Міністерство освіти і науки України

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Фізичний факультет

Кафедра загальної фізики

**Дослідницька пропозиція**

Зі спеціальності 104 Фізика та астрономія

«Визначення концентрації домішок в кремнієвих сонячних елементах методами глибокого навчання згорткових повнозв’язних нейромереж»

Виконав: Завгородній Олексій Володимирович

Науковий керівник: Оліх Олег Ярославович

Київ 2022

**Обгрунтування актуальності**

У зв'язку із зростанням населення і промисловості споживання електроенергії росте з кожним днем. Через екологічні проблеми традиційних електростанцій недостатньо для задоволення попиту споживачів. Більшість багатих країн сьогодні концентрують свої зусилля на розробці екологічних матеріалів і вкладають значні кошти в розвиток продукції. Вітер, сонце, паливні елементи і гідро/водні ресурси є одними з найчистіших та екологічних відновлювальних джерел.

Для сучасного життя є необхідним використання відновлювальних джерел енергії (ВДЕ). Приріст потужностей ВДЕ за останні роки перевершив всілякі попередні прогнози та оцінки, навіть незважаючи на пандемію COVID-19. Міжнародне агентство з відновлювальних джерел енергії у 2020 році оприлюднило дані, за якими приріст потужностей у 2020 році на 50% більший ніж у 2019 році [1]. Цей приріст складає більше ніж 250 ГВт. А у 2021 році у світі приріст становив вже рекордні 295 ГВт нових потужностей. Цього року очікується глобальне збільшення потужностей до 320 ГВт [2].

Сонячна енергетика сприяє скороченню викидів вуглекислого газу, зменшенню забруднення атмосферного повітря, захисту навколишнього середовища, поліпшенню соціальних стандартів. Методи виготовлення та матеріали, з яких виготовляють сонячні елементи, постійно вдосконалюються. Виробники та дослідники з усього світу шукають нові підходи щодо збільшення ефективності сонячних елементів, намагаються підвищити обсяги вироблення енергії з одиниці площі, поліпшити роботу при будь-якому освітленні і збільшити стійкість сонячних елементів від втручання зовнішніх факторів. В останні десятиліття дослідники значно підвищили ефективність сонячних елементів, що вивело сонячну енергетику на новий рівень.

Унікальність сонячної енергетики пов’язана, насамперед, з можливістю задоволення енергетичних потреб без хімічного та теплового забруднення навколишнього середовища, при цьому генерація енергії може відбуватися безпосередньо в околі місця споживання.

Сонячна фотовольтаїка має найшвидші темпи росту серед інших енергетичних технологій. З вдосконаленням сонячної енергетики було розроблено низку різноманітних видів сонячних елементів: кремнієві (перше покоління), тонкоплівкові (друге покоління) і органічні (третє покоління). Тонкоплівкові та органічні сонячні елементи різняться в залежності від ефективності, вартості, довготривалості. Основну увагу приділяють матеріалам, що поглинають світло: від неорганічних моно- і полікристалічних напівпровідників до органічних, полімерних і гібридних сполук. Лише завдяки сукупності всіх необхідних компонентів сонячної батареї можливо досягти необхідної ефективності перетворення енергії світла в електричну.

**Обгрунтування теми**

За останні роки більше ніж 90% енергії, яка була вироблена фотовольтаїчними перетворювачами, припадає на кремнієві сонячні елементи (КСЕ). Виробники обладнання для сонячних електростанцій зосередженні на покращенні фотоелектричних пристроїв, тому вони обрали монокристалічний кремній, який в порівнянні з полікристалічним має меншу кількість дефектів. Використання монокристалічного кремнію оцінюється в 80% на світовому ринку сонячної енергії, коли на полікристалічний кремній припадає лише 20% [3]. З кожним роком доля полікристалічного кремнію зменшується і очікується найближчим часом його зникнення зі світового ринку сонячної енергії.

Властивості кремнієвих сонячних елементів (КСЕ) напряму залежать від їх домішкового складу, зокрема від концентрації заліза, яке є шкідливою домішкою для сонячного елемента. Окрім міжвузольного заліза муже бути присутнім інші типи дефектів, які як і міжвузольне залізо також викликають інтенсивну рекомбінацію Шоклі-Рида-Холла і є шкідливими домішками. Основними конкурентами пари FeB в CZ-Si є комплекси бор-кисень та кисневмістні преципітати; побудова відповідної моделі може бути наступним кроком подібних досліджень або замість заліза або пар залізо-бор в міжвузольному положенні можуть перебувати інші перехідні метали. Тому, в порівнянні з магістерською роботою, ми маємо намір досліджувати не один тип дефектів, а різні комплекси.

З метою здешевлення кінцевої продукції для створення КСЕ переважно використовуються кристали відносно невисокої чистоти і металеві домішки є достатньо типовими для подібних систем. Як наслідок, у світі поширені дослідження щодо впливу різноманітних металевих домішок на характеристики сонячних елементів. Зокрема значна увага приділена атомам алюмінію (Ш. Ян, Х. Ю, К. Фенг, Жейянгський університет, Гонконг) чи нікелю (Ташкентський державний технічний університет, Узбекистан, М.К. Бахадирханов, С.Б. Ісамов, З.Т. Кенжаев, С.В. Ковешніков).

Так можна виділити роботи, де експериментально проаналізовано взаємозв’язок концентрації заліза з величиною часу життя неосновних носіїв заряду (І.Гордон, Університет Дебрецена, Угорщина), величиною фактору неідеальності (Дж. Бодунрін, Д. Оеба, С. Молої, Університет Південної Африки, Преторія, Південна Африка), а також теоретичну роботу Я. Шмідта (Інститут досліджень сонячної енергетики, Хамелн, Німеччина), спрямовану на аналіз впливу розпаду пари залізо-бор на параметри фотоелектричного перетворення КСЕ.

Для дослідження концентрації дефектів в КСЕ, з прикладної точки зору, використовують неруйнівні методи. Вони бувають як прямими так і не прямими, але майже завжди потребують спеціальної обробки об’єктів або спеціального обладнання. Найпоширенішим неруйнівним методом є вимірювання вольт-амперних характеристик.

В наших попередніх роботах була показана принципова можливість оцінки концентрації заліза за величиною фактору неідеальності, який безпосередньо може бути визначений в результаті вимірювання ВАХ. Проте однією з найголовніших перепон на шляху розробки подібного зручного для використання та експресного методу є багатопараметричність взаємозв’язку концентрації рекомбінаційних центрів та параметрів ВАХ. Завдяки використанню методів глибокого навчання, які саме і орієнтовані на вирішення задач, де не передбачається можливість чіткої алгоритмізації, проблему багатопараметричності можна вирішити достатньо легко.

Підвищення якості баз даних, в порівнянні з магістерською роботою, є одною з головних задач в нашому подальшому дослідженні. Для цього ми будемо використовувати програмні інструменти, що дозволяють здійснювати багатовимірне моделювання інтегральних напівпровідникових структур, використовуючи як початкову інформацію опис технологічного процесу їх виготовлення. В магістерській роботі ми моделювали 1Д структури, тепер ми будемо моделювати 3Д структури і розширимо типи дефектів які можуть бути в наших КСЕ. Це дасть змогу максимально ефективно визначати концентрації дефектів, що в свою чергу збільшить час існування сонячних елементів та обсяги енергії, що вони конвертують в електричний струм.

В нашому досліджені ми будемо використовувати приладово-технологічне моделювання, або TCAD (Technology Computer Aided Design). В результаті використання систем TCAD ми можемо розраховувати електрофізичні параметри, електричні характеристики інтегральних приладів в 3Д розмірності.

У нанорозмірних структурах практично немає другорядних параметрів, а зі зменшенням розмірів елементів посилюється взаємозв'язок технологічних параметрів і електричних характеристик інтегральних приладів. Застосування експериментальних методів при дослідженні областей в напівпровідникових структурах з розмірами близько 1-10 нм не дає високої точності результатів, яка необхідна для надійного прогнозування приладових характеристик. Не можна також обійтися тільки експериментальними дослідженнями при пошуку і оптимізації принципово нових приладових структур і конструктивних рішень. Розумною альтернативою в цих випадках є використання чисельного моделювання.

Приладово-технологічне моделювання наддасть нам доступ до великої кількості фотоелектричних параметрів наших кремнієвих сонячних елементів. Це збільшить ефективність визначення концентрації різних забруднюючих домішок, що негативно впливають на наш СЕ.

**Аналіз стану розробки у вітчизняній та зарубіжній науці**

Методи штучного інтелекту з кожним роком все більше захоплюють фізичні дослідження. Наприклад, це може бути оптимізація конфігураційних параметрів з метою покращення певних фізичних властивостей. У роботі [4] оптимізують структуру шарових систем графенових стрічок задля покращення термоелектричних властивостей, емпіричними методами такого результату досягти вчені не могли.

В дослідженні [5] за допомогою нейромереж прогнозували короткострокову фотоелектричну потужність, яка потрібна для контролю і проектування інтелектуальних систем управління енергією для мікромереж. Для навчання і порівняльного тестування нейронних мереж використовується база даних фотоелектричної енергії, що виробляється мікромережею, встановленою в Університеті Трієста (Італія). Точність прогнозу складає більше ніж 97%.

В роботі [6] представлений аналіз різних компонентів гібридної енергетичної системи, пов'язаної з мережею, що включає фотоелектричну систему. У цьому дослідженні пропонується унікальний метод регулювання напруги на основі такої штучної нейронної мережі, призначеної тільки для зниження тиску літій-іонних батарей в автономних мікромережах поновлюваних джерел енергії. Запропонований метод управління енергією здатний регулювати потік енергії, керувати потужністю і задовольняти вимоги навантаження упродовж усієї роботи системи. Це в свою чергу збільшує час життя літій-іонних батарей.

В дослідженні [7] представлені методи виявлення пошкоджень фотоелектричних панелей на основі глибокого навчання з використанням теплових зображень, отриманих з безпілотного літального апарату, оснащеного інфрачервоними датчиками. Моделі сегментації на основі глибокого навчання значно перевершують традиційні підходи до сегментації зображень. Таким чином, застосування безпілотників разом з методами штучного інтелекту може бути корисним для операторів при технічному обслуговуванні.

В роботі [8] досліджуються хвилинні рівні потужності сонячних елементів по зображеннях неба за допомогою нейронних мереж. Зображення неба надають інформацію про поточний і майбутній хмарний покрив і потенційно корисні для прогнозування вироблення фотоелектричної енергії. У цій роботі використовуються згорткові нейронні мережі для співвідношення потужності фотоелектричних панелей з сучасними зображеннями неба.

У роботі [9] представлено моделювання просторових характеристик кремнієвого сонячного елементу за допомогою ANN – математичної моделі на основі біологічних нейронних систем, призначених для збору взаємозв'язків даних для забезпечення більшої точності прогнозування.

**Напрацювання за темою майбутнього дисертаційного дослідження**

В роботі [9] ми досліджували фактор неідеальності, який часто використовують як параметр сонячних елементів. Він залежить від умов навколишнього середовища та параметрів рекомбінаційних центрів в СЕ. Досліджувалася кремнієва структура , а саме її вольт-амперні характеристики. Передбачалося, що атоми заліза присутні в p-шарах. Розглядалися два випадки дефектів: тільки міжвузольне залізо або пари залізо-бор. За допомогою дво-діодної моделі визначали фактор неідеальності. Отримали результати: 1) глибина бази впливає на значення коефіцієнта неідеальності у випадку, кола довжина дифузії домішкових носіїв є набагато більшою за товщину бази; 2) вплив температури і рівня легування стосується в основному зміни заселеності рівня рекомбінації; 3) Залежність фактору неідеальності від концентрації заліза є монотонною функцією. Дослідження було побудовано на бакалаврській роботі.

В роботі [10] показано, що залежність значення коефіцієнта неідеальності від температури і рівня легування в основному визначається діркою, що виникає на рівні, де знаходиться міжвузольне залізо. На значення фактору неідеальності впливає не лише концентрація дефекту, але і його розташування. Внутрішня рекомбінація викликає зменшення значення фактору неідеальності при високій температурі, а також при низькій концентрації заліза. Збільшення товщини бази призводить до зменшення значення фактору неідеальності. Дослідження показало, що коефіцієнт неідеальності у випадку співіснування пар FeB і просто міжвузольного заліза може перевищувати коефіцієнт неідеальності у випадку самотнього неспареного міжвузольного заліза. Зміна коефіцієнта неідеальності після дисоціації пар FeB може бути використана для оцінки концентрації забруднюючих речовин.

На Європейській конференції з відновлювальних енергетичних систем [11] вперше ми об’єднали попередні роботи з нейронними мережами і показали можливість швидкої і простої оцінки концентрації заліза в кремнієвих СЕ за допомогою вольт-амперних характеристик. Для навчання нейронної мережі були використані значення фактору неідеальності і параметри СЕ для більш ніж 10 000 структур. Для побудови мережі використовувався Keras з чотирма прихованими щільними шарами (до 300 нейронів, активація relu) і концентрацією заліза на виході. Було показано, що середня квадратична відносна похибка для прогнозування тестових даних склала до 0,28 у разі мережі, навченої для випадку коли у нас тільки пари FeB, і до 0,06 у разі співіснування пар Fe-B та просто міжвузольного заліза. Робота виконана за підтримки NRFU (project 2020.02/0036).

В дослідженні [12] ми систематично досліджували ефективність глибокого навчання для визначення концентрації заліза в кремнієвих BSF сонячних елементах за значенням коефіцієнта ідеальності. Ми провели моделювання, щоб отримати тренувальний набір даних і тестовий набір даних. Врешті-решт, глибока нейронна мережа (ГНМ) була протестована з використанням параметрів реальних сонячних елементів. Наші результати показали здатність ГНМ передбачати концентрацію заліза по коефіцієнту неідеальності, товщині і рівню легування бази СЕ, а також по температурі. Для синтетичних наборів даних значення відносної середньої квадратичної похибки склало всього 0,005. Наше моделювання показує перспективність застосування фактору неідеальності двох випадків (для структури тільки з міжвузольним залізом, а також із співіснуванням цього міжвузольного заліза з парами залізо- бор) для підвищення точності прогнозування. В той же час практичне застосування цього підходу продемонструвало труднощі з отриманням коректних даних. Важливо було навчити ГНМ значенням концентрації бору, які узгоджувалися з рівнем легування досліджуваних структур. Більше того, збільшення концентрації заліза або бору, а також зниження температури призводило до менших помилок прогнозування.

Запропонований підхід використовує просту і широко застосовну установку і не вимагає багато часу. Тому він може бути легко інтегрований у виробниче середовище. Слід зазначити, проте, що для наших цілей завдання було спрощене.

**Можливі шляхи розв’язання задач**

Ми вважаємо, що підхід ГНМ, який ми використали в останньому своєму дослідженні, можна удосконалити двома способами.

1. 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 SENTAURUS TCAD) або завдяки експериментальним вимірюванням ВАХ на широкому наборі реальних КСЕ.
2. Другий шлях пов’язаний з покрашенням функціонування ГНМ і в цьому випадку найбільш перспективним видається використання підходу донавчання. Наприклад, небагаточисленний набір параметрів структур та результатів вимірювань (в нашому випадку це товщина бази, концентрація бору в базі, температура та фактор неідеальності) 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).

**Список використаної літератури**

1. World Adds Record New Renewable Energy Capacity in 2020, Press release, April 5 2021, IRENA, https://www.irena.org/newsroom/pressreleases/2021/Apr/World-Adds-Record-New-Renewable-Energy-Capacity-in-2020

2. <https://www.iea.org/news/renewable-power-is-set-to-break-another-global-record-in-2022-despite-headwinds-from-higher-costs-and-supply-chain-bottlenecks>

3. Solar Power Europe, What’s Cool in Solar: Wafers,

<https://www.solarpowereurope.org/whats-cool-in-solar-wafers/>

4. *S. Ju, S. Shimizu, J. Shiomi* / Designing thermal materials by coupling thermal transport calculations and machine learning // *J. Appl. Phys*. – 2020. – Oct. – 27. – Vol. 128. – Iss. 16.

5. *A. Mellit, A. Massi Pavan, V. Lughi* / Deep learning neural networks for short-term photovoltaic power forecasting // *Renewable Energy* - 2020. - July. - Vol. 172. - Pp. 276-288

6. *S. Sahoo, T. M. Amirthalakshmi , S. Ramesh , G. Ramkumar , Joshuva Arockia Dhanraj, A. Ranjith , Sami Al Obaid, Saleh Alfarraj, and S. S. Kumar* / Artificial Deep Neural Network in Hybrid PV System for Controlling the Power Management // *International Journal of Photoenergy*. - 2022. - Mar. - Vol. 2022.

7. *S. Jumaboev, D. Jurakuziev, M. Lee* / Photovoltaics Plant Fault Detection Using Deep Learning Techniques // *Remote Sensing*. – 2022. – Vol. 14. – No. 15.

8. *Y. Sun, G. Szucs, A. R. Brandt* / Solar PV output prediction from video streams using convolutional neural networks // *Energy & Environmental Science journal*. - 2018. - July. - Vol. 7. - Pp. 1643-1912

9. *Olikh, O. Ya*. Modeling of ideality factor value in silicon solar cells / *O. Ya. Olikh, O. V. Zavhorodnii* // *XXII International Seminar on Physics and Chemistry of Solids, Lviv, Ukraine. Book of Abstracts*. — Lviv: 2020. — P. 77.

10. *Olikh, O. Ya.* Modeling of ideality factor value in n+–p–p+–Si structure / *O. Ya. Olikh, O. V. Zavhorodnii* // *Journal of Physical Studies*. - 2020. - Vol. 24. — P. 4701-1-4701-8

11. *Olikh, O.* Deep-learning approach to the iron concentration evaluation in silicon solar cell / *O. Olikh, O. Lozitsky, O. Zavhorodnii* *// 9 European conference on renewable energy systems. Proceedings. Istanbul, Turkey*. / Ed. by Erol Kurt. —Istanbul: 2021. — P. 22.

12. *Olikh, O*. Estimation for iron contamination in Si solar cell by ideality factor: deep neural network approach / *O. Olikh, O. Lozitsky, O. Zavhorodnii* // *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* – 2022. —Vol. 30. – P. 648-660