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. Одним з визначальних чинників властивостей КСЕ є система дефектів, зокрема, їхній домішковий склад. Залізо в таких структурах є основною і одною з найшкідливіших домішок.

Неруйнівні методи, що мають на меті оцінку концентрації домішок у напівпровідникових структурах, мають важливе значення з прикладної точки зору.

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.

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

План дій виглядав наступним чином:

1.\_Спочатку ми змоделювали ВАХ в програмному пакеті SCAPS і розбили їх на тренувальний та тестовий набори.

2. Паралельно з цим ми експериментально виміряли ВАХ на реальних СЕ, щоб наш тестовий набір даних містив не тільки синтетично отримані ВАХ.

3. Після цього відбувалася розробка, налаштування та тренування наших нейронних мереж.

4. Кінцевим кроком в роботі було тестування наших глибоких нейронних мереж та аналіз застосовності їх до реальних сонячних елементів.

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

Моделювання

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.

Моделювання проводилося для двох випадків:

1.\_У першому випадку вважалося, що у кристалі присутні як неспарені міжвузлові атоми заліза так і пари заліза з бором. (рівноважний стан)

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

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 під час розрахунків наведені у таблиці. Параметри, які варіювалися це

Концентрація бору в базі

Товщина бази

Концентрація домішкового заліза в шарах з дірковою провідністю

Температура

З вольт-амперних характеристик визначалися:

1) фактор неідеальності *n*;

2) струм короткого замикання *I*SC; 4) напруга розімкненого кола *VOC*;

3) коефіцієнт корисної дії η; 5) фактор заповнення *FF*

*загальна кількість змодельованих ВАХ – більше 95 тис. штук*

ВАХ розраховувалися за допомогою програмного пакету одномірного моделювання SCAPS

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

Розробка глибоких нейронних мереж

Розглядалися 6 варіантів глибоких нейроних мереж, які відрізнялися вхідними шарами (параметрами). Обов’язковими вхідними вузлами були ті, на які подавалися температура, товщина бази та логарифм концентрації бору в базі.

Додатковими вхідними вузлами були: фактор неідеальності для системи з міжвузольним залізом та парами залізо-бор, фактор неідеальності для системи де є тільки міжвузольне залізо, відносні зміни струму короткого замикання та коефіцієнту корисної дії, відносні зміни напруги розімкнутого кола та фактору заповнення.

Вихідний шар мав 1 вузол і передбачав логарифм концентрації заліза в кремнієвому сонячному елементі.

На малюнку зображена схема розробки мереж. Важливою на малюнку є функція втрат, використовували при цьому метрики MRSE (або ж середнє значення відносної квадратичної похибки) та MSE (середнє значення просто квадратичної похибки). Перед мережами стояло завдання з кожним новим етапом в навчанні шукати шляхи по зменшенню цих метрик по зменшенню функції втрат.

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

Налаштування ГНМ

Під час налаштування мережі розглядалися різні конфігурації схованих шарів, кількості шарів, кількості вузлів у першому схованому шарі, розміри пакетів, типи активаційної функції для схованих шарів, типи оптимізаторів, темпи навчання, кількість епох, початкові значення вагових коефіцієнтів, методи попередньої підготовки даних, способи регуляризації.

Для перебору такої великої кількості параметрів використовувався пакет Keras-Tuner. Пошук відбувався в декілька етапів на все меншому і меншому ареалі даних.

Раціональні набори гіперпараметрів для двох мереж наведені в таблиці.

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

Тренування нейронних мереж

Після розробки нейромереж, тобто після знайдення найефективніших наборів гіперпараметрів для кожної з мереж, ми провели тренування відповідних мереж і застосували методи перехресної перевірки натренованих мереж: для темнових мереж була обрана 10-ти кратна перехресна перевірка, для світлових 5-ти кратна. Результати перевірок наведені у таблицях. На графіках, що наведені на слайді, пунктирна лінія – лінія істинності. Найбільше відхилення від неї можемо спостерігати для мережі де на зразку не було освітлення і співіснувало неспарене міжвузольне залізо з парами залізо-бор (рівноважний стан). Найменше відхилення спостерігається для мережі де на зразку було сонячне освітлення АМ 1.5 з чотирма додатковими вузлами на вхідному шарі: відносною зміною струму короткого замикання, коефіцієнта корисної дії, напруги розімкнутого кола та фактору заповнення.

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

Тестування на синтетичних ВАХ

Для оцінки якості передбачень на тестових наборах використовувалися MSRE, коефіцієнт детермінації та коефіцієнт кореляції Пірсона . Коефіцієнт детермінації – це статистичний показник, що використовується як міра залежності варіації залежної змінної від варіації незалежних змінних. Він вказує, наскільки отримані спостереження підтверджують модель. Змінюється від 0 до 1, чим ближче до 1 тим модель краща. Коефіцієнт Кореляції Пірсона – це показник лінійної залежності між двома змінними X та Y, який набуває значень від −1 до +1 включно. Якщо він 0 – то лінійної кореляції між змінними немає, якщо 1 – то лінійна залежність є.

Для темнових та світлових мереж найбільша похибка спостерігається у випадку, коли тестовий набір створювався з використанням тих значень легування, які не зустрічалися у тренувальному наборі.

Для темнових мереж набір Fe-varied найбільш наближений до реальної ситуації, і в цьому випадку навіть для відносна квадратична похибка не перевищує 0,01 для 88% випадків. Що не можна сказати за набір B-varied.

В межах концентарції заліза можемо спостерігати появу сильного відхилення від лінії істинності для світлової мережі 940full. Загалом, мережі з 940 нм добре працюють при малих значення концентрації заліза.

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

Тестування на реальних ВАХ

Для тестування було використано два зразки, #320 та #349. – концентрація заліза в базі. Вона була визначена шляхом вивчення кінетики зміни величини струму короткого замикання при монохроматичного освітлення після дисоціації пар і різна для кожного зразка.

Вимірювання були проведені як після витримки зразків в темряві на протязі 48 год при кімнатній температурі (випадок «Fe-FeB»), так і безпосередньо після інтенсивного освітлення галогеновою лампою (випадок «Fe»).

Результати для реальних ВАХ підтверджують тенденції, виявлені при роботі з синтетичними ВАХ. Зокрема, точність прогнозу падає при температурах, вищих 320 К та концентраціях заліза, близьких до верхньої межі () використаного діапазону.

Передбачення мережі , тренованої на повному наборі, кращі ніж у випадку використання лише тренувального набору, особливо для зразка #320. Це підкреслює важливість тренування ГНМ з тими значеннями , які очікуються у об’єктах майбутніх досліджень. Для світлових мереж наведені графіки. При цьому використовувалися ті ж самі зразки (і ще два нових…). Для обох мереж 940 та 940full можна зробити висновок, що при більш високих температурах маємо більшу ефективність, особливо це помітно при значенні , інші граничні концентрації дають меншу ефективність, особливо при малих температурах. Хоча при малих концентраціях можемо бачити хороший результат при T = 300 K для тренувального набору.

Висновки

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.