ВСТУП

**Актуальність теми.** Сучасний розвиток фотоелектричної енергетики визначається потребою в підвищенні ефективності та надійності кремнієвих сонячних елементів (КСЕ), які залишаються основою світового ринку відновлюваної енергетики, забезпечуючи понад 90% виробництва фотоелектричних перетворювачів. Незважаючи на значні успіхи у вдосконаленні технологій вирощування кремнію та формування p–n-переходів, ефективність КСЕ істотно обмежується наявністю точкових дефектів та домішкових забруднень, серед яких особливу роль відіграють атоми заліза. Ці домішки формують глибокі енергетичні рівні в забороненій зоні, прискорюють рекомбінаційні процеси та знижують час життя носіїв заряду, що безпосередньо впливає на струм короткого замикання, напругу холостого ходу та ефективність фотоелемента.

Традиційні методи характеризації дефектів, зокрема спектроскопія глибоких рівнів з або без перетворення Лапласа, електронний парамагнітний резонанс або спектрометрія мас вторинних іонів хоч і забезпечують високу точність, мають низку суттєвих обмежень: висока вартість обладнання та складність проведення експериментів; необхідність спеціальної підготовки зразків, часто руйнівної; потреба у високій кваліфікації оператора та складному аналізі даних; низька швидкість дослідження великих обсягів матеріалу; деякі методи (EPR, DLTS) чутливі лише до специфічних типів дефектів і не дають повної картини всіх точкових центрів.

Одним із перспективних шляхів подолання цих обмежень є використання вольт-амперних характеристик (ВАХ) як доступного джерела інформації про електрофізичні процеси у напівпровідниковій структурі. ВАХ відображають сукупний вплив структурних та дефектних параметрів, а отже можуть бути використані для ідентифікації різних типів дефектів та оцінки їхньої концентрації, за умови застосування адекватних моделей інтерпретації. Проте аналітичне відновлення зв’язку між параметрами ВАХ та концентрацією рекомбінаційних центрів, що відповідають точковим дефектам, є складною задачею через нелінійність процесів рекомбінації та багатофакторність впливів.

У цьому контексті особливої актуальності набуває застосування методів машинного навчання, здатних виявляти приховані кореляції між експериментальними даними та фізичними параметрами матеріалу. Поєднання чисельного моделювання ВАХ кремнієвих структур типу n+-p-p+ з машинним навчанням відкриває можливість створення нових підходів до автоматизованої характеризації дефектів, які забезпечують високу точність, швидкість обробки та придатність до практичного застосування у виробничому контролі.

**Зв’язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційне дослідження є частиною наукової роботи, що проводиться на кафедрі загальної фізики фізичного факультету КНУ імені Тараса Шевченка. Роботу було виконано за фінансової підтримки Національному фонду наукових досліджень України (проекти: № 2020.02/0036 «Development of physical base of both acoustically controlled modification and machine learningoriented characterization for silicon solar cells» та № 2023.03/0252 «Development of principles for the creation and machine-oriented characterization of porous silicon nanostructures with optimal heat transport properties»).

**Мета і завдання дослідження.** Мета дослідження полягає у розробці методики характеризації дефектів у кремнієвих сонячних елементах типу n+-p-p+:Si на основі аналізу вольт-амперних характеристик із застосуванням алгоритмів машинного навчання. Для досягнення поставленої мети в роботі вирішувалися такі основні завдання:

* провести аналітичний огляд сучасних підходів до виявлення та характеризації дефектів у кремнієвих фотоелектричних перетворювачах, зокрема методів, що базуються на вольт-амперних вимірюваннях та алгоритмах машинного навчання, визначивши їх переваги та обмеження.
* провести моделювання одновимірної структури n⁺-p-p⁺:Si із залізовмісними дефектами у пакеті SCAPS-1D, врахувавши параметризацію кристалічних та дефектних властивостей кремнію.
* змоделювати темнові та світлові вольт-амперні характеристикидля різних станів дефектів, що пов’язані з залізом.
* встановити діагностичні параметри з отриманих вольт-амперних характеристик, що є найбільш чутливими до варіації концентрації заліза, та визначити області легування, у яких кореляція між зміною цих параметрів та концентрацією заліза є найвираженішою.
* налаштувати та протестувати моделі глибоких нейронних мереж для прогнозування концентрації заліза в КСЕ за набором фотоелектричних дескрипторів, порівняти їхню ефективність з алгоритмами машинного навчання: Gradient Boosting, eXtreme Gradient Boosting, Random Forest та Support Vector Regression.
* проаналізувати вплив кожного з дескрипторів на точність прогнозування та встановити оптимальні умови для узагальнення моделей машинного навчання.
* провести експериментальну перевірку результатів чисельного моделювання, підтвердивши можливість кількісної оцінки концентрації заліза на основі змін фотоелектричних параметрів після дисоціації пар FeB.
* розробити методику, що базується на використанні трансферного навчання з попередньо навченими моделями комп’ютерного зору для прогнозування концентрації заліза в КСЕ на основі кінетичних залежностей струму короткого замикання після дисоціації пар FeB

**Об’єкт дослідження:** Об’єктом дослідження є кремнієві сонячні елементи типу n⁺-p-p⁺ з наявними домішковими залізовмісними дефектами, їх вольт-амперні характеристики та фотоелектричні параметри, що визначаються концентрацією та просторовим розподілом домішок, товщиною бази та умовами освітлення.

**Предмет дослідження:** Предметом дослідження є закономірності впливу залізовмісних дефектів на фотоелектричні параметри кремнієвих сонячних елементів, зокрема на фактор неідеальності, струм короткого замикання, напругу розімкнутого кола, фактор форми та ефективність; відносні зміни цих параметрів та фактор неідеальності, їх використання для кількісної оцінки концентрації забруднюючого заліза; розробка методики прогнозування концентрації заліза з використанням машинного навчання, моделей комп’ютерного зору, трансферного навчання;

**Методи дослідження:** У роботі використано комплекс теоретичних, експериментальних та чисельних методів:

1. Моделювання вольт-амперних характеристик n⁺-p-p⁺ сонячних елементів із урахуванням залізовмісних домішок;
2. Аналіз впливу параметрів структури та електричного стану заліза на фактор неідеальності та на відносні зміни фотоелектричних параметрів, що були визначенні з вольт-амперних характеристик;
3. Використання експериментально отриманих вольт-амперних характеристик для перевірки змодельованих залежностей;
4. Налаштування моделей глибоких нейронних мереж та алгоритмів машинного навчання для прогнозування концентрації заліза в сонячному елементі за допомогою пакетів: Python Keras, Scikit-learn, Xgboost, Optuna;
5. Оцінка чутливості відносних змін фотоелектричних параметрів до варіацій концентрації заліза та оптимізація діагностичних ознак для монохроматичного та стандартного освітлень.
6. Моделювання та експериментальне вимірювання кінетичних залежностей струму короткого замикання, поєднання цих залежностей через трансферне навчання з моделями комп’ютерного зору та алгоритмами машинного навчання

**Наукова новизна одержаних результатів:**

1.Встановлено, що значення фактора неідеальності у кремнієвих сонячних елементах типу n⁺-p-p⁺ із залізовмісними домішками визначається не лише концентрацією заліза, а й його електричним станом та просторовим розподілом у базі, що дозволяє точніше описати механізми рекомбінації носіїв заряду.

2. Виявлено залежність фактора неідеальності від товщини бази сонячного елемента в умовах, коли довжина дифузії носіїв перевищує товщину бази, та пояснено цей ефект перерозподілом рекомбінаційних процесів між областю просторового заряду та базою КСЕ.

3. Встановлено високочутливий діагностичний параметр для оцінки концентрації заліза — відносну зміну струму короткого замикання, а також визначено умови, за яких ефективність та напруга розімкнутого кола можуть слугувати додатковими параметрами для діагностики.

4. Розроблено та вперше застосовано глибокі нейронні мережі для прогнозування концентрації заліза в діапазоні (1010 - 1014) см-3 з високою точністю (середня квадратична відносна похибка для змодельованих даних становить 0,005), включно з врахуванням концентрації бору та температури, що істотно підвищує надійність моделі.

5. Виявлено, що точність прогнозування залежить від відповідності параметрів тренувального набору реальним умовам використання моделей машинного навчання, а застосування методу головних компонент дозволяє оптимізувати кількість вхідних даних без суттєвої втрати точності.

6. Для експериментальних та змодельованих даних вперше показано, що алгоритми XGBoost та Deep Neural Network забезпечують найвищу точність прогнозування концентрації заліза, тоді як застосування Support Vector Regression є недоцільним для даної задачі.

7. Розроблено методику, що базується на використанні трансферного навчання з попередньо навченими моделями комп’ютерного зору для прогнозування концентрації заліза в КСЕ на основі кінетичних залежностей після дисоціації пар FeB.

**Практичне значення одержаних результатів.**

Одержані результати мають вагоме практичне значення для підвищення ефективності та швидкодії неруйнівних методів контролю якості кремнієвих сонячних елементів. На основі проведених досліджень:

1. Виявлена кореляція між фактором неідеальності та концентрацією заліза дозволяє реалізувати спрощений неруйнівний метод кількісного контролю забруднення без застосування традиційних методів характеризації дефектів, що зменшує собівартість контролю якості пластин.

2. Отримані залежності придатні для побудови цифрових двійників сонячних елементів, які дозволяють моделювати зміну характеристик під час експлуатації й прогнозувати старіння матеріалу під впливом температури, освітлення чи забруднення домішками.

3. Створено методики, що дозволяють визначати концентрацію домішок заліза у кремнії за допомогою алгоритмів машинного навчання, глибоких нейронних мереж та моделей комп’ютерного зору без застосування спеціалізованого експериментального обладнання чи попередньої підготовки зразків. Аналіз базується на стандартних фотоелектричних вимірах (I–V характеристики), що дозволяє легко інтегрувати методи у виробничі процедури контролю.

4. Розроблені методи також можуть бути адаптовані для характеризації інших типів дефектів та домішок у напівпровідниках. А також можуть бути адаптовані для інших типів сонячних елементів.

**Особистий внесок здобувача.** Дисертант брав активну участь у всіх етапах наукового дослідження. Автор роботи самостійно проводив аналіз літературних джерел по темі дисертації. Проводив моделювання вольт-амперних характеристик кремнієвих сонячних елементів n⁺-p-p⁺ з урахуванням залізовмісних домішок. Здобувач виконував експериментальні вимірювання та аналіз вольт-амперних характеристик з метою перевірки змодельованих залежностей та оцінки чутливості діагностичних параметрів до змін концентрації заліза. Реалізація моделей машинного навчання та моделей комп’ютерного зору для прогнозування концентрації заліза в кремнієвих сонячних елементах була здійснена в результаті спільної роботи з науковим керівником Оліх О.Я. Здобувач брав безпосередню участь у написанні та оформленні публікацій за темою роботи. Обговорення отриманих даних та інтерпретація результатів проводились разом із співавторами.

**Апробація матеріалів дисертації.** Основні результати роботи були представлені на всеукраїнських та міжнародних наукових конференціях: «The 22-th International Seminar on Physics and Chemistry of Solids (eISPCS'20)» (м. Львів, Україна, 2020 р.); «9-th European conference on renewable energy systems (ECRES-2021)» (м. Стамбул, Турція, 2021 р.); «IEEE 3rd KhPI Week on Advanced Technology (KhPIWeek-2022)» (м. Харків, Україна, 2022); «9-та наукова конференція з фізики напівпровідників (УНКФН–9)» (м. Ужгород, Україна, 2023 р.); «11-th International conference «Topical Problems of Semiconductors Physics (TPSP-2024)» (м. Дрогобич, Україна, 2024 р.); «20-th Conference on Gettering and Defect Engineering in Semiconductor Technology (GADEST-2024)» (м. Бад-Шандау, Німеччина, 2024 р.); «10-та українська наукова конференція з фізики напівпровідників (УНКФН–10)» (м. Ужгород, Україна, 2025 р.).

**Публікації.** За результатами дисертаційного дослідження опубліковано 11 наукових робіт, з них 4 статті у наукових фахових виданнях, 6 тез доповідей конференцій та 1 матеріали конференції.

**Структура та обсяг дисертації.** Дисертація складається із вступу, шістьох розділів, загальних висновків, списку використаних джерел та додатку. Загальний обсяг дисертації становить NNN сторінки, у тому числі NNN сторінок основного тексту. Дисертація містить N таблиць, NN рисунків, бібліографію, яка включає NNN посилань на праці вітчизняних і зарубіжних авторів та N додаток.