# **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.

Проводилось моделювання ВАХ при освітленні. Апроксимувавши ВАХ, визначалися параметри фотоперетворення. Створивши базу даних, налаштували та натренували глибокі нейронні мережі. Протестували мережі з використанням синтетичних та експериментальних ВАХ. Розрахунки проводились для структури при різних значеннях температури, товщини бази, концентрацій легуючого бору та заліза. Розглядалися 2 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 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 . Найвища точність оцінок спостерігається для структур з рівнем легування, який відповідає значенням, що використовувалися під час навчання. Найкращі прогностичні результати спостерігаються при застосуванні для мереж 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

# **EXPLANATORY PAGES**

# **AIM AND APPROACH**

Метою була розробка та налаштування (визначення оптимальних значень гіперпараметрів) глибоких нейронних мереж, призначених для передбачення концентрації домішкового заліза в кремнієвих структурах за величинами рівня легування, товщини бази, температури та 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 5-ти кратна перехресна. Розглядали саме відносні зміни фотоелектричних параметрів: струму короткого замикання , напруги холостого ходу , фактору заповнення та коефіцієнту корисної дії . Вольт-амперні характеристики розраховувалися за допомогою програмного пакету одномірного моделювання SCAPS. При моделюванні проводилися розрахунки положення рівня Фермі, які застосовувалися для оцінки просторового розподілу дефектів різного типу. Моделювання відбувалося в діапазоні напруг від нульової напруги до напруги холостого ходу. Вважалося, що сонячний елемент 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**

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 (тренувальний+тестовий) для тренування майже не покращує результат відносно набору даних без тестової складової. Для сонячного спектру навпаки – тренування на повному наборі даних суттєво підвищило ефективність. Комбінування фотоелектричних параметрів може бути темою наступного дослідження. Ця гіпотеза походить від попереднього дослідження фактору ідеальності, коли використання одразу декількох факторів ідеальності (після розпаду пар FeB та в рівновазі) було більш ефективним ніж використання всього одного фактору ідеальності для прогнозування.

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. Перший пов’язаний з використанням більш якісного набору даних для тренування ГНМ. Такий набір може бути отриманий або шляхом використання 3D симуляторів бар’єрних структур (наприклад, SILVACO TCAD або SENTAURUS TCAD) або завдяки експериментальним вимірюванням ВАХ на широкому наборі реальних сонячних елементів. Другий шлях пов’язаний з покращенням функціонування ГНМ і в цьому випадку найбільш перспективним видається використання підходу донавчання. Наприклад, небагаточисленний набір параметрів структур та результатів вимірювань може бути мультипліковано і перетворено на зображення. Після цього для розпізнавання можуть бути використані вже готові (навчені, оптимізовані) ГНМ, орієнтовані на розпізнавання зображень (наприклад, VGG16).

# **A Deep Neural Network Approach to Estimate Iron Contamination of a Solar Cell Using Photovoltaic Parameters**

Olikh O.Ya., Zavhorodnii O.V.

Taras Shevchenko National University of Kyiv

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

# **SUMMARY OF THE ABSTRACT**

Using an approach based on deep neural networks (DNN), the contamination of a solar cell with iron was estimated using the ideality factor. In this research, the assessment was additionally performed on photovoltaic parameters.

The I-V characteristics under illumination were modeled. After approximating the I-V characteristics, the photovoltaic parameters were determined. After creating the database, we set up and trained deep neural networks. Tested networks using synthetic and experimental I-V characteristics. The calculations were performed for the structure at different values of temperature, base thickness, boron and iron dopant concentrations. We considered 2 neural networks with different input layers, which were created in the Keras API framework. To optimize the networks, we determined the optimal values of 12 hyperparameters. To assess the quality of trained networks, we used MSRE, Pearson's correlation coefficient , and determination coefficient .

More than 95 000 I-V characteristics of silicon structures with different base thicknesses , boron doping levels , temperatures , and iron concentrations were modeled. The cases of the structure under sunlight and monochromatic light illumination are considered, it is taken into account that impurity iron atoms can be in the interstitial state and as part of the FeB pair. MSRE predictions of iron concentration can reach . The highest accuracy of the estimates is observed for structures with a doping level that corresponds to the values used during training. The best predictive results are achieved when applied to networks with relative changes in all parameters of photovoltaic conversion. Possible ways to improve the estimation accuracy by modifying the dataset and applying retraining of standard image processing networks are considered.

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

TOPIC 1: Silicon Materials and Cells

1.4 Characterisation & Modelling of Si Cells

# **EXPLANATORY PAGES**

# **AIM AND APPROACH**

The aim was to develop and configure (determine the optimal values of hyperparameters) deep neural networks designed to predict the concentration of impurity iron in silicon structures by the values of the doping level, base thickness, temperature, and photovoltaic conversion characteristics. Among all possible hyperparameters, we chose the following: number of hidden layers, number of nodes in the first hidden layer, batch size, type of activation function for hidden layers, type of optimizer, learning rate, number of epochs, data preprocessing method, type of regularization function, regularization rate, thinning rate, type of initialization of weights. We considered 5 configurations of hidden layers: 1) all hidden layers consist of the same number of nodes; 2) six hidden layers, in each subsequent layer the number of nodes decreases by 10% of the number of nodes in the first layer; 3) ten layers, in which the number of neurons uniformly decreases from 100% (first layer) to 10% (last layer); 4) two mirrored trapezium configurations; 5) Two consecutive configurations of #2. To quantify the prognostic properties of DNNs on the training set, we used a 5-fold cross-validation. We considered the relative changes of the photovoltaic parameters: short-circuit current , open-circuit voltage , fill factor and efficiency . I-V characteristics were calculated using the one-dimensional modeling software package SCAPS. During the modeling, we calculated the position of the Fermi level, which was used to assess the spatial distribution of defects. The simulation was performed in the voltage range from zero voltage to no-load voltage. The solar cell was illuminated either with sunlight (AM1.5 spectrum, 1000 illumination power, which corresponds to standard conditions), or with monochromatic light (940 nm, 4 , which coincides with the case when the light-emitting diode SN-HPIR940nm-1W is used for illumination). In addition, it was necessary to demonstrate the ability of the developed neural networks to determine the concentration of iron based on both synthetic and experimentally measured I-V characteristics.

# **SCIENTIFIC INNOVATION AND RELEVANCE**

The recombination processes associated with defects (intrinsic and impurity) are extremely important for understanding the properties of solar cells, as they often limit the efficiency of photovoltaic devices. However, the physical parameters that control these processes can be extremely difficult to measure, requiring special methods and sample preparation. Non-destructive methods aimed at estimating the concentration of impurities in semiconductor structures are important from the applied point of view. The problem of the multivariate relationship between recombination center concentration and I-V parameters, which is one of the main obstacles to the development of a user-friendly and rapid method, can be easily solved by DNNs.

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

The largest error is observed in the case when the test set was distorted using doping values that were not found in the training set. For the monochromatic light, using the full data set (training + test) for training shows almost no improvement over the data set without the test component. For the solar spectrum, on the other hand, training on the full dataset has significantly increased efficiency. The combination of photovoltaic parameters may be the topic of further research. This hypothesis comes from a previous research on the ideality factor, where the use of several ideality factors (after FeB pair decay and at equilibrium) was more effective than using only one ideality factor to predict.

We also investigated the applicability of the developed DNNs to real solar cells (BSF and PERC). The applicability of the created DNNs is determined by the fulfillment of the Shockley-Reed-Hall (SCR) condition. In addition, the base must be doped with boron. If the base is not doped with boron, the simulation model should be changed. If other defects are present in the solar cell and also cause intensive recombination of the SCR, the calculation model should be more complex. The next step in the research may be the characterization of defects in photovoltaic cells. In our opinion, there are two main ways to improve the method. The first is related to the use of a better data set for training DNNs. This set can be generated either by using 3D barrier structure simulators (e.g., SILVACO TCAD or SENTAURUS TCAD) or by experimental measurements of I-V characteristics on a wide range of real solar cells. The second way is related to improving the functioning of DNNs, and in this case, the most promising approach seems to be the use of a pre-training approach. For example, a small set of structure parameters and measurement results can be multiplied and transformed into an image. After that, ready-made (trained, optimized) DNNs (for example, VGG16) can be used for image recognition.