

1 РОЗРОБКА ЗАСАД ЕКСПРЕС-МЕТОДУ КІЛЬКІСНОЇ ОЦІНКИ ЕЛЕКТРИЧНО-АКТИВНИХ ДЕФЕКТІВ У БАР'ЄРНИХ СТРУКТУРАХ ЗА ВЕЛИЧИНОЮ ФАКТОРУ НЕІДЕАЛЬНОСТІ НА ПРИКЛАДІ ДОМІШКОВОГО ЗАЛІЗА В КРЕМНІЄВИХ СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТАХ

Неруйнівні методи, що мають на меті оцінку концентрації домішок у напівпровідникових структурах, зокрема в кремнієвих сонячних елементах (КСЕ), мають важливе значення з прикладної точки зору. На сьогодні розроблено чимало як прямих, так і непрямих методів, що дозволяють вирішити подібне завдання. Проте практично всі вони вимагають чи спеціальної підготовки об'єктів для досліджень, чи спеціалізованого обладнання. Водночас, чи не найпоширенішим методом характеристизації сонячних елементів є вимірювання вольт-амперних характеристик (ВАХ). Одним з параметрів, які швидко визначаються з ВАХ, є фактор неідеальності (n). У літературі показано, що ця величина досить часто використовується для характеристики різних напівпровідникових бар'єрних структур [1,2,3,4,5]. У нашій попередній роботі [6] було показано, що значення коефіцієнта неідеальності може бути використано для оцінки концентрації заліза (N_{Fe}) в кремнієвих сонячних елементах. Це відкриває перспективи для розробки швидкого методу кількісної оцінки електрично-активних дефектів, що може бути органічним доповненням вимірювання ВАХ. Проте вплив дефектів на величину фактору неідеальності нерідко маскується впливом багатьох інших фізичних процесів; в результаті отримані аналітичні вирази $N_{Fe} = f(n)$ не є загальними та для визначення N_{Fe} потрібні численні калібрувальні криві; крім того, для підвищення точності необхідні вимірювання ВАХ в певному температурному діапазоні [6]. З іншого боку, в останнє десятиліття у різних областях теоретичної та прикладної фізики [7,8,9] почали широко використовуватися методи глибокого навчання, які дозволяють вирішити

проблеми без чіткої алгоритмізації. Ця робота спрямована на застосування глибоких нейронних мереж (ГНМ) для подолання проблеми багатопараметричності взаємозв'язку N_{Fe} та n при прогнозуванні концентрації заліза на основі значення коефіцієнта ідеальності (так би мовити, «глибоке навчання для глибоких рівнів»).

Водночас, навчання та тренування штучних нейронних мереж вимагають великої кількості розмічених даних. Очевидно, що подібний набір з експериментальних ВАХ був би найкращим, але практично неможливо підібрати тисячі зразків КСЕ з необхідними параметрами і провести безпосереднє визначення як концентрації заліза, так і величини фактору неідеальності. Іншим шляхом для отримання розмічених даних є моделювання відповідних структур. Тому в даній роботі можна виділити наступні складові 1) моделювання ВАХ для КСЕ з різними параметрами та різними значеннями концентрації заліза; 2) апроксимація отриманих ВАХ з метою визначення величини фактору неідеальності і створення таким чином тренувального та тестового набору розмічених даних; 3) налаштування та тренування штучної нейронної мережі; 4) тестування ГНМ з використанням синтетичних та експериментальних ВАХ. Реалізація вказаних пунктів описана в наступних розділах.

1.1 Основні характеристики розрахункової моделі кремнієвої $n^+p\text{-}p^+$ структури

В якості наближення до практичного використання у роботі розглядалася система, яка складається з кристалічної кремнієвої $n^+p\text{-}p^+$ структури (так звана система з полем задньої поверхні (ПЗП)), що містить домішкове заліза, яке вважається основними рекомбінаційними центрами. Незважаючи на певну спрощеність, така система має велике практичне значення. Так саме кремнієві сонячні елементи забезпечують близько 90% поточного виробництва сонячної

енергії у світові [10], а ПЗП-система є однією з найпопулярніших конструкцій, що використовуються як для промислового виробництва КСЕ, так і моделювання [11,12]. Залізо ж є основною, а також однією з найбільш шкідливих металевих домішок у КСЕ [13,14].

Розрахунки проводилися для структури, геометрія якої зображена на рис.1.1. Вважалося, що система складається з емітерного n^+ -шару товщиною d_n , бази з дірковою провідністю товщиною d_p та p^+ -шару для створення ПЗП товщиною d_{SBF} . Вважалося, що концентрації легуючих домішок (фосфору та бору) дорівнюють N_D , N_B та N_{SBF} в емітері, базі та ПЗП-шарі, відповідно.

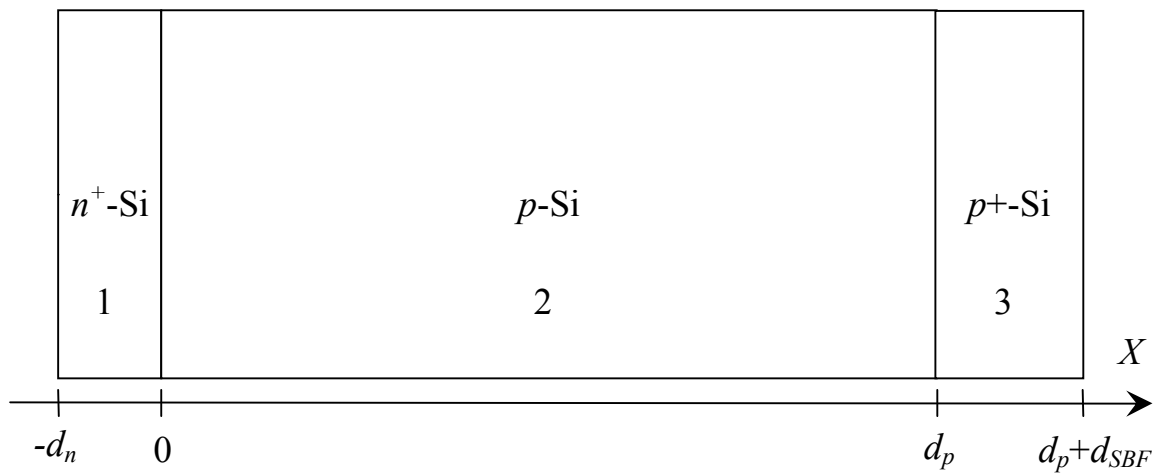


Рисунок 1.1 – Геометрія структури, використаної у розрахунковій моделі. 1 – емітер, 2 – база, 3 – шар ПЗП

Розрахунки проводилися при різних температурах, тому необхідно було враховувати пов'язані з цим зміни величин параметрів кремнію. Так, ширина забороненої зони обчислювалась за формулою Пасслера [15]

$$E_G(T) = E(0) - \alpha\theta \left\{ \frac{(1 - 3\Delta^2)}{\exp(\theta/T) - 1} + \frac{3\Delta^2}{2} \left(\sqrt[6]{1 + \frac{\pi^2}{3(1 + \Delta^2)} \left(\frac{2T}{\theta} \right)^2} + \frac{3\Delta^2 - 1}{4} \left(\frac{2T}{\theta} \right)^3 + \frac{8}{3} \left(\frac{2T}{\theta} \right)^4 + \left(\frac{2T}{\theta} \right)^6} - 1 \right) \right\} \quad (1.1)$$

де

де $E(0) = 1,1701$ еВ ширина забороненої зони при нульовій температурі,

T – температура, К,

$\alpha = 3,23 \cdot 10^{-4}$ еВ/К,

$\Theta = 446$ К,

$\Delta = 0,51$.

При цьому враховувалось звуження забороненої зони ΔE_G внаслідок легування, яке відповідно до даних роботи [16] для n - та p -областей має описуватися виразами (1.2) та (1.3) відповідно:

$$\Delta E_G(T) = 4.2 \cdot 10^{-5} \left[\ln \left(\frac{N_D}{10^{20}} \right) \right]^3, \quad (1.2)$$

$$\Delta E_G(T) = 4.72 \cdot 10^{-5} \left[\ln \left(\frac{N_{B,BSF}}{10^{20}} \right) \right]^3, \quad (1.3)$$

де значення концентрацій легантів очікуються у м^{-3} , а звуження забороненої зони - в еВ.

При обчисленні теплових швидкостей електронів $v_{th,n}$ та дірок $v_{th,p}$ використовувались вирази з роботи [17]; розрахунок ефективної густини станів поблизу дна зони провідності N_C та ефективної густини станів поблизу стелі валентної зони N_V відбувався з використанням температурних залежностей ефективних мас густини станів, запропонованих в роботі [18]. Вираз, з останньої роботи також використовувався при оцінці власної концентрації носіїв заряду:

$$n_i(T) = 1,541 \cdot 10^{21} T^{1,712} \exp \left(- \frac{E_G}{2kT} \right). \quad (1.4)$$

Рухливості електронів та дірок обчислювалися за теорією Классена [19], яка враховує як граткове, так і електрон-діркове розсіяння носіїв заряду. Температурні залежності ефективних мас вільних носіїв заряду описувалися за допомогою поліномів 6-го ступеня відповідно до [20].

При розрахунках темпу власної рекомбінації коефіцієнти Оже-рекомбінації дірок та електронів C_{p0} та C_{n0} розраховувалися з використанням

виразів, наведених в [21]:

$$C_{p0}(T) = (7,91 \cdot 10^{-44} - 4,13 \cdot 10^{-47} T + 3,59 \cdot 10^{-49} T^2) \times \\ \times \left(1 + (564812 \cdot T^{-1,6545} - 1) \left(1 - \tanh \left[\left\{ \frac{p}{5 \cdot 10^{22}} \right\}^{0,29} \right] \right) \right), \quad (1.5)$$

$$C_{n0}(T) = 2,8 \cdot 10^{-43} \times \left(1 + (235548 \cdot T^{-1,5013} - 1) \left(1 - \tanh \left[\left\{ \frac{n}{5 \cdot 10^{22}} \right\}^{0,34} \right] \right) \right). \quad (1.6)$$

В свою чергу, обчислення рекомбінаційного коефіцієнту, пов'язаного з випромінювальними міжзонними переходами, проводилося шляхом апроксимації табличних даних роботи [22] за допомогою поліному 5-го ступеня. Крім того вважалося, що поверхнева швидкість рекомбінації однакова на обох поверхнях і дорівнює 10^3 см/с.

Враховувалась також рекомбінація на дефектах відповідно до моделі Шоклі-Ріда-Хола (ШРХ), темп якої

$$U_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_{p0}(n + n_1) + \tau_{n0}(p + p_1)}, \quad (1.7)$$

де

n та p – концентрації електронів та дірок, відповідно, м^{-3} ;

$$\tau_{n0} = \frac{1}{N_{tr} \sigma_n v_{th,n}}, \quad \tau_{p0} = \frac{1}{N_{tr} \sigma_p v_{th,p}}, \quad (1.9)$$

N_{tr} – концентрація дефектів, м^{-3} ,

σ_n та σ_p – поперечні перерізи захоплення дефектом електронів та дірок, відповідно, м^2 ;

$$n_1 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{tr}}{kT}\right), \quad p_1 = N_v \exp\left(-\frac{E_{tr} - E_v}{kT}\right), \quad (1.10)$$

E_c та E_v – енергетичні положення дна зони провідності та вершини валентної зони, відповідно, еВ;

E_{tr} – енергетичне положення рівня, пов'язаного з дефектом, еВ.

В моделі вважалося, що дефекти в базі та в шарі ПЗП пов'язані з домішковими атомами заліза, причому в обох шарах передбачалась однакова концентрація N_{Fe} і вважалося, що домішки рівномірно розподілені по об'єму напівпровідника. Дефекти в емітері не розглядалися.

Моделювання проводилося для двох випадків. У першому вважалося, що всі атоми заліза не утворюють комплекси і перебувають у міжвузольному стані $N_{\text{Fe}} = N_{\text{Fe,i}}$. На практиці подібний стан реалізується шляхом інтенсивного освітлення сонячного елемента [23] або внаслідок високотемпературної обробки (210°C, 3 хв) [24]. Надалі цей випадок позначатиметься «Fe».

У другому випадку, який відповідав рівноважному стану неосвітленого сонячного елемента, вважалося, що у кристалі присутні як неспарені міжвузлові атоми заліза, так і пари заміщуючий атом бору – міжвузольний атом заліза Fe_iB_s : $N_{\text{Fe}} = N_{\text{Fe,i}} + N_{\text{FeB}}$ (де N_{FeB} – концентрація пар). При цьому розподіл рекомбінаційних центрів є неоднорідним по товщині структури, залежить від положення рівня Фермі E_F і, відповідно до [25,26], може бути розрахований з використанням наступних співвідношень

$$N_{\text{FeB}} = N_{\text{Fe}} \frac{N_{\text{B}} 10^{-23} \exp\left(\frac{E_b}{kT}\right)}{\left[1 + N_{\text{B}} 10^{-23} \exp\left(\frac{E_b}{kT}\right)\right] \left[1 + \exp\left(\frac{E_F - E_{\text{Fe}}}{kT}\right)\right]}, \quad (1.11)$$

$$N_{\text{Fe,i}} = N_{\text{Fe}} - N_{\text{FeB}}, \quad (1.12)$$

де

$E_b = 0,582$ еВ – енергія зв'язку пари,

E_{Fe} – енергія донорного рівня, пов'язаного з міжвузольним залізом. Для позначення цього випадку використовуватиметься скорочення «Fe-FeB».

При розрахунках використовувалися значення параметрів дефектів, наведених в у таблиці 1.1.

Таблиця 1.1 – Параметри дефектів, використані у розрахунках [27]

Параметр	Дефект	
	Fe _i	FeB
E_{tr} , eV	$E_V+0,394$	$E_C-0,26$
σ_n , м ²	$3,47 \cdot 10^{-15} T^{-1,48}$	$5,1 \cdot 10^{-13} T^{-2,5}$
σ_p , м ²	$4,54 \cdot 10^{-20} \exp\left(-\frac{0,05}{kT}\right)$	$3,32 \cdot 10^{-14} \exp\left(-\frac{0,262}{kT}\right)$

1.2 Моделювання вольт-амперних характеристик кремнієвих n^+-p-p^+ структур з різними товщинами, ступенем легування та концентрацією домішки

Вольт-амперні характеристики структури, описаної в підрозділі 1.1, розраховувалися за допомогою програмного пакету одномірного моделювання SCAPS 3.3.08 [28]. Цей пакет широко використовується в літературі для симуляції роботи різноманітних сонячних елементів [29,30,31]. В роботі проводилося моделювання прямої гілки ВАХ в діапазоні напруг 0-0,45 В з кроком 0,01 В. Значення параметрів, які використовувалися під час розрахунків, наведені в таблиці 1.2. Як видно, параметрами, які варіювалися під час моделювання були концентрації бору в базі, її товщина, концентрація домішкового заліза в шарах з дірковою провідністю та температура. Діапазони параметрів вибиралися з умови максимального наближення до реальних елементів. А саме, температурний діапазон 290÷340 К відображає той факт, що фотоперетворювачі в некосмічних умовах використовуються поблизу кімнатних температур, або підвищених, що викликано їхнім перебуванням під прямим сонячним світлом. Для стандартних комерційних кремнієвих сонячних елементів товщина база складає 180 мкм [32] і тому моделювання проводилося

для товщин $150 \div 240$ мкм. Так само діапазон ступеня легування $10^{15} \div 10^{17} \text{ см}^{-3}$ відповідає стандартним фотоперетворювачам. Нарешті, розгляд значень концентрацій домішкового заліза з інтервалу $10^{10} \div 10^{13} \text{ см}^{-3}$ зумовлений тим, що, з одного боку, при менших рівнях забруднення залізо практично не впливає на параметри КСЕ [33], а з другого, сучасна технологія виробництва запобігає потраплянню у кремнієві кристали перехідних металів у більшій кількості.

Таблиця 1.2 – Параметри структур $n^+ - p - p^+$, що використовувалися при моделюванні ВАХ

Параметр	Значення
d_n , мкм	0,5
d_p , мкм	$150 \div 240$
d_{SBF} , мкм	1
N_D , см^{-3}	10^{19}
N_A , см^{-3}	$10^{15} \div 10^{17}$
N_{SBF} , см^{-3}	$5 \cdot 10^{18}$
N_{Fe} , см^{-3}	$10^{10} \div 10^{13}$
T , К	$290 \div 340$

Особливістю SCAPS є те, що він не дозволяє в автоматичному режимі враховувати реальні температурні залежності параметрів як кремнію, так і рекомбінаційних центрів, пов'язаних з домішковими атомами заліза. Як наслідок, виникла необхідність створення окремих файлів даних для роботи SCAPS при обчисленні параметрів кремнієвої $n^+ - p - p^+$ структури для кожного зі значень температури, рівня легування та концентрації домішок. Для автоматизації цього процесу була розроблена спеціальна програма, яку можна знайти за посиланням <https://github.com/olegolikh/SCAPSConversion.git>. Зокрема проводилися розрахунки положення рівня Фермі у структурі без

дефектів, а потім отримані результати застосовувалися для оцінки просторового розподілу дефектів різного типу. Приклади таких розрахунків представлені на рис.1.2.

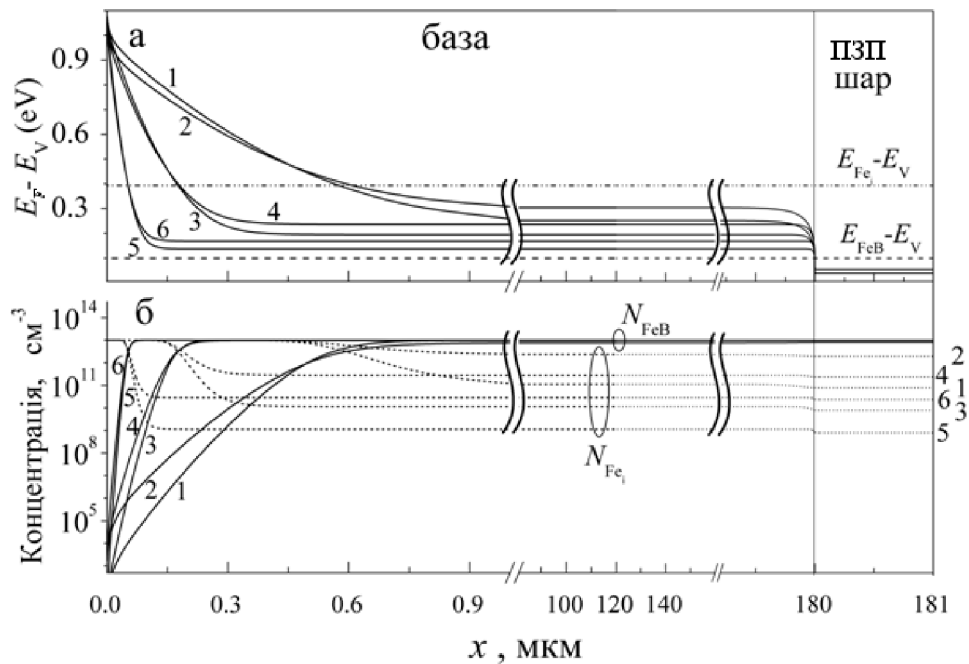


Рисунок 1.2 - Розраховані залежності для бази та ПЗП шару положення рівня Фермі (а, суцільні лінії), концентрації міжвузольних атомів заліза (б, суцільні лінії) та пар Fe_iB_s (б, пунктир) при нульовому зміщенні. N_{B} , cm^{-3} : 10^{15} (криві 1 та 2), 10^{16} (3 та 4), 10^{17} (5 та 6). T , К: 290 (1, 3, 5), 340 (2, 4, 6). $N_{\text{Fe}} = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$. $d_p = 180 \text{ мкм}$. В частині (а) також показані положення донорних рівнів, пов'язаних з міжвузольним залізом (штрих-пунктирна лінія) та парою Fe_iB_s (пунктир)

Зауважимо, що основною метою даного моделювання є створення бази розмічених даних, які в подальшому використовуються для тренування та тестування ГНМ, орієнтованої на оцінку концентрації домішок за величиною фактору неідеальності КСЕ. У зв'язку з цим отримані в результаті моделювання ВАХ можна розділити на декілька наборів.

Для створення тренувального набору даних були в подальшому використані ВАХ, симульовані з використанням 4 значень товщини 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} , рівномірно розподілених по вказаних у таблиці 2.1 діапазонах (для d_p і T використовувалась рівномірність у лінійному масштабі, для N_B і N_{Fe} – у логарифмічному). Крім того, були змодельовані ВАХ для декількох тестових наборів. У набір, який позначено T-varied, увійшли ВАХ, симульовані 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. Подібним чином були створені тестові набори d-varied, Fe-varied та B-varied. При отриманні набору All-varied були використані ВАХ, симульовані з використанням таких значень і товщина бази, і концентрації бору, і температури, і концентрації заліза, які не розглядалися при створенні тренувального набору. Точні значення параметрів для кожного з наборів наведені у Проміжному звіті за 2020 р.

Враховуючи, що розглядалися дві можливі конфігурації дефектної підсистеми та бралися до уваги загальні рекомбінаційні струми чи лише та їхня складова, яка пов'язана з рекомбінацією на дефектах, всього було отримано трохи більше 40 тис. ВАХ. Всі отримані вольт-амперні характеристики можна знайти за адресою <https://github.com/olegolikh/IVcharacteristics.git>.

1.3 Вплив параметрів n^+p-p^+ структури на величину фактору неідеальності

Останньою частиною підготовки розмічених даних для ГНМ було визначення величин фактору неідеальності для створеного набору ВАХ. Для цього була проведена апроксимація модельованих ВАХ відповідно до дво-діодної моделі сонячного елемента, для якої струм через структуру I та прикладена до неї напруга V пов'язані наступним чином [34,35]:

$$I = I_{01} \left[\exp \left(\frac{q(V - IR_s)}{kT} \right) - 1 \right] + I_{02} \left[\exp \left(\frac{q(V - IR_s)}{nkT} \right) - 1 \right] + \frac{(V - IR_s)}{R_{sh}}, \quad (1.13)$$

де

T – температура, К,

I_{01} та I_{02} – струми насичення, пов'язані з процесами рекомбінації у квазі-нейтральній області та в області просторового заряду (ОПЗ), відповідно, А,

n – фактор неідеальності;

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

Як видно з (1.13), 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 [36], для точного та стабільного оцінювання параметрів фотоелектричних перетворювачів в рамках різних моделей може бути використано покращений ІАУА оптимізаційний алгоритм. На відміну від більшості інших алгоритмів, які базуються на використанні популяцій розв'язків, ІАУА не передбачає застосування 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} . Розмір популяції (загальна кількість розв'язків) було вибрано 24 (величина, в чотири рази більша ніж збільшена на одиницю кількість невідомих параметрів [36]). Як цільова функція була використана відносна квадратична похибка

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

де сумування відбувається по точках ВАХ.

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} – $[10^{-15}, 10^{-4}]$ А, I_{02} – $[10^{-18}, 10^{-7}]$ А, R_S – $[10^{-5}, 10]$ Ом та R_{SH} – $[10^5, 10^{20}]$ Ом.

Метод ІАУА був реалізований з використанням мови програмування Delphi. Програму (як от відкомпільований варіант, так і вихідні файли Delphi-проєкту) можна знайти за посиланням <https://github.com/olegolikh/IVcharacteristics/tree/main/Progr>.

Використовуючи розроблену програму було апроксимовано більше 40 тис. попередньо симульованих ВАХ. Зауважимо, що, як показали розрахунки, для симульованих ВАХ можна знехтувати як впливом послідовного, так і шунтуючого опорів (отримані в результаті апроксимації значення для R_S менші 10^{-2} Ом, а для R_{SH} – більші 10^{18} Ом). Отримані значення фактору неідеальності разом зі значеннями товщини бази, рівня легування бази, концентрації домішкового заліза та температури, для яких розраховувалась відповідна характеристика, можна знайти за адресою <https://github.com/olegolikh/IVcharacteristics> у файлах CSV-формату.

Також було проведено аналіз впливу різних параметрів КСЕ на величину фактора неідеальності [37]. У представлених далі результатах використовуються наступні позначення для фактору неідеальності, отриманого для різних випадків: n_{Fe}^{SRH} – «Fe» випадок і врахування тільки ШРХ-рекомбінації, n_{Fe} – «Fe» випадок і всі рекомбінаційні механізми, $\delta n_{Fe}^{SRH} = n_{Fe}^{SRH} - n_{Fe}$ – величина, що характеризує вплив власної рекомбінації на фактор неідеальності; відповідні позначення для випадку «Fe-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 часткової асоціації пар $\delta n_{Fe-Fe-FeB} = n_{Fe} - n_{Fe-FeB}$.

На рис.1.3-1.5 зображено типові залежності фактору неідеальності від температури, концентрації домішкового заліза N_{Fe} та концентрації легуючої домішко бору N_B при різних значеннях товщини бази КСЕ d_p .

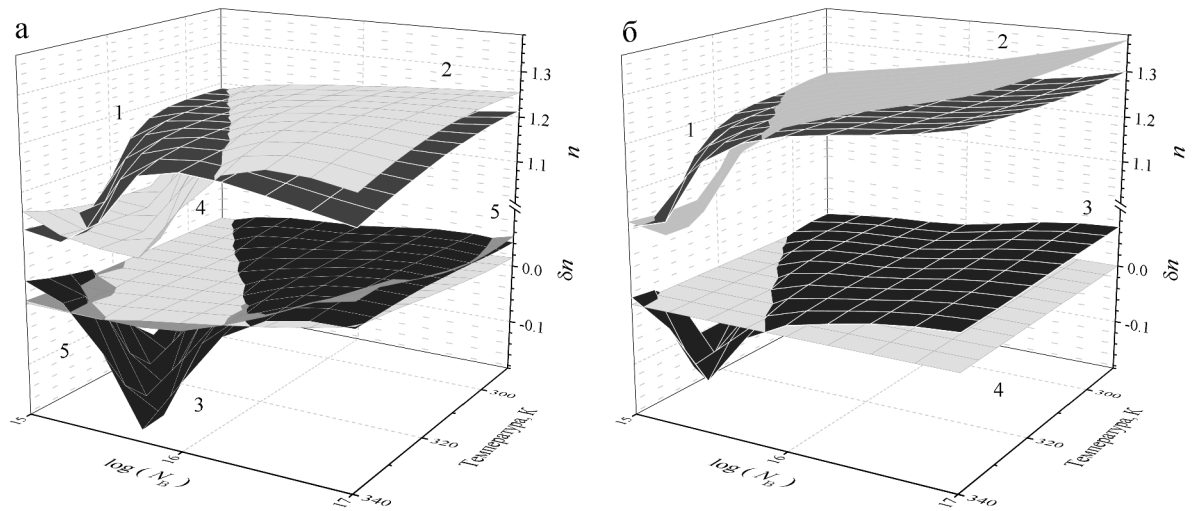


Рисунок 1.3 – Залежність фактору неідеальності від температури та концентрації бору. N_{Fe} , см^{-3} : 10^{10} (а), 10^{13} (б). $d_p=240$ мкм. Поверхня 1 – $n_{\text{Fe-FeB}}$, 2 – n_{Fe} , 3 – $\delta n_{\text{Fe-Fe-FeB}}$, 4 – $\delta n_{\text{Fe-FeB}}^{\text{SRH}}$, 5 – $\delta n_{\text{Fe}}^{\text{SRH}}$

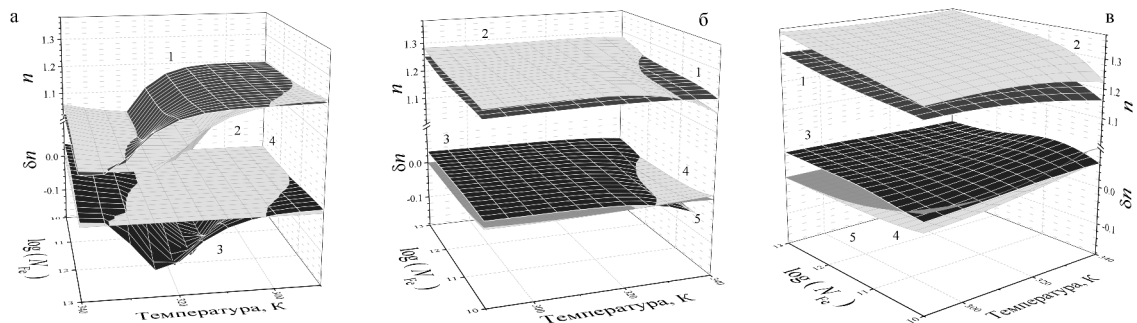


Рисунок 1.4 – Залежність фактору неідеальності від температури та концентрації заліза. N_{B} , см^{-3} : 10^{15} (а), 10^{16} (б), 10^{17} (в). $d_p=150$ мкм. Позначення поверхонь такі ж як на рис.1.3

Виявлено, що, по-перше, міжвузольні атоми заліза відіграють переважачу роль в рекомбінації навіть якщо в глибині КСЕ присутні як Fe_i , так і пари FeV . 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 Fe_i переважає концентрацію FeV в 2/3

товщини цієї області. Це підтверджується подібністю залежностей $n_{\text{Fe-FeB}}$ (поверхня 1) та n_{Fe} (поверхня 2) на рис.1.3-1.5. 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 Fe_i в квазі-нейтральній області складає 23 (або 3)% N_{Fe} при 340 К та $N_{\text{B}}=10^{15} \text{ см}^{-3}$ (або 10^{16} 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 $N_{\text{Fe}}=10^{11} \text{ см}^{-3}$.

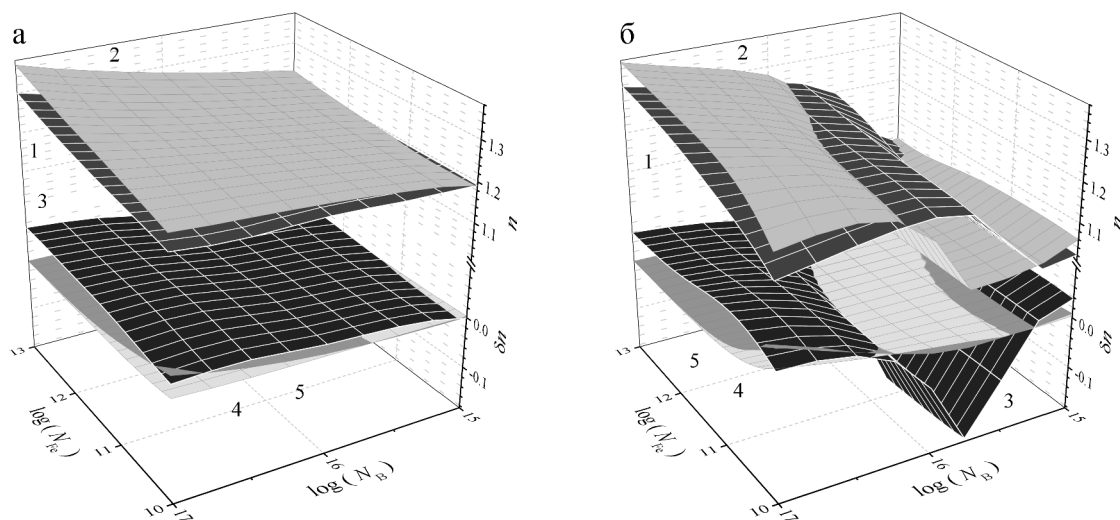


Рисунок 1.5 – Залежність фактору неідеальності від концентрацій заліза та бору. T , К: 290 (а), 340 (б). $d_p=180$ мкм.

Позначення поверхонь такі ж як на рис.1.3

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

1) Присутність дірки на рівні E_{Fe} , пов'язаному з Fe_i , яка визначає ефективність рекомбінації. Згідно зі статистикою Фермі-Дірака, ймовірність діркової заселеності f_p в невиродженому напівпровіднику p -типу в режимі виснаження акцептора може бути записана у вигляді

$$f_p = \frac{1}{1 + \frac{N_V}{N_B} \exp\left(\frac{E_V - E_{Fe}}{kT}\right)}. \quad (1.14)$$

Як було показано раніше [6], 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, слабо зростаючи зі зменшенням N_B - див.рис.1.4б,в, 1.5в. 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.1.3, 1.4а, 1.5б.

2) Співвідношення між власною рекомбінацією та рекомбінацією на дефектах. Рекомбінація ШРХ викликає збільшення фактору неідеальності. В свою чергу, власна рекомбінація підсилюється при збільшенні як концентрації вільних носіїв заряду, так і температури ([21,22], формули (1.5),(1.6)). В цьому випадку фактор неідеальності зменшується і величини δn_{Fe}^{SRH} та δn_{Fe-FeB}^{SRH} стають відмінними від нуля – див. рис.1.3а, 1.4б,в, 1.5.

Зміна концентрації заліза майже не впливає на характер залежностей n від інших параметрів. Проте зростання N_{Fe} супроводжується збільшенням величини n (див. рис.1.4, 1.5), яке є фактично лінійним відносно $\ln(N_{Fe})$. Відхилення спостерігаються лише у випадку, 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.1.5б,в.

Також виявлено залежність величини n від товщини бази n^+p-p^+ структури, яка для «Fe» та «Fe-FeB» випадків задовільно описується лінійною функцією:

$$n = n_0 - \beta d_p, \quad (1.15)$$

де

β – товщинний коефіцієнт, мкм^{-1} . Тобто, процеси у квазінейтральній області також впливають на фактор неідеальності. Виявлено, що максимальний вплив товщини спостерігається для середніх $1,05 < n < 1,25$ значень. Послаблення β при малих значеннях n пов'язано зі зменшенням відносного внеску рекомбінації ШРХ. В той же час, великі значення фактору неідеальності спостерігаються при значній концентрації заліза, що, в свою чергу викликає зменшення довжини дифузії електронів (L_n) в базі КСЕ. 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.1.3-1.5 також представлені залежності зміни фактора неідеальності після спарювання міжвузольного заліза – див. поверхні 3. Так як подібний процес має пригнічувати рекомбінацію ШРХ, то очікувалось, що для всіх значень параметрів мало б бути $\delta n_{\text{Fe-Fe-FeB}} > 0$. Проте, як видно з рис.1.4б, в та 1.5а спостерігається і протилежний ефект. В цьому випадку $\delta n_{\text{Fe-Fe-FeB}}$ збільшується при зростанні концентрації бору і практично не залежить від T та N_{Fe} . Випадок $n_{\text{Fe}} < n_{\text{Fe-FeB}}$ спостерігається в області зменшення фактору неідеальності, пов'язаного із заповненням рівня Fe_i . Можливою причиною цього могла б бути відмінність положення рівня Фермі для «Fe» та «Fe-FeB» випадків. Проте проведені розрахунки показали, що ця відмінність не перевищує $5 \cdot 10^{-6}$ еВ і тому не може бути причиною даного ефекту. В свою чергу, рис.1.6 представляє розраховані просторові розподіли рекомбінаційно активних (додатно заряджених) атомів заліза до та після спарювання. Очевидно, ступінь зменшення концентрації Fe_i^+ залежить від відстані до p - n переходу (розташованого при $x=0$). На нашу думку, саме зміна профілю N_{Fe^+} і 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_{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 ГНМ.

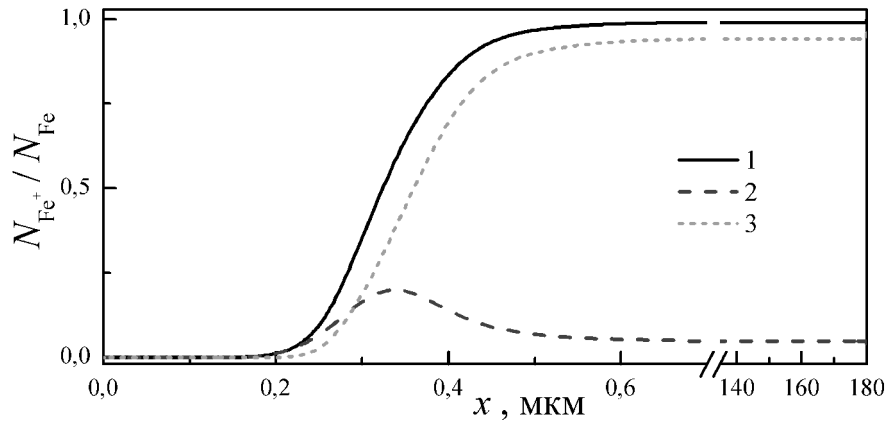


Рисунок 1.6 – Розподіл частки додатно заряджених атомів заліза в базі структури. Криві 1 та 2 відповідають «Fe» та «Fe-FeB» випадкам, відповідно; 3 – різниця між 1 та 2. $T=330$ К, $N_B=3,162 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $d_p=180$ мкм

1.4 Налаштування штучної нейронної мережі

Як вже зазначалося, одним із завдань проекту роботи було створення штучної нейронної мережі, здатної передбачити концентрацію домішкових атомів заліза в КСЕ, спираючись на вимірювання ВАХ (значення фактору неідеальності і температуру вимірювання) та параметри сонячного елементу (товщину та рівень легування бази). На попередніх етапах роботи були створені тренувальний набір даних, який складався з 7524 зразків, та декілька тестових: T-varied (894 зразка) , d-varied (1189 зразків), Fe-varied (856 зразків), B-varied (514 зразків) та All-varied (864 зразки). Відмінності наборів детально описані в підрозділі 1.2.

Загалом розглядалися два варіанти ГНМ [38]. В одному з них використовувалося лише значення фактору неідеальності для рівноважного стану КСЕ - $n_{\text{Fe-FeB}}$. Для позначення цієї мережі використовувалося позначення $\text{DNN}_{\text{FeFeB}}$. В другому варіанті до уваги бралися як величина $n_{\text{Fe-FeB}}$, так і n_{Fe}

(подальше позначення - $DNN_{FeFeB-Fe}$).

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 застосовувалася функція антилогарифмування.

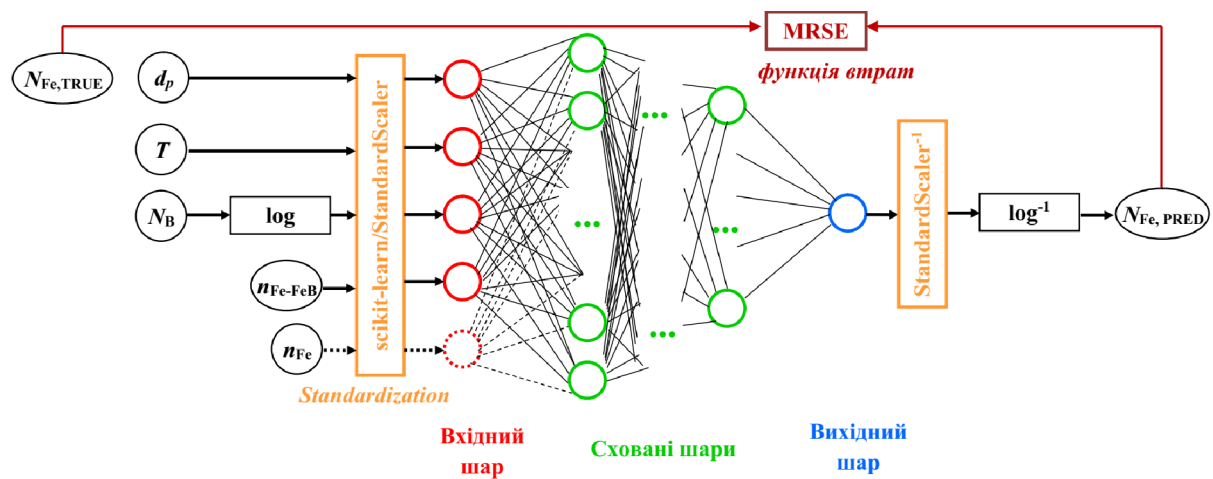


Рисунок 1.7 – Схема ГНМ для оцінки концентрації заліза

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

$$MRSE = \frac{1}{N_S} \sum_{i=1}^{N_S} \frac{(N_{Fe,TRUE,i} - N_{Fe,PRED,i})^2}{N_{Fe,TRUE,i} N_{Fe,PRED,i}}, \quad (1.16)$$

де

N_S – кількість зразків у тренувальному (тестовому) наборі,

$N_{Fe,TRUE,i}$ – істинна величина концентрації заліза для i -го зразка (та, яка використовувалась при моделюванні відповідної ВХХ),

$N_{Fe,PRED,i}$ – 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 схованих шарів та вибиралися оптимальні (раціональні) значення таких гіперпараметрів як кількість шарів (N_{HL}), кількість вузлів у першому схованому шарі (N_{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_{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 1.3.

Таблиця 1.3 – Початковий простір пошуку гіперпараметрів

Гіпер-параметр	Значення
N_{HL}	2÷16
N_{node}	5, 10, 20, 30, 40, 50, 75, 100, 125, 150, 175, 200, 250, 300, 500
BS	2, 4, 6, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 80, 100, 120, 140, 170, 200, 250, 300
ActF	ReLu, sigmoid, tanh, SELU, ELU
Opt	SGD, RMSprop, Adam, Adadelata, Adagrad, Adamax, Nadam, Ftrl
LR	0.01, $3,16 \cdot 10^{-3}$, 10^{-3} , $3,16 \cdot 10^{-4}$, 10^{-4} , $3,16 \cdot 10^{-5}$, 10^{-5}
N_{ep}	10, 20, 50, 75, 100, 200, 300, 500, 700, 900, 1100, 1300, 1500
PreM	StandartScaler, MinMaxScaler
RegF	None, L2, L1, Dropout
RR	10^{-5} , 10^{-4} , 10^{-3} , 10^{-2} , 10^{-1}
DR	0.2, 0.3, 0.4, 0.5
WI	Xavier Normal, Xavier Uniform, He Normal, He Uniform, Random Normal, Random Uniform, Ones

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.

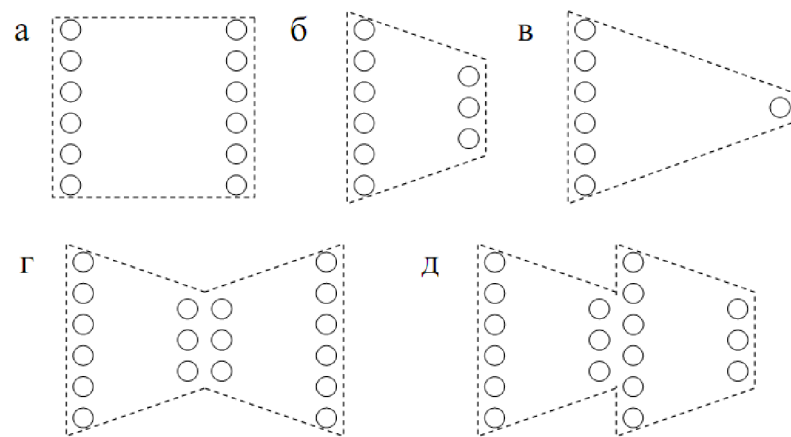


Рисунок 1.8 – Схеми конфігурації схованих шарів ГНМ, які розглядалися при налаштуванні. а – pipe; б – trapezium; в – triangle; г – butterfly; д – fir

Під час налаштування гіперпараметрів для кількісної характеристики 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 ґратковий пошук (grid search) раціональних значень. Пошук проводився для pipe-конфігурації. Це дозволяло обмежити простір гіперпараметрів по чергово по кожній з розмірностей.

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 1.4 представлені остаточні значення гіперпараметрів, оптимальні в нашому випадку.

Таблиця 1.4 – Вибрані в результаті налаштування значення гіперпараметрів

Мережа	DNN_{FeFeB}	$DNN_{FeFeB-FeB}$
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_{ep}	400	1500
PreM	StandartScaler	StandartScaler
RegF	None	None
WI	Xavier Normal	Xavier Normal

1.5 Навчання та тестування нейронних мереж за допомогою синтетичних даних

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 1.5. Як видно, мережа $DNN_{FeFeB-FeB}$ демонструє значно кращі прогностичні результати. Це стосується як абсолютного середнього значення MSRE на 10 наборах, так і середньоквадратичної похибки, яка також вказана в таблиці.

Таблиця 1.5 – Результати 10-кратної перехресної перевірки навчання ГНМ

Набір	MSRE	
Мережа	DNN_{FeFeB}	$DNN_{FeFeB-FeB}$
тренувальний	$0,31 \pm 0,07$	$0,03 \pm 0,01$
повний	$0,28 \pm 0,05$	$0,03 \pm 0,01$

Натреновані мережі були застосовані для передбачень на тестових наборах. Для оцінки якості використовувалися MSRE, коефіцієнт детермінації R^2 та коефіцієнт кореляції Пірсона R . Результати для DNN_{FeFeB} представлені на рис.1.9 та в таблиці 1.6. Видно, що в цьому випадку похибка для окремих зразків (тобто наборів $\{d_p, T, N_B, n_{Fe-FeB}\}$) може бути достатньо великою.

Таблиця 1.6 – Результати тестування навчених мереж на синтетичних тестових наборах

Набір	DNN_{FeFeB}			$DNN_{FeFeB-FeB}$		
	MSRE	R^2	R	MSRE	R^2	R
T-varied	0,41	0,936	0,967	0,020	0,994	0,997
d-varied	0,37	0,961	0,980	0,018	0,996	0,998
B-varied	1,06	0,881	0,939	0,084	0,991	0,995
Fe-varied	0,06	0,991	0,996	0,005	0,996	0,999
All-varied	0,54	0,813	0,901	0,138	0,948	0,974

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 $N_{Fe,TRUE,i}$ та $N_{Fe,PRED,i}$ 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.1.9а,б,г.

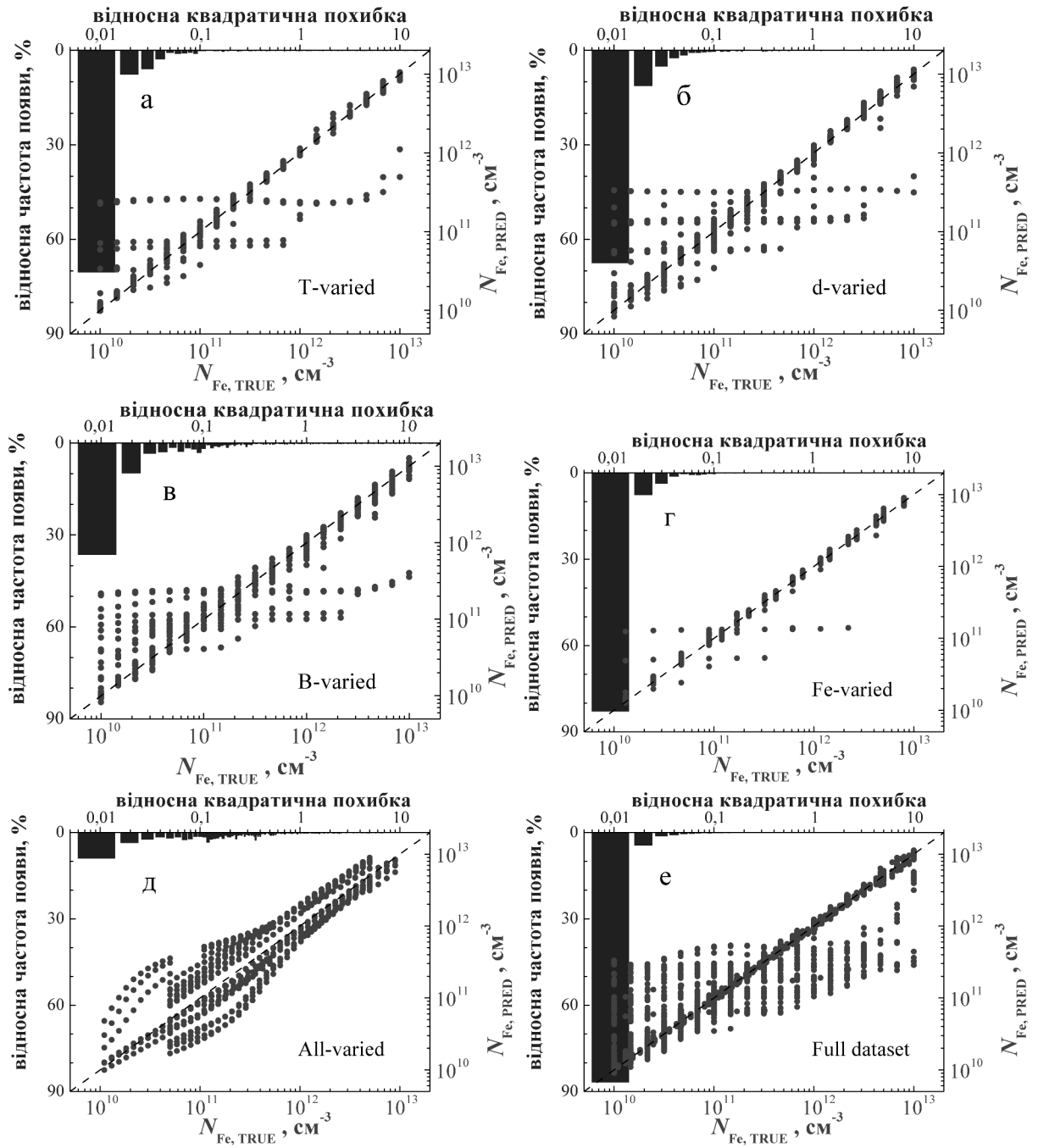


Рисунок 1.9 – Співвідношення передбачених мережею DNN_{FeFeB} та істинних значень концентрацій заліза для T-varied (а), d-varied (б), B-varied (в), Fe-varied (г), All-varied (д) тестових та повного (е) наборів (точки). Стовпці відображають гістограми SRE. ГНМ була навчена на тренувальному (а-д) або повному (е) наборах. Пунктирна лінія істинності наведена для зручності

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 ($SRE > 20$), що призвело до $MSRE = 1,06$. Для цього набору $SRE < 0,05$ для 54% зразків. Найбільш неточні прогнози цілком очікувано спостерігаються для All-varied тренувального набору: R^2 дорівнює всього 0,813, а SRE менша ніж 0,05 всього для 18% 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_{FeFeB} відносна квадратична похибка не перевищує 0,01 для 88% випадків.

Також були розглянуті залежності помилок прогнозування DNN від значень параметрів KCE – див. рис.1.10-1.13. На рисунках представлені дані для тренувального набору даних, результати для тестових подібні.

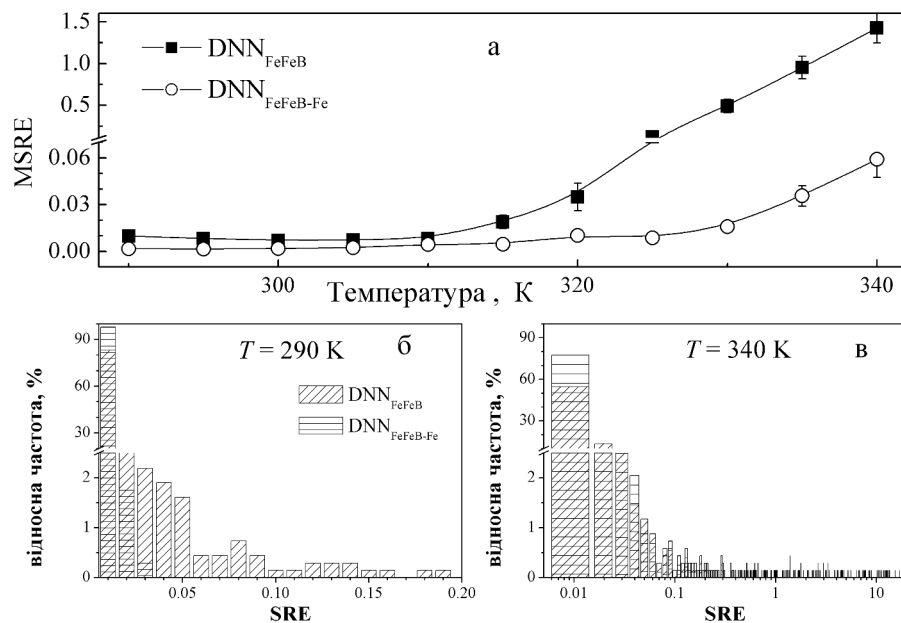


Рисунок 1.10 – Залежність $MSRE$ для тренувального навчання набору від температури (а). Гістограми частот появи SRE для $T = 290$ K (б) та $T = 340$ K (в). Похиле штрихування - DNN_{FeFeB} ; горизонтальне - $DNN_{FeFeB-Fe}$

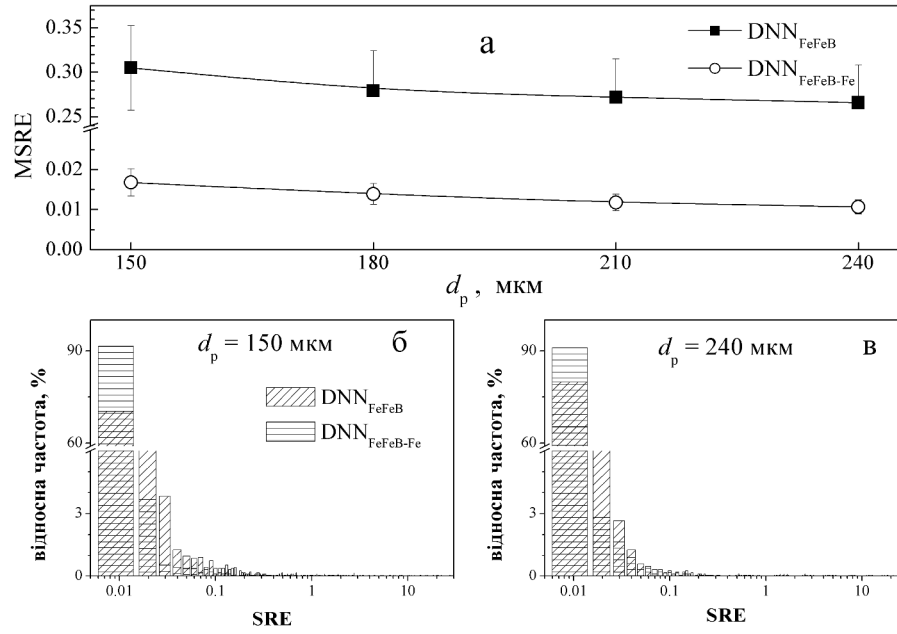


Рисунок 1.11 – Залежність MSRE для тренувального навчання набору від товщини бази (а). Гістограми частот появи SRE для $d_p = 150 \mu\text{m}$ (б) та $d_p = 240 \mu\text{m}$ (в). Похиле штрихування - $\text{DNN}_{\text{FeFeB}}$; горизонтальне - $\text{DNN}_{\text{FeFeB-Fe}}$

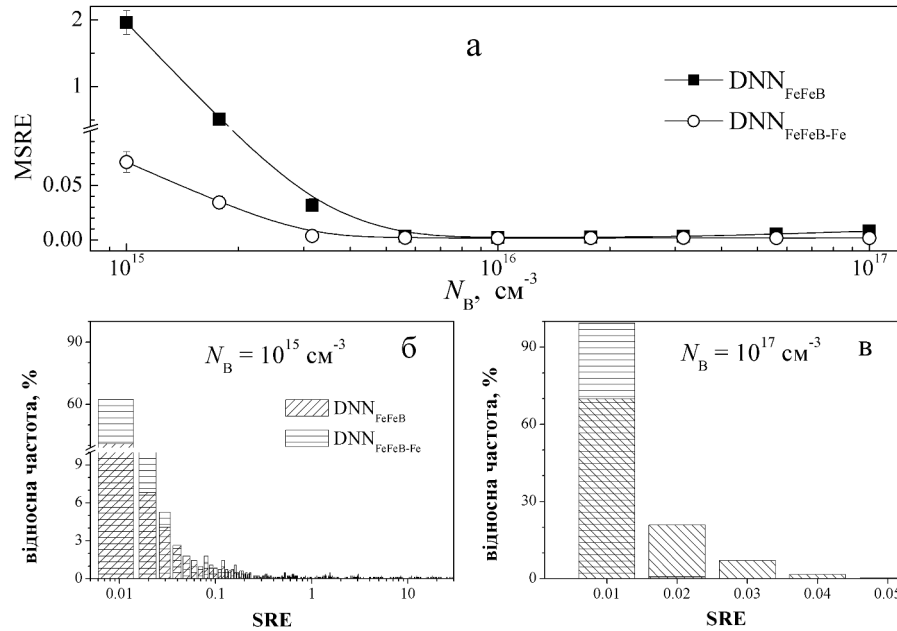


Рисунок 1.12 – Залежність MSRE для тренувального навчання набору від концентрації бору (а). Гістограми частот появи SRE для $N_B = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (б) та $N_B = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (в). Похиле штрихування - $\text{DNN}_{\text{FeFeB}}$; горизонтальне - $\text{DNN}_{\text{FeFeB-Fe}}$

Так з рис.10а видно, що для DNN_{FeFeB} значне збільшення значення помилки прогнозування спостерігається при $T > 320$ К. Так для температури 340 К максимальне значення SRE становить близько 20, а відсоток зразків, для яких значення SRE менше 0,01 становить всього 55% (див. рис.10в). В той же час для 290 К (рис.10б) відповідні величини дорівнюють 0,02 та 83%. Як було зазначено раніше, підвищення температури викликає збільшення впливу власної рекомбінації на величину фактору неідеальності. Як наслідок, вплив рекомбінації ШРХ на n послаблюється і прогностична здатність ГНМ падає.

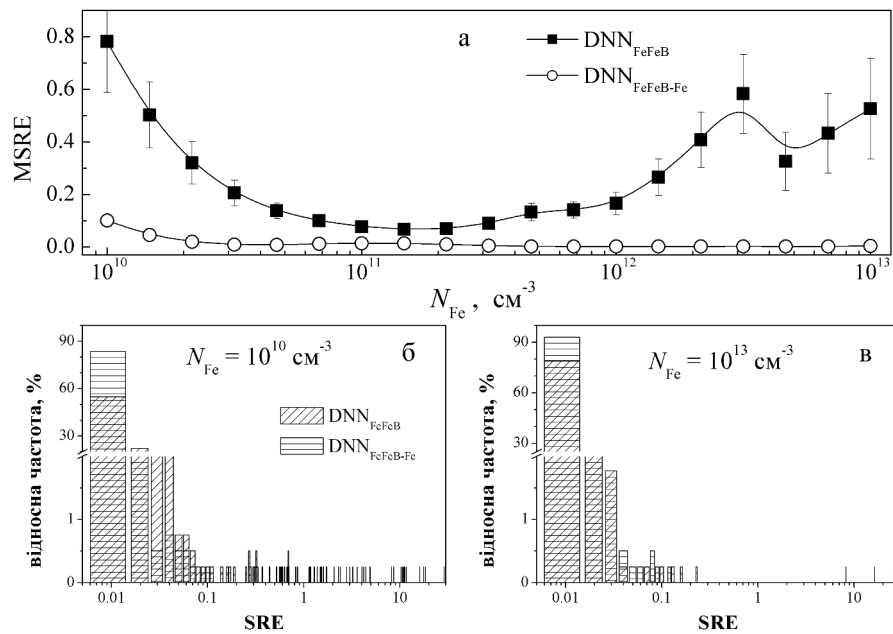


Рисунок 1.13 – Залежність MSRE для тренувального навчання набору від концентрації заліза (а). Гістограми частот появи SRE для $N_{Fe} = 10^{10} cm^{-3}$ (б) та $N_{Fe} = 10^{13} cm^{-3}$ (в). Похиле штрихування - DNN_{FeFeB} ; горизонтальне - $DNN_{FeFeB-Fe}$

Як показано на рис.11, товщина бази КСЕ практично не впливає на помилки прогнозування (як на середнє значення SRE, так і на відносну частоту, з якою зустрічається помилка певної величини). Проте, як вже було зазначено раніше (див. підрозділ 1.3, формулу (1.15)), значення коефіцієнта неідеальності залежить від товщини бази і тому d_p є важливим параметром під час навчання ГНМ.

Похибка прогнозування різко зростає зі зменшенням рівня легування - див. рис. 12а. Так, максимальне значення SRE становить приблизно 0,05 для $N_B = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ (рис.12в), тоді як для $N_B = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ відносна квадратична похибка у квадраті менше 0,05 лише для 56% зразків (рис.12б). Як впливає з формули (1.14) зменшення N_B підвищує ймовірність заповнення електроном рівня, пов'язаного з міжвузольним залізом, що спричинює різке зменшення впливу рекомбінації за участю рівня даного дефекту на величину фактору неідеальності, що і пояснює виявлене послаблення точності прогнозу ГНМ. Додатковою причиною є описане в підрозділі 1.3 загальне зменшення впливу домішок на n при низьких рівнях легування (рис.1.5). Зауважимо, що заповнення рівня Fe_i може бути додатковою причиною збільшення помилок передбачень при зростанні температури.

З рис.13а видно, що MSRE зростає як при малих, так і при великих концентраціях заліза. Перша область поганих передбачень є цілком прогнозованою, друга – достатньо несподіваною. Проте, як видно з рис.13в, зростання MSRE при $N_{Fe} = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ пов'язане насамперед з існуванням всього декількох зразків з дійсно великим (декілька десятків) значенням SRE.

На нашу думку, не достатньо високі прогностичні можливості DNN_{FeFeB} викликані фундаментальною неможливістю точно передбачити концентрацію заліза через неоднозначність зв'язку n_{Fe-FeB} та N_{Fe} – див. підрозділ 1.3. Збільшення кількості вхідних параметрів само по собі має підвищити можливості ГНМ, але в нашому випадку розгляд ще одного значення фактору неідеальності (n_{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 $DNN_{FeFeB-FeB}$ представлені на рис.1.14 та в таблицях 1.5 та 1.6. 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-

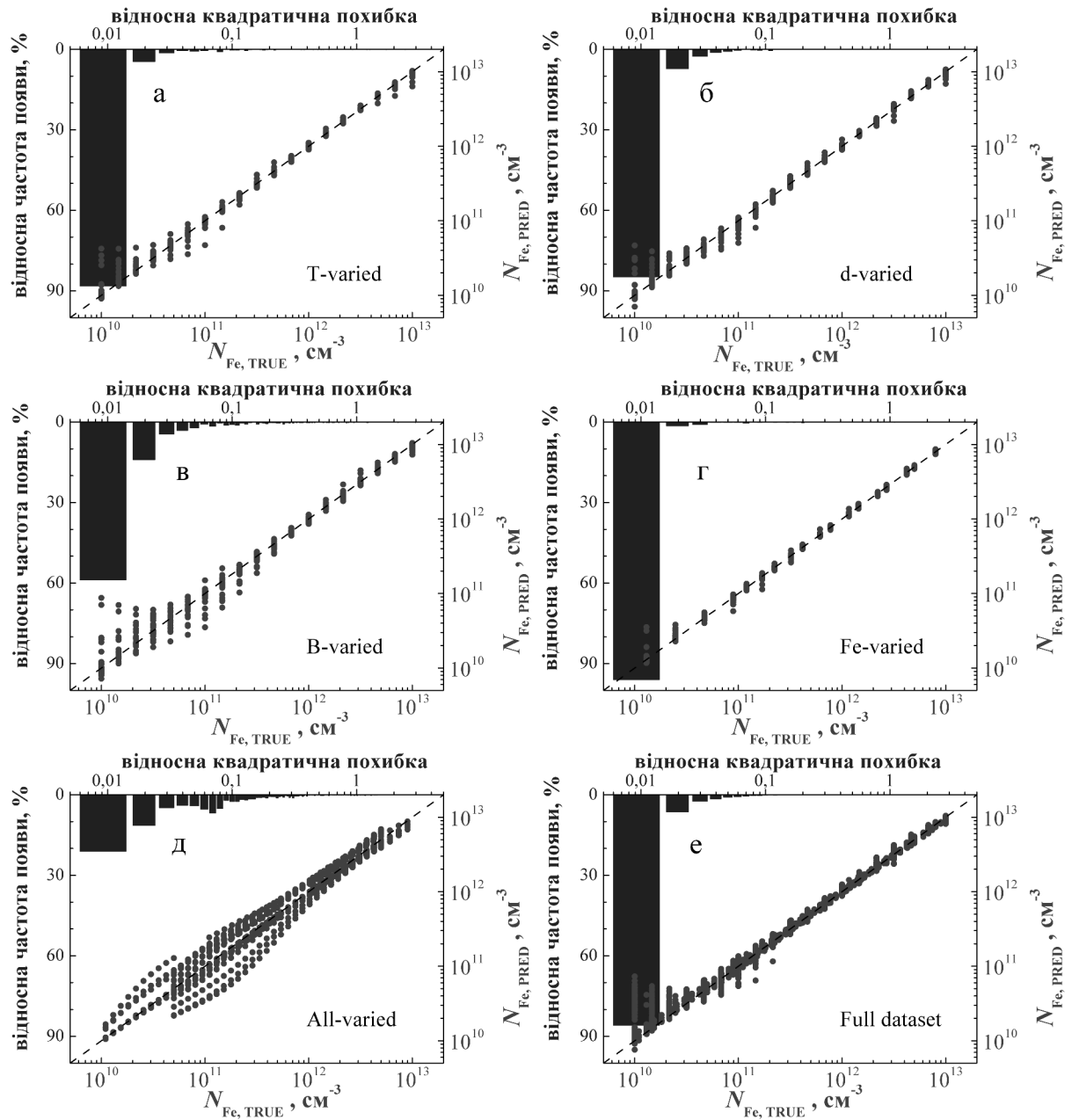


Рисунок 1.14 – Співвідношення передбачених мережею $DNN_{FeFeB-FeB}$ та істинних значень концентрацій заліза для T-varied (а), d-varied (б), B-varied (в), Fe-varied (г), All-varied (д) тестових та повного (е) наборів (точки). Столпці відображають гістограми SRE. ГНМ була навчена на тренувальному (а-д) або повному (е) наборах. Пунктирна лінія істинності наведена для зручності

varied набору складає всього 0,138, так і розкиду передбачень для окремих зразків (рис.1.10-1.14): так максимальна величина SRE не перевищує 1 навіть для All-varied набору і SRE менше 0,02 для 93%, 92%, 73% та 97%

зразків для наборів T-varied, d-varied, B-varied та Fe-varied, відповідно. Також звертають на себе уваги значення коефіцієнтів детермінації (0,999) та кореляції (0,999) для Fe-varied тестового набору.

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. Крім того, підвищення температури (рис.1.10), зменшення рівня легування (рис.1.12) та концентрації заліза (рис.1.13) призводять до зростання похибки передбачення. Проте, на відміну від DNN_{FeFeB} , при збільшенні N_{Fe} похибка не зростає і діапазон отриманих значень SRE при $N_{Fe} = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ більш вузький, ніж у випадку $N_{Fe} = 10^{10} \text{ см}^{-3}$ – див. рис.1.13б,в.

Відомо [39], 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 1.5 та на рис.1.9е і 1.14е. 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>.

1.6 Тестування нейронних мереж на експериментально вимірних ВАХ

Здатність ГНМ передбачати концентрацію заліза була також протестована на реальних КСЕ. Детальніше зразки описані у підрозділі 2.1, проте тут зауважимо, що це були кремнієві $n^+p\text{-}p^+$ структури, виготовлені з Cz-

пластин, легованих бором з питомим опором $10 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ ($N_B = 1,4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$). Емітерний n^+ шар мав товщину $0,7 \text{ мкм}$ та поверхневий опір $20\text{-}30 \text{ Ом}/\square$, товщина бази – 350 мкм , товщина та поверхневий опір p^+ шару – $0,6 \text{ мкм}$ та $10\text{-}20 \text{ Ом}/\square$. Концентрація заліза в базі КСЕ $N_{\text{Fe,MEAS}}$ була визначена шляхом вивчення кінетики зміни величини струму короткого замикання при монохроматичного освітлення після дисоціації пар [40] – метод описано в підрозділі 2.2. Для тестування було використано два зразки, #320 та #349, значення $N_{\text{Fe,MEAS}}$ для яких становило $(2,0 \pm 0,4) \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ та $(6,7 \pm 0,7) \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, відповідно.

Як видно з наведених даних, перед ГНМ була поставлено достатньо важка задача, складність якої пов'язана певною відмінністю параметрів реальних структур, та тих, які були використані під час симуляції. Проте головним критерієм вибору саме цих зразків була необхідність того, щоб рекомбінація ШРХ визначалась саме дефектами, пов'язаними із залізом.

Темнові ВАХ вказаних структур були виміряні при температурах 300 , 320 та 340 К . Вимірювання були проведені як після витримки зразків в темряві на протязі 48 год при кімнатній температурі (випадок «Fe-FeB»), так і безпосередньо після інтенсивного освітлення КСЕ галогеновою лампою (випадок «Fe»). Після цього була проведена апроксимація виміряних ВАХ відповідно до формули (1.13) та визначено параметри, зокрема n , R_S , R_{SH} . Типові результати вимірювання та апроксимації наведено на рис.1.15 та в таблиці 1.7. Варто зауважити, що для експериментальних ВАХ, на відміну від синтетичних, не можна знехтувати впливом послідовного та шунтуючого опорів (величина R_S становила близько 3 та 6 Ом для зразків #320 та #349, відповідно, значення R_{SH} наведено в таблиці 1.7).

Значення фактору неідеальності, визначені з експериментальних ВАХ, та параметри зразків були використані як вхідні дані для попередньо натренованих на синтетичних даних (лише на тренувальному наборі чи на повному наборі розмічених даних) DNN_{FeFeB} та $DNN_{\text{FeFeB-FeB}}$. Результати

передбачень зведені в таблиці 1.7.

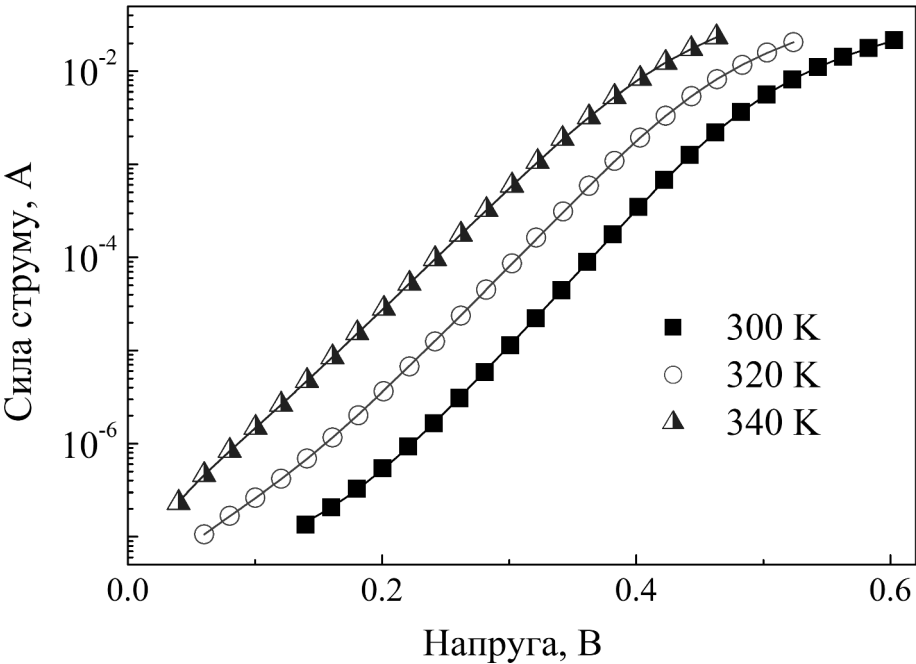


Рисунок 1.15 – Вольт-амперні характеристики зразка #320_1, виміряні при температурах 300, 320 та 340 К. Точки – експеримент, лінії – апроксимація відповідно до (1.13)

Таблиця 1.7 – Результати апроксимації експериментальних ВАХ та тестування передбачень щодо вмісту заліза за допомогою ГНМ

Зразок	$N_{\text{Fe,MEAS}}, 10^{12} \text{ см}^{-3}$	$T, \text{ К}$	$n_{\text{Fe-FeB}}$	$R_{\text{SH, Fe-FeB}}, \text{ Ом}$	n_{Fe}	$R_{\text{SH, Fe}}, \text{ Ом}$	$N_{\text{Fe,PRED}}, 10^{12} \text{ см}^{-3}$			
							$\text{DNN}_{\text{FeFeB}}$		$\text{DNN}_{\text{FeFeB-FeB}}$	
							трен	повн	трен	повн
#320	$2,0 \pm 0,4$	300	1,214	$1,6 \cdot 10^6$	1,195	$1,4 \cdot 10^6$	3,9	2,8	3,0	2,0
		320	1,204	$8,6 \cdot 10^5$	1,148	$8,0 \cdot 10^5$	6,6	1,9	16	19
		340	1,118	$4,3 \cdot 10^5$	1,111	$4,3 \cdot 10^5$	3,8	1,2	89	574
#349	$6,7 \pm 0,7$	300	1,223	$2,9 \cdot 10^6$	1,222	$2,6 \cdot 10^6$	8,9	5,6	15	11
		320	1,183	$1,7 \cdot 10^6$	1,182	$1,7 \cdot 10^6$	1,2	0,4	10	32
		340	1,138	$1,3 \cdot 10^6$	1,173	$1,3 \cdot 10^6$	9,8	1,7	26	411

Аналізуючи отримані результати, щонайперше зауважимо, що незважаючи на те, що використана модель не було надзвичайно складною, точність передбачень навіть перевищила очікувану. Особливо це стосується DNN_{FeFeB} , прогнози якої щодо концентрації заліза відрізнялися лише в декілька разів від вимірних значень. А у випадку застосування DNN_{FeFeB} , тренованої на повному наборі, до #320, помилка прогнозу взагалі не перевищує 40%.

Також зауважимо, що результати для реальних ВАХ підтверджують тенденції, виявлені при роботі з синтетичними ВАХ. Зокрема, точність прогнозу падає при температурах, вищих 320 К та концентраціях заліза, близьких до верхньої межі (10^{13} см^{-3}) використаного діапазону. Це повністю збігається з даними на рис.1.10а та рис.1.13а, відповідно. Крім того, значення рівня легування бази реальних КСЕ ($N_B = 1,4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$) не використовувалося при створенні тренувального набору розмічених даних, проте зустрічалося в *V-varried* наборі (а отже, і в повному). З таблиці 1.7 видно, що передбачення DNN_{FeFeB} , тренованої на повному наборі, кращі ніж у випадку використання лише тренувального набору, особливо для #320. Ця особливість підтверджує зроблений раніше висновок про важливість тренування ГНМ з тими значеннями N_B , які очікуються у об'єктах майбутніх досліджень.

З іншого боку, всупереч очікуванням, $DNN_{FeFeB-FeB}$ продемонструвала гірші результати ніж DNN_{FeFeB} в більшості випадків. Причин для цього може бути декілька. По-перше, використання двох значень фактору неідеальності підсилює вплив спрощень, використаних під час симуляції (наприклад, вплив неврахованих під час моделювання процесів, що викликають появу послідовного та шунтуючого опорів). По-друге, точне визначення n_{Fe} є більш складною задачею з експериментальної точки зору, ніж n_{Fe-FeB} . Наприклад, в нашому випадку вимірювання ВАХ після інтенсивного освітлення потребувало близько 100 с. Цей проміжок був необхідний для встановлення температури зразка після нагріву, індукованого освітленням, а також для безпосереднього вимірювання значень струму та напруги. Відповідно до [41,42],

характеристичний час асоціації пари FeB при $T = 340$ К та $N_B = 1,4 \cdot 10^{15}$ см⁻³ становить близько 600 с. А отже, не можна очікувати, що визначене при такій температурі значення фактору неідеальності відповідає саме випадку повної дисоціації пар FeB. Таким чином, незважаючи на потенційно вищу точність прогнозів мережі $DNN_{FeFeB-FeB}$, показано в попередньому підрозділі, практичне застосування такого підходу є більш ускладненим.

Загалом, отримані результати підтверджують можливість оцінки концентрації домішкового заліза (або інших електрично активних дефектів) за величиною фактору неідеальності.

Запропонований підхід передбачає використання простого та широко поширеного обладнання і не потребує багато часу. Проте зауважимо, що так як наше дослідження було спрямоване на розробку засад експрес-методу кількісної оцінки електрично-активних дефектів у бар'єрних структурах, було розглянуто спрощений випадок. На нашу думку, існує два основні напрямки покращення методу. Один із них пов'язаний з використанням більш якісного набору розмічених даних для тренування ГНМ. Такий набір може бути отриманий або шляхом використання 3D симуляторів бар'єрних структур (наприклад SILVACO TCAD) або завдяки експериментальним вимірюванням ВАХ на широкому наборі реальних КСЕ. Другий шлях пов'язаний з покращенням функціонування ГПМ і в цьому випадку найбільш перспективним видається використання підходу донавчання. Наприклад, набір небагато численний параметрів структур та результатів вимірювань (в нашому випадку - d_p , T , N_B , n_{Fe-FeB}) може бути мультипліковано і перетворено на картинку. Після цього для розпізнавання можуть бути використані вже готові (навчені, оптимізовані) ГНМ, орієнтовані на розпізнавання зображень (наприклад, VGG16).

1.7 Основні результати розділу 1

1. Розроблена розрахункова модель кремнієвої $n^+p\text{-}p^+$ структури з врахуванням реальних величин і температурних залежностей параметрів кристалів кремнію та рекомбінаційних центрів, пов'язаних з домішковими атомами заліза.

2. За допомогою програмного пакету SCAPS 3.3.08 та розробленого програмного забезпечення проведено моделювання більше 40 тис. вольт-амперних характеристик кремнієвих $n^+p\text{-}p^+$ структур з різною товщиною бази ($150\div 240$ мкм) та ступенем її легування ($10^{15}\div 10^{17}$ см⁻³) для температурного діапазону $290\div 340$ К при варіації концентрації домішкового заліза в інтервалі $10^{10}\div 10^{13}$ см⁻³; враховано можливість перебування домішкових атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари FeB; визначені відповідні значення фактору неідеальності.

3. Показано, що залежність фактору неідеальності від температури та рівня легування переважно пов'язані з ймовірністю наявності дірки на рині міжвузольного заліза. Виявлено, величина фактору неідеальності монотонно залежить від концентрації домішкового заліза, а також визначається його просторовим розташуванням в КСЕ. Виявлено залежність фактору неідеальності від товщини бази структури $n^+p\text{-}p^+$ у випадку, якщо вона переважає довжину дифузії неосновних носіїв заряду.

4. Проведено налаштування гіперпараметрів глибоких нейронних мереж для передбачення концентрації домішкового заліза в КСЕ (раціональні значення параметрів зведено у таблиці 1.4), а також їхнє навчання з використанням синтетичних даних.

5. Шляхом тестування роботи ГНМ на синтетичних та експериментальних даних, показана можливість визначення концентрації електрично-активних центрів (на прикладі заліза) у кремнієвих сонячних елементах за величиною фактора неідеальності.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

- 1 Explanation of High Solar Cell Diode Factors by Nonuniform Contact Resistance / A. S. H. van der Heide, A. Schonecker, J. H. Bultman, W. C. Sinke // Progress in Photovoltaics: Research and Applications. — 2005. — Vol. 13. — P. 3–16.
- 2 Relationship Between the Diode Ideality Factor and the Carrier Recombination Resistance in Organic Solar Cells / L. Duan, H. Yi, C. Xu et al. // IEEE Journal of Photovoltaics. — 2018. — Vol. 8. — P. 1701–1709.
- 3 Electrical characterization of GaN Schottky barrier diode at cryogenic temperatures / J. Chen, M. Zhu, X. Lu, X. Zou // Appl. Phys. Lett. — 2020. — Vol. 116 — P. 062102.
- 4 Dalapati, P. Analysis of the Temperature Dependence of Diode Ideality Factor in InGaN-Based UV-A Light-Emitting Diode / P. Dalapati, N.B. Manik, A.N. Basu // Semiconductors. — 2020. — Vol. 54. — P. 1284–1289.
- 5 Identifying Dominant Recombination Mechanisms in Perovskite Solar Cells by Measuring the Transient Ideality Factor / P. Calado, D. Burkitt, J. Yao et al. // Phys. Rev. Applied. — 2019. — Vol. 11. — P. 044005.
- 6 Olikh, O.Ya. Relationship between the ideality factor and the iron concentration in silicon solar cells / O.Ya. Olikh // Superlattices Microstruct. — 2019. — Vol. 136. — P. 106309.
- 7 Ju, S. Designing thermal functional materials by coupling thermal transport calculations and machine learning / S. Ju, S. Shimizu, J. Shiomi // J. Appl. Phys. — 2020. — Vol. 128. — P. 161102.
- 8 Rodrigues, S. Machine learning PV system performance analyser / S. Rodrigues, H. G. Ramos, F. Morgado-Dias // Prog. Photovoltaics Res. Appl. — 2018. — Vol. 26. — P. 675–687.

- 9 Machine learning and the physical sciences / G. Carleo, I. Cirac, K. Cranmer et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 2019. — Vol. 91. — P. 045002.
- 10 Pathways for solar photovoltaics / J. Jean, P.R. Brown, R.L. Jaffe et al. // *Energy Environ Sci.* — 2015. — Vol. 8. — P. 1200–1219.
- 11 A review of photovoltaic performance of organic/inorganic solar cells for future renewable and sustainable energy technologies / J. Ajayan, D. Nirmal, P. Mohankumar et al. // *Superlattices Microstruct.* — 2020. — Vol. 143. — P. 106549.
- 12 Numerical simulations of multilevel impurity photovoltaic effect in the sulfur doped crystalline silicon / E.T. Hu, G.Q. Yue, R.J. Zhang et al. // *Renewable Energy.* — 2015. — Vol. 77. — P. 442–446.
- 13 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.
- 14 Iron related solar cell instability: Imaging analysis and impact on cell performance / M.C. Schubert, M. Padilla, B. Michl et al. // *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* — 2015. — Vol. 138. — P. 96–101.
- 15 Passler R. Dispersion-related description of temperature dependencies of band gaps in semiconductors / R. Passler // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 66. — P. 085201.
- 16 Yan D. Empirical determination of the energy band gap narrowing in p⁺ silicon heavily doped with boron / D. Yan, A. Cuevas // *Phys. Rev. B.* — 2014. — Vol. 116. — P. 194505.
- 17 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.

- 18 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.
- 19 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
- 20 O'Mara W.C. Handbook of semiconductor silicon technology / W.C. O'Mara, R.B. Herring, L.P. Hant. – New Jersey, USA: Noyes Publications, 1990. – 795 p.
- 21 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.
- 22 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.
- 23 Geerligs, L. J. Dynamics of light-induced FeB pair dissociation in crystalline silicon / L. J. Geerligs, Daniel Macdonald // *Appl. Phys. Lett.* — 2004.— Vol. 85. — P. 5227–5229.
- 24 Zoth, G. A fast, preparation-free method to detect irpn in silicon / G. Zoth, W. Bergholz // *J. Appl. Phys.* — 1990. — Vol. 67. — P. 6764–6771.
- 25 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.
- 26 Wijaranakula, W. The Reaction Kinetics of Iron–Boron Pair Formation and Dissociation in P–Type Silicon / W. Wijaranakula // *J. Electrochem. Soc.* — 1993. — Vol. 140. — P. 275–281.

- 27 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.
- 28 Burgelman M. Modelling polycrystalline semiconductor solar cells / M. Burgelman, P. Nollet, S. Degraeve // *Thin Solid Films.* — 2000. — Vol. 361-362. — P. 527-532.
- 29 Modeling the effect of 1 MeV electron irradiation on the performance of n⁺-p-p⁺ silicon space solar cells / A. Hamache, N. Sengouga, A. Meftah, M. Henin // *Radiat. Phys. Chem.* — 2016. — Vol. 123. — P. 103–108.
- 30 Azzouzi G. Improving silicon solar cell efficiency by using the impurity photovoltaic effect / G. Azzouzi, W. Tazibt // *Energy Procedia.* — 2013. — Vol. 41. — P. 40–49.
- 31 Study of the reverse saturation current and series resistance of p-p-n perovskite solar cells using the single and double-diode models / M.A. Cappelletti, G.A. Casas, A.P. Cedola et al. // *Superlattices Microstruct.* — 2018. — Vol. 123. — P. 338-348.
- 32 Sinke W.C. Development of photovoltaic technologies for global impact / W.C. Sinke // *Renewable Energy.* — 2019. — Vol. 138. — P. 911-914.
- 33 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.
- 34 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.
- 35 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.
- 36 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.
 - 37 Olikh, O. Ya. Modeling of ideality factor value in n^+-p-p^+-Si structure / O. Ya. Olikh, O. V. Zavhorodnii // Journal of Physical Studies. — 2020. — Vol. 24. — P. 4701-1-4701-8.
 - 38 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.
 - 39 Chollet, F. Deep Learning with Python / F. Chollet. — Second edition. — Manning, 2017. — 361 c.
 - 40 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<P 2021. Book of Abstracts. Kharkiv, Ukraine. — Kharkiv: 2021. — P. 191.
 - 41 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.
 - 42 Dissociation and Formation Kinetics of Iron–Boron Pairs in Silicon after Phosphorus Implantation Gettering / N. Khelifati, H.S. Laine, V. Vahanissi et al. // Phys Status Solidi A. — 2019. — Vol. 216. — P. 1900253.