



# Х УКРАЇНСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ З ФІЗИКИ НАПІВПРОВІДНИКІВ УНКФН–10

## ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ



**Національна академія наук України**  
**Міністерство освіти та науки України**  
**Наукова рада з проблеми «Фізика напівпровідників**  
**і діелектриків» при Відділенні фізики і астрономії**  
**Національної академії наук України**  
**Українське фізичне товариство**  
**Академія наук вищої школи України**  
**Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України**  
**Ужгородський національний університет**  
**Інститут електронної фізики НАН України**

*Конференція присвячена 100-річчю  
з дня народження проф. П.І. Баранського і  
75-річчю з дня заснування фізико-математичного факультету УжНУ.*

**X УКРАЇНСЬКА НАУКОВА  
КОНФЕРЕНЦІЯ З ФІЗИКИ  
НАПІВПРОВІДНИКІВ  
УНКФН–10**

**X UKRAINIAN SCIENTIFIC  
CONFERENCE ON PHYSICS  
OF SEMICONDUCTORS  
(USCPS-10)**

**ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ  
ABSTRACTS**

**Ужгород, Україна  
26 - 30 травня 2025**

**Uzhhorod, Ukraine  
May 26-30, 2025**

# Застосування алгоритмів машинного навчання до обчислення рухливості носіїв заряду у кремнії

Олег Оліх, Іван Куш

<sup>1</sup> Київський національний університет імені Тараса Шевченка,  
Україна, 01601, місто Київ, вул. Володимирська, 64/13  
olegolikh@knu.ua

Методи машинного навчання (МН) все ширше застосовуються у різноманітних галузях фізики, дозволяючи, прискорювати пошук матеріалів із заданими властивостями, полегшувати обробку вимірювань чи оптимізувати розрахунки, наприклад завдяки використанню спеціалізованих міжатомних потенціалів [1]. Проте підхід, коли МН є чорною скринькою, що отримує на вхід дані та робить передбачення без обґрунтування результатів поступово перестає задовольняти. Одним із варіантів інтерпретованого МН є Symbolic Regression [2] (SR), який дозволяє отримати математичний вираз, що прозоро поєднує вхідні та вихідні параметри.

У роботі застосовувався підхід SR до задачі оцінки рухливості  $\mu$  носіїв заряду у кремнії. Завдання обчислення  $\mu$  за певних температури та концентрації легуючої домішки є достатньо поширеним у фізиці напівпровідників, зокрема при моделюванні сонячних елементів. Незважаючи на можливість використання перших принципів для відповідних розрахунків, більш зручним є використання наближених виразів, які враховують особливості розсіяння електронів та дірок у тому чи іншому матеріалі. Для кремнію найбільш точним вважається підхід Klaassen [3]. Проте в цьому випадку передбачається використання близько 20 констант і тому на практиці часто застосовується більш простіший, проте менш точний підхід, запропонований Aroga [4].

Використовуючи як тренувальний набір значення, розраховані відповідно до теорії Klaassen [3], були отримані апроксимуючі вирази, що описуються рухливістю електронів та дірок коли вони є як основними, так і неосновними носіями:

$$\mu_{n,n} = \frac{N_{d,n} + 1413,197}{T_n^{2,2508} + \frac{\left(\frac{N_{d,n}}{0,872766T_n + 0,0728199}\right)^{0,721} (0,2152N_{d,n}^{0,58024} + 10,496T_n - 1,34188)}{0,2152N_{d,n}^{0,58024} + 10,496T_n + \left(\frac{N_{d,n}}{0,872766T_n + 0,072819895}\right)^{0,721} - 1,34188}} \quad (1)$$

$$\mu_{p,p} = N_{d,n}^{0,4486} + \frac{469,99396}{T_n^{2,25048} + \frac{1,5324200358 N_{d,n}^{0,9256572} T_n \left(\frac{1}{T_n}\right)^{0,754558}}{2,6517315 N_{d,n}^{0,1669551} T_n + 0,57789411779 N_{d,n}^{0,7587021} \left(\frac{1}{T_n}\right)^{0,754558}}} \quad (2)$$

$$\mu_{n,p} = 26,318 \left( \frac{N_{d,n}}{N_{d,n} + 191,785} \right)^{0,622} + \frac{1412,3245}{T_n^{2,2496} + \frac{10,953 N_{d,n}^{0,10296} T_n \left( \frac{N_{d,n}}{T_n + 0,7073} \right)^{0,7162}}{5,699 N_{d,n}^{0,10296} T_n + 1,922 \left( \frac{N_{d,n}}{T_n + 0,7073} \right)^{0,7162}}}$$

(3)

$$\mu_{p,n} = \frac{0,02258 N_{d,n} \log T_n}{\log T_n + 0,62785} + \frac{113.56397}{\left( 0,1562 T_n^{2,9406} + \left( \frac{N_{d,n}^{0,60845} T_n^{1,14302}}{1,1508 N_{d,n}^{0,60845} + 4,2095 T_n^{1,14302}} \right)^{1,1768} \right)^{0,7655}} \quad (4)$$

де перший нижній індекс визначає тип носіїв, другий – тип провідності кристалу,  $T_n$  та  $N_{d,n}$  – нормовані температура та концентрація легуючої домішки:  $T_n = T / 300$ ,  $N_{d,n} = N_d / 10^{17}$ . Вирази (1)-(4) справедливі для невідродженого Si з концентрацією легуючої домішки  $10^{13}$ - $10^{19}$  см<sup>-3</sup> для температурного інтервалу 200-500 К.

Крім того, були побудовані стандартні регресійні моделі, призначені для оцінки рухливості на основі значень температури та ступеня легування, які базуються на використанні алгоритмів Random Forest (RF), Gradient Boosting (GB), Support Vector Regression (SVR), Deep Neural Network (DNN). Отримані значення метрик точності (mean absolute percentage error MAPE; максимальна величина відносної похибки  $APE_{\max}$  та mean absolute error MAE) різних підходів представлені у Табл. Як видно, запропоновані вирази перевищують за точнісними показниками не лише класичний підхід Arora, але й інші алгоритми МН.

Табл. Метрики відхилень розрахованих значень рухливості у кремнії від теорії Klaassen

Метод обчислень	MAPE, %				APE <sub>max</sub> , %				MAE, cm <sup>2</sup> /V s			
	$n_n$	$n_p$	$p_p$	$p_n$	$n_n$	$n_p$	$p_p$	$p_n$	$n_n$	$n_p$	$p_p$	$p_n$
Arora [4]	5.35	20.3	5.62	37.8	38.2	70.7	17.6	111	45.7	103	16	82.6
RF	1.42	1.77	1.46	1.41	12.3	14.4	14.5	12.6	11.6	14.1	4.40	4.76
SVR	0.108	<b>0.087</b>	<b>0.098</b>	0.082	1.71	2.16	2.26	3.56	1.20	1.03	0.394	0.410
GB	1.32	1.60	1.82	1.23	1.42	11.7	15.0	8.48	11.3	13.4	5.92	4.19
DNN	0.374	0.623	0.655	0.671	2.23	3.75	5.96	2.97	3.58	3.49	2.88	1.97
Eqs.(1)-(4)	<b>0.094</b>	0.141	0.140	<b>0.049</b>	<b>1.19</b>	<b>1.05</b>	<b>1.48</b>	<b>0.61</b>	<b>0.475</b>	<b>0.764</b>	<b>0.313</b>	<b>0.119</b>

О.О. висловлює подяку за фінансову підтримку роботи Національному фонду досліджень України (проект № 2023.05/0024).

- [1] L. Yu, K. Dong, Q. Yang *et al.* Appl. Phys. Lett. **125**, 213101 (2024)  
[2] D. Angelis *et al.* Arch. Comput. Meth. Eng. **30**, 3845 (2023)  
[3] D. Klaassen. Solid-State Electron. **35**, 953 (1992)  
[4] N. Arora *et al.* IEEE Trans. Electron Devices, **29**, 292 (1982)