

ФОРМУ ЗАТВЕРДЖЕНО
рішенням наукової ради Національного фонду
досліджень України
протокол № 20 від 04-07 вересня 2020 року

Додаток 1 до Договору про виконання наукового
дослідження і розробки за рахунок грантової
підтримки

ЗАТВЕРДЖУЮ

Проректор з наукової роботи
Київського національного університету
імені Тараса Шевченка

(підпис) О.І. Жилінська

м.п.

ТЕХНІЧНЕ ЗАВДАННЯ

до проєкту з виконання наукових досліджень і розробок на 2020 рік

**«Розробка фізичних засад акусто-керованої модифікації та машинно-орієнтованої характеристики
кремнієвих сонячних елементів»(далі – Проєкт)**
(назва Проєкту)

Назва конкурсу: «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»

Реєстраційний номер Проєкту: 2020.02/0036

Науковий керівник Проєкту, доцент кафедри загальної фізики Київського національного університету імені Тараса Шевченка _____ (підпис) О.Я. Оліх	ПОГОДЖЕНО: Перший заступник виконавчого директора Національного фонду досліджень України _____ (підпис) С.І. Губар
Начальник планово-фінансового відділу Київського національного університету імені Тараса Шевченка _____ (підпис) О.Б. Білявська	Начальник управління забезпечення грантової підтримки Національного фонду досліджень України _____ (підпис) Н.Л. Посєдинок
Головний бухгалтер Київського національного університету імені Тараса Шевченка _____ (підпис) В.П. Денисенко	Керівник відповідного структурного підрозділу управління забезпечення грантової підтримки Національного фонду досліджень України _____ (підпис)
	Головний спеціаліст відповідного структурного підрозділу управління забезпечення грантової підтримки Національного фонду досліджень України _____ (підпис)

**Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок 2020.02/0036
«Розробка фізичних засад акусто-керованої модифікації та машинно-орієнтованої характеристики
кремнієвих сонячних елементів»**

Рішення Наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»

протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21.

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ (заповнюється відповідно до поданої заявки на одержання грантової підтримки, далі – заявка)

Короткий опис Проєкту (до 5000 знаків)

На сьогодні сонячна фотовольтаїка характеризується найшвидшими темпами зростанням серед усіх технологій у світі, спрямованих на використання відновлюваних джерел енергії. При цьому практичне використання даного способу створення енергії переважно реалізується за допомогою кремнієвих сонячних елементів. Задля здешевлення кінцевої продукції, для створення КСЕ використовуються кристали достатньо невисокої чистоти, причому однією з найпоширеніших і водночас з найшкідливіших домішок, є атоми заліза та інших перехідних металів. Питання щодо з'ясування поведінки дефектів та реалізації можливості їхнього керованого переведення у електрично-неактивний стан мають фундаментальне значення для покращення експлуатаційних характеристик пристроїв. Одним з варіантів модифікації дефектної підсистеми є збудження у кристалі пружних коливань. Проте, наявних на сьогодні знань недостатньо для формування цілісних уявлень щодо акусто-дефектної взаємодії у напівпровідникових кристалах загалом та практичного використання можливостей активного ультразвуку під час виготовлення сонячних елементів зокрема. Особливістю даного проєкту є те, що він передбачає з'ясування фізичних особливостей та механізмів впливу ультразвукового навантаження на процеси перебудови дефектних комплексів, ініційовані іншим активаційним чинником (освітленням) чи викликані прагненням системи повернутися до стану термодинамічної рівноваги. Тобто, проєкт орієнтований на розробку фізичних засад методу, що базується на використанні комплексних процесів, де ультразвуку відведена роль додаткового чинника та певного фактору коригування.

Експериментальна частина проєкту має на меті встановити фізичні закономірності та механізми впливу акустичних хвиль на процес перебудови дефектних комплексів, пов'язаних із атомами перехідних металів та передбачає визначення закономірностей змін параметрів КСЕ (фактор неідеальності, струм насичення, шунтуючий опір, напруга холостого ходу, струм короткого замикання) внаслідок світло-індукованої деградації в умовах ультразвукового навантаження (повздовжні та поперечні хвилі з частотою (1-30) МГц та інтенсивністю (0,1-1Вт/см²) в температурному діапазоні 290-350 К) та порівняння із випадком відсутності звуку; визначення кінетичних характеристик зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-V в умовах ультразвукового навантаження та порівняння з беззвуким випадком; розробку рекомендацій щодо спрямованої зміни експлуатаційних характеристик КСЕ шляхом акустостимульованої деактивації дефектів. Вибір домішкової пари Fe-V як безпосереднього об'єкту акусто-керованої модифікації в КСЕ зумовлений, зокрема, поширеністю даного дефекту у реальних сонячних елементах та його суттєвим впливом на ефективність фотоелектричного перетворення, а також тим, що з компонентами пари пов'язана зміна об'єму кристалу різного знаку, а саме, для дефектів такого типу, відповідно до попередніх досліджень, очікується найбільша ефективність акусто-дефектної взаємодії.

Неруйнівні методи, що мають на меті оцінку концентрації домішок у напівпровідникових структурах, зокрема в КСЕ, мають важливе значення з прикладної точки зору. На сьогодні розроблено чимало як прямих, так і непрямих методів, що дозволяють вирішити подібне завдання. Проте практично всі вони вимагають чи спеціальної підготовки об'єктів для досліджень, чи спеціалізованого обладнання. Водночас, чи не найпоширенішим методом характеристизації сонячних елементів є вимірювання вольт-амперних характеристик (ВАХ). Параметри КСЕ зокрема та процеси поширення носіїв загалом залежать від наявності електрично активних дефектів і тому існує принципова можливість визначення концентрації останніх за виглядом ВАХ. Однією з найголовніших перепон на шляху розробки подібного зручного для

використання та експресного методу є багатопараметричність взаємозв'язку концентрації рекомбінаційних центрів та параметрів ВАХ. Цей проєкт передбачає подолання цієї перешкоди завдяки використанню методів глибокого навчання, які орієнтовані на вирішення задач, де не передбачається можливість чіткої алгоритмізації. Для успішного застосування глибокого навчання є необхідним наявність значної за об'ємом бази даних. У цьому проєкті передбачено створення відповідного масиву даних шляхом моделювання ВАХ для кремнієвих структур n⁺-p-p⁺ з різною товщиною (150-240 мкм) та різним ступенем легування (10¹⁵÷10¹⁷ см⁻³) бази при варіації концентрації домішки в інтервалі 10¹⁰÷10¹³ см⁻³ для температурного діапазону 290-340 К. При цьому буде враховано можливість знаходження атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари Fe-B, а також різні зарядові стани дефекту. Останнім етапом цього напряму проєкту буде налаштування (підбір кількостей схованих шарів та нейронів в них, методу регуляризації, активаційної функції, швидкості навчання) та навчання штучної нейронної мережі, спроможної передбачити концентрацію домішкових атомів заліза на основі параметрів сонячного елемента, умов вимірювання та значення фактору неідеальності.

Тривалість виконання Проєкту
дворічний проєкт

Початок: 01.10.2020 рік

Закінчення: 31.12.2021 рік

Загальна вартість Проєкту, грн.
6 508 830

Вартість Проєкту по роках, тис.грн.:

1-й рік 1779,8

2-й рік 4729,03

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ (заповнюється відповідно до поданої заявки)

до виконання Проєкту буде залучено 7 виконавців, з них:

доктори наук 2;

кандидати наук 2;

інші працівники 3.

Інформація про виконавців (авторів) Проєкту(в тому числі особи, які будуть залучені до виконання Проєкту за трудовим договором або угодою цивільно-правового характеру: ПІБ, основне місце роботи, посада, науковий ступінь).

Оліх Олег Ярославович, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, доцент кафедри загальної фізики, доктор фізико-математичних наук;

Костильов Віталій Петрович, Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, завідувач лабораторії Фізико-технічних основ напівпровідникової фотоенергетики, доктор фізико-математичних наук, професор (прикладна фізика і наноматеріали);

Власюк Віктор Миколайович, Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, науковий співробітник у лабораторії Фізико-технічних основ напівпровідникової фотоенергетики, кандидат фізико-математичних наук;

Лозицький Олег Всеволодович, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, аспірант кафедри загальної фізики;

Коркішко Роман Михайлович, Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, науковий співробітник у лабораторії Фізико-технічних основ напівпровідникової фотоенергетики, кандидат технічних наук;

Майко Катерина Олександрівна, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, аспірант кафедри експериментальної фізики;

Костина Артем Романович, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, студент фізичного факультету

3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ОРГАНІЗАЦІЮ(І) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ (заповнюється відповідно до поданої заявки)

Субвиконавці не залучаються

4. ОПИС ПРОЄКТУ (заповнюється відповідно до поданої заявки)

4.1. Мета Проєкту(до 500 знаків)

Розробка фізичних засад методу акустостимульованої деактивації дефектів, пов'язаних з атомами перехідних металів, у монокристалічних кремнієвих сонячних елементах (КСЕ) з метою покращення експлуатаційних характеристик (ефективності, світлодеградаційної стійкості). Розробка експрес-методу оцінки концентрації електрично-активних центрів у кремнієвих бар'єрних структурах на основі вимірювання вольт-амперних характеристик з використанням методів глибокого навчання.

4.2. Основні завдання Проєкту (до 1000 знаків)

Розробити методику оцінювання кінетичних характеристик перебудови дефектів у бар'єрних структурах в умовах ультразвукового навантаження. Встановити фізичні закономірності та механізми впливу акустичних хвиль на процес перебудови дефектних комплексів, пов'язаних із атомами перехідних металів, у КСЕ залежно від температури, інтенсивності та типу коливань. Шляхом моделювання з'ясувати вплив геометричних особливостей, ступеню легування та наявності різних типів дефектів на особливості формування вольт-амперних характеристик типових кремнієвих сонячних елементів в широкому температурному діапазоні. Використовуючи методи глибокого навчання, встановити взаємозв'язок між величиною фактору неідеальності та концентрацією рекомбінаційних центрів. Запропонувати метод кількісної оцінки електрично-активних дефектів у бар'єрних структурах за величиною фактору неідеальності.

4.3. Детальний зміст Проєкту:

- Сучасний стан проблеми (до 2 сторінок)

Для сучасної цивілізації використання відновлюваних джерел енергії є життєво необхідним. Серед різноманітних технологій, спрямованих на вирішення цього завдання, особливе місце займає безпосереднє перетворення сонячного випромінювання на електроенергію. Унікальність такого підходу пов'язана, насамперед, з можливістю задоволення енергетичних потреб без хімічного та теплового забруднення навколишнього середовища, при цьому генерація енергії може відбуватися безпосередньо в околі місця споживання. Як наслідок, на сьогодні сонячна

фотовольтаїка характеризується найшвидшими темпами зростанням серед усіх енергетичних технологій у світі.

Понад 90% з більше ніж 550 ГВт-год енергії, яка виробляється на сучасному етапі внаслідок застосування фотовольтаїчних перетворювачів, припадає на кремнієві сонячні елементи (КСЕ). Ці системи створюються з використанням аморфного, полікристалічного чи кристалічного кремнію, причому частка останніх складає близько 40%. Як і для інших напівпровідникових пристроїв, одним з визначальних чинників властивостей КСЕ є система дефектів, зокрема, їхній домішковий склад. Зауважимо, що з метою здешевлення кінцевої продукції для створення КСЕ переважно використовуються кристали відносно невисокої чистоти. Так, однією з найпоширеніших і водночас з найшкідливіших домішок є атоми заліза та інших перехідних металів. Чимало зусиль науковців спрямовані на розробку на реалізацію технологічних методів, що мають на меті переведення подібних дефектів у електрично-неактивний стан, зокрема внаслідок їхнього гетерування. Проте коефіцієнти корисної дії реальних елементів суттєво нижчі за теоретичну межу. З цієї точки зору зрозуміло, що питання розуміння поведінки дефектів та керування їхнім станом мають фундаментальне значення для покращення експлуатаційних характеристик пристроїв.

Загальновизнаними методами зовнішньої активації/деактивації технологічно функціональних дефектів для управління властивостями напівпровідникових структур є опромінення та термообробка, які, проте, суттєво впливають і на стан кристала загалом. Іншим варіантом модифікації дефектної підсистеми є збудження у кристалі пружних коливань. У літературі, зокрема, показано, що акустичні хвилі у неп'єзоелектричних матеріалах здатні викликати перерозподіл домішок та викликати перебудову окремих точкових дефектів, причому такий спосіб характеризується вибірковістю впливу саме на області з порушеннями періодичності та може бути реалізований при кімнатних температурах. Крім того, показано слушність використання ультразвукового навантаження як додаткового фактору впливу під час технологічних операцій, таких як, наприклад, іонна імплантація. Водночас, наявної інформації недостатньо для формування цілісних уявлень щодо акусто-дефектної взаємодії у напівпровідникових, зокрема кремнієвих, кристалах. Як наслідок, можливості активного ультразвукового впливу не використовуються під час виготовлення сонячних елементів, на відміну від багатьох інших технологічних процесів.

Неруйнівні методи, що мають на меті оцінку концентрації домішок, у тому числі перехідних металів, у напівпровідникових кристалах та структурах на їхній основі, зокрема сонячних елементах, мають важливе значення з прикладної точки зору. На сьогодні розроблено чимало як прямих (інфрачервона томографія, електронно-парамагнітний резонанс, нестаціонарна спектроскопія і т.п.), так і непрямих (поверхневої фотоерс, виміри часу життя неосновних носіїв) методів, що дозволяють вирішити подібне завдання. Проте практично всі вони вимагають чи спеціальної підготовки об'єктів для досліджень, чи спеціалізованого обладнання. Водночас, чи не найпоширенішим методом характеристизації сонячних елементів є вимірювання вольт-амперних характеристик (ВАХ), який, зокрема, дозволяє отримати такі фундаментальні параметри даних пристроїв як коефіцієнт корисної дії, напруга холостого ходу та струм короткого замикання. Очевидно, що ці характеристики зокрема та процеси поширення носіїв загалом залежать від наявності електрично активних дефектів і тому існує принципова можливість визначення концентрації останніх за виглядом ВАХ. Однією з найголовніших перепон на шляху розробки подібного зручного для використання та експресного методу є багатопараметричність взаємозв'язку концентрації рекомбінаційних центрів та параметрів ВАХ, які можуть бути визначені шляхом апроксимації експериментальних кривих. Проте в останнє десятиліття методи глибокого навчання, спрямовані, зокрема, на вирішення задач, де не передбачається можливість чіткої алгоритмізації, знаходять успішне застосування у різних галузях теоретичної та прикладної фізики. Це дозволяє сподіватись на можливість реалізації вказаного методу характеристизації сонячних елементів з використанням подібних підходів.

- Новизна Проєкту (до 1 сторінки)

Перша частина проєкту пов'язана з експериментальним встановленням закономірностей динамічних акусто-індукованих ефектів у КСЕ. На відміну від численних попередніх досліджень, у яких акустичні хвилі використовувались як одноосібний інструмент незворотної модифікації

неп'єзоелектричної напівпровідникової системи шляхом виведення її зі стабільного (метастабільного) стану, даний проєкт передбачає з'ясування фізичних особливостей та механізмів впливу ультразвукового навантаження на процеси перебудови дефектних комплексів, ініційовані іншим активаційним чинником (освітленням) чи викликані прагненням системи повернутися до стану термодинамічної рівноваги. Тобто, проєкт орієнтований на розробку фізичних основ методу, що базується на використанні комплексних процесів, де ультразвуку відведена роль додаткового чинника та певного коректуючого фактору. Крім того, новизна проєкту пов'язана з вибором об'єкту для вивчення акустичної активності, а саме, домішок атомів перехідних металів та комплексів за їхньою участю у монокристалічному кремнії.

Друга частина проєкту спрямована на розробку нового експрес-методу оцінки концентрації рекомбінаційних центрів, який є простим за реалізацією доповненням стандартної процедури характеристики КСЕ за допомогою ВАХ. Запропонований підхід передбачає низку нових підходів, зокрема, використання величини фактору неідеальності як кількісного показника концентрації рекомбінаційних центрів та застосування методів глибокого навчання для встановлення взаємозв'язку вказаних величин.

- Методологія дослідження (до 2 сторінок)

Експериментальна частина проєкту має на меті встановити фізичні закономірності та механізми впливу акустичних хвиль на процес перебудови дефектних комплексів, пов'язаних із атомами перехідних металів та передбачає наступні етапи: 1) підбір реальних КСЕ з базою, легованою бором, та високою концентрацією домішкового заліза; 2) визначення впливу світло-індукованого розпаду пар Fe-B на параметри вольт-амперних характеристик (фактор неідеальності, струм насичення, шунтуючий опір, напруга холостого ходу, струм короткого замикання) КСЕ; 3) з'ясування кількісних характеристик кінетики зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B; 4) визначення закономірностей змін параметрів КСЕ внаслідок світло-індукованої деградації в умовах ультразвукового навантаження (повздовжні та поперечні хвилі з частотою (1-30) МГц та інтенсивністю (0,1-1) Вт/см² в температурному діапазоні 290-350 К) та порівняння із беззвуким випадком; 5) визначення кінетичних характеристик зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B в умовах ультразвукового навантаження та порівняння з випадком відсутності звуку; 6) розробка рекомендацій щодо спрямованої зміни експлуатаційних характеристик КСЕ шляхом акустостимульованої деактивації дефектів.

Вибір домішкової пари Fe-B як безпосереднього об'єкту акусто-керованої модифікації в КСЕ зумовлений декількома факторами. А саме

- а) поширеністю даного дефекту у реальних сонячних елементах та його суттєвим впливом на ефективність фотоелектричного перетворення;
- б) високим ступенем вивченості параметрів Fe-B;
- в) легкістю ініціації перебудови комплексу: пара руйнується під впливом освітлення і відновлюється у темряві, причому характерний час останнього процесу при кімнатних температурах складає десятки хвилин;
- г) з компонентами пари пов'язана зміна об'єму кристалу $\Delta\Omega$ різного знаку: бор є домішкою заміщення з іонним радіусом, який менший ніж для атомів кремнію Si, тоді як для міжвузлового заліза $\Delta\Omega > 0$; а саме для дефектів такого типу, відповідно до попередніх досліджень, очікується найбільша ефективність акусто-дефектної взаємодії.

Розробка методу характеристики домішкового складу сонячних елементів на основі вимірювання ВАХ передбачається шляхом теоретичного моделювання кремнієвих n⁺-p-p⁺ структур з домішками атомів перехідних металів (на прикладі заліза). Ця частина включає розрахунки ВАХ для структур з різною товщиною (150-240 мкм) та ступенем легування ($10^{15} \div 10^{17}$ см⁻³) бази при варіації концентрації домішки в інтервалі $10^{10} \div 10^{13}$ см⁻³ для температурного діапазону 290-340 К. При цьому буде враховано можливість знаходження атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари Fe-B, а також різні зарядові стани дефекту. Розрахунки будуть здійснені за допомогою симулятора сонячних елементів SCAPS 3.3.08 з врахуванням отриманих в результаті аналізу літературних джерел реальних величин та температурних залежностей параметрів кремнію (ширини та звуження забороненої зони, рухливості, теплової швидкості та ефективної маси носіїв, коефіцієнтів власної рекомбінації тощо) та рекомбінаційних центрів. Наступний етап – визначення фактору неідеальності для розглянутих структур шляхом апроксимації отриманих

ВАХ. Апроксимація буде здійснюватися відповідно до дводіодної моделі з використанням мета-евристичного методу оптимізації Jaya. Останній етап – налаштування (підбір кількостей схованих шарів та нейронів в них, методу регуляризації, активаційної функції, швидкості навчання) та навчання (на основі масиву даних, отриманих попередньо) штучної нейронної мережі, спроможної передбачити концентрацію домішкових атомів заліза на основі параметрів сонячного елемента, умов вимірювання ВАХ та отриманого в результаті апроксимації ВАХ значення фактору неідеальності. Орієнтовний інструмент роботи зі штучною нейронною мережею – пакет Keras.

- Інформація про наявну матеріально-технічну базу, обладнання та устаткування, необхідні для виконання Проєкту (до 1 сторінки)

Центр випробувань фотоперетворювачів і батарей фотоелектричних укомплектований наступним обладнанням і стандартними зразками:

- установкою фототехнічних випробувань сонячних елементів;
- установкою для визначення спектральних характеристик фотоперетворювачів;
- установкою для електричних і фототехнічних випробувань сонячних батарей;
- вимірювачем фотоенергетичних параметрів сонячних модулів „Фотон-3”;
- установкою імпульсного тестування фотоелектричних модулів і батарей;
- вимірювачем енергетичної освітленості ВЕО-01;
- зразковими фотоперетворювачами;
- лазерним еліпсометром;

Крім того, наявна матеріально-технічна база включає наступні елементи

- установка для вимірювання вольт-амперних характеристик $((-5 \div 5) \text{ В}, (10^{-8} \div 2 \cdot 10^{-2}) \text{ А})$, точність 0,1%, швидкість – до 50 вимірів/с);
- термостат на базі пропорційно-інтегрально-диференційного контролера (температурна стабільність $\pm 0,02 \text{ К}$);
- п'єзоелектричні перетворювачі для збудження повздовжніх та поперечних хвиль у діапазоні $(1 \div 30) \text{ МГц}$;
- комплекс для ультразвукового навантаження (генератор ГЗ-41, частотомір ЧЗ-34, цифровий осцилограф GDS-806S, характерограф Х1-48);
- комп'ютер AMDA4–3400, 2.7GHz CPU, 3072 MB RAM.

- Очікувані результати виконання Проєкту (до 1 сторінки):

Очікувана в результаті виконання проєкту наукова продукція полягає у

- з'ясуванні фізичних закономірностей та механізмів взаємодії дефектних комплексів, пов'язаних із атомами перехідних металів, у КСЕ з пружними хвилями ультразвукового діапазону;
- оцінці можливостей цілеспрямованого керування характеристиками кремнієвих сонячних елементів шляхом застосування ультразвукового навантаження під час виробництва та розробці рекомендацій щодо практичного використання даного підходу;
- розробці фізичних основ методу оцінки концентрації електрично-активних дефектів у бар'єрних структурах за величиною фактору неідеальності;
- створенні масиву даних (близько 15 тисяч наборів) розрахованих величин фактору неідеальності для кремнієвих структур n^+-p-p^+ з різними геометричними та електрофізичними характеристиками;
- налаштуванні штучної нейронної мережі для оцінки концентрації атомів заліза в кремнієвих n^+-p-p^+ структурах;
- підготовка не менше 2 статей у журналах першого та другого квартилів;
- підготовка не менше 3 доповідей на конференціях міжнародного рівня.

- Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці (до 1 сторінки).

Встановлені фізичні закономірності впливу ультразвукового навантаження на процеси перебудови домішкових центрів, пов'язаних з атомами перехідних металів, можуть бути

використані для модифікації стандартних технологічних операцій, що використовуються при створенні кремнієвих сонячних елементів, з метою деактивації вказаних дефектів. Визначенні особливості акусто-дефектної взаємодії дозволять налаштувати параметри ультразвукового впливу задля отримання найбільшої ефективності контрольованої модифікації дефектної підсистеми. Крім того, отримані результати можуть стати основою для розробки методів акустичної інженерії дефектів у напівпровідникових пристроях.

З'ясовані кількісні характеристики взаємозв'язку величини фактору неідеальності та концентрації рекомбінаційних центрів можуть бути покладені в основу експрес-методу оцінки домішкового складу реальних сонячних елементів. Налаштована штучна нейронна мережа може бути безпосередньо використана для оцінки концентрації атомів заліза в кремнієвих n⁺-p-p⁺ структурах, де вказані дефекти є основними рекомбінаційними центрами.

4.4. Виконання Проєкту у 2020 році:

- Обґрунтування необхідності придбання у 2020 році за рахунок гранту обладнання та устаткування, а також напрямів їх використання після завершення реалізації Проєкту (інформація наводиться у разі наявності відповідної інформації у заявці) (до 1 сторінки).

За рахунок коштів проєкту передбачається придбання обладнання на загальну суму 1252,64 тис.грн.:

- Вимірювальних модулів 4210-CVU та Keithley 4200A-CVIV. Це модулі з використанням платформи Keithley 4200A-SCS (яка передбачається для закупівлі у першому кварталі 2021 року) дозволяють з високою точністю проводити швидкі вимірювання вольт-фарадних характеристик (10^{-14} ÷ 10^{-6} Ф, до 400 В у частотному діапазоні 10^3 ÷ 10^7 МГц) одночасно з вимірюванням вольт-амперних. Необхідність придбання пов'язана з розширенням можливостей тестування КСЕ та підготовки рекомендацій для модифікації технологічних процесів завдяки проведенню вольт-фарад досліджень у широкому частотному діапазоні. Після завершення проєкту система буде використовуватися для дослідження параметрів різноманітних напівпровідникових пристроїв та структур, а також для тестування методів активного впливу на їхні властивості.

- Ноутбук ASUS TUF Gaming FX505DU. Сучасні підходи до глибоко навчання передбачають роботу з великими об'ємами даних, що висуває достатньо жорсткі вимоги до швидкодії та оперативної пам'яті обчислювальних пристроїв. Зокрема, широко використовуються процеси паралельних обчислень з використанням відео-процесорів, що підтримують технологію CUDA. Більшість розроблених інструментів для роботи зі штучними нейронними мережами, зокрема Keras, який планується використати під час реалізації проєкту, оптимізовані саме для використання подібних технологій. На жаль, наявний комп'ютерний парк з цієї точки зору є застарілим і для ефективної роботи зі штучною нейронною мережею, спроможною передбачити концентрацію домішkových атомів заліза на основі параметрів сонячного елемента необхідне обладнання з більшою розрахунковою потужністю. Після завершення гранту ноутбук буде і надалі використовуватися для реалізації процесів глибокого навчання.

Обсяг фінансування на 2020 рік, необхідний для виконання Проєкту, з відповідним обґрунтуванням за статтями витрат Кошторису витрат (Додаток 3 до Договору) (до 2 сторінок).

1-й рік 1779,8 тис. грн.:

Витрати на оплату праці (в т.ч. нарахування) 7 учасників, задіяних у виконанні проєкту, складають – 344,04 тис. грн. Для закупівлі необхідних **предметів та матеріалів** для виконання проєкту заплановано витрати на загальну суму – 5,14 тис. грн., які включають придбання картриджів, фотобарабану та паперу офісного для підготовки інформаційно-аналітичних довідок, наукових публікацій, звітів та проміжних результатів роботи. Витрати на **службові відрядження** відсутні. **Інші витрати** відсутні. Витрати на закупівлю обладнання складають 1252,64 тис. грн. та обґрунтовані в п.4.4. технічного завдання. **Непрямі витрати**, обсяг яких, становить – 177,98 тис. грн., включають витрати на оплату комунальних послуг та експлуатаційні витрати.

ППП	Завдання під час етапу
Оліх О.Я., д.ф-м.н., доцент, науковий керівник проєкту	Розробка розрахункової моделі кремнієвої n^+-p-p^+ структури; розробка програмного забезпечення для автоматизації моделювання та обробки результатів; проведення моделювання; розробка методики оцінювання кінетичних характеристик сонячних елементів в умовах ультразвукового навантаження, підготовка звіту
Костильов В.П. д.ф-м.н., проф.	Підбір кремнієвих сонячних елементів (КСЕ); розробка методики вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в КСЕ, підготовка звіту
Власюк В.М. к.ф-м.н, н.с.	Відпрацювання режимів вимірювання кінетики світло індукованих процесів в монокристалічних пластинах кремнію, підготовка звіту
Лозицький О.В., аспірант	Розробка програмного забезпечення для автоматизації моделювання та обробки результатів; проведення моделювання
Коркішко Р.М., к.т.н, н. с.	Відпрацювання режимів вимірювання кінетичних змін ВАХ сонячних елементів, підготовка звіту
Майко К.О., аспірант	Підготовка експериментального стенду; літературний пошук реальних величинами і температурних залежностей параметрів кремнію та рекомбінаційних центрів
Костина А.Р., студент	Практична реалізація методики оцінювання кінетичних характеристик ВАХ; підготовка зразків до вимірювань

Разом за **1-й рік** 1779,8 тис. грн.

- Можливі ризики, що можуть вплинути на реалізацію Проєкту у 2020 році (до 1 сторінки). Введення жорсткого карантину перешкодить виконанню експериментальних досліджень у повному обсязі.

5. ЕТАП ВИКОНАННЯ ПРОЄКТУ (ЕВП) та індикатори виконання у 2020 році

ЕВП №:1 01.10.2020-15.12.2020

Назва **ЕВП**: Моделювання вольт-амперних характеристик n^+-p-p^+ структур

Цілі **ЕВП**: сформувані матеріальну та розрахункову бази проєкту, отримати масив даних для ВАХ n^+-p-p^+ структур з різними параметрами; відпрацювати методику вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в КСЕ

- Заплановані завдання для **ЕВП** та організації, які їх виконують, в тому числі субвиконавців (до 1000 знаків)

Завдання 1. Розробка розрахункової моделі кремнієвої n^+-p-p^+ структури для симулятора сонячних елементів SCAPS 3.3.08 за реальними величинами і температурними залежностями параметрів кремнію та рекомбінаційних центрів, отриманими в результаті аналізу літературних джерел, розробка програмного забезпечення для автоматичного створення моделей з різними параметрами.

Завдання 2. Підбір кремнієвих сонячних елементів (КСЕ) з базою, легованою бором, та високою концентрацією домішкового заліза.

Завдання 3. Створення програмного забезпечення для парсингу файлів, які є результатом роботи SCAPS; проведення розрахунків вольт-амперних характеристик (ВАХ) для кремнієвих n^+-p-p^+ структур з різною товщиною (150-240 мкм) та ступенем легування ($10^{15} \div 10^{17} \text{ см}^{-3}$) бази при варіації концентрації домішки в інтервалі $10^{10} \div 10^{13} \text{ см}^{-3}$ для температурного діапазону 290-340 К.

Завдання 4. Підготовка експериментального стенду для вимірювання перехідних світлоіндукованих процесів в КСЕ.

Завдання 5. Відпрацювання режимів вимірювання кінетики світло індукованих процесів в КСЕ.

- Індикатори виконання (який науковий або інший результат буде отримано в межах етапу)

Програмне забезпечення для автоматичного створення моделей n^+-p-p^+ структур для симулятора сонячних елементів SCAPS; набір КСЕ та кремнієвих монокристалічних пластин з різним ступенем легування, масив даних розрахованих ВАХ для кремнієвих структур n^+-p-p^+ з різними геометричними та електрофізичними характеристиками; програмне забезпечення для парсингу файлів, які є результатом роботи SCAPS; експериментальний стенд для вимірювання перехідних світлоіндукованих процесів в КСЕ; тестові результати вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в КСЕ.

6. НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ, ЩО ОЧІКУЮТЬСЯ ОТРИМАТИ У 2020 РОЦІ (до 2 сторінок)

Програмне забезпечення для автоматичного створення моделей кремнієвої n^+-p-p^+ структури, придатних для подальшого використання у симуляторі сонячних елементів SCAPS 3.3.08. Вихідними даними моделі є рівні легування, концентрація домішкового заліза, товщ будуть використані температура, концентрація легуючих домішок, товщини шарів та температура. При створенні моделі будуть враховані температурні та концентраційні залежності ширини забороненої зони, звуження ширини забороненої зони, рухливостей, теплових швидкостей та ефективних мас носіїв заряду, власної концентрації носіїв, густини енергетичних рівнів поблизу дозволених зон, енергетичного положення та ефективного перерізу захоплення центрів, пов'язаних з дефектами. Також враховуватимуться просторові розподіли концентрації відокремлених міжвузольних атомів заліза та пар залізо-бор.

Програмне забезпечення для парсингу файлів, які є результатом роботи SCAPS, що дозволяє виділяти вольт-амперні характеристики (ВАХ) з врахуванням як загального струму, так і його окремої складової, пов'язаної з рекомбінацією на дефектах.

Розрахований масив ВАХ кремнієвих n^+-p-p^+ структур з різною товщиною (150-240 мкм) та ступенем легування ($10^{15} \div 10^{17} \text{ см}^{-3}$) бази при варіації концентрації домішки в інтервалі $10^{10} \div 10^{13} \text{ см}^{-3}$ для температурного діапазону 290-340 К – загалом близько 30 тис характеристик. Розраховані ВАХ в наступній частині проекту будуть використані для розробки фізичних основ експрес-методу оцінки концентрації електрично-активних дефектів у бар'єрних структурах за величиною фактору неідеальності, а також для налаштування штучної нейронної мережі для оцінки концентрації атомів заліза в кремнієвих n^+-p-p^+ структурах.

Експериментальна установка для вимірювання кінетики світло індукованих процесів в кремнієвих сонячних елементах в умовах ультразвукового навантаження. Установка у наступній частині проекту буде використана для з'ясування фізичних закономірностей та механізмів взаємодії дефектних комплексів, пов'язаних із атомами перехідних металів, у кремнієвих сонячних елементах з пружними хвилями ультразвукового діапазону. В свою чергу, встановлені фізичні закономірності впливу ультразвукового навантаження на процеси перебудови домішкових центрів, пов'язаних з атомами перехідних металів, можуть бути використані для модифікації стандартних технологічних операцій, що використовуються при створенні кремнієвих сонячних елементів, з метою деактивації вказаних дефектів.

7. ПЕРЕЛІК ДОКУМЕНТІВ, ЩО ПОДАЮТЬСЯ ЗА РЕЗУЛЬТАТАМИ РЕАЛІЗАЦІЇ ПРОЄКТУ У ПОТОЧНОМУ РОЦІ, ТА ВИМОГИ ЩОДО ДЕРЖАВНОЇ РЕЄСТРАЦІЇ НАУКОВО-ДОСЛІДНОЇ РОБОТИ

7.1. Перелік документів, що подаються за результатами реалізації Проєкту

Грантоотримувач не пізніше 15 грудня 2020 року подає Грантонадавачу:

- а) Акт про виконання проміжного етапу Проєкту – у 2-х паперових примірниках;
- б) науковий звіт про проміжні результати реалізації Проєкту, оформлений відповідно до ДСТУ 3008:2015 «Інформація та документація. Звіти у сфері науки і техніки. Структура та правила оформлювання» – в електронному вигляді та у 2-х паперових переплетених примірниках;

- в) фінансовий звіт про використання бюджетних коштів за етап – в електронному вигляді та у 2-х паперових примірниках;
- г) витяг із протоколу засідання вченої (наукової, науково-технічної, технічної) ради Грантоотримувача про виконання Проєкту у відповідному році – в 1-ому паперовому примірник;
- д) анотований звіт про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проєкту із виконання наукових досліджень і розробок (для оприлюднення) – в електронному вигляді та в 1-ому паперовому примірнику;
- е) інші матеріали та документи, відповідно до Технічного завдання та Календарного плану в 1-ому паперовому примірнику;
- є) копії документів щодо придбання обладнання та устаткування за рахунок гранту під час виконання Проєкту;
- ж) за умов залучення субвиконавця – науковий звіт (оформлений відповідно до ДСТУ 3008:2015 «Інформація та документація. Звіти у сфері науки і техніки. Структура та правила оформлювання») в електронному вигляді та у 2-х паперових примірниках; копію договору із субвиконавцем (з додатками), копію кошторису витрат, копію фінансового звіту про використання бюджетних коштів, копію акту здачі-приймання робіт, завірені належним чином.

7.2. Підприємство/установа/організація (Грантоотримувач) здійснює державну реєстрацію науково-дослідної роботи та не пізніше 10 робочих днів після подання звітної документації, зазначеної у п. 7.5 Договору, надає Грантонадавачу примірники реєстраційної, облікової та інформаційної карток у порядку, встановленому законодавством.

***Примітки:**

Фінансові звіти про використання бюджетних коштів подаються за підписами керівника, наукового керівника Проєкту, головного бухгалтера, начальника планово-фінансового відділу організації/підприємства/установи (Грантоотримувача).

Технічне завдання до Проєкту із виконання наукових досліджень і розробок не повинно містити відомостей, заборонених до відкритого опублікування.