**Слайд 2 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------**

Використання відновлюваних джерел енергії є життєво необхідним. Серед технологій, спрямованих на вирішення цього завдання, особливе місце займає перетворення сонячного випромінювання на електроенергію.

90 % енергії, яку виробляють фотовольтаїчні перетворювачі припадає на кремнієві сонячні елементи. Одним з визначальних чинників властивостей СЕ є система дефектів, зокрема, їх 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.

Найпоширенішим методом характеризації сонячних елементів є вимірювання вольт-амперних характеристик. Чимало сучасних наукових досліджень спрямовані на розробку методів характеризації дефектів, які спираються на аналіз ВАХ. 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.

Налаштувати відповідні мережі та визначити оптимальні значення гіперпараметрів

Протестувати здатність розроблених нейронних мереж визначати концентрацію заліза як на синтетичних так і на експериментальних даних.

**Слайд 3 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------**

План дій виглядав наступним чином:

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

2. Паралельно, 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 глибоких нейронних мереж та аналіз застосовності до реальних сонячних елементів.

**Слайд 4 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------**

Моделювання

На малюнку зображена кремнієва n+-p-p+ структура, що містить домішкове залізо.

Моделювання проводилося для двох випадків:

1.\_Випадок співіснування неспареного міжвузольного заліза з парами залізо-бор.

2.\_Та випадок коли всі атоми заліза перебувають в міжвузольному стані.

У випадку світлових ВАХ вважалося, що СЕ освітлюється або сонячним світлом (спектр АМ 1.5) або монохроматичним (спектр 940 нм). Значення параметрів, які використовувалися під час розрахунків наведені у таблиці.

З вольт-амперних характеристик визначався фактор неідельності для темного випадку, інші 4 параметри для світлових випадків.

**Слайд 5 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------**

Розробка глибоких нейронних мереж

Розглядалися 6 варіантів глибоких нейронних мереж, які відрізнялися вхідними параметрами. Обов’язковими вхідними вузлами були температура, товщина бази та логарифм концентрації бору в базі.

Додатковими вхідними параметрами були:

Фактори неідеальності для перших двох типів мереж. Відносні зміни струму короткого замикання та коефіцієнту корисної дії для двох наступних типів мереж. Останні два типи мереж враховували на додачу напругу холостого ходу та фактор заповнення

Вихідний шар мав 1 вузол і передбачав логарифм концентрації заліза.

На малюнку зображена схема розробки мереж. Важливою на малюнку є функція втрат, використовували для неї метрику середньої відносної квадратичної похибки та середнє значення просто квадратичної похибки.

**Слайд 6 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------**

Налаштування ГНМ

Під час налаштування мереж на тренувальному наборі за допомогою пакету Keras-Tuner ми перебрали велику кількість гіперпараметрів для нейромеж та визначили раціональні набори цих гіперпараметрів. Два з таких наборів для двох наших мереж наведені у таблиці.

Були розглянуті 5 конфігурацій мереж, 8 різних оптимізаторів та великі вибірки інших не менш важливих для нас гіперпараметрів.

**Слайд 7 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------**

Тренування нейронних мереж

Після налаштування нейромереж ми провели тренування мереж і застосували методи перехресної перевірки до них. Результати перевірок наведені у таблицях. На графіках, що наведені на слайді, пунктирна лінія – лінія істинності. Найбільше відхилення від неї можемо спостерігати для мережі де не було освітлення і співіснувало неспарене міжвузольне залізо з парами залізо-бор. Найменше відхилення спостерігається для мережі де було сонячне освітлення АМ 1.5 з чотирма додатковими вузлами на вхідному шарі.

**Слайд 8 ---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------**

Тестування на синтетичних ВАХ

Дієздатність мереж була перевірена на тестових наборах отриманих на основі моделювання. Ці тестові набори жодна з мереж ще не бачила. Для оцінки якості передбачень на тестових наборах використовувалися MSRE, коефіцієнт детермінації та коефіцієнт кореляції Пірсона .

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

Для темнових випадків набір з варіацією концентрації заліза найбільш наближений до реальної ситуації, відносна квадратична похибка не перевищує 0,01 для майже 90% випадків.

Для світлового випадку спектра 940 нм можемо спостерігати появу відхилення від лінії істинності на середині інтервалу концентрацій заліза.

Чим більше параметрів в мережі – тим краща її ефективність – головний висновок.

**Слайд 9 -------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------**

Тестування на реальних ВАХ

Треба сказати, що результати на реальних ВАХ не такі чудові, як на синтетичних.

Для тестування на реальних ВАХ було використано два зразки. – це концентрація заліза в базі. Вона була визначена шляхом вивчення кінетики зміни величини струму короткого замикання.

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

Передбачення для темнового випадку з міжвузольним залізом та парами залізо-бор, натренованого на повному наборі, кращі ніж у випадку використання лише тренувального набору, особливо для 320-го зразка. Це підкреслює важливість тренування ГНМ з тими значеннями концентрацій бору, які очікуються у об’єктах майбутніх досліджень. Для обох мереж випадку монохроматичного освітлення можна зробити висновок, що при більш високих температурах маємо більшу ефективність.

Висновки

1. Проведено моделювання ВАХ кремнієвих *n*+-*p*-*p*+ структур. Розглянуто випадки перебування структури у темряві та при освітленні сонячним та монохроматичним світлом. Враховано перебування домішкових атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пар FeB.

2. Розроблено глибокі нейронні мережі, призначені для передбачення концентрації домішкового заліза в нашій структурі за величинами рівня легування, товщини бази, фактору неідеальності темнової ВАХ за наявності пар FeB, фактору неідеальності темнових ВАХ до та після розпаду пар FeB, відносних змін струму короткого замикання, ефективності фотоперетворення, напруги холостого ходу, коефіцієнта форми. Визначені раціональні значення гіперпараметрів.

3. Проведено навчання та тестування глибоких нейронних мереж на даних, отриманих шляхом моделювання. 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, на реальних сонячних елементах. Виявлено, що найкращі результати спостерігаються при застосуванні до темнових ВАХ мережі, що використовує одне значення фактору неідеальності, а для ВАХ, виміряних при освітленні – мережі з відносними змінами всіх параметрів фотоелектричного перетворення.

5. Показано можливість застосування налаштованих глибоких мереж для визначення концентрації домішкового заліза в сонячних елементах.