#### 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

$$\mu = \frac{e\tau_p}{m_\sigma} \,, \tag{1.1}$$

де e — елементарний заряд,  $au_p$  — 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 виділяють розсіяння на коливаннях ґратки (акустичних та оптичних 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:

$$\mu^{-1} = \sum_{i} \mu_i^{-1} \,, \tag{1.2}$$

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]:

$$\mu_{\rm I} = \frac{3,68 \cdot 10^{20} \,{\rm cm}^{-3}}{N_{\rm I} Z^2} \left(\frac{\varepsilon}{16}\right)^2 \left(\frac{T}{100 \,{\rm K}}\right)^{1,5} \frac{\left(m_0/m\right)^{0,5}}{\left[\lg(1+\beta_{\rm BH}^2) - \frac{0,434\beta_{\rm BH}^2}{1+\beta_{\rm BH}^2}\right]},$$
(1.3)

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

$$\beta_{\rm BH} = \left(\frac{\varepsilon}{16}\right)^{0.5} \frac{T}{100 \,\text{K}} \left(\frac{m}{m_0}\right)^{0.5} \left(\frac{2,08 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}}{n_c}\right)^{0.5} , \qquad (1.4)$$

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

$$\mu_{\rm I} = \frac{3,68 \cdot 10^{20} \,{\rm cm}^{-3}}{N_{\rm I} Z^2} \left(\frac{\varepsilon}{16}\right)^2 \left(\frac{T}{100 \,{\rm K}}\right)^{1,5} \frac{\left(m_0/m\right)^{0,5}}{\lg\left(1 + \beta_{\rm CW}^2\right)},$$

$$\beta_{\rm CW} = \frac{1}{Z} \frac{\varepsilon}{16} \frac{T}{100 \,{\rm K}} \left(\frac{2,35 \cdot 10^{19} \,{\rm cm}^{-3}}{N_{\rm I}}\right)^{1/3}.$$
(1.5)

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

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

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  $T_{ref}^{Fl}=300~{\rm K},~F_1=1,04\cdot 10^{21}~{\rm cm}^{-1}{\rm B}^{-1}{\rm c}^{-1},~F_2=7,45\cdot 10^{12}~{\rm cm}^2$  і тоді вираз (1.6) перетворюється на наступний

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

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]:

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

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

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

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

боку, формула (1.8) не дозволяє оцінити рухливості неосновних носіїв та не враховує температурну залежність  $\mu$ .

Модифікований варіант такого підходу був запропонований Masetti [6]:

$$\mu_{n} = \mu_{0} + \frac{\mu_{\max} - \mu_{0}}{1 + \left(\frac{n}{C_{r}}\right)^{a}} - \frac{\mu_{1}}{1 + \left(\frac{C_{s}}{n}\right)^{b}},$$

$$\mu_{p} = \mu_{0} \exp\left(-\frac{p_{c}}{p}\right) + \frac{\mu_{\max}}{1 + \left(\frac{p}{C_{r}}\right)^{a}} - \frac{\mu_{1}}{1 + \left(\frac{C_{s}}{p}\right)^{b}}.$$
(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 Маsetti 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

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

де  $N = N_a^- + N_d^+$  — 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 темпе-

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

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

ратури схожим чином:

$$\mu_{\min} = \mu_{\min}^{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{\beta_1},$$

$$\mu_0 = \mu_0^{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{\beta_2},$$

$$N_0 = N_0^{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{\beta_3},$$

$$\alpha = \alpha^{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{\beta_4}.$$

$$(1.11)$$

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) поширюють 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

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

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

[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:

$$\mu = \frac{\mu_L \,\mu_{DA}}{\mu_L + \mu_{DA}} \,, \tag{1.12}$$

де

$$\mu_{L} = \mu_{\text{max}} \left(\frac{300}{T}\right)^{2,25}$$

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

$$+ \frac{\mu_{\text{max}} \mu_{\text{min}}}{\mu_{\text{max}} - \mu_{\text{min}}} \cdot \frac{n + p}{N_{\text{eff}}} \cdot \left(\frac{300}{T}\right)^{0,5}$$
(1.14)

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

електрони: 
$$N_{sc} = N_d^+ + N_q^- + p$$
, (1.15a)

дірки: 
$$N_{sc} = N_a^- + N_d^+ + n$$
, (1.156)

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

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

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

дірки: 
$$N_{\text{eff}} = N_a^- + N_d^+ \cdot G_p(P_p, T) + \frac{n}{F_n(P_p, T)}$$
. (1.166)

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

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

$$G_p = 1 - \frac{S_1}{\left[S_2 + \left(\frac{m_0}{m_h} \frac{T}{300}\right)^{S_4} P_p\right]^{S_3}} + \frac{S_5}{\left[\left(\frac{m_h}{m_0} \frac{300}{T}\right)^{S_7} P_p\right]^{S_6}}, \quad (1.176)$$

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

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

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

$$(1.20a)$$

$$Z_n = 1 + \frac{1}{0,21 + \left(\frac{4\cdot10^{20}}{N_d^+}\right)^2}; \quad Z_p = 1 + \frac{1}{0,5 + \left(\frac{7,2\cdot10^{20}}{N_a^-}\right)^2},$$
 (1.206)

$$P_{bn} = \frac{3.83}{\frac{1,36 \cdot 10^{26}}{N_d^+ + p} \left(\frac{T}{300}\right)^2 \frac{m_e}{m_0}}; \quad P_{bn} = \frac{3.83}{\frac{1,36 \cdot 10^{26}}{N_a^- + n} \left(\frac{T}{300}\right)^2 \frac{m_h}{m_0}}.$$
 (1.20a)

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:

$$T \in [200, 500] \,\mathrm{K}; \quad N_D \in [10^{13}, 10^{19}] \,\mathrm{cm}^{-3} \,.$$
 (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  $10^{13}$  см $^{-3}$  до  $10^{19}$  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 окремі 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

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

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

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:

$$N_d^+ = N_d \left( 1 - \frac{1}{1 + 0.5 \exp\left[\frac{E_F - E_d}{kT}\right]} \right),$$
 (2.4)

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

$$n = p + N_d^+ \,, \tag{2.5}$$

при цьому вважалося, що

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

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

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 р-Si розрахунки проводилися аналогічно.

І для електронного, і для діркового напівпровідника вважалося, що енергія активації легуючої домішки складає 45 меВ. 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.

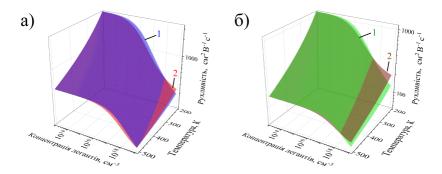


Рис. 2.1. Залежності рухливості електронів (а) та дірок (б) у випадку, коли вони є основними (поверхні 1) та неосновними (поверхні 2) носіями заряду від температури та концентрації легуючої домішки. Розрахунки виконані відповідно до теорії Klaassen.

#### 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 є інтерпретованим, які можна дешевше оцінити порівняно з класичними моделями МН та легше інтегрувати у вирішення різноманітних фізичних проблем.

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

SR може призвести 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 забороняти 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 ехр. Також було заборонено комплексність (складність) показника експоненти вище 3 та показника функції  $x^y$  вище 5.

#### 2.3. Класичні регресійні моделі

Random Forest (RF) improves predictive accuracy by training multiple decision trees on different subsets of the dataset. RF aggregates predictions from all trees using majority voting for classification or averaging for regression, reducing overfitting and increasing robustness to noise [17].

Gradient Boosting (GB) combines multiple weak learners, typically decision trees, to improve predictive performance. It sequentially adds predictors, with each new model correcting the errors of its predecessor, thereby enhancing overall accuracy. The final prediction is obtained by aggregating forecasts, usually through a weighted sum [18].

Support Vector Regression (SVR) finds a hyperplane that maximizes the margin while minimizing errors within a specified tolerance. It maps input data into a high-dimensional feature space using kernel functions, effectively capturing nonlinear relationships [19].

Deep Neural Network (DNN) comprises multiple layers of interconnected neurons that process input data through successive nonlinear transformations [20].

## 2.4. Метрики оцінювання

# 3. Отримані результати

- 3.1. Моделі опису рухливості
- 3.2. Порівняння точності різних алгоритмів машинного навчання

# Висновки

# 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.