Слайд 2 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

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.

90 % енергії, яку виробляють внаслідок застосування фотовольтаїчних перетворювачів припадає на кремнієві сонячні елементи. 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. Проте багато з існуючих таких методів потребують або спеціальної підготовки об’єктів або спеціального обладнання.

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 існує проблема багатопараметричності взаємозв’язку концентрації рекомбінаційних центрів та параметрів ВАХ.

У зв’язку з цим метою даної роботи було

Розробити глибокі нейронні мережі, призначені для передбачення концентрації домішкового заліза в кремнієвих структурах за величинами рівня легування, товщини бази, температури і фактору неідеальності або характеристик фотоелектричного перетворення.

Налаштувати відповідні мережі та визначити оптимальні значення гіперпараметрів

Протестувати здатність розроблених нейронних мереж визначати концентрацію заліза, спираючись як на синтетичні, так і експериментально виміряні вольт-амперні характеристики кремнієвих сонячних елементів.

*Далі я нічого не правив – давайте Ви подивитесь на варіант слайдів, а потім зідзвонимося і в такому режимі (дивлячись на картинки) обговоримо текст під них…*

Слайд 3 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

План дій виглядав наступним чином:

1.\_Спочатку ми повинні були визначитися із структурою сонячного елементу.

2.\_Далі ми паралельно моделюємо в двох напрямках: коли структура не освітлюється та коли освітлюється або монохроматичним світлом або сонячним світлом. Базу даних для неосвітленої структури ми отримали ще в бакалаврській роботі.

3.\_Отримавши фактично три бази даних – вважаємо їх тренувальними наборами для наших ГНМ.

4.\_Наступним кроком є аналогічне моделювання тестових наборів ВАХ але треба прагнути до максимальної унікальності в порівнянні з тренувальним набором даних.

5.\_Отримавши великий набір даних, розробляємо нейромережі, шляхом перебору їх гіперпараметрів для того, щоб визначити найбільш ефективні набори цих гіперпараметрів та натреновуємо ці нейромережі.

6.\_Проводимо тестування мереж.

7.\_В кінці кінців аналізуємо отримані данні з тестувань, та проводимо аналіз застосовності наших глибоких нейроних мереж до реальних сонячних елементів.

Зупинимось на кожному з цих кроків більш детально.

Слайд 4 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Моделювання структури сонячного елемента

На малюнку зображена кремнієва n+-p-p+ структура, що містить домішкове залізо. Складається вона з емітерного -шару товщиною , бази з дірковою провідністю товщиною та -шару для створення системи з полем задньої поверхні товщиною . Вважалося, що концентрації легуючих домішок (фосфору та бору) дорівнюють в емітері, в базі та в BSF-шарі.

Враховувались багато параметрів такі як:

Неоднорідний розподіл рекомбінаційних центрів (формула 1)

Рекомбінація на дефектах відповідно до моделі Шоклі-Ріда-Хола, темп якої зображений у (формулі 2)

Звуження забороненої зони внаслідок легування для n та p областей розраховувалася за (формулою 3)

Сама ж ширина забороненої зони обчислювалася за формулою Пасслера (формула 4)

Крім цього також розраховувалися коефіцієнти Оже-рекомбінації дірок та електронів для визначення темпу власної рекомбінації.

Моделювання проводилося для двох випадків:

1.\_У першому вважалося, що всі атоми заліза утворюють комплекси і перебувають у міжвузольному стані.

2.\_У другому випадку вважалося, що у кристалі присутні як неспарені міжвузлові атоми заліза так і пари з заміщуючим атомом бору.

Слайд 5 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Моделювання світлових ВАХ + моделювання темнових ВАХ

ВАХ розраховувалися за допомогою програмного пакету одномірного моделювання SCAPS. Темнові та світлові ВАХ моделювалися в діапазоні напруг від 0 до 0.45 В з кроком 0.01 В. У випадку світлових ВАХ вважалося, що СЕ освітлюється або сонячним світлом (це спектр АМ 1.5 з потужністю освітлення 1000 Вт/м^2) або монохроматичним (це спектр 940 нм, з потужністю освітлення 4 Вт/м^2). Значення параметрів, які використовувалися від час розрахунків наведені у таблиці. Параметри, які варіювалися це

Концентрація бору в базі

Товщина бази

Концентрація домішкового заліза в шарах з дірковою провідністю

Температура

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

Всі ВАХ ми розділили на декілька наборів:

В першому для темнових ВАХ були проведені симуляції з використанням 4 значень , 9 значень , 11 значень та 19 значень , рівномірно розподілених по вказаних у Таблиці  діапазонах. Всього для цього набору вийшло 15048. Для тестувального набору ми вирішили зробити базу в якій буде окремо 857 ВАХ з новою варіацією тільки концентрації міжвузольного заліза, 2378 ВАХ з новою варіацією товщини бази, 1664 ВАХ з новою варіацією температури, 1028 ВАХ з новою варіацією концентрації бору та 1368 ВАХ з новою варіацією всіх наших параметрів.

Аналогічно ми зробили і до світлових ВАХ, тільки для тренувального набору в нас вже було 5 значень , а не 4, 25 значень , а не 19. По кожному типу освітлення було 24752 ВАХ. Тестовий набір складався аналогічно: набір з варіацією концентрації заліза мав 1806 ВАХ для 940 нм та 2252 ВАХ для АМ 1.5, набір з варіацією концентрації бору 2202 ВАХ для кожного типу освітлення, набір з варіацією усіх параметрів мав 6602 ВАХ для 940 нм та 8102 ВАХ для АМ 1.5.

Фактор неідеальності для темнових ВАХ шукали шляхом апроксимації ВАХ відповідно до дводіодної моделі сонячного елементу, для якої струм через структуру та прикладена до неї напруга пов’язані формулою (5)

З освітлених ВАХ визначалися струм короткого замикання, напруга розімкнутого кола, фактор заповнення та коефіцієнт корисної дії. Використовувалися саме відносні зміни цих параметрів.

Слайд 6 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Розробка глибоких нейронних мереж

Розглядалися 4-ри варіанти глибоких нейроних мереж, які відрізнялися вхідними шарами. Обов’язковими вхідними вузлами були ті, на які подавалися температура, товщина бази та логарифм концентрації бору в базі.

Перша мережа мала додатково фактор неідеальності для системи з міжвузольним залізом та парами залізо-бор.

Друга мережа окрім попереднього фактору неідеальності мала ще фактор неідеальності для системи де є тільки міжвузольне залізо.

Третя мережа додатково мала на вході відносні зміни струму короткого замикання та коефіцієнту корисної дії. Окремо третя мережа поділялася на DNN(AM) та DNN(940) так як для кожного типу освітлення ми мали різний струм короткого замикання та коефіцієнт корисної дії.

Четверта мережа додатково відносно третьої мала ще на вході напругу розімкнутого кола та відносну зміну фактору заповнення.

Вихідний шар мав 1 вузол та лінійну функцію активації і передбачав логарифм концентрації заліза в кремнієвому сонячному елементі.

Слайд 7 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

У якості функції втрат для темнових ВАХ було середнє значення відносної квадратичної похибки (формула 6). Для світлових ВАХ використовувалося середнє значення просто квадратичної похибки (формула 7). Для роботи з мережами використовувався високорівневий пакет Keras від TensorFlow. Під час налаштування мережі розглядалися різні конфігурації схованих шарів. Кількість шарів, кількість вузлів у першому схованому шарі, розмір пакету, тип активаційної функції для схованих шарів, тип оптимізатора, темп навчання, кількість епох, метод попередньої підготовки даних, тип функції регуляризації, темп регуляризації, темп поріджування, тип початкової ініціалізації вагових коефіцієнтів. Початковий простір пошуку цих гіперпараметрів наведено у таблиці.

Для перебору такої великої кількості параметрів використовувався пакет Keras-Tuner. Пошук відбувався в декілька етапів на все меншому і меншому ареалі даних. Для кількісної оцінки прогностичності на тренувальному наборі темнових ВАХ використовувалася 10-кратна перехресна перевірка а для світлових 5-ти кратна.

Слайд 8 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Тренування та тестування нейронних мереж

Спочатку розглянемо нейромережі для темнових ВАХ.

У таблиці 1 показаний найефективніший набір значень гіперпараметрів для наших нейроних мереж. У таблиці 2 показані результати 10-тикратної перехресної перевірки навчання. Натреновані мережі були використані для передбачень на тестових наборах. Для оцінки якості використовувалися MSRE, коефіцієнт детермінації R^2 та коефіцієнт кореляції Пірсона R. Результати представленні в таблиці 3. Видно, що похибка окремих наборів параметрів може бути достатньо великою. Найбільша похибка спостерігалася, коли тестовий набір створювався з використанням тих значень легування, які не зустрічалися у тренувальному наборі. Для мережі DNN(FeFeB) значне збільшення значення помилки прогнозування спостерігається при T>320K. Товщина бази практично не впливає на помилки прогнозування. Похибка прогнозування різко зростає зі зменшенням рівня легування. На нашу думку не достатньо високі прогностичні можливості мережі DNN(FeFeB) викликані неможливістю точно передбачити концентрацію заліза через неоднозначність зв’язку концентрації заліза та фактора неідеальності. Здатність мереж передбачати концентрацію заліза була також протестована на реальних сонячних елементах. Результати апроксимації експериментальних ВАХ та тестування передбачень щодо вмісту заліза за допомогою нейромереж наведені в таблиці 4. (дуже багато чого сказати ще треба…..)

Слайд 9 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Розглянемо тепер нейромережі для світлових ВАХ.

У таблиці 1 показаний найефективніший набір значень гіперпараметрів для наших нейроних мереж. У таблиці 2 показані результати 5-тикратної перехресної перевірки навчання. Результати передбачення на тестових наборах наведені в таблиці 3. Мережа DNN(AMfull) найбільш наближена до реальної ситуації. Використовуючи тепер на вхідних вузлах не значення фактору неідеальності а фотоелектричні параметри, можемо бачити значне збільшення ефективності мереж. Тестування роботи на реальних зразках проводилося на 4-ьох зразках. Якщо порівнювати 940full та 940 то можемо зробити висновок, що для обох мереж при більш високих температурах маємо більшу ефективність, особливо при високих значеннях концентрації заліза. При малих значеннях концентраціїї заліза ефективними температурами є середні температури, в нашому випадку це 300 К. (дуже багато тексту ще треба….)

Слайд 10 -------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Висновки (Потрібен ще слайд з аналізом до реальних КСЕ?)

1. Проведено моделювання більше ніж 95 000 вольт-амперних характеристик кремнієвих *n*+-*p*-*p*+ структур з різною товщиною бази (150÷380 мкм) та ступенем її легування (1015÷1017 см-3) для температурного діапазону 290÷340 К при варіації концентрації домішкового заліза в інтервалі 1010÷1014 см-3. Розглянуто випадки перебування структури у темряві, при освітленні (сонячний спектр, АМ1.5, 1000 Вт/м2 та монохроматичне 940 нм, 4 Вт/м2) та враховано перебування домішкових атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари FeB.

2. Розроблено глибокі нейронні мережі, призначені для передбачення концентрації домішкового заліза в кремнієвих структурах за величинами рівня легування та товщини бази, температури і наступними характеристиками вольт-амперних характеристик: 1) значення фактору неідеальності темнової ВАХ за наявності пар FeB; 2) значень фактору неідеальності темнових ВАХ до та після розпаду пар FeB; 3) відносних змін струму короткого замикання та ефективності фотоперетворення після розпаду пар FeB; 4) відносних змін струму короткого замикання, напруги холостого ходу, коефіцієнта форми та ефективності фотоперетворення після розпаду пар FeB. Визначено раціональні значення гіперпараметрів мереж (наведені у таблицях 1.4 та 1.8).

3. Проведено навчання та тестування глибоких нейронних мереж на даних, отриманих шляхом моделювання. Виявлено, що середнє відносна квадратична похибка передбачень концентрації заліза може досягати 5⋅10-3 при використанні темнових ВАХ та 3⋅10-4 для випадку ВАХ при освітленні. Показано, що найвища точність оцінок спостерігається для структур з рівнем легування, який відповідає значенням, що використовувалися під час навчання мереж.

4. Проведено тестування нейронних мереж, натренованих на синтетичних даних, на реальних сонячних елементах. Виявлено, що найкращі прогностичні результати спостерігаються при застосуванні до темнових ВАХ мережі, що використовує одне значення фактору неідеальності, а для ВАХ, виміряних при освітленні – мережі, що бере до уваги відносні зміни всіх параметрів фотоелектричного перетворення.

5. Показано можливість застосування налаштованих глибоких мереж для визначення концентрації домішкового заліза в сонячних елементах, виготовлених за BSF та PERC технологіями з пластин кремнію, легованих бором. Розглянуто можливі шляхи покращення точності оцінки завдяки модифікації розміченого набору даних та застосування донавчання стандартних мереж для обробки зображень.