# **ЗАСТОСУВАННЯ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ ЗАЛІЗА В КРЕМНІЄВИХ СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТАХ**

Оліх О.Я., Завгородній О.В

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

[olikh@univ.kiev.ua](mailto:olikh@univ.kiev.ua), nevermor464@gmail.com

# **SUMMARY OF THE ABSTRACT**

При підході на основі глибоких нейронних мереж по фактору ідеальності було оцінено забруднення залізом в Si сонячному елементі. У цьому дослідженні оцінка проводилася додатково по фотоелектричним параметрам.

Для збільшення ефективності прогнозування потрібно збільшити базу даних та підвищити її якість.

Проводилось моделювання темнових та світлових ВАХ. Апроксимувавши ВАХ, визначалися параметри фотоперетворення та фактори ідеальності. Створивши базу даних, налаштували та натренували глибокі нейронні мережі. Протестували мережі з використанням синтетичних та експериментальних ВАХ. Розрахунки проводились для n+-p-p+ структури при різних значеннях температури, товщини бази (p-область), концентрацій легуючого бору та заліза. Розглядалися загалом 4 нейронні мережі з різними вхідними шарами, які були створені в пакеті Keras API. Для налаштування мереж визначали раціональні значення 12-ти гіперпараметрів. Для оцінки якості натренованих мереж використовувалися , коефіцієнт кореляції Пірсона , та коефіцієнт детермінації .

Проведено моделювання більше 95 000 вольт-амперних характеристик кремнієвих структур з різною товщиною бази та ступенем її легування для температурного діапазону при концентрації домішкового заліза в інтервалі . Розглянуто випадки перебування структури у темряві, при освітленні сонячним та монохроматичним світлом, враховано перебування домішкових атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари FeB. MSRE передбачень концентрації заліза може досягати при використанні темнових ВАХ та для випадку освітлення. Найвища точність оцінок спостерігається для структур з рівнем легування, який відповідає значенням, що використовувалися під час навчання. Найкращі прогностичні 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. Розглянуто можливі шляхи покращення точності оцінки завдяки модифікації набору даних та застосування донавчання стандартних мереж для обробки зображень.

# **APPLICABLE TOPIC AND SUB-TOPIC NUMBER**

TOPIC 1: Silicon Materials and Cells

1.4 Characterisation & Modelling of Si Cells

Background -> 1. What is already known about the subject, related to the paper in question? 2. What is not known about the subject and hence what the study intended to examine (or what the paper seeks to present)?

Problem statement -> Specific problem that you are trying to solve.

Methods -> What was the research design?

Results

text – скоріше за все треба видалити.

# **EXPLANATORY PAGES**

# **AIM AND APPROACH**

Метою була розробка та налаштування (з визначенням оптимальних значень гіперпараметрів) глибоких нейронних мереж, призначених для передбачення концентрації домішкового заліза в кремнієвих структурах за величинами рівня легування та товщини бази, температури і фактору ідеальності або характеристик фотоелектричного перетворення. Серед гіперпараметрів ми обрали: кількість схованих 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 проріджування, тип початкової ініціалізації вагових коефіцієнтів. Розглядалися 5 конфігурацій схованих шарів: 1) всі сховані шари складаються з однакової кількості вузлів; 2) шість схованих шарів, в кожному наступному з них кількість вузлів зменшується на 10% кількості вузлів у першому шарі; 3) десять шарів, кількість нейронів в який рівномірно зменшується від 100% (перший шар) до 10% (останній шар); 4) дві дзеркально відображені trapezium конфігурації; 5) Дві послідовні конфігурації №2. Для кількісної оцінки прогностичних властивостей ГНМ на тренувальному наборі використовувалася 10-ти кратна перехресна перевірка для темнових ВАХ, та 5-ти кратна перехресна перевірка для ВАХ при освітленні сонячним спектром. Розглядали саме відносні зміни наступних фотоелектричних параметрів: струм короткого замикання , напруга холостого ходу , фактор заповнення та коефіцієнт корисної дії . Вольт-амперні характеристики розраховувалися за допомогою програмного пакету одномірного моделювання SCAPS 3.3.08 При моделюванні проводилися розрахунки положення рівня Фермі, які застосовувалися для оцінки просторового розподілу дефектів різного типу. 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 сонячним світлом (спектр АМ1.5, потужність освітлення 1000 Вт/м2, що відповідає стандартним умовам), або монохроматичним (940 нм, 4 Вт/м2 , що збігається з випадком, коли для освітлення використовується світло випромінюючий діод SN-HPIR940nm-1W). Крім цього, треба було показати можливість розроблених нейронних мереж визначати концентрацію заліза, спираючись як на синтетичні, так і експериментально виміряні вольт-амперні характеристики.

# **SCIENTIFIC INNOVATION AND RELEVANCE**

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. Неруйнівні методи, що мають на меті оцінку концентрації домішок у напівпровідникових структурах, зокрема в КСЕ, мають важливе значення з прикладної точки зору. Проблема багатопараметричності взаємозв'яку концентрації рекомбінаційних центрів та параметрів ВАХ, що є однією з найголовніших перепон на шляху розробки зручного для використання та експресного методу, може бути достатньо легко вирішена за допомогою глибоких нейронних мереж.

# **RESULTS (OR PRELIMINARY RESULTS) AND CONCLUSIONS**

Для ВАХ, виміряних в темряві, найбільша похибка спостерігається у випадку, коли тестовий набір створювався з використанням тих значень легування, які не зустрічалися у тренувальному наборі. На нашу думку, не достатньо високі прогностичні можливості мережі в цьому випадку викликані фундаментальною неможливістю точно передбачити концентрацію заліза через неоднозначність зв’язку фактору ідеальності та концентрації заліза. Використання факторів ідеальності після розпаду пар FeB та у стані рівноваги, спричиняє своєрідне знаття виродження взаємозв'язку фактору ідеальності та концентрації заліза. При цьому спостерігається суттєве підвищення прогностичних властивостей ГНМ порівняно з використанням всього одного значення фактору ідеальності. Крім того, підвищення температури, зменшення рівня легування та концентрації заліза призводять до зростання похибки передбачення. Здатність ГНМ передбачати концентрацію заліза була також протестована на реальних КСЕ. Це були кремнієві структури, виготовлені з Cz-пластин, легованих бором. Для тестування було використано два зразки. Параметри реальних структур та параметри, що використовувалися при моделюванні відрізнялися. Головним критерієм вибору саме таких зразків була необхідність того, щоб рекомбінація ШРХ визначалась саме дефектами, пов’язаними із залізом. Прогнози мережі щодо концентрації заліза відрізнялися лише в декілька разів від виміряних значень для випадку співіснування міжвузольного заліза та пар FeB. Тренуючи мережу на повному наборі даних (тренувальні + тестові набори) помилка прогнозу взагалі не перевищує 40%. Результати для реальних ВАХ підтверджують тенденції, виявлені при роботі з синтетичними ВАХ: точність прогнозу падає при температурах, вищих 320 К та концентраціях заліза, близьких до верхньої межі використаного діапазону. Підхід з фактором ідеальності ускладнений тим, що ми не можемо бути впевненими, що дисоціювали всі пари FeB.

Для випадку освітлення також найбільша похибка спостерігається у випадку, коли тестовий набір спотворювався з використанням тих значень легування, які не зустрічалися у тренувальному наборі. Для випадку монохроматичного світла використання повного набору даних для тренування майже не покращує результат відносно набору без тестової складової. Для сонячного спектру навпаки – тренування на повному наборі даних суттєво підвищило ефективність. Комбінування фотоелектричних параметрів може бути темою наступного дослідження, бо можлива така сама ситуація як з двома факторами ідеальності.

Також ми дослідили застосовність розроблених ГНМ до реальних сонячних елементів (BSF та PERC). Застосовність створених ГНМ визначається виконанням умови Шоклі-Ріда-Хола. Крім того, база має бути легована бором. Якщо база буде легована не бором, то симуляційна модель повинна бути змінена. Якщо інші дефекти присутні в сонячному елементі і також є причиною інтенсивної рекомбінації ШРХ - розрахункова модель повинна бути більш складною. Наступним кроком досліджень може стати характеризація дефектів фотоелектричних перетворювачів. На нашу думку, існує два основні напрямки покращення методу. Один із них пов’язаний з використанням більш якісного набору розмічених даних для тренування ГНМ. Такий набір може бути отриманий або шляхом використання 3D симуляторів бар’єрних структур (наприклад, SILVACO TCAD) або завдяки експериментальним вимірюванням ВАХ на широкому наборі реальних КСЕ. Другий шлях пов’язаний з покрашенням функціонування ГНМ і в цьому випадку найбільш перспективним видається використання підходу донавчання.