

ЗАТВЕРДЖУЮ
Проректор з наукової роботи
Київського національного університету
імені Тараса Шевченка
проф. Ганна ТОЛСТАНОВА

(підпис)

М.П.

АНОТОВАНИЙ ЗВІТ
про виконану роботу в рамках реалізації проєкту
із виконання наукових досліджень і розробок
«Розробка фізичних засад акусто-керованої модифікації та машинно-орієнтованої
характеризації кремнієвих сонячних елементів»

Назва конкурсу: «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»

Реєстраційний номер Проєкту: 2020.02/0036

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

Рішення Наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених» протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21.

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Загальна тривалість виконання проєкту 2020 рік – 2021 рік

Початок – 05.11.2020 р.

(дата укладання Договору про виконання наукового дослідження і розробки)

Закінчення – 15.12.2021 р.

Загальна вартість Проєкту, грн. 4 662 155

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 1 779 800

2-й рік 2 882 355

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проєкту залучено 6 виконавців, з них:

доктори наук 2;

кандидати наук 2;

інші працівники 2.

**3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(Ї)
СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ**

Грантоотримувач - Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Субвиконавці не залучаються

4. ОПИС ПРОЄКТУ

4.1. Мета Проєкту (до 200 знаків)

Розробка фізичних засад методів а) акустостимульованої деактивації дефектів у кремнієвих сонячних елементах (КСЕ); б) оцінки концентрації дефектів у КСЕ з використанням методів глибокого навчання.

4.2. Основні завдання Проєкту (до 400 знаків)

Встановити фізичні закономірності та механізми впливу ультразвуку на процес перебудови дефектних комплексів. Шляхом моделювання з'ясувати вплив ступеню легування, температури та наявності дефектів на формування вольт-амперних характеристик КСЕ. Запропонувати метод кількісної оцінки електрично-активних дефектів у КСЕ за величиною фактору неідеальності з використанням методів глибокого навчання.

4.3. Детальний зміст Проєкту:

- Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

Існуючі неруйнівні методи оцінки концентрації домішок у КСЕ вимагають спеціальної підготовки об'єктів чи спеціалізованого обладнання. Розробка експрес-методу, що базується на вимірюваннях ВАХ, є важливим з прикладної точки зору. Для виготовлення комерційних КСЕ переважно використовуються кристали невисокої чистоти, причому залізо є однією з найпоширеніших та найшкідливіших домішок.

- Новизна Проєкту (до 400 знаків)

Розробку фізичних основ методу, де ультразвуку відведена роль додаткового фактору впливу на процеси перебудови дефектних комплексів, ініційовані іншим активаційним чинником. Передбачається використання фактору неідеальності як кількісного показника концентрації рекомбінаційних центрів та застосування методів глибокого навчання для встановлення взаємозв'язку вказаних величин.

- Методологія дослідження (до 400 знаків)

Моделювання КСЕ з різними параметрами, зокрема концентрацією домішок, визначення фактору неідеальності (n), створення штучної нейронної мережі, здатної передбачити концентрацію дефектів на основі величини n . Встановлення фізичних закономірностей впливу ультразвуку на перебудову дефектних комплексів шляхом з'ясування дослідження кінетики зміни параметрів ВАХ внаслідок перебудови пар Fe-B.

5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році/ в рамках реалізації Проєкту, зокрема:

5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проєкту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик)

Проведено моделювання (з використанням SCAPS 3.3.08) вольт-амперних характеристик кремнієвих n^+-p-p^+ структур з різною товщиною (150-240 мкм) та ступенем легування ($10^{15} \div 10^{17} \text{ см}^{-3}$) бази при варіації концентрації домішкового заліза в інтервалі $10^{10} \div 10^{13} \text{ см}^{-3}$ для температурного діапазону 290-340 К. При цьому враховано можливість перебування атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари FeB і розраховано загалом близько 40 тис характеристик. За допомогою розробленого програмного забезпечення (реалізація мета-евристичного методу Jaya) отримано величини фактору неідеальності у межах дво-діодної моделі для вказаних структур. Отримані дані доступні за адресою <https://github.com/olegolikh/IVcharacteristics.git> у файлах CSV-формату. Показано, що залежність фактору неідеальності від температури та рівня легування переважно пов'язані з ймовірністю наявності дірки на рівні 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-p^+ у випадку, якщо вона переважає довжину дифузії неосновних носіїв заряду.

Вперше розроблено глибокі нейронні мережі (ГНМ), призначені для передбачення концентрації рекомбінаційно активних домішок в кремнієвих n^+-p-p^+ структурах за величинами фактору неідеальності, рівня легування та товщини бази і температури. Проведено налаштування ГНМ та вибрано раціональні значення конфігурації схованих шарів та таких гіперпараметрів як

розмір пакету (32), тип активаційної функції для схованих шарів (ReLU), тип оптимізатора (Adamax), темп навчання (10^{-3}), кількість епох (400 або 1500 залежно від кількості вхідних параметрів), метод попередньої підготовки даних (нульове середнє значенні та одиничне стандартне відхилення), тип початкової ініціалізації вагових коефіцієнтів (з використанням функції Ксав'є та розподілу Гауса); показано недоречність використання регуляризації. Натреновані мережі доступні: <https://github.com/olegolikh/IVcharacteristics/tree/main/Models> 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. Виявлено, що точність прогнозування зменшується з підвищенням температури вимірювань.

Показано, що для ефективної роботи ГНМ а) необхідне тренування мережі з використанням значень рівня легування, які збігаються з відповідними величинами в структурах, які надалі досліджуються; б) використання двох значень величини фактору неідеальності, які відповідають випадкам наявності лише міжвузольних атомів заліза та рівноважного співіснування пар FeV та Fe_i, потенційно дозволяє суттєво підвищити прогностичні властивості нейронної мережі, але практична реалізація подібного підходу є ускладненою. Шляхом аналізу особливостей формування величини фактору неідеальності показано, що створені ГНМ можуть бути застосовані для визначення концентрації домішкового заліза як в BSF, так і в PERC сонячних елементах, виготовлених з пластин кремнію, легованих бором.

Створено експериментальний стенд для вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в КСЕ в умовах ультразвукового навантаження. Запропоновано методика, що базується на вимірюванні кінетики струму короткого замикання КСЕ при монохроматичному освітленні з довжиною хвилі 900÷980 нм при малому рівні збудження та дозволяє оцінити значення енергії міграції атомів заліза та концентрацію пар FeV.

Виявлено, що для КСЕ найбільш чутливими до розпаду пар залізо-бор є струм короткого замикання, максимальна вихідна потужність та струм насичення в області просторового заряду, тоді як відносні зміни напруги холостого ходу та коефіцієнта форми вольт-амперної характеристики значно менші і суттєво спадають при зменшенні температури. Показано, що відносні зміни струму короткого замикання та максимальної вихідної потужності можуть бути використані для оцінки концентрації заліза в КСЕ.

Вперше виявлено акустокеровані ефекти зменшення частки пар FeV, які дисоціювали внаслідок освітлення, та зменшення енергії міграції атомів заліза в кремнієвих сонячних елементах. Показано, що ефективність ультразвукового (частота 0,3-30 МГц, інтенсивність до 2 Вт/см²) впливу на енергію міграції зростає при підвищенні температури, тоді як частотна залежність визначається типом коливальних. Проаналізовано можливі механізми виявлених ефектів та показано, що найбільш ймовірними причинами є акустоіндуковане підвищення локальної ефективної температури кристалу та зменшення ефективної поляронної енергії, а також зменшення кулонівського відштовхування внаслідок збільшення відстані між компонентами пари FeV та/або перезарядка іона заліза в ультразвуковому полі.

Проаналізовано можливості практичного використання ультразвукового навантаження під час виробництва КСЕ та визначено, що застосування акустичних хвиль є доцільним: а) безпосередньо перед дифузією фосфору для створення *n*⁺ емітера та термохімічним осадженням плівок нітриду кремнію; температура обробки – не менше 100°C, акустичні деформації - (10^{-5} ÷ 10^{-4}), частота – близько 100 кГц, час - 30 хв; б) під час таких технологічних операцій, як дифузія фосфору та термохімічне створення просвітлюючого шару; температура та час відповідають стандартним умовам технологічних операцій, акустичні деформації: (1 ÷ 5)· 10^{-6} ; частота: (1 ÷ 5) МГц при використанні повздовжніх хвиль, (20÷30) МГц – для поперечних.

Зроблено 10 доповідей на конференціях міжнародного рівня, підготовлено 17 наукових праць. З них 10 для видань, які індексуються у науково-метричній базі SCOPUS, а саме: 1) Kinetics of Light-Induced Processes Due to Iron Impurities in Silicon Solar Cells / V. Vlasivuk, R. Korkishko, V. Kostylyov, Oleg Olikh // 2021 International Conference on Electrical, Computer, Communications and Mechatronics Engineering (ICECCME). — Mauritius: 2021. — P. 1–6; 2) Analysis of the recombination mechanisms in silicon solar cells with the record 26.6% photoconversion efficiency / Anatoliy Sachenko, Vitaliy Kostylyov, Viktor Vlasivuk et al. // 2021 IEEE

48th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC). — 2021. — P. 0532–0539; 3) Characterization and Optimization of Highly Efficient Silicon-Based Textured Solar Cells: Theory and Experiment / A.V. Sachenko, V. P. Kostylyov, V. M. Vlasiuk et al. // 2021 IEEE 48th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC). — 2021. — P. 0544–0550; 4) Modeling of the key characteristics of high-efficiency silicon solar cells with planar surfaces / A. Sachenko, V. Kostylyov, V. Vlasiuk et al. // 2021 IEEE 48th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC). — 2021. — P. 0590–0595; 5) 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; 6) Simulation and characterization of planar high-efficiency back contact silicon solar cells / A.V. Sachenko, V.P. Kostylyov, R.M. Korkishko et al. // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. — 2021. — Vol. 24. — P. 319–327; 6) Features of FeB pair light-induced dissociation and repair in silicon n^+-p-p^+ structures under ultrasound loading / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk et al. // J. Appl. Phys. – прийнято до друку; 7) Estimation for iron contamination in Si solar cell by ideality factor: deep neural network approach / O. Olikh, O. Lozitsky, O. Zavhorodnii // Prog. Photovoltaics Res. Appl. - на стадії рецензування; 8) 8. Intensification of iron-boron complex association in silicon solar cells under acoustic wave action / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk et al. // Applied Physics A - на стадії рецензування; 9) Experimental investigation and theoretical modeling of textured silicon solar cells with rear metallization / A.V. Sachenko, V.P. Kostylyov, R.M. Korkishko et al. // Journal of Photonics for Energy - на стадії рецензування.

5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами

З огляду на те, що передбачене у Проєкті дослідження має фундаментальний характер, науково-технічна продукція не передбачена.

5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства (стосується проєктів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)

Проєкт передбачає проведення фундаментальних наукових досліджень

5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.

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.

Анотований звіт не містить відомостей, заборонених до відкритого опублікування

Науковий керівник Проєкту

професор кафедри загальної фізики
Київського національного університету
імені Тараса Шевченка
Олег ОЛІХ