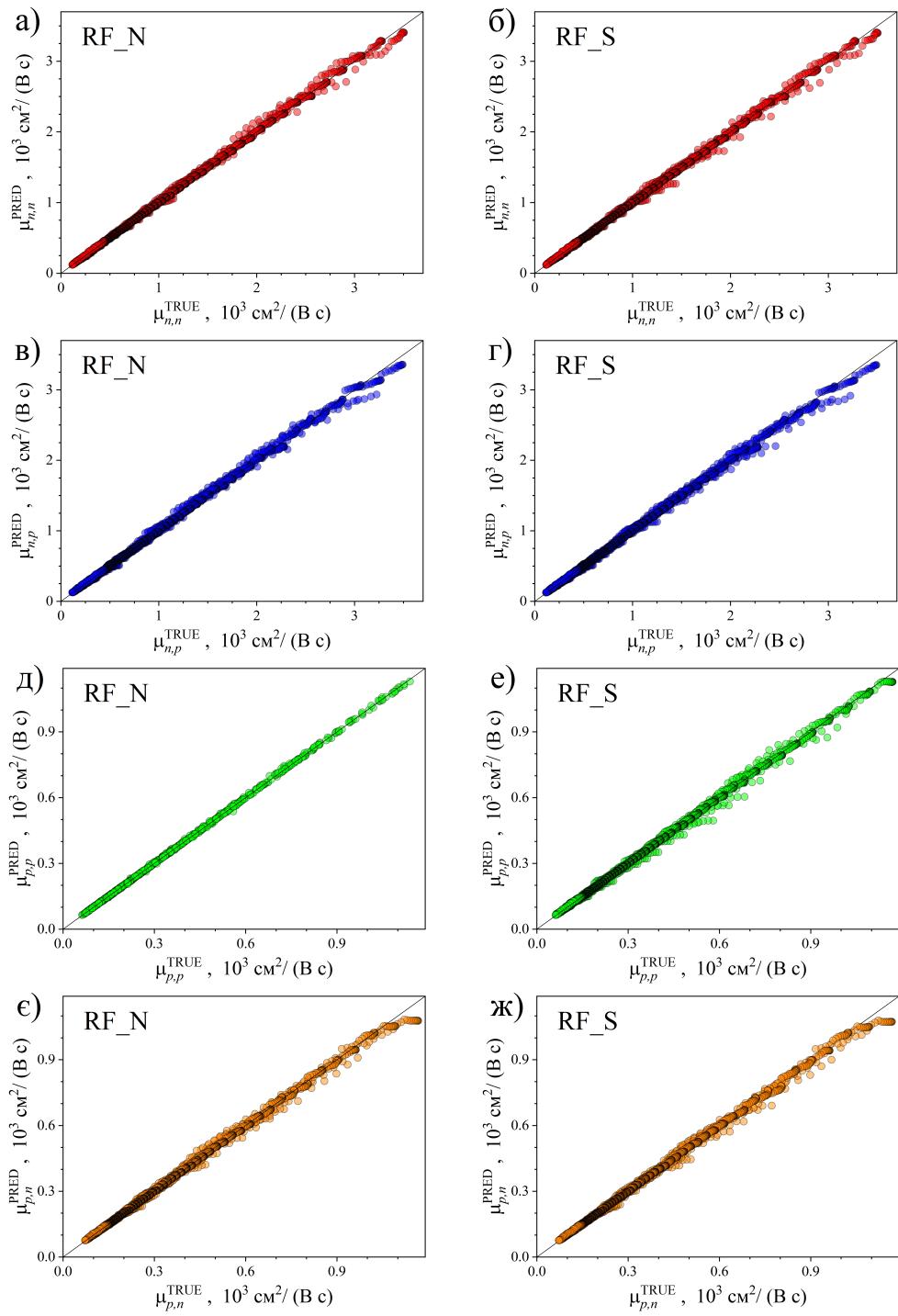
**Табл. 11.** Використані значення гіперпараметрів для GB моделей

Модель	GB_N				GB_S			
Цільова величина	$\mu_{n,n}$	$\mu_{n,p}$	$\mu_{p,p}$	$\mu_{p,n}$	$\mu_{n,n}$	$\mu_{n,p}$	$\mu_{p,p}$	$\mu_{p,n}$
Гіперпараметр	Значення							
# estimators	700	800	800	570	840	770	810	850
max depth	4	4	4	4	4	4	2	4
min samples leaf	6	2	5	4	5	3	5	4
min samples split	2	2	3	3	5	5	5	6
learning rate, $10^{-2}$	6,44	9,78	7,69	4,68	9,49	4,63	9,67	5,29
max features	0,8	1,0	1,0	0,6	1,0	0,7	1,0	0,8

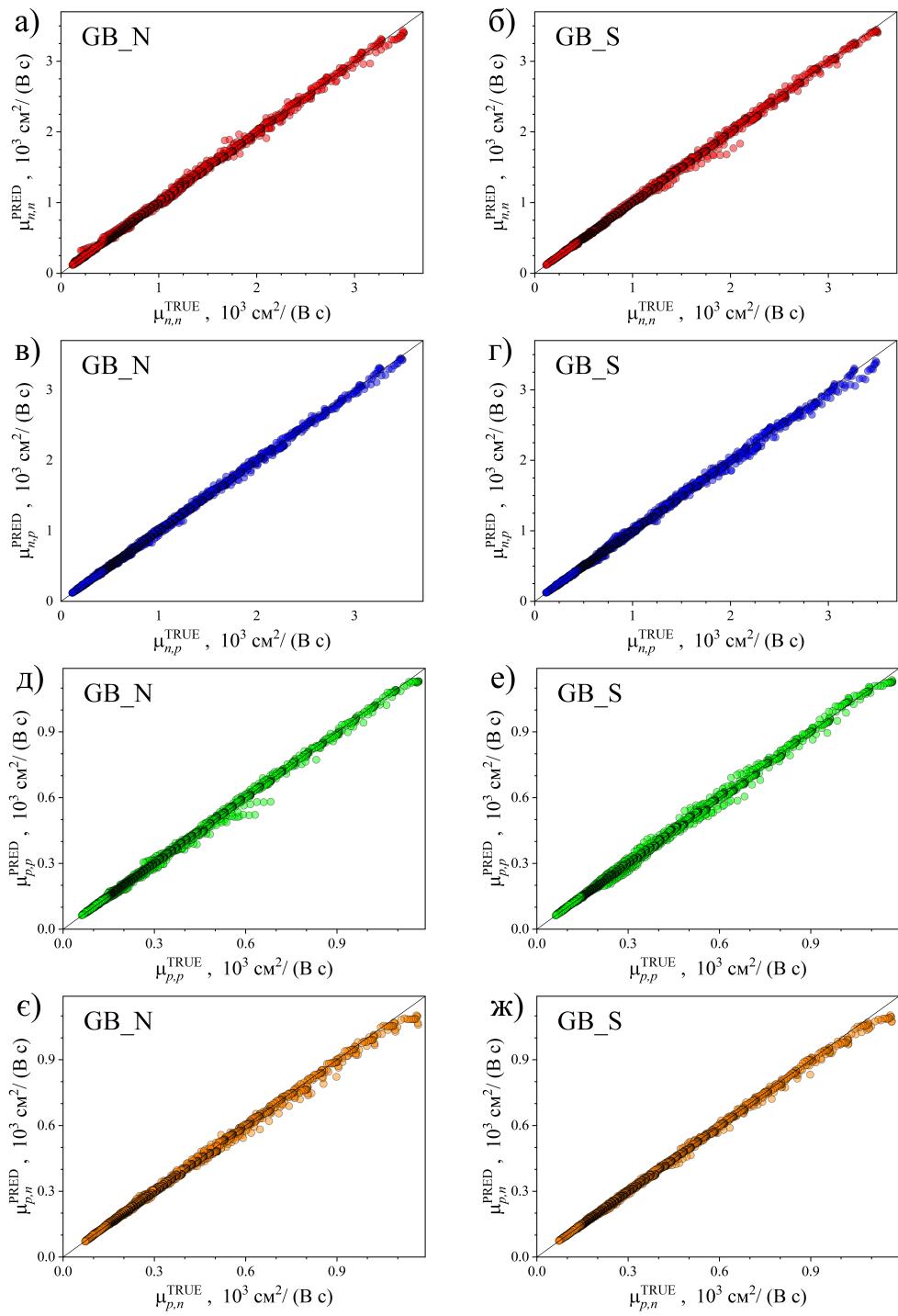
**Табл. 12.** Використані значення гіперпараметрів для SVR моделей

Модель	SVR_N				SVP_S			
Цільова величина	$\mu_{n,n}$	$\mu_{n,p}$	$\mu_{p,p}$	$\mu_{p,n}$	$\mu_{n,n}$	$\mu_{n,p}$	$\mu_{p,p}$	$\mu_{p,n}$
Гіперпараметр	Значення							
kernel	poly	poly	poly	poly	rbf	rbf	rbf	rbf
degree	6	6	6	6	–	–	–	–
$C_0$	7,52	7,54	7,08	7,02	4,92	2,73	3,88	6,78
Tolerance, $10^{-3}$	5,64	2,22	0,60	0,015	0,75	0,32	0,083	0,068
$C$	9,79	7,04	3,00	4,19	15	15	15	15
$\varepsilon, 10^{-3}$	33,2	11,6	10,4	0,91	0,55	0,50	2,44	0,84

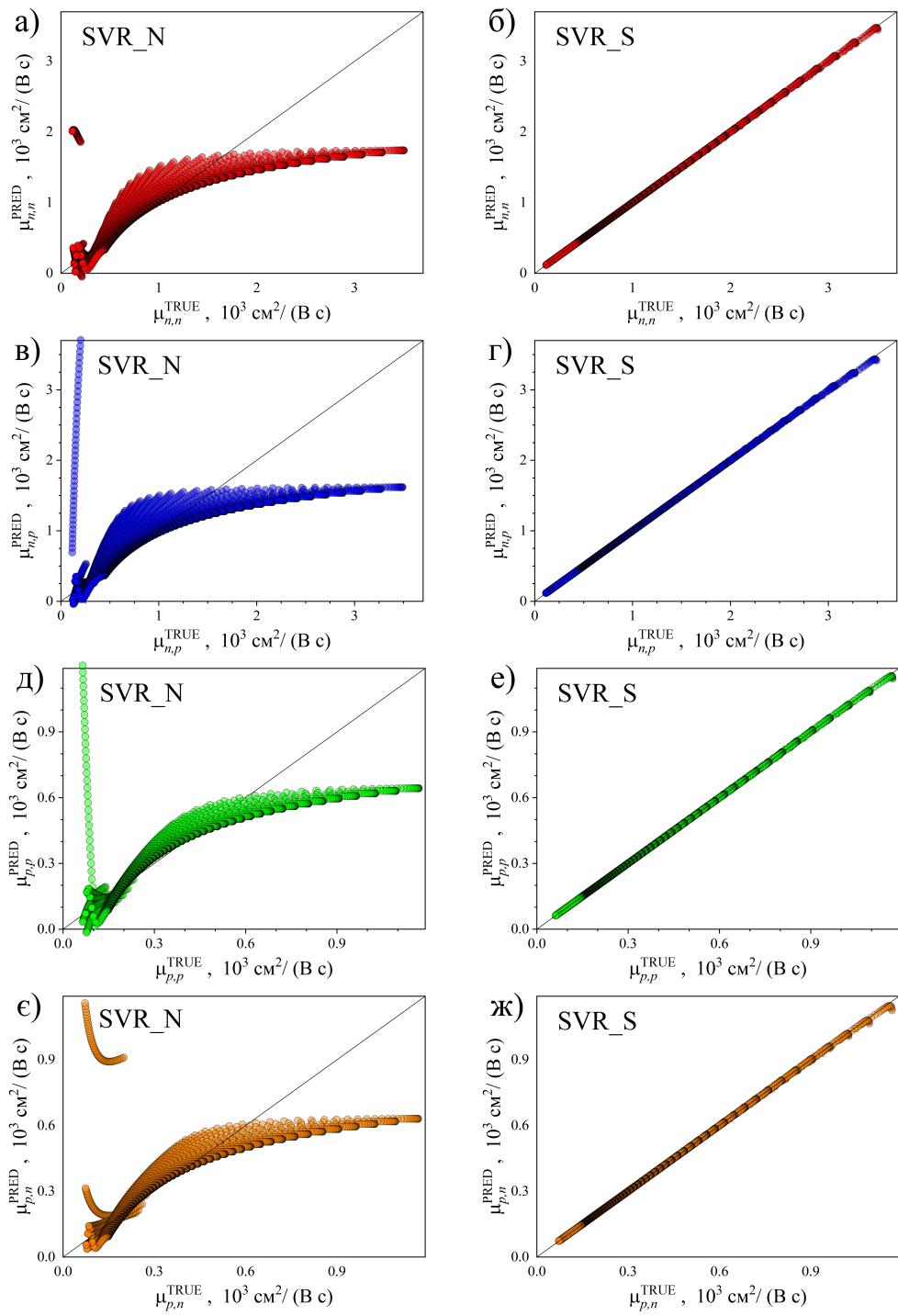
Результати застосування натренованих моделей до тестового набору ілюстровано Рис. 3.3-3.6. Як правило, відхилення зростають при збільшенні величини рухливості, причому ця тенденція спостерігається незалежно від вибраного алгоритму МН, попередньої підготовки даних чи типу носіїв заряду. Нормалізація даних фактично не впливає на точність прогнозів у випадку використання Random Forest та Gradient Boosting (див. Рис. 3.3 та Рис. 3.4), що, загалом є типовим для деревоподібних алгоритмів. У випадку глибоких нейронних мереж додаткова попередня обробка має сенс, як це можна бачити при порівнянні DNN\_S та DNN\_N мереж на Рис. 3.6. При застосуванні алгоритму SVR стандартизація даних виглядає абсолютно необхідною — див. Рис. 3.5.



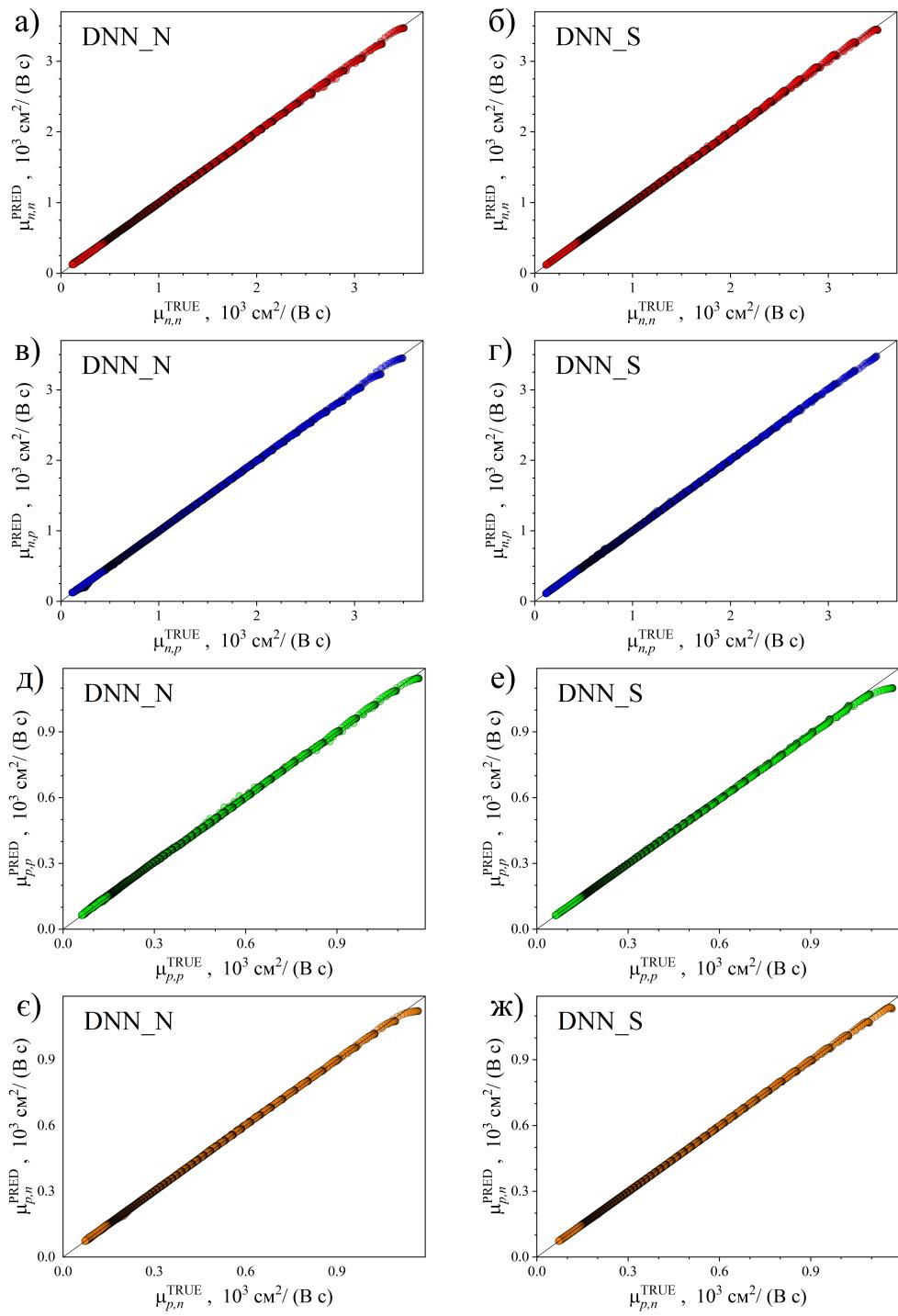
**Рис. 3.3.** Діаграми розсіювання, що порівнюють еталонні значення рухливості із значеннями, передбаченими RF моделями на тестовому наборі даних. Представлені випадки оцінки рухливості електронів (а–г) та дірок (д–ж), коли вони є основними (а, б, д, е) та неосновними (в, г, є, ж) носіями заряду. Попередня підготовка даних передбачала нормування (а, в, д, є) або нормалізацію (б, г, є, ж). Чорні прямі — лінії ідентичності для зручності порівняння.



**Рис. 3.4.** Діаграми розсіювання, що порівнюють еталонні значення рухливості із значеннями, передбаченими GB моделями на тестовому наборі даних. Представлені випадки оцінки рухливості електронів (а–г) та дірок (д–ж), коли вони є основними (а, б, д, е) та неосновними (в, г, є, ж) носіями заряду. Попередня підготовка даних передбачала нормування (а, в, д, є) або нормалізацію (б, г, є, ж). Чорні прямі — лінії ідентичності для зручності порівняння.



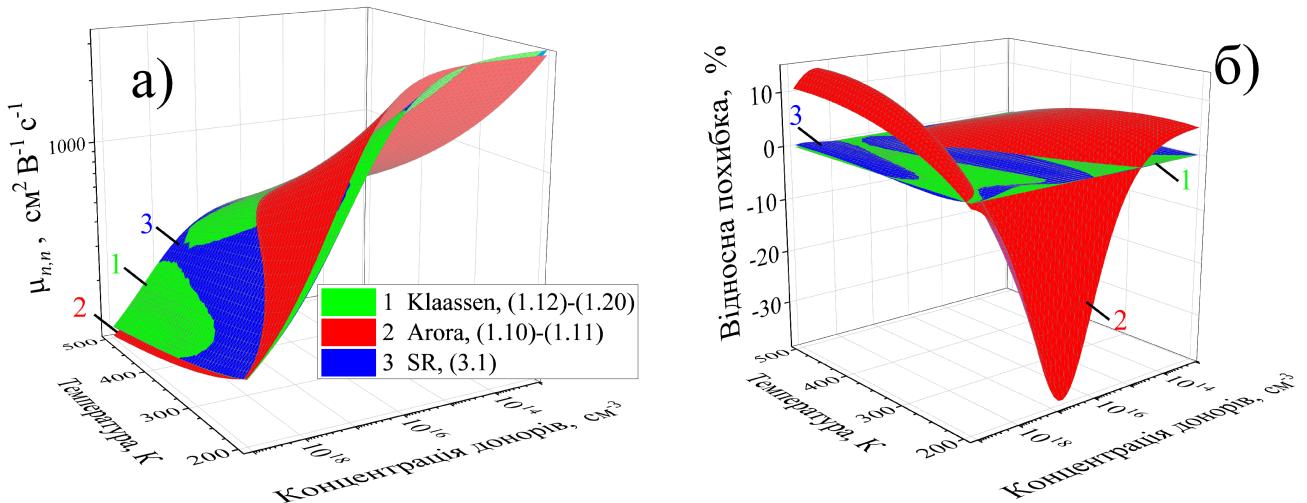
**Рис. 3.5.** Діаграми розсіювання, що порівнюють еталонні значення рухливості із значеннями, передбаченими SVR моделями на тестовому наборі даних. Представлені випадки оцінки рухливості електронів (а–г) та дірок (д–ж), коли вони є основними (а, б, д, е) та неосновними (в, г, є, ж) носіями заряду. Попередня підготовка даних передбачала нормування (а, в, д, є) або нормалізацію (б, г, є, ж). Чорні прямі — лінії ідентичності для зручності порівняння.



**Рис. 3.6.** Діаграми розсіювання, що порівнюють еталонні значення рухливості із значеннями, передбаченими DNN моделями на тестовому наборі даних. Представлені випадки оцінки рухливості електронів (а–г) та дірок (д–ж), коли вони є основними (а, б, д, е) та неосновними (в, г, є, ж) носіями заряду. Попередня підготовка даних передбачала нормування (а, в, д, є) або нормалізацію (б, г, е, ж). Чорні прямі — лінії ідентичності для зручності порівняння.

**Табл. 13.** Використані значення гіперпараметрів для DNN моделей

Модель	DNN_N				DNN_S			
Цільова величина	$\mu_{n,n}$	$\mu_{n,p}$	$\mu_{p,p}$	$\mu_{p,n}$	$\mu_{n,n}$	$\mu_{n,p}$	$\mu_{p,p}$	$\mu_{p,n}$
Гіперпараметр	Значення							
# nodes for first hidden layer	25	100	25	75	25	75	100	25
batch size	16							
activation function	SELU	ReLU	SELU	sigmoid	ReLU	sigmoid	ReLU	sigmoid
optimizer	Nadam	Adamax			Nadam	Adamax		
learning rate, $10^{-3}$	0,58	1,25	8,05	5,17	13,0	4,89	12,8	2,84
weight initializer	Xavier Normal	He Normal	Xavier Normal	He Normal		Xavier Normal		
# epoch	1000							



**Рис. 3.7.** Температурні та концентраційні залежності рухливості основних носіїв заряду у n-Si (а) та помилки розрахунків відносно теорії Klaassen. Обчислення проводилися відповідно до формул (1.12)-(1.20) (поверхня 1), (1.10)-(1.11) (поверхня 2) та (3.1) (поверхня 3).

### 3.3. Порівняння точності різних алгоритмів машинного навчання

Окрім оцінки точності передбачень величини рухливості, що отримуються при використанні різних моделей, доцільно також порівняти результати теорії Klaassen з іншими, більш спрощеними, варіантами визначення  $\mu$ . В роботі ми зосередили увагу на теорії Arora, як найбільш популярної теорії, що зустрічається в літературі, провівши розрахунки відповідно до виразів (1.10)-(1.11). На Рис. 3.7,а наведено порівняння  $\mu_{n,n}$ , обчислених за теорією Klaassen та Arora, а на Рис. 3.7,а — відносні похибки. Також для порівняння на рисунку представлені залежності, отримані при використанні аналітичного виразу, запропонованого за допомогою символичної регресії. Як видно, відхилення у випадку застосування (1.10)-(1.11) набагато більші. Приведені залежності є типовими, для  $\mu_{n,p}$ ,  $\mu_{p,p}$  та  $\mu_{p,n}$  співвідношення схожі.

Відомо, що теорія Arora не враховує розсіяння носій–носій. Тому ми також провели розрахунки, вважаючи що

$$\frac{1}{\mu^{AD}} = \frac{1}{\mu^A} + \frac{1}{\mu_{cc}}, \quad (3.7)$$

де  $\mu^A$  та  $\mu_{cc}$  описуються виразами (1.10) та (1.7), відповідно. Виявилося, що за умов, які розглядалися внесок розсіяння носій–носій надзвичайно малий: максимальні відхилення значень, отриманих відповідно до (3.7) від теорії Arora не перевищують 0,059% для  $\mu_{n,n}$ , 0,068% для  $\mu_{n,p}$ , 0,023% для  $\mu_{p,p}$  та 0,028% для  $\mu_{p,n}$ . Тобто, врахування додаткового механізму не до-

зволяє наблизити значення рухливості, що обчислюються за теорією Arora, до більш точних величин, які можуть бути отримані з використанням теорії Klaasen та запропонованих нами апроксимаційних наближень.

Значення метрик, отримані при розрахунках рухливості різними методами узагальнені в Табл. 14. Загалом, числові дані підтверджують висновки, зроблені раніше з Рис. 3.3–3.6. А саме, доцільність застосування попередньої стандартизації при використанні SVR та DNN (всі метрики для SVR\_S та DNN\_S моделей кращі, ніж для SVR\_N та DNN\_N, відповідно); несуттєва відмінність точностей RF\_S і RF\_N та GB\_S і GB\_N моделей.

Як видно з наведених даних, заміна теорії Klaassen більш простими виразами теорії Arora призводить до значно більших помилок ніж використання будь-якої з моделей машинного навчання (за виключенням SVR\_N). Серед МН моделей найгірші показники спостерігаються при використанні Gradient Boosting. Трохи кращі кількісні характеристики у випадку використання алгоритму Random Forest, але відмінності від GB досить незначні. Далі у рейтінгу точності розташовується модель DNN\_N (за виключенням максимальної помилки, яка співрозмірна з показниками попередньо згаданих моделей). Для DNN\_S практично всі показники приблизно у 1,5 рази кращі. Найкращі результати продемонстрували SVR\_S та SR моделі, причому остання переважає лише за значеннями MAPE та APE<sub>MED</sub> для кремнію з дірковою провідністю (обидва типи носіїв). Тобто SVR\_S має найкращі показники у 4 випадках з 16, решта 12 метрик кращі у SR.

**Табл. 14.** Метрики відхилень розрахованих значень рухливості у кремнії від теорії Klaassen. Жирним виділено найкращі результати для кожної метрики при передбаченнях рухливості електронів та дірок, коли вони є основними та неосновними носіями заряду

Модель	MAPE, %				APE <sub>MAX</sub> , %				APE <sub>MED</sub> , %				MAE, см <sup>2</sup> /(B · c)			
	$\mu_{n,n}$	$\mu_{n,p}$	$\mu_{p,p}$	$\mu_{p,n}$	$\mu_{n,n}$	$\mu_{n,p}$	$\mu_{p,p}$	$\mu_{p,n}$	$\mu_{n,n}$	$\mu_{n,p}$	$\mu_{p,p}$	$\mu_{p,n}$	$\mu_{n,n}$	$\mu_{n,p}$	$\mu_{p,p}$	$\mu_{p,n}$
Arora [7]	5,35	20,3	5,62	37,8	38,2	70,7	17,6	111	3,67	16,3	5,01	32,6	45,7	103	16,0	82,6
RF_N	1,29	1,69	1,52	1,47	9,33	14,5	4,60	10,9	0,805	0,994	0,264	0,913	11,0	13,5	4,50	4,76
RF_S	1,42	1,77	1,46	1,41	12,3	14,4	14,5	12,6	0,852	1,04	0,744	0,872	11,6	14,1	4,40	4,76
SVR_N	46,5	51,5	32,6	33,4	1630	1750	2070	1510	14,9	17,4	13,1	12,9	220	244	68,8	73,6
SVR_S	0,108	<b>0,087</b>	<b>0,098</b>	0,082	1,71	2,16	2,26	3,56	0,088	<b>0,064</b>	<b>0,069</b>	0,050	1,20	1,03	0,394	0,410
GB_N	2,20	1,46	1,60	1,55	58,2	10,8	17,3	11,0	1,46	0,939	0,905	1,15	15,43	10,85	4,75	5,24
GB_S	1,32	1,60	1,82	1,23	1,42	11,7	15,0	8,48	0,841	1,104	1,19	0,874	11,3	13,4	5,92	4,19
DNN_N	0,925	0,942	2,01	0,529	9,39	20,0	8,07	6,02	0,621	0,702	1,893	0,383	5,23	5,37	4,22	1,39
DNN_S	0,374	0,623	0,655	0,671	2,23	3,75	5,96	2,97	0,323	0,392	0,556	0,631	3,58	3,49	2,88	1,97
SR	<b>0,094</b>	0,137	0,140	<b>0,050</b>	<b>1,19</b>	<b>0,992</b>	<b>1,48</b>	<b>0,596</b>	<b>0,044</b>	0,077	0,079	<b>0,026</b>	<b>0,475</b>	<b>0,708</b>	<b>0,314</b>	<b>0,115</b>

Наприкінці підсумуємо переваги використання виразів (3.1)–(3.4) порівняно з іншими варіантами оцінки рухливості носіїв заряду. Порівняно з теорією Agora вони дозволяють отримати наближення до теорії Klaassen (яка вважається найбільш точним варіантом опису рухливості) з набагато меншими відхиленням. Формули (3.1)–(3.4) переважають за точністю регресійні моделі, що використовують алгоритми випадкового лісу, градієнтного бустингу та глибоких нейронних мереж. Порівняно з алгоритмом опорних векторів перевага в точності не настільки велика, але практичне використання SVR моделей (як і інших класичних підходів до вирішення регресійних задач) вимагає як самих натренованих моделей, так і використання відповідного програмного забезпечення. Такий процес не є занадто складним та критичним для реалізації, проте виглядає дещо складнішим за розрахунки за відомою формулою. Нарешті, якщо порівнювати обчислення з використанням формул (3.1)–(3.4) та (1.12)–(1.20), то варто наголосити наступне: 1) втрати точності при застосуванні (3.1)–(3.4) мінімальні: при  $T = 200 \div 500$  К та  $N_D = 10^{13} \div 10^{19}$  см $^{-3}$  приблизно для 50% можливих комбінацій параметрів похибки менші 0,044%, 0,077%, 0,079% та 0,026% при обчисленні  $\mu_{n,n}$ ,  $\mu_{n,p}$ ,  $\mu_{p,p}$  та  $\mu_{p,n}$ , відповідно; 2) запропоновані вирази містять більше ніж у двічі менше параметрів; 3) при обчисленнях за допомогою (3.1)–(3.4) не потрібно попередньо оцінювати ступінь іонізації легантів; 4) нарешті, вирази просто простіші, хоча це, звичайно, не є критичним при сучасному розвитку комп’ютерної техніки.

Таким чином, незважаючи на певні обмеження у застосуванні (об’ємний кристалічний нескомпенсований кремній легований бором або фосфором (хоча останнє обмеження є суттєвим лише у достатньо вузькому температурному діапазоні), температура  $200 \div 500$  К, ступінь легування  $10^{13} \div 10^{19}$  см $^{-3}$ ) запропоновані вирази мають значні перспективи для практичного використання.

## **Висновки**

1. Проведено розрахунки рухливості основних та неосновних носіїв заряду у монокристалічному кремнії відповідно до теорії Klaassen, теорії Arora та теорії Agora з врахуванням розсіяння носій-носій відповідно до теорії Dorkel та порівняно точність отриманих величин.
2. Розроблено та налаштовано моделі машинного навчання для оцінки рухливості електронів та дірок у n-Si та p-Si з використанням алгоритмів випадкового лісу, градієнтного бустинга, опорних векторів, глибоких нейронних мереж та символної регресії; проведено порівняння точності прогнозів вказаних моделей у порівнянні з теорією Klaassen та показано доцільність застосування підходів Support Vector Regression та Deep Neural Network з попередньою стандартизацією вхідних даних, а також Symbolic Regression.
3. Запропоновано аналітичні вирази для опису рухливості електронів та дірок у монокристалічному кремнії для діапазону температур 200–500 К та діапазону концентрації легуючої домішки (бор або фосфор)  $10^{13} – 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ; показано, що середня відносна похибка запропонованих виразів від теорії Klaassen не перевищує 0,14%, а абсолютна —  $0,71 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ ; водночас вирази містять суттєво меншу кількість параметрів та більш зручні для використання.

## Список використаних джерел

- [1] *Seeger, Karlheinz.* Semiconductor Physics. An Introduction / Karlheinz Seeger. Advanced Texts in Physics. — 9 edition. — Springer Berlin, Heidelberg, 2004. — Jun.
- [2] *Fletcher, Neville H.* The High Current Limit for Semiconductor Junction Devices / Neville H. Fletcher // Proc. IRE. — 1957. — Vol. 45, no. 6. — Pp. 862–872.
- [3] *Choo, Seok Cheow.* Theory of a forward-biased diffused-junction P-L-N rectifier—Part I: Exact numerical solutions / Seok Cheow Choo // IEEE Trans. Electron Devices. — 1972. — Vol. 19, no. 8. — Pp. 954–966.
- [4] *Dorkel, J.M.* Carrier mobilities in silicon semi-empirically related to temperature, doping and injection level / J.M. Dorkel, Ph. Leturcq // Solid-State Electron. — 1981. — Vol. 24, no. 9. — Pp. 821–825.
- [5] *Caughey, D.M.* Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field / D.M. Caughey, R.E. Thomas // Proc. IEEE. — 1967. — Vol. 55, no. 12. — Pp. 2192–2193.
- [6] *Masetti, G.* Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-, phosphorus-, and boron-doped silicon / G. Masetti, M. Severi, S. Solmi // IEEE Trans. Electron Devices. — 1983. — Vol. 30, no. 7. — Pp. 764–769.
- [7] *Arora, N.D.* Electron and hole mobilities in silicon as a function of concentration and temperature / N.D. Arora, J.R. Hauser, D.J. Roulston // IEEE Trans. Electron Devices. — 1982. — Vol. 29, no. 2. — Pp. 292–295.
- [8] *Swirhun, S.E.* Measurement of electron lifetime, electron mobility and band-gap narrowing in heavily doped p-type silicon / S.E. Swirhun, Y.-H. Kwark, R.M. Swanson // 1986 International Electron Devices Meeting. — 1986. — Pp. 24–27.
- [9] *del Alamo, J.* Simultaneous measurement of hole lifetime, hole mobility and bandgap narrowing in heavily doped n-type silicon / J. del Alamo, S. Swirhun, R.M. Swanson // 1985 International Electron Devices Meeting. — 1985. — Pp. 290–293.
- [10] *Klaassen, D.B.M.* A unified mobility model for device simulation — I. Model equations and concentration dependence / D.B.M. Klaassen // Solid-State Electron. — 1992. — Jul. — Vol. 35, no. 7. — Pp. 953–959.
- [11] Mobility Modeling Considerations for Radiation Effects Simulations in Silicon / Daniel J. Cummings, Arthur F. Witulski, Hyunwoo Park et al. // IEEE Trans. Nucl. Sci. — 2010. — Vol. 57, no. 4. — Pp. 2318–2326.
- [12] Temperature, electric field, and doping dependent mobilities of electrons and holes in semiconductors / S. Noor Mohammad, Andrew V. Bemis, Ronald L. Carter, Robert B. Renbeck // Solid-State Electron. — 1993. — Vol. 36, no. 12. — Pp. 1677–1683.
- [13] *Couderc, Romain.* Reassessment of the intrinsic carrier density temperature dependence in crystalline silicon / Romain Couderc, Mohamed Amara, Mustapha Lemiti // J. Appl. Phys. — 2014. — Mar. — Vol. 115, no. 9. — P. 093705.

- [14] *Pässler, Roland*. Dispersion-related description of temperature dependencies of band gaps in semiconductors / Roland Pässler // *Phys. Rev. B*. — 2002. — Aug. — Vol. 66. — P. 085201.
- [15] *Bednarczyk, D*. The approximation of the Fermi-Dirac integral F12 / D. Bednarczyk, J. Bednarczyk // *Phys. Lett. A*. — 1978. — Vol. 64, no. 4. — Pp. 409–410.
- [16] *Angelis, Dimitrios*. Artificial Intelligence in Physical Sciences: Symbolic Regression Trends and Perspectives / Dimitrios Angelis, Filippos Sofos, Theodoros E. Karakasidis // *Arch. Comput. Methods Eng.* — 2023. — Jul. — Vol. 30, no. 6. — Pp. 3845–3865.
- [17] *Breiman, Leo*. Random Forests / Leo Breiman // *Mach. Learn.* — 2001. — Oct. — Vol. 45, no. 1. — Pp. 5–32.
- [18] *Natekin, Alexey*. Gradient boosting machines, a tutorial / Alexey Natekin, Alois Knoll // *Front. Neurorob.* — 2013. — Vol. 7.
- [19] *Cao, Weidong*. Parameter Optimization of Support Vector Regression Using Henry Gas Solubility Optimization Algorithm / Weidong Cao, Xin Liu, Jianjun Ni // *IEEE Access*. — 2020. — Vol. 8. — Pp. 88633–88642.
- [20] Machine-Learning Accelerating the Development of Perovskite Photovoltaics / Tiantian Liu, Sen Wang, Yinguang Shi et al. // *Sol. RRL*. — 2023. — Vol. 7, no. 23. — P. 2300650.
- [21] Enhancing Solar Forecasting Accuracy with Sequential Deep Artificial Neural Network and Hybrid Random Forest and Gradient Boosting Models across Varied Terrains / Muhammad Farhan Hanif, Muhammad Umar Siddique, Jicang Si et al. // *Advanced Theory and Simulations*. — 2024. — Vol. 7, no. 7. — P. 2301289.
- [22] Optuna: A Next-generation Hyperparameter Optimization Framework / Takuya Akiba, Shotaro Sano, Toshihiko Yanase et al. // Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining. — KDD '19. — New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 2019. — P. 2623–2631.