

**Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”**

Детальний зміст проєкту

Назва проєкту

Розробка фізичних засад акусто-керованої модифікації та машинно-орієнтованої характеристики кремнієвих сонячних елементів

Development of physical base of both acoustically controlled modification and machine learning-oriented characterization for silicon solar cells

Науковий керівник проєкту

Оліх Олег Ярославович, доктор фіз.-мат. наук, доцент

Olikh Oleg Yaroslavovych, doctor of science (physics and mathematics), associate professor

3. Детальний зміст проєкту (українською та англійською мовами)

3.1 Сучасний стан проблеми (до 2 сторінок)

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

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

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

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

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

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

фізики. Це дозволяє сподіватись на можливість реалізації вказаного методу характеристики сонячних елементів з використанням подібних підходів.

The renewable energy is vital for modern civilization. The direct conversion of solar radiation into electricity plays a special role among various renewable energy technologies. Firstly this approach singularity is deals with ability to meet the energy needs of without chemical and thermal pollution of the environment. Besides the energy generation can directly occur in immediate proximity to consumption. As a result nowadays the solar photovoltaics are the fastest-growing energy technology in the world.

Silicon solar cells (SSCs) are used to produce more than 90% of about 550 GW of energy, which is currently produced by photovoltaic converters. The amorphous, polycrystalline or crystalline silicon is used to such system creation and a last material's portion is about 40%. Similarly to case of other semiconductor devices, the defect subsystem in general and impurity composition in particular determine the SSC properties predominantly. It should be noted that in purpose to reduce the final cost the low purity crystals are used to SSC manufacturing. So one of the most common as well as the most harmful impurities are atoms of iron and other transition metals. A lot of scientists' efforts are aimed at a developing and a technological implementing of methods, which must to provide a deactivation of such defects by gettering in particular. But the efficiency of real solar cells is far from the theoretical limit. Therefore it is evident that the issues of understanding the defect behavior and driving of defect state are fundamental to improve the devices performance.

The irradiation and annealing are the well-known methods of semiconductor structure properties driving by activation/deactivation of technologically functional defects. However they affect the whole crystal as well. Another way of defective subsystem modification is the excitation of elastic oscillations in a crystal. In particular, the acoustic waves in non-piezoelectric materials are shown to be able to cause redistribution of impurities and point defects rebuilding. Moreover, this method affect a defect regions selectively and is realized at room temperature. In addition, the ultrasonic loading is shown to be effective additional factor of influence during technological operations, for example, during ion implantation. On the other hand the available information is insufficient to form a holistic view of the acousto-defective interaction in semiconductor crystals and in silicon in particular. As a result, the possibilities of active ultrasound are not used during solar cell manufacturing, unlike to many other technological processes.

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

Non-destructive methods of estimation of the concentration of impurities (including transition metals) in semiconductor crystals and structures, in particular solar cells, are important from an applied point of view. To date, a not little collection of direct methods (an infrared tomography, an electron-paramagnetic resonance, a non-stationary spectroscopy, etc.) as well as indirect methods (a surface photovoltage, a minority carrier lifetime measurements) has been developed to solve this problem. But almost all of them require either special sample preparing or specialized equipment. At the same time, the current-voltage curve (IVC) measurement is a widespread method of solar cell characterization and allows to determine such fundamental SC parameters as efficiency, open-circuit voltage, and short-circuit current. Evidently these parameters in particular and the processes of carrier propagation in general depend on electrically active defects presence; therefore there is a possibility in principle to determine the defect concentration by IVC shape. One of the main obstacles of such a convenient and express method developing is the multiparameter relationship between the concentration of recombination centers and IVC characteristics, which are determined by experimental curves fitting. However, in the last decade, deep learning, which are enable to solve problems without clear algorithmization, have been successfully used in various fields of theoretical and applied physics. This gives hope for an real implementation of aforesaid SC characterization method with deep learning approaches using.

3.2 Новизна проєкту (до 1 сторінки)

Перша частина проєкту пов'язана з експериментальним встановленням закономірностей динамічних акусто-індукованих ефектів у КСЕ. На відміну від численних попередніх досліджень, у яких акустичні хвилі використовувались як одноосібний інструмент незворотної модифікації неп'єзоелектричної напівпровідникової системи шляхом виведення її зі стабільного (метастабільного) стану, даний проєкт передбачає з'ясування фізичних особливостей та механізмів впливу ультразвукового навантаження на процеси перебування дефектних комплексів, ініційовані іншим активаційним чинником (освітленням) чи викликані прагненням системи повернутися до стану термодинамічної рівноваги. Тобто, проєкт орієнтований на розробку фізичних основ методу, що базується на використанні комплексних процесів, де ультразвуку відведена роль додаткового чинника та певного коректуючого фактору. Крім того, новизна проєкту пов'язана з вибором об'єкту для вивчення акустичної активності, а саме, домішок атомів перехідних металів та комплексів за їхньою участю у монокристалічному кремнії.

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

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

The first part of the project deals with the experimental establishment of regularities of dynamic acoustically induced effects in SSCs. Unlike to numerous previous studies, where acoustic waves were used as an exclusive tool of irreversible modification of a non-piezoelectric semiconductor by disturbing from a stable (metastable) state, this project is focused on the ascertaining physical features and mechanisms of ultrasound loading influence on the complex point defect rebuilding, which is initiated by another activating factor (lighting) or is caused by the system aspiration for a thermodynamic equilibrium state. That is, the project concentrates effort on the development of the physical principles of the complex method, where ultrasound is regarded as an additional and adjustment factor. In addition, the project novelty is defined by the object of a study of acoustic activity, namely, transition metal atoms and complexes, which involve these atoms, in monocrystalline silicon.

The second part of the project is aimed at developing a new express method of estimating of the recombination centers concentration, which is a simple complement of the standard procedure of SSCs characterization by using IVC. The proposed approach involves a number of new approaches, in particular, the exploitation of the ideality factor value as a quantitative indicator of the recombination centers concentration and the using of deep learning to establish the relationship between aforesaid parameters.

3.3 Методологія дослідження (до 2 сторінок)

Експериментальна частина проєкту має на меті встановити фізичні закономірності та механізми впливу акустичних хвиль на процес перебудови дефектних комплексів, пов'язаних із атомами перехідних металів та передбачає наступні етапи: 1) підбір реальних КСЕ з базою, легованою бором, та високою концентрацією домішкового заліза; 2) визначення впливу світло-індукованого розпаду пар Fe-B на параметри вольт-амперних характеристик (фактор неідеальності, струм насичення, шунтуючий опір, напруга холостого ходу, струм короткого

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

замикання) КСЕ; 3) з'ясування кількісних характеристик кінетики зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B; 4) визначення закономірностей змін параметрів КСЕ внаслідок світло-індукованої деградації в умовах ультразвукового навантаження (повздовжні та поперечні хвилі з частотою (1-30) МГц та інтенсивністю (0,1-1) Вт/см² в температурному діапазоні 290-350 К) та порівняння із беззвуким випадком; 5) визначення кінетичних характеристик зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B в умовах ультразвукового навантаження та порівняння з випадком відсутності звуку; 6) розробка рекомендацій щодо спрямованої зміни експлуатаційних характеристик КСЕ шляхом акустостимульованої деактивації дефектів.

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

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

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

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

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

The project experimental part aims to establish the physical regularities and mechanisms of acoustic waves influence on the rebuilding of defects, which involves transition metal atoms and provides for the following milestones: i) the selection of real SSCs with boron-doped base and high concentration of impurity iron; ii) the determination of influence of light-induced Fe-B pair dissociation on the IVC parameters (an ideality factor, a saturation current, a shunt resistance, an open-circuit voltage, a short-circuit current) of silicon solar cells; iii) the quantification of kinetic of IVC parameters change induced by Fe-B pair association; iv) the finding out of regularities of SSC parameters change, which forced by light-induced degradation, under ultrasonic loading (longitudinal and transverse waves with frequency (1-30) MHz and intensity $(0.1-1) \text{ W/cm}^2$ over the temperature range 290-350 K) and the comparison to non-ultrasound case; v) the determination of kinetic characteristics of IVC parameters variation due to Fe-B pair association under ultrasonic loading condition and the comparison to non-ultrasound case; vi) the development of recommendations for targeted changes in SSC performance specification by acoustically stimulated defect deactivation.

The choice of the Fe-B impurity pair as a direct object of acoustically driven modification is defined by several factors. Namely

- a) this defect is prevalent in real solar cells and it has a significant impact on the efficiency of photovoltaic conversion;
- b) the Fe-B parameters are well-known;
- c) this complex are easy to rebuild: pair can be readily dissociated under intense illumination and is repaired in the darkness and the association characteristic time is about tens minutes at room temperature;

d) the pair's components are characterized by crystal volume change $\Delta\Omega$ of different sign: boron is a impurity whose ionic radius is smaller than that of matrix atoms whereas $\Delta\Omega$ for interstitial iron is positive; accordingly to the previous studies such defects are expected to be characterized by highest efficiency of acousto-defect interaction.

The development of the method, which is intended for solar cell impurity characterization and based on the IVC measurement, is provided by modeling of silicon n+-p-p+ structures with transition metal atom impurities (by the example of iron). This part includes numerical simulation of IVC for structures with different base thickness (150-240 μm), base doping level (10^{15} - 10^{17} cm^{-3}), impurity concentration (10^{10} - 10^{13} cm^{-3}) over the temperature range 290-340 K. The interstitial iron, Fe_iB_s pair and different charge states of the defects would be under consideration. In our numerical simulation we will use of one-dimensional code solar cell simulator SCAPS 3.3.08 and real values and temperature dependences of parameters for silicon and traps (band gap width and narrowing, mobility, carrier thermal velocity and effective mass, intrinsic recombination coefficients, carrier capture cross section, energy level etc.) will be taken into account. The ideality factor determination for the structures under consideration is the next stage. The meta-heuristic optimization method Jaya will be used to IVC non-linear fittings according to the two-diode model. The last stage is tuning (a fitting of numbers of both hidden layer and neuron, regularization method, activation function, learning speed) and training (by using pre-calculated data set) of an artificial neural network, which is able to predict the concentration of impurity iron atoms by utilization of solar cell parameters, measuring conditions and ideality factor value which extracted from IVC. The preliminary tool for neural network driving is the Keras package.

3.4 Обґрунтування спроможності виконання проєкту учасником Конкурсу (до 3 сторінок).

Досвід наукової роботи Оліха О.Я. – 24 роки., він є автором понад 70 наукових публікацій, серед яких 40 статей (з них 10 – одноосібних робіт у фахових періодичних виданнях, індексованих у Scopus; зокрема 2 та 3 подібні роботи у виданнях 1-го та 2-го квартилів відповідно). Індекс Хірша (Scopus) дорівнює 7. Основна тематика досліджень: використання ультразвуку для характеристики та модифікації властивостей напівпровідникових структур. Ним вперше проведено дослідження перенесення заряду в кремнієвих р-п-структурах та структурах з бар'єром Шотки за умов ультразвукового навантаження; запропоновано модель акустоактивного комплексного дефекту. Він є фахівцем в галузі визначення параметрів бар'єрних структур за вольт-амперними

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

характеристиками, зокрема, з використанням мета-евристичних методів (Journal of Applied Physics, 2015, **118**, 024502). Також він є автором роботи, де проаналізовано зв'язок величини фактору неідеальності кремнієвої n^+ - p структури з концентрацією атомів заліза (Superlattices and Microstructures, 2019, **136**, 106309), яка є підґрунтям запропонованого у проєкті методу.

Досвід наукової роботи проф. Костильова В.П. – 45 років, він є автором понад 270 наукових публікацій, серед яких 1 монографія (у складі авторів), 152 статті (з них 54 роботи у періодичних виданнях, індексованих у Scopus; зокрема 4 роботи у виданнях 1-го та 8 робіт 2-го квартилів), 6 патентів України. Індекс Хірша (Scopus) дорівнює 7. Основними напрямками наукової діяльності В. П. Костильова є комплексне дослідження електрофізичних, фотоелектричних і оптичних процесів в багатошарових фоточутливих структурах на основі кремнію, розроблення фізичних і технологічних принципів створення нових типів фотоелектричних приладів і сонячних елементів на їх основі, а також розробка і створення нових методів і методик дослідження зазначених приладів і структур. В результаті проведених досліджень були з'ясовані особливості протікання процесів генерації-рекомбінації та збирання нерівноважних носіїв заряду в кремнієвих структурах з приповерхневими дифузійно-польовими бар'єрами та гетеро-переходами (т.ч. на основі гетероструктур $p^+-\alpha\text{-Si:H}/n\text{-c-Si}/n^+-\alpha\text{-Si:H}$ (HIT)) в широкому діапазоні зміни температури та рівнів освітленості (Journal of Applied Physics, 2016, **119**, 225702; IEEE Journal of Photovoltaics, 2020, **10**, 63-69), запропонований новий механізм прояву впливу екситонів на рекомбінацію нерівноважних носіїв заряду в кремнії за рахунок безвипромінювальної анігіляції екситонів по механізму Оже за участю глибоких домішкових центрів. Отримані результати дозволили розробити технологію виготовлення вискоелективних кремнієвих перетворювачів сонячної енергії наземного та космічного призначення з коефіцієнтом корисної дії до 19% в умовах АМ 1,5, розроблені фізико-технологічні принципи зменшення на 30-40% оптичних втрат в фотоперетворювачах завдяки використанню багатошарових антивідбиваючих покриттів і зменшення омичних втрат.

В рамках Загальнодержавної (Національної) космічної програми України при його активній творчій участі були розроблені і впроваджені у виробництво вискоелективні сонячні батареї ААЕИ.564113.001 для космічних апаратів нового покоління КС5МФ2 «Мікрон». В.П. Костильов створив і очолив єдиний в Україні сертифікований Центр випробувань фотоперетворювачів (ФП) і батарей фотоелектричних (БФ) Інституту фізики напівпровідників НАН України, атестований уповноваженими органами Мінекономрозвитку України на право здійснення вимірювань фото енергетичних параметрів сонячних елементів і

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

батарей, який Постановою Кабінету Міністрів України від 28.08 2013р. №650-р внесений до Державного реєстру наукових об’єктів, що становлять національне надбання.

За роботу «Ключові технології виробництва кремнієвих сонячних елементів та енергетичних систем на їх основі» Костильов В.П. в складі авторського колективу в 2013 році відзначений Державною премією України в галузі науки та техніки.

Досвід наукової роботи Власюка В.М. – 5 років. Він є автором 44 наукових публікацій, серед яких 13 статей (з них 3 – роботи у виданнях 1-го та 2-го квартилів). Основна тематика досліджень: фотоелектричні процеси в фоточутливих структурах на основі кремнію. Ним вперше показано, що рекомбінаційні струми в області просторового заряду кремнієвих фоточутливих структур формуються на основі часів життя, менших, принаймні на порядок, за об’ємні часи життя. Оцінено параметри глибоких рівнів, відповідальних за рекомбінацію в області просторового заряду. Уточнено внесок безвипромінювальної екситонної рекомбінації в ефективний час життя нерівноважних носіїв заряду в кремнії. Власюк В.М. є спеціалістом в області визначення фотоелектричних і рекомбінаційних параметрів фоточутливих структур.

Досвід наукової роботи Лозицького О.В. – 4 роки, він навчається в аспірантурі. Він є автором 13 публікацій, з яких 12 статей у виданнях, індексованих в Scopus (з них 6 – роботи у виданнях 1-го та 2-го квартилів). Індекс Хірша (Scopus) дорівнює 3. Лозицький О.В. має досвід моделювання фізичних властивостей матеріалів за допомогою машинного навчання, а саме ним проведено моделювання екранувальних і електричних властивостей одно- і багатошарових композитів в мікрохвильовому діапазоні. Також наявний досвід використання машинного навчання з підкріпленням (reinforcement learning) на платформі Upwork.

Центр випробувань ФП і БФ укомплектований наступним обладнанням і стандартними зразками:

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

Крім того, наявна матеріально-технічна база включає наступні елементи

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

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

O. Olikh has a scientific work experience of 24 years, he is the author of more than 70 scientific publications, including 40 articles (10 papers is single author papers in journals, which are Scopus indexed; in particular, 2 and 3 similar works are in the Q1 and Q2 journals, respectively). H-index (Scopus) is equals to 7. His main research subject is using of ultrasound to characterize and modify the properties of semiconductor structures. For the first time he have investigated the charge transfer in silicon p-n and Schottky barrier structures under ultrasound loading conditions; the model of acoustically active complex defect has been proposed by him. O. Olikh is a specialist in determination of barrier structure parameters from IVC, in particular, by using meta-heuristic methods (Journal of Applied Physics, 2015, **118**, 024502). Besides he is the author of a paper, which is base of the proposed in project method and devoted to analyze of relationship between an ideality factor value of silicon n^+ -p-structure and the iron concentration (Superlattices and Microstructures, 2019, **136**, 106309).

V. Kostylyov has a scientific work experience of 45 years, he is the author of more than 270 scientific publications, including 1 monograph, 152 articles (54 papers are Scopus indexed; in particular, 4 and 8 works are in the Q1 and Q2 journals, respectively), 6 patents of Ukraine. H-index (Scopus) is equals to 7. His main directions of scientific activity are complex research of electrophysical, photoelectric and optical processes in multilayer photosensitive silicon structures, development of physical and technological principles for creation of new types of photovoltaic devices and solar cells, and development and creation of new methods for investigation mentioned devices and structures. As a research results the features of the generation-recombination processes and the collection of non-equilibrium carriers in silicon structures with near-surface diffusion-field barriers and hetero-transitions (including heterostructures $p^+-\alpha\text{-Si:H/n-c-Si/n}^+-\alpha\text{-Si:H}$ (HIT)) were

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

clarified over wide temperature and illumination ranges (Journal of Applied Physics, 2016, **119**, 225702; IEEE Journal of Photovoltaics, 2020, **10**, 63-69); new mechanism of exciton influence on the charge carrier recombination in silicon due to non-radiative Auger annihilation of excitons with the participation of deep impurity centers is proposed. The obtained results allowed to develop the technology of manufacturing highly efficient silicon converters of solar energy for terrestrial and space purposes with efficiency up to 19% in AM 1.5 conditions. In addition, the physical and technological principles of 30-40% reduction of optical losses in photoconverters by using multilayer anti-reflective coatings and ohmic losses reduction are developed.

Under the framework of the National Space Program of Ukraine, V.P. Kostylyov taken active and creative part in developing and introducing into production of high-performance solar batteries AAEL.564113.001 for new generation spacecraft KS5MF2 "Micron".

V.P. Kostylyov created and headed the only in Ukraine certified Center for testing photoconverters (PC) and photovoltaic batteries (PVB) of the Institute of Semiconductor Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine. Center is certified by the Ministry of Economic Development of Ukraine to measure photo-energetic parameters of solar cells and batteries. Center is included in the State Register of scientific objects that are national property (resolution of the Cabinet of Ministers of Ukraine, 28.08.2013 №650-p).

V.P. Kostylov et al. were awarded the State Prize of Ukraine in the field of science and technology in 2013.

V.M. Vlasuk has a scientific work experience of 5 years, he is the author of 44 scientific publications, including 13 articles (3 papers are in the Q1 and Q2 journals). The research activity is deals with investigation of photoelectric processes in silicon photosensitive structures. For the first time he shown that recombination currents in the space charge region of silicon photosensitive structures have been formed by carriers with very short lifetimes in comparison with volume case. The contribution of non-radiative exciton recombination to the effective lifetime of non-equilibrium charge carriers in silicon is specified. Vlasuk V.M. is a specialist in determination of photoelectric and recombination parameters of photosensitive structures.

O. Lozitsky has a scientific work experience of 4 years, he is post-graduate student. He is the author of 14 papers (12 are Scopus indexed and 6 are in the Q1 and Q2 journals). H-index (Scopus) is equals to 3. O. Lozitsky is experienced in modeling of physical properties of material by using machine learning. Particularly, the shielding and electrical properties of single- and multilayer composites in the microwave range were modeled by him. There is also experience in using reinforcement learning on the Upwork platform.

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

Center of PC and PVB testing is equipped by the following equipment and standard samples:

- the setup of phototechnical tests of solar cells;
- the setup of determination of spectral characteristics of photoconverters;
- the setup of electrical and phototechnical tests of solar panels;
- the measuring device for photoenergy parameters of solar modules "Photon-3";
- the setup of pulse testing of photovoltaic modules and batteries;
- the measuring device for energy lighting BEO-01;
- the standard photoconvertors;
- the laser ellipsometer.

In addition, the available material and technical resources includes the following elements

- the setup of current-voltage characteristic measuring ((-5-5) V, (10^{-8} - $2 \cdot 10^{-2}$) A, accuracy 0,1%, working rate – up to 50 measurement/s);
- the thermostat with proportional-integral-differential controller (temperature stability $\pm 0,02$ K);
- the piezoelectric transducers for excitation of longitudinal and transverse waves (1-30 MHz);
- the complex for ultrasound loading (generator ГЗ-41, wavemeter ЧЗ-34, digital oscilloscope GDS-806S, characterograph X1-48);
- PC AMDA4–3400, 2.7GHz CPU, 3072 MB RAM.

3.5 Обґрунтування необхідності придбання за рахунок гранту обладнання та устаткування, а також напрямів їх використання після завершення гранту (до 1 сторінки).

За рахунок гранту передбачається придбання наступного обладнання:

- Вимірювальна платформа Keithley 4200A-SCS з модулями Keithley 4200-SMU, Keithley 4210-CVU та Keithley 4200A-CVIV. Цей прилад дозволяє з високою точністю проводити швидкі вимірювання вольт-амперних характеристик (у діапазоні струмів $10^{-15} \div 1$ А та напруг $10^{-6} \div 210$ В) та вольт-фарадних характеристик ($10^{-14} \div 10^{-6}$ Ф, до 400 В у частотному діапазоні $10^3 \div 10^7$ МГц). Необхідність його придбання у даному проєкті пов'язана з 1) можливістю реалізації швидкісних вимірювань ВАХ: у імпульсному режимі часове розділення даного приладу досягає 10 нс, що суттєво перевищує можливості наявного обладнання; водночас характерні часи процесів перебудови та перезарядки дефектів у напівпровідникових пристроях найчастіше знаходяться у діапазоні $10^{-6} \div 10^{-2}$ с і тому використання даного приладу дозволить безпосередньо визначати фізичні закономірності подібних процесів та впливу на них акустичних хвиль; 2) розширенням можливостей тестування КСЕ та підготовки

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

рекомендацій для модифікації технологічних процесів завдяки проведенню вольт-фарад досліджень у широкому частотному діапазоні. Після завершення гранту аналізатор Keithley 4200A-SCS буде використовуватися для тестування різноманітних напівпровідникових пристроїв та структур. Зокрема, завдяки можливостям надшвидких вимірювань малих струмів, він буде використовуватись для характеристики наноелектронних пристроїв.

- Ноутбук HP Pavilion Gaming 15. Сучасні підходи до глибоко навчання передбачають роботу з великими об'ємами даних, що висуває достатньо жорсткі вимоги до швидкодії та оперативної пам'яті обчислювальних пристроїв. Зокрема, широко використовуються процеси паралельних обчислень з використанням відео-процесорів, що підтримують технологію CUDA. Більшість розроблених інструментів для роботи зі штучними нейронними мережами, зокрема Keras, який планується використати під час реалізації проєкту, оптимізовані саме для використання подібних технологій. На жаль, наявний комп'ютерний парк з цієї точки зору є застарілим і для ефективної роботи зі штучною нейронною мережею, спроможною передбачити концентрацію домішкових атомів заліза на основі параметрів сонячного елемента необхідне обладнання з більшою розрахунковою потужністю. Після завершення гранту ноутбук буде і надалі використовуватися для реалізації процесів глибокого навчання.

The grant provides for the purchase of the following equipment:

- Keithley 4200A-SCS Parameter Analyzer with units Keithley 4200-SMU, Keithley 4210-CVU and Keithley 4200A-CVIV. This device allows to carry out with high accuracy fast measurements of current-voltage characteristics (current range 10^{-15} -1 A, voltage range 10^{-6} -210 V) and capacity-voltage characteristics (10^{-14} - 10^{-6} F, up to 400 V, frequency range 10^3 - 10^7 MHz).

The purchase necessity is determined by following reasons. 1) The high-speed IVC measurements are possible: Keithley 4200A-SCS separation time reaches 10 ns in pulse mode and significantly exceeds the capabilities of existing equipment; at the same time, the characteristic time of the rebuilding and recharging of defects in semiconductor devices is often in the range of 10^{-6} - 10^{-2} s and therefore this device will enabled the direct determination of physical features for such processes and the impact of acoustic waves; 2) The capacity-voltage measurement ability leads to expanding possibility SSC testing and preparation of recommendations for the modification of technological processes. After project finalization, the Keithley 4200A-SCS Parameter Analyzer will be used to test a variety of semiconductor devices and structures. In particular, the possibility of ultra-fast small current measurements allows to characterize nanoelectronic devices.

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

- Laptop HP Pavilion Gaming 15. Modern deep learning approaches involve working with big data sets, therefore requirements for the operation speed and RAM volume of computing devices are rigid. In particular, parallel computing processes using video processors with CUDA technology support are widely used. Most of the present artificial neural networks tools (in particular, Keras, which is planned to be used during the project) are optimized to similar technologies using. Unfortunately, the existing PC set is outdated from this point of view and effective work with an artificial neural network, which is able to predict an impurity concentration by solar cell parameters, requires equipment with more computing power. After project finalization, the laptop will continue to be used to implement deep learning processes.

3.6 Обсяг фінансування, необхідний для виконання наукового дослідження (розробки), з відповідним обґрунтуванням за статтями витрат згідно з таблицями у Розділі VII (до 2 сторінок).

Витрати на оплату праці, включно з нарахуваннями передбачають фінансування у обсязі 1886210 грн (390250 грн у 1 рік, 1495960 грн у 2 рік). Вони передбачають оплату відповідно до схеми посадових окладів Київського національного університету імені Тараса Шевченка за роботи, виконані виконавцями проєкту, зазначені у наступній таблиці.

ПП	Завдання під час етапів	Зайнятість, міс
Оліх О.Я., д.ф-м.н., доцент, науковий керівник проєкту	Розробка розрахункової моделі кремнієвої n+-p-p+ структури; розробка програмного забезпечення для автоматизації моделювання та обробки результатів; проведення моделювання; розробка методики оцінювання кінетичних характеристик ВАХ в умовах ультразвукового навантаження; розробка методики екстрагування параметрів дефектних комплексів з ВАХ, проведення відповідних розрахунків; розробка архітектури штучної нейронної мережі, визначення механізмів акусто-дефектної взаємодії; розробка рекомендацій щодо методу кількісної оцінки електрично-активних дефектів у бар'єрних структурах за величиною фактору неідеальності; підготовка доповідей, наукових статей, звітів.	14,5
Костильов В.П. д.ф-м.н., проф.	Підбір кремнієвих сонячних елементів; розробка методики вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в КСЕ; визначення кількісних характеристик кінетики зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B; визначення механізмів впливу акустичних хвиль на процес перебудови дефектних комплексів; розробка рекомендацій щодо практичного використання ультразвукового навантаження під час виробництва КСЕ; підготовка доповідей, наукових статей, звітів.	14,5

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

Власюк В.М. к.ф- м.н, н.с.	Закупівля обладнання; відпрацювання режимів вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в КСЕ; вимірювання характеристик впливу світло-індукованого розпаду пар Fe-B на параметри ВАХ за умов ультразвукового навантаження та без нього; підготовка доповідей, наукових статей, звітів.	14,5
Лозицький О.В., аспірант	Розробка програмного забезпечення для автоматизації моделювання та обробки результатів; проведення моделювання; програмна реалізація мета-евристичного методу оптимізації Jaya; налаштування та навчання штучної нейронної мережі; підготовка доповідей, наукових статей, звітів.	14,5
молодий учений, к.ф-м.н	Практична реалізація методики оцінювання кінетичних характеристик ВАХ в умовах ультразвукового навантаження; проведення відповідних вимірювань.	8,5
молодий учений, аспірант	Вимірювання кінетики зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B за умов ультразвукового навантаження та без нього; проведення закупівель	8,5
студент	Практична реалізація методики оцінювання кінетичних характеристик ВАХ в умовах ультразвукового навантаження; підготовка зразків до вимірювань	8,5

Фінансування на матеріали, необхідні для виконання робіт, крім спецустаткування складає 166900 грн (65000 грн у 1 рік, 101900 грн у 2 рік). Переважно воно передбачає витрати на комплектуючі, необхідні для роботи параметричного аналізатора Keithley 4200A-SCS. Крім того, у зв'язку з необхідністю підготовки звітів, передбачені закупівлі паперу та витратних матеріалів для принтерів.

Витрати на спецустаткування (обладнання) - 3368370 грн (2262620 грн у 1 рік, 1105750 грн у 2 рік) – обґрунтування наведене у п.3.5.

Витрати на відрядження пов'язані з необхідністю представлення результатів науковій спільноті та ознайомлення з найсучаснішими досягненнями і передбачають участь у закордонних (1 відрядження для кожного з основних виконавців проєкту) та українських (2 відрядження сумарно) конференціях. Передбачений обсяг фінансування – 179330 грн (2 рік).

Інші витрати 257140грн (2 рік) призначені на сплату публікаційних внесків передбачених в очікуваних результатах проєкту 2 статей у міжнародних фахових журналах та організаційних внесків на наукових конференціях.

Загальний обсяг фінансування проєкту - 6508830грн (3019860грн у 1 рік, 3488970грн у 2 рік)

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

The total labour compensation expenses provide funding in the amount of 1886210 uah (390250 uah 1st year, 1495960 uah 2nd year). They are planned in accordance with the salary scheme of the Taras Shevchenko National University of Kyiv and project executor works are listed in the following table.

Name	Tasks	Employment, month
Olikh O.Ya., doctor of science, assoc. prof., project scientific head	Development of a calculation model of silicon n ⁺ -p-p ⁺ structure; development of software for automation of modeling and results processing; numerical calculation; development of procedure for quantification of kinetic of IVC parameters change under ultrasound loading; development of methods for extracting parameters from IVCs; development of artificial neural network architecture; determination of mechanisms of acousto-defective interaction; development of recommendations for the method of quantitative evaluation of electrically active defects in barrier structures by the ideality factor value; writing of presentations, papers, and reports	14,5
Kostylov V.P. doctor of science, prof.	The selection of silicon solar cells; development of procedure for measuring of kinetics of light-induced processes in SSCs; quantification of kinetic of IVC parameters changes due to Fe-B pair association; determination of mechanisms of acoustic wave influence defect complex rebuilding; development of recommendations about using of ultrasound loading during SSC manufacturing; writing of presentations, papers, and reports	14,5
Vlasiuk V.M., PhD	Equipment purchase; testing of modes for measuring of kinetics of light-induced processes in SSCs; measuring of influence of light-induced dissociation of Fe-B pairs on the IVC parameters both with and without ultrasound loading; writing of presentations, papers, and reports	14,5
Lozitsky O.V., post-graduate student	Development of software for automation of modeling and results processing; numerical calculation; software implementation of the meta-heuristic optimization method Jaya; tuning and training of an artificial neural network; writing of presentations, papers, and reports	14,5
young scientist, PhD	Practical implementations of procedure for quantification of kinetic of IVC parameters change under ultrasound loading; measurements of kinetic of IVC parameters change.	8,5
young scientist, post-graduate student	Measurements of characteristics of IVC parameters changes due to Fe-B pair association both with and without ultrasound loading; equipment purchase	8,5
student	Practical implementations of procedure for quantification of kinetic of IVC parameters change under ultrasound loading; sample preparation	8,5

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

Funding for materials needed to perform the work, in addition to special equipment is 166900 uah (65000 uah 1st year, 101900 uah 2nd year). Preferably, it involves the cost of components required for the parametric analyzer Keithley 4200A-SCS operation. In addition, purchase of paper and consumables for printers is planned due to report prepare need.

The equipment expenses are 3368370 uah (2262620 uah 1st year, 1105750 uah 2nd year); the justification is given in 3.5.

Business trip expenses are related to the need to present the scientific results as well as to get acquainted with the latest achievements. It is provided 4 business trip abroad and 2 business trip internal, the total expenses – 179330 uah (2nd year).

Other expenses 257140 uah (2nd year) are intended for the payment of publication fees (2 papers, which are provided in the project expected results) and organizational fees at scientific conferences.

The total project expenses equal to 6508830 uah (3019860 uah 1st year, 3488970 uah 2nd year)

3.7 Очікувані результати виконання проєкту (до 1 сторінки):

Очікувана в результаті виконання проєкту наукова продукція полягає у

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

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

The expected project scientific products are following:

- the finding out the physical regularities and mechanisms of interaction between ultrasound waves and defect complexes, which associated with transition metal atoms;
- the evaluation of possibility of targeted changes in SSC performance by using ultrasound during manufacturing and development of recommendations for the practical using;
- the development of physical base of method for estimation of concentration of electrically active defects in barrier structures by an ideality factor value;
- the creation of data array (about 15 000 sets) of calculated ideality factor value for silicon $n^+ - p - p^+$ structures with various geometric and electrophysical characteristics;
- the tuning of an artificial neural network to estimate the concentration of iron atoms in silicon $n^+ - p - p^+$ structures
- at least 2 papers in Q1 and Q2 journals;
- at least 3 presentation at international conference.

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

Встановлені фізичні закономірності впливу ультразвукового навантаження на процеси перебудови домішкових центрів, пов'язаних з атомами перехідних металів, можуть бути використані для модифікації стандартних технологічних операцій, що використовуються при створенні кремнієвих сонячних елементів, з метою деактивації вказаних дефектів. Визначенні особливості акусто-дефектної взаємодії дозволять налаштувати параметри ультразвукового впливу задля отримання найбільшої ефективності контрольованої модифікації дефектної підсистеми. Крім того, отримані результати можуть стати основою для розробки методів акустичної інженерії дефектів у напівпровідникових пристроях.

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

Національний фонд досліджень України
Конкурс проєктів із виконання наукових досліджень і розробок
“Підтримка досліджень провідних та молодих вчених”

The established physical regularities of the ultrasonic loading influence on the rebuilding of defect complexes, which associated with transition metal atoms, can be used to modify the standard technological operations of silicon solar cell manufacturing to deactivate these defects. The determined features of the acousto-defect interaction will allow to adjust the ultrasound parameters to raise efficiency of the controlled modification of the defective subsystem. In addition, the results can be the basis for the development of methods of acoustic engineering of defects in semiconductor devices.

The established quantitative relationship between an ideality factor value and the concentration of recombination centers can be used as a basis for the express method of estimating the impurity composition of real solar cells. The tuned artificial neural network can be directly used to estimate the concentration of iron atoms in silicon $n^+ - p - p^+$ structures, where these defects are the main recombination centers.

3.9 Можливі ризики, що можуть вплинути на реалізацію проєкту (до 1 сторінки)

Введення карантину перешкодить виконанню експериментальних досліджень у повному обсязі.

The quarantine will prevent the full implementation of experimental research.