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 температурно-інжекційна спектроскопія часу життя, електролюмінісцентна та фотолюмінісцентна візуалізації, хоч і забезпечують високу точність, мають низку суттєвих обмежень: потребу у складному лабораторному обладнанні, значні часові витрати, необхідність залучення кваліфікованого персоналу для інтерпретації результатів, а також неможливість забезпечення масового неруйнівного контролю в умовах виробництва. Крім того, ці методи часто не дають змоги отримати інформацію про концентрацію домішок у вигляді кількісної оцінки, а лише інформацію про їхній вплив на оптичні або рекомбінаційні властивості.

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 і 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 мікроскопічними характеристиками дефектів 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 за фінансову підтримку (проект № 2023.03/0252 «Розробка принципів створення та машиноорієнтованої характеристики пористих наноструктур кремнію з оптимальними теплопровідними властивостями»).

**Мета і завдання дослідження.** Мета дослідження полягає у розробці науково обґрунтованої методики характеризації домішкових дефектів у кремнієвих сонячних елементах типу n+-p-p+:Si на основі аналізу вольт-амперних характеристик із застосуванням технологій машинного навчання, що забезпечує кількісне прогнозування концентрації заліза та виявлення закономірностей його впливу на параметри фотоелектричного перетворення. 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.
* розробити фізично обґрунтовану одновимірну модель структури n+-p-p+:Si із залізовмісними дефектами у пакеті SCAPS-1D, врахувавши вплив температури, рівня легування, товщини бази та стану домішкових пар FeB.
* змоделювати темнові та світлові вольт-амперні характеристикидля різних станів дефектів Fe і FeB, а також визначити вплив структурних і температурних параметрів на фотоелектричні властивості елементів.
* витягнути відносні зміни основних параметрів фотоелектричного перетворення (Isc, Voc, FF, η, n) з отриманих ВАХ і дослідити закономірності їхньої зміни залежно від концентрації заліза та умов освітлення (монохроматичного і стандартного AM1.5).
* встановити діагностичні параметри, що є найбільш чутливими до варіації концентрації заліза, та визначити області легування, у яких кореляція між зміною цих параметрів і концентрацією Fe є найвираженішою.
* сформувати узагальнену базу даних на основі результатів чисельного моделювання для подальшого навчання моделей машинного навчання.
* розробити, навчити 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 Fe на основі змін фотоелектричних параметрів 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 і просторовим розподілом домішок, товщиною бази та умовами освітлення.

**Предмет дослідження:** Предметом дослідження є закономірності впливу залізовмісних дефектів на електричні параметри кремнієвих сонячних елементів, зокрема на фактор неідеальності, струм короткого замикання, напругу розімкнутого кола, фактор форми, ефективність та їхнє використання для кількісної оцінки концентрації забруднюючого заліза. Крім того, предметом є розробка та застосування методів прогнозування концентрації заліза з використанням глибокого навчання та алгоритмів машинного 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 товщини бази, концентрації бора та електричного стану заліза на фактор неідеальності та на інші фотоелектричні параметри;
3. Використання експериментальних вольт-амперних вимірювань для перевірки змодельованих залежностей;
4. Розробка та тренування моделей глибоких нейронних мереж для прогнозування концентрації заліза;
5. Застосування алгоритмів машинного навчання та аналізу головних компонент для зменшення розмірності вхідних даних;
6. Аналіз чутливості фотоелектричних параметрів до варіацій концентрації заліза та оптимізація діагностичних ознак для монохроматичного та стандартного освітлення AM1.5.

**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.

**Практичне значення одержаних результатів.** Результати дослідження дозволяють підвищити точність оцінки концентрації заліза у кремнієвих сонячних елементах, що сприяє контролю якості матеріалів та підвищенню ефективності фотоперетворювачів на стадії виробництва. Виявлені закономірності впливу товщини бази та концентрації домішок на фактор неідеальності та інші параметри ефективності можуть бути використані для оптимізації конструкції n+-p-p+ структур і розробки більш стабільних сонячних елементів. Розроблені алгоритми прогнозування концентрації заліза з використанням моделей машинного навчання дозволяють автоматизувати та прискорити процес діагностики кремнієвих сонячних елементів, що знижує витрати на лабораторні вимірювання та підвищує ефективність контролю виробництва. Використання оптимізованих моделей машинного навчання дозволяє адаптувати їх до конкретних умов виробництва та освітлення, що підвищує точність прогнозування і зменшує ризик помилкових оцінок рівня забруднення.

**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. Розробка та реалізація моделей машинного навчання 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 стаття з конференції.

**Структура та обсяг дисертації.** Дисертація складається із вступу, чотирьох 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.