

УДК 539.12;537.8  
УКПП 72.19.13-00.00  
№ держреєстрації 0121U111034

Міністерство освіти і науки України  
Київський національний університет імені Тараса Шевченка  
01601, м. Київ, вул. Володимирська, 64/13, тел: 239-31-25

ЗАТВЕРДЖУЮ  
Проректор з наукової роботи  
Київського національного університету  
імені Тараса Шевченка  
професор \_\_\_\_\_ Г.М. Толстанова  
«31» серпня 2021 р.

НАУКОВИЙ ЗВІТ  
ПРО ПРОМІЖНІ РЕЗУЛЬТАТИ РЕАЛІЗАЦІЇ ПРОЄКТУ 2020.02/0036  
за договором від 23.04.2021 № 15/02/0036  
Розробка фізичних зasad акусто-керованої модифікації та машинно-  
орієнтованої характеристизації кремнієвих сонячних елементів  
СТВОРЕННЯ МЕТОДИКИ ОЦІНЮВАННЯ КІНЕТИЧНИХ  
ХАРАКТЕРИСТИК ВАХ В УМОВАХ УЛЬТРАЗВУКОВОГО  
НАВАНТАЖЕННЯ ТА ШТУЧНОЇ НЕЙРОННОЇ МЕРЕЖІ ДЛЯ ОЦІНКИ  
КОНЦЕНТРАЦІЇ ЗАЛІЗА В КСЕ  
(проміжний)

Науковий керівник проєкту  
д-р фіз.-мат. наук, доц.

О.Я. Оліх

2021

Результати роботи розглянуто Науково-технічною радою Київського  
національного університету імені Тараса Шевченка,  
протокол № \_\_\_\_ від 25.08.2021 р.

## СПИСОК АВТОРІВ

Науковий керівник,  
доцент, докт. фіз.-мат. наук,  
доцент

О.Я. Оліх  
(вступ, висновки,  
реферат, розділ 1,  
підрозділи 2.2, 2.4)

Завідувач лабораторії,  
докт. фіз.-мат. наук,  
професор

В.П. Костильов  
(підрозділи 2.2, 2.3; Інститут  
фізики напівпровідників  
ім. В.Є. Лашкарьова  
НАН України)

Наук. співроб.,  
канд. фіз.-мат. наук

В.М. Власюк  
(підрозділи 2.1, 2.3; Інститут  
фізики напівпровідників  
ім. В.Є. Лашкарьова  
НАН України)

Наук. співроб.,  
канд. техн. наук

Р.М. Коркішко  
(підрозділи 2.1, 2.4; Інститут  
фізики напівпровідників  
ім. В.Є. Лашкарьова  
НАН України)

Аспірант

О.В. Лозицький  
(підрозділ 1.1, 1.3)

Аспірант

К.О. Майко  
(підрозділ 1.2, 1.4)

## РЕФЕРАТ

Звіт про виконання наукового дослідження і розробки за рахунок грантової підтримки: 96 с., 48 рис., 12 табл., 42 джерела.

### ВОЛЬТ-АМПЕРНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ, ГЛИБОКА НЕЙРОННА МЕРЕЖА, КРЕМНІЙ, ПЕРЕБУДОВА ДЕФЕКТІВ, РЕКОМБІНАЦІЙНІ ЦЕНТРИ, СОНЯЧНІ ЕЛЕМЕНТИ

**Об'єкт дослідження:** процеси перенесення заряду в кремнієвих сонячних елементах з різним станом дефектів, пов'язаних з атомами заліза; процеси асоціації пари залізо-бор в умовах ультразвукового навантаження.

**Мета роботи:** налаштування та тренування нейронної мережі, орієнтованої на оцінку концентрації домішкового заліза в кремнієвих  $n^+ - p - p^+$  структурах; дослідження впливу світло-індукованого розпаду пар FeB на фотоелектричні параметри кремнієвих сонячних елементів, встановлення фізичних закономірностей відновлення пар FeB в умовах ультразвукового навантаження при використанні повздовжніх хвиль.

**Методи дослідження:** моделювання вольт-амперних характеристик, гратковий та випадковий пошук при налаштуванні штучної нейронної мережі, вимірювання вольт-амперних характеристик та кінетики струму короткого замикання.

Підготовлено тренувальний та тестові набори для глибокої нейронної мережі, призначеної для передбачення концентрації домішкового заліза в кремнієвих  $n^+ - p - p^+$  структурах; проведено налаштування мережі та вибрано оптимальні значення конфігурації схованих шарів та гіперпараметрів. Показана можливість визначення концентрації домішок (на прикладі заліза) в кремнієвих сонячних елементах на основі вимірювання вольт-амперних характеристик з використанням глибокої нейронної мережі з середньою відносною квадратичною похибкою до 0,005. Показано, що для ефективної роботи нейронної мережі доцільне використання двох значень величини фактору неідеальноті, які відповідають випадкам як наявності лише міжузольних атомів заліза, так і рівноважного співіснування пар FeB та Fe<sub>i</sub>. Виявлено, що найбільш чутливими до розпаду пар залізо-бор є струм короткого замикання, максимальна вихідна потужність. Виявлено ефект зменшення енергії міграції атомів заліза в КСЕ під дією пружних коливань ультразвукового діапазону. Показано, що ефективність УЗ впливу на енергію міграції зменшуються при збільшенні частоти УЗ та зменшенні температури; залежність зміни енергії міграції від інтенсивності пружних коливань характеризується насиченням.

## ЗМІСТ

Скорочення.....	6
Вступ.....	7
1 Налаштування штучної нейронної мережі для передбачення концентрації домішкових атомів заліза в кремнієвих сонячних елементах .....	11
1.1 Підготовка тренувального та тестового наборів розмічених даних на основі модельованого набору вольт-амперних характеристик кремнієвих $n^+ - p - p^+$ структур.....	11
1.2 Налаштування гіперпараметрів штучної нейронної мережі ..	23
1.3 Навчання та тестування нейронної мережі.....	46
1.4 Основні результати розділу 1 .....	50
2 Визначення закономірностей змін параметрів кремнієвих сонячних елементів внаслідок світло-індукованої деградації в умовах ультразвукового навантаження при використанні повздовжніх хвиль.....	52
2.1 Експериментальний стенд для оцінювання кінетичних характеристик перебудови дефектів у бар'єрних структурах в умовах ультразвукового навантаження.....	52
2.2 Методика екстрагування параметрів дефектів, пов'язаних із залізом .....	57
2.3 Вплив світло-індукованого розпаду пар FeB на параметри вольт-амперних характеристик кремнієвих сонячних елементів.....	66

2.4	Закономірності змін параметрів КСЕ внаслідок світло-індукованої деградації та відновлення пар FeB в умовах ультразвукового навантаження при використанні повз涓жніх хвиль .....	78
2.5	Основні результати розділу 2.....	86
	Висновки.....	89
	Перелік джерел посилання.....	91
	Додаток А Перелік підготовлених доповідей на конференції.....	96

## СКОРОЧЕННЯ

АХ	—	Акустична хвиля
AI	—	акустоіндукований
ВАХ	—	вольт-ампері характеристики
КСЕ	—	кремнієвий сонячний елемент
ОПЗ	—	область просторового заряду
ПІД	—	пропорційно-інтегрально-диференціальний
СКЗ	—	струм короткого замикання
УЗ	—	ультразвук
УЗН	—	ультразвукове навантаження
ШНМ	—	штучна нейронна мережа
ШРХ	—	Шоклі-Ріда-Хола
DUT	—	device under test, пристрій, що досліджується
MSRE	—	mean squared relative error, середня відносна квадратична похибка
SRE	—	squared relative error, відносна квадратична похибка

## ВСТУП

Одним з найважливіших завдань людства на сьогодні є щонайширше використання відновлювальних джерел енергії. З цієї точки зору чи найбільш перспективним та широко використовуваним є безпосереднє перетворення сонячного випромінювання в електричну енергію. Близько 90% світового фотовольтаїчного перетворення реалізується за допомогою кремнієвих кристалічних структур. Зрозуміло, що фундаментальне значення має покращення експлуатаційних характеристик подібних пристрій.

Водночас, робочі параметри кремнієвих сонячних елементів (КСЕ), як і інших напівпровідниковых систем, багато в чому визначаються рекомбінаційно активними дефектами. З цієї точки зору атоми заліза є одночасно надзвичайно поширеними та шкідливими. Протягом останніх років активно розвиваються наукові дослідження, спрямовані як на виокремлення ролі саме залізовмісних дефектів у впливі на характеристики КСЕ, зокрема параметри вольт-амперних характеристик (ВАХ), так і на шляхи їхньої деактивації.

Аналізуючи перший напрямок можна виділити роботи, де експериментально проаналізовано взаємозв'язок концентрації заліза з величиною часу життя неосновних носіїв заряду (І.Гордон, Університет Дебрецена, Угорщина) та величиною фактору неідеальності (Дж. Бодунрін, Д. Оеба, С. Молої, Університет Південної Африки, Преторія, Південна Африка), а також теоретичну роботу Я. Шмідта (Інститут досліджень сонячної енергетики, Хамелн, Німеччина), спрямовану на аналіз впливу розпаду пари залізо-бор на параметри фотоелектричного перетворення КСЕ. Водночас результати експериментального дослідження впливу стану подібного комплексу на характеристики реальних КСЕ відсутні.

Значний інтерес викликає можливість преципітації домішкового заліза під час технологічних операцій, застосовних при стандартному виготовленні

КСЕ. Наприклад, показано що деактивація цих дефектів можлива під час дифузії фосфору, як імплантованого у кремній (В. Вяхяніссі, А. Хаарахілтунен, Х. Савін, Університет Аалто, Еспо, Фінляндія), так і нанесеного розпиленням (Д. Вебер, Т. Мчедлідзе, Технічний Університет Дрездена, Німеччина). Останні автори також показали, що деактивація можлива і під час створення антивідбиваючого покриття. Процеси гетерування атомів заліза визначаються їхньою дифузійною здатністю і збільшення цього параметру в ультразвуковому полі під час вказаних вище технологічних операцій має підвищити ефективність деактивації дефектів. Проте дослідження щодо впливу пружних коливань на рух атомів заліза в літературі відсутні. З іншого боку, дослідження С. Остапенка та Р. Бела (Центр мікроелектронних досліджень, Тампа, США) показали, що ультразвук може бути причиною розпаду пар будови дефектних комплексів, пов'язаних з домішкових залізом, тобто цей дефект є акустоактивним. Крім того, певними передумовами робіт, запланованих у Проєкті, є відоме покращення ефективності інших технологічних операцій у випадках, коли вони відбуваються в акустичному полі. Мова насамперед, йде про процеси іонної імплантації, що широко відображені в роботах Б.М. Романюка та В.П. Мельника (Інститут фізики напівпровідників ім. В.С. Лашкарьова НАН України).

Важливу роль при виробництві КСЕ відіграють методи оцінки концентрації домішок, зокрема заліза. Сучасні наукові дослідження спрямовуються на розробку подібних методів, які спираються на аналіз ВАХ сонячних елементів. Так К. Клейс та Е. Сімоен (Левенський католицький університет, Левен, Бельгія) запропонували використовувати температурну залежність компонент струму, С. Булярський (Інститут нанотехнологій мікроелектроніки, Москва, Росія) – диференціальні коефіцієнти ВАХ. Проте ці підходи вимагають вимірювання багаточисленних ВАХ чи висувають високі вимоги до точності апаратури, відповідно. Нами запропоновано метод,

що полягає у використанні величини фактору неідеальності як кількісного показника концентрації рекомбінаційних центрів. Проте взаємозв'язок цієї характеристики ВАХ з дефектами заплутаний багатьма іншими фізичними процесами і задача вичленення саме внеску заліза не має чіткої алгоритмізації. З іншого боку, подібні задачі з недавнього часу достатньо ефективно вирішуються за допомогою методів штучного інтелекту. Так методи машинного навчання застосовні до багатьох фізичних проблем (І. Чірак, Інститут квантової оптики ім. Макса Планка, Гархінг-бай-Мюнхен, Німеччина). У тому числі глибокі нейронні мережі використовуються, наприклад, у роботах Ш. Джу, Ш. Сімідзу та Д. Шіомі (Університет Токіо, Японія) для визначення транспортних властивостей матеріалів чи С. Родрігес, Х. Рамос (Університет Лісабону, Португалія) для передбачення поведінки сонячних елементів. Таким чином, новизна розвинутого у роботі підходу пов'язана з використання величини фактору неідеальності як кількісного показника концентрації домішкового заліза та застосування глибоких нейронних мереж для встановлення їхнього взаємозв'язку.

Технічне завдання виконання та календарний план проєкту із виконання наукових досліджень і розробок 2020.02/0036 «Розробка фізичних зasad акусто-керованої модифікації та машинно-орієнтованої характеристизації кремнієвих сонячних елементів» передбачає, що цілями етапу №1 у 2021 році є практична реалізація методики оцінювання кінетичних характеристик перебудови дефектів у бар'єрних структурах в умовах ультразвукового навантаження; опрацювання масиву попередньо отриманих вольт-амперних характеристик відповідно до дводіодної моделі, створення штучної нейронної мережі для оцінки концентрації домішкових атомів заліза за характеристиками вольт-амперних характеристик; з'ясування фізичних закономірностей акусто-дефектної взаємодії у КСЕ при використанні повздовжніх хвиль ультразвукового діапазону. При цьому основними завданнями є програмна реалізація мета-евристичного методу оптимізації Jaya;

визначення величини фактору неідеальності для отриманого масиву вольт-амперних характеристик відповідно до дводіодної моделі; налаштовування гіперпараметрів глибокої нейронної мережі, спроможної передбачити концентрацію домішкових атомів заліза на основі фактору неідеальності; навчання нейронної мережі. Крім того, передбачено визначення характеристик 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. Нарешті, заплановано визначення закономірностей змін параметрів ВАХ та кінетичних характеристик їхнього відновлення внаслідок зміни стану пар FeB в умовах ультразвукового навантаження при використанні повздовжніх хвиль. Також передбачена підготовка 2 доповідей на конференції міжнародного рівня.

# 1 НАЛАШТУВАННЯ ШТУЧНОЇ НЕЙРОННОЇ МЕРЕЖІ ДЛЯ ПЕРЕДБАЧЕННЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ ДОМІШКОВИХ АТОМІВ ЗАЛІЗА В КРЕМНІЄВИХ СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТАХ

1.1 Підготовка тренувального та тестового наборів розмічених даних на основі модельованого набору вольт-амперних характеристик кремнієвих  $n^+ - p - p^+$  структур

Одним із завдань даної роботи було створення штучної нейронної мережі (ШНМ), здатної передбачити концентрацію домішкових атомів заліза в КСЕ на основі вимірювання вольт-амперних характеристик. На попередньому етапі було проведення моделювання ВАХ кремнієвих  $n^+ - p - p^+$  структур з різними геометричними та електрофізичними характеристиками. Одне із завдань цього етапу – створення тренувального та тестового наборів даних, які б містили інформацію про величину фактору неідеальності КСЕ з різними величинами товщини бази, рівня легування бази, концентрації домішкового заліза залежно від температури. Для цього необхідно провести апроксимацію модельованих ВАХ, причому в цьому випадку необхідно використовувати дво-діодну модель сонячного елементу, відповідно до якої струм через структуру та прикладена до неї напруга пов'язані наступним чином [1,2]:

$$I = I_{01} \left[ \exp\left(\frac{q(V - IR_s)}{kT}\right) - 1 \right] + I_{02} \left[ \exp\left(\frac{q(V - IR_s)}{nkT}\right) - 1 \right] + \frac{(V - IR_s)}{R_{SH}}, \quad (1.1)$$

де

$I$  – струм через КСЕ; А,

$V$  – напруга, прикладена до нього, В,

$T$  – температура, К,

$I_{01}$  та  $I_{02}$  – струми насиження, пов'язані з процесами рекомбінації у квазі-

нейтральній області та в області просторового заряду (ОПЗ), відповідно, A,  $n$  – фактор неідеальності;

$R_S$  та  $R_{SH}$  – послідовний та шунтуючий опори, відповідно, Ом.

Як видно з наведеного виразу, змінні  $I$  та  $V$  не розділяються, а отже потрібно застосовувати спеціалізовані методи апроксимації та визначення параметрів. Останні роки свою дієздатність при вирішенні подібних оптимізаційних задач довели метаевристичні методи. Зокрема, як показано в літературі [3], для точного та стабільного оцінювання параметрів фотоелектричних перетворювачів в рамках різних моделей може бути використано покращений JAYA оптимізаційний алгоритм. На відміну від більшості інших алгоритмів, які базуються на використанні популяцій розв'язків, JAYA не має специфічних для алгоритму гіперпараметрів і включає лише два загальні параметри, а саме розмір популяції та кількість поколінь.

В нашому випадку кожен з можливих розв'язків є 5-мірним, так як необхідно визначити п'ять параметрів:  $I_{01}$ ,  $I_{02}$ ,  $n$ ,  $R_S$  та  $R_{SH}$ . Тобто, кожен представник популяції можливих розв'язків складається з 5 чисел:

$$\vec{x}_i = (x_{i,1}, x_{i,2}, x_{i,3}, x_{i,4}, x_{i,5}) = (I_{01,i}, I_{02,i}, n_i, R_{S,i}, R_{SH,i}) \quad (1.2)$$

Розмір популяції (загальна кількість розв'язків) було вибрано 24 (величина, в чотири рази більша ніж кількість невідомих параметрів плюс 1 [3]), тобто  $i = \overline{1..24}$ . Як цільова функція була використана відносна квадратична похибка

$$f(\vec{x}) = \sum_k \left\{ 1 - \frac{I_{01}}{I_k} \left[ \exp\left(\frac{q(V_k - IR_S)}{kT}\right) - 1 \right] + \frac{I_{02}}{I_k} \left[ \exp\left(\frac{q(V - IR_S)}{nkT}\right) - 1 \right] + \frac{(V - IR_S)}{I_k R_{SH}} \right\}^2,$$

де сумування відбувається по точках ВАХ.

Відповідно до вихідного методу JAYA наступне наближення до розв'язку (наступне покоління) для  $i$ -го представника популяції розраховуються з використанням наступного виразу

$$x'_{i,j} = x_{i,j} + R_1(x_{best,j} - |x_{i,j}|) - R_2(x_{worst,j} - |x_{i,j}|), \quad (1.3)$$

де

$\vec{x}_{best}$  - розв'язок серед покоління, для якого цільова функція мінімальна,

$\vec{x}_{worst}$  - розв'язок серед покоління, для якого цільова функція максимальна,

$R_1$  та  $R_2$  – випадкові числа, рівномірно розподілені на інтервалі  $[0,1]$ .

Як показали проведені дослідження, в нашому випадку достатня кількість поколінь для збіжності методу – 3000. Параметри першого покоління ініціюються випадковим чином з заданого інтервалу, який для  $n$  було вибрано  $[1,2]$ , для  $I_{01} - [10^{-15}, 10^{-4}] \text{ A}$ ,  $I_{02} - [10^{-18}, 10^{-7}] \text{ A}$ ,  $R_S - [10^{-5}, 10] \text{ Ом}$  та  $R_{SH} - [10^5, 10^{20}] \text{ Ом}$ .

Відповідно до вимог IJAYA, при розрахунках було реалізовано видозмінену процедуру обчислення для наступного покоління. А саме, якщо  $\vec{x}_i \neq \vec{x}_{best}$ , використовуються або само-узгоджені вагові коефіцієнти

$$\vec{x}'_{i,j} = \vec{x}_{i,j} + R_1(\vec{x}_{best,j} - |\vec{x}_{i,j}|) - WR_2(\vec{x}_{worst,j} - |\vec{x}_{i,j}|), \quad (1.4)$$

де

$$W = \begin{cases} \left( \frac{f(\vec{x}_{best})}{f(\vec{x}_{worst})} \right)^2, & \text{npu } f(\vec{x}_{worst}) \neq 0, \\ 1, & \text{в решті випадків} \end{cases}, \quad (1.5)$$

або так звана стратегія навчання, що базується на попередньому досвіді:

$$\vec{x}'_{i,j} = \begin{cases} \vec{x}_{i,j} + R(\vec{x}_{k,j} - \vec{x}_{l,j}), & \text{npu } f(\vec{x}_k) < f(\vec{x}_l) \\ \vec{x}_{i,j} + R(\vec{x}_{l,j} - \vec{x}_{k,j}), & \text{npu } f(\vec{x}_l) \leq f(\vec{x}_k), \end{cases} \quad (1.6)$$

де

$\vec{x}_k$  та  $\vec{x}_l$  - випадковим чином вибрані з популяції,  $i \neq l \neq k$ ,

$R$  – випадкове число, рівномірно розподілене на інтервалі  $[0,1]$ . Вибір варіанта, що описується виразом (1.5) або варіанту, що описується виразом (1.6) відбувається випадковим чином (при програмній реалізації порівнюються два випадкових числа).

У випадку, коли  $\vec{x}_i = \vec{x}_{best}$ , використовуються так званий хаотичний метод елітного навчання

$$x'_{best,j} = x_{best,j} + R(2Z_m - 1), \quad (1.7)$$

де

$Z_m$  – елемент хаотичної послідовності, для розрахунку якого використовується наступна логістична карта (logistic map):

$$Z_{m+1} = 4Z_m(1 - Z_m), \quad (1.8)$$

$m$  – номер ітерації (номер покоління),

$Z_0$  – випадковим чином генерується на інтервалі  $[0,1]$ .

Після розрахунку всіх розв'язків наступного покоління відбувається жадібний відбір: новий розв'язок замінює старий лише у випадку  $f(\vec{x}'_i) < f(\vec{x}_i)$ .

Програмна реалізація вищеописаного методу реалізована з використанням мови програмування Delphi. Розроблена програма обробляла всі файли, які знаходилися в певній директорії і містили пари значень напруга-сила струму (у csv-форматі), що відповідають вольт-амперній характеристиці. Отримані в результаті значення фактору неідеальності вносилися в окремий файл разом зі значеннями товщини бази, рівня легування бази, концентрації домішкового заліза та температури для яких розраховувалась відповідна характеристика. При цьому був реалізований наступний псевдокод:

**While** присутні необроблені файли з даними **do**

    Зчитування з файлу значень напруги та струму

    Зчитування з окремих довідниковых файлів значення температури та параметрів сонячного елементу.

    Встановлення максимальної кількості поколінь  $max\_NG$

    Встановлення номера поточного покоління  $NG=1$

    Встановлення кількості розв'язків у популяції  $NP=24$

    Початкова випадкова ініціалізація всіх розв'язків у популяції

    Оцінка цільової функції для кожного розв'язку

**While**  $NG < max\_NG$  **do**

        Вибір  $\vec{x}_{best}$  та  $\vec{x}_{worst}$  з покоління

**For**  $i=1$  to  $NP$  **do**

**If**  $\vec{x}_i \neq \vec{x}_{best}$  **Then**

Вибираємо два випадкових числа  $a$  та  $b$  з інтервалу  $[0,1]$

**If  $a < b$  Then**

Розрахунок вагового коефіцієнту (5)

Обчислення наступного наближення (4)

**Else**

Вибір двох інших представників покоління

Реалізація навчання з попереднім досвідом (6)

**End if**

**Else**

Реалізація хаотичного елітного навчання (7)-(8)

**End if**

Оцінка цільової функції для даного нового розв'язку

Застосування жадібного відбору

**End For**

NG=NG+1

**End While**

**End While**

Запис результатів в файл «dates.dat»

Використовуючи розроблену програму було апроксимовано більше 40 тис. попередньо симульованих вольт-амперних характеристик. Результати апроксимації можна знайти за адресою <https://github.com/olegolikh/IVcharacteristics>. Програму (як от компільований варіант, так і вихідні файли Delphi-проекту) можна знайти за посиланням <https://github.com/olegolikh/IVcharacteristics/tree/main/Progr>.

Загальновідомо, що для налаштування ГНМ необхідна значна кількість розмічених даних. Для створення тренувального набору даних були використані ВАХ, симульовані з використанням 4 значень товщина бази КСЕ  $d_p$ , 9 значень концентрації бору (легуючої домішки  $p$ -областей)  $N_B$ , 11 значень температури  $T$  та 19 значень концентрації заліза  $N_{Fe}$ , розподілених в діапазонах  $150 \div 180$  мкм,  $10^{15} \div 10^{17}$  см $^{-3}$ ,  $290 \div 340$  К та  $10^{11} \div 10^{13}$  см $^{-3}$ , відповідно. Вибрані значення були рівномірно розподілені по вказаним діапазонам в лінійному масштабі для  $d_p$  і  $T$  та логарифмічному для  $N_B$  і  $N_{Fe}$ . Таким чином, тренувальний набір складався з 7524 зразків.

Крім того, були створені декілька тестових наборів. У набір, який позначено T-varied, увійшли дані, отримані з ВАХ, модельованих з використанням значень  $d_p$ ,  $N_B$  та  $N_{Fe}$ , які використовувалися і при створенні тренувального набору та значення температури, які до нього не входять. Цей набір містив 894 зразка, точні значення параметрів можна знайти у попередньому звіті. Подібним чином були створені тестові набори d-varied (1189 зразків), Fe-varied (856 зразків) та B-varied (514 зразків). При отриманні набору All-varied були використані ВАХ, симульовані з використанням таких значень і товщина бази, і концентрації бору, і температури  $T$  і концентрації заліза, які не розглядалися при створенні тренувального набору. Останній набір містив 864 зразки.

Також було проведено аналіз впливу різних параметрів КСЕ на величину фактора неідеальності. Зауважимо, що в роботі проводилися розрахунки як для рівноважного випадку (переважна кількість домішкового заліза утворила пари з атомами бору, незначна частина у неспареному міжвузольному стані), так і для ситуації, коли атоми всі атоми Fe є неспареними (випадок, який може бути реалізований після освітлення структури). Крім того, розглядалися випадки, коли бралася до уваги лише рекомбінація на дефектах відповідно до механізму Шоклі-Ріда-Хола (ШРХ), а також, коли враховувалася і власна рекомбінація також. У представлених далі результатах використовуються наступні позначення для фактору неідеальності:  $n_{Fe}^{SRH}$  – випадок наявності лише міжвузольних атомів заліза і врахування тільки ШРХ-рекомбінації,  $n_{Fe}$  – міжвузольні атоми і всі рекомбінаційні механізми,  $\delta n_{Fe}^{SRH} = n_{Fe}^{SRH} - n_{Fe}$  характеризує вплив власної рекомбінації на величину фактора неідеальності; відповідні позначення, коли присутні і  $Fe_i$ , і пари  $FeB$  –  $n_{Fe-FeB}^{SRH}$ ,  $n_{Fe-FeB}$  та  $\delta n_{Fe-FeB}^{SRH} = n_{Fe-FeB}^{SRH} - n_{Fe-FeB}$ . Крім того, була розрахована також величина зміни фактору неідеальності після асоціації пар  $\delta n_{Fe-Fe-FeB} = n_{Fe} - n_{Fe-FeB}$ .

На рис.1.1-1.3 зображені типові залежності фактору неідеальності від

температури, концентрації домішкового заліза  $N_{\text{Fe}}$  та концентрації легуючої домішко бору  $N_{\text{B}}$  при різних значеннях товщини бази КСЕ  $d_p$ .

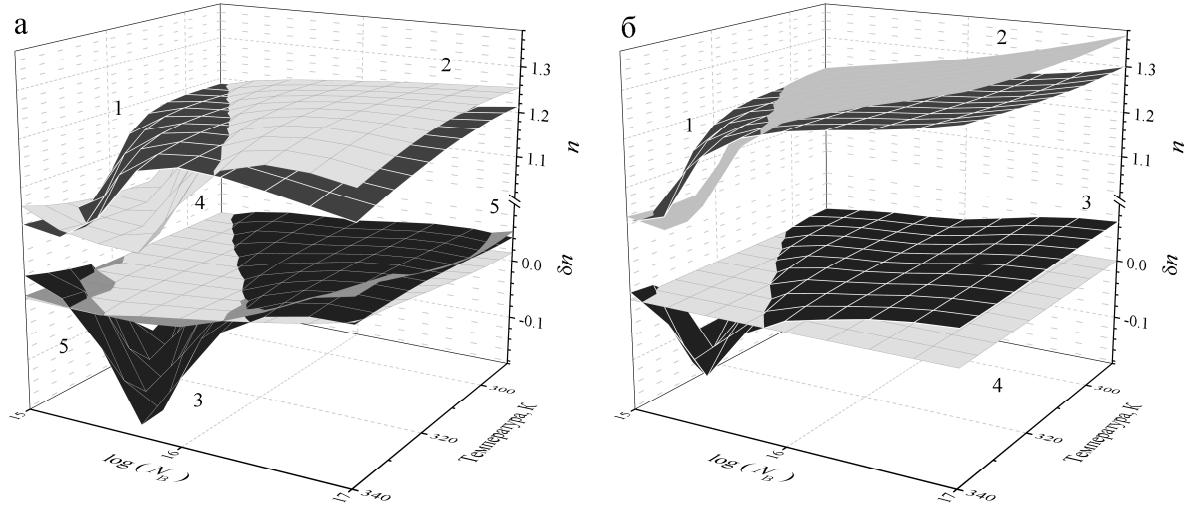


Рисунок 1.1 – Залежність фактору неідеальності від температури та концентрації бору.  $N_{\text{Fe}}$ ,  $\text{см}^{-3}$ :  $10^{10}$  (а),  $10^{13}$  (б).  $d_p=240$  мкм. Поверхня 1 –  $n_{\text{Fe-FeB}}$ , 2 -  $n_{\text{Fe}}$ , 3 -  $\delta n_{\text{Fe-Fe-FeB}}$ , 4 -  $\delta n_{\text{Fe-FeB}}^{\text{SRH}}$ , 5 -  $\delta n_{\text{Fe}}^{\text{SRH}}$

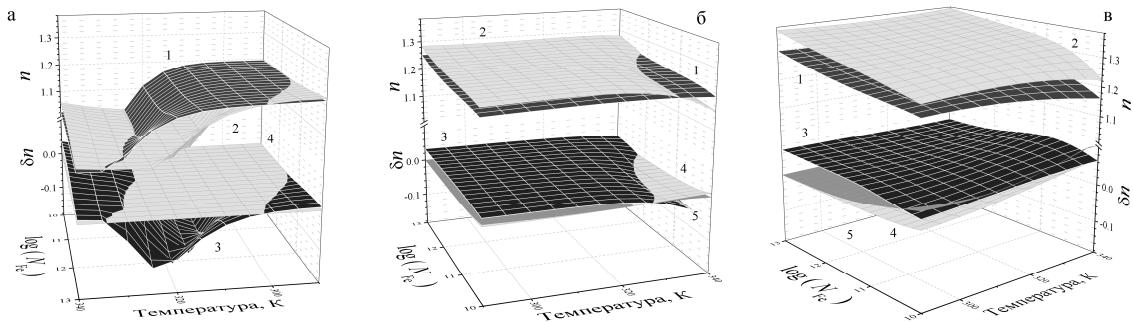


Рисунок 1.2 – Залежність фактору неідеальності від температури та концентрації заліза.  $N_{\text{B}}$ ,  $\text{см}^{-3}$ :  $10^{15}$  (а),  $10^{16}$  (б),  $10^{17}$  (в).  $d_p=150$  мкм. Позначення поверхонь такі ж як на рис.1.1

Насамперед необхідно зауважити, що як показують розрахунки, по-перше, міжвузольні атоми заліза відіграють переважаючу роль в рекомбінації навіть якщо в глибині КСЕ присутні  $\text{Fe}_i$ , і пари  $\text{FeB}$ . Дійсно, донорний рівень пари в наших структурах розташовано нижче рівня Фермі, а отже ймовірність

захоплення ним нерівноважного електрону дуже мала. Крім того, фактор неідеальності переважно визначається рекомбінацією в ОПЗ, а концентрація  $\text{Fe}_i$  переважає концентрацію  $\text{FeB}$  в  $2/3$  товщини цієї області. Це підтверджується подібністю залежностей  $n_{\text{Fe-FeB}}$  (поверхня 1) та  $n_{\text{Fe}}$  (поверхня 2) на рис.1.1-1.3. По-друге, абсолютна концентрація неспарених атомів заліза може бути достатньо великою навіть у випадку співіснування обох типів дефектів і вона підвищується при зростанні температури та зменшенні рівня легування. Наприклад, розрахунки показують, що концентрація  $\text{Fe}_i$  в квазінейтральній області складає  $23$  (або  $3$ )%  $N_{\text{Fe}}$  при  $340$  К та  $N_{\text{B}}=10^{15} \text{ см}^{-3}$  (або  $10^{16} \text{ см}^{-3}$ ). А отже за цих умов, концентрація неспарених атомів заліза в рівновазі та при  $N_{\text{Fe}}=10^{13} \text{ см}^{-3}$  перевищує відповідну величину після освітлення при  $N_{\text{Fe}}=10^{11} \text{ см}^{-3}$ .

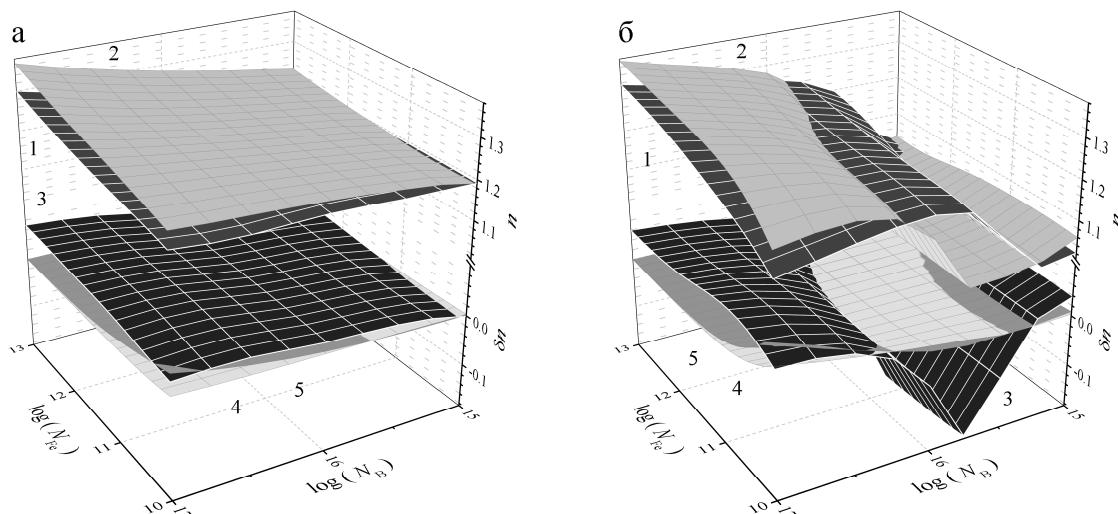


Рисунок 1.3 – Залежність фактору неідеальності від концентрацій заліза та бору.  $T, \text{ К}: 290$  (а),  $340$  (б).  $d_p=180 \text{ мкм}$ . Позначення поверхонь такі ж як на рис.1.1

При аналізі залежності фактору неідеальності від температури та концентрації бору необхідно врахувати наступне.

- 1) Присутність дірки на рівні  $E_{\text{Fe},i}$ , пов'язаному з  $\text{Fe}_i$ , яка визначає ефективність рекомбінації. Згідно зі статистикою Фермі-Дірака, ймовірність діркової заселеності  $f_p$  в невиродженному напівпровіднику  $p$ -типу в режимі

виснаження акцептора може бути записана у вигляді

$$f_p = \frac{1}{1 + \frac{N_V}{N_B} \exp\left(\frac{E_V - E_{Fe_i}}{kT}\right)}, \quad (1.9)$$

де

$N_V$  - ефективна густина станів поблизу вершини валентної зони, см<sup>-3</sup>,

$E_V$  – енергетичне положення вершини валентної зони, еВ.

Як було показано раніше [4] залежність  $f_p (T, N_B)$  загалом схожа, на ту, що отримана для фактору неідеальності. Зокрема, якщо  $f_p$  близька до одиниці (високий рівень легування та низькі температури), залежність  $n$  слабка і ця величина є температуро незалежною, слабко зростаючи зі зменшенням  $N_B$  – див.рис.1.2б,в, 1.3в. Якщо  $N_B$  зменшується та (або) зростає  $T$ , рівень заповнюється електроном в достатньо вузькому діапазоні параметрів, рекомбінація ШРХ послаблюється і фактор неідеальності різко спадає – див. рис.1.1, 1.2а, 1.3б.

2) Співвідношення між власною рекомбінацією та рекомбінацією на дефектах. Рекомбінація ШРХ викликає збільшення фактору неідеальності, якщо вона є домінуючою, то у літературі використовується значення  $n=2$ . Власна рекомбінація підсилюється при збільшенні як концентрації вільних носіїв заряду, так і температури [5,6]. В цьому випадку фактор неідеальності зменшується і величини  $\delta n_{Fe}^{SRH}$  та  $\delta n_{Fe-FeB}^{SRH}$  стають відмінними від нуля – див. рис.1.1а, 1.2б,в, 1.3

Зміна концентрації заліза майже не впливає на характер залежностей  $n$  від інших параметрів. Проте зростання  $N_{Fe}$  супроводжується збільшенням величини  $n$  (див. рис.1.2, 1.3), яке є фактично лінійним відносно  $\ln(N_{Fe})$ . Відхилення спостерігаються лише коли рівень міжвузольного заліза заповнений електроном ( $n < 1,06$ ). Водночас, внесок власної рекомбінації збільшується при низьких концентраціях заліза (за сталості інших параметрів), що викликає різке зменшення величини фактору неідеальності – рис.1.3б,в.

На перший погляд, так як  $n$  пов'язується з процесами в ОПЗ, його величина не має залежати від товщини бази  $n^+ - p - p^+$  структури. Проте подібна залежність спостерігається (див. рис.1.4а), що свідчить про вплив також і процесів у квазінейтральній області на фактор неідеальності. Зміни  $n$  подібні як для випадку лише наявності  $\text{Fe}_i$ , так і співіснування  $\text{Fe}_i$  та  $\text{FeB}$  і добре описуються лінійною функцією

$$n = n_0 - \beta d_p, \quad (1.10)$$

де

$\beta$  – товщинний коефіцієнт,  $\text{мкм}^{-1}$ .

Максимальний вплив товщини спостерігається для середніх  $1,05 < n < 1,25$  значень. Рис.1.4б-г демонструє залежність  $\beta$  від інших параметрів. Як видно з наведених даних, вплив  $d_p$  підсилюється з підвищенням температури та зменшенням концентрацій бору та заліза. Зменшення відносного внеску рекомбінації ШРХ викликає зменшення абсолютноого значення  $\beta$ . Крім того, на рис.1.5 показана залежність довжини дифузії електронів ( $L_n$ ) в базі КСЕ від концентрації неспарених атомів заліза. Очевидно, що вплив товщини можливий лише при  $L_n > d_p$  і саме з цієї причини  $\beta \approx 0$  при  $n > 1,3$ .

На рис.1.1-1.3 також представлені залежності зміни фактора неідеальності після спарювання міжузольного заліза – див. поверхні 3. Так як подібний процес має пригнічувати рекомбінацію ШРХ очікувалось, що для всіх значень параметрів мало б бути  $\delta n_{\text{Fe}-\text{Fe}-\text{FeB}} > 0$ . Проте, як видно з рис.1.2б, в та 1.3а спостерігається і протилежний ефект. В цьому випадку  $\delta n_{\text{Fe}-\text{Fe}-\text{FeB}}$  збільшується при зростанні концентрації бору і практично не залежить від  $T$  та  $N_{\text{Fe}}$ . Випадок  $n_{\text{Fe}} < n_{\text{Fe}-\text{FeB}}$  спостерігається в області зменшення фактору неідеальності, пов'язаного із заповненням рівня  $\text{Fe}_i$ . Можливою причиною цього могла б бути відмінність положення рівня Фермі для випадків неспареного міжузольного заліза та співіснування  $\text{Fe}_i$  та  $\text{FeB}$ . Проте проведені розрахунки показали, що ця відмінність не перевищує  $5 \cdot 10^{-6}$  еВ і тому не може бути причиною даного ефекту.

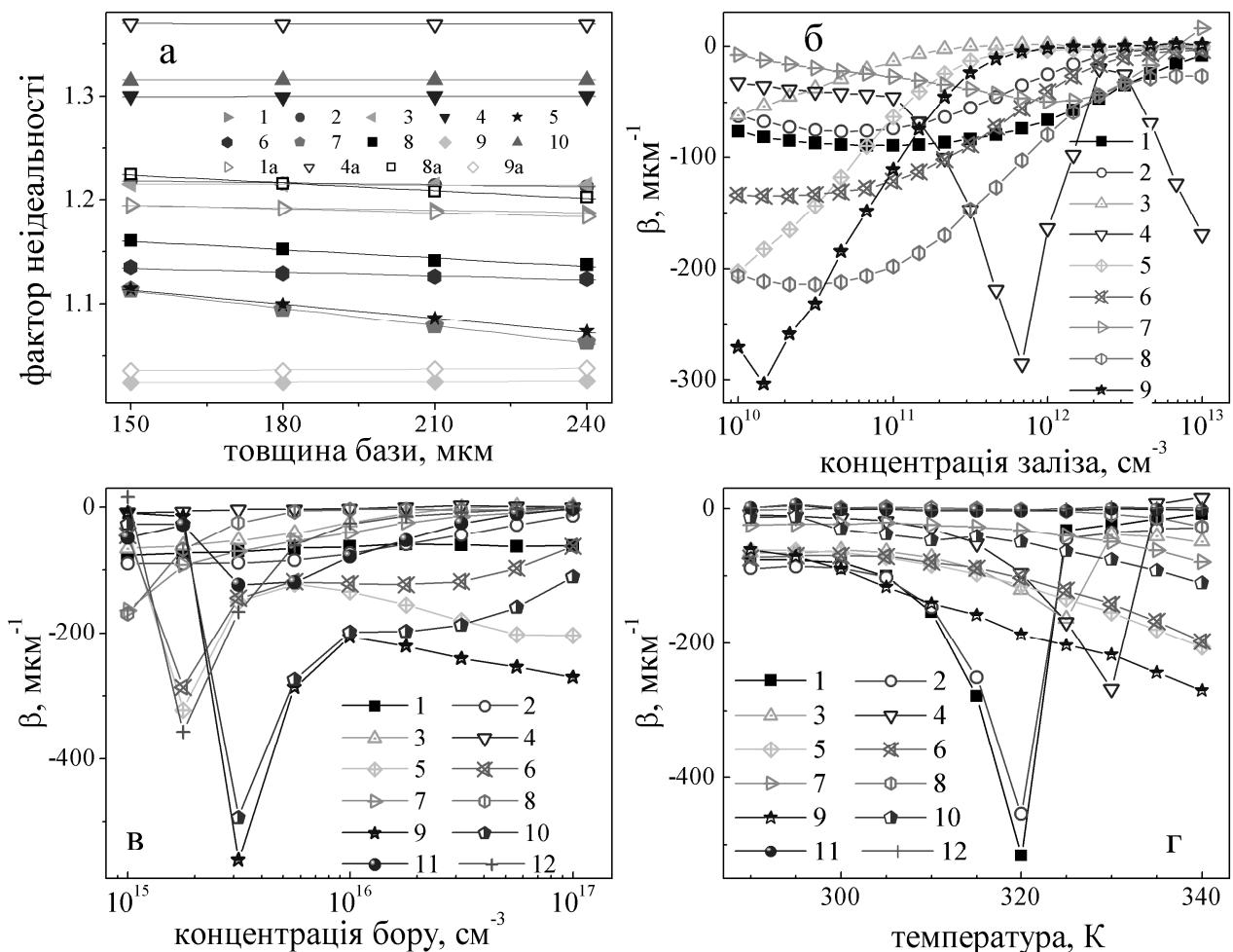


Рисунок 1.4 (а) - Типові залежності фактору неідеальності від товщини бази. Представлені результати як для випадку співіснування  $\text{Fe}_i$  та  $\text{FeB}$  (криві 1-6, заповнені символи), так і наявності лише  $\text{Fe}_i$  (2a,5a, 6a, порожні символи).  $T, \text{K}: 290$  (1,2,2a), 320 (3), 340 (4-6,5a,6a);  $N_{\text{Fe}}, \text{см}^{-3}: 10^{10}$  (4,5,5a),  $10^{12}$  (3),  $10^{13}$  (1,2,2a,6,6a);  $N_{\text{B}}, \text{см}^{-3}: 10^{15}$  (1,3,6,6a),  $3,162 \cdot 10^{15}$  (4),  $10^{17}$  (2,2a,5,5a). Лінії – апроксимація за формулою (1.10). (б) - Залежність товщинного коефіцієнта від концентрації заліза.  $T, \text{K}: 290$  (1,2), 325 (3), 340 (4-6);  $N_{\text{B}}, \text{см}^{-3}: 10^{15}$  (4),  $10^{16}$  (1,5),  $10^{17}$  (2,3,6). (в) - Залежність товщинного коефіцієнта від концентрації бору.  $T, \text{K}: 290$  (1,2), 325 (2-5), 340 (6);  $N_{\text{Fe}}, \text{см}^{-3}: 10^{10}$  (3,6),  $10^{11}$  (1,4),  $10^{12}$  (5),  $10^{13}$  (2). (г) - Залежність товщинного коефіцієнта від температури.  $N_{\text{B}}, \text{см}^{-3}: 10^{15}$  (1,2),  $10^{16}$  (3,4),  $10^{17}$  (5,6);  $N_{\text{Fe}}, \text{см}^{-3}: 10^{10}$  (3,5),  $10^{12}$  (2,4,6)

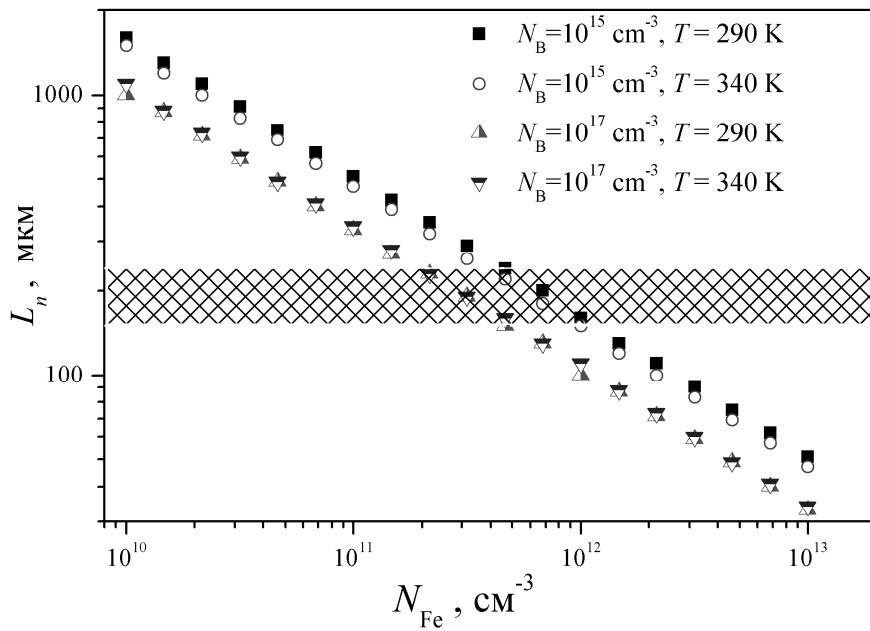


Рисунок 1.5 – Розраховані залежності довжини дифузії електронів в базі КСЕ у випадку наявності лише неспарених атомів заліза. Заштрихована область відповідає діапазону товщин бази, які використовувалися при моделюванні

Рис.1.6 представляє просторові розподіли рекомбінаційно активних (додатно заряджених) атомів заліза до та після спарювання. Очевидно, ступінь зменшення концентрації  $\text{Fe}_i^+$  залежить від відстані до  $p-n$  переходу (розташованого при  $x=0$ ). На нашу думку, саме зміна профілю  $N_{\text{Fe}^+}$  є можливою причиною збільшення фактору неідеальності. Зауважимо, що ефект залежить від концентрації заліза.

Крім того, величина  $\delta n_{\text{Fe-Fe-FeB}}$  залежить від  $N_{\text{Fe}}$  і у випадку  $n_{\text{Fe}} > n_{\text{Fe-FeB}}$ . Тобто, використання двох значень фактору неідеальності (для рівноважного випадку і випадку, який можна реалізувати освітленням) дозволяє отримати додаткову інформацію про концентрацію домішок. Саме такий підхід і буде використаний надалі, при налаштуванні ШНМ.

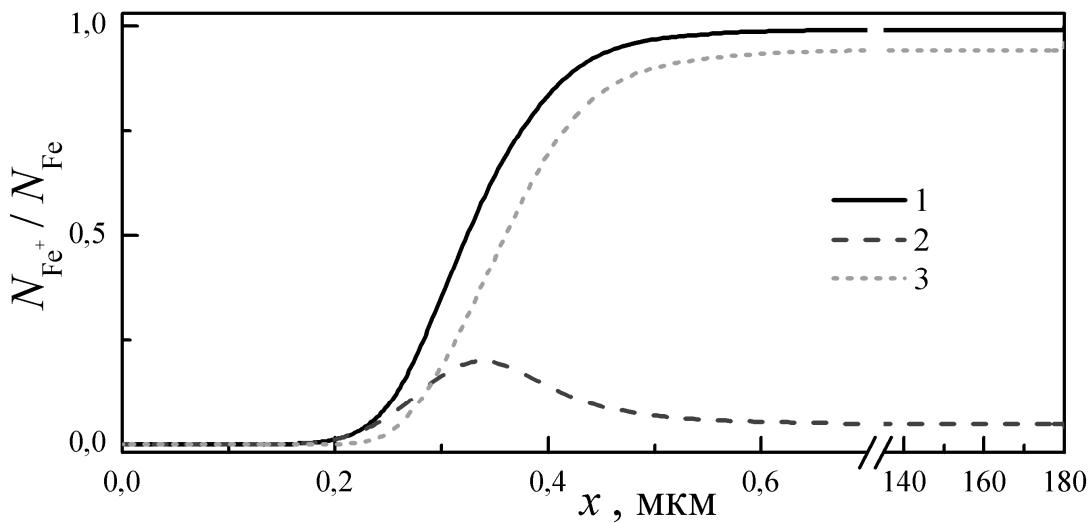


Рисунок 1.6 – Розподіл частки додатно заряджених атомів заліза в базі структури. Криві 1 та 2 відповідають випадкам неспареного міжвузольного заліза та співіснування  $Fe_i$  та  $FeB$ , 3 – різниця між 1 та 2.  $T=330$  К,  $N_B=3,162 \cdot 10^{15}$  см $^{-3}$ ,  $d_p=180$  мкм

## 1.2 Налаштування гіперпараметрів штучної нейронної мережі

Загалом розглядалися два варіанти ГНМ. В одному з них використовувалося лише значення фактору неідеальності для рівноважного стану КСЕ -  $n_{Fe-FeB}$ . Для позначення цієї мережі використовувалося позначення DNN $_{FeFeB}$ . В другому варіанті до уваги бралися як величина  $n_{Fe-FeB}$ , так і  $n_{Fe}$ . На практиці така ситуація може бути реалізована шляхом інтенсивного освітлення КСЕ, відпалом протягом 3 хв при температурі близько 200°C або інжекцією носіїв заряду [7,8]. Ця мережа надалі позначена DNN $_{FeFeB-Fe}$ .

Узагальнена схема використаної глибокої мережі приведена на рис.1.7. Вхідний шар складався з чотирьох або п'яти вузлів і величинами, які подавалися туди подавалися окрім  $n_{Fe-FeB}$  (або  $n_{Fe-FeB}$  та  $n_{Fe}$ ) були температура, товщина бази КСЕ та логарифм концентрації бору в базі.

Вихідний шар містив один вузол, використовував лінійну функцію активації і передбачав логарифм концентрації заліза в КСЕ. Для отримання

прогнозованої концентрації до значення вихідного вузла застосувалася функція антилогарифмування.

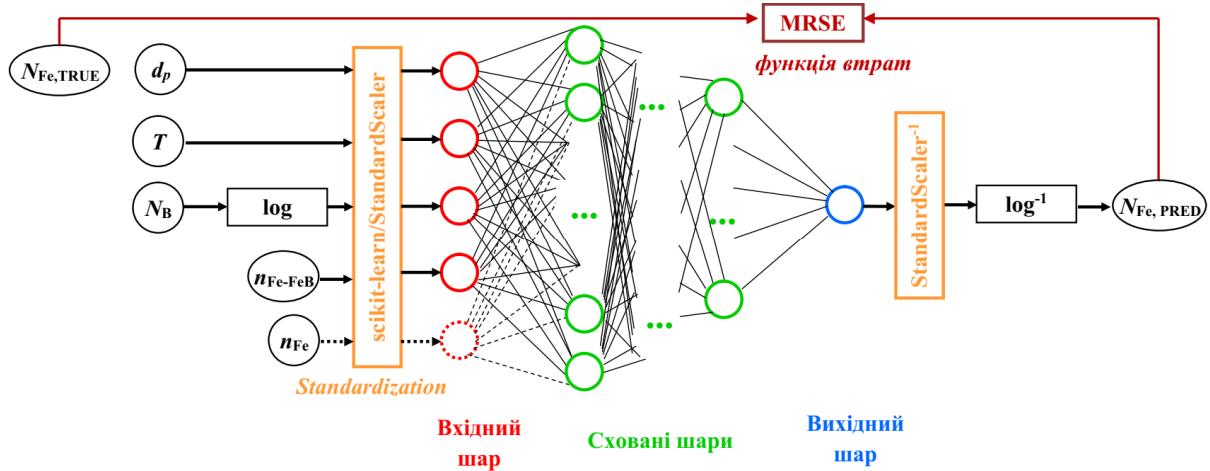


Рисунок 1.7 – Схема ГНМ для оцінки концентрації заліза

У якості функції втрат використовувалося середнє значення відносної квадратичної похибки (mean squared relative error, MSRE):

$$\text{MRSE} = \frac{1}{N_S} \sum_{i=1}^{N_S} \frac{(N_{\text{Fe,TRUE},i} - N_{\text{Fe,PRED},i})^2}{N_{\text{Fe,TRUE},i} N_{\text{Fe,PRED},i}}, \quad (1.11)$$

де

$N_S$  – кількість зразків у тренувальному (тестовому) наборі,

$N_{\text{Fe,TRUE},i}$  – істинна величина концентрації заліза для  $i$ -го зразка (та, яка використовувалася при моделюванні відповідної ВАХ,

$N_{\text{Fe,PRED},i}$  – величина, передбачена ГНМ для даного зразка.

Для роботи з ГНМ використовувався високорівневий пакет Keras API від TensorFlow. Сховані шари були повнозв'язними. Під час налаштування мережі розглядалися різні конфігурації (Conf) схованих шарів та вибиралися оптимальні (раціональні) значення таких гіперпараметрів як кількість шарів ( $N_{\text{HL}}$ ), кількість вузлів у першому схованому шарі ( $N_{\text{node}}$ ), розмір пакету (batch size, BS), тип активаційної функції для схованих шарів (activation function, ActF), тип оптимізатора (optimizer, Opt), темп навчання (learning rate, LR), кількість епох ( $N_{\text{ep}}$ ), метод попередньої підготовки даних (preprocessing

method, PreM), тип функції регуляризації (regularization function, RegF), темп регуляризації (regularization rate, RR), темп проріджування (dropout rate, DR), тип початкової ініціалізації вагових коефіцієнтів (weight initializer, WI). Значення гіперпараметрів, які розглядалися, зведені у таблиці 1.1.

Таблиця 1.1 – Початковий простір пошуку гіперпараметрів

Гіперпараметр	Значення
$N_{\text{HL}}$	2, 4, 6, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 80, 100, 120, 140, 170, 200, 250, 300
$N_{\text{node}}$	ReLU, sigmoid, tanh, SELU, ELU
BS	SGD, RMSprop, Adam, Adadelta, Adagrad, Adamax, Nadam, Ftrl
ActF	$0.01, 3.16 \cdot 10^{-3}, 10^{-3}, 3.16 \cdot 10^{-4}, 10^{-4}, 3.16 \cdot 10^{-5}, 10^{-5}$
Opt	10, 20, 50, 75, 100, 200, 300, 500, 700, 900, 1100, 1300, 1500
LR	StandartScaler, MinMaxScaler
$N_{\text{ep}}$	None, L2, L1, Dropout
PreM	$10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}$
RegF	0.2, 0.3, 0.4, 0.5
RR	Xavier Normal, Xavier Uniform, He Normal, He Uniform, Random Normal, Random Uniform, Ones
DR	2, 4, 6, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 80, 100, 120, 140, 170, 200, 250, 300

Розглядалися 5 конфігурацій схованих шарів (див. рис.1.8):

- pipe: всі сховані шари складаються з однакової кількості вузлів;
- trapezium: шість схованих шарів, в кожному наступному з них кількість вузлів зменшується на 10% кількості вузлів у першому шарі;
- triangle: десять шарів, кількість нейронів в який рівномірно зменшується від

100% (перший шар) до 10% (останній шар);

- butterfly: дві дзеркально відображені trapezium конфігурації;

- fir: дві послідовні trapezium конфігурації.

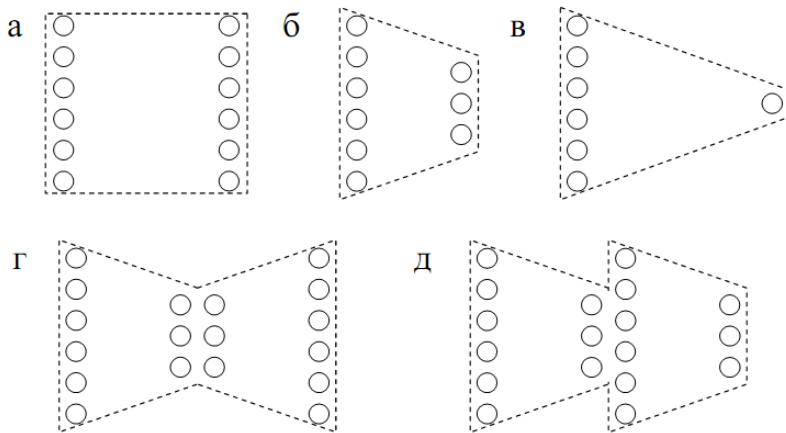


Рисунок 1.8 – Схеми конфігурації схованих шарів ГНМ, які розглядалися при налаштуванні. а – pipe; б – trapezium; в – triangle; г – butterfly; д – fir

Під час налаштування гіперпараметрів для кількісної характеризації прогностичних властивостей ГНМ використовувалася 5-кратна перехресна перевірка (5-fold cross-validation) на тренувальному наборі, а також якісна оцінка на тестових наборах.

Налаштування ГНМ відбувалося в два етапи . На першому з них для грубої оцінки значень гіперпараметрів фіксувалися майже всі з них, окрім одного чи двох та проводився гратковий пошук (grid search) раціональних значень. Пошук проводився для pipe-конфігурації ( $\text{Conf} = \text{pipe}$ ). Це дозволяло обмежити простір гіперпараметрів почергово по кожній з розмірностей.

Спочатку були розглянуті мережі з різною кількістю шарів та кількістю вузлів у кожному з них. Отримані для мереж  $\text{DNN}_{\text{FeFeB}}$  та  $\text{DNN}_{\text{FeFeB-Fe}}$  узагальнено на рис.1.9 та рис.1.10, відповідно. Як видно з наведених даних, використання великої кількості схованих шарів (більше ніж 4-6) не дає суттєвого збільшення точності передбачень. Подібна ситуація стосується і кількості вузлів у шарах: при малих значеннях  $N_{\text{node}}$  похибка достатньо велика,

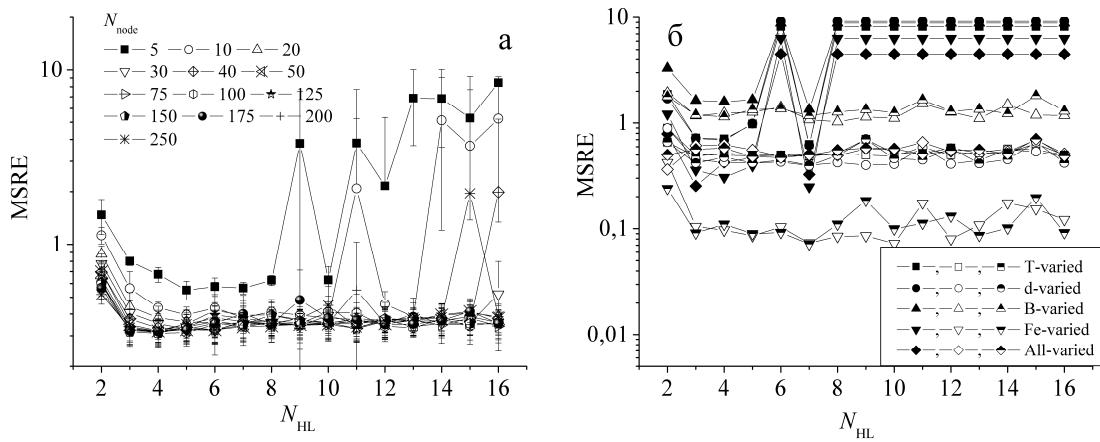


Рисунок 1.9 – Залежності величини функції втрат від кількості схованих шарів для тренувального (а) та тестового (б) наборів. Для (б)  $N_{node}$ : 5 (заповнені символи), 30 (незаповнені), 100 (напівзаповнені). Мережа DNN<sub>FeFeB</sub>. Conf=pipe, BS=32, ActF=ReLU, Opt=Adam, LR=0,001,  $N_{ep}=100$ , PreM= StandartScaler, RegF= None, WI= Xavier Normal

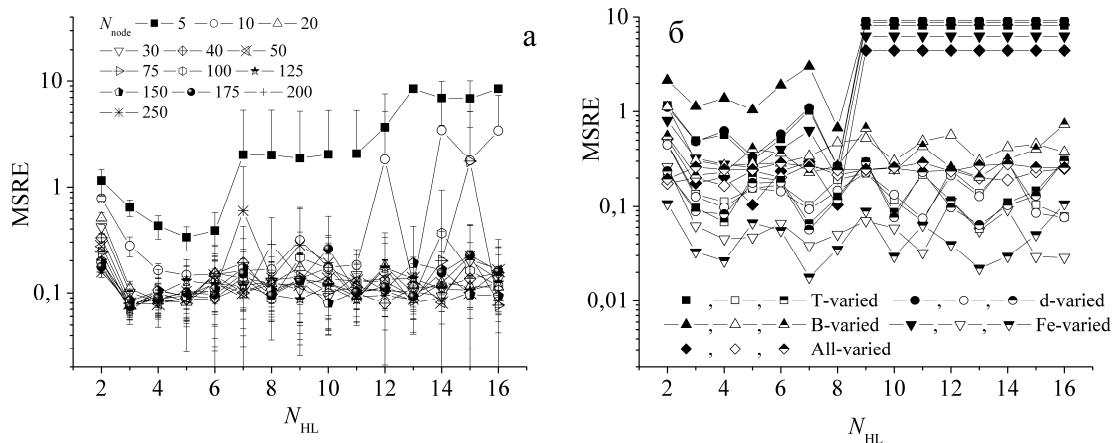


Рисунок 1.10 – Залежності величини функції втрат від кількості схованих шарів для тренувального (а) та тестового (б) наборів. Для (б)  $N_{node}$ : 5 (заповнені символи), 40 (незаповнені), 250 (напівзаповнені). Мережа DNN<sub>FeFeB-Fe</sub>. Conf=pipe, BS=32, ActF=ReLU, Opt=Adam, LR=0,001,  $N_{ep}=100$ , PreM= StandartScaler, RegF= None, WI= Xavier Normal

проте у випадку коли ця величина перевищує декілька десятків похибка

швидко досягає насичення і використання шарів з сотнями вузлів для не виглядає доцільним. Як наслідок, у подальшому для оптимізаційних пошуків використовувалися по дві мережі кожного варіанту: для DNN<sub>FeFeB</sub> розглядалися ГНМ з  $N_{HL}=5$  та  $N_{node}=30$  і  $N_{HL}=6$  та  $N_{node}=40$ ; для DNN<sub>FeFeB-FeB</sub>.  $N_{HL}=4$  та  $N_{node}=30$  і  $N_{HL}=6$  та  $N_{node}=40$ .

Наступним кроком було визначення функції активації. Вважалося що активаційна функція для всіх схованих шарів однаакова і розглядалися наступні варіанти:

- сигмоїdalна функція (sigmoid):

$$f(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)}, \quad (1.12)$$

- випрямлений лінійний вузол (rectified linear unit, ReLU):

$$f(z) = \begin{cases} 0, & z < 0 \\ z, & z \geq 0 \end{cases}, \quad (1.13)$$

- гіперболічний тангенс (tanh):

$$f(z) = (\exp(z) + \exp(-z)) / (\exp(z) + \exp(-z)), \quad (1.14)$$

- масштабована експоненційна лінійна функція (Scaled exponential linear unit, SELU):

$$f(z) = \lambda \cdot \begin{cases} \alpha(\exp(z) - 1), & z < 0 \\ z, & z \geq 0 \end{cases}, \quad (1.15)$$

де для гіперпараметрів використовувалися значення  $\alpha=1.67326324$ ,  $\lambda=1.05070098$ ;

- експоненційна лінійна функція (exponential linear unit, ELU):

$$f(z) = \begin{cases} \alpha(\exp(z) - 1), & z < 0 \\ z, & z \geq 0 \end{cases}, \quad (1.16)$$

де для гіперпараметра використовувалося значення  $\alpha=1$ .

Отримані результати представлені на рис.1.11 та 1.12. Okрім застосування різних активаційних функцій, тренування мереж проводилися і для двох різних значень кількості епох: 100 та 300. Як видно з рисунків,

найгірші результати спостерігаються при застосуванні функції sigmoid, причому це стосується як тренувального, так і тестового наборів. Використання більшої кількості епох зменшує відставання sigmoid від інших функцій (за однакових решти гіперпараметрів), проте точність передбачень при використанні саме цієї функції найгірше. Щодо найкращої активаційної функції, то тут відповідь не настільки очевидна, так як для решти значень ActF результати достатньо подібні. Для мережі з чотирма входними вузлами трохи гірші результати спостерігаються для SELU, для DNN<sub>FeFeB-FeB</sub> – ReLu. Як наслідок, було вирішено використовувати для DNN<sub>FeFeB</sub> ReLu та tanh, для DNN<sub>FeFeB-FeB</sub> – tanh та ELU.

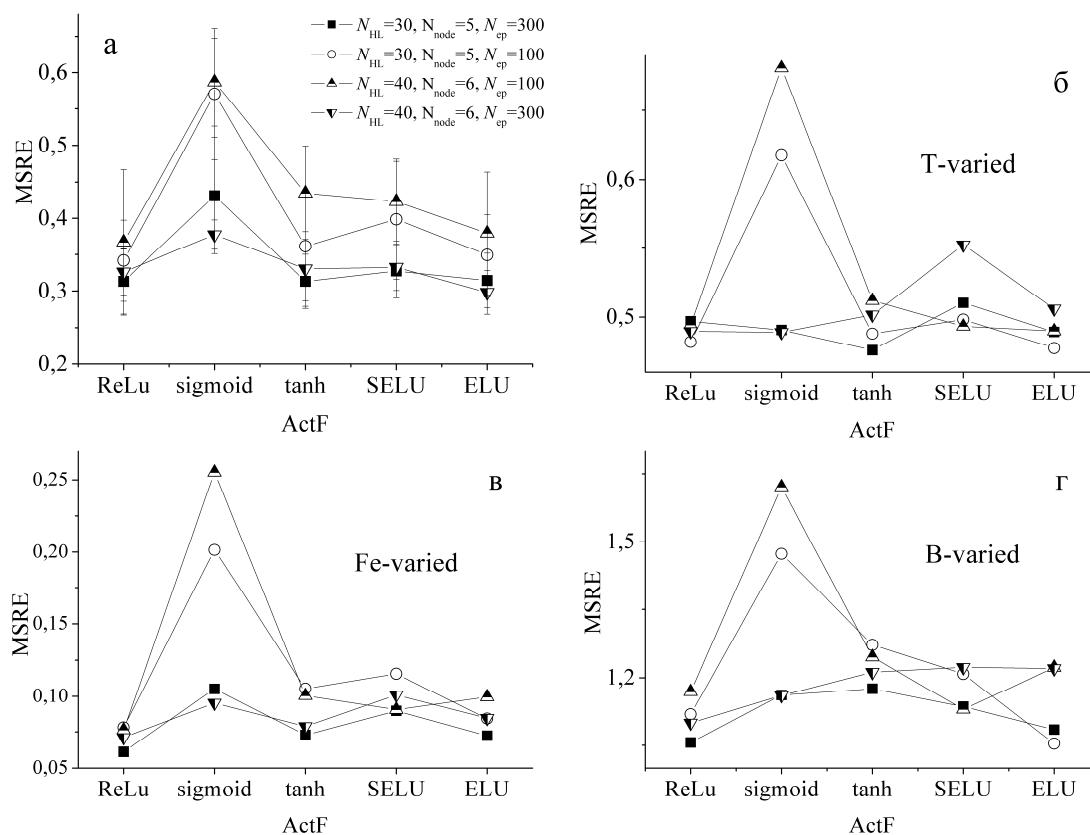


Рисунок 1.11 – Залежності величини функції втрат при різних активаційних функціях та кількостях епох для тренувального (а) та тестових (б-г) наборів. Мережа DNN<sub>FeFeB</sub>. Conf=pipe, BS=32, Opt=Adam, LR=0,001, PreM= StandartScaler, RegF= None, WI= Xavier Normal

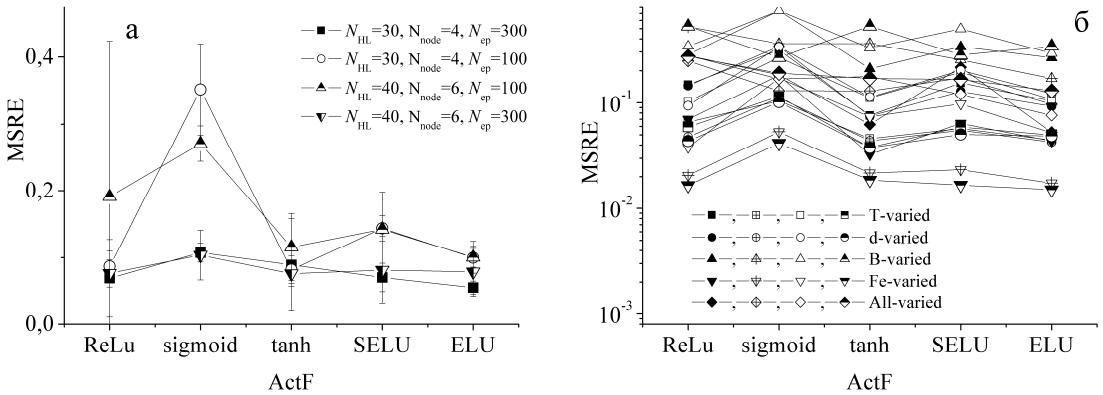


Рисунок 1.12 – Залежності величини функції втрат при різних активаційних функціях та кількостях епох для тренувальногоного (а) та тестових (б) наборів. Мережа DNN<sub>FeFeB-FeB</sub>. Conf=pipe, BS=32, Opt=Adam, LR=0,001, PreM= StandartScaler, RegF= None, WI= Xavier Normal

На рис.1.13 та 1.14 представлена результати тренування ГНМ при використанні пакетів різного розміру. Зауважимо, що зменшення BS спричинює суттєве зростання часу навчання при сталих інших параметрів. Як видно, використання пакетів з розміром, менше 10 у випадку наших мереж не є також доцільним і з точки зору прогностичної здатності. З іншого боку, при BS>100 також спостерігається зростання помилки, особливо для мережі DNN<sub>FeFeB</sub>. Таким чином, доцільним є використання пакетів розміром від 30 до 50 для DNN<sub>FeFeB</sub> та від 30 до 90 для DNN<sub>FeFeB-FeB</sub>. В літературі вказується на доцільність вибору величини розміру пакету, який є цілим ступенем двійки. Тому надалі для першої мережі будемо використовувати BS=32, а для другої BS=32 та BS=64 (або 50 для підвищення варіативності).

Вибір початкових значень вагових коефіцієнтів має, з одного боку, перешкодити занадто великим значенням, що отримуються в результаті застосування функції активації (попередити так званий вибух алгоритму градієнтного спуску), а з іншого – не допустити занадто малі величини на виходах шарів, тобто затухання, що робить збіжність процесу занадто повільною. В нашому випадку були розглянуті 7 можливих стратегій

початкової ініціалізації, а саме

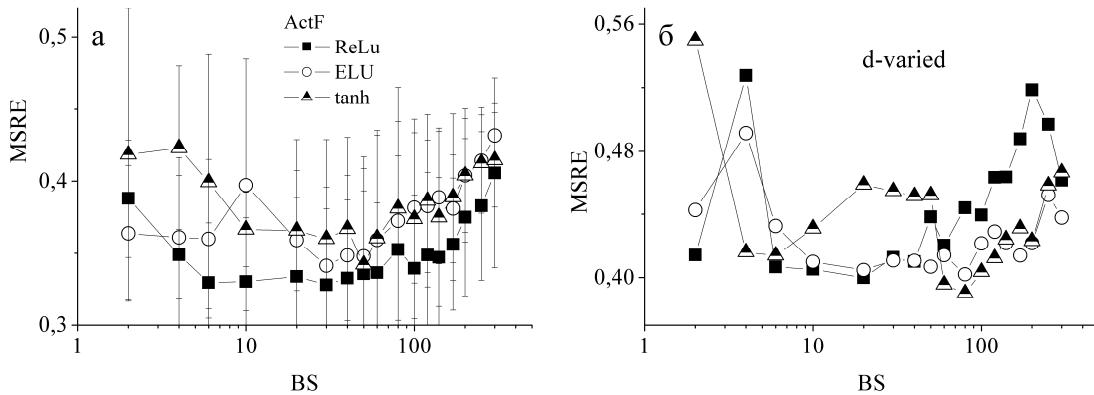


Рисунок 1.13 – Залежності величини функції втрат від розміру пакету для тренувального (а) та тестового (б) наборів при використанні різних активаційних функцій. Мережа DNN<sub>FeFeB</sub>. Conf=pipe,  $N_{\text{HL}}=5$ ,  $N_{\text{node}}=30$ , Opt=Adam,  $N_{\text{ep}}=100$ , LR=0,001, PreM= StandartScaler, RegF= None, WI= Xavier Normal

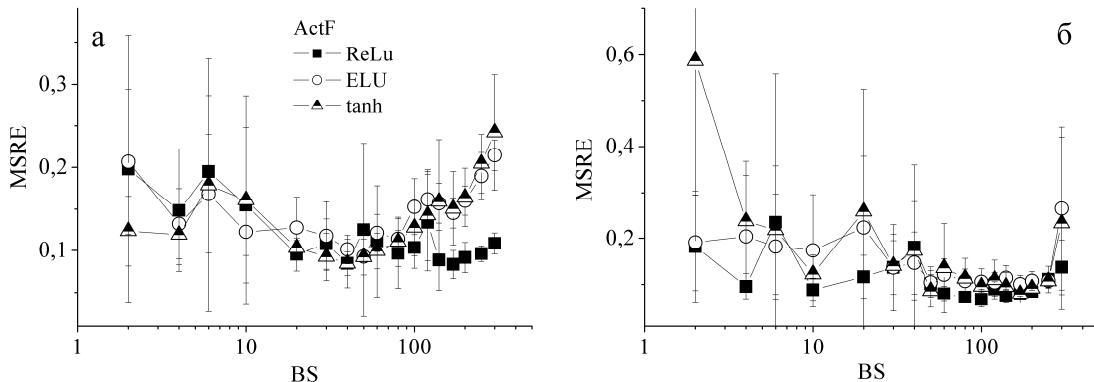


Рисунок 1.14 – Залежності величини функції втрат від розміру пакету для тренувального набору при використанні різних активаційних функцій. Мережа DNN<sub>FeFeB-FeB</sub>. Conf=pipe,  $N_{\text{HL}}=4$  (а), 6 (б),  $N_{\text{node}}=30$  (а) 40 (б), Opt=Adam,  $N_{\text{ep}}=100$ , LR=0,001, PreM= StandartScaler, RegF= None, WI= Xavier Normal

- нормальна випадкова ініціалізація, при якій вагові коефіцієнти мають нормальній (гаусовий) розподіл з середнім значенням рівним  $\text{mean}=0$  та стандартним відхиленням  $\sigma=0,05$  (Random Normal або RN);

- однорідна випадкова ініціалізація, коли значення вагових коефіцієнтів вибираються з інтервалу  $[-0,05;0,05]$  з постійною ймовірністю для кожної величини (Random Uniform або RU);
- початкові значення всіх вагових коефіцієнтів вибираються рівними одиниці (Ones);
- нормальнa ініціалізація Ксав'є, коли значення для  $i$ -го шару вибираються з використанням розподілу Гаусса, центрованого в нульовій точці та з стандартним відхиленням

$$\sigma_{i,X} = \sqrt{\frac{2}{N_{node,in} + N_{node,out}}}, \quad (1.17)$$

де

$N_{node,in}$  та  $N_{node,out}$  – кількості вхідних та вихідних нейронів, відповідно; цей випадок надалі позначається Xavier Normal або XN;

- рівномірна ініціалізація Ксав'є (Xavier Uniform, XU), коли для значень вагових коефіцієнтів  $i$ -го шару вибираються випадковим чином розподілені числа з інтервалу  $[-lim_{i,X}; +lim_{i,X}]$ , причому

$$lim_{i,X} = \sqrt{\frac{6}{N_{node,in} + N_{node,out}}}; \quad (1.18)$$

- нормальнa ініціалізація Хе, яка подібно XN також використовує нормальний розподіл, причому стандартне відхилення для кожного шару своє

$$\sigma_{i,H} = \sqrt{\frac{2}{N_{node,in}}}; \quad (1.19)$$

і надалі позначена He Normal або HN;

- рівномірна ініціалізація Хе (He Uniform, HU), де використовується інтервал  $[-lim_{i,H}; +lim_{i,H}]$ , причому

$$lim_{i,H} = \sqrt{\frac{6}{N_{node,in}}}. \quad (1.20)$$

На рис. 1.15 та 1.16 наведено результати застосування різних типів

ініціалізації. Зауважимо, що у випадку Ones незалежно від інших використаних параметрів мав місце вибух градієнту і тому відповідні дані не наведено. Щодо інших варіантів, то найгірші результати спостерігаються для випадків Random Normal та Random Uniform і тому їх також надалі не розглядатимемо.

З іншого боку для DNN<sub>FeFeB</sub> (рис.1.15) найкраще виглядають Xavier Normal та Xavier Uniform, для DNN<sub>FeFeB-FeB</sub> (рис.1.16) - He Uniform (при ActF=tanh) та Xavier Normal (при ActF=ELU). Проте ці переваги не настільки великі, щоб виключити інші типи ініціалізації при тонкому налаштуванні гіперпараметрів.

Проблематично передавати у нейронну мережу значення, які мають різні діапазони змін значень і тому прийнято застосовувати так звану нормалізацію.

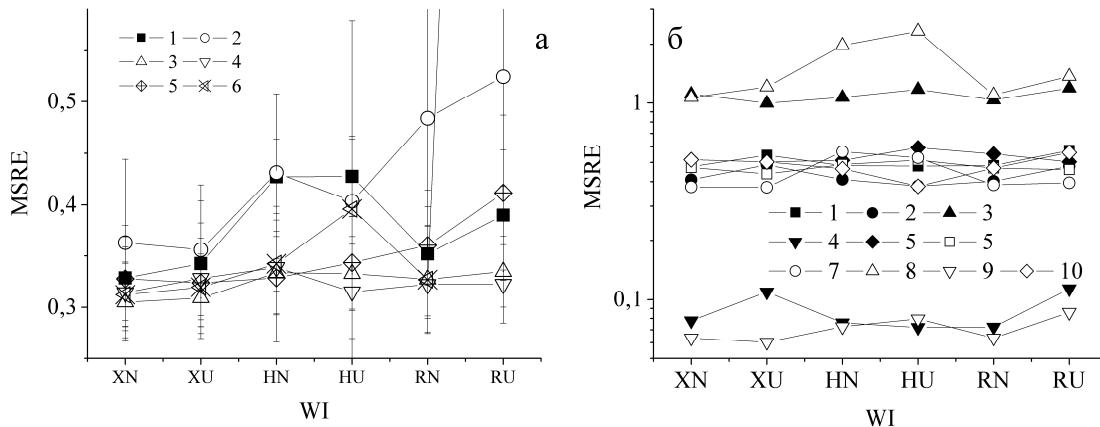


Рисунок 1.15 – Залежності величини функції втрат від типу початкової ініціалізації вагових коефіцієнтів для тренувального (а) та тестових (б) наборів. Мережа DNN<sub>FeFeB</sub>. Conf=pipe, Opt=Adam, LR=0,001, PreM= StandartScaler, RegF=None. а)  $N_{node}$ : 30 (криві 1,3,4), 40 (2,5,6);  $N_{HL}$ : 5 (1,3,4), 6 (2,5,6); BS: 32 (криві 1,3,4), 64 (2,5,6); ActF: ReLu (1,3,6), tanh (2,4,5);  $N_{ep}$ : 100 (1,2), 300 (4-6). б)  $N_{node}$ = 40,  $N_{HL}$ =6, BS=64,  $N_{ep}$ =300, ActF: tanh (1-5), ReLu (6-10); T-varied (1,6), d-varied (2,7), B-varied (3,8), Fe-varied (4,9), All-varied (5,10)

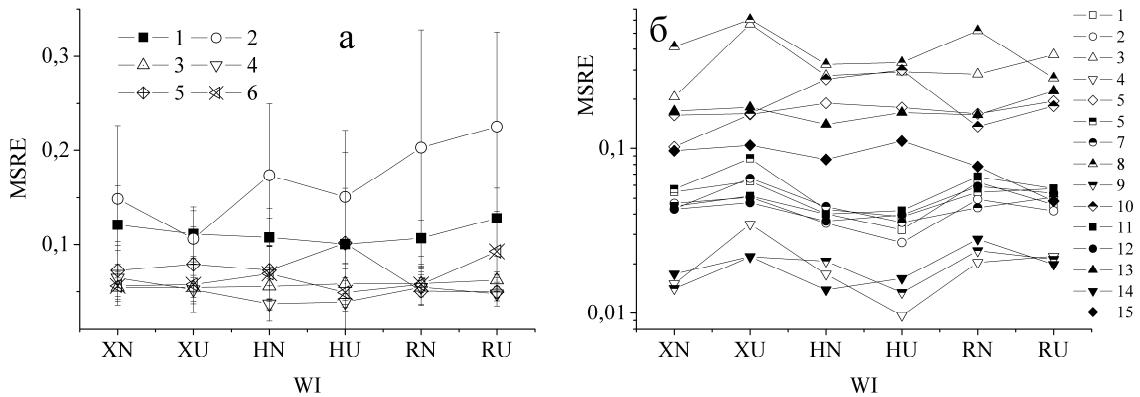


Рисунок 1.16 – Залежності величини функції втрат від типу початкової ініціалізації вагових коефіцієнтів для тренувальногоного (а) та тестових (б) наборів. Мережа DNN<sub>FeFeB-FeB</sub>. Conf=pipe, Opt=Adam, BS=32, LR=0,001, PreM= StandartScaler, RegF= None. а)  $N_{node}$ : 30 (криві 1,3,4), 40 (2,5,6);  $N_{HL}$ : 4 (1,3,4), 6 (2,5,6); ActF: ELU (2,3,5), tanh (1,4,6);  $N_{ep}$ : 100 (1,2), 300 (4-6). б)  $N_{node}$ : 30 (1-5, 11-15), 40 (6-10);  $N_{HL}$ : 4 (1-5, 11-15), 6 (6-10),  $N_{ep}$ =300, ActF: tanh (1-10), ELU (11-15); T-varied (1,6,11), d-varied (2,7,12), B-varied (3,8,13), Fe-varied (4,9,14), All-varied (5,10,15)

В роботі було розглянуто два варіанти її реалізації. В першому з них, так званої міні-максної нормалізації, значення, що потрапляли на вхід ГНМ, зводилися до діапазону [0; 1], використовуючи наступний вираз

$$x^* = \frac{(x - x_{\min})}{(x_{\max} - x_{\min})}, \quad (1.21)$$

де

$x$  – реальна величина параметру, який характеризує сонячний елемент (в нашому випадку це може бути  $d_p$ ,  $\log N_B$ ,  $T$ ,  $n_{Fe-FeB}$ ,  $n_{Fe}$  чи  $\log N_{Fe}$ ),  $x_{\min}$  та  $x_{\max}$  – мінімальне та максимальні значення цієї величини,  $x^*$  - значення, яке потрапляло на вхід мережі (у випадку  $\log N_{Fe}$  – очікувалося на виході). При цьому використовувалися наступні значення ( $x_{\min}$ ;  $x_{\max}$ ) для кожного з параметрів: для  $d_p$  - (0,00014; 0,00025); для  $\log N_B$  - (14; 18); для  $T$  - (280; 350); для  $n_{Fe-FeB}$ , та  $n_{Fe}$  - (0,99; 1,51); для  $\log N_{Fe}$  - (9; 14). Цей випадок

позначенено MinMaxScaler.

У другому варіанті використовувався підхід, коли для кожної ознаки забезпечувалося її центрування на нульовому значенні та стандартне відхилення, рівне одиниці:

$$x^* = \frac{(x - \bar{x})}{x_{std}}, \quad (1.22)$$

де

$$\bar{x} = \frac{1}{N_S} \sum_{i=1}^{N_S} x_i; \quad x_{std} = \sqrt{\frac{1}{N_S} \sum_{i=1}^{N_S} (x_i - \bar{x})^2}. \quad (1.23)$$

Позначення StandartScaler, яке використовувалося у цьому випадку, запозичено з бібліотеки sklearn.

На рис.1.17 та 1.18 наведено залежності відносної квадратичної похибки від кількості епох при використанні вказаних способів нормалізації. З наведених даних можна зробити два висновки, однаково віправдані для обох ГНМ: по-перше, використання MinMaxScaler не є віправданим, так як отримані значення передбачуваної точності фактично не відрізняються від випадку застосування StandartScaler, проте досягається після більшої точності епох, а отже вимагає більших розрахункових затрат; по-друге, при PreM=StandartScaler зменшення MRSE у випадку перевищення кількістю епох значення 300 не є суттєвим і тому для грубого налаштування достатньо використовувати це значення (щонайменше для Opt=Adam)

Нерідко важливу роль у досягненні високої точності передбачень нейронною мережею відіграє вибір оптимізатора. В нашому випадку також був здійснений підбір цього гіперпараметру, причому до розгляду були взяті наступні методи:

- стохастичний градієнтний спуск (SGD), який передбачає, що на кожній ітерації для оцінки градієнта втрат для параметрів мережі використовується лише один випадковим чином выбраний зразок з набору;

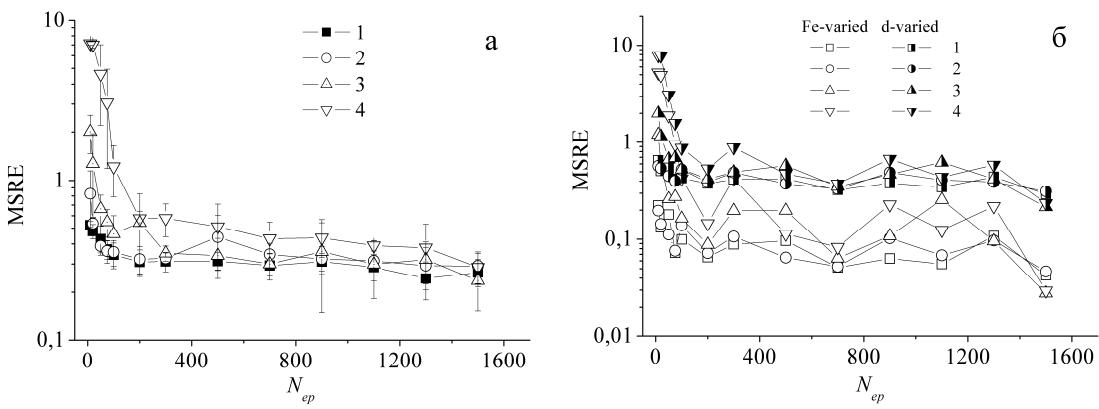


Рисунок 1.17 – Функції втрат як функція кількості епох для тренувального (а) та тестових (б) наборів. DNN<sub>FeFeB</sub>. Conf=pipe, Opt=Adam, LR=0,001, RegF= None, WI= XU. N<sub>HL</sub>: 5 (криві 1,3), 6 (2, 4); N<sub>node</sub>: 30 (1, 3), 40 (2, 4); ActF: ReLu (1,3), tanh (2, 4); BS: 32 (1,3), 64 (2, 4); PreM: StandartScaler (1, 2), MinMaxScaler (3, 4). Заповнені точки – тренувальний набір, напівзаповнені та порожні – d-varied та Fe-varied, відповідно

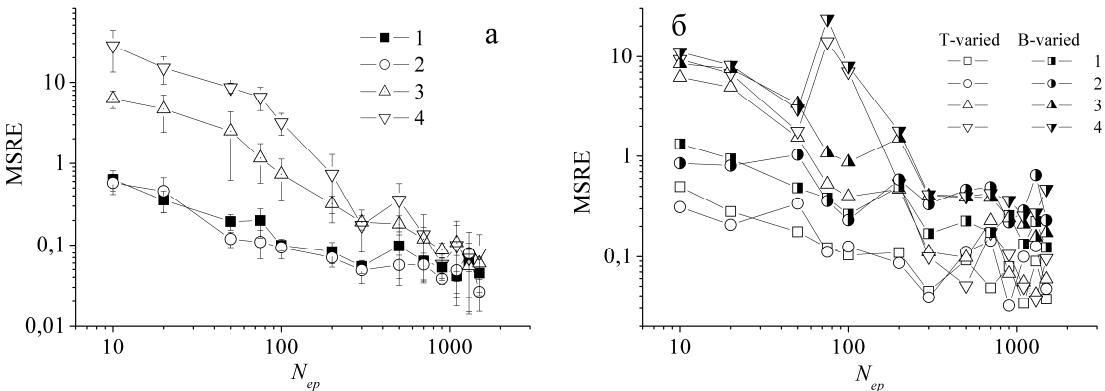


Рисунок 1.18 – Залежності величини функції втрат від кількості епох для тренувального (а) та тестових (б) наборів. Мережа DNN<sub>FeFeB-FeB</sub>. Conf=pipe, Opt=Adam, LR=0,001, RegF= None, BS=32. N<sub>HL</sub>: 4 (криві 1,3), 6 (2, 4); N<sub>node</sub>: 30 (1, 3), 40 (2, 4); ActF: ELU (1,3), tanh (2, 4); WI: Xavier Normal (1,3), He Uniform (2, 4); PreM: StandartScaler (1, 2), MinMaxScaler (3, 4). Заповнені точки – тренувальний набір, напівзаповнені та порожні – тестові B-varied та T-varied набори, відповідно

- RMSprop, що використовує для оновлення параметрів темп навчання, розділений на корінь з експоненціально зваженого середнього значення всіх квадратів градієнтів;
- Adam, в якому використовуються як експоненційно зважені середні значення похідних на попередніх ітераціях, так і експоненційно зважені середні експоненціальна квадратичних похідних;
- Adagrad, який адаптує темп навчання на кожному кроці для кожного з параметрів, зменшуючи оновлення елементів, які оновлюються часто і забезпечуючи затухання LR;
- Adadelta, як і попередній метод оптимізації, забезпечує затухання швидкості навчання, проте замість повної суми оновлень кожного з параметрів використовується усереднений квадрат градієнту;
- Adamax у порівнянні з Adam, має більшу стабільність та більш стійкий до випадкових оновлень градієнту завдяки використанню не дисперсії, а інерційного моменту значно більшого ступеня ніж 2;
- Nadam фактично співпадає з Adam, проте використовує імпульс Нестерова, в рамках якого передбачено використання прогнозованого значення градієнту;
- Ftrl є алгоритмом, що здатен оброблювати дані поступово, при їхньому надходженні і не потребує всього набору одразу; при своїй роботі використовує L1 та L2-регуляризації.

На рис.1.19 представлени результахи, отримані для двох варіантів мережі DNN<sub>FeFeB</sub> при використанні різних оптимізаторів та темпів навчання. Відомо, що порівнювати оптимізатори недоцільно при одинакових інших параметрах (зокрема величині LR), більше вдалий підхід до вибору кращого способу полягає у співставленні найкращих показників для кожного значення Opt. Таким чином, доцільно виключити з переліку раціональних способів оптимізації Ftrl (для якого, до речі при другому варіанті мережі, рис.18б спостерігається вибух градієнту і тому дані не наведені), SGD, Adadelta.

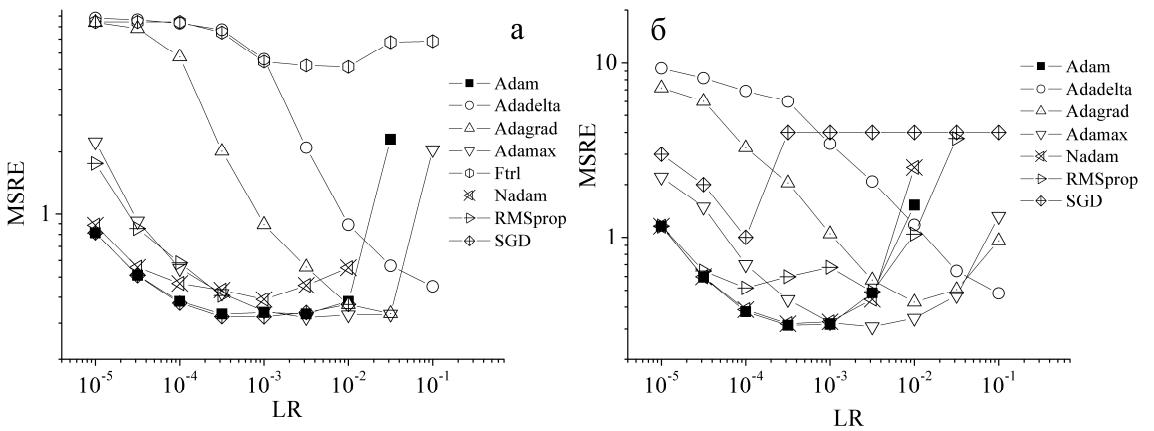


Рисунок 1.19 – Залежності величини функції втрат від величини темпу навчання для тренувального набору. Мережа  $DNN_{FeFeB}$ . Conf=pipe, RegF=None,  $N_{ep}=300$ , PreM=StandartScaler, WI= Xavier Uniform.  $N_{HL}$ : 5 (а), 6 (б);  $N_{node}$ : 30 (а), 40 (б); ActF: ReLu (а), tanh (б); BS: 32 (а), 64 (б)

Зауважимо, що всі криві, наведені на рисунку, отримані при використанні  $N_{ep}=300$ . Зростання похибки передбачення для більшості методів при LR навчання може свідчити про недонавчання. Для перевірки цього варіанту були проведені розрахунки при  $N_{ep}=1500$ , деякі результати який представлені на рис.1.20. Зокрема з рис.1.20а видно, що а) дійсно при  $LR \leq 10^{-4}$  для більшості методів доцільно використовувати кількості епох, що перевищують 1000, так як в протилежному випадку суттєві ефекти недонавчання; б) для Nadam та Adamax та  $LR=10^{-3}$  при раціональних значеннях кількості епох спостерігаються кращі результати, ніж при використанні меншого темпу навчання. Рис.1.20б підтверджує, що у випадку грубого (початкового) налаштування мережі комбінація ( $LR=10^{-3}$ ;  $N_{ep}=300$ ) є цілком доцільною.

На рис.1.21 представлено результати тренування з різними оптимізаторами для мережі  $DNN_{FeFeB-FeB}$ . Загалом, вони схожі до тих, які отримані при розгляді мережі з меншою кількістю входних вузлів: це стосується і типів оптимізаторів (найгірші Ftrl, SGD, Adadelta, Adagrad,

найкращі Nadam та Adamax), і темпу навчання (при зменшенні LR якість передбачень на тренувальному наборі зменшується).

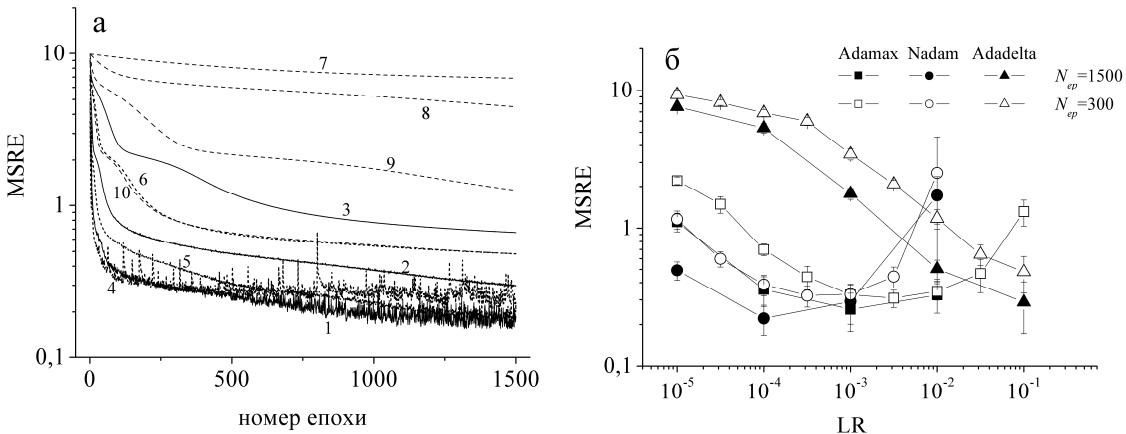


Рисунок 1.20а – Криві навчання. ActF: Adamax (1-3), Nadam (4-6), Adadelta (7-10); LR:  $10^{-2}$  (10),  $10^{-3}$  (1, 4, 9),  $10^{-4}$  (2, 5, 8),  $10^{-5}$  (3, 6, 7). б - Залежності величини функції втрат від величини темпу навчання для тренувального набору при різних кількостях епох. Мережа DNN<sub>FeFeB</sub>. Conf=pipe,  $N_{HL}=6$ ,  $N_{node}=40$ , ActF=tanh, BS=64, RegF=None, PreM=StandartScaler ,WI= XU

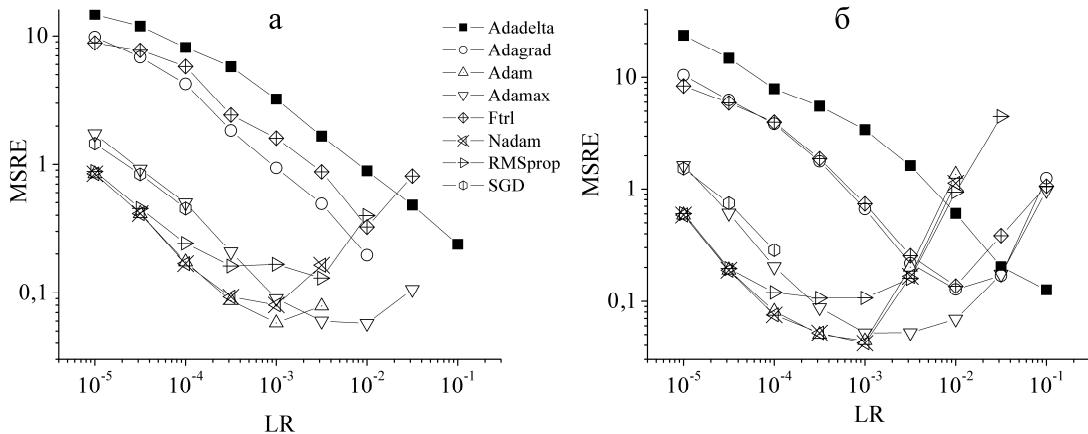


Рисунок 1.21 – Залежності величини функції втрат від величини темпу навчання для тренувального набору. Мережа DNN<sub>FeFeB-FeB</sub>. Conf=pipe, RegF=None,  $N_{ep}=300$ , PreM=StandartScaler.  $N_{HL}$ : 4 (а), 6 (б);  $N_{node}$ : 30 (а), 40 (б); ActF: ELU (а), tanh (б); BS: 32 (а), 50 (б); WI: Xavier Normal (а), He Uniform (б)

Таким чином, можна зробити висновок, що в подальшому простір гіперпараметрів вздовж осі оптимізаторів можна обмежити Nadam та Adamax, а вздовж осі темпу навчання проводити пошуки в інтервалі  $[10^{-4}, 5 \cdot 10^{-3}]$ .

Одним з широковживаних варіантів покращення роботи ГНМ внаслідок зменшення перенавчання є регуляризація. В нашому випадку розглядалися як регуляризація вагових коефіцієнтів, так і проріджування. В першому випадку до функції втрат додається штрафний член, пов'язаний з величинами вагових коефіцієнтів. В роботі бралися до уваги два найпопулярніші варіанти: L1 регуляризація, при якій штрафний доданок має вигляд

$$\Delta_{pen} = RR \cdot \sum_{i,j} |w_{i,j}|, \quad (1.24)$$

де

$w_{i,j}$  –  $j$ -й ваговий коефіцієнт  $i$ -го шару, сумування відбувається про всім шарам та вузлам. При L2 регуляризації

$$\Delta_{pen} = RR \cdot \sum_{i,j} |w_{i,j}|^2. \quad (1.25)$$

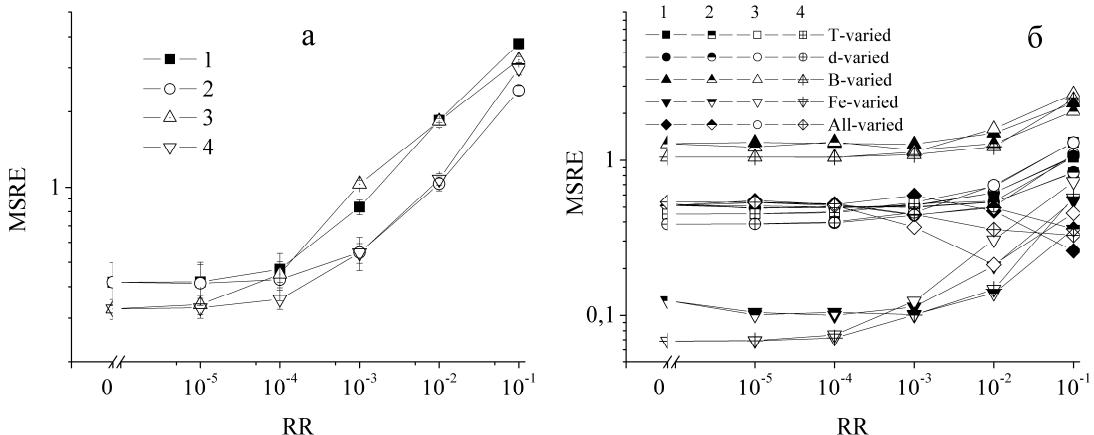


Рисунок 1.22 – Залежності величини функції втрат від темпу регуляризації для тренувального (а) та тестових (б) наборів. Мережа DNN<sub>FeFeB</sub>. Conf=pipe,  $N_{ep}=300$ , PreM=StandartScaler, WI=XU, Opt=Adamax.  $N_{HL}$ : 5 (1,2), 6 (3,4);  $N_{node}$ : 30 (1,2), 40 (3,4); ActF: ReLu (1,2), tanh (2,4); BS: 32 (1,2), 64 (3,4); LR:  $3 \cdot 10^{-4}$  (1,2),  $10^{-3}$  (3,4); RegF:L1 (1,3), L2 (2,4)

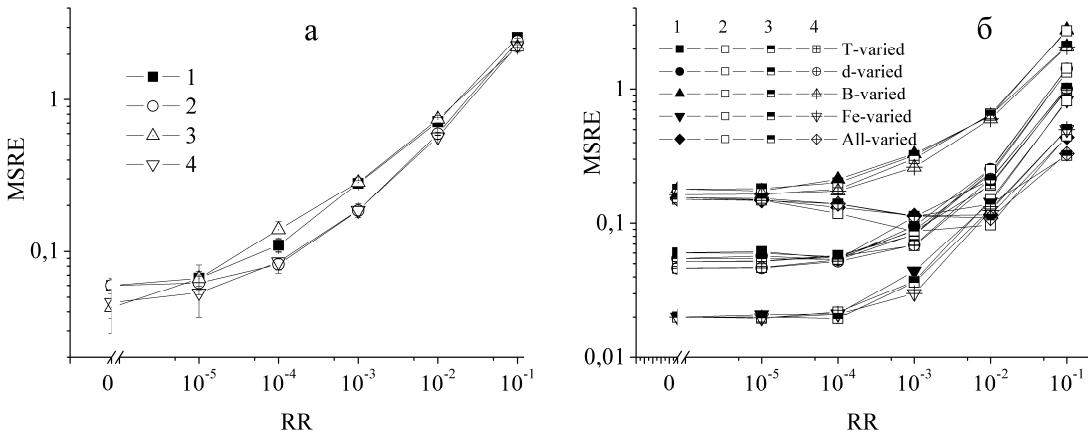


Рисунок 1.23 – Залежності величини функції втрат від темпу регуляризації для тренувальногоного (а) та тестових (б) наборів. Мережа DNN<sub>FeFeB-FeB</sub>. Conf=pipe,  $N_{ep}=300$ , PreM=StandartScaler;  $N_{HL}$ : 4 (1,2), 6 (3,4);  $N_{node}$ : 30 (1,2), 40 (3,4); ActF: ELU (1,2), tanh (3,4); BS: 32 (1,2), 50 (3,4); WI: XN (1,2), HU (3,4); Opt: Adamax (1,2), Nadam (3,4); LR:  $3 \cdot 10^{-3}$  (1,2),  $10^{-3}$  (3,4); RegF: L1 (1,3), L2 (2,4)

На рис.1.22 та 1.23 приведено результати застосування регуляризації вагових коефіцієнтів. Видно, що в нашому випадку така регуляризація недоцільна.

Проріджування передбачає, що під час навчання частина нейронів шару видаляється. Які це саме нейрони визначається випадковим чином на кожній з ітерацій, кількість видалених визначається темпом прорідження як частка від повного числа вузлів у даному шарі. Наступні два рисунки (1.24 та 1.25) ілюструють застосування цього методу регуляризації в нашому випадку. Як видно з наведених даних, цей підхід також не є доцільним.

Одним з переваг проріджування є те, що воно передбачає можливість певного авто-налаштування конфігурації шарів. Для перевірки цієї можливості були розглянуті мережі зі збільшеною кількістю вузлів (100 та 500), причому в останньому випадку використовувалося  $N_{ep}=1000$ . Проте, як видно з рисунків, такий підхід також не дозволив зменшити похибку передбачення.

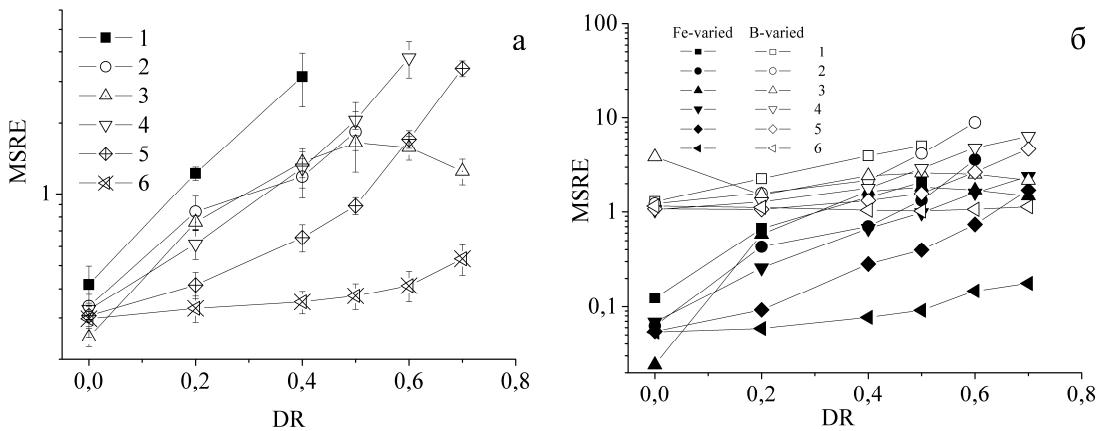


Рисунок 1.24 – Залежності MSRE від темпу проріджування для тренувального (а) та тестових (б) наборів. DNN<sub>FeFeB</sub>. Conf=pipe, RegF=Dropout, PreM=StandartScaler, WI=XU, Opt=Adamax.  $N_{HL}$ : 5 (1-3), 6 (4-6);  $N_{node}$ : 30 (1), 40 (4), 100 (2,5), 500 (3,6); ActF: ReLu (1-3), tanh (4-6); BS: 32 (1-3), 64 (4-6); LR:  $3 \cdot 10^{-4}$  (1-3),  $10^{-3}$  (4-6);  $N_{ep}$ : 300 (1,2,4,5), 1000 (3,6)

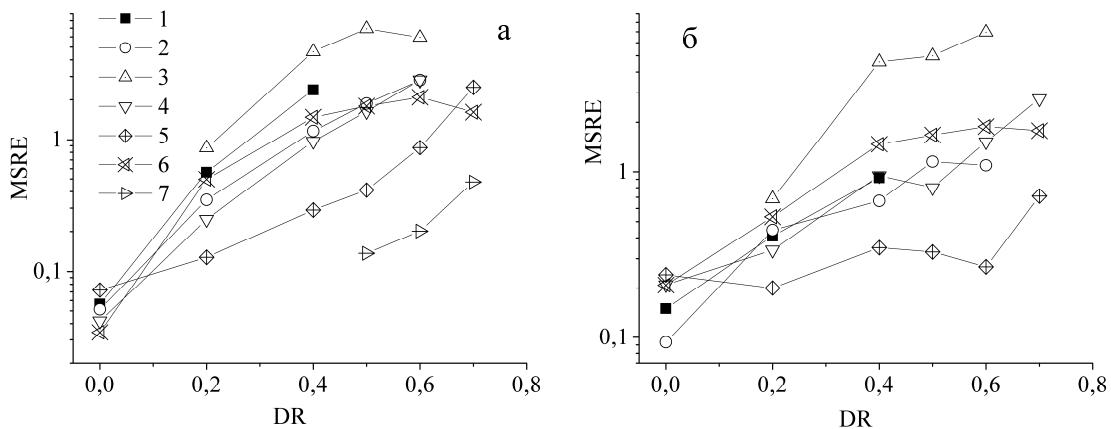


Рисунок 1.25 – Залежності MSRE від темпу проріджування для тренувального (а) та All-varied тестового (б) наборів. DNN<sub>FeFeB-FeB</sub>. Conf=pipe, RegF= Dropout, PreM=StandartScaler,.  $N_{HL}$ : 4 (1-3), 5 (6), 6 (4,5,7);  $N_{node}$ : 30 (1), 40 (4), 100 (2,5), 500 (3,6,7); ActF: ELU (1-3), ReLu (5), tanh (4,5,7); BS: 32 (1-3,6), 64 (4,5,7); LR:  $3 \cdot 10^{-3}$  (1-3),  $3 \cdot 10^{-4}$  (6)  $10^{-3}$  (4,5,7);  $N_{ep}$ : 300 (1,2,4,5), 1000 (3,6,7); WI: XN (1-3), HU (4,5,7), XU (6); Opt: Adamax (1-3,6), Nadam (4,5,7)

Фактично, відсутність вигід від регуляризації свідчить насамперед про те, що в нашому випадку не спостерігається перенавчання. Однією з можливих причин є те, що тренувальний набір не надто великий.

На рис.1.26 та 1.27 наведено результати використання мереж з різною конфігурацією. Враховуючи, що при однаковій кількості шарів подібні мережі суттєво відрізняються за кількістю вузлів, в цьому випадку доречно застосовувати порівняння здатності до передбачень ГНМ при однаковій кількості параметрів, що модифікуються під час навчання (вагових коефіцієнтів та зміщень). Саме ця величина і відкладена по осі абсцис на вказаних рисунках. Зауважимо, що в цьому сегменті роботи розглядалися конфігурації trapezium, triangle, butterfly та fir з кількістю вузлів у першому скованому шарі  $N_{node}$ , рівною 30, 40, 50, 75, 100, 150, 200, 250, 300 та 500; розраховувалися загальні кількості параметрів, а потім проводилися розрахунки для ріреної конфігурації, яка містила таке число скованих шарів, щоб

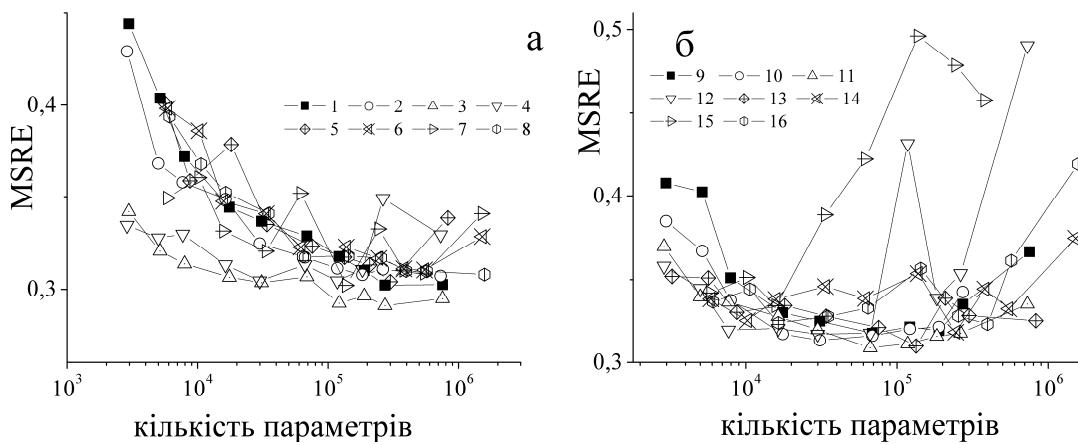


Рисунок 1.26 – Залежності величини функції втрат від загальної кількості параметрів, які навчаються, для тренувального набору. Мережа DNN<sub>FeFeB</sub>. RegF=None, PreM=StandartScaler, WI=XU,  $N_{ep}=300$ ; Conf: pipe (1,2,9,10), trapezium (3,4,11,12), triangle (5,13), butterfly (6,7,14,15), fir (8,16); Opt: Adamax (1,3,5,6,8,9,11,13,14,16), Nadam (2,4,7,10,12,15); ActF: ReLu (1-8), tanh (9-16); BS: 32 (1-8), 64 (9-16); LR:  $3 \cdot 10^{-4}$  (1-8,10,12,15),  $10^{-3}$  (9,11,13,14,16)

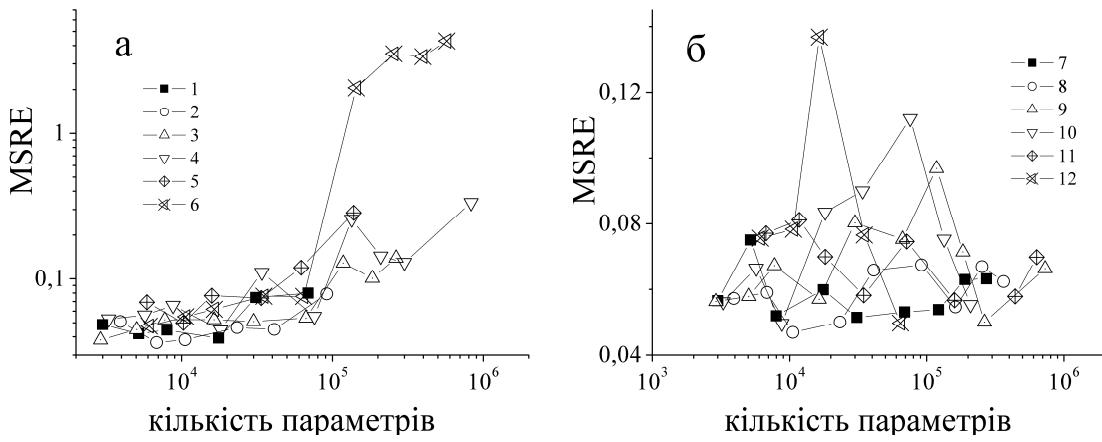


Рисунок 1.27 – Залежності величини функції втрат від загальної кількості параметрів, які навчаються, для тренувального набору. Мережа DNN<sub>FeFeB-FeB</sub>. RegF=None, PreM=StandartScaler,  $N_{ep}=300$ ; Conf: pipe (1,2,7,8), trapezium (3,9), triangle (4,10), butterfly (5,11), fir (6,12); Opt: Adamax (7-12), Nadam (1-6); ActF: ELU (7-12), tanh (1-6); BS: 32 (7-12), 50 (1-6); LR:  $3 \cdot 10^{-3}$  (1-6),  $10^{-3}$  (7-12); WI: He Uniform (1-6), Xavier Normal (7-12)

кількість параметрів не перевищувала отримане значення.

Як видно з наведених даних для мережі DNN<sub>FeFeB</sub> мінімальна похибка на тренувальному наборі відповідає trapezium конфігурації, причому раціональна кількість параметрів близько  $10^5$ , що відповідає  $N_{node}$  близько 200. Для мережі DNN<sub>FeFeB-FeB</sub> (див рис.21) найбільш перспективною виглядає pipe конфігурація, кожен схований шар якої містить близько 100 вузлів (загальна кількість параметрів близько  $10^4$ ).

Таким чином, проведене грубе налаштування дозволило обмежити гіперпростір параметрів по всім вимірам – див. таблицю 1.2.

Для тонкого налаштування, в межах цього обмеженого простору проводився відбувався випадковий пошук (random search). При цьому використовувався пакет Keras Tuner. Пошук проводився в декілька етапів на все меншому ареалі параметрів. В таблиці 1.3 представлені остаточні значення гіперпараметрів, оптимальні в нашому випадку.

Таблиця 1.2 – Простір пошуку гіперпараметрів після початкового налаштування за допомогою граткового пошуку

Гіперпараметр	Значення
$N_{\text{HL}}$	4-15
$N_{\text{node}}$	75, 100, 125, 150, 175, 200, 250
BS	32, 64
ActF	ReLU, tanh, ELU
Opt	Adamax, Nadam
LR	$3 \cdot 10^{-3}$ , $10^{-3}$ , $3 \cdot 10^{-4}$ , $10^{-4}$
$N_{\text{ep}}$	300, 400, 500, 900, 300, 1500
PreM	StandartScaler
RegF	None
RR	Xavier Normal, Xavier Uniform, He Uniform
DR	4-15

Таблиця 1.3 – Вибрані в результаті налаштування значення гіперпараметрів

Мережа	DNN <sub>FeFeB</sub>	DNN <sub>FeFeB-FeB</sub>
Гіперпараметр	Значення	
конфігурація	120-108-96-84-72-60	100-100-100-100
BS	32	32
ActF	ReLU	ReLU
Opt	Adamax	Adamax
LR	$10^{-3}$	$10^{-3}$
$N_{\text{ep}}$	400	1500
PreM	StandartScaler	StandartScaler
RegF	None	None
WI	Xavier Normal	Xavier Normal

### 1.3 Навчання та тестування нейронної мережі

Для оцінки остаточного ступеня навчання ГНМ з визначеними у попередньому пункті гіперпараметрами була використана 10-кратна перехресна перевірка (10-fold cross-validation). Результати представлені в таблиці 1.4. Як видно, мережа DNN<sub>FeFeB-FeB</sub> демонструє значно кращі прогностичні результати. Це стосується як абсолютноого середнього значення MSRE на 10 наборах, так і середньоквадратичної похибки, яка також вказана в таблиці.

Таблиця 1.4 – Результати 10-кратної перехресної перевірки навчання ГНМ

Набір	MSRE	
	DNN <sub>FeFeB</sub>	DNN <sub>FeFeB-FeB</sub>
тренувальний	0,31±0,07	0,03±0,01
повний	0,28±0,05	0,03±0,01

Натреновані мережі були застосовані для передбачень на тестових наборах. Результати DNN<sub>FeFeB</sub> представлені на рис.1.28 та в таблиці 1.5. Видно, що в цьому випадку похибка для окремих зразків (тобто наборів  $\{d_p, T, N_B, n_{Fe-FeB}\}$ ) може бути достатньо великою.

Таблиця 1.5 – Середнє значення відносної квадратичної похибки при застосуванні навчених мереж до тестових наборів

Набір	DNN <sub>FeFeB</sub>	DNN <sub>FeFeB-FeB</sub>
T-varied	0,41	0,020
d-varied	0,37	0,018
B-varied	1,06	0,084
Fe-varied	0,06	0,005
All-varied	0,54	0,138

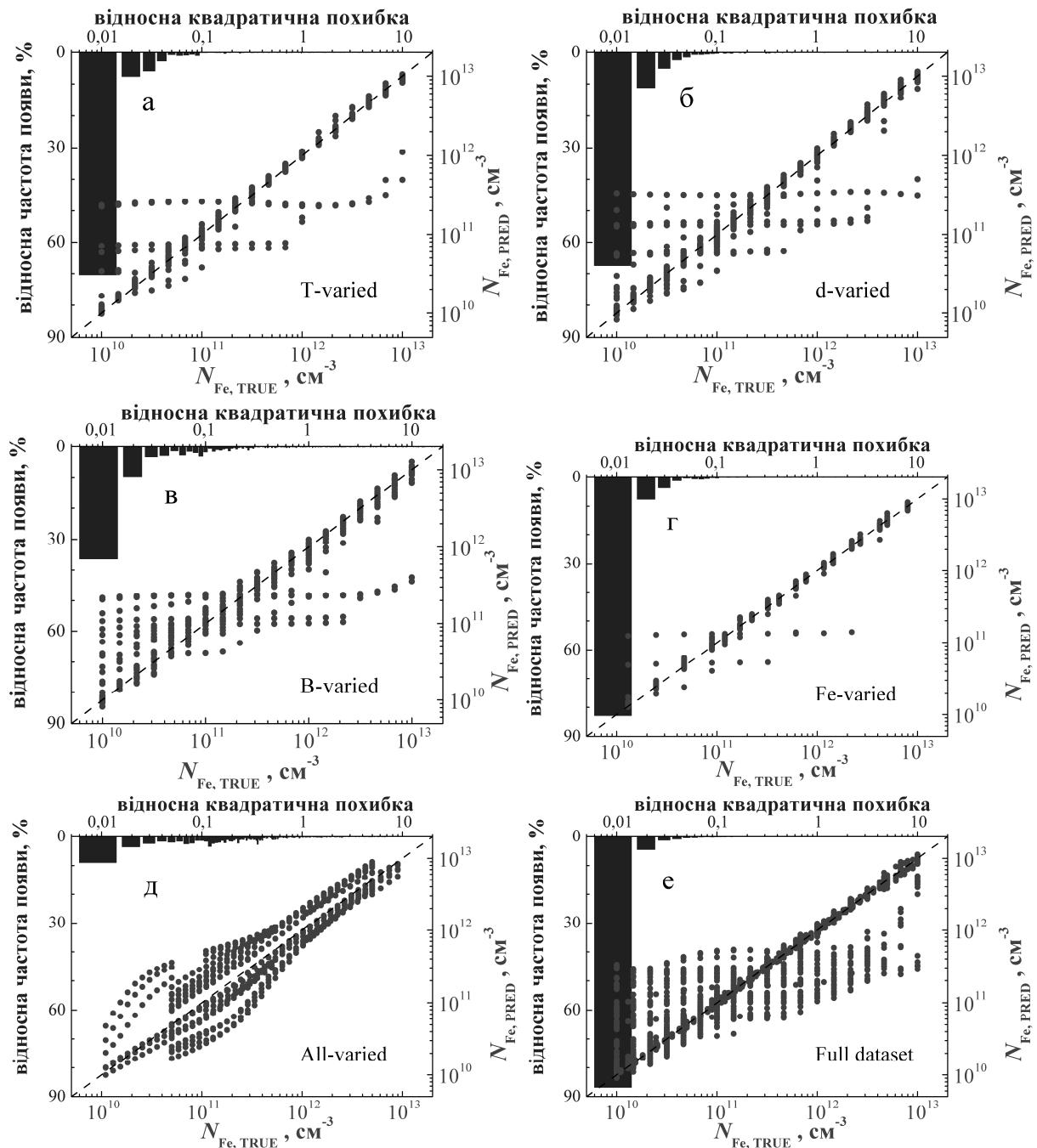


Рисунок 1.28 – Співвідношення передбачених мережею DNN<sub>FeFeB</sub> та істинних значень концентрацій заліза для T-varied (а), d-varied (б), B-varied (в), Fe-varied (г), All-varied (д) тестових та повного (е) наборів (точки). Стовпці відображають гістограми SRE. ГНМ була навчена на тренувальному (а-д) або повному (е) наборах. Пунктирна лінія істинності наведена для зручності

На рисунку також наведено гістограми, які відображають розподіл величини відносної квадратичної похибки (squared relative error, SRE) по тестовим наборам. Необхідно зауважити, що, частка передбачень з дійсно великою відмінністю між  $N_{\text{Fe,TRUE},i}$  та  $N_{\text{Fe,PRED},i}$  не є великою для більшості випадків. Так SRE не перевищує 0,05 для 87%, 88% та 96% для наборів T-varied, d-varied та Fe-varied відповідно – див. рис.1.28а,б,г.

Найбільша похибка спостерігається у випадку, коли тестовий набір створювався з використанням таких значень легування, які не зустрічалися у тренувальному наборі (B-varied). В цьому випадку частина зразків характеризувалася дійсно великою похибкою ( $\text{SRE} > 20$ ), що призвело до  $\text{MSRE} = 1,06$ . Для цього набору  $\text{SRE} < 0,05$  для 54% зразків. З іншого боку, набір Fe-varied найбільш наближений до реальної ситуації, коли необхідно визначити відхилення в концентрації заліза, і в цьому випадку навіть для DNN<sub>FeFeB</sub> відносна квадратична похибка не перевищує 0,01 для 88% випадків.

На нашу думку, не достатньо високі прогностичні можливості DNN<sub>FeFeB</sub> викликані фундаментальною неможливістю точно передбачити концентрацію заліза через неоднозначність зв'язку  $n_{\text{Fe-FeB}}$  та  $N_{\text{Fe}}$  – див. підрозділ 1.1. Збільшення кількості вхідних параметрів само по собі має підвищити можливості ГНМ, але в нашему випадку розгляд ще одного значення фактору неідеальності ( $n_{\text{Fe}}$ ) має спричинити своєрідне зняття виродження взаємозв'язку фактору неідеальності та концентрації заліза.

Результати, як тренування, так і застосування до тестових наборів даних для мережі DNN<sub>FeFeB-FeB</sub> представлені на рис.1.29 та в таблицях 1.4 та 1.5. Дійсно, в цьому випадку спостерігається суттєве підвищення прогностичних властивостей ГНМ порівняно з використанням всього одного значення фактору неідеальності. Це стосується як MSRE, яке в найгіршому випадку All-varied набору складає всього 0,138, так і розкиду передбачень для окремих зразків:  $\text{SRE} < 0,1$  для 67% з All-varied, а для, наприклад, Fe-varied менше 0,05 для 99%.

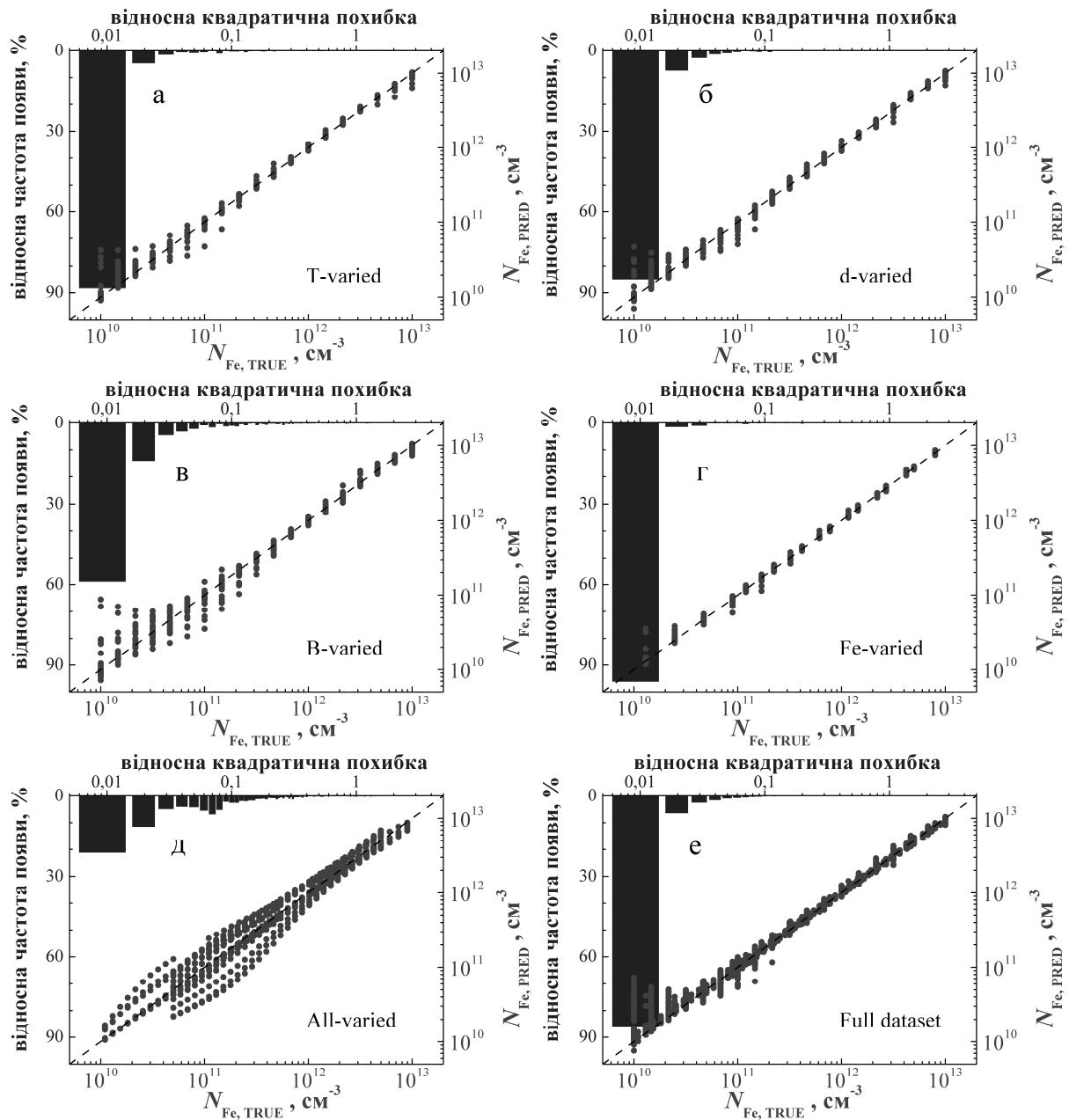


Рисунок 1.29 – Співвідношення передбачених мережею DNN<sub>FeFeB-FeB</sub> та істинних значень концентрацій заліза для Т-varied (а), d-varied (б), B-varied (в), Fe-varied (г), All-varied (д) тестових та повного (е) наборів (точки). Стовпці відображають гістограми SRE. ГНМ була навчена на тренувальному (а-д) або повному (е) наборах. Пунктирна лінія істинності наведена для зручності

Окрім суттєвого підвищення точності, інші виявлені особливості для мережі  $DNN_{FeFeB-FeB}$  подібні до  $DNN_{FeFeB}$ . А саме, критичним для вдалого функціонування ГНМ є використання для тренування тих значень  $N_B$ , які очікуються в подальшій оціночній діяльності, а також сприятлива з точки зору практичного застосування здатність достатньо точно передбачати відхилення у концентрації заліза.

Відомо [9], що збільшення розміченого набору даних, які використовуються для тренування, має покращувати результати роботи ГНМ. Ми використали всі дані, так званий повний набір, який складався з тренувального та всіх тестових, для тренування як  $DNN_{FeFeB-FeB}$ , так і  $DNN_{FeFeB}$ . Результати наведені в таблиці 1.4 та на рис.1.28e і 1.29e. Видно, що дійсно, використання розширеного набору викликає певне покращення тренування  $DNN_{FeFeB}$ .

Всі натреновані мережі (як з використанням тренувального, так і повного наборів розмічених даних) знаходяться у вільному доступі за адресою <https://github.com/olegolikh/IVcharacteristics.git>.

## 1.4 Основні результати розділу 1

1. За допомогою розробленого програмного забезпечення отримано масив (більше 40 тис.) величини фактору неідеальності для кремнієвих  $n^+ - p - p^+$  структур з різними геометричними та електрофізичними параметрами з врахуванням можливості перебудови домішкових атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари FeB.

2. Показано, що залежність фактору неідеальності від температури та рівня легування переважно пов'язані з ймовірністю наявності дірки на ріні міжвузольного заліза. Виявлено, величина фактору неідеальності монотонно

залежить від концентрації домішкового заліза, а також визначається його просторовим розташуванням в КСЕ.

3. Виявлена залежність фактору неідеальності від товщини бази структури  $n^+ - p - p^+$  у випадку, якщо вона переважає довжину дифузії неосновних носіїв заряду.

4. Проведено налаштування гіперпараметрів нейронної мережі для передбачення концентрації домішкового заліза в КСЕ. Раціональні значення параметрів зведені у таблиці 1.3.

5. Показана можливість визначення концентрації домішок (на прикладі заліза) в кремнієвих сонячних елементах на основі вимірювання ВАХ з використанням глибокої нейронної мережі з середньою відносною квадратичною похибкою до 0,005.

6. Аналіз роботи ГНМ показав, що важливим є використання для тренування мережі значень рівня легування, які збігаються з відповідними величинами в структурах, які надалі досліджуються.

7. Показано, що суттєве підвищення прогностичних властивостей спостерігається при використанні двох значень величини фактору неідеальності, які відповідають випадкам як наявності лише міжвузольних атомів заліза, так і рівноважного співіснування пар FeB та Fe<sub>i</sub>.

**2 ВИЗНАЧЕННЯ ЗАКОНОМІРНОСТЕЙ ЗМІН ПАРАМЕТРІВ  
КРЕМНІЄВИХ СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ ВНАСЛІДОК  
СВІТЛО-ІНДУКОВАНОЇ ДЕГРАДАЦІЇ В УМОВАХ  
УЛЬТРАЗВУКОВОГО НАВАНТАЖЕННЯ ПРИ  
ВИКОРИСТАННІ ПОВЗДОВЖНІХ ХВИЛЬ**

2.1 Експериментальний стенд для оцінювання кінетичних характеристик перебудови дефектів у бар'єрних структурах в умовах ультразвукового навантаження

У роботі для досліджень було використано зразки КСЕ дифузійно-польового типу, що мають структуру  $n^+ - p - p^+$ . Виготовлені вони були на основі монокристалічних (100) пластин  $p$ -типу кремнію товщиною 380 мкм марки КДБ-10 (кремній дірковий легований бором з питомим опором 10 Ом·см), концентрація вільних носіїв в якому складала близько  $1,36 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . Пластини вирізані зі злитків, вирощених за методом Чохральського.  $P-n$  перехід було створено шляхом дифузії фосфору при температурі 940°C. Товщина  $n^+$ -шару складала 0,7 мкм, його поверхневий опір 20-30 Ом/◻. Антирекомбінаційний ізотипний перехід на тиловій поверхні створено за допомогою  $p^+$  шару, який сформовано дифузією бору при температурі 985°C. Товщина цього шару та поверхневий опір – 0,6 мкм та 10-20 Ом/◻ відповідно. На фронтальній поверхні СЕ були наявні також просвітлюючі покриття з двоокису кремнію  $\text{SiO}_2$  товщиною 30 нм і нітриду кремнію  $\text{Si}_3\text{N}_4$  товщиною 40 нм. Також на поверхнях СЕ було сформовані алюмінієві контакти: суцільний на тиловій та гребінчастий на фронтальній. Схема структури представлена на рис.2.1а.

В експериментах використовувалися зразки розміром  $1,5 \times 1,5 \text{ см}^2$  - рис.2.1б.

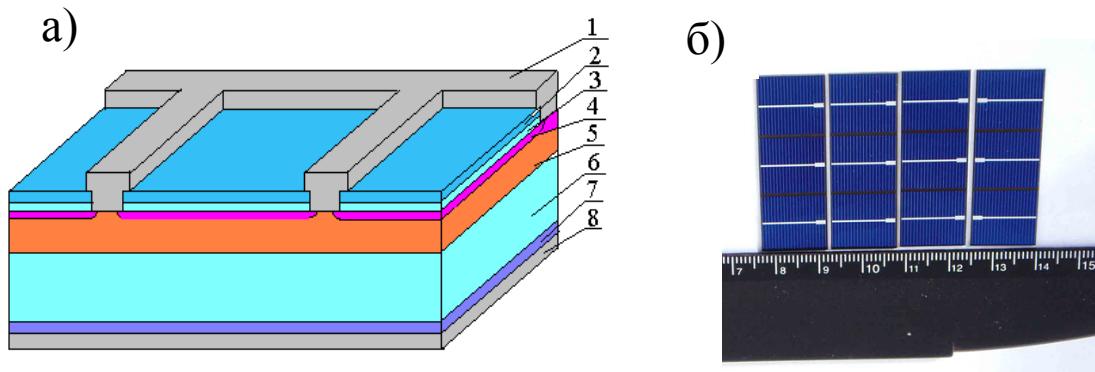


Рисунок 2.1а – Схема структури досліджених сонячних елементів. 1 – фронтальний металевий електрод (Al); 2 – шар нітриду кремнію; 3 діелектричний шар  $\text{SiO}_2$ ; 4 – індуктований  $n^{++}$ -шар; 5 – дифузійний  $n^+$ -шар; 6 – базова область ( $p\text{-Si}$ ); 7 – дифузійний  $p^+$ -шар; 8 – тилова металізація (Al). б - Вигляд реальних сонячних елементів; фотографія зроблена з боку фронтального металевого електрода

Під час виконання проєкту стан дефектів, пов’язаних із домішковим залізом, визначався за параметрами вольт-амперних характеристик КСЕ. Загальна схема для вимірювання ВАХ представлена на рис.2.2. Детально експериментальний стенд описаний у попередньому звіті, проте доцільним є наголосити на декількох моментах. По-перше, використовувалося два джерела світла. Одне, високоінтенсивне, роль якого відігравала галогенова лампа потужністю 200 Вт, було призначено для реалізації дисоціації пар  $\text{FeB}$ . Інтенсивність випромінювання цим джерелом була калібрована (на виході оптоволоконного світловоду) за допомогою вимірювача потужності PowerMeter Rk-5720. Дослідження показали, що оптична потужність складає величину від 70 до 220 мВт при зміні сили струму через лампу від 5,5 до 7,5 А. Друге джерело слугувало для оцінки фотоелектричного перетворення під час вимірювання ВАХ. Як показали попередні дослідження, найбільш чутливим до зміни стану дефектів є струм короткого замикання КСЕ, причому доцільно використовувати монохроматичне освітлення, при якому відбувається

рівномірна генерації носіїв заряду по об'єму бази елементу. У зв'язку з цим високоінтенсивне джерело світла

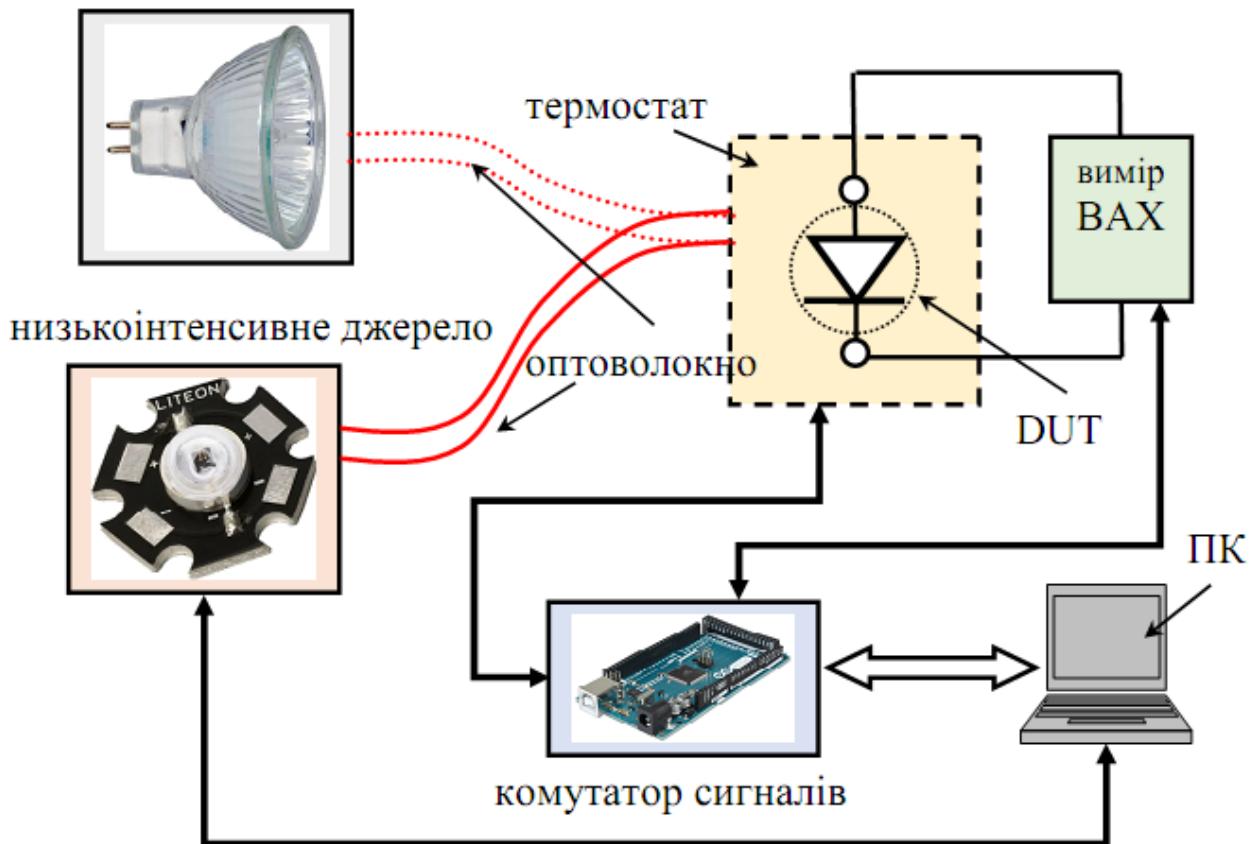


Рисунок 2.2 – Загальна схема експериментального стенду  
для вимірювання ВАХ

був використаний світловипромінюючий діод SN-HPIR940nm-1W, максимум випромінювальної здатності якого припадає на інфрачервоний діапазон (940 нм). В цьому випадку ефективна глибина поглинання світла  $d_\lambda$  у кремнії становить приблизно 55 мкм. Калібрівка по інтенсивності (з використанням PowerMeter Rk-5720) показала, що оптична інтенсивність змінюється від 30 до 700 мкВт при зміні струму через діод від 30 до 300 мА.

По-друге, особлива увага була приділена точності вимірювання температури досліджуваних сонячних елементів (DUT, device under testing) – див. рис.2.3. Елемент розміщувався в термостаті, температура якого регулювалася за допомогою елементів Пельт'є, контролюваного джерела живлення та програмно реалізованого пропорційно-інтегрально-

диференціального (ПІД) контролера. Для контролю температури використовувалися цифрові датчики STS-21 та HTU21D, які розміщувалися безпосередньо на поверхні КСЕ. Система дозволяла підтримувати необхідну температуру зразка з точністю до 0,05 К.

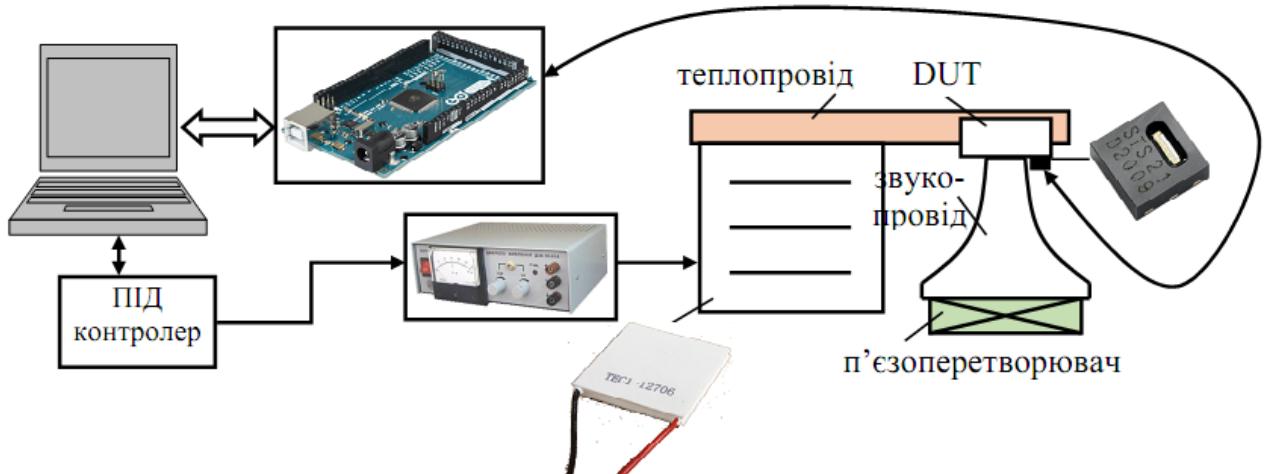


Рисунок 2.3 – Схема контролю та вимірювання температури КСЕ

Одним із основних завдань проекту було досліджені перебудови дефектних комплексів, пов’язаних із залізом, в КСЕ за умов поширення ультразвуку (УЗ). Загальна схема ультразвукового навантаження (УЗН) представлена на рис.2.4. Для збудження у досліджуваних структурах повздовжніх хвиль використовувалися п’єзоелектричні перетворювачі, виготовлені з пластин ніобату літію ( $\text{LiNbO}_3$ , зріз  $\text{Y}+36^\circ$ ) або п’єзокераміки ЦТС19. Обидві грані пластин були металізовані шляхом вакуумного напилення алюмінію. Проводилося збудження пружних коливань на частотах  $f_{\text{US}}$ , які відповідають власним товщинним коливанням (перша та третя гармоніки).

Відомо, що акустичні коливання п’єзоелектричних матеріалів супроводжуються значими електричними полями, які, проникаючи в КСЕ, здатні як суттєво впливати на стан дефектів, так і спотворювати результати вимірювання ВАХ. З метою перешкоджання подібним явищам проводилося

екранування п'єзоелектричних полів за рахунок розташування між п'єзоперетворювачем та КСЕ заземленого екрану, у ролі якого виступала тонка мідна фольга (1 на рис.2.4). Для створення акустичного контакту використовувалися клей БФ6 (між перетворювачем та фольгою) та вакуумне масло (між фольгою та сонячним елементом).

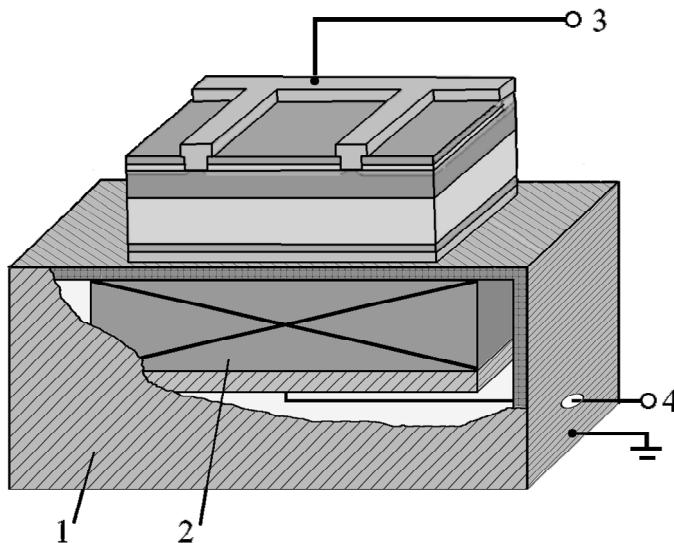


Рисунок 2.4 – Схема УЗН кремнієвих сонячних елементів.

1 – екран; 2 – п'єзоелектричний перетворювач; 3 – контакти для вимірювання ВАХ; 4 – контакти для збудження УЗ

Для оцінки інтенсивності акустичної хвилі (АХ)  $W_{\text{US}}$ , введеної у напівпровідникову структуру, використовувалася формула плоского п'єзо перетворювача [10]:

$$W_{\text{US}} = 4K_p^2 C_p f_r \frac{\rho_p \vartheta_p}{\rho_{\text{Si}} \vartheta_{\text{Si}}} \frac{V_{\text{RF}}^2}{A_p M_0}, \quad (2.1)$$

де

$K_p$  – коефіцієнт електромеханічного зв'язку, для ніобат-літієвих перетворювачів - 0,24, для п'єзокерамічного – 0,40;

$C_p$  – статична ємність закріпленого перетворювача,  $\Phi$ ;

$f_r$  – частота резонансу перетворювача, Гц;

$\rho_p$  – густина матеріалу п'єзоперетворювача,  $4700 \text{ кг}/\text{м}^3$  ( $\text{LiNbO}_3$ ),  $7500 \text{ кг}/\text{м}^3$

(ЦТС19);

$\rho_{\text{Si}}$  – густина кремнію, 2328 кг/м<sup>3</sup>;

$v_p$  – швидкість звуку в п'єзоперетворювачі, 7340 м/с ( $\text{LiNbO}_3$ ), 4560 м/с (ЦТС19);

$v_{\text{Si}}$  – швидкість звуку в КСЕ, враховуючи (100) орієнтацію пластин 8430 м/с;

$V_{\text{RF}}$  – амплітуда високочастотної напруги, прикладеної до перетворювача, В;

$A_p$  – площа перетворювача, м<sup>2</sup>;

а коефіцієнт  $M_0$  розраховується за допомогою спiввiдношення

$$M_0 = \frac{\left[ \cos\left(\pi \frac{f_{\text{US}}}{f_r}\right) \right]^2 + \left[ \frac{\rho_p \vartheta_p}{\rho_{\text{Si}} \vartheta_{\text{Si}}} \sin\left(\pi \frac{f_{\text{US}}}{f_r}\right) \right]^2}{\left[ \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{f_{\text{US}}}{f_r}\right) \right]^4}. \quad (2.2)$$

Параметри використаних перетворювачів зведені у таблиці 2.1.

Таблиця 2.1 – Параметри п'єзоелектричних перетворювачів

Перетво рювач	Матеріал	$f_r$ , МГц	$f_{\text{US}}$ , МГц	$C_p$ , пФ	$A_p$ , мм <sup>2</sup>
L2d4	ЦТС19	2,23	2,39	6250	314
L4d1	$\text{LiNbO}_3$	4,02	4,09	135	178
		13,41	13,60		
L5d4	$\text{LiNbO}_3$	5,33	5,40	288	283
		18,90	17,87		
L9d0	$\text{LiNbO}_3$	8,53	8,98	378	225
		30,42	30,74		

## 2.2 Методика екстрагування параметрів дефектів, пов'язаних із залізом

В роботі проводилося визначення параметрів дефектів в КСЕ на основі

аналізу кінетики струму короткого замикання ( $I_{SC}$ ) після інтенсивного освітлення структури. Типовий вигляд відповідної залежності представлено на рис.2.5. Особливостями світло індукованих змін  $I_{SC}$  є їхня оборотність при достатньо невисоких температурах (величина повністю відновлюється після зберігання при температурі близько 70°C протягом 50 хв.), а також зменшення величини СКЗ внаслідок опромінення. В експериментах визначення СКЗ відбувалося при використанні монохроматичного освітлення з довжиною хвилі  $\lambda=940$  нм, при цьому фотогенерований струм переважно зумовлюється утворенням електронно–діркових пар у  $p$ -області (базі) КСЕ. Якщо база КСЕ перевищує у декілька разів довжину дифузії неосновних носіїв заряду  $L_n$ , то величина СКЗ може бути записана у наступному вигляді [11,12]:

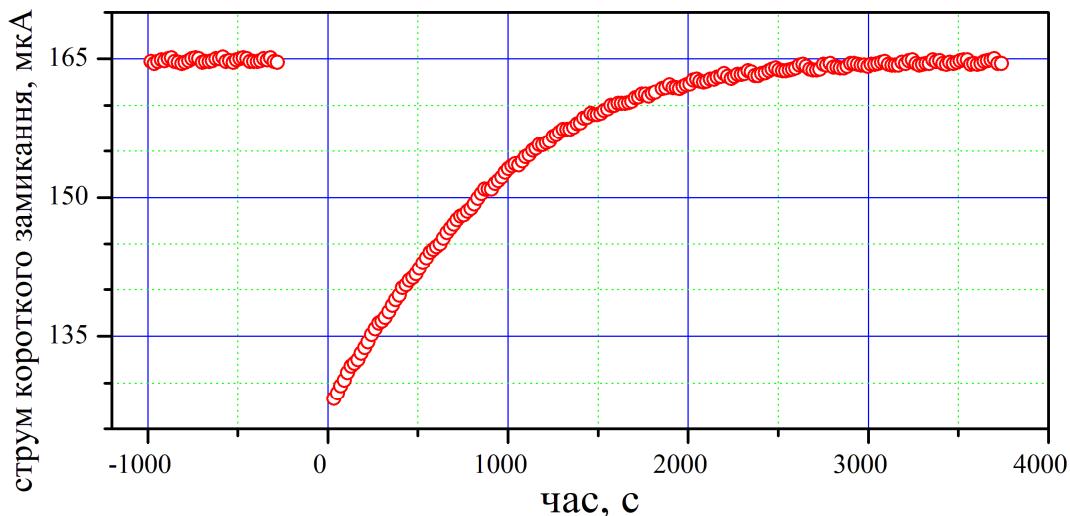


Рисунок 2.5 – Залежність струму короткого замикання до та після інтенсивного освітлення (момент початку освітлення позначено стрілкою). Початок відліку збігається з моментом закінчення освітлення. Температура 340 К

$$I_{SC} = \frac{W_{ph} (1 - R_{ph}) q \beta \lambda}{hc} \frac{\alpha_{ph} L_n}{1 + \alpha_{ph} L_n}, \quad (2.3)$$

де

$\alpha_{ph} = \alpha_{ph} (T, \lambda)$  - коефіцієнт поглинання світла,  $\text{м}^{-1}$ ;

$W_{ph}$  – світлова потужність, Вт;

$R_{ph}$  – коефіцієнт відбиття;

$\beta$  – коефіцієнт квантового виходу.

Як показали вимірювання  $L_n$  по спектральній залежності внутрішнього квантового виходу, в нашому випадку ця величина становить від 35 до 150 мкм (залежно від зразка) і тому використання виразу (2.3) є цілком віправданим. В свою чергу

$$L_n = \sqrt{\frac{\mu_n kT}{q}} \tau, \quad (2.4)$$

де

$\mu_n$  – рухливість електронів,  $\text{m}^2/(\text{B}\cdot\text{c})$ ;

$\tau$  – час життя неосновних носіїв заряду, с. В нашому випадку виконується умова  $a_{ph} L_n \sim 1$ , тому зменшення СКЗ свідчить про світло-індуковане зменшення величини  $\tau$ .

В свою чергу, для Cz-Si:В час життя неосновних носіїв суттєво залежить від наявності таких дефектів, комплекси, що містять бор та кисень (ВО-дефекти), пар залізо-бор та кисневмісних преципітатів. Перші два типи дефектів можуть змінювати свій стан під дією інтенсивного освітлення і тому першочерговою задачею було визначити причини спостережуваних ефектів.

Перебудова ВО-дефектів в умовах освітлення викликає зменшення часу життя, що збігається з виявленою зміною СКЗ. Проте світло-індуковані зміни є залишковими при температурах поблизу кімнатних: для відновлення початкових значень  $\tau$  необхідним є відпал при температурах не нижче  $200^\circ\text{C}$  [13], що суперечить отриманим даним – див. рис.2.5.

При освітленні також може відбуватися розпад пар FeB, причому зміни часу життя пов'язані з суттєвими різницями енергетичних положень рівнів та поперечних перерізів захоплення електронів  $\sigma_n$  та дірок  $\sigma_p$  міжвузольним залізом та парою – див. таблицю 2.2. Як показано в літературі [14], розпад пар може викликати як зменшення, так і зростання  $\tau$ : це залежить від концентрації нерівноважних носіїв заряду, і коли це величина не перевищує певне критичне

значення  $\Delta n_{cr}$ , спостерігається зменшення часу життя. В свою чергу,  $\Delta n_{cr}$  залежить від рівня легування і для КДБ10 має становити величину близько  $2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ .

Таблиця 2.2 – Параметри дефектів, використані у розрахунках [15]

Параметр	Дефект	
	Fe <sub>i</sub>	FeB
$E_{tr}$ , eВ	$E_V + 0,394$	$E_C - 0,26$
$\sigma_n$ , м <sup>2</sup>	$3,47 \cdot 10^{-15} T^{-1,48}$	$5,1 \cdot 10^{-13} T^{-2,5}$
$\sigma_p$ , м <sup>2</sup>	$4,54 \cdot 10^{-20} \exp\left(-\frac{0,05}{kT}\right)$	$3,32 \cdot 10^{-14} \exp\left(-\frac{0,262}{kT}\right)$

Концентрацію нерівноважних носіїв заряду  $\Delta n$  можна оцінити за величиною напруги холостого ходу [16]:

$$\Delta n = -\frac{n_0}{2} + \sqrt{\frac{n_0^2}{4} + n_i \exp\left(\frac{qV_{OC}}{kT}\right)}, \quad (2.5)$$

де

$n_0$  – рівноважна концентрація неосновних носіїв в базі КСЕ, м<sup>-3</sup>;

$n_i$  – концентрація носіїв заряду у власному напівпровіднику, м<sup>-3</sup>;

$V_{OC}$  – напруга холостого ходу, В. Використовуючи формулу (2.5) були проведені розрахунки очікуваної концентрації надлишкових носіїв при різних значеннях температури та  $V_{OC}$ , результати яких приведені на рис.2.6. При розрахунках для оцінки  $n_0$  використовувалося співвідношення:

$$n_0 = n_i^2 / p_0, \quad (2.6)$$

де

$p_0$  – концентрація дірок, м<sup>-3</sup>; при цьому вважалося, що реалізується режим виснаження легуючої домішки, тобто  $p_0$  збігається з концентрацією бору  $N_B$ .

Крім того, для опису температурної залежності  $n_i$  було використано вираз з роботи [17]:

$$n_i(T) = 1,541 \cdot 10^{21} T^{1,712} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right), \quad (2.7)$$

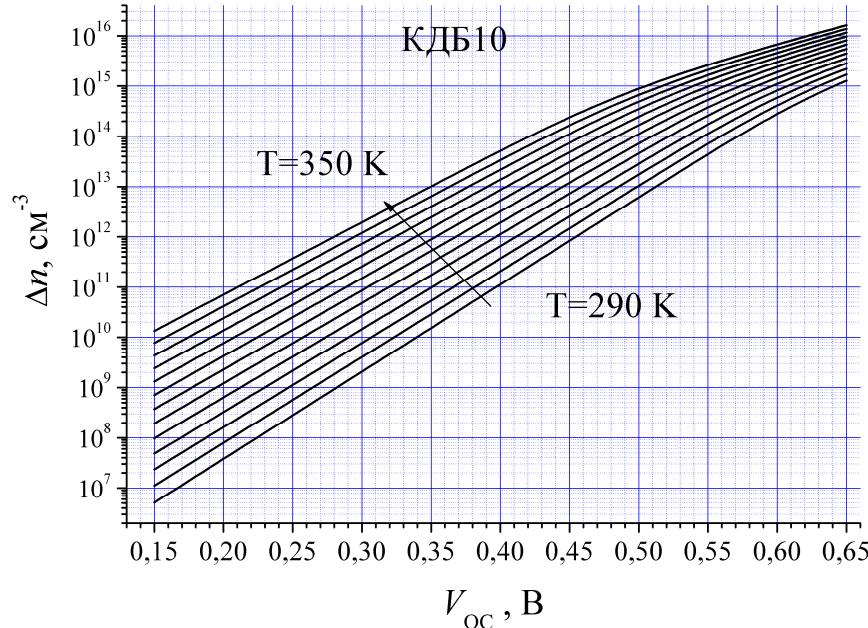


Рисунок 2.6 – Залежності концентрації нерівноважних носіїв заряду в режимі холостого ходу при різних температурах для діркового кремнію з концентрацією носіїв  $1,36 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$

де

$E_g$  – ширина забороненої зони кремнію, яка, в свою чергу, розрахувалася використовуючи формулу Паслера [18]

$$E_g(T) = E(0) - \alpha \theta \left\{ \frac{(1 - 3\Delta^2)}{\exp(\theta/T) - 1} + \frac{3\Delta^2}{2} \left( \sqrt[6]{1 + \frac{\pi^2}{3(1 + \Delta^2)} \left( \frac{2T}{\theta} \right)^2} + \frac{3\Delta^2 - 1}{4} \left( \frac{2T}{\theta} \right)^3 + \frac{8}{3} \left( \frac{2T}{\theta} \right)^4 + \left( \frac{2T}{\theta} \right)^6 - 1 \right) \right\}, \quad (2.8)$$

де

$$E(0) = 1,1701 \text{ eV}, \alpha = 3,23 \cdot 10^{-4} \text{ eV/K}, \Theta = 446 \text{ K}, \Delta = 0,51.$$

В наших дослідженнях напруга холостого ходу не перевищувала 0,42 В

при 300 К та 0,26 В при 340 К, а отже  $\Delta n < 10^{12} \text{ см}^{-3} < \Delta n_{cr}$ . Таким чином, відповідно до даних на рис.2.6, можна очікувати зменшення часу життя неосновних носіїв внаслідок розпаду пар залізо-бор, що відповідає виявленій тенденції зміни СКЗ.

У припущені, що суттєву роль в рекомбінації відіграють саме дефекти, пов'язані із залізом, для оцінки  $\tau$  відповідно до правила Маттісона може бути використаний наступний вираз:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{BtB}} + \frac{1}{\tau_{Auger}} + \frac{1}{\tau_{Fei}} + \frac{1}{\tau_{FeB}} + \frac{1}{\tau_{rest}}, \quad (2.9)$$

де перші два доданки пов'язані з власною рекомбінацією, зокрема

$\tau_{BtB}$  – час життя, пов'язаний з випромінюваною міжзонною рекомбінацією

$$\tau_{BtB} = \frac{1}{B(N_A + n_0 + \Delta n)}, \quad (2.10)$$

де

$B$  – міжзонний рекомбінаційний коефіцієнт, який в нашому випадку обчислювався шляхом апроксимації табличних даних роботи [19] для діапазону 90-363 К за допомогою поліному 5-го ступеня;

$\tau_{Auger}$  – час життя, пов'язаний з Оже-процесами:

$$\tau_{Auger} = \frac{1}{C_p N_B^2}, \quad (2.11)$$

а рекомбінаційний коефіцієнт описується виразом [20]:

$$C_p(T) = (7,91 \cdot 10^{-44} - 4,13 \cdot 10^{-47} T + 3,59 \cdot 10^{-49} T^2) \times \\ \times \left( 1 + \left( 564812 \cdot T^{-1,6545} - 1 \right) \left( 1 - \tanh \left[ \left\{ \frac{p_0}{5 \cdot 10^{22}} \right\}^{0,29} \right] \right) \right); \quad (2.12)$$

$\tau_{Fei}$  та  $\tau_{FeB}$  пов'язані з рекомбінацією на міжвузольних атомах заліза Fe<sub>i</sub> та на парах FeB, відповідно, с,

$\tau_{rest}$  описує решту рекомбінаційних каналів, включно з поверхневою рекомбінацією.

Для обчислення  $\tau_{Fei}$  та  $\tau_{FeB}$  може бути використана ШРХ модель:

$$\tau_{SRH} = \frac{\tau_{p0}(n_0 + n_1 + \Delta n) + \tau_{n0}(p_0 + p_1 + \Delta n)}{p_0 + n_0 + \Delta n}, \quad (2.13)$$

де

$n_1$  та  $p_1$  – концентрації електронів та дірок, відповідно, у випадку, коли рівень Фермі збігається з рівнем дефекту:

$$n_1 = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_{tr}}{kT}\right), \quad p_1 = N_V \exp\left(-\frac{E_{tr} - E_V}{kT}\right), \quad (2.14)$$

де

$E_{tr}$  – енергетичне положення рівня, пов’язаного з дефектом, еВ,

$E_C$  – енергетичне положення дна зони провідності, еВ,

$N_C$  - ефективна густина станів поблизу дна зони провідності, см<sup>-3</sup>.

Для розрахунку ефективних густин станів у кремнії можуть бути використані вирази [21]

$$N_C(T) = 4.83 \cdot 10^{21} \left( \frac{m_{dC}^*}{m_0} \right)^{1,5} T^{1,5}; \quad N_V(T) = 4.83 \cdot 10^{21} \left( \frac{m_{dV}^*}{m_0} \right)^{1,5} T^{1,5}, \quad (2.15)$$

$$\left( \frac{m_{dC}^*}{m_0} \right)^{1,5} = 1,094 - 1,312 \cdot 10^{-5} T + 6,753 \cdot 10^{-7} T^2 - 4,609 \cdot 10^{-10} T^3, \quad (2.16)$$

$$\left( \frac{m_{dV}^*}{m_0} \right)^{1,5} = 0,3426 + 3,376 \cdot 10^{-3} T - 4,689 \cdot 10^{-6} T^2 + 2,525 \cdot 10^{-9} T^3, \quad (2.17)$$

де

$m_{dC}^*$  та  $m_{dV}^*$  - ефективні маси густин станів, кг,

$m_0$  – маса вільного електрону, кг;

$$\tau_{n0} = \frac{1}{N_{tr} \sigma_n v_{th,n}}, \quad \tau_{p0} = \frac{1}{N_{tr} \sigma_p v_{th,p}}, \quad (2.18)$$

де

$N_{tr}$  – концентрація дефектів (міжузольних атомів заліза при розрахунку  $\tau_{Fei}$  та

пар залізо-бор при обчисленні  $\tau_{FeB}$ ),  $\text{м}^{-3}$ ,

$v_{th,n}$  та  $v_{th,p}$  - теплові швидкості електронів та дірок, відповідно, м/с.

Відомо, що після розпаду пар часова залежність концентрації міжвузольних атомів заліза описується виразом [22]:

$$N_{\text{Fe}}(t) = (N_{\text{Fe},0} - N_{\text{Fe,eq}}) \exp(-t/\tau_{ass}) + N_{\text{Fe,eq}}, \quad (2.19)$$

де

$N_{\text{Fe},0}$  – концентрація міжвузольних атомів зразу після інтенсивного освітлення,  $\text{м}^{-3}$ ,

$N_{\text{Fe,eq}}$  – та частина міжвузольних атомів заліза з  $N_{\text{Fe},0}$ , які залишаться неспареними в рівноважному стані (після тривалого перебування у темряві):

$$N_{\text{Fe,eq}} = \frac{N_{\text{Fe},0}}{\left[1 + N_B 10^{-23} \exp\left(\frac{0,582}{kT}\right)\right] \left[1 + \exp\left(\frac{E_F - 0,394}{kT}\right)\right]}, \quad (2.20)$$

$\tau_{ass}$  – характерний час асоціації комплексу, який залежить від концентрації бору та температури, зокрема, у [23] для його оцінки запропоновано вираз

$$\tau_{ass} = \frac{5,7 \cdot 10^5}{N_B} T \exp\left(\frac{E_m}{kT}\right), \quad (2.21)$$

де

$E_m$  – енергія міграції міжвузольних атомів заліза, еВ.

В свою чергу, часова залежність концентрації пар залізо-бор  $N_{\text{FeB}}$ , утворених внаслідок асоціації частини з  $N_{\text{Fe},0}$  має описуватися виразом

$$N_{\text{FeB}}(t) = N_{\text{Fe},0} - N_{\text{Fe}}(t). \quad (2.22)$$

Відомо, ступінь дисоціації пар залежить від часу освітлення. У випадку, коли цей час достатній для дисоціації всіх наявних пар величина де  $N_{\text{Fe},0}$  має відповідати повній концентрації атомів домішкового заліза, в протилежному випадку має бути меншою.

Була проведена апроксимація відповідно до комплексу наведених вище формул експериментально вимірюваних залежностей струму короткого

замикання. При цьому вважалося, що  $\beta = 1$ ,  $R_{ph} = 0$ ,  $\Delta n = 0$ , що відповідає режиму короткого замикання [16]. Розрахунок  $\alpha_{ph}(T,\lambda)$  проводився відповідно до [24], теплові швидкості носіїв обчислювалися за даними роботи [25], а рухливість електронів - за теорією Классена [26]. Апроксимація проводилася з використанням метаевристичного методу EBL SHADE [27], шуканими параметрами вважалися величини  $W_{ph}$ ,  $\tau_{rest}$ ,  $N_{Fe,0}$  та  $E_m$ . Приклади результатів вимірювань та апроксимації при двох температурах наведені на рис.2.7.

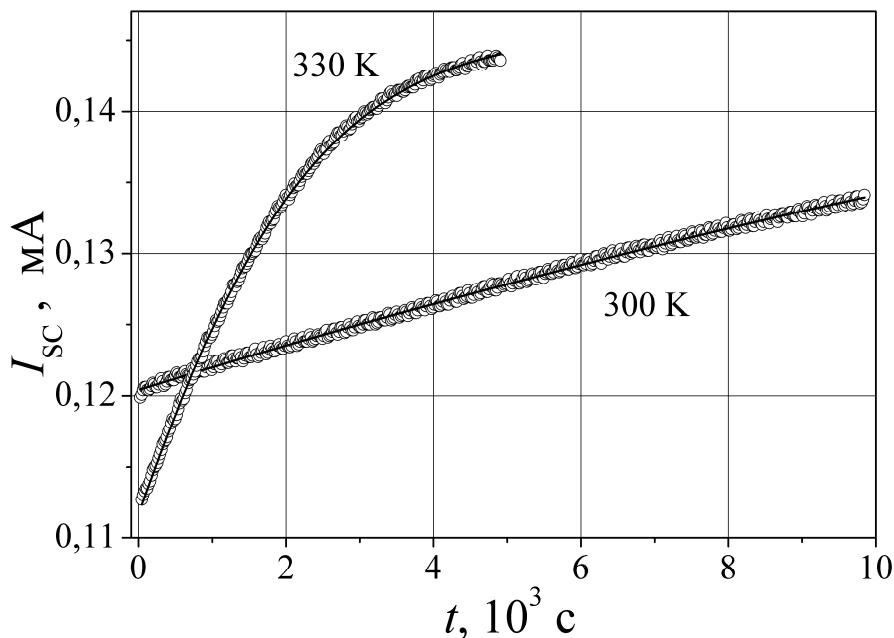


Рисунок 2.7 – Кінетика струму короткого замикання КСЕ після інтенсивного освітлення при різних температурах. Точки – експеримент, лінії – апроксимація

Визначені шляхом апроксимації величини параметрів склали наступні значення.  $W_{ph} = (3,2 \pm 0,3) \cdot 10^{-4}$  Вт. Ця величина досить добре співпадає зі значенням  $3,1 \cdot 10^{-4}$  Вт, отриманим під час калібрування джерела (див. підрозділ 2.1). У випадку, коли час інтенсивного освітлення перевищує 20 с,  $\tau_{rest} > 100$  с, що свідчить про те, що внесок інших рекомбінаційних каналів у досліджених зразках може бути знехтуваний. При менших значеннях часу освітлення  $\tau_{rest} < 2 \cdot 10^{-5}$  с і залежить від тривалості; тобто має місце неповне розбиття пар.  $N_{Fe,0} = (2,0 \pm 0,4) \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup>, що, з одного боку, є достатньо типовою

величиною для сонячного кремнію, а з другого – є близьким до значень, отриманих за допомогою методу дослідження спектральної залежності внутрішньої квантової ефективності ( $0,9 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ) на зразках тієї самої серії. Нарешті, отримане значення енергії міграції атомів заліза склало  $E_m = (0,655 \pm 0,002) \text{ eV}$ . Ця величина збігається з відомим в літературі [23,28] значенням ( $0,66 \pm 0,01$ ) eV. Цей збіг є додатковим підтвердженням того, що саме зміна стану домішкового заліза спричинює зміни параметрів в досліджених КСЕ.

Таким чином, оборотність та знак світлоіндукованих змін СКЗ, а також збіг визначеного значення енергії міграції атомів заліза з літературними даними свідчать на користь того, що виявлені зміни величини  $I_{SC}$  після інтенсивного освітлення пов’язані саме з розпадом пар залізо-бор. З іншого боку, запропоновано методику, що базується на вимірюванні кінетики струму короткого замикання та її подальшої апроксимації, яка дозволяє оцінити а) значення енергії міграції атомів заліза; б) концентрацію пар FeB, що дисоціювали внаслідок освітлення.

### 2.3 Вплив світло-індукованого розпаду пар FeB на параметри вольт-амперних характеристик кремнієвих сонячних елементів

В роботі проводилися вимірювання темнових ВАХ та ВАХ при монохроматичному освітленні (940 нм) і стандартних умовах енергетичної освітленості AM1,5 ( $100 \text{ мВт/см}^2$ ) кремнієвих сонячних елементів до та після високоінтенсивного освітлення (тривалість від 1 до 300 с) при температурах 290÷340 К. Типові ВАХ, отримані як у темряві, так і при монохроматичному освітленні при різних температурах представлені на рис.2.8.

Для апроксимації темнових ВАХ використовувалося дводіодна модель, що описується виразом (1.1). При використаних інтенсивностях монохроматичного освітлення величина фотогенерованого струму  $I_{ph}$  складала

близько 150 мкА, що суттєво перевищує верхню межу струмів ( $\sim 10^{-4}$  А, див. рис.2.8), при якій внесок другого доданку у виразі (1.1) є суттєвим. Як наслідок, більш доречним є апроксимація світлових ВАХ в рамках однодіодної моделі

$$I = -I_{ph} + I_0 \left[ \exp\left(\frac{q(V - IR_s)}{nkT}\right) - 1 \right] + \frac{(V - IR_s)}{R_{SH}}. \quad (2.23)$$

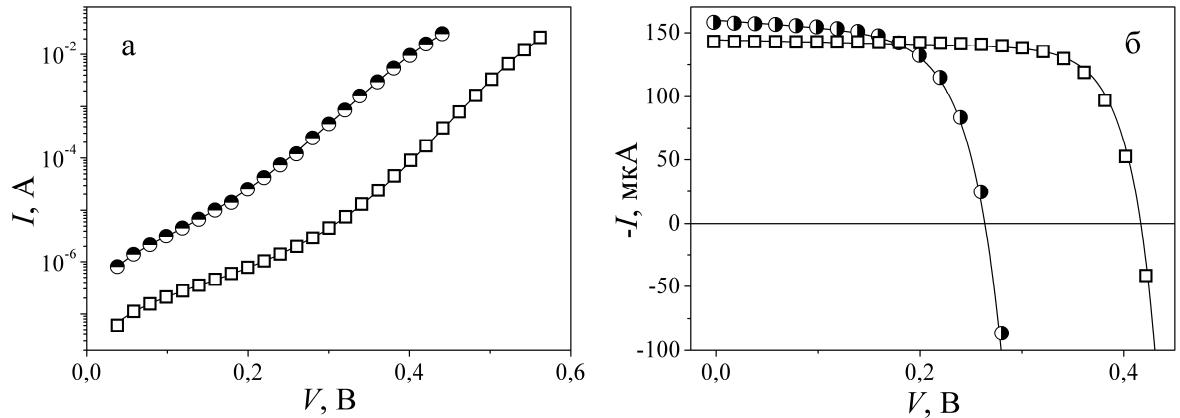


Рисунок 2.8 – Темнові (а) та світлові (б) ВАХ сонячного елемента, виміряні при температурах 290К (квадрати) та 340 К (коло). Точки – експеримент, лінії – апроксимація відповідно до формул (1.1) (а) та (2.23) (б). Зразок #350\_1

При апроксимації використовувався метод EBL SHADE [27]. Крім того, з освітлених ВАХ визначалися  $I_{SC}$ ,  $V_{OC}$ , максимальна вихідна потужність ( $P_m$ ) та фактор заповнення ( $FF = P_m / (I_{SC} V_{OC})$ ). При цьому застосувався підхід, запропонований в роботі [29], який базується на нелінійній апроксимації різних ділянок ВАХ. При використанні стандартних умов енергетичної освітленості AM1,5 також розраховувався коефіцієнт корисної дії КСЕ  $\eta$ .

На рис.2.9 та 2.10 представлено типові кінетичні залежності змін параметрів КСЕ після інтенсивного освітлені, екстрагованих як з темнових ВАХ, так і ВАХ, отриманих при монохроматичному освітленні при різних температурах. Показниками того, що розпад пар FeВ впливає на певний параметр є а) зміни величини параметру після інтенсивного освітлення та

відновлення його величини при збереженні у темряві; б) схожість кінетичних залежностей зміни параметру із залежностями, зареєстрованими для  $I_{SC}$ .

З наведених даних видно, що розпад пар викликає зменшення всіх чотирьох параметрів, що характеризують фотоелектричне перетворення ( $I_{SC}$ ,  $V_{OC}$ ,  $P_m$  та  $FF$ ). Величина зміни суттєво залежить від самого параметру, температури та концентрації заліза у конкретному зразку. Ці залежності проаналізовано нижче.

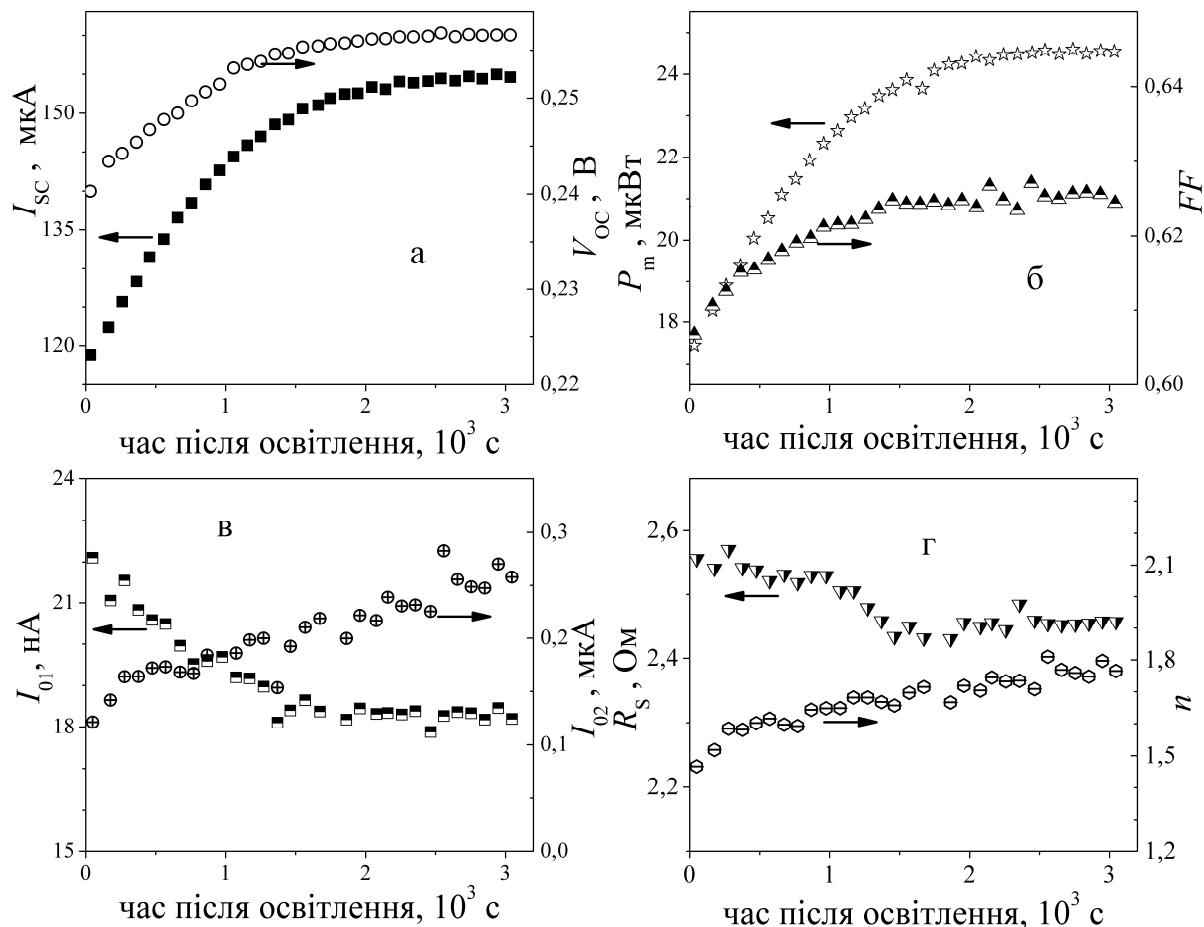


Рисунок 2.9 – Кінетика зміни струму короткого замикання, напруги холостого ходу (а), максимальної вихідної потужності, коефіцієнта форми (б), струмів насиження, пов’язаних з процесами рекомбінації у квазі-нейтральній області та в ОПЗ (в), фактору неідеальності та послідовного опору (г). Зразок #350\_1.  $T = 340$  К

Щодо характеристик КСЕ, отриманих з темнових ВАХ, то тут ситуція

складніша. З впевненістю можна сказати, що розпад пар FeB спричинює зростання струму насищення, пов'язаного з рекомбінаційними процесами в ОПЗ ( $I_{01}$ , див. рис.2.9в та 2.10в). Це є цілком очікуваним, так як в підрозділі 2.2 показано, що для досліджуваних зразків впливом інших рекомбінаційних каналів, крім тих, що пов'язані з домішковим залізом, можна знехтувати ( $\tau_{rest} > 100$ ). Розпад пар викликає підсилення рекомбінаційних процесів завдяки більшим коефіцієнтам захоплення електронів міжвузольним залізом порівняно з парою FeB, а отже і до збільшення  $I_{01}$ .

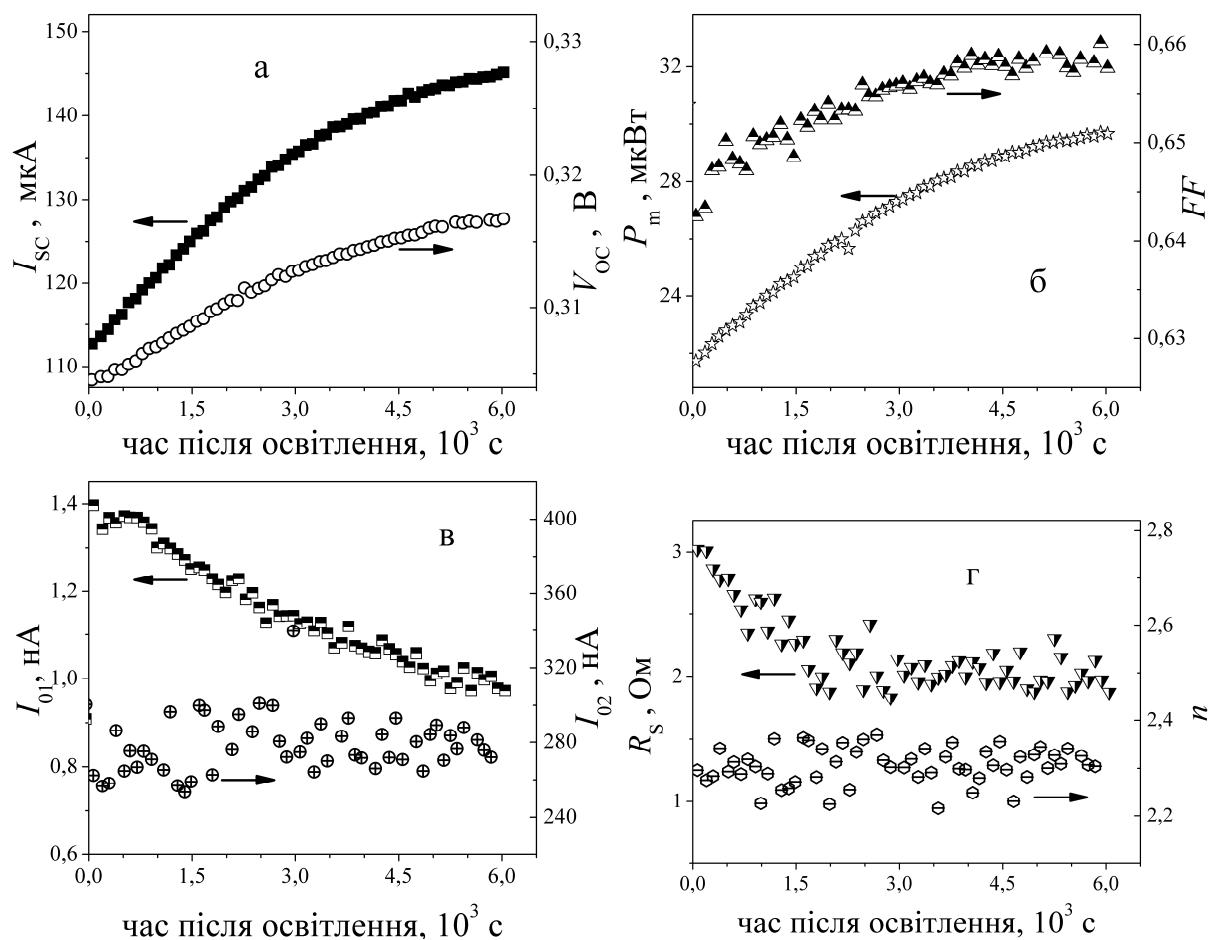


Рисунок 2.10 – Кінетика зміни струму короткого замикання, напруги холостого ходу (а), максимальної вихідної потужності, коефіцієнта форми (б), струмів насищення, пов'язаних з процесами рекомбінації у квазі-нейтральній області та в ОПЗ (в), фактору неідеальності та послідовного опору (г). Зразок #350\_1.  $T = 320$  К

Параметри, пов'язані з процесами в ОПЗ ( $I_{02}$  та фактор неідеальності) після розпаду пар зменшуються – див. рис. 2.9в та 2.9г. Проте їхні зміни достатньо невеликі і зменшуються при зменшенні температури: так при 340 К ці зміни несуттєво переважають точність вимірювань (рис. 2.9в та 2.9г), а при  $T \leq 320$  К фактично не спостерігаються (рис. 2.10в та 2.10г, для менших температур графіки не наведені). Крім того, вищеозначені світлоіндуковані зміни  $I_{02}$  та  $n$  спостерігаються лише у зразках з високою концентрацією заліза ( $N_{Fe} > 3 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ). Все це свідчить про те, що в ОПЗ суттєвим є внесок інших рекомбінаційних каналів. Цікаво, що в підрозділі 1.1 показано, що розпад пар може викликати саме зменшення коефіцієнта неідеальності в КСЕ (внаслідок перерозподілу в ОПЗ додатно заряджених іонів заліза), причому ефект має збільшуватися з підвищеннем концентрації заліза у структурах з  $N_B > 10^{15} \text{ см}^{-3}$ .

Також виявлено, що після освітлення спостерігається збільшення величини послідовного опору – див. 2.9г та 2.10г. Проте час відновлення цієї величини в темряві не залежить від температури і складає значення близько 1500 с. А отже, зміну  $R_S$  не можна пов'язати зі зміною стану міжузольного заліза. Щодо шунтуочного опору, то змін його величини після інтенсивного освітлення не виявлено.

Для визначення кількісних характеристик кінетики зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар FeB експериментально виміряні та представлені рис. 2.9 та 2.10 криві були апроксимовані експоненційною залежністю. Характерні часи зміни кожного з параметрів представлена в таблиці 2.3. Також у таблиці наведено характерний час асоціації комплексу FeB  $\tau_{ass}$ , отриманий за методикою, описанаю в попередньому підрозділі, за кінетикою струму короткого замикання та очікувана величина цього часу  $\tau_{ass,teor}$ , розрахована за формулою (2.21) для  $E_m = 0,650$  еВ. Видно, що загалом характерні часи відновлення параметрів фотоелектричного перетворення, як і  $I_{01}$ , слідують тенденції  $\tau_{ass,teor}$ , експоненційно зменшуючись при зростанні температури. Проте спостерігаються достатньо суттєві відмінності між

абсолютними значеннями характерних часів та часом асоціації. Це спостерігається навіть для струму короткого замикання, який найбільш однозначно пов'язаний з рекомбінаційними процесами на дефектах.

Таблиця 2.3 – Характерний час відновлення параметрів КСЕ після інтенсивного освітлення

Параметр	Характерний час,	
	с	340 К
$I_{SC}$	$900 \pm 30$	$3500 \pm 90$
$V_{OC}$	$820 \pm 50$	$4100 \pm 200$
$FF$	$500 \pm 300$	$2300 \pm 300$
$P_m$	$860 \pm 30$	$3700 \pm 100$
$I_{01}$	$800 \pm 90$	$5500 \pm 760$
$R_S$	$1100 \pm 300$	$980 \pm 100$
$\tau_{ass}$	$640 \pm 30$	$2230 \pm 100$
$\tau_{ass,teor}$	603	2267

З іншого боку, підхід, який ґрунтуються на врахуванні температурних залежностей параметрів КСЕ і не обмежується використанням однієї експоненти у апроксимуючій кривій, є достатньо продуктивним, про що свідчить збіг  $\tau_{ass}$  та  $\tau_{ass,teor}$ . Проте у випадку інших, окрім  $I_{SC}$ , параметрів КСЕ подібний підхід вимагає інформації про значну кількість характеристик, пов'язаних як з рекомбінаційними процесами не лише на дефектах, пов'язаних із залізом, так із альтернативними механізмами проходження струму (позабар'єрний рух, тунелювання тощо). Тому на практиці такий шлях є нереалізовним. Крім того, точне визначення кінетичних характеристик зміни ряду параметрів є утрудненим через їхню слабку залежність від стану міжвузольного заліза – насамперед це стосується коефіцієнта форми та напруги холостого ходу.

Таблиця 2.4 – Фотоелектричні параметри КСЕ до та після інтенсивного освітлення, отримані при монохроматичному освітленні

Зразок	$N_{Fe}$ , $10^{13} \text{ см}^{-3}$	$T$ , К	Освіт- лення	$I_{SC}$ , мкА	$V_{OC}$ , В	$FF$ , %	$P_m$ , мкВт	$I_{01}$ , нА
#350_1	3,3	340	без	154	0,256	62,6	24,8	18
			після	119	0,240	61,0	17,4	22
		320	без	147	0,319	65,9	30,8	1,04
			після	112	0,305	64,4	21,7	1,35
		300	без	144	0,381	71,7	39,3	0,053
			після	104	0,364	70,3	26,5	0,059
#320	0,2	340	без	155	0,258	64,2	25,8	
			після	148	0,255	64,0	24,2	
		320	без	149	0,318	69,5	33,0	
			після	137	0,316	69,3	30,1	
		300	без	143	0,375	73,5	40,3	
			після	127	0,367	73,5	34,3	
#341_1	4,2	340	без	164	0,190	36,7	11,4	22
			після	128	0,167	34,0	7,2	28
		320	без	155	0,214	37,1	12,3	1,26
			після	117	0,185	36,4	7,9	1,62
		300	без	145	0,225	40,1	13,2	0,058
			після	108	0,196	40,5	8,5	0,071
#349_1	1,0	340	без	174	0,265	64,3	29,5	24
			після	146	0,255	63,7	23,7	79
		320	без	165	0,324	69,6	36,8	0,332
			після	136	0,314	69,3	29,5	0,635
		300	без	157	0,384	73,9	44,7	0,013
			після	126	0,318	73,7	35,2	0,017

В таблиці 2.4 узагальнено кількісні характеристики змін параметрів КСЕ після розпаду пар FeB при різних температурах. В таблиці також наведено значення концентрації заліза, отримані з релаксації  $I_{SC}$  за умов повного розпаду пар. Зауважимо, що для різних параметрів спостерігається суттєва відмінність у величинах змін. Крім того, величини параметрів залежать від температури, тому в подальшому акцентуємо увагу на відносних змінах кожного з параметрів:

$$\varepsilon A = \Delta A / A_{FeB} \times 100\% = (A_{FeB} - A_{Fe}) / A_{FeB} \times 100\%, \quad (2.24)$$

де

$A$  – параметр КСЕ ( $I_{SC}$ ,  $V_{OC}$ ,  $P_m$ ,  $FF$ ,  $\eta$  чи  $I_{01}$ ),

індекс «FeB» відповідає значенню параметра у рівновазі, індекс «Fe» - зразу після освітлення.

На рис.2.11 наведено температурні залежності відносних змін  $I_{SC}$ ,  $V_{OC}$ ,  $P_m$ ,  $FF$ , та  $I_{01}$ . Так, розпад FeB викликає зменшення  $I_{SC}$  приблизно на (20-25)% при  $N_{Fe} \geq 10^{13} \text{ см}^{-3}$ , причому зі зростанням температури відгук зміни струму короткого замикання на розпад пар несуттєво зменшується.

Максимально чутливим до зміни стану дефектного комплексу є максимальна вихідна потужність (величина, пропорційна коефіцієнту корисної дії), причому  $\varepsilon P_m$  практично не залежить від температури в дослідженному діапазоні. Певні відхилення від цієї залежності спостерігаються для зразка #320, але в цьому випадку концентрація заліза є значно меншою.

Зменшення напруги холостого ходу та фактору форми внаслідок розпаду пар набагато менші. Так, наприклад, в більшості випадків  $\varepsilon V_{OC}$  не перевищує 10%. При розгляді  $V_{OC}$  необхідно взяти до уваги, що знехтувавши впливом послідовного та шунтуючого опорів, вираз для неї може бути записаний у вигляді

$$V_{OC} = \frac{n k T}{q} \ln \left( \frac{I_{SC}}{I_0} + 1 \right). \quad (2.25)$$

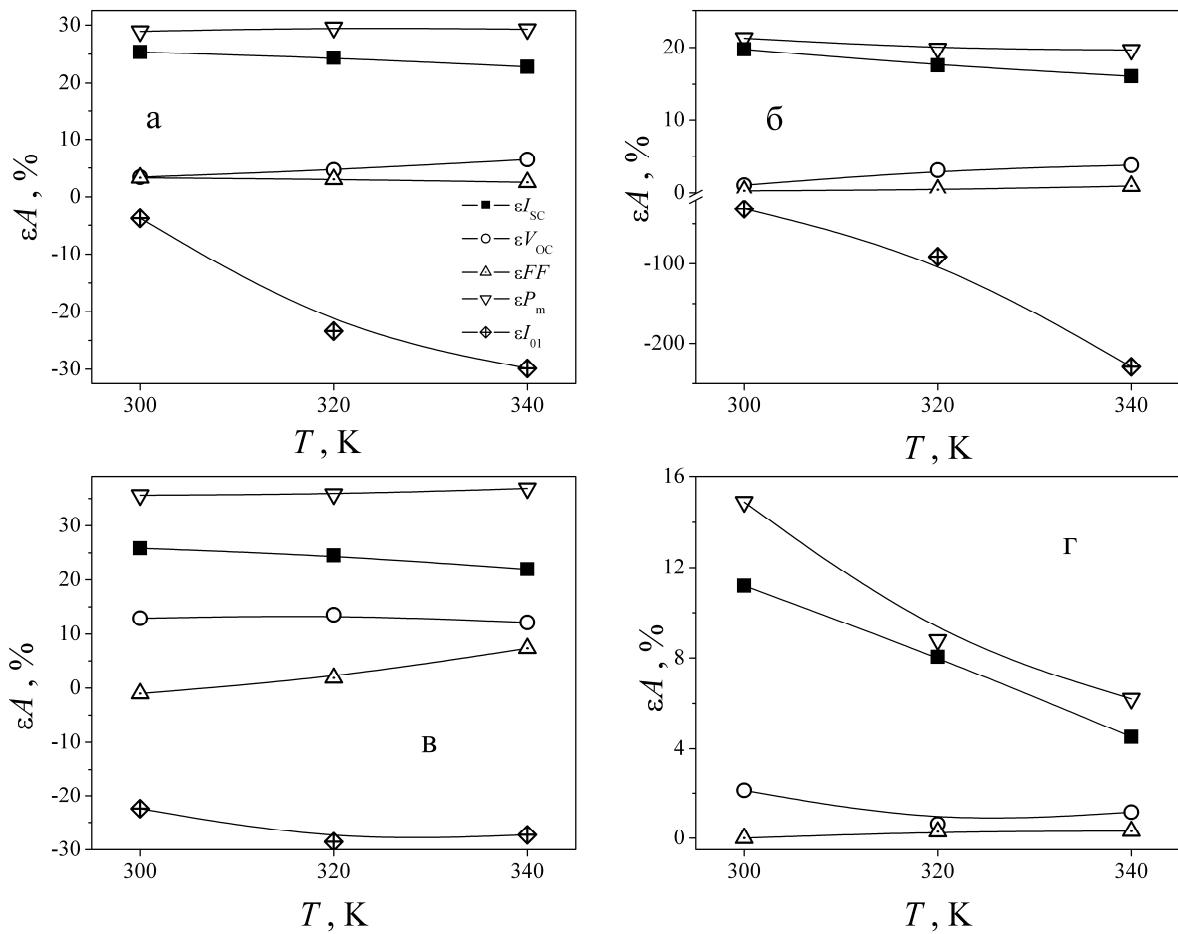


Рисунок 2.11 – Температурні залежності відносних змін параметрів КСЕ внаслідок розпаду пар FeB для зразків #350\_1 (а), #349\_1 (б), #341\_1 (в) та #320 (г). Фотоелектричні параметри отримані при монохроматичному освітленні

Тобто, якщо розпад пар безпосередньо спричинює зменшення довжини дифузії неосновних носіїв, а отже і  $I_{sc}$ , то для  $V_{oc}$  має місце логарифмічна залежність від струму короткого замикання, причому при зменшенні температури залежність послаблюється. Враховуючи, що в нашому випадку  $I_{sc}/I_0 \gg 1$  та нехтуючи зміною величини струму насищення внаслідок розпаду пар, для відносної зміни напруги холостого ходу можна наблизено записати:

$$\varepsilon V_{oc} \approx \frac{nkT}{V_{OC,FeB} I_{SC,FeB}} \varepsilon I_{sc}. \quad (2.26)$$

Таким чином, зменшення абсолютноного значення  $V_{oc}$  зі зростанням температури також є причиною зменшення чутливості даного параметру до

стану домішкової пари при охолодженні. Подібні міркування застосовні і до фактору форми ВАХ: як наслідок при кімнатних температурах зміни цього параметра після розпаду пар FeB мінімальні.

Зауважимо, що для зразка #341\_1 характерним є велике значення фактору неідеальності ( $\sim 4,2$  при 340 К, тоді як для інших зразків ця величина складає  $1,1 \div 1,7$ ) і мале - коефіцієнту форми (близько 0,4 порівняно з  $\sim 0,65$  для інших структур). На нашу думку, саме це і є причиною відмінностей абсолютнох значень  $\varepsilon V_{OC}$  та  $\varepsilon FF$  для #341\_1.

Відносні зміни фактично кожного з параметрів КСЕ зростають зі збільшенням концентрації заліза (не вдалося виявити монотонної залежності лише для  $\varepsilon I_{01}$ ). Достатньо цікавим є питання щодо можливості оцінки концентрації цієї домішки за величинами світлоіндукованих змін. Зауважимо, що з цієї точки зору найбільш перспективними виглядають струм короткого замикання та максимальна вихідна потужність. Щодо  $FF$ , то, на нашу думку, використання цього параметру утруднено через достатньо незначні величини світлоіндукованих змін. Зміни ж напруги холостого ходу, як це видно на прикладі зразка #341\_1, залежать не лише від кількості наявних пар FeB, але й від інших рекомбінаційних центрів, які визначають величину  $n$ .

На рис.2.12 представлена концентраційні залежності  $\varepsilon I_{SC}$  та  $\varepsilon P_m$ . Видно, що спостерігається лінійна залежність між  $\varepsilon I_{SC}$  та  $\lg N_{Fe}$ , що, загалом може дозволити використовувати величину світло індукованих змін струму короткого замикання для оцінки концентрації заліза в КСЕ. Зауважимо, що коефіцієнт пропорційності, як і величина зміщення, залежать від температури (рис.2.12а). Зміни максимальної вихідної потужності також пропорційні концентрації заліза – див. рис. 2.12б. Слабка температурна залежність  $\varepsilon P_m$  спрощує оцінку  $N_{Fe}$ , дозволяючи не зважати на цей параметр.

Як було зазначено, також проводилися визначення змін фотоелектричних параметрів КСЕ за умов використання імітатора сонячного випромінювання. Отримані результати узагальнено в таблиці 2.5, а на рис.2.13

представлено відносні зміни параметрів.

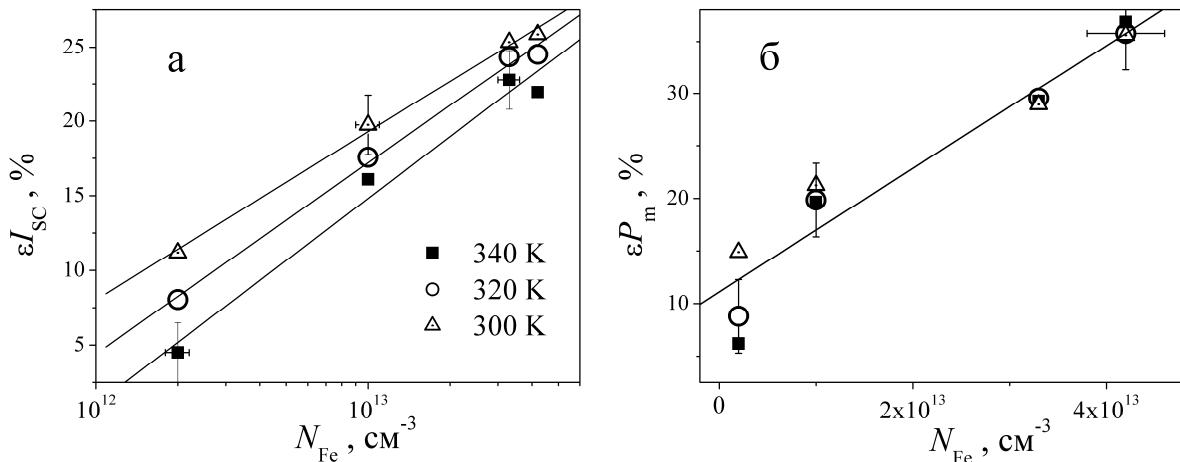


Рисунок 2.12 – Залежності відносних змін струму короткого замикання (а) та максимальної вихідної потужності (б) внаслідок розпаду пар FeB від концентрації заліза.  $I_{SC}$  та  $P_m$  отримані при монохроматичному освітленні. Точки – експеримент, прямі – лінійна апроксимація (для  $\varepsilon I_{SC}$  для кожної температури окремо, для  $\varepsilon P_m$  – всіх значень)

Як видно з наведених даних, результати, отримані при використанні білого освітлення, загалом, збігаються з тими, що були виявлені при застосуванні монохроматичного. А саме, найбільші відносні зміни в результаті розпаду пар FeB спостерігаються для ефективності перетворення та струму короткого замикання, тоді як  $\varepsilon V_{OC}$  та  $\varepsilon FF$  набагато менші. Водночас, абсолютні значення  $\varepsilon A$  за умов AM1,5 менші ніж при  $\lambda = 940$  нм. Це пов’язано з тим, що за умов стандартної освітленості більш значну роль у формуванні фотовідгуку відіграють процеси, не пов’язані з поширенням нерівноважних неосновних носіїв заряду в базі КСЕ.

З рис.2.13 видно, що значення  $\varepsilon A$  достатньо суттєво змінюються від зразка до зразка. Очевидно, що це визначається дефектним складом конкретного КСЕ. Нами були розраховані коефіцієнти кореляції  $R$  та детермінації  $R^2$  між  $\varepsilon A$  та абсолютною величинами фотоелектричних параметрів, а також між парами  $\varepsilon A$  – див. таблицю 2.6.

Таблиця 2.5 – Фотоелектричні параметри КСЕ до та після інтенсивного освітлення, отримані за стандартних умов енергетичної освітленості АМ1,5.  
 $T = 298 \text{ K}$

Зразок	$I_{SC}$ , мкА		$V_{OC}$ , В		$FF$ , %		$\eta$ , %	
	до	після	до	після	до	після	до	після
#293_3	43,776	42,523	0,541	0,537	76,104	75,880	4,26	4,03
#297_3	47,52	44,302	0,567	0,558	76,359	76,78	4,82	4,43
#313_3	43,966	40,643	0,545	0,537	77,033	75,598	4,39	3,82
#319_3	45,223	43,418	0,555	0,551	70,334	69,772	4,25	3,95
#325_3	47,466	42,014	0,563	0,555	78,356	77,192	4,96	4,36
#326_3	49,472	42,97	0,557	0,545	73,691	71,022	4,81	3,91
#329_3	50,081	48,064	0,556	0,554	75,127	74,905	5,05	4,72
#338_3	39,884	36,725	0,542	0,537	71,79	71,328	3,72	3,27
#341_3	47,254	40,304	0,563	0,553	78,587	76,957	5,08	3,99
#348_3	43,037	40,882	0,548	0,541	77,06	76,793	4,26	3,97
#350_3	52,407	44,506	0,578	0,572	70,726	69,945	5,06	4,2
#352_3	52,276	44,572	0,558	0,553	68,105	68,437	4,64	3,98

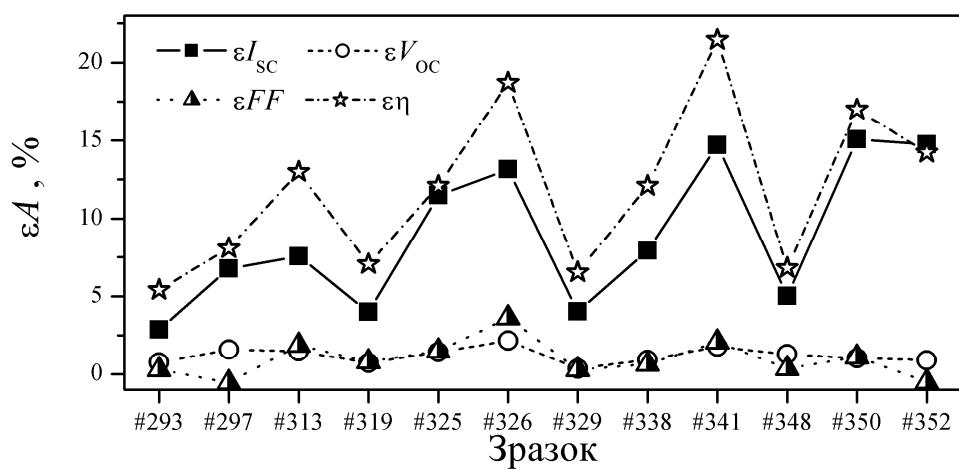


Рисунок 2.13 – Відносні зміни параметрів КСЕ, отриманих при освітленості AM1,5, внаслідок розпаду пар FeB.  $T = 298$  К. Точки – експеримент, лінії наведено для зручності

Таблиця 2.6 – Коефіцієнти кореляції та детермінації між відносними змінами фотоелектричних параметрів КСЕ та абсолютною значеннями параметрів і відносними змінами інших параметрів. Умови освітленості АМ1,5;  $T = 298$  К

Незалежна змінна	$\varepsilon I_{SC}$		$\varepsilon V_{OC}$		$\varepsilon FF$		$\varepsilon \eta$	
	$R$	$R^2$	$R$	$R^2$	$R$	$R^2$	$R$	$R^2$
$I_{SC}$	0,59	0,35	0,043	0,002	0,036	0,001	0,39	0,15
$V_{OC}$	0,61	0,38	0,23	0,055	0,052	0,003	0,44	0,19
$FF$	-0,21	0,45	0,41	0,17	0,25	0,061	-0,057	0,003
$\eta$	0,51	0,26	0,27	0,075	0,22	0,05	0,42	0,18
$\varepsilon I_{SC}$	1	1	0,51	0,26	0,41	0,16	0,91	0,83
$\varepsilon V_{OC}$	0,51	0,26	1	1	0,66	0,44	0,63	0,40
$\varepsilon FF$	0,40	0,16	0,66	0,44	1	1	0,66	0,43
$\varepsilon \eta$	0,91	0,83	0,63	0,4	0,66	0,43	1	1

Отримані результати свідчать, що певний взаємозв'язок існує лише між  $\varepsilon I_{SC}$  та  $\varepsilon \eta$ , тоді як навіть абсолютно значення струму короткого замикання та ефективності не можуть бути використані для передбачень змін параметрів внаслідок модифікації стану міжвузольного заліза. Раніше було вказано, що значення  $\varepsilon I_{SC}$  та  $\varepsilon \eta$  визначаються  $N_{Fe}$  і тому взаємозв'язок між цими величинами є цілком очікуваним. З іншого боку, отримані результати ще раз підтверджують, що жодна з величин  $\varepsilon V_{OC}$ ,  $\varepsilon FF$ ,  $I_{SC}$ ,  $V_{OC}$ ,  $FF$ ,  $\eta$  не може бути використана для оцінки концентрації заліза в КСЕ.

2.4 Закономірності змін параметрів КСЕ внаслідок світло-індукованої деградації та відновлення пар FeB в умовах ультразвукового навантаження при використанні повздовжніх хвиль

Одним із завдань проєкту є експериментальне дослідження впливу

наявності акустичних хвиль ультразвукового діапазону на зміни параметрів КСЕ внаслідок світло-індукованої деградації та кінетичні характеристики їхнього відновлення внаслідок асоціації пар Fe-B. На рис.2.14 приведено типові часові залежності відновлення параметрів за умов УЗН та без нього. Одним з найпомітніших результатів є зміна величин параметрів КСЕ за наявності пружних коливань. Подібний акустоіндукований (AI) ефект був досліджений раніше [30] і у даній роботі ми на ньому не зупиняємося, зосередивши увагу саме на процеси, пов'язані зі зміною стану міжвузольного заліза.

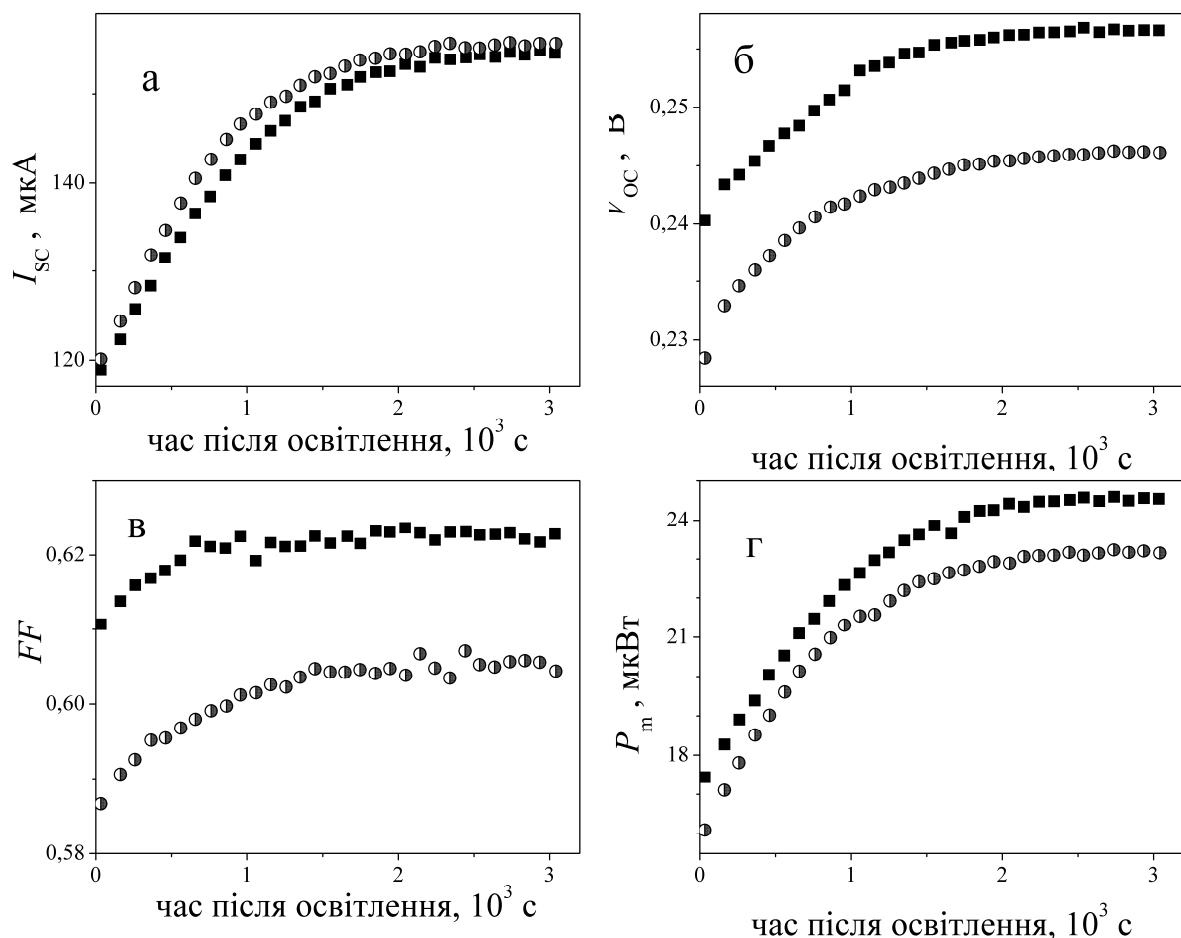


Рисунок 2.14 – Кінетика зміни струму короткого замикання (а), напруги холостого ходу (б), коефіцієнта форми (в) та максимальної вихідної потужності (г) при УЗН (напівзаповнені точки) та без нього (заповнені точки). Зразок #350\_1.  $f_{US} = 8,98$  МГц,  $W_{US} = 0,2$  Вт/см $^2$ ,  $T = 340$  К

У таблиці 2.7 представлено величини змін параметрів КСЕ внаслідок світло-індукованої деградації при УЗН та без нього при різних температурах. Видно, що ультразвукове навантаження не впливає на величини змін, особливості яких описано у попередньому підпункті. З іншого боку, поширення акустичних хвиль є причиною певного пришвидшення релаксаційних процесів – див. рис. 2.14. Саме результати дослідження кінетичних характеристик зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B в умовах ультразвукового навантаження представлено нижче.

Таблиця 2.7 – Відносні зміни параметрів ВАХ, отриманих при монохроматичному освітленні, внаслідок розпаду пар FeB за умов УЗН та без нього.  $T = 340$  К

Зразок	УЗН	T	$\varepsilon I_{SC}$ , %	$\varepsilon V_{OC}$ , %	$\varepsilon FF$ , %	$\varepsilon P_m$ , %	$\varepsilon I_{01}$ , %
#350_1	нема	340	23±2	6±1	3±1	29±3	-30
		320	24±2	4±1	2±1	29±3	-23
	$8,980$ МГц, $0,46$ Вт/см $^2$	340	23±2	6±1	3±1	29±3	-29
		320	25±2	4±1	2±1	30±3	-23
	$4,09$ МГц, $0,53$ Вт/см $^2$	340	23±2	7±1	3±1	30±3	-30
		320	24±2	4±1	2±1	30±3	-26
#341_1	нема	340	22±2	12±1	7±1	37±3	-27
		320	25±2	14±1	2±1	36±3	-28
	$5,40$ МГц, $0,08$ Вт/см $^2$	340	22±2	13±1	9±1	36±3	-29
		320	26±2	14±1	1±1	35±3	-30

Причому, як було показано у підрозділі 2.2, безпосередню інформацію щодо параметрів домішкових іонів заліза (енергію міграції, концентрацію пар, що розпалися внаслідок освітлення) можна отримати з аналізу кінетичних характеристик саме струму короткого замикання КСЕ, отриманого в умовах монохроматичного освітлення. У підрозділі 2.3 продемонстровано, що

найбільш зручними індикаторами зміни стану домішкового заліза є  $I_{SC}$  та максимальна вихідна потужність (коєфіцієнт корисної дії). Проте отримання кількісних характеристик дефектів, пов'язаних із залізом, із аналізу величин  $P_m$  або  $\eta$  достатньо утруднене через їхню комплексну залежність від багатьох рекомбінаційних процесів. Тому в нашій роботі основна увага була приділена саме дослідженням кінетичних характеристик  $I_{SC}$  за умов УЗН при варіюванні як зовнішніх умов (температури), так і параметрів акустичних хвиль (частоти, інтенсивності). Щодо інших параметрів, то для них результати подібні.

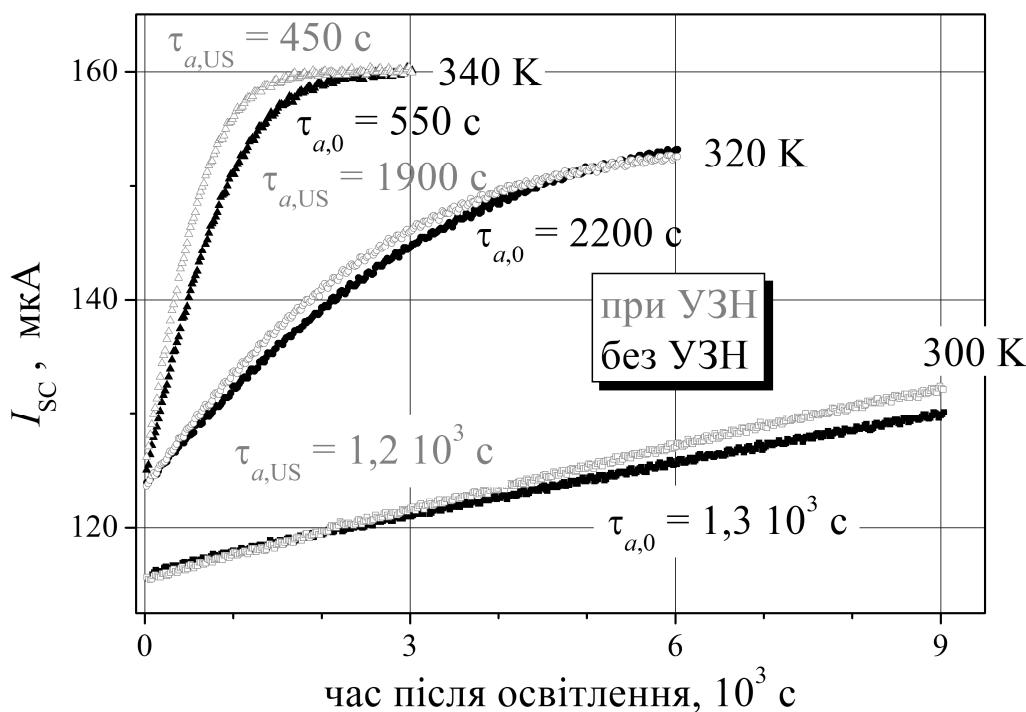


Рисунок 2.15 – Кінетика зміни величини струму короткого замикання при УЗН (порожні сірі точки) та без нього (заповнені чорні точки). Зразок #350\_2.  $f_{US} = 2,39$  МГц

Було виявлено, що внаслідок збудження пружних коливань процеси відновлення величини струму короткого замикання пришвидшуються. Так на рис. 2.15. приведено часові залежності струму короткого замикання після інтенсивного освітлення при різних температурах, виміряні за умов УЗН та без нього. Видно, що швидкість відновлення  $I_{SC}$  залежить як від температури (що цілком очікувало відповідно до виразу (2.21)), так і від наявності

ультразвукового навантаження. На рисунку також приведені значення характерного часу асоціації комплексу FeB (див формулу (2.19)), визначені шляхом нелінійної апроксимації експериментальних кривих. При цьому використано позначення  $\tau_{a,0}$  – час асоціації без УЗ,  $\tau_{a,US}$  – в умовах УЗН. Видно, що  $\tau_{a,US} / \tau_{a,0} < 1$ .

Зауважимо, що при температурах, близьких до кімнатних, час асоціації комплексу достатньо великий. Наприклад, на рис.2.15 наведено результати вимірювання кінетики  $I_{SC}$  при 300 К протягом 9000 с, які свідчать про те, що за цей час процеси відновлення пари далекі від завершення. Як показують розрахунки, для кімнатної температури значення  $\tau_{ass}$  складає більше 8 годин, і тому, через обмежений час виконання проекту, дослідження кінетики асоціації міжвузольного заліза Fe<sub>i</sub> з легуючою домішкою переважно проводилися при підвищенні температурі (340 К).

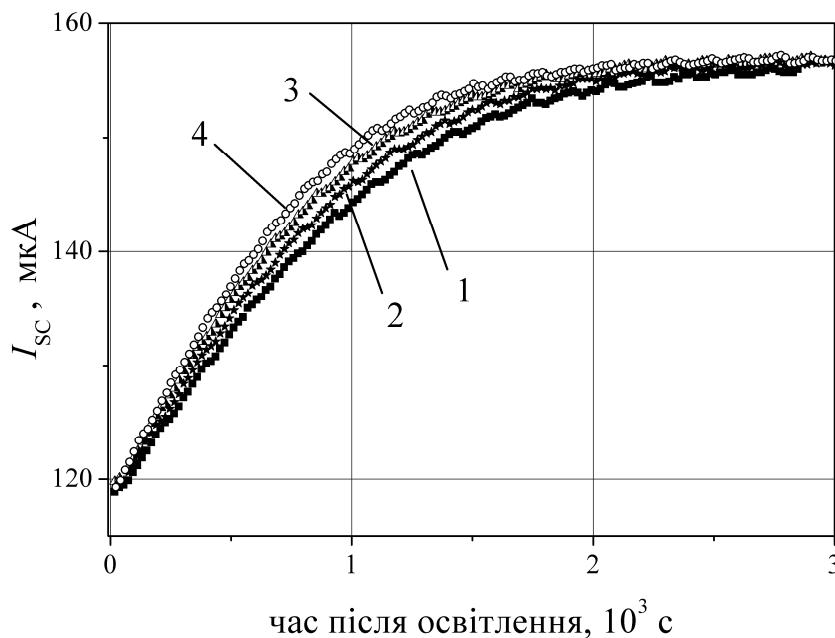


Рисунок 2.16 – Кінетика зміни величини струму короткого замикання при різних інтенсивностях УЗН.  $W_{US}$ , Вт/см<sup>2</sup>: 0 (1), 0,26 (2), 0,65(3), 0,87 (4).  $f_{US} = 8,98$  МГц.  $T=340$  К. Зразок #350\_1

Як показали дослідження, ступінь пришвидшення асоціації при УЗН залежить від інтенсивності акустичних хвиль. Так на рис.2.16 наведено дані,

які свідчать, що збільшення  $W_{\text{US}}$  викликає зменшення  $\tau_{a,\text{US}}$ . Зокрема, для даних, наведених на рисунку  $\tau_{a,\text{US}} / \tau_{a,0}$  складає величини 0,85, 0,78 та 0,70 для значень інтенсивності УЗ 0,26, 0,65 та 0,87 Вт/см<sup>2</sup>, відповідно.

Асоціація комплексу FeB відбувається за рахунок дифузії міжвузольних атомів заліза до розташованих у заміщуючому положенні та міцно зв'язаних із сусідами завдяки утворенню ковалентних зв'язків атомів бору. Відповідно, час асоціації залежить від коефіцієнта дифузії атомів заліза  $D_{\text{Fe}}$  [23,31]:

$$\tau_{ass} = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 kT}{q^2 D_{\text{Fe}} N_B} = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 kT}{q^2 D_{0,\text{Fe}} N_B} \exp\left(\frac{E_m}{kT}\right), \quad (2.27)$$

де

$$D_{\text{Fe}} = D_{0,\text{Fe}} \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right),$$

$D_{0,\text{Fe}}$  – температуронезалежний множник, у загальному випадку [32]

$$D_{0,\text{Fe}} = \beta_a v a_0^2 \exp\left(\frac{\delta S_{\text{Fe}}}{k}\right), \quad (2.28)$$

де

$\beta_a$  – множник, що враховує кореляцію дифузійних стрибків атомів заліза і залежить від типу кристалічної кратки,

$v$  – частота спроб стрибків, яка за величиною дорівнює частоті власних коливань атомів у міжвузіллях, с<sup>-1</sup>,

$a_0$  – відстань між сусідніми паралельними площинами які проходять через міжвузольні позиції заліза, м;

$\delta S_{\text{Fe}}$  – зміна ентропія кристалу, при переході заліза в сусіднє положення, Дж/К.

Зменшення часу асоціації FeB в умовах УЗН свідчить про AI збільшення  $D_{\text{Fe}}$ , пов'язане, швидше за все, зі зменшенням енергії дифузії. Процеси підсилення дифузії домішок в ультразвуковому полі спостерігалися і раніше як в твердих розчинах [33], так і в полі- та моно-кристалах кремнію та арсеніду галію [34,35,36,37,38,39,40,41]. Зменшення енергії міграції міжвузольних атомів заліза можна записати у вигляді

$$E_m \xrightarrow{\text{ultrasound}} E_{m,0} - \Delta E_{\text{US}}, \quad (2.29)$$

де

$E_{m,0}$  – енергія міграції без наявності пружних коливань в КСЕ, відповідно до літературних даних [23,28] та експериментальних результатів  $E_{m,0} \approx 0,66$  еВ;  $\Delta E_{\text{US}}$  – АІ зміна цієї величини, еВ.

На рис.2.17 представлена залежність  $\Delta E_{\text{US}}$  від інтенсивності введеного УЗ при різних значеннях  $f_{\text{US}}$ , розраховані з вимірюваних кінетичних кривих  $I_{\text{SC}}$  з використанням виразу (2.21). Видно, що незалежно від частоти УЗ, при малих значеннях  $W_{\text{US}}$  зміна енергії практично лінійно залежить від інтенсивності. При інтенсифікації УЗН спостерігається насичення  $\Delta E_{\text{US}}$ , що відповідає величині близько 10 меВ.

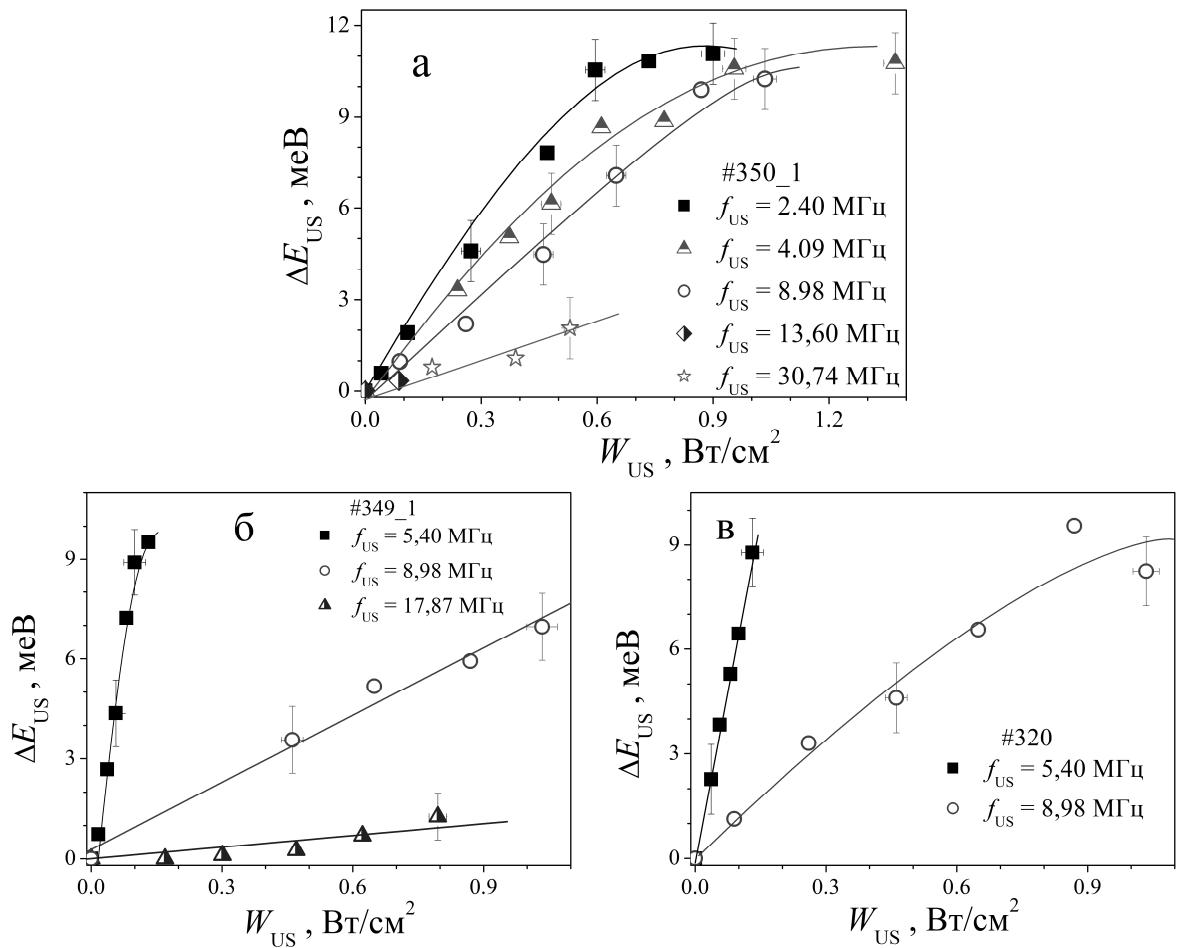


Рисунок 2.17 – Залежності акустоіндукованих змін енергії міграції іонів заліза від інтенсивності введеного ультразвуку.  
 $T=340$  К. Зразки #350\_1 (α), #349\_1 (β), #320 (γ)

З рис. 2.17 також видно, що ефективність AI змін енергії міграції при зростанні частоти УЗ зменшується, причому цей ефект спостерігається для всіх зразків незалежно від концентрації домішкового заліза. Щодо величини насичення  $\Delta E_{US}$ , то вона не залежить від  $f_{US}$ .

На наступному рисунку, 2.18, зведено залежності  $\Delta E_{US}$  для зразків з різною концентрацією заліза при використання УЗ однакової частоти. Видно, що величина акустоіндукованого ефекту фактично не залежить від  $N_{Fe}$ .

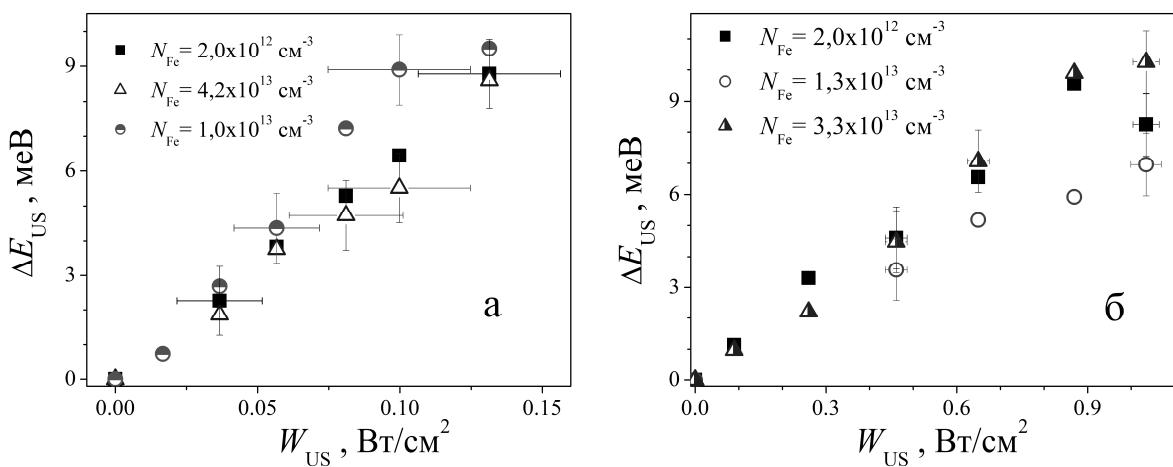


Рисунок 2.18 – Залежності акустоіндукованих змін енергії міграції від інтенсивності введеного ультразвуку в КСЕ з різним вмістом атомів заліза.  $T=340 \text{ K}$ .  $f_{US}$ , МГц: 5,40 (а), 8,98 (б).

Експерименти показали, що при зменшенні температури ефективність ультразвукового впливу на  $\Delta E_{US}$  зменшується – див. рис.2.19, де представлені температурні залежності зменшення енергії міграції при постійній інтенсивності введеного звуку. Загалом ці залежності близькі до лінійних, тобто

$$\Delta E_{US} = \Delta E_{US,0} + \alpha_{US} T, \quad (2.30)$$

де

$\Delta E_{US,0}$  – температуронезалежна частина AI зменшення енергії міграції, яка залежить від інтенсивності та частоти УЗН, тоді як температурний коефіцієнт  $\alpha_{US}$  практично не залежить від параметрів пружних хвиль.

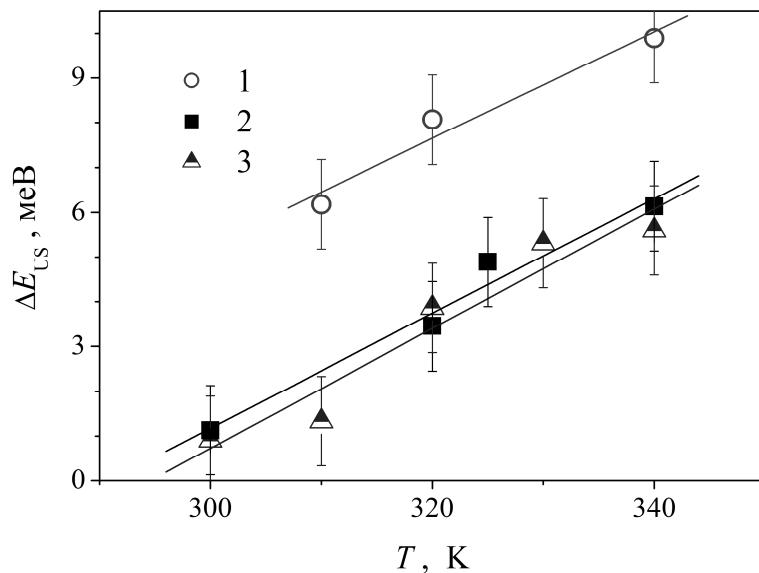


Рисунок 2.19 – Температурні залежності

акустоіндукованих змін енергії міграції іонів заліза в КСЕ з різним вмістом атомів заліза.  $f_{\text{US}}$ , МГц: 8,98 (крива 1), 4,09 (2), 2,39 (3).  $W_{\text{US}}$ , Вт/см<sup>2</sup>: 0,9 (1), 0,5 (2), 0,3 (3).  $N_{\text{Fe}}$ , 10<sup>13</sup> см<sup>-3</sup>: 4,6 (1), 2, 3,4 (3). Точки – експеримент, прямі – лінійна апроксимація

Причиною виявлених змін може бути поглинання коливальної енергії. Цей механізм, зокрема, використовувався авторами роботи [42] для пояснення причин впливу УЗН на систему дефектів в структурах Si-SiO<sub>2</sub>.

## 2.5 Основні результати розділу 2

1. Створено експериментальний стенд, який дозволяє вимірювати кінетичні характеристики параметрів КСЕ в умовах ультразвукового навантаження.
2. Запропоновано методику, що базується на вимірюванні кінетики струму короткого замикання КСЕ після інтенсивного освітлення та її подальшої апроксимації та дозволяє оцінити значення енергії міграції атомів заліза та концентрацію пар FeB, що дисоціювали внаслідок освітлення.

3. Проведено дослідження впливу світло-індукованого розпаду пар FeB на величину таких параметрів КСЕ, як струми насичення, пов'язані з процесами рекомбінації у квазі-нейтральній області та в ОПЗ, фактор неідеальності, послідовний та шунтуючий опор, струм короткого замикання, напруга холостого ходу, фактор заповнення ВАХ, максимальна вихідна потужність (коєфіцієнт корисної дії), отриманих як за умов монохроматичного освітлення, так і стандартних умов енергетичної освітленості АМ1,5.

4. Виявлено, що найбільш чутливими до розпаду пар залізо-бор є струм короткого замикання, максимальна вихідна потужність та струм насичення в ОПЗ, тоді як відносні зміни напруги холостого ходу та коєфіцієнта форми ВАХ значно менші і суттєво спадають при зменшенні температури. Зміни фактору неідеальності та струму насичення в квазі-нейтральній області спостерігаються лише при підвищених температурах (~340 K).

5. Характерний час зміни параметрів фотоелектричного перетворення КСЕ внаслідок відновлення пар FeB близький до часу асоціації комплексу. Проте при використанні одно-експонентної апроксимації отримуються завищені значення, що пов'язано з необхідністю врахування температурних залежностей параметрів КСЕ. Час релаксації послідовного опору після інтенсивного опромінення близько 1000 с і не залежить від температури.

6. Показано, що відносні світлоіндуковані зміни струму короткого замикання та максимальної вихідної потужності можуть бути використані для оцінки концентрації заліза в КСЕ.

7. Показано, що ультразвукове навантаження не впливає на величину відносних змін параметрів КСЕ внаслідок світло-індукованого розпаду пар FeB.

8. Виявлено ефект зменшення енергії міграції атомів заліза в КСЕ в умовах УЗН.

9. Вивчено закономірності AI впливу на енергію міграції при використанні повздовжніх акустичних хвиль. Зокрема показано, що ефективність УЗ впливу зменшуються при збільшенні частоти УЗ та зменшенні температури; залежність зміни енергії міграції від інтенсивності пружних коливань характеризується насиченням, причому максимальна зміна цієї величини в акустичному полі досягає приблизно 10 мeВ. Водночас залежності кількісних характеристик ефекту від концентрації заліза не виявлено.

## ВИСНОВКИ

1. Шляхом апроксимації у межах дво-діодної моделі модельованих вольт-амперних характеристик кремнієвих  $n^+$ - $p$ - $p^+$  структур підготовлено тренувальний та тестові набори для глибокої нейронної мережі, призначеної для передбачення концентрації домішкового заліза. Набори містять значення товщини бази КСЕ в діапазоні 150÷240 мкм, рівень легування ( $10^{15} \div 10^{17}$  см<sup>-3</sup>), температури (290÷340 К), концентрації заліза ( $10^{11} \div 10^{13}$  см<sup>-3</sup>), фактору неідеальності ВАХ за умови, що всі атоми заліза знаходяться у міжвузольному неспареному стані та фактору неідеальності ВАХ для випадку рівноважного співіснування пар FeB та міжвузольних атомів Fe.
2. Проведено налаштування ГНМ та вибрано оптимальні значення конфігурації схованих шарів та таких гіперпараметрів як розмір пакету (32), тип активаційної функції для схованих шарів (ReLU), тип оптимізатора (Adamax), темп навчання ( $10^{-3}$ ), кількість епох (400 або 1500 залежно від мережі), метод попередньої підготовки даних (нульове середнє значенні та одиничне стандартне відхилення), тип початкової ініціалізації вагових коефіцієнтів (з використанням функції Ксав'є та розподілу Гаусса); показано недоречність використання регуляризації.
3. Виявлена залежність фактору неідеальності від товщини бази структури  $n^+$ - $p$ - $p^+$  у випадку, якщо вона переважає довжину дифузії неосновних носіїв заряду.
4. Показана можливість визначення концентрації домішок (на прикладі заліза) в кремнієвих сонячних елементах на основі вимірювання ВАХ з використанням глибокої нейронної мережі з середньою відносною квадратичною похибкою до 0,005.
5. Показано, що для ефективної роботи ГНМ а) необхідне тренування мережі з використанням значень рівня легування, які збігаються з

- відповідними величинами в структурах, які надалі досліджуються;
- б) доцільне використанні двох значень величини фактору неідеальності, які відповідають випадкам як наявності лише міжвузольних атомів заліза, так і рівноважного співіснування пар FeB та Fe<sub>i</sub>.
6. Запропоновано методику, що базується на вимірюванні кінетики струму короткого замикання КСЕ після інтенсивного освітлення та її подальшої апроксимації, та дозволяє оцінити значення енергії міграції атомів заліза та концентрацію пар FeB, які дисоціювали внаслідок освітлення.
  7. Виявлено, що найбільш чутливими до розпаду пар залізо-бор є струм короткого замикання, максимальна вихідна потужність та струм насичення в ОПЗ, тоді як відносні зміни напруги холостого ходу та коефіцієнта форми ВАХ значно менші і суттєво спадають при зменшенні температури.
  8. Виявлено близькість значень характерних часів відновлення фотоелектричних параметрів КСЕ після інтенсивного опромінення та часу асоціації пари FeB.
  9. Показано, що відносні світлоіндуковані зміни струму короткого замикання та максимальної вихідної потужності можуть бути використані для оцінки концентрації заліза в КСЕ.
  10. Виявлено ефект зменшення енергії міграції атомів заліза в КСЕ під дією пружних коливань ультразвукового діапазону.
  11. Показано, що ефективність УЗ впливу на енергію міграції зменшуються при збільшенні частоти УЗ та зменшенні температури; залежність зміни енергії міграції від інтенсивності пружних коливань характеризується насиченням.

**ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ**

- 1 Ishaque K. Simple, fast and accurate two-diode model for photovoltaic modules / K. Ishaque, Z. Salam, H. Taheri // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. — 2011. — Vol. 95. — P. 586–594.
- 2 Breitenstein O. Understanding the current-voltage characteristics of industrial crystalline silicon solar cells by considering inhomogeneous current distributions / O. Breitenstein // Opto-Electronics Review. — 2013. — Vol. 21. — P. 259–282.
- 3 Parameters identification of photovoltaic models using an improved JAYA optimization algorithm / K. Yu, J.J. Liang, B.Y. Qu et al. // Energy Conversion and Management. — 2017. — Vol. 150. — P. 742–753.
- 4 Olikh, O.Ya. Acoustically driven degradation in single crystalline silicon solar cell / O.Ya. Olikh // Superlattices Microstruct. — 2018. — Vol. 117. — P. 173–188.
- 5 Nguyen H.T. Temperature dependence of the radiative recombination coefficient in crystalline silicon from spectral photoluminescence / H.T. Nguyen, S.C. Baker-Finch, D. Macdonald // Appl. Phys. Lett. — 2014. — Vol. 104. — P. 112105.
- 6 Assessment and parameterisation of Coulomb-enhanced Auger recombination coefficients in lowly injected crystalline silicon / P.P. Altermatt, J. Schmidt, G. Heiser, A.G. Aberle // J. Appl. Phys. — 1997. — Vol. 82. — P. 4938–4944.
- 7 Zoth, G. A fast, preperation-free method to detect irpn in silicon / G. Zoth, W. Bergholz // J. Appl. Phys. — 1990. — Vol. 67. — P. 6764–6771.
- 8 Geerligs, L. J. Dynamics of light-induced FeB pair dissociation in crystalline silicon / L. J. Geerligs, D. Macdonald // Appl. Phys. Lett. — 2004. — Vol. 85. — P. 5227–5229.

- 9 Chollet, F. Deep Learning with Python / F. Chollet. — Second edition. — Manning, 2017. – 361 c.
- 10 Дъелисан, Э. Упругие волны в твёрдых телах. Применение для обработки сигналов / Э. Дъелисан, Д. Руайе. — М.: Наука, 1982. — 424 с.
- 11 Фаренбрух, А. Солнечные элементы. Теория и эксперимент / А. Фаренбрух, Р. Бьюб. — М.: Энергоатомиздат, 1987. — 280 с.
- 12 Razeghi, M. Semiconductor ultraviolet detectors / M. Razeghi, A. Rogalski // J. Appl. Phys. — 1996. — Vol. 79. — P. 7433–7473.
- 13 Degradation of Crystalline Silicon Due to Boron–Oxygen Defects / T. Niewelt, J. Schoon, W. Warta et al. // IEEE Journal of Photovoltaics. — 2017. — Vol. 7. — P. 383–398.
- 14 Schmidt, J. Effect of Dissociation of Iron–Boron Pairs in Crystalline Silicon on Solar Cell Properties / J. Schmidt // Progress in Photovoltaics: Research and Applications. — 2005. — Vol. 13. — P. 325–331.
- 15 Rougieux, F. E. Determining the charge states and capture mechanisms of defects in silicon through accurate recombination analyses: A review / F. E. Rougieux, C. Sun, D. Macdonald // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. — 2018. — Vol. 187. — P. 263–272.
- 16 Temperature dependence of photoconversion efficiency in silicon heterojunction solar cells: Theory vs experiment / A. V. Sachenko, Yu. V. Kryuchenko, V. P. Kostylyov et al. // J. Appl. Phys. — 2016. — Vol. 119. — P. 225702.
- 17 Couderc, R. Reassessment of the intrinsic carrier density temperature dependence in crystalline silicon / R. Couderc, M. Amara, M. Lemiti // J. Appl. Phys. — 2014. — Vol. 115. — P. 093705.
- 18 Passler R. Dispersion-related description of temperature dependencies of band gaps in semiconductors / R. Passler // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66. – P. 085201.

- 19 Nguyen H.T. Temperature dependence of the radiative recombination coefficient in crystalline silicon from spectral photoluminescence / H.T. Nguyen, S.C. Baker-Finch, D. Macdonald // Appl. Phys. Lett. – 2014. – Vol. 104. – P. 112105.
- 20 Assessment and parameterisation of Coulomb-enhanced Auger recombination coefficients in lowly injected crystalline silicon / P.P. Altermatt, J. Schmidt, G. Heiser, A.G. Aberle // J. Appl. Phys. – 1997. – Vol. 82. – P. 4938–4944.
- 21 Couderc R. Reassessment of the intrinsic carrier density temperature dependence in crystalline silicon / R. Couderc, M. Amara, M. Lemiti // J. Appl. Phys. – 2014. – Vol. 115. – P. 093705.
- 22 The effect of oxide precipitates on minority carrier lifetime in p-type silicon / J.D. Murphy, K. Bothe, M. Olmo et al. // J. Appl. Phys. – 2011. – Vol. 110. – P. 053713.
- 23 Iron-boron pairing kinetics in illuminated p-type and in boron/phosphorus co-doped n-type silicon / C. Moller, T. Bartel, F. Gibaja, K. Lauer // J. Appl. Phys. — 2014. — Vol. 116. — P. 024503.
- 24 Solar Cells. Materials, Manufacture and Operation / Ed. by A. McEvoy, T. Markvart, L. Castaner. — Second edition. — Oxford: Academic Press, 2013. — 641 p.
- 25 Green M. A. Intrinsic concentration, effective densities of states, and effective mass in silicon / M.A. Green // J. Appl. Phys.. – 1990. – Vol. 67. – P. 2944-2954.
- 26 Klaassen D.B.M. A unified mobility model for device simulation - I. Model equations and concentration dependence / D.B.M. Klaassen // Solid-State Electron. – 1992. – Vol. 35. – P. 953-959.
- 27 Mohamed, A. W. Novel mutation strategy for enhancing SHADE and LSHADE algorithms for global numerical optimization / A. W. Mohamed, A.

- A. Hadi, K. M. Jambi // *Swarm Evol. Comput.* — 2019. — Vol. 50. — P. 100455.
- 28 Macdonald, D. Measuring dopant concentrations in compensated p-type crystalline silicon via iron–acceptor pairing / D. Macdonald, A. Cuevas, L. J. Geerligs // *Appl. Phys. Lett.* — 2008. — Vol. 92. — P. 202119.
- 29 New guidelines for a more accurate extraction of solar cells and modules key data from their current–voltage curves / B. Paviet-Salomon, J. Levrat, V. Fakhfouri et al. // *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* — 2017. — Vol. 25. — P. 623–635.
- 30 Olikh, O.Ya. Acoustically driven degradation in single crystalline silicon solar cell / O.Ya. Olikh // *Superlattices Microstruct.* — 2018. — Vol. 117. — P. 173–188.
- 31 Formation rates of iron-acceptor pairs in crystalline silicon / D. Macdonald, T. Roth, P. N. K. Deenapanray et al. // *J. Appl. Phys.* — 2005. — Vol. 98. — P. 083509.
- 32 Оліх, О.Я. Дефекти у напівпровідникових та діелектричних кристалах / О.Я. Оліх. — Вінниця: ФОП Корзун Д.Ю., 2016. — 152 с.
- 33 Механизм изменения подвижности носителей заряда при ультразвуковой обработке полупроводниковых твердых растворов / П.И. Баранский, А.Е. Беляев, С.М. Комиренко, Шевченко Н.В. // *Физика твердого тела.* — 1990. — Т. 32 — С. 2159–2161.
- 34 Ostapenko, S. Defect passivation using ultrasound treatment: fundamentals and application / S. Ostapenko // *Applied Physics A: Materials Science & Processing.* — 1999. — Vol. 69. — P. 225–232.
- 35 Activation of luminescence in polycrystalline silicon thin films by ultrasound treatment / J. Koshka, S. Ostapenko, T. Ruf, J. M. Zhang // *Appl. Phys. Lett.* — 1996. — Vol. 69. — P. 2537–2539.

- 36 *Ostapenko, Sergei S.* Mechanism of Ultrasonic Enhanced Hydrogenation in Poly–Si Thin Films / S.S. Ostapenko // Defects in Semiconductors 19. — Vol. 258 of *Materials Science Forum*. — Trans Tech Publications, 1997. — P. 197–202.
- 37 *Заверюхин, Б.Н.* Изменение коэффициента отражения излучения от поверхности полупроводников в спектральном диапазоне  $\lambda = 0.2 \div 20$   $\mu\text{м}$  под воздействием ультразвуковых волн / Б.Н. Заверюхин, Н.Н. Заверюхина, О.М. Турсункулов // *Письма в журнал технической физики*. — 2002. — Т. 28. — С. 1–12.
- 38 Акустостимулированное изменение плотности и энергетического спектра поверхностных состояний в монокристаллах р–кремния / Н.Н. Заверюхина, Е.Б. Заверюхина, С.И. Власов, Б.Н. Заверюхин // *Письма в журнал технической физики*. — 2008. — Т. 34. — С. 36–42.
- 39 Акустостимулированная адгезия медных пленок к кремнию / Б.Н. Заверюхин, Х.Х. Исмаилов, Р.А. Муминов и др. // *Письма в журнал технической физики*. — 1996. — Т. 22. — С. 25–27.
- 40 *Островский, И.В.* Стимулированное ультразвуком низкотемпературное перераспределение примесей в кремнии / И.В. Островский, А.Б. Надточий, А.А. Подолян // *Физика и техника полупроводников*. — 2002. — Т. 36. — С. 389–391.
- 41 Influence of  $\gamma$ -irradiation and ultrasound treatment on current mechanism in Au-SiO<sub>2</sub>-Si structure / A.M. Gorb, O.A. Korotchenkov, O.Ya. Olikh et al. // Solid-State Electron. — 2020. — Vol. 165. — P. 107712.
- 42 Effect of ultrasonic treatment on the defect structure of the Si–SiO<sub>2</sub> system / D. Kropman, V. Seeman, S. Dolgov, A. Medvids // *Phys. Status Solidi C*. — 2016. — Vol. 13. — P. 793–797.

**ДОДАТОК А**  
**ПЕРЕЛІК ПІДГОТОВЛЕНИХ ДОПОВІДЕЙ НА КОНФЕРЕНЦІЇ**

1. Olikh, O. Deep-learning approach to the iron concentration evaluation in silicon solar cell / O. Olikh, O. Lozitsky, O. Zavhorodnii // 9 European conference on renewable energy systems. Proceedings. Istanbul, Turkey. / Ed. by Erol Kurt. — Istanbul: 2021. — P. 22.
2. Acoustically Induced Acceleration of Iron Migration in Silicon Solar Cells / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, R. Korkishko // Ultrasonics 2021, 5th International Caparica Conference on Ultrasonic based Applications: from analysis to synthesis. Proceedings Book. Caparica, Portugal. — Caparica: 2021. — P. 109.
3. Estimation of Iron Concentration in Silicon Solar Cell by Kinetics of Light-Induced Change in Short-Circuit Current / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, R. Korkishko // II International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics CM&LTP 2021. Book of Abstracts. Kharkiv, Ukraine. — Kharkiv: 2021. — P. 191.
4. Ultrasound as Functional Influence Tool on FeB pair Association in Silicon Solar Cells / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, R. Korkishko // 3<sup>rd</sup> AAAFM-UCLA International Conference on Advances in Functional Materials. Los Angeles, USA. — Los Angeles: 2021.