

О.Я. ОЛІХ

Київський національний університет імені Тараса Шевченка
(Вул. Володимирська, 64/13, Київ 01601; e-mail: olegolikh@knu.ua)

УДК 004.932:537.311:
621.382.21

ЗАСТОСУВАННЯ МОДЕЛЕЙ МАШИННОГО НАВЧАННЯ ДЛЯ ЕФЕКТИВНОЇ ОЦІНКИ РУХЛИВОСТІ НОСІЇВ У КРЕМНІЇ

У роботі досліджено застосування моделей машинного навчання (RF, GB, SVR, DNN) і символічної регресії (SR) для оцінки рухливості носіїв у монокристалічному кремнії ($T = 200\text{--}500\text{ K}$, $N_D = 10^{13}\text{--}10^{19}\text{ см}^{-3}$). Отримані за допомогою SR компактні аналітичні вирази мають удвічі менше параметрів порівняно з моделлю Клаассена і не потребують попереднього розрахунку іонізації домішок, забезпечуючи водночас відносну похибку меншу за 0,1% для більшості випадків. Порівняльний аналіз показав, що моделі SR і SVR суттєво кращі за наближення Арора за точністю, особливо для неосновних носіїв. Запропонований підхід є перспективним для TCAD-систем, оскільки дає змогу значно зменшити обчислювальні витрати при збереженні високої достовірності моделювання.

Ключові слова: рухливість носіїв, кремній, модель Клаассена, символічна регресія, машинне навчання.

1. Вступ

Рухливість носіїв заряду є одним із ключових транспортних параметрів напівпровідників, що безпосередньо визначає ефективність перенесення електричного струму під дією зовнішнього електричного поля. Кількісно рухливість μ пов'язує дрейфову швидкість носіїв із напруженістю поля та за фіксованої концентрації носіїв саме ця величина визначає рівень провідності матеріалу та його придатність для використання в активних елементах електроніки. У фізичному сенсі рухливість є містком між мікроскопічними механізмами розсіяння носіїв і макроскопічними електрофізичними характеристиками. З прикладної точки

зору рухливість визначає швидкодію та енергетичну ефективність електронних компонентів, впливає на дифузійну довжину носіїв і тому є критичним параметром для польових транзисторів, сонячних елементів, світлодіодів тощо. Зокрема аналіз механізмів, що обмежують рухливість, дає змогу ідентифікувати домінуючі канали розсіяння та оптимізувати технологічні параметри вирощування й обробки матеріалів.

Крім того, рухливість є фундаментальним параметром для моделювання транспортних процесів у напівпровідникових структурах і можливість її оцінювання залежно від температури, концентрації домішок і напруженості електричного поля є необхідною умовою для адекватного прогнозування характеристик приладів включно з деградаційними ефектами. Рухливість необхідно знати (мати можливість оцінити), коли під час інтерпретації експериментальних даних потрібно розділити вплив концентрації та розсіяння, обробити результати вимірювань ефекту Голла, магнітоопору, частотної залежності ємності або провідності; вста-

Цитування: Оліх О.Я. Застосування моделей машинного навчання для ефективної оцінки рухливості носіїв у кремнії. *Укр. фіз. журн.* **71**, №8, 686 (2026).

© Видавець ВД "Академперіодика" НАН України, 2026. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

новити, домінуючий механізм розсіювання, що надзвичайно важливо при розробці нових матеріалів, наноструктур або радіаційно-стійких систем.

Найбільш загальний підхід до розрахунку величини μ базується на розв'язанні кінетичного рівняння Больцмана з урахуванням реальної зонної структури напівпровідника. Такий шлях, зокрема, передбачає розрахунок інтегралу зіткнень, який враховує всі наявні механізми розсіювання носіїв (на фонах різного типу, іонізованих і нейтральних домішках, дислокаціях, границях зерен, інших носіях, поверхнях тощо). Зрозуміло, що подібний підхід є достатньо складним і далеко не завжди виправданим з точки зору докладених зусиль, що зумовлює застосування різних наближень. Зокрема у наближенні часу релаксації припускається експоненційна релаксація до рівноваги, що дає змогу замінити інтеграл зіткнень простим виразом з використанням характерного часу. Якщо розглядати ізотропний напівпровідник з параболічними зонами та вважати, що час релаксації не залежить від енергії, то [1]

$$\mu = \frac{e\tau_p}{m_\sigma}, \quad (1)$$

де e – елементарний заряд, τ_p – час релаксації імпульсу носія, m_σ – ефективна маса електропровідності. У випадку, коли різні процеси розсіювання статистично незалежні, може бути застосоване правило Матіссена [2]

$$\mu^{-1} = \sum_i \mu_i^{-1}, \quad (2)$$

де μ_i – рухливість носіїв за наявності лише i -го механізму розсіювання.

Для переважної більшості механізмів розсіювання вирази для оцінки рухливості відомі. Наприклад, для опису розсіювання на іонізованих домішках нерідко використовуються формули Брукса–Геррінга або Конвелла–Вайскопфа [1, 3, 4], а для випадку розсіювання носіїв–носій застосовується підхід, розвинутий Флетчером [5, 6] – див. Додаток А. Проте в більшості випадків підхід до оцінки рухливості, який ґрунтується на застосуванні правила Матіссена й набору “одномеханізових” формул, не є практично застосовним, оскільки для точного опису реального матеріалу необхідно враховувати значну кількість механізмів, які, до того ж,

модифікуються залежно від того, який саме носій (електрон чи дірка) розглядається та яку функцію (основного чи неосновного носія) він виконує. Як наслідок, більшого поширення набув підхід до оцінки величини μ , що передбачає застосування апроксимаційної функції. Таку функцію зазвичай будують на основі експериментальних даних, а її аналітичний вигляд і набір параметрів визначаються властивостями конкретного матеріалу.

Для монокристалічного кремнію (випадок слабких полів та об'ємного напівпровідника без урахування впливу поверхні) одним з перших подібних наближень був вираз, запропонований Коугі й Томасом [7, 8]. Припускалося, що відмінності між рухливостями електронів і дірок враховуються через різні значення параметрів у межах однієї й тієї самої аналітичної залежності – див. Додаток Б. Формула Коугі–Томаса насамперед призначена для оцінки залежності рухливості основних носіїв від концентрації легувальної домішки поблизу 300 К, проте не дає можливості оцінити рухливості неосновних носіїв та не враховує температурну залежність μ , а отже має обмежене застосування. У модифікованому варіанті Масетті передбачено застосування різних виразів для опису рухливості електронів і дірок (формули (Б.2)), і залежності від конкретних легувальних атомів [9, 10]. Теорія Масетті краще описує експериментальні дані, ніж підхід Коугі–Томаса, проте так само не дає змоги отримати інформацію для неосновних носіїв і температур, відрізняючись від кімнатної. Спробу врахувати температурні залежності здійснили Н. Арора зі співавторами [11]. У цій роботі проаналізовано розсіювання на фонах та іонізованих домішках, а для опису концентраційної залежності рухливості використано узагальнений вираз Коугі–Томаса, аналітична форма якого є однаковою для електронів і дірок (формули (Б.3)–(Б.4)).

Проте найкращу узгодженість з експериментальними даними забезпечує підхід до оцінювання рухливості, розроблений Клаассеном [12], відомий у літературі як модель Philips Unified і який реалізовано в сучасних пакетах Sentaurus і Silvaco. У межах цього підходу визначальними механізмами вважають розсіювання на коливаннях ґратки, іонізованих домішках та інших носіях заряду. Розрахунок рухливості виконують за допомогою співвідношень, окремо сформульованих для електронів

і дірок, а також для основних і неосновних носіїв. Формули є багатокомпонентними (структурно розгалуженими) і містять понад двадцять параметрів – див. Додаток В. 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 Арори (Б.3)–(Б.4), попри його меншу точність. Зауважимо, що в оригінальній роботі [11] вирази отримані й визначені значення констант на основі аналізу експериментальних даних щодо рухливості основних носіїв за різних значень температури й ступеня легування. Нерідко формули поширюють і на випадок неосновних носіїв, використовуючи значення констант (табл. Б3), отримані в роботах [13] (електрони) і [14] (дірки). Проте у вказаних роботах наведено дані лише для однієї температури й тому поширення виразів на широкий температурний діапазон потребує обережності.

Зазначимо, що питання опису рухливості продовжує привертати увагу й періодично з'являються нові моделі. Одні з них уточнюють підходи до опису розсіювання відповідно до певного механізму [15] або в структурах з обмеженою розмірністю [16, 17], інші пропонують універсальні вирази, які дають змогу врахувати додаткові механізми розсіювання завдяки модифікації наявних моделей [18–20], використовують апроксимаційні поліноми [21], чи базуються на перших принципах [2, 22].

Як і для більшості аспектів фізики напівпровідників [23], задача вивчення рухливості носіїв заряду останнім часом часто розв'язується із застосуванням методів машинного навчання (МН), серед яких можна виокремити кілька ключових напрямів. По-перше, використання обчислювально ефективних сурогатних моделей дає змогу суттєво спростити ресурсомісткі розрахунки процесів перенесення з перших принципів або розв'язання рівняння Больцмана; зокрема застосовують глибокі [24] і фізично інформовані нейронні мережі [25, 26], причому в останньому випадку структура диференціальних рівнянь безпосередньо інтегрується в процес навчання. По-друге, точне визначення рухливості є не менш складним завданням, ніж її моделювання, у зв'язку з чим запропоновано ряд МН-підходів для аналізу результатів вимірювань [27] і вдосконалення процедур їхнього проведення [28]. По-третє, підхід перенесення знань дає змогу залучати великий масив даних щодо до-

бре досліджених об'ємних матеріалів (наприклад, кремнію) для прогнозування властивостей нових систем, зокрема двовимірних кристалів [29], для яких обчислення рухливості з перших принципів є надзвичайно складним. Нарешті, розробляються МН-моделі, спрямовані на передбачення рухливості [30–35] на основі набору фізичних дескрипторів (симетрія ґратки, об'ємна геометрія молекул, кількість валентних електронів, константа електрон-фононої взаємодії, ширина забороненої зони тощо). Останній варіант відповідає поширеному підходу до моделювання й оптимізації різноманітних напівпровідникових матеріалів і пристроїв [36–38].

Метою даної роботи є створення регресійних МН моделей, здатних забезпечити оцінку рухливості носіїв заряду у монокристалічному кремнії залежно від температури T і концентрації легувальної домішки N_D . Такі моделі поєднують простоту обчислень, характерну для підходу Арори, з високою точністю передбачень, що є основною перевагою моделі Клаассена. Запропонований підхід може бути адаптований до конкретного набору експериментальних даних або до результатів фундаментальних розрахунків, наприклад, у рамках розв'язання рівняння Больцмана.

Крім того, використання алгоритму символічної регресії дало змогу отримати суттєво простіші аналітичні вирази для опису рухливості, ніж це передбачено в моделі Philips, зберігаючи водночас фізично коректну поведінку залежностей у широкому діапазоні температур і концентрацій. Подібний підхід має низку переваг. По-перше, формування єдиного уніфікованого опису рухливості без необхідності явного комбінування окремих механізмів розсіювання через правило Маттісена спрощує алгоритмічну реалізацію в пакетах типу TCAD і зменшує ризик накопичення похибок у разі переходу між різними режимами легування або температур. По-друге, компактна аналітична форма істотно зменшує обчислювальні витрати у багатовимірних чисельних симуляціях, коли рухливість обчислюється в кожному вузлі сітки на кожному кроці ітераційного процесу. По-третє, отримані вирази для рухливості залежать лише від двох параметрів (T і N_D) та є аналітично диференційовними, що дає змогу чисельно розв'язати рівняння переносу, забезпечити стабільність і збіжність ітераційних алгоритмів, отримати коректні похідні транспортних коефіцієнтів, полегшити отри-

мання спрощених фізичних моделей для швидкого інженерного аналізу; зменшити похибки, пов'язані з чисельним диференціюванням, і підвищити ефективність градієнтних методів у задачах параметричної оптимізації технологічних параметрів. Отже, використання машинного навчання регресією дає можливість досягти компромісу між фізичною інтерпретованістю, чисельною ефективністю та високою точністю опису транспортних властивостей кремнію, що робить запропонований підхід перспективним як для фундаментальних досліджень, так і для прикладного приладового моделювання.

2. Методологія

2.1. Особливості підготовки даних

Для побудови моделей машинного навчання передусім необхідний репрезентативний набір даних. У цій роботі такими даними є значення рухливості, що відповідають заданим температурам і концентраціям легувальної домішки. Як тренувальний, так і тестовий набори формували шляхом обчислення рухливості відповідно до формул (B.1)–(B.10). Тобто, результати, отримані в межах моделі Класасена, приймали як референтні, а регресійні моделі навчали так, щоб їхні передбачення максимально відтворювали ці значення.

У роботі розроблялися моделі, здатні передбачати рухливість як основних, так і неосновних електронів і дірок у кремнії. Для кожного з цих чотирьох випадків формувалися окремі тренувальні й тестові набори даних. У подальшому рухливість електронів у n -Si позначатиметься як μ_{nn} , а в p -Si – як μ_{np} . Аналогічно, μ_{pp} та μ_{pn} відповідатимуть рухливостям дірок як основних та неосновних носіїв заряду, відповідно.

У розрахунках величини рухливості вважалося, що в кристалі наявні легувальні домішки лише одного типу, тобто розглядався некомпенсований напівпровідник, і нехтувалося наявністю нерівноважних носіїв заряду. Як видно з виразів (B.1)–(B.10), рухливість залежить як від концентрації електронів n і дірок p , так і від кількості іонізованих акцепторів N_a^- і донорів N_d^+ в одиниці об'єму. У випадку n -Si для обчислення концентрацій носіїв заряду використовувалися такі вирази

$$n = \frac{N_d^+}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_d^+}{2}\right)^2 + n_i^2}, \quad p = \frac{n_i^2}{n}, \quad (3)$$

причому температурна залежність концентрації електронів у власному напівпровіднику n_i розраховувалася відповідно до [39]. У свою чергу, концентрація іонізованих донорів обчислювалася з урахуванням статистики Фермі–Дірака:

$$N_d^+ = N_d \left(1 - \frac{1}{1 + 0,5 \exp \left[\frac{E_F - E_d}{kT} \right]} \right), \quad (4)$$

де E_F – положення рівня Фермі, E_d – енергія донорного рівня. Оцінка розташування рівня Фермі здійснювалася з використанням умови електро-нейтральності

$$n = p + N_d^+, \quad (5)$$

водночас вважалося, що

$$n = N_C F_{\frac{1}{2}} \left(-\frac{E_F}{kT} \right), \quad p = N_V F_{\frac{1}{2}} \left(-\frac{E_G - E_F}{kT} \right), \quad (6)$$

де N_C та N_V – ефективні густини станів біля дна зони провідності й вершини валентної зони, обчислювалися відповідно до [39]; E_G – ширина забороненої зони, розраховувалася згідно з [40]; $F_{\frac{1}{2}}$ – інтеграл Фермі–Дірака порядку 1/2, оцінювався з використанням наближення [41].

У випадку p -Si розрахунки проводилися аналогічно. І для електронного, і для діркового напівпровідника вважалося, що енергія активації легувальної домішки становить 45 меВ. Ця величина відповідає енергіям іонізації атомів бору й фосфору, які є основними легантами для кремнію.

Зазначимо, що в роботі розглядалися такі діапазони температур і рівнів легування:

$$T \in [200, 500] \text{ K}, \quad N_D \in [10^{13}, 10^{19}] \text{ см}^{-3}, \quad (7)$$

які відповідають області застосування теорії Класасена. Зауважимо, що вказаний підхід до обчислень концентрацій заряджених компонентів у кристалі враховував відхилення від наближених співвідношень $n = N_d^+ = N_d$ (для n -Si) і $p = N_a^- = N_a$ (для p -Si), які, загалом, можуть бути використані лише в діапазоні від температури виснаження домішки до температури початку власної провідності. Як показують оцінки, для бору й фосфору для $N_D \geq 10^{18} \text{ см}^{-3}$ температура виснаження вища за 200 K, а для $N_D < 3 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ температура, за якої вже не можна нехтувати власними

носіями заряду, менша за 500 К. Тому застосування строго підходу (3)–(6) є необхідним.

При створенні кожного з чотирьох тренувальних наборів даних випадковим чином вибиралися 500 пар значень (T, N_D) з діапазону (7) і обчислювалися значення μ , використовуючи вирази (B.1)–(B.10) і (3)–(6). Тестові набори, які використовувалися для оцінки якості передбачень моделей, складалися з 2550 зразків кожен, які відповідали всім комбінаціям 51 значень температури (від 200 К до 500 К з кроком 6 К) і 50 значень рівня легування, рівномірно розподілених у логарифмічному масштабі в діапазоні від 10^{13} см $^{-3}$ до 10^{19} см $^{-3}$.

2.2. Використані моделі машинного навчання

Для знаходження аналітичних виразів, які описують рухливість, використовувався алгоритм символічної регресії (Symbolic Regression, SR) [42]. Це відносно новий алгоритм машинного навчання, який дає змогу апроксимувати залежності між вхідними й вихідними параметрами без попереднього задання аналітичної форми функції. Формування функціональної залежності й підбір її числових параметрів здійснюються із застосуванням еволюційних метаевристичних алгоритмів [43]. SR є методом, що поєднує експериментальні дані, моделі машинного навчання й наукові теорії, забезпечуючи отримання інтерпретованих аналітичних виразів, які потребують менших обчислювальних витрат порівняно з класичними моделями МН і простіше інтегруються в розв'язання широкого кола фізичних задач [43–48].

Алгоритм реалізовувався на мові Python з використанням пакету PySR [49]. Для побудови рівнянь використовувалися стандартні математичні функції (+, −, ×, ÷, exp, ln, x^y , tanh, sin) і дійсні константи. Крім того, використовувалися спеціально сконструйовані оператори $f_1(x) = \frac{1}{1+x}$ і $f_2(x, y) = \frac{x \cdot y}{x+y}$, що відповідають функціям, які часто зустрічаються в наявних моделях для опису рухливості носіїв заряду (див. Додатки). Попередня обробка даних передбачала їхню нормалізацію: на вхід SR моделі подавалися безрозмірні величини T_n і N_{Dn} :

$$T_n = \frac{T}{300 \text{ К}}, \quad N_{Dn} = \frac{N_D}{10^{17} \text{ см}^{-3}}. \quad (8)$$

Крім того, було розроблено декілька регресійних моделей, які використовували різні МН алгоритми, зокрема Random Forest (RF), Gradient Boosting (GB), Support Vector Regression (SVR) і Deep Neural Network (DNN). Для кожного з вказаних алгоритмів було підготовлено два варіанти моделей, які відрізнялися попередньою обробкою даних. В одному випадку як вхідні ознаки використовувалися нормовані значення температури й концентрації легувальної домішки (див. формули (8)), а прогнози були орієнтовані на отримання величини μ . Відповідні моделі надалі позначатимуться шляхом додавання до аббревіатури використаного алгоритму суфікса “_N” (RF_N, DNN_N тощо). Для моделей другого типу враховувалося, що перепорою для точних прогнозів може бути широкий діапазон використаних ознак (наприклад, N_D змінюється у межах шести порядків). Тому в цьому випадку попередня обробка вхідних даних передбачала нормалізацію значень температури T і логарифмів ступеня легування $\lg N_D$, а як цільова змінна розглядалася величина $\lg \mu$. Як наслідок, тренувальні набори кожної вхідної та вихідної ознак характеризувалися нульовим середнім і одиничним стандартним відхиленням. Позначення відповідних моделей міститиме суфікс “_S” (RF_S, DNN_S тощо).

Моделі були імплементовані на мові Python з використанням пакетів Keras і Scikit-learn. Для налаштування гіперпараметрів моделей, що як відомо є надзвичайно важливим для оптимізації їхньої продуктивності [50], використовувався пакет Optuna [51] із застосуванням TPE саплера, Hyperband прюнера та 5-кратної крос-валідації.

Підкреслимо, що хоча вказаний регресійний підхід широко використовується в різних галузях фізики, проте подібні моделі фактично є чорною скринькою, що суттєво утрудняє обґрунтування отриманих результатів і поступово перестає задовольняти науковців.

2.3. Метрики оцінювання

Для оцінки прогностичних властивостей моделей були використані декілька метрик, а саме середня квадратична похибка (the mean squared error, MSE), середня абсолютна похибка (mean absolute error, MAE), середня відносна похибка (mean absolute percentage error, MAPE), визначе-

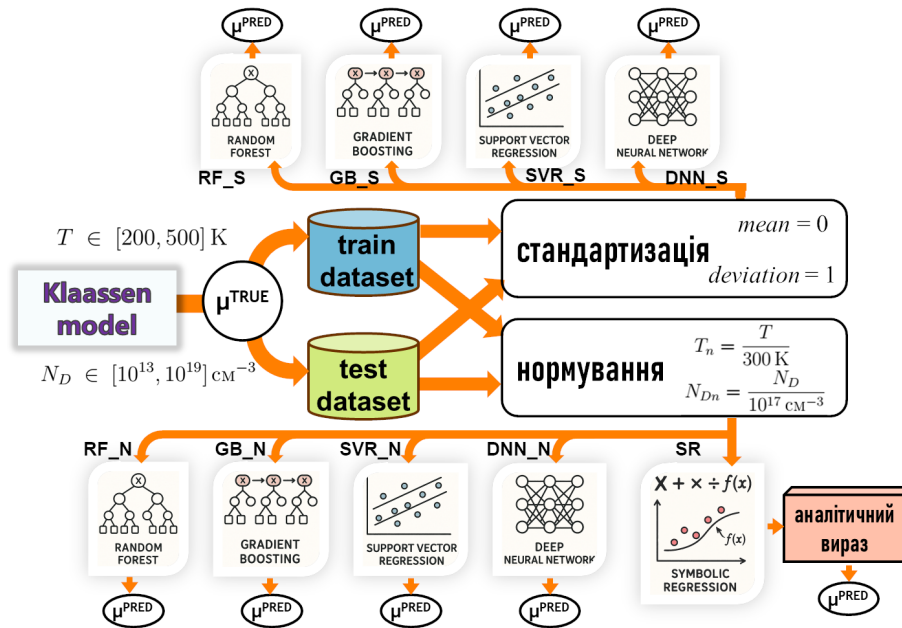


Рис. 1. Загальна блок-схема розрахунків

ні відповідно до виразів (9)–(11):

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2, \quad (9)$$

$$\text{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\hat{y}_i - y_i|, \quad (10)$$

$$\text{MAPE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|\mu_i^{\text{PRED}} - \mu_i^{\text{TRUE}}|}{\mu_i^{\text{TRUE}}} \times 100\%, \quad (11)$$

де $\hat{y}_i$ – прогнозоване моделлю значення для i -го зразка (набору вхідних параметрів), y_i – відоме цільове значення для i -го зразка, (для SR і *_S моделей збігалось з величиною рухливості, для *_S моделей з'являлось в результаті логарифмування та стандартизації); N – кількість зразків у наборі даних; μ_i^{PRED} – передбачене значення рухливості (для *_S моделей після застосування операцій, обернених до нормування та стандартизації), μ_i^{TRUE} – істинне значення рухливості (отримане в результаті розрахунків відповідно до теорії Клаассена).

MSE використовувалося для оцінки якості моделей, зокрема під час налаштування гіперпараметрів та як цільова функція для мінімізації під час навчання. Для оцінки точності безпосередньо прогнозів рухливості застосовувалися MAE

та MAPE, а також медіанне (APE_{MED}) і максимальне (APE_{MAX}) значення відносної похибки.

Загальна схема використання МН моделей представлена на рис. 1.

3. Результати та обговорення

3.1. Символьна регресія

Для опису рухливості електронів, коли вони є основними носіями в монокристалічному кремнії в результаті застосування SR отримано вираз:

$$\mu_{nn} = \frac{N_{Dn} + 1413,2}{T_n^{2,2508} + \frac{a_{nn}b_{nn}}{a_{nn}+b_{nn}}}, \quad (12a)$$

$$a_{nn} = \left(\frac{N_{Dn}}{0,873T_n + 0,0727} \right)^{0,7212}, \quad (12b)$$

$$b_{nn} = 0,215N_{Dn}^{0,58} + 10,5T_n - 1,342. \quad (12c)$$

Найбільш цікавим є знаменник формули (12a). Температурна залежність першого доданку надзвичайно близька до залежності рухливості, пов'язаної з розсіянням на фононах. Форма другого збігається з виразом, який очікується відповідно до правила Маттісена за наявності двох механізмів розсіяння. Загалом, вираз (12) містить всього 9 параметрів і є набагато простішим, ніж той, який

пропонується в теорії Клаассена. Водночас похибка виразу (12) порівняно з формулами (В.1)–(В.10) не перевищує 1,2% – див. рис. 2, а. Проте навіть таке досить невелике відхилення спостерігається лише для $T \sim 200$ К і $N_d \sim 10^{18}$ см⁻³, для переважної ж більшості значень температури й рівня легування АРЕ не перевищує 0,15%.

Отриманий аналітичний вираз для опису рухливості неосновних електронів у кремнії наведено у формулі (13), тоді як АРЕ порівняно з результатами моделі Клаассена як функцію температури й концентрації акцепторів подано на рис. 2, б. У цьому випадку максимальні розбіжності, які проте не перевищують 1,1%, спостерігаються за концентрації легувальної домішки 10^{19} см⁻³ і температури, близької до 500 К. Додаткові області підвищеної похибки відповідають інтервалам $T = 230$ – 270 К, коли $N_a = (3-6) \cdot 10^{17}$ см⁻³, а також $T \simeq 200$ К коли $N_a = 10^{19}$ см⁻³. Загалом похибка оцінювання рухливості електронів як неосновних носіїв є дещо меншою, ніж у випадку, коли вони виступають основними носіями заряду.

$$\mu_{np} = 26,3 \left(\frac{N_{Dn}}{N_{Dn} + 192} \right)^{0,62} + \frac{1412,3}{T_n^{2,25} + \frac{a_{np}b_{np}}{a_{np}+b_{np}}}, \quad (13a)$$

$$a_{np} = 1,92 \left(\frac{N_{Dn}}{T_n + 0,071} \right)^{0,717}, \quad (13b)$$

$$b_{np} = 5,7 N_{Dn}^{0,103} T_n. \quad (13c)$$

Вираз для опису рухливості дірок у *p*-Si (формула (14)) містить найменшу кількість параметрів з усіх отриманих виразів. Проте і максимальні похибки в цьому випадку найбільші, хоча вони спостерігаються в достатньо вузькому діапазоні параметрів – див. рис. 2, в.

$$\mu_{pp} = N_{Dn}^{0,448} + \frac{470}{T_n^{2,2505} + \frac{a_{pp}b_{pp}}{a_{pp}+b_{pp}}}, \quad (14a)$$

$$a_{pp} = 2,652 N_{Dn}^{0,1669} T_n, \quad (14b)$$

$$b_{pp} = 0,578 N_{Dn}^{0,7587} T_n^{-0,755}, \quad (14c)$$

Для неосновних дірок досягнуто найкращої узгодженості між значеннями, обчисленими за допомогою отриманої формули (15), і результатами моделі Клаассена, що ілюструє рис. 2, г. З рисунка видно, що в більшості досліджених інтервалів

температури й концентрації легувальної домішки відносна похибка не перевищує 0,08%.

$$\mu_{pn} = \frac{0,0226 \cdot N_{Dn} \cdot \ln T_n}{\ln T_n + 0,63} + \frac{113,56}{0,2414 \cdot \left[T_n^{2,94} + \left(\frac{a_{pn} \cdot b_{pn}}{a_{pn} + b_{pn}} \right)^{1,177} \right]^{0,76547}}, \quad (15a)$$

$$a_{pn} = 1,151 \cdot N_{Dn}^{0,6085}, \quad (15b)$$

$$b_{pn} = 4,21 \cdot T_n^{1,143}. \quad (15c)$$

Видно, що всі отримані вирази (12)–(15) мають подібну структуру і є суттєво простішими за формули (В.1)–(В.10) з точки зору глибини вкладення, загальної кількості операторів і числа параметрів. Водночас вони забезпечують практично ідентичну точність відтворення результатів. Крім того, запропоновані вирази зручніші для використання не лише через свою меншу ускладненість, але й через можливість використання як розрахункового параметра концентрації легувальної домішки, яка є паспортною характеристикою матеріалу, замість концентрацій носіїв та іонізованих домішок, які потребують додаткових розрахунків, проте фігурують у формулах теорії Клаассена. Звичайно, як це часто буває, остання перевага має наслідком зменшення точності отриманих формул для кремнію, легуваного домішкою з енергією іонізації, відмінною від 45 меВ за температур, коли ще не спостерігається виснаження домішки. Проте це обмеження не є надто жорстким, так як 1) саме таку енергетичну структуру мають найуживаніші для забезпечення домішкової провідності в кремнії атоми бору й фосфору; 2) температура виснаження для інших можливих легантів (алюміній, мідь, галій) вища за 200 К (нижню границю діапазону застосовності отриманих формул) лише для $N_D \geq 10^{18}$ см⁻³; 3) відповідні похибки не перевищують 1%. Тобто, фактично, запропоновані формули будуть застосовні для будь-яких варіантів легування.

3.2. Класичні регресійні алгоритми, порівняння ефективності різних підходів

Типові результати застосування оптимізованих і натренованих регресійних моделей до тестового

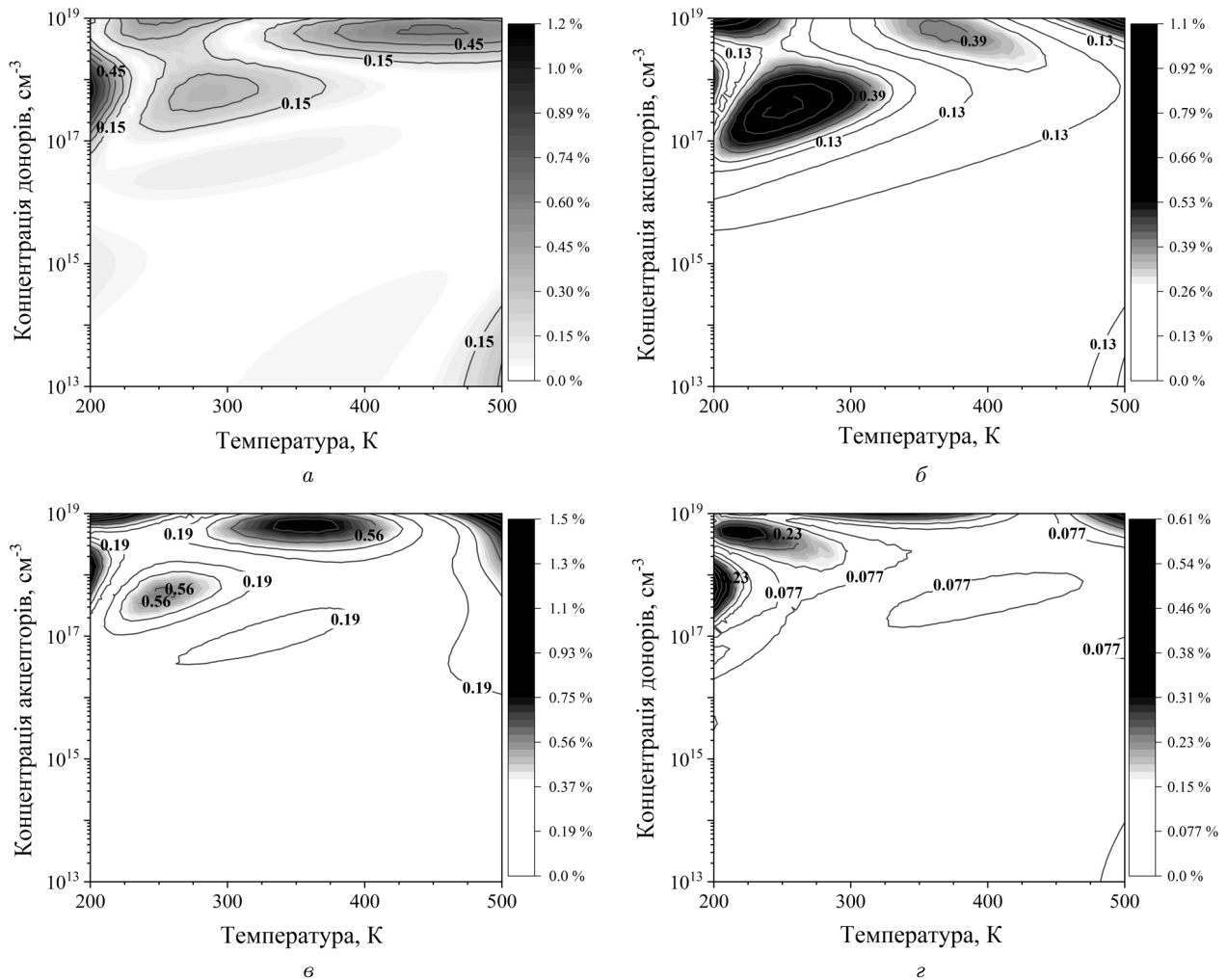


Рис. 2. Температурні й концентраційні залежності величини абсолютної відносної похибки при оцінюванні рухливості носіїв заряду у кремнії за допомогою виразів (12)–(15). Представлені випадки оцінки рухливості електронів (а, б) і дірок (в, г), коли вони є основними (а, в) і неосновними (б, г) носіями заряду

набору даних наведено на рис. 3. Значення метрику, отримані в розрахунках рухливості різними методами, узагальнені в табл. 1. Видно, що похибки прогнозів зростають при збільшенні величини рухливості, причому ця тенденція спостерігається незалежно від вибраного алгоритму, попередньої підготовки даних чи типу носіїв заряду. Нормалізація даних фактично не впливає на точність прогнозів у випадку використання Random Forest і Gradient Boosting, що, загалом, є типовим для деревоподібних алгоритмів. У випадку глибоких нейронних мереж додаткова попередня обробка має сенс, як це можна бачи-

ти при порівнянні результатів DNN_S і DNN_N мереж у табл. 1.

Якщо порівнювати показники різних регресійних моделей, то катастрофічні за своєю якістю результати демонструють моделі SVR_N. У цьому випадку лише медіанна відносна похибка перебуває на прийнятному рівні, близько 15%. Водночас значення інших метрик свідчать про те, що для більшості досліджених температур і концентрацій леганта відхилення розрахованої рухливості є надзвичайно значними. Для інших моделей характерним є те, що великі похибки спостерігаються лише для небагатьох комбінаціях аргументів (APE_{max}

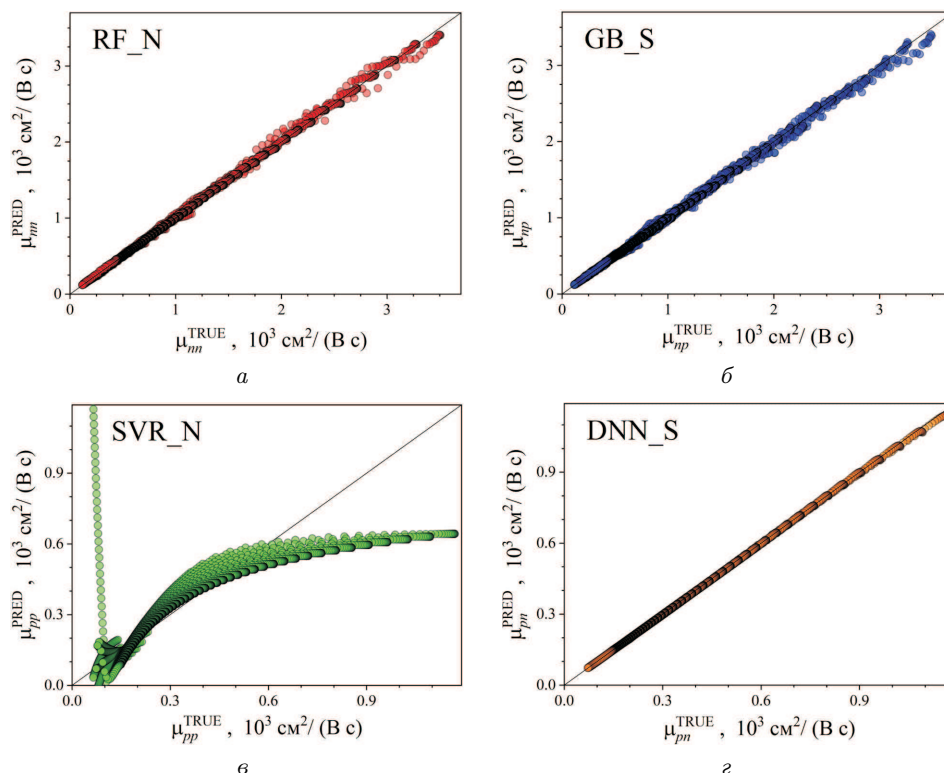


Рис. 3. Типові співвідношення між референсними значеннями рухливостями та прогнозами RF (а), GB (б), SVR (в) та DNN (г) моделей, що використовують нормовані (а, в) або нормалізовані (б, г) ознаки. Представлені випадки оцінки рухливості електронів (а, б) та дірок (в, г), коли вони є основними (а, в) і неосновними (б, г) носіями. Чорні прямі – лінії ідентичності, наведені для зручності порівняння

Таблиця 1. Метрики передбачень величини рухливості носіїв заряду в кремнії, отримані при використанні різних моделей на тестовому наборі. Жирним виділено найкращі результати для кожної метрики в передбаченнях рухливості носіїв різних типів (електронів і дірок, основних і неосновних)

Модель	MAPE, %				APE _{MAX} , %				APE _{MED} , %				MAE, cm ² /(V · s)			
	μ _{nn}	μ _{np}	μ _{pp}	μ _{pn}	μ _{nn}	μ _{np}	μ _{pp}	μ _{pn}	μ _{nn}	μ _{np}	μ _{pp}	μ _{pn}	μ _{nn}	μ _{np}	μ _{pp}	μ _{pn}
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	0,087	0,098	0,082	1,71	2,16	2,26	3,56	0,088	0,064	0,069	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	0,094	0,137	0,140	0,050	1,19	0,992	1,48	0,596	0,044	0,077	0,079	0,026	0,475	0,708	0,314	0,115
Agora [11]	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

і MAPE або APE_{MED} суттєво відрізняються). Водночас найгірші показники спостерігаються при використанні алгоритму Gradient Boosting. Трохи кращі кількісні характеристики у випадку засто-

сування алгоритму Random Forest, але відмінності від GB досить незначні. Далі в рейтингу точності розташовуються моделі DNN_N (за виключенням максимальної помилки, яка співмірна з показни-

ками попередньо згаданих моделей) і DNN_S, для якої практично всі показники приблизно у 1,5 рази кращі. Найкращі результати продемонстрували моделі SVR_S.

У табл. 1 також наведено метрики застосування виразів, отриманих за допомогою SR. Видно, що показники SR моделі перевищує лише SVR_S, та й то лише за значеннями MAPE і APE_{МЕД} для кремнію з дірковою провідністю. Для решти 12 метрик з 16 найкращі показники у SR. Тобто, формули (12)–(15) переважають за точністю регресійні моделі, що використовують алгоритми випадкового лісу, градієнтного бустингу й 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 розв'язання регресійних задач) потребує наявності попередньо натренованих моделей, використання відповідного програмного забезпечення й попередньої підготовки даних (коефіцієнти лінійних перетворень, які використовуються під час нормалізації, залежать від тренувального набору даних). Такий процес не є занадто складним і критичним для реалізації, проте виглядає дещо більш утрудненим ніж розрахунки за відомою формулою. Крім того, наявність аналітичного виразу має низку переваг порівняно з “чорним ящиком” регресійної моделі, згаданих у Вступі.

Окрім порівняння точності передбачень рухливості при використанні різних МН моделей, доцільно зіставити результати теорії Клаассена з іншими, більш спрощеними підходами до визначення μ . В роботі було зосереджено увагу на теорії Арори, як найбільш популярного наближення, що зустрічається в літературі, та проведено розрахунки відповідно до виразів (Б.3)–(Б.4). Отримані метрики й відносні похибки представлені в табл. 1 та на рис. 4, відповідно. На рисунку для порівняння також наведено похибки для деяких МН моделей. Зазначимо, що наведені результати для *n*-Si є подібними до отриманих і для кремнію з дірковою провідністю.

Вирази (Б.3)–(Б.4) за своєю структурною складністю та кількістю параметрів цілком співмірні з формулами (12)–(15), проте дають суттєво гірші результати, особливо для випадку неосновних носіїв. Тобто, заміна теорії Клаассена більш простими виразами теорії Арори призводить

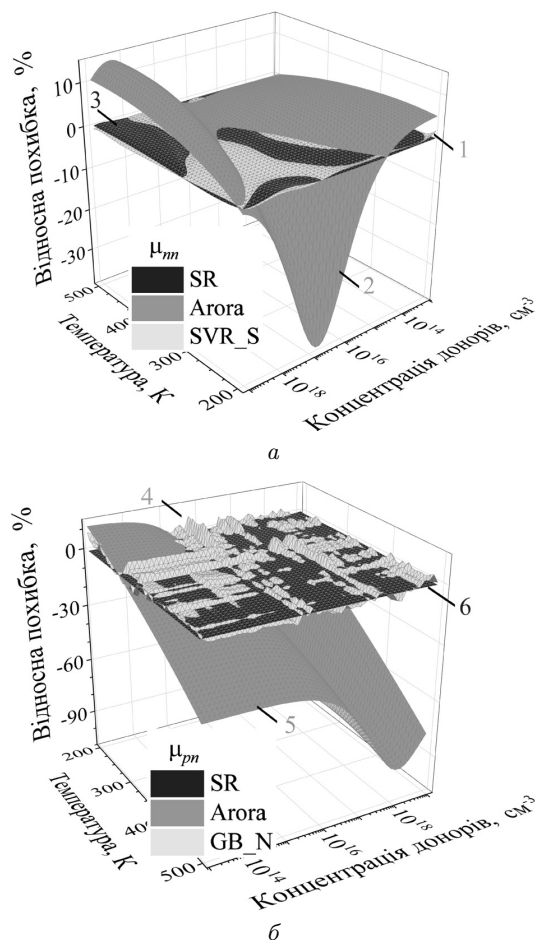


Рис. 4. Температурні й концентраційні залежності помилки розрахунків рухливості основних (а) і неосновних (б) носіїв за допомогою різних моделей відповідно до теорії Клаассена. Модель: SVR_S (поверхня 1), Arora (2, 5), SR (3, 6), GB_N (4)

до значно більших помилок, ніж використання будь-якої з моделей машинного навчання (за винятком SVR_N).

Відомо, що модель Арори, на відміну від підходу Клаассена, не враховує розсіяння носіїв–носіїв. Тому для тестових наборів даних додатково обчислено значення μ у припущенні, що окремі внески до повної рухливості описуються співвідношеннями Арори (Б.3) і Доркеля (А.6), а їх поєднання здійснюється відповідно до правила Матіссена. Виявилося, що за розглянутих умов внесок розсіяння носіїв–носіїв надзвичайно малий: максимальні відхилення значень, отриманих відповідно до підходу Арори–Доркеля, від значень, розрахованих за

теорією Арори, 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 дозволяє наблизити значення рухливості, що обчислюються за теорією Арори, до більш точних величин, які можуть бути отримані з використанням теорії Клаассена та запропонованих у роботі апроксимаційних наближень.

4. Висновки

Розроблено й налаштовано регресійні моделі машинного навчання для оцінки рухливості електронів і дірок у n -Si та p -Si з використанням алгоритмів випадкового лісу, градієнтного бустингу, опорних векторів і глибоких нейронних мереж. Проведенню порівняння точності прогнозів вказаних моделей у порівнянні з теорією Клаассена та показано доцільність застосування алгоритмів Support Vector Regression та Deep Neural Network з попередньою нормалізацією вхідних даних.

Використовуючи алгоритм символічної регресії, отримано аналітичні вирази для опису рухливості електронів і дірок у монокристалічному кремнії в інтервалі температур 200–500 K і концентрацій легувальної домішки 10^{13} – 10^{19} см^{-3} . Порівняно з моделлю Клаассена, запропоновані формули містять більш ніж удвічі меншу кількість параметрів, не потребують попереднього визначення ступеня іонізації легантів і мають простішу структурну форму. Водночас втрата точності є мінімальною: приблизно для 50% усіх комбінацій температури й ступеня легування відносна похибка не перевищує 0,044%, 0,077%, 0,079% і 0,026% при обчисленні $\mu_{n,n}$, $\mu_{n,p}$, $\mu_{p,p}$ та $\mu_{p,n}$, відповідно. Порівняно з моделлю Арори, отримані вирази характеризуються співмірною складністю, проте забезпечують істотно вищу точність. Це свідчить про доцільність і перспективність їхнього практичного застосування.

ДОДАТОК А

Залежності рухливості при врахуванні одного механізму розсіяння

Для опису рухливості μ_1 при розсіянні носіїв заряду на іонізованих домішках часто застосовується такий вираз [1, 3]:

$$\mu_1 = \frac{1,44 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}}{N_I Z^2} \left(\frac{T}{100 \text{ K}} \right)^{\frac{3}{2}} \times \frac{\varepsilon^2 \cdot \sqrt{m_0/m}}{\left[\lg(1 + \beta_{\text{ВН}}^2) - \frac{0,434\beta_{\text{ВН}}^2}{1 + \beta_{\text{ВН}}^2} \right]}, \quad (\text{A.1})$$

де N_I – концентрація домішок із зарядом Ze , ε – діелектрична проникність напівпровідника, T – температура, m – ефективна маса носія, m_0 – маса вільного електрона, а величина $\beta_{\text{ВН}}$ має вигляд

$$\beta_{\text{ВН}} = \frac{T}{100 \text{ K}} \sqrt{\frac{2,08 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} \cdot \varepsilon m}{16 n_c m_0}}, \quad (\text{A.2})$$

n_c – концентрація носіїв заряду. Вираз має назву формули Брукса–Геррінга, він отриманий у наближенні часу релаксації для випадку ізотропної параболічної зони й слабого екранованого кулонівського потенціалу. Менш строге з фізичної точки зору наближення, що передбачає використання кулонівського потенціалу зі штучним обрізанням за малих кутів розсіяння і краще працює за високих концентрацій домішок, має назву формули Конвелла–Вайскопфа [1, 3]:

$$\mu_1 = \frac{1,44 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}}{N_I Z^2} \left(\frac{T}{100 \text{ K}} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\varepsilon^2 \cdot \sqrt{m_0/m}}{\lg(1 + \beta_{\text{CW}}^2)}, \quad (\text{A.3})$$

$$\beta_{\text{CW}} = \frac{T}{100 \text{ K}} \cdot \frac{\varepsilon}{16 Z} \left(\frac{2,35 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}}{N_I} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (\text{A.4})$$

Для випадку розсіяння носій–носій часто застосовується підхід, розвинутий Флетчером [6]:

$$\mu_{cc} = \frac{\left(\frac{T}{T_{\text{ref}}^{\text{F1}}} \right)^{\frac{3}{2}} F_1}{\sqrt{np} \cdot \ln \left[1 + \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}^{\text{F1}}} \right)^2 (np)^{-\frac{1}{3}} F_2 \right]}, \quad (\text{A.5})$$

де n і p – концентрації електронів і дірок, відповідно; $T_{\text{ref}}^{\text{F1}}$, F_1 та F_2 – константи, значення яких залежать від матеріалу. Як показано в роботах [52, 53], для кремнію доцільно застосовувати $T_{\text{ref}}^{\text{F1}} = 300 \text{ K}$, $F_1 = 1,04 \cdot 10^{21} \text{ 1/(см В с)}$, $F_2 = 7,45 \cdot 10^{12} \text{ см}^2$ і тоді вираз (A.5) перетворюється на так звану формулу Доркеля

$$\mu_{cc} = \frac{2 \cdot 10^{17} T^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{np} \cdot \ln \left[1 + 8,28 \cdot 10^8 T^2 (np)^{-\frac{1}{3}} \right]}. \quad (\text{A.6})$$

ДОДАТОК Б

Моделі рухливості носіїв у кремнії

Модель Коуги–Томаса [8]:

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

де N – концентрація легантів, а значення констант для носіїв обох типів наведено в табл. Б1.

Модель Масетті [9]:

$$\mu_n^{\text{M}} = \mu_0 + \frac{\mu_{\max} - \mu_0}{1 + \left(\frac{n}{C_r} \right)^a} - \frac{\mu_1}{1 + \left(\frac{C_s}{n} \right)^b},$$

$$\mu_p^{\text{M}} = \frac{\mu_0}{\exp\left(\frac{p_c}{p}\right)} + \frac{\mu_{\max}}{1 + \left(\frac{p}{C_r} \right)^a} - \frac{\mu_1}{1 + \left(\frac{C_s}{p} \right)^b}, \quad (\text{B.2})$$

де коефіцієнти залежать від типу легувальних атомів. У табл. Б2 наведено величини для бору й фосфору.

Таблиця Б1. Коефіцієнти для розрахунку рухливості відповідно до моделі Коуги–Томаса (Б.1)

Тип носіїв	Параметр			
	$\mu_{\max}, \text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	$\mu_{\min}, \text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	α	$N_{\text{ref}}, \text{см}^{-3}$
Електрони	1330	65	0,72	$8,5 \cdot 10^{16}$
Дірки	495	47,7	0,76	$6,3 \cdot 10^{16}$

Таблиця Б2. Коефіцієнти для розрахунку рухливості відповідно до моделі Масетті (Б.2)

Параметр	Легант	
	Фосфор	Бор
$\mu_0, \text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	68,5	44,9
$\mu_{\max}, \text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	1414	470,5
$\mu_0, \text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	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
$p_c, \text{см}^{-3}$	–	$9,23 \cdot 10^{16}$

Таблиця Б3. Коефіцієнти для розрахунку рухливості відповідно до моделі Арори (Б.3)–(Б.4)

Параметр	Тип носіїв			
	Електрони		Дірки	
	Основні [11]	Неосновні [13]	Основні [11]	Неосновні [14]
$T_{\text{ref}}, \text{К}$	300	295	300	292
$\mu_{\min}^{\text{ref}}, \text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	88	232	54,3	130
$\mu_0^{\text{ref}}, \text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	1252	1180	407	370
$N_0^{\text{ref}}, 1/\text{см}^3$	$1,26 \times 10^{17}$	8×10^{16}	$2,35 \times 10^{17}$	8×10^{17}
α^{ref}	0,88	0,9	0,88	1,25
β_1	–0,57			
β_2	–2,33		–2,23	
β_3	2,4			
β_4	–0,146			

Модель Арори [11]:

$$\mu^A = \mu_{\min} + \frac{\mu_0}{1 + \left(\frac{N_I}{N_0}\right)^\alpha}, \quad (\text{Б.3})$$

де $N_I = N_a^- + N_d^+$ – загальна концентрація іонізованих легантів (N_a^- і N_d^+ – кількості іонізованих акцепторів і донорів у одиниці об'єму, відповідно), а решта коефіцієнтів мають подібну температурну залежність:

$$\mu_{\min} = \mu_{\min}^{\text{ref}} \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}}\right)^{\beta_1}, \quad \mu_0 = \mu_0^{\text{ref}} \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}}\right)^{\beta_2}, \quad (\text{Б.4})$$

$$N_0 = N_0^{\text{ref}} \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}}\right)^{\beta_3}, \quad \alpha = \alpha^{\text{ref}} \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}}\right)^{\beta_4}.$$

(див. табл. Б3). Константи наведено у табл. Б2

ДОДАТОК В

Оцінка рухливості відповідно до моделі Клаассена (Philips)

У цьому випадку [12] для обчислення рухливості як електронів, так і дірок, незалежно від того, чи вони є основними чи неосновними носіями, застосовують схожі формули з різними числовими коефіцієнтами. А саме,

$$\mu^K = \frac{\mu_L \cdot \mu_{\text{DA}}}{\mu_L + \mu_{\text{DA}}}, \quad (\text{Б.1})$$

де

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

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

а константи наведено в табл. В1.

Величини N_{sc} та N_{eff} є функціями температури і концентрації носіїв та іонізованих легантів, явний вигляд яких залежить від типу носіїв. А саме, при визначенні рухливості електронів

$$N_{\text{sc}} = N_d^+ + N_a^- + p, \quad (\text{Б.4a})$$

$$N_{\text{eff}} = N_d^+ + N_a^- \cdot G_n(P_n, T) + \frac{p}{F_n(P_n, T)}, \quad (\text{Б.5a})$$

тоді як для дірок

$$N_{\text{sc}} = N_a^- + N_d^+ + n, \quad (\text{Б.4б})$$

$$N_{\text{eff}} = N_a^- + N_d^+ \cdot G_p(P_p, T) + \frac{n}{F_p(P_p, T)}. \quad (\text{Б.5б})$$

У свою чергу функції $G_{n(p)}$, $F_{n(p)}$ та $P_{n(p)}$ мають вигляд:

$$G_n = 1 - S_1 \left[S_2 + \left(\frac{m_0}{m_e} \frac{T}{300}\right)^{S_4} P_n \right]^{-S_3} + S_5 \left[\left(\frac{m_e}{m_0} \frac{300}{T}\right)^{S_7} P_n \right]^{-S_6}, \quad (\text{Б.6a})$$

$$G_p = 1 - S_1 \left[S_2 + \left(\frac{m_0}{m_h} \frac{T}{300}\right)^{S_4} P_p \right]^{-S_3} + S_5 \left[\left(\frac{m_h}{m_0} \frac{300}{T}\right)^{S_7} P_p \right]^{-S_6}, \quad (\text{Б.6б})$$

Таблиця В1. Коефіцієнти для розрахунку рухливості відповідно до моделі Клаассена, формули (В.2)–(В.3)

Тип носіїв	Параметр			
	$\mu_{\max}, \text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	$\mu_{\min}, \text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	α	$N_{\text{ref}}, \text{см}^{-3}$
Електрони	1414	68,5	0,711	$9,2 \cdot 10^{16}$
Дірки	495	44,9	0,719	$2,23 \cdot 10^{17}$

Таблиця В2. Коефіцієнти для розрахунку рухливості відповідно до моделі Клаассена, формули (16) і (В.7)

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

$$F_n = \frac{r_1 P_n^{r_6} + r_2 + r_3 \frac{m_e}{m_h}}{P_n^{r_6} + r_4 + r_5 \frac{m_h}{m_e}}, \quad F_p = \frac{r_1 P_p^{r_6} + r_2 + r_3 \frac{m_h}{m_e}}{P_p^{r_6} + r_4 + r_5 \frac{m_e}{m_h}}, \quad (\text{В.7})$$

$$P_n = (P_{bn} + P_{cn})^{-1}, \quad P_p = (P_{bp} + P_{cp})^{-1}, \quad (\text{В.8})$$

$$P_{bn} = \frac{3,83 \left(\frac{m_0}{m_e} \right)}{\frac{1,36 \times 10^{26}}{N_d^+ + p} \left(\frac{T}{300} \right)^2}, \quad P_{bp} = \frac{3,83 \left(\frac{m_0}{m_h} \right)}{\frac{1,36 \times 10^{26}}{N_a^- + n} \left(\frac{T}{300} \right)^2}, \quad (\text{В.9})$$

де m_e і m_h – ефективні маси електрона й дірки, відповідно, а константи, що входять до виразів (В.6) і (В.7), наведено в табл. В2. У випадку неосновних носіїв $P_{cn} = 0$, $P_{cp} = 0$, а для основних

$$P_{cn} = \frac{\left(Z_n \sqrt[3]{N_d^+} \right)^2}{1,79 \cdot 10^{14} T^2}, \quad P_{cp} = \frac{\left(Z_p \sqrt[3]{N_a^-} \right)^2}{1,79 \cdot 10^{14} T^2}, \quad (\text{В.10a})$$

$$Z_n = \frac{1,21 + \frac{1,6 \cdot 10^{41}}{(N_d^+)^2}}{0,21 + \frac{1,6 \cdot 10^{41}}{(N_d^+)^2}}, \quad Z_p = \frac{1,5 + \left(\frac{7,2 \cdot 10^{20}}{N_a^-} \right)^2}{0,5 + \left(\frac{7,2 \cdot 10^{20}}{N_a^-} \right)^2}. \quad (\text{В.10б})$$

1. C. Hamaguchi. *Basic Semiconductor Physics*. 4th edition (Springer Cham, 2023) [ISBN: 978-3-031-25510-6].
2. J. Leveillee, X. Zhang, E. Kioupakis, F. Giustino. Ab initio calculation of carrier mobility in semiconductors including ionized-impurity scattering. *Phys. Rev. B* **107**, 125207 (2023)
3. K. Seeger. *Semiconductor Physics. An Introduction*. 9th edition (Springer Berlin, 2004) [ISBN: 978-3-540-21957-6].

4. K.W. Böer, U.W. Pohl. *Semiconductor Physics* 2nd edition (Springer Cham, 2023) [ISBN: 978-3-031-18285-3].
5. E. Bourbaba, S. Kadri, M. Bensafi, S. Laguech, Y. Menni, B.M. Alshammari, L. Kolsi. Empirical model integration for accurate charge carrier mobility simulation in silicon mosfets. *Open Physics* **23**, 20250248 (2025).
6. N.H. Fletcher. The high current limit for semiconductor junction devices. *Proc. IRE* **45**, 862 (1957).
7. S. Rudra, D. Rao, S. Poncé, B. Saha. Dominant scattering mechanisms in limiting the electron mobility of scandium nitride. *Nano Lett.* **24**, 11529 (2024).
8. D. Caughey, R. Thomas. Carrier mobilities in silicon empirically related to doping and field. *Proc. IEEE* **55**, 2192 (1967).
9. G. Masetti, M. Severi, S. Solmi. Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-, phosphorus-, and boron-doped silicon. *IEEE Trans. Electron Devices* **30**, 764 (1983).
10. S. Berrada, H. Carrillo-Nunez, J. Lee, C. Medina-Bailon, T. Dutta, O. Badami, F. Adamu-Lema, V. Thirunavukkarasu, V. Georgiev, A. Asenov. Nano-electronic simulation software (ness): A flexible nano-device simulation platform. *J. Comput. Electron.* **19**, 1031 (2020).
11. N. Arora, J. Hauser, D. Roulston. Electron and hole mobilities in silicon as a function of concentration and temperature. *IEEE Trans. Electron Devices* **29**, 292 (1982).
12. D. Klaassen. A unified mobility model for device simulation – I. model equations and concentration dependence. *Solid-State Electron.* **35**, 953 (1992).
13. S. Swirhun, Y.-H. Kwark, R. Swanson. Measurement of electron lifetime, electron mobility and band-gap narrowing in heavily doped p-type silicon. In: *Proc. of the 1986 International Electron Devices Meeting, Los Angeles, CA, USA, December 07-10, 1986*, p. 24.
14. J. del Alamo, S. Swirhun, R. Swanson. Simultaneous measurement of hole lifetime, hole mobility and bandgap narrowing in heavily doped n-type silicon. In: *Proc. of the 1985 International Electron Devices Meeting, Washington, DC, USA, December 01-04, 1985*, p. 290.
15. D.L. Rode, J.S. Cetnar. Electron mobility of heavily doped semiconductors including multiple scattering by ionized impurities. *J. Appl. Phys.* **134**, 075701 (2023).
16. T. Sadi, C. Medina-Bailon, M. Nedjalkov, J. Lee, O. Badami, S. Berrada, H. Carrillo-Nunez, V. Georgiev, S. Selberherr, A. Asenov. Simulation of the impact of ionized impurity scattering on the total mobility in si nanowire transistors. *Materials* **12**, 124 (2019).
17. Z. Wang, Z. Tang, A. Guo, X. Luo, C. Cao, Y. Yuan, X. Zhang, L. Liu, J. Li, Y. Cao, O. Shao, S. Hu, S. Chen, Y. Zhao, X. Kou. Temperature-driven gate geometry effects in nanoscale cryogenic mosfets. *IEEE Electron Device Lett.* **41**, 661 (2020).
18. L. Abenante. Incomplete activation and ionization of dopants in si at room temperature. *AIP Adv.* **13**, 015109 (2023).

19. D.J. Cummings, A.F. Witulski, H. Park, R.D. Schrimpf, S.E. Scott, M.E. Low. Mobility modeling considerations for radiation effects simulations in silicon. *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **57**, 2318 (2010).
20. Q. Wu, A. Sojka, B.D. Price, N.I. Agladze, A. Yadav, S.L. Pain, J.D. Murphy, T. Niewelt, M.S. Sherwin. Two-fluid mobility model from coupled hydrodynamic equations for simulating laser-driven semiconductor switches. *Phys. Rev. Appl.* **24**, 014007 (2025).
21. S. Noor Mohammad, A.V. Bemis, R.L. Carter, R.B. Renbeck. Temperature, electric field, and doping dependent mobilities of electrons and holes in semiconductors. *Solid-State Electron.* **36**, 1677 (1993).
22. Y.-N. Wu, X.-G. Zhang, S. T. Pantelides. First-principles calculations reveal controlling principles for carrier mobilities in semiconductors. *Semicond. Sci. Technol.* **31**, 115016 (2016).
23. D.-Y. Liu, L.-M. Xu, X.-M. Lin, X. Wei, W.-J. Yu, Y. Wang, Z.-M. Wei. Machine learning for semiconductors. *Chip* **1**, 100033 (2022).
24. R. Li, E. Lee, T. Luo. A unified deep neural network potential capable of predicting thermal conductivity of silicon in different phases. *Mater. Today Phys.* **12**, 100181 (2020).
25. R. Li, E. Lee, T. Luo. Physics-informed deep learning for solving coupled electron and phonon boltzmann transport equations. *Phys. Rev. Appl.* **19**, 064049 (2023).
26. R. Li, J. Zhou, J.-X. Wang, T. Luo. Physics-informed bayesian neural networks for solving phonon boltzmann transport equation in forward and inverse problems with sparse and noisy data. *ASME J. Heat and Mass Transfer* **147**, 032501 (2024).
27. C. Fai, A.J. Ladd, C.J. Hages. Machine learning for enhanced semiconductor characterization from time-resolved photoluminescence. *Joule* **6**, 2585 (2022).
28. Y. Xu, A. V. Lalwani, K. Arora, Z. Zheng, A. Renteria, D.G. Senesky, P. Wang. Hall-effect sensor design with physics-informed gaussian process modeling. *IEEE Sensors J.* **22**, 22519 (2022).
29. X. Chen, S. Lu, Q. Chen, Q. Zhou, J. Wang. From bulk effective mass to 2d carrier mobility accurate prediction via adversarial transfer learning. *Nat. Commun.* **15**, 5391 (2024).
30. J.H. Hong, C.H. Lee, H.W. Kim, D.W. Jeon, J.H. Jun, Y.-S. Kim, J.-S. Bae, S. Heo, S. Lee, J. Na, J. You, S. Hong, H. Cho, J.-S. Park, S.B. Cho. Ai-driven quantitative review of mobility–stability trade-off in oxide semiconductors. *Nano Convergence* **13**, 4 (2026).
31. T. Nematiam, Z. Lamprou, Y. Moshfeghi. Accelerating the discovery of high-mobility molecular semiconductors: a machine learning approach. *Chem. Commun.* **61**, 3676 (2025).
32. P. Reiser, M. Konrad, A. Fediai, S. Léon, W. Wenzel, P. Friederich. Analyzing dynamical disorder for charge transport in organic semiconductors via machine learning. *J. Chem. Theory Comput.* **17**, 3750 (2021).
33. A.K. Pimachev, S. Neogi. First-principles prediction of electronic transport in fabricated semiconductor heterostructures via physics-aware machine learning. *npj Comput. Mater.* **7**, 93 (2021).
34. V. Bhat, B. Ganapathysubramanian, C. Risko. Rapid estimation of the intermolecular electronic couplings and charge-carrier mobilities of crystalline molecular organic semiconductors through a machine learning pipeline. *J. Phys. Chem. Lett.* **15**, 7206 (2024).
35. T. Tan, D. Wang. Machine learning based charge mobility prediction for organic semiconductors. *J. Chem. Phys.* **158**, 094102 (2023).
36. K.M. Mamun, N. Pala, M.S.A. Shawkat. A comprehensive review of machine learning approaches for semiconductor device modeling and simulation. *IEEE Access* **13**, 162969 (2025).
37. P. Raut, D.K. Panda, A.K. Goyal. A comprehensive review on next-generation modeling and optimization for semiconductor devices. *IEEE Access* **13**, 123724 (2025).
38. R. Khatua, B. Das, A. Mondal. Physics-informed machine learning with data-driven equations for predicting organic solar cell performance. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **16**, 57467 (2024).
39. R. Couderc, M. Amara, M. Lemiti. Reassessment of the intrinsic carrier density temperature dependence in crystalline silicon. *J. Appl. Phys.* **115**, 093705 (2014).
40. R. Pässler. Dispersion-related description of temperature dependencies of band gaps in semiconductors. *Phys. Rev. B* **66**, 085201 (2002).
41. A. AlQurashi, C. Selvakumar. A new approximation of Fermi-Dirac integrals of order 1/2 for degenerate semiconductor devices. *Superlattices Microstruct.* **118**, 308 (2018).
42. A. Tonda. Review of pysr: high-performance symbolic regression in python and julia. *Genet. Program. Evol. M.* **26**, 7 (2024).
43. D. Angelis, F. Sofos, T. E. Karakasidis. Artificial intelligence in physical sciences: Symbolic regression trends and perspectives. *Arch. Comput. Methods Eng.* **30**, 3845 (2023).
44. V. Hruska, A. Furmanova, M. Bednarik. Analytical formulae for design of one-dimensional sonic crystals with smooth geometry based on symbolic regression. *J. Sound Vibration* **597**, 118821 (2025).
45. B. L. Davis, Z. Jin. Discovery of a planar black hole mass scaling relation for spiral galaxies. *Astrophys. J. Lett.* **956**, L22 (2023).
46. V.V. Kuryliuk, O.Y. Olikh. Thermal conductivity of nanoporous silicon: Molecular dynamics simulations and machine learning prediction. *Low Temp. Phys.* **52**, 50 (2026).
47. T. Mengel, P. Steffanic, C. Hughes, A.C.O. da Silva, C. Nattrass. Interpretable machine learning methods applied to jet background subtraction in heavy-ion collisions. *Phys. Rev. C* **108**, L021901 (2023).
48. Y. Li, H. Wang, Y. Li, H. Ye, Y. Zhang, R. Yin, H. Jia, B. Hou, C. Wang, H. Ding, X. Bai, A. Lu. Electron transfer rules of minerals under pressure informed by machine learning. *Nat. Commun.* **14**, 1815 (2023).

49. M. Cranmer. Interpretable machine learning for science with pysr and symbolicregression.jl. arXiv:2305.01582v3 [astro-ph.IM]
50. M.F. Hanif, M.U. Siddique, J. Si, M.S. Naveed, X. Liu, J. Mi. Enhancing solar forecasting accuracy with sequential deep artificial neural network and hybrid random forest and gradient boosting models across varied terrains. *Advanced Theory and Simulations* **7**, 2301289 (2024).
51. T. Akiba, S. Sano, T. Yanase, T. Ohta, M. Koyama. Optuna: A next-generation hyperparameter optimization framework. In: *Proc of the 25th ACM SIGKDD Int. Conf. Knowl. Discov. Data Mining, Anchorage, AK, USA, August 04–08, 2019*, p. 2623.
52. S.C. Choo. Theory of a forward-biased diffused-junction p-l-n rectifier-part i: Exact numerical solutions. *IEEE Trans. Electron Devices* **19**, 954 (1972).
53. J. Dorkel, P. Leturcq. Carrier mobilities in silicon semi-empirically related to temperature, doping and injection level. *Solid-State Electron.* **24**, 821 (1981).

Одержано 05.03.26

О.Я. Олих

MACHINE LEARNING MODELS FOR EVALUATING EFFICIENT CARRIER MOBILITY IN SILICON

The application of machine learning (ML) models – specifically Random Forest (RF), Gradient Boosting (GB), Support Vector Regression (SVR), and Deep Neural Networks (DNNs) – alongside Symbolic Regression (SR) for predicting carrier mobility in monocrystalline silicon over wide temperature (200–500 K) and doping concentration (10^{13} – 10^{19} cm⁻³) ranges has been evaluated. The analytical expressions derived via SR are notably more parsimonious, requiring 50% fewer parameters than the Klaassen model. Furthermore, these expressions bypass the need for preliminary impurity ionization calculations while maintaining a relative error below 0.1% in most cases. A comparative analysis demonstrated that the SR and SVR models significantly outperform the Arora approximation in terms of accuracy, particularly for minority carriers. The proposed approach offers a robust framework for TCAD systems, substantially reducing computational overhead while ensuring high modeling accuracy.

Keywords: carrier mobility, silicon, Klaassen model, symbolic regression, machine learning.