МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Фізичний факультет

Кафедра загальної фізики

На правах рукопису

**Застосування нейронних мереж для визначення концентрації заліза в кремнієвих сонячних елементах**

**Галузь знань:** 10 Природничі науки

**Спеціальність**: 104 Фізика та астрономія

**Освітня програма:** Фізика наносистем

**Кваліфікаційна робота магістра**

студента 2 року навчання

ЗАВГОРОДНЬОГО О.В

**Науковий керівник**:

доктор фізико-математичних наук,

доцент, професор кафедри загальної фізики

ОЛІХ О.Я

Робота заслухана на засіданні кафедри загальної фізики та рекомендована до захисту на ЕК, протокол №\_\_\_ від «\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2022р.

Завідувач кафедри загальної фізики БОРОВИЙ М.О

Київ – 2022

**ВИТЯГ**

з протоколу №\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

засідання Екзаменаційної комісії

Визнати, що студент \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ виконав та захистив кваліфікаційну роботу магістра з оцінкою \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_.

Голова ЕК \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

«\_\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2022 р.

**АНОТАЦІЯ**

**Олексій Завгородній.** Оцінка забруднення залізом кремнієвих сонячних елементів за допомогою глибоких нейронних мереж

*Кваліфікаційна робота магістра за спеціальністю 104 Фізика та астрономія, освітня програма «Фізика наносистем». – Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет, кафедра загальної фізики. – Київ – 2022.*

**Науковий керівник**: доктор фізико-математичних наук, доцент ОЛІХ О.Я, професор кафедри загальної фізики.

Розроблені глибокі нейронні мережі, призначені для передбачення концентрації домішкового заліза в кремнієвих структурах за величинами рівня легування та товщини бази, температури і фактору неідеальності або характеристик фотоелектричного перетворення. Проведено налаштування відповідних мереж, визначено оптимальні значення гіперпараметрів. Показана можливість розроблених нейронних мереж визначати концентрацію заліза в кремнієвих сонячних елементах, спираючись як на синтетичні, так і експериментально виміряні вольт-амперні характеристики.

**Ключові слова**: фактор неідеальності, структури, SCAPS, кремній, нейронні мережі, вміст заліза, вольт-амперні характеристики.

**SUMMARY**

**Oleksii Zavhorodnii.** Assessment of iron contamination in silicon solar cells using deep neural networks

*Master’s qualification in specialty 104 Physics and astronomy, educational program «Physics of nanosystems». – Taras Shevchenko National University of Kyiv, Faculty of Physics, Metal Physics Department. – Kyiv. – 2022*.

**Research supervisor**: Doctor of Physico-Mathematical Sciences, Associate Professor Oleg OLIKH, Associate Professor of General Physics Department.

Deep neural networks designed to predict the concentration of recombination-active impurities in silicon structures by the value of the non-ideality factor, doping level and base thickness and temperature were developed. The corresponding networks were tuned and the optimal values of hyperparameters were determined. The ability of the developed neural networks to determine the iron concentration in silicon solar cells, based on both synthetic and experimentally measured volt-ampere characteristics, is shown.

**Key words**: non-ideality factor, machine learning, structures, SCAPS, silicon, neural networks, iron contamination.

ЗМІСТ

[Вступ 3](#_Toc99920640)

[II. Методика досліджень 5](#_Toc99920641)

[2.1 СХЕМА ПІДХОДУ ВИРІШЕННЯ ПРОБЛЕМИ 5](#_Toc99920642)

[5](#_Toc99920643)

[Рис. 1 Схема підходу на основі глибокого навчання для прогнозування концентрації заліза. 5](#_Toc99920644)

[2.2 ОСНОВНІ ВІДОМОСТІ ПРО СТРУКТУРУ ТА РОЗРАХУНОК 6](#_Toc99920645)

[2.3 МОДЕЛІ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ 10](#_Toc99920646)

[III. результати та їх обговорення 13](#_Toc99920647)

[3.1 Назва підрозділу 3.1 15](#_Toc99920648)

[3.2 Назва підрозділу 3.2 15](#_Toc99920649)

[3.3 Назва підрозділу 3.3 15](#_Toc99920650)

[висновки 16](#_Toc99920651)

[список використаної літератури 17](#_Toc99920652)

[ДОДАТКИ 20](#_Toc99920653)

*Я виправив тему роботи, анотацію та ключові слова в укр.варіанті – в англомовному це ще треба зробити. Як на мене, при підготовці диплому все ж таки краще було спиратися на звіт, а не на переклад статті: в звіті однаково використані великі шматки подібного перекладу, але більш точного (літературного); крім того у звіті література оформлена за правилами і якщо просто скопіювати посилання в квадратних дужках, до точне посилання з’явиться в кінці файлу (в звіті це зроблено на основі кінцевих посилань).*

*Орієнтовний план диплому може бути наступний*

*Вступ*

*Розділ 1. Передумови дослідження (літературний огляд)*

*Розділ 2. Методика оцінки концентрації атомів заліза за допомогою ВАХ*

*2.1 Загальні засади методу*

*2.2 Розрахункова модель кремнієвого сонячного елементу*

*2.3 Моделювання темнових та світлових ВАХ*

*2.4 Характеристики глибоких нейронних мереж*

*Розділ 3. Результати навчання та тестування ГНМ*

*3.1 Визначення концентрації заліза із темнових ВАХ*

*3.2 Визначення концентрації заліза із світлових ВАХ*

*3.3 Аналіз застосовності розроблених ГНМ до реальних сонячних елементів*

*Висновки*

*Список використаної літератури*

*Надалі для посилань будуть використовуватися позначення на кшталт*

*[4з] – четверта робота зі звіту*

*[4с] – четверта робота зі статті*

*[4ф] – робота, яка знаходиться у файлі з назвою «4.pdf» - дані для списку літератури треба буде взяти безпосередньо з неї*

*Акуратну нумерацію посилань (рисунків, таблиць, формул тощо) всередині диплому потрібно буде зробити Вам. Там само як і список використаних джерел.*

Вступ

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. Зокрема, на сьогодні сонячна фотовольтаїка характеризується найшвидшими темпами зростанням серед усіх енергетичних технологій у світі. У 2020 році понад 90% з більше ніж 855 ТВт⋅год електроенергії, яка була вироблена внаслідок застосування фотовольтаїчних перетворювачів (а це 3,2% загальносвітового виробництва електроенергії), припадає на кремнієві сонячні елементи (КСЕ). Ці системи створюються з використанням аморфного, полікристалічного чи монокристалічного кремнію, причому частка останніх зараз складає близько 84% (у 2019 – 66%). Як і для інших напівпровідникових пристроїв, одним з визначальних чинників властивостей КСЕ є система дефектів, зокрема, їхній домішковий склад. Зокрема, залізо в таких структурах є основною і одною з найшкідливіших домішок.

Неруйнівні методи, що мають на меті оцінку концентрації домішок у напівпровідникових структурах, зокрема в КСЕ, мають важливе значення з прикладної точки зору. На сьогодні розроблено чимало як прямих, так і непрямих методів, що дозволяють вирішити подібне завдання. Наприклад, дефекти, пов'язані з металами, зазвичай характеризуються за допомогою інфрачервоної спектроскопії, електронного парамагнітного резонансу, перехідної спектроскопії глибоких рівнів (DLTS), Лаплас-DLTS тощо. Проте практично всі вони вимагають чи спеціальної підготовки об’єктів для досліджень, чи спеціалізованого обладнання.

Водночас, чи не найпоширенішим методом характеризації сонячних елементів є вимірювання вольт-амперних характеристик (ВАХ) і тому чимало сучасних наукових досліджень спрямовані на розробку методів характеризації дефектів, які спираються на аналіз саме цих характеристик. Проте однією з найголовніших перепон на цьому шляху розробки подібного зручного для використання та експресного методу є багатопараметричність взаємозв’язку концентрації рекомбінаційних центрів та параметрів ВАХ. З іншого боку, у останнє десятиліття різні галузі теоретичної і прикладної фізики успішно вирішують різні завдання, що не вимагають жорсткої алгоритмізації, за допомогою методів глибокого навчання. Більше того, деякі науковці стверджують, що інформатика матеріалів (поєднання розрахунків/вимірів властивостей матеріалів і алгоритмів інформатики) стала четвертою (разом з теорією, моделюванням і експериментами) парадигмою науки.

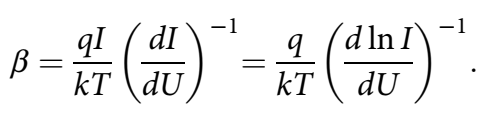
У цій роботі розглянута можливість застосування глибоких нейронних мереж для визначення концентрації домішкових атомів заліза за параметрами темнових (коефіцієнту ідеальності) чи світлових (характеристики фотоелектричного перетворення) ВАХ кремнієвих сонячних елементів(так би мовити, "глибоке навчання для глибоких рівнів").

Розділ 1. Передумови дослідження (літературний огляд)

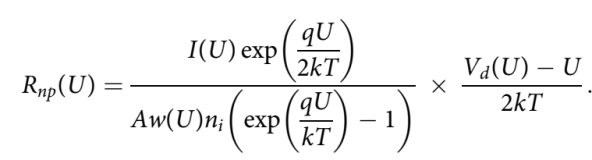
Процеси рекомбінації, пов’язані з дефектами (як власними, так і домішковими) є надзвичайно важливими для розуміння властивостей сонячних елементів, оскільки саме вони нерідко обмежують ефективність роботи фотоелектричних пристроїв. Однак фізичні параметри, що керують цими процесами, можуть бути надзвичайно складними для вимірювання, що вимагають спеціальних методів і підготовки зразків. І все ж той факт, що вони обмежують продуктивність, яка найчастіше визначається на основі ВАХ, вказує на те, що ці дефекти повинні мати певний вплив на сигнал, який виокремлюється під час вимірювання вольт-амперних характеристик. Інша справа, що внесок дефектів нерідко замаскований іншими процесами і виділити саме його є, як правило, достатньо складною задачею. Проте в літературі запропоновано ряд методів, які намагаються вирішити подібну задачу.

Наприклад, в роботах [10c,11c] розглянуто можливі процедури виділення різноманітних компонент струму (дифузійної, генераційної, пов’язаної з крайовою рекомбінацією, витоковою тощо) для структур з p-n переходом, а також описано взаємозв’язок цих компонент з параметрами дефектів. Також показано, як спираючись на температурні залежності цих компонент можна визначити такі параметри дефектів як концентрація, положення відповідного енергетичного рівня у забороненій зоні, поперечні перерізи захоплення носіїв. Зауважимо, що подібний підхід передбачає вимірювання цілого набору ВАХ.

Автори робіт [8c,9c] пропонують перебудовувати ВАХ і розглядати польові залежності диференційного нахилу

 (1.1)

та зниженої швидкості рекомбінації

 (1.2)

*якщо можна – наберіть формули, щоб не були картинкою*

де А – площа p-n переходу, w – ширина області просторового заряду, nі – концентрація носіїв у власному напівпровіднику, Vd – дифузійний потенціал. Надалі характеристики дефектів визначаються за положенням максимумів похідної диференційного нахилу та внаслідок розбиття залежності Rnp(U) на декілька компонент. Зазначимо, що обчислення диференціальних коефіцієнтів потребує високої точності вимірювання ВАХ, що накладає додаткові вимоги до експериментального обладнання.

У роботі [5с] використовуються як результати вимірювання ВАХ, так і моделювання фотоелектричних пристроїв з врахуванням різних значень параметрів рекомбінаційних центрів. Надалі використовується Байєсівський підхід для побудови розподіл ймовірностей за параметрами рекомбінації та демонструється здатність визначати характеристики дефектів на прикладі поперечних перерізів захоплення носіїв.

Дослідження, результати якого представлені у дипломній роботі багато в чому ідеологічно грунтується на попередній роботі, а також на результатах, отриманих в [6з]. Так в [6з] показано, що існує однозначний взаємозв’язок між концентрацією заліза NFe та величиною фактору неідеальності n ВАХ кремнієвого сонячного елементу. Проте отримані в роботі аналітичні вирази, що описують взаємозв’язок NFe та n не є універсальними і для визначення концентрації доводиться використовувати велику кількість градуювальних кривих.

До речі, фактор неідеальності нерідко використовується для характеризації напівпровідникових бар'єрних структур різних типів. Наприклад, в [5з,4з] величина фактору неідеальності використовується для визначення переважаючого механізму рекомбінації в СЕ на основі перовскіту та LED ультрафіолетового діапазону; авторами роботи [1ф] запропоновано застосовувати n з метод оцінки ступеню деградації світловипромінючих діодів на основі полімерів. В роботі [3з] значення фактору неідеальності розглядається як кількісний показник неоднорідності бар’єру в структурах з контактом Шотки на базі нітриду галію. Також показано взаємозв’язок між величиною n та рекомбінаційним опором носіїв заряду в органічних сонячних елементах [2з] і неоднорідністю контактного опору фронтальної металізації [1з].

Як вже зазначалося, в роботі використано методи штучного інтелекту (зокрема глибокі нейронні мережі) задля встановлення зв’зку між параметрами ВАХ та концентрацією домішкових атомів перехідних металів (заліза). Подібні підходи останнім часом все ширше використовуються в різних галузях матеріалознавства. Причому можна виділити декілька головних напрямків застосування таких методів.

Наприклад може йти мова про оптимізацію конфігураційних параметрів з метою покращення певних фізичних властивостей. Зокрема в роботі [19c] методи матеріалознавчої інформатики використані для оптимізації структури шарових систем на основі графенових стрічок з метою покращення термоелектричних властивостей. У дослідженні [2ф] представлено зворотний метод прогнозування геометричних параметрів звукопоглинача за допомогою глибинної нейронної мережі. Для цього розроблена, навчена та успішно протестована нова архітектура глибокої нейронної мережі (ГНМ), яка складається з ієрархічно впорядкованих згорткових і щільних шарів, при цьому гіперпараметри точно налаштовані для отримання максимальної ефективності. Іншим варіантом реалізації такого підходу є передбачення властивостей складних систем без їхньої практичної реалізації. Наприклад, доцільність застосування машинного навчання для передбачення механічних властивостей композитів з комплексною мікроструктурою показана в роботі [5ф]. В цьому випадку застосування знайшли згорткові штучні мережі – див. рис.1.1.

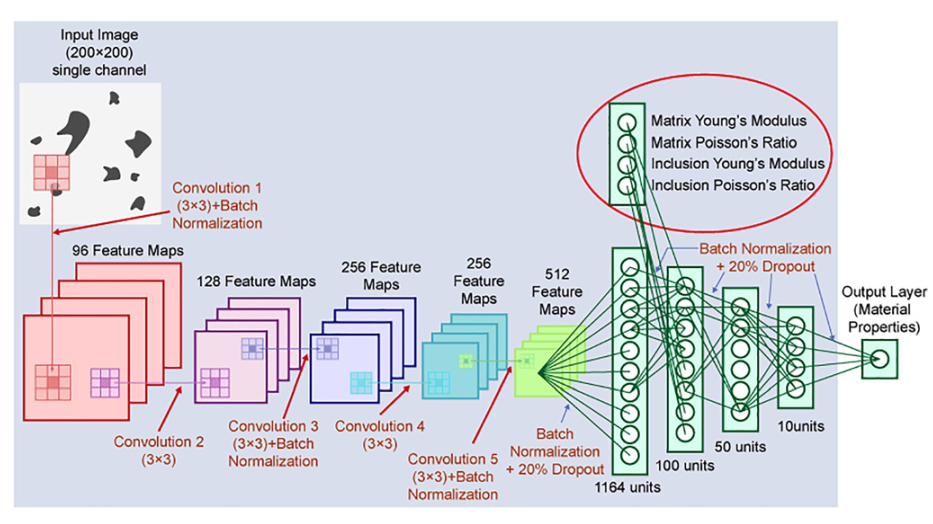


Рис.1.1. Схема згорткової нейронної мережі для прогнозування ефективних механічних властивостей композитів.. Рисунок взято з [5ф].

Інший підхід – швидке та надійне виокремлення фізичних параметрів на основі експериментальних даних. Так ГНМ застосовувалась для передбачення швидкості рекомбінації носіїв на границях зерен мультикристалічного кремнію з виміряного профілю інтенсивності фотолюмінесценції (ФЛ) [3ф] – зокрема схема відповідної процедури представлена на Рис.1.2. Іншим прикладом може бути обробка з використанням методів машинного навчання гамма-спектрів – дослідженню цієї проблеми присвячена робота [4ф].

Своє застосування подібні новітні методи знайшли і у галузі фотовольтаїки. Причому знову ж таки, спектр застосування достатньо широкий. Наприклад, мова може йти про передбачення вигляду ВАХ за різних умов на основі масиву попередньо виміряних подібних залежностей – цьому присвячені роботи [6ф,7ф]. Також розглянута можливість розробки аналізатора продуктивності фотовольтаїчної системи залежно від метеоумов [20c]. В цій роботі зроблена спроба розробити універсальну модель, яку можна натренувати з використанням даних для певної фотоелектричної системи, розташованої у певній геолокації, а використовувати і для інших систем та зовнішніх умов.

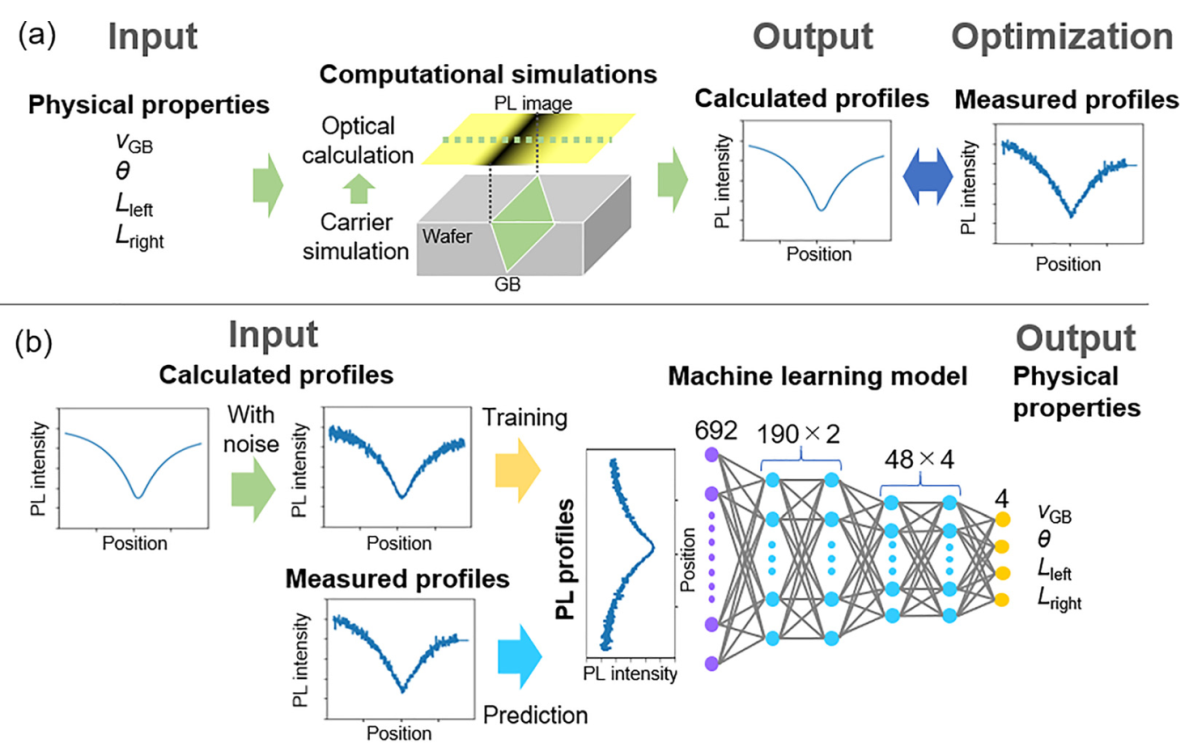


Рис.1.2. Схема оцінки фізичних властивостей на основі виміряного профілю ФЛ за допомогою обчислювального моделювання та моделі машинного навчання. Рисунок взято з роботи [3ф].

Крім того, застосовуються машинно-орієнтовані підходи для автоматизованої оцінки ступеню деградації та наявності дефектів сонячних панелей за електролюмінісцентними зображеннями [8ф,9ф] чи передбачення наслідків іонної імплантації, застосованої до перовскітних перетворювачів сонячної енергії.

Загалом, спектр застосування методів штучного інтелекту до фізичних задач досить широкий. Наприклад, робота [18с] є достатньо широким оглядом з цього питання. Зокрема, там згадані можливості машинного навчання у галузі статистичної фізики, фізики частинок та космології, квантових комп’ютерів, квантової хімії чи матеріалознавчих розрахунків.

Розділ 2. Методика оцінки концентрації атомів заліза за допомогою ВАХ

2.1 Загальні засади методу

Узагальнена блок-схема використаного нами евристичного підходу показана на Рис. 2.1. Як вже неодноразово зазначалося, в роботі були використані штучні нейронні мережі. Відомо, що навчання та тренування ГНМ 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 визначення характерних параметрів вольт-амперних характеристик. Іншим шляхом, використаним у роботі для отримання розмічених даних є моделювання відповідних структур. Загалом, можна виділити наступні етапи роботи.

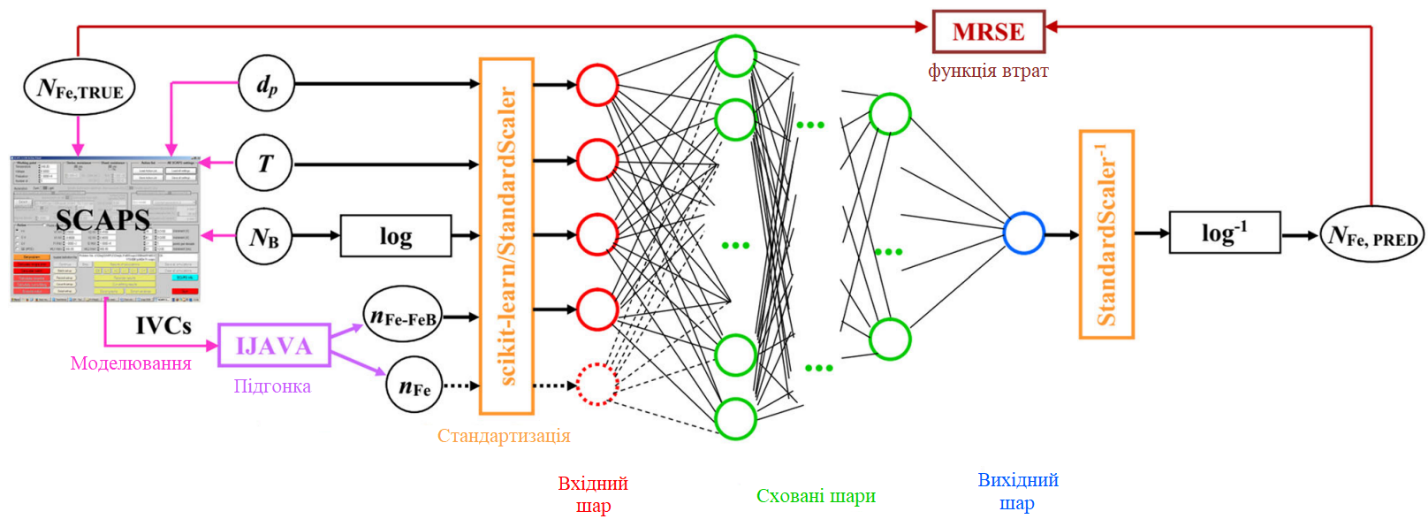


Рис.2.1. Загальна схема використаного методу визначення концентрації домішкових атомів в кремнієвих сонячних елементах.

1) Моделювання темнових та світлових ВАХ для КСЕ з різними параметрами та різними значеннями концентрації заліза. 2) Апроксимація отриманих ВАХ з метою визначення величини фактору неідеальності (для темнових характеристик) або параметрів фотоперетворення (для світлових ВАХ) і створення таким чином тренувального та тестового набору розмічених даних. 3) Налаштування та тренування ГНМ для оцінювання забруднення залізом, використовуючи товщину бази СЕ, рівень легування, температуру і характеристики ВАХ. 4) Тестування ГНМ з використанням синтетичних та експериментальних ВАХ.

2.2 Розрахункова модель кремнієвого сонячного елементу

Розрахунки проводилися для система, яка складалася з кристалічної кремнієвої *n*+-*p*-*p*+ структури (так звана система з полем задньої поверхні (BSF, back surface field)), що містить домішкове залізо. Незважаючи на певну спрощеність, така система має велике практичне значення. Зокрема BSF-система є однією з найпопулярніших конструкцій, що використовуються як для промислового виробництва КСЕ, так і моделювання [11з,12з]. Залізо ж є основною, а також однією з найбільш шкідливих металевих домішок у КСЕ [13з,14з]. Використана в розрахунках система зображена на рис. 2.2. Вважалося, що система складається з емітерного *n*+-шару товщиною *dn*, бази з дірковою провідністю товщиною *dp* та *p*+-шару для створення BSF товщиною *dSBF*. Вважалося, що концентрації легуючих домішок (фосфору та бору) дорівнюють *N*D, *N*В та *N*SBF в емітері, базі та BSF-шарі, відповідно.

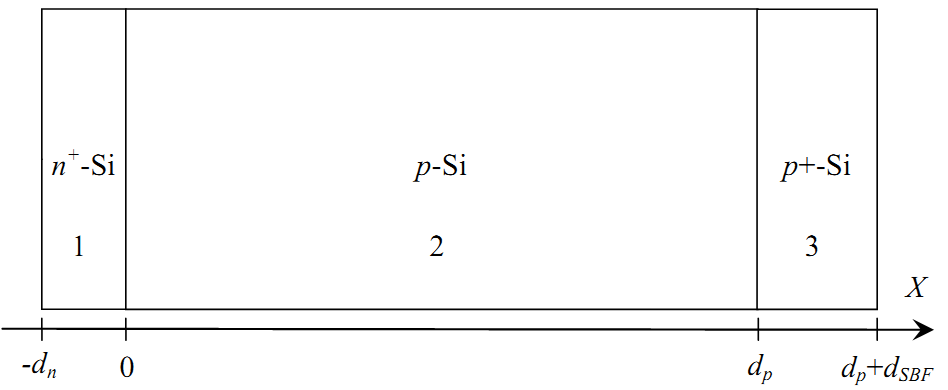


Рисунок 2.2 – Геометрія структури, використаної у розрахунковій моделі. 1 – емітер, 2 – база, 3 – BSF шар

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 [15з]

 (1.1)

де де *Е*(0) = 1,1701 еВ ширина забороненої зони при нульовій температурі, α = 3,23⋅10-4 еВ/К, Θ = 446 К, Δ = 0,51.

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

 (1.2)

 (1.3)

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

При обчисленні теплових швидкостей електронів υ*th,n* та дірок υ*th,p* використовувались вирази з роботи [17з]; розрахунок ефективної густина станів поблизу дна зони провідності *NC* та ефективної густини станів поблизу стелі валентної зони *NV* відбувався з використанням температурних залежностей ефективних мас густин станів, запропонованих в роботі [18з].

Рухливості електронів та дірок обчислювалися за теорією Классена [19з], 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 [20з].

При розрахунках темпу власної рекомбінації коефіцієнти Оже-рекомбінації дірок та електронів *С*р0 та *C*n0 розраховувалися з використанням виразів, наведених в [21з]:

, (1.5)

. (1.6)

В свою чергу, обчислення рекомбінаційного коефіцієнту, пов’язаного з випромінювальними міжзонними переходами, проводилося шляхом апроксимації табличних даних роботи [22з] за допомогою поліному 5-го ступеня. Крім того вважалося, що поверхнева швидкість рекомбінації однакова на обох поверхнях і дорівнює 103 см/с.

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

, (1.7)

де *n* та *p* – концентрації електронів та дірок, відповідно;

, , (1.9)

*Ntr* – концентрація дефектів, σ*n* та σ*p* – поперечні перерізи захоплення дефектом електронів та дірок, відповідно;

, , (1.10)

*Е*С та *E*V – енергетичні положення дня зони провідності та вершини валентної зони, відповідно; *Εtr* – енергетичне положення рівня, пов’язаного з дефектом.

При моделюванні вважалося, що дефекти в базі та в BSF-шарі 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 . На практиці подібний стан реалізується шляхом інтенсивного освітлення сонячного елементу або внаслідок високотемпературної обробки (210°С, 3 хв). Надалі цей випадок позначатиметься «Fe».

У другому випадку, який відповідав рівноважному стану неосвітленого сонячного елементу, вважалося, що у кристалі присутні як неспарені міжвузлові атоми заліза, так і пари заміщуючий атом бору – міжвузольний атом заліза FeiBs:  (де *N*FeB – концентрація пар). При цьому розподіл рекомбінаційних центрів є неоднорідним по товщині структури, залежить від положення рівня Фермі *EF* і, відповідно до [25з,26з], може бути розрахований з використанням наступних співвідношень

 , (1.11)

 , (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, взяті з роботи [27з].

2.3 Моделювання темнових та світлових ВАХ

Вольт-амперні характеристики розраховувалися за допомогою програмного пакету одномірного моделювання SCAPS 3.3.08 [28з]. В роботі проводилося моделювання прямої гілки ВАХ з кроком 0,01 В. Моделювалися як темнові ВАХ в діапазоні напруг 0-0,45 В, так і світлові від нульової напруги до напруги холостого ходу. В останньому випадку вважалося, що СЕ освітлюється або білим світлом (спектр АМ1.5, потужність освітлення 100 мВт/см2, що відповідає стандартним умовам), або монохроматичним (940 нм, 30 мВт/см2, що збігається з випадком, коли для освітлення використовується світло випромінюючий діод SN-HPIR940nm-1W). Значення параметрів, які використовувалися під час розрахунків, наведені в таблиці 1.2. Як видно, параметрами, які варіювалися під час моделювання були концентрація бору в базі, її товщина, концентрація домішкового заліза в шарах з дірковою провідністю та температура.

Таблиця 1.2 − Параметри структур *n*+-*p*-*p*+, що використовувалися при моделюванні ВАХ

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Параметр | Значення | |
|  | темнові ВАХ | світлові ВАХ |
| *dn*, мкм | 0,5 | |
| *dр*, мкм | 150÷240 | 150÷3?? |
| *dSBF*, мкм | 1 | |
| *N*D, см-3 | 1019 | |
| *N*В, см-3 | 1015 ÷ 1017 | |
| *N*SBF, см-3 | 5⋅1018 | |
| *N*Fe, см-3 | 1010 ÷ 1013 | 1010 ÷ 1014 (але *N*Fe<0.01 *N*A) |
| *T*, K | 290 ÷ 340 | |

При моделюванні проводилися розрахунки положення рівня Фермі, які застосовувалися для оцінки просторового розподілу дефектів різного типу.

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.

Наприклад, у випадку темнових ВАХ для створення тренувального набору були проведені симуляції з використанням 4 значень *d*p, 9 значень *N*B, 11 значень *T* та 19 значень *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). Загальна кількість ВАХ, змодельованих для цього набору - 15048 (з врахуванням 2 станів дефектів «Fe-FeB» та «Fe»). Крім того, були змодельовані ВАХ для декількох тестових наборів. Наприклад, у набір, який позначено Fe-varied, увійшли два під набори ВАХ. До одного увійшли характеристики, симульовані з використанням значень *N*Fe 1.3 1010, 2.471 1010, 4.696 1010, 8.927 1010, 1.697 1011, 3.225 1011, 6.130 1011, 1.165 1012, 2.214 1012, 4.209 1012, 8.000 1012 см-3 (не використовувалися при створенні тренувального набору), значення *Т* 290, 295, 300, 305, 310, 315, 320, 325, 330, 335, 340 K (використовувалися), значення *d*p 180 мкм (використовувалося) та значення *N*B 1.778 1015, 5.623 1015, 1016, 3.162 1016, 1017 см-3 (використовувалися). При підготовці другого під набору використовувалися значення *N*Fe 1.2 1011, 2.234 1011, 4.160 1011, 7.746 1011, 1.442 1012 , 2.685 1012 та 5 1012 см-3 (не зустрічалися у тренувальному наборі), температури 290, 300, 310, 320, 330 та 340 K (зустрічалися), товщини бази 210 та 240 мкм (зустрічалися) та концентрації бору 3.162 1015, 1016 та 1017 см-3 (були використані). Таким чином, позначено Fe-varied тестовий набір містив 857 пар ВАХ. Подібним чином були створені тестові набори d-varied (2378 ВАХ), Т-varied (1664 ВАХ) та В-varied (1028 ВАХ). При отриманні набору All-varied (1368 ВАХ) 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.

У випадку світлових ВАХ був використаний подібний підхід. Так при підготовці тренувального набору були використані 4 значення *d*p, 9 значень *N*B, 11 значень *T* та 25 значень *N*Fe для кожного типу освітлення (по ВАХ). Схожий підхід застосовувався і до створення тестових Fe-varied, В-varied та All-varied наборів.

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

, (1.13)

де *I*01 та *I*02 – струми насичення, пов’язані з процесами рекомбінації у квазі-нейтральній області та в області просторового заряду (ОПЗ), відповідно, *n* – фактор неідеальності. При апроксимації використовувався метаеврістичний покращений IJAYA оптимізаційний алгоритм [36з]. [[[1]](#endnote-1)]. У представлених далі результатах використовуються наступні позначення для фактору неідеальності, отриманого для різних випадків: *n*Fe – «Fe» випадок, *n*Fe-FeB – «Fe-FeB» випадок.

З освітлених ВАХ визначалися струм короткого замикання *I*SC, напруга розімкнутого кола *V*OC, фактор заповнення *FF* та коефіцієнт корисної дії. Безпосередньо при використанні ГНМ використовувалися відносні зміни кожного з цих параметрів:

, (2.15)

Де *А* – параметр КСЕ (*I*SC, *V*OC, *FF*, η), індекс «FeB» відповідає значенню параметра у випадку «Fe-FeB» (рівновага), індекс «Fe» ‑ зразу після розпаду пар («Fe» випадок).

2.4 Характеристики глибоких нейронних мереж

Узагальнена схема використаних глибоких мереж присутня на рис. 2.1. Загалом розглядалися чотири варіанти ГНМ, які відрізнялися вхідним шаром. Обов’язковими вхідними вузлами кожної з ГНМ були ті, на які подавалися температура, товщина бази КСЕ та логарифм концентрації бору в базі. Крім того, у вхідний шар могла подаватися: 1) значення *n*Fe-FeB – мережа з чотирма вхідними вузлами, яка надалі позначається DNNFeFeB; 2) величини як *n*Fe-FeB, так і *n*Fe – 5 вхідних вузлів, подальше позначення ‑ DNNFeFeB-Fe; 3)

. В одному з них використовувалося лише значення фактору неідеальності для рівноважного стану КСЕ ‑ *n*Fe-FeB. Для позначення цієї мережі використовувалося позначення DNNFeFeB. В другому варіанті до уваги бралися як величина *n*Fe-FeB, так і *n*Fe (подальше позначення ‑ DNNFeFeB-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.

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

, (1.16)

де

*NS* – кількість зразків у тренувальному (тестовому) наборі,

*N*Fe,TRUE,*і* – істинна величина концентрації заліза для *і*-го зразка (та, яка використовувалась при моделюванні відповідної ВАХ),

*N*Fe,PRED,*і* – 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.

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.

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, Adadelta, Adagrad, Adamax, Nadam, Ftrl |
| LR | 0.01, 3,16⋅10-3, 10-3, 3.16⋅10-4, 10-4, 3.16⋅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 |

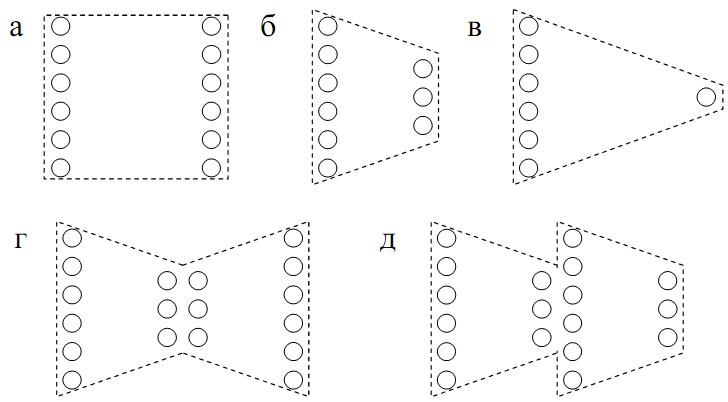


Рисунок 1.8 – Схеми конфігурації схованих шарів ГНМ, які розглядалися при налаштуванні. а – pipe; б – trapezium; в – triangle; г – butterfly; д – fir

Під час налаштування гіперпараметрів для кількісної характеризації 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 гратковий пошук (grid search) раціональних значень. Пошук проводився для pipe-конфігурації. Це дозволяло обмежити простір гіперпараметрів почергово 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.

*Розділ 3. Результати навчання та тестування ГНМ*

*3.1 Визначення концентрації заліза із темнових ВАХ*

*3.2 Визначення концентрації заліза із світлових ВАХ*

*3.3 Аналіз застосовності розроблених ГНМ до реальних сонячних елементів*

*Висновки*

*Список використаної літератури*

II. Методика досліджень

2.1 СХЕМА ПІДХОДУ ВИРІШЕННЯ ПРОБЛЕМИ

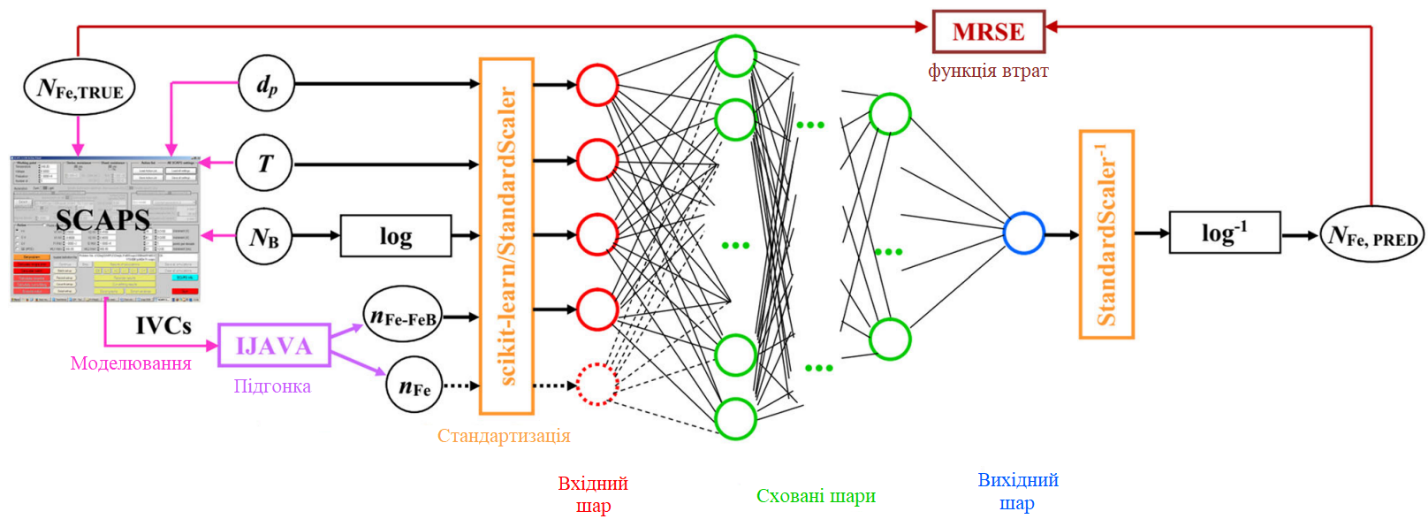


Рис. 1 Схема підходу на основі глибокого навчання для прогнозування концентрації заліза.

Блок-схема використаного нами евристичного підходу показана на Рис. 1, де можна виділити наступні етапи. Спочатку були змодельовані темні характеристики ВАХ для СЕ з різними параметрами і відомим складом забруднюючих речовин. При чисельному моделюванні ми використали SCAPS - 1D [25,26], широко використовуваний для моделювання сонячних елементів [27-32]. По-друге, отримані криві ВАХ були підігнані відповідно до моделі подвійного діода, і були оцінені коефіцієнти ідеальності. В результаті були отримані маркіровані набори даних. Очевидно, що набір маркерованих даних з експериментальних ВАХ був би прийнятніший, але на практиці практично неможливо знайти тисячі зразків з необхідними параметрами. По-третє, глибока нейронна мережа (DNN) була навчена оцінювати забруднення залізом, використовуючи товщину бази СЕ, рівень легування, температуру і коефіцієнт ідеальності. По-четверте, DNN була протестована використовуючи як синтетичні, так і експериментальні криві ВАХ.

2.2 ОСНОВНІ ВІДОМОСТІ ПРО СТРУКТУРУ ТА РОЗРАХУНОК

Структура , використана в розрахунках, мала емітерний шар товщиною 0,5 мкм з концентрацією донора ; - шар і - шар були рівномірно леговані бором; база мала товщину і концентрацію леганта ; BSF - шар мав товщину і концентрацію акцептора .

Моделювання проводилося в діапазоні температур 290 - 340 K. Для кожної температури був створений файл налаштувань SCAPS з використанням наступних параметрів матеріалу. Моделі забороненої зони і звуження забороненої зони були узяті з Pässler [33] і Yan і Cuevas [34] відповідно:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (2) |

де . Теплові швидкості носіїв були розраховані по моделі запропонованої Гріном [35]:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (3) |

де - маса вільного електрона. Ефективні маси густини станів в зоні провідності і валентній зоні були розраховані відповідно до моделі Кудерка та ін. [36]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |
|  | (5) |

Рухливості носіїв і ефективні маси вільних носіїв були узяті з Клаассена [37], О'Мара та ін. [38]. Залежності коефіцієнтів оже-рекомбінації від температури і легування були розраховані на основі моделей Альтерматта та ін. [39] :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (7) |

Коефіцієнт міжзонної рекомбінації випромінювання був узятий з роботи Нгуена та ін. [40]. Враховувалася рекомбінація на зовнішній поверхні зі швидкостями електронів і дірок . Для металевих контактів на задній і передній поверхнях були прийняті умови плоскої зони.

Моделювання проводилося в припущенні, що рекомбінація за участю дефектів відповідає тільки глибоким рівням, пов'язаним із залізом. Оскільки основа і BSF-шар є однорідними забрудненнями, залізо передбачається в концентрації . Відомо, що в кремнії може знаходитися в двох станах: у вигляді пари або в міжвузольному стані . При кімнатній температурі і концентрації бору майже увесь , пов'язаний в парами , знаходиться в рівноважному стані [41-44]. За даними Wijaranakula [44], концентрація міжвузольних атомів заліза , які залишаються неспареними в рівноважному стані, залежить від температури, рівня легування і положення рівня Ферми. Оцінки показують, що при 340 K, для в квазінейтральній області бази СЕ.

Моделювання проводилося для наступних двох випадків. У першому випадку концентрація повністю розчиненого заліза задавалася сумою концентрацій міжвузольних атомів заліза і пар :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (8) |

Розподіли дефектів у базі і - шарі неоднорідні, залежать від положення рівня Ферми і задаються як[44,45]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (9) |

де - енергія зв'язку пар , - донорний рівень, пов'язаний з . Цей випадок відповідає рівноважному стану, будемо його називати .

У другому випадку передбачалося, що однорідно розподілений (). Ця умова може бути реалізована шляхом термообробки (при 210 C, 3 хв.) [46] або інтенсивного освітлення [47]. Цей випадок називатиметься як .

Донорний рівень з перерізами захоплення електрона та дірки був пов'язаний з в наших симуляціях. Для донорний рівень , , і акцепторний рівень , , [45,48,49].

Темні прямі ВАХ характеристики були отримані за допомогою SCAPS в діапазоні напруги до 0,45 В. Згідно моделі двох діодів, темний струм СЕ задається як [50]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (10) |

де і - струми насичення, і – опір шунту і послідовний опір. Модель двох діодів часто застосовується для опису реальних Si-СЕ: в рівнянні (10) перший діод представляє "ідеальний" діод, а перший член рівняння описує рекомбінацію в глибині бази і емітера, включаючи їх поверхні; другий діод - так званий рекомбінаційний діод, а другий член описує рекомбінацію в області збіднення [50]. Змодельовані данні були підігнані по рівнянню (10) з , , , і в якості параметрів підгонки. Підгонка виконувалася методом IJAVA [51].

Слід зазначити, що 1) впливом і можна нехтувати в змодельованих ВАХ; 2) вклад струму рекомбінаційного діода істотний тільки при низькому зміщенні, і діапазон напруги (0 - 0.45 В) в цілому достатній для точного визначення значень коефіцієнта ідеальності.

Типові змодельовані залежності коефіцієнта ідеальності показані на Рис. 2. Детальне обговорення значень і представлене у [52] проте слід зазначити, що (1) може бути однаковим для різних значень параметрів СЕ; (2) залежності і відрізняються не лише абсолютними значеннями, але і поведінкою, хоча і несуттєво.

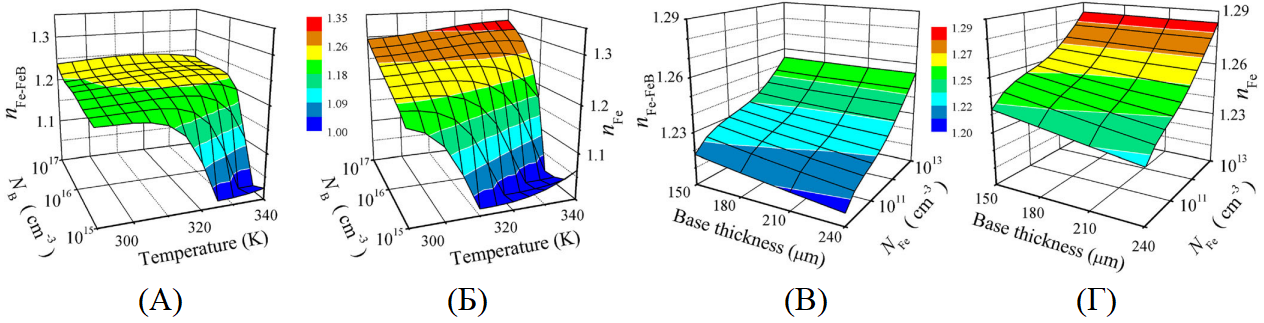


Рис. 2 (А,Б) – коефіцієнт ідеальності в залежності від температури і концентрації бору, (В,Г) – в залежності від товщини бази і концентрації заліза. (А,В) - випадок , (Б,Г) – випадок .

2.3 МОДЕЛІ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ

Для навчання глибокої нейронної мережі потрібна велика кількість даних. Для створення навчального набору даних ми використали ВАХ, змодельовані за допомогою 5 значень , 9 значень , 11 значень і 25 значень , які регулярно розподілені (для і в лінійному масштабі, для і в логарифмічному масштабі) по діапазонах , мкм, і , відповідно. Також ми розглядали 2 види випромінювання: АМ 1.5 та 940 нм. Для кожного з них ми отримали по 12375 характеристик.

Крім того, були підготовлені тестові набори даних. Для АМ 1.5 тестовий набір даних складається з наступних даних:

1)\_**All\_varied** (Було 25 значень для всіх товщин. Початок з до включно)

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 298, 313, 318, 323, 333 |
|  | 313, 318, 323, 328, 333 |
|  | 293, 308, 318, 323, 328, 333, 338 |
|  | 293, 303, 308, 313, 338 |
|  | 298, 303, 318, 328, 333 |
|  | 293, 298, 303, 308, 313, 318, 323, 328, 333 |
|  | 293, 303, 308, 313, 318, 323, 338 |
|  | 293, 308, 318, 328, 333, 338 |
|  | 293, 298, 308, 318, 323, 333 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 303, 318, 323, 328, 333 |
|  | 293, 298, 308, 313, 323, 328, 333 |
|  | 293, 298, 308, 313, 328, 338 |
|  | 293, 298, 303, 318, 323, 328, 338 |
|  | 303, 308, 313, 318, 323, 328, 333 |
|  | 298, 303, 308, 318, 328, 338 |
|  | 293, 308, 318, 323, 333 |
|  | 293, 303, 308, 318, 323, 333 |
|  | 298, 308, 313, 323, 328, 338 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 293, 298, 303, 318, 323, 333 |
|  | 293, 303, 308, 313, 318, 323, 328, 333 |
|  | 298, 313, 323, 328, 333 |
|  | 298, 303, 313, 323, 328, 333 |
|  | 293, 298, 308, 328, 338 |
|  | 298, 308, 318, 323 |
|  | 293, 298, 308, 318, 328, 333 |
|  | 293, 303, 308, 313, 318, 328 |
|  | 298, 308, 318, 323, 328, 333 |

2) **Fe\_varied** (Було 25 значень для всіх товщин. Початок з до включно)

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 300, 330 |
|  | 300, 310, 340 |
|  | 295, 325, 340 |
|  | 290, 300 |
|  | 290, 295, 340 |
|  | 295, 305, 320, 325, 330 |
|  | 300 |
|  | 290, 315, 320 |
|  | 340 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 310, 315, 330, 340 |
|  | 300 |
|  | 310, 315, 335 |
|  | 300, 310 |
|  | 295, 305, 325 |
|  | 310, 315 |
|  | 295, 300, 310 |
|  | 320 |
|  | 290, 330, 340 |

3) **B\_varied** (Було 25 значень для всіх товщин. Початок з до включно)

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 300 |
|  | 310, 320 |
|  | 305, 315 |
|  | 295, 305, 325, 330, 340 |
|  | 290, 310 |
|  | 290, 300, 315 |
|  | 325 |
|  | 290, 310, 320, 335 |
|  | 305, 330 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 300, 305, 340 |
|  | 330 |
|  | 310, 315, 325, 335, 340 |
|  | 295, 315, 320, 340 |
|  | 305, 330 |
|  | 310 |
|  | 300, 320 |
|  | 290, 330 |
|  | 300, 340 |

Для випромінювання 940 нм тестовий набір був наступним:

1)\_**All\_varied** (Було 25 значень для всіх товщин. Початок з до включно)

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 292, 297, 312, 317, 327, 332, 337 |
|  | 292, 302, 307, 312, 317, 332, 337 |
|  | 297, 312, 317, 322, 327, 332 |
|  | 292, 302, 317, 322, 327, 332 |
|  | 292, 302, 307, 317, 322, 327, 332, 337 |
|  | 292, 297, 302, 312, 322 |
|  | 292, 307, 317, 322, 337 |
|  | 297, 312, 327, 332, 337 |
|  | 292, 297, 302, 307, 322, 337 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 297, 302, 307, 312, 317, 322, 327 |
|  | 292, 297, 302, 317, 322, 337 |
|  | 292, 302, 307, 312, 327, 332 |
|  | 297, 307, 312, 317, 327, 337 |
|  | 292, 302, 307, 312, 322, 332 |
|  | 292, 307, 317, 327, 332, 337 |
|  | 297, 302, 312, 317, 332 |
|  | 292, 302, 312, 322, 327, 332, 337 |
|  | 292, 297, 307, 317, 322, 337 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 292, 297, 302, 317, 332, 337 |
|  | 297, 307, 312, 327, 337 |
|  | 292, 297, 302, 307, 322, 332 |
|  | 292, 297, 307, 312, 317, 327, 337 |
|  | 297, 302, 322, 332 |
|  | 292, 302, 307, 312, 322, 327, 337 |
|  | 292, 297, 307, 317, 327, 332 |
|  | 292, 302, 312, 317, 322, 327, 337 |
|  | 297, 307, 312, 317, 327, 332, 337 |

2) **Fe\_varied** (Було 25 значень для всіх товщин. Початок з до включно)

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 310, 315 |
|  | 320 |
|  | 295, 315, 325 |
|  | 340 |
|  | 310, 320, 335 |
|  | 290, 300, 340 |
|  | 300, 325 |
|  | 295, 320, 335 |
|  | 300, 305, 330, 340 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 305, 310, 320, 330 |
|  | 325, 330 |
|  | 295, 305 |
|  | 300, 305, 335 |
|  | 290, 340 |
|  | 310, 330 |
|  | 295, 320 |
|  | 290, 305, 310 |
|  | 330, 335 |

3) B\_varied

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 310, 330 |
|  | 290, 325 |
|  | 305, 340 |
|  | 290, 295, 320 |
|  | 300, 305, 310, 340 |
|  | 315, 330 |
|  | 300, 325 |
|  | 295, 315, 335 |
|  | 310, 335 |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  | 295, 310 |
|  | 315, 335 |
|  | 290, 295, 305 |
|  | 310, 330 |
|  | 300, 325 |
|  | 290, 300, 305, 315, 340 |
|  | 290, 335 |
|  | 295, 315 |
|  | 320, 340 |

Ми спробували побудувати DNN, яка могла б оцінити забруднення залізом, використовуючи параметри СЕ ( і ), виміряні температури і результат підгонки ВАХ (фактор ідеальності). Два спектри освітлення (АМ 1.5 та 940 нм) дають змогу збільшити кількість параметрів для нейронної мережі. Таким чином ми додатково отримуємо до базових параметрів ще і параметри освітлення:

- Jsc\_Fe – струм короткого замикання при наявності міжвузольного Fe.

- Eta\_Fe – коефіцієнт корисної дії при наявності міжвузольного Fe.

- Voc\_Fe – напруга холостого ходу при наявності міжвузольного Fe.

- FF\_Fe – коефіцієнт форми вольт-амперної характеристики з Fe.

- Jsc\_FeB - струм короткого замикання при наявності пар FeB.

- Eta\_FeB - коефіцієнт корисної дії при наявності пар FeB.

- Voc\_FeB - напруга холостого ходу при наявності пар Fe.

- FF\_FeB - коефіцієнт форми вольт-амперної характеристики з FeB.

- Jsc\_e – відносна зміна густини струму короткого замикання після

розпаду пар FeB

- Eta\_e – різниця коефіцієнтів корисної дії при Fe та FeB.

- Voc\_e – різниця напруг холостого ходу при Fe та FeB.

- FF\_e – різниця коефіцієнтів форми ВАХ при Fe та FeB.

Така велика кількість параметрів потрібна нам, щоб наша майбутня нейромережа мала високу ефективність. Глибока нейронна мережа була реалізована за допомогою високорівневого API Keras, наданого TensorFlow [53]. За допомогою keras-tuner ми вишукували найефективніші параметри для нейронних мереж. Були розглянуті різні архітектури схованих шарів:

- "труба": кожен прихований шар містить однакову кількість вузлів;

- "трапеція": кількість нейронів лінійно зменшується від 100% (перший

шар) до 50% (останній шар);

* "трикутник": кількість нейронів лінійно зменшується від 100% (перший шар) до 10% (останній шар);
* "метелик": дві послідовні відбиті конфігурації трапеції;
* "ялинка": дві послідовні конфігурації трапеції.

В якості функції втрат була обрана середня квадратична відносна помилка (MSRE):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (11) |

де - кількість прикладів в наборі даних, - концентрація заліза, використана при моделюванні кожного прикладу, а - прогноз DNN для кожного приклада.

Крім архітектури мережі перебиралися також і інші гіперпараметри нейронних мереж: кількість схованих шарів; кількість нейронів в кожному схованому шарі; розмір міні-вибірки (порція), яка надходила в мережу; кількість епох (кількість разів, яку алгоритм проходитиме через увесь навчальний набір даних); коефіцієнт навчання (параметр, який керує величиною корекції ваг на кожній ітерації мережі); оптимізатор мережі; функція активація нейронів; ініціалізатор мережі; регуляризатор мережі.

III. результати та їх обговорення

В даному розділі студент представляє отримані оригінальні результати в аналітичному, табличному, графічному вигляді, проводить їх обговорення та інтерпретацію, порівняння з результатами досліджень інших авторів.

Опис оригінальних досліджень потрібно проводити найдетальніше. Викладення матеріалу варяяято проводити таким чином, щоб читачеві були зрозумілі висновки, які будуть підсумком роботи. Представлення результатів досліджень має супроводжуватися їх детальним обговоренням.

Для наочного та доступного представлення результатів варто використовувати рисунки і таблиці. Подання ілюстративного матеріалу (рисунки, діаграми, графіки, схеми, фотознімки) потрібно виконувати в такій формі, яка потребує менше часу для сприйняття вміщеної в ньому інформації. Наприклад, таблиці варто використовувати, коли інтерес представляє не хід залежності між величинами, а конкретні числові значення, що вони їх набувають. Не варто дублювати одну й ту ж інформацію, перевантажувати ілюстрації зайвими деталями, які ускладнюють їх розуміння.

В тексті мають міститись посилання на всі ілюстрації із зазначенням номеру, який складається з номеру розділу та порядкового номеру ілюстрації в цьому розділі, розділених крапкою. Наприклад, рис.2.3 – третій рисунок другого розділу. Рисунки повинні розміщуватись після посилання на них у тексті кваліфікаційної роботи. Кожен рисунок супроводжується змістовним підписом, що дозволяє за даними, показаними на рисунку, отримати інформацію про результати досліджень не звертаючись до основного тексту.

Приклад оформлення рисунка:

|  |
| --- |
| https://lh5.googleusercontent.com/2o-kf7sn9u4DORe5aZN-R8Z-f2605uo6_JnwQBgxBTjc8slp3lFP5ejCUnkfTQDn4jI-NrIyJJpNKsE_Ytxl_RI69pgTcIwKPgUd-Pff1SxTba4ie2D0p_naETtJzh50e_avFTw |
| Рис. 2.3. Схематичне зображення досліджуваної структури та схема визначення градієнту температури |

Таблиці нумеруються арабськими цифрами в межах розділу. Слово «Таблиця» розміщується у верхньому лівому куті сторінки, поруч вказується назва таблиці. Наприклад,

Таблиця 1.3. Коефіцієнти теплопровідності досліджуваних структур

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| № п/п | Структура | *k*, Вт/(м·К) |
| 1 | Si | 140,5 |
| 2 | Ge | 74,6 |

Формули та рівняння розміщують із відступом принаймні в один рядок зверху і знизу від основного тексту або сусідніх формул. Перенесення формули чи рівняння допускається лише на знаках рівності, плюс, мінус, множення і ділення з повторенням їх на початку наступного рядка. Формули, що не розділені текстом, мають відокремлюватись комами. Розшифрування значень використаних символів слід наводити в тексті безпосередньо за формулою. Перший рядок розшифрування починають із слова «де», двокрапку після нього не ставлять. При повторному використанні символу наводити його розшифрування не слід, якщо вона надавалася раніше. Формули, на які є посилання в тексті, повинні нумеруватися в межах розділу арабськими цифрами. Номер формули повинен складатися з номеру розділу і номеру формули, розділених крапкою, наприклад, (2.1) – перша формула другого розділу. Номер потрібно брати в круглі дужки і розміщувати на правому полі сторінки на рівні нижнього рядка формули, якої він стосується. При посиланні в тексті на формулу, необхідно зазначити її повний номер в круглих дужках. Приклади наведення формул в тексті:

, (2.3)

(3.1)

Розділ III. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ може складатись з декількох підрозділів.

3.1 Назва підрозділу 3.1

Текст.

3.2 Назва підрозділу 3.2

Текст.

3.3 Назва підрозділу 3.3

Текст.

висновки

У цьому розділі мають бути чітко сформульовані найбільш важливі наукові та практичні результати, отримані в роботі, подані твердження, що підсумовують результати досліджень, співставленні отримані результати з поставленням задачі.

Висновки мають бути конкретними і сформульовані таким чином, щоб можна було отримати уявлення про результати дослідження в цілому, не читаючи детально всього матеріалу. Висновки потрібно формулювати так, щоб вони відображали зміст роботи і показували доведені положення, які виносяться на захист роботи. Не бажано використовувати абстрактні фрази на кшталт «У роботі досліджено ...», а варто «Показано, що...», «Доведено, що...», «Встановлено, що …».

1. Текст висновку №1.
2. Текст висновку №2.
3. Текст висновку №3.

список використаної літератури

В даному розділі приводиться список використаної літератури. До переліку літератури слід включати лише ті джерела, які використовувались в тексті роботи. Список використаної літератури необхідно розміщувати в тій послідовності, в якій вони з'являються в роботі.

[1]. Посилання на літературне джерело №1.

[2]. Посилання на літературне джерело №2.

[3]. Посилання на літературне джерело №3.

Бібліографічний опис літератури складають відповідно до чинних стандартів. Приклади оформлення списку використаної літератури наводяться в таблиці нижче.

ДОДАТОК В. Приклади оформлення у списку джерел

(згідно ДСТУ 8302:2015)

|  |  |
| --- | --- |
| **Характеристика джерела** | **Приклад оформлення** |
| ***Книги:***  Один автор | [1]. Omar M.A. Elementary Solid State Physics: Principles and Applications. 4th ed. Massachusetts : Addison-Wesley, 1975. 669 p. |
| Два автори | [2]. Кузьменко П.П., Макара В.А. Зв'язок між електронною структурою атомів, кристалічною структурою і магнітними властивостями в металах. Київ : Наукова думка, 1995. 124 с. |
| Три автори | [3]. Боровий М.О., Куницький Ю.А., Курилюк В.В. Вступ до наноелектроніки. Київ : Кафедра, 2013. 256 с. |
| Чотири і більше авторів | [4]. Фізичні основи спінтроніки / Товстолиткін О.І. та ін. Вінниця : ТОВ «Нілан-ЛТД», 2014. 500 с. |
|  | |
| ***Статті в періодичних виданнях:***  Один автор | [5]. Howell P.C. Comparison of molecular dynamics methods and interatomic potentials for calculating the thermal conductivity of silicon. *The Journal of Chemical Physics*. 2012. Vol. 137. P. 224111–224125. |
| Два автори | [6]. Гордієнко В. В., Косуба Р. Б. Вікові особливості екологічно обумовленого накопичення важких металів в органах інтактних лабораторних щурів. *Клінічна та експериментальна патологія*. 2016. Т. 15, № 3. С. 26–29. |
| Три автори | [7]. Kuryliuk, V., Korotchenkov, O., Cantarero, A. Carrier confinement in Ge/Si quantum dots grown with an intermediate ultrathin oxide layer. *Physical Review B*. 2012. Vol. 85, №.7. P. 075406-1 – 075406-11. |
| Чотири і більше авторів | [8]. Probing matrix/filler interphase with ultrasonic waves / A. Nadtochiy, B. Gorelov, O. Polovina [et al.]. *Journal of Materials Science*. 2021. Vol. 56. P. 14047–14069. |
|  | |
| ***Матеріали конференцій, тези доповідей*** | [9]. Бородянський Є.А., Карбівський В.Л. Графен та багатошарові вуглецеві наноструктури. *Наука ХХІ сторiччя: Сучаснi проблеми фiзики* : тези доп. конф. мол. вч., м. Київ, 13-15 травня 2014 р. / Київський національний ун-т ім. Т. Шевченка, Київ, 2014. С. 34–35.  [10]. Семенько М.П., Остапенко Р.В. Деякі особливості внутрішньої будови високоентропійних сплавів за даними рентгенівської дифракції. *Сучасні проблеми фізики конденсованого стану* : зб. праць міжнар. конф., м. Київ, 19-20 жовтня 2015 р. / Київський національний ун-т ім. Т. Шевченка, Київ, 2015. – C. 130-131. |
|  | |
| ***Дисертації*** | [11]. Момот А.І. Ефективнi взаємодiї та флуктуацiї у запорошенiй слабкоiонiзованiй плазмi: дис. … доктора фіз.-мат. наук : 01.04.02. Київ, 2019. 297 с. |

ДОДАТКИ

За необхідності, робота може містити ДОДАТКИ, які оформлюються як продовження кваліфікаційної роботи на наступних її сторінках. Додатки можуть включати допоміжний матеріал, необхідний для повноти сприйняття роботи та корисний при її детальному вивченні, наприклад: проміжні математичні доведення, формули, викладки і розрахунки; таблиці допоміжних цифрових даних; опис алгоритмів і програм розв’язання задач на ЕОМ, які розроблені чи використані під час виконання кваліфікаційної роботи; ілюстрації допоміжного характеру; технологічні питання.

Кожен додаток починається з нової сторінки. Якщо в роботі є два чи більше додатків, їх нумерують послідовно великими літерами української абетки, наприклад, Додаток А, Додаток Б. Один додаток позначається як додаток А. За необхідності текст додатків може поділятися на підрозділи, пункти чи підпункти, які слід нумерувати в межах кожного додатку.

Ілюстрації, таблиці, формули та рівняння, що є в тексті додатка, слід нумерувати в межах кожного додатку, наприклад, рис. Г.З - третій рисунок додатка Г. Джерела, що їх цитують тільки в додатках, повинні розглядатися незалежно від тих, які цитуються в основній частині кваліфікаційної роботи, і відповідно їх має бути перелічено наприкінці кожного додатка в переліку посилань.

1. 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. [↑](#endnote-ref-1)