Уважаемая Людмила Анатолиевна!

Это вариант ответа на замечания рецензентов. Сами замечания я тоже оставил (для ясности ответов), но отметил их *зеленым курсивом*. Фактически, все большие куски в ответах я вставил и в новый вариант статьи, потом их правленый вариант перенесу. Пожалуйста, отредактируйте ответы (обычный черный текст). После каждого абзаца я написал то, что приблизительно хотел им сказать (фиолетовым написал).

*A solar cell with BSF is chosen as the basis of the work, claiming that*

*"BSF is one of the popular designs used for industrial mass production...",*

*but this is no longer the case, BSF solar cells are present in the market due to old manufacturing lines that are still operative, but the standard now is PERC technology. If the training of the network is based on SCAPS simulations, why was not trained with a PERC structure? At least, some hint on how results would be with a PERC structure should be given. (By the way, the BSF in this work is made with B-doping, which is also a minoritary approach at the industrial level, where BSF is of Aluminium).*

The Reviewer is absolutely right that PERC technology will be dominant in the near future. At the present moment, however, the part of BSF solar cells is still big enough --- see Fig.1 .

Рецензент повністю має рацію і технологія PERC буде основною вже найближчим часом. Проте на сьогодні BSF сонячні елементи все ще використовуються достатньо широко.

SCAPS-1D is a one-dimensional solar cell simulation program, so to model PERC solar cells with a rear contact, which is inhomogeneous in a surface, is a rather hard job. We understand the restrictions of 1D simulators and point out this fact in the Conclusion.

SCAPS-1D – це програма для одномірної симуляції сонячних елементів і тому моделювати PERC сонячні елементи з неоднорідним по площі тиловим контактом достатньо важко. Ми розуміємо певні обмеження одномірних симуляторів і вказуємо це у Висновках.

We agree that it would be better to use an Al-doped p+-layer, but our choice was determined by the following considerations//please consider the following. The simulated IV curves were used to obtain the ideality factor value n. According to the used two-diode model//two-diode model we applied, n characterizes the current of the second (or so-called recombination) diode; the second diode current is//arises due to recombination occurring mainly within the depletion region []. The p+-layer influence on the mentioned process is rather determined by the pulling electric field.The p+-layer influences the mentioned process is rather determined by the pulling electric field. Therefore the kind of doping atom in the p+-layer is not very important for our simulation. In the case of n+-p-p+ structure with Al-doped base, the new training data set is needed, but the proposed deep-learning oriented approach to determining the impurity concentration remains valid. On the other hand, the recombination in the rear surface region is not dominant in n value determination. In our opinion, the trained DNN can be applied to PERC solar cell in which

1. the base is boron-doped;

ii) the iron-related deep levels are the main reason for defect-assisted recombination.

Ми згодні, що краще було б використовувати р+ шар, легований алюмінієм, але необхідно врахувати наступне. Симулювані вольт-амперні характеристики використовувалися для отримання величини фактору неідеальності n. Відповідно до 2-діодної моделі, n характеризує струм другого (так званого рекомбінаційного діоду); струм другого діоду переважно пов’язаний з процесами рекомбінації в області збіднення. Р+-шар впливає на вказані процеси лише завдяки створеному ним тягнучому електричному полю. А отже тип легуючих атомів р+ шару не є дуже важливим для моделювання в нашому випадку. У випадку, якщо до розгляду буде взята n+-p-p+ структура з базою, легованою алюмінієм, необхідний буде новий тренувальний набір, проте запропонований орієнтований на глибоке навчання спосіб визначення концентрації домішок залишиться цілком застосовним. З іншого боку, рекомбінація в області задньої поверхні не є визначальною для величини n. На нашу думку, натреновані DNNs цілком можуть бути використані і до тих PERC сонячних елементів, для яких а) база легована бором; б) пов’язані із залізом глибокі рівні є основною причиною рекомбінації, зв’язаної з дефектами.

The text was revised and some speculations about the applicability of the trained DNNs were added (last tree paragraph before Conclusion).

Текст було змінено, додані певні міркування щодо застосовності натренованих мереж (останні три параграфи перед Висновками)

*As far as I understand, the simulation with SCAPS could be improved: emitter and BSF are uniform and this is not the case in reality. There is no mention to the metallization, are there no contacts? There should be, and they will influence the carrier transport and also the surface recombination velocities in the metal-semiconductor interface, among others.}*

The flat bands' conditions were assumed for metal contacts on the rear and front surfaces. A sentence was added in the text. Let us note that it is common practice not to pay special attention in SCAPS simulation to contacts in the case of the barrier absence --- e.g., see [].

Для металевих контактів на фронтальній та тиловій поверхнях було використано наближення плоских зон. Відповідне речення додано в текст. Дозвольте зауважити, що при SCAPS моделювання є загальнопрйнятим не зосереджувати особливу у вагу на контактах, якщо вони не викликають появу додаткових бар’єрів – див., наприклад, [].

The Reviewer is correct about the way of SCAPS simulation improvement. In the present paper, we have concentrated on recombination in the SC base region, which mainly determines ideality factor value. The non-uniformities of emitter and BSF-layer affect much weaker on n value. In any case, the Reviewer’s suggestion is very interesting and must be done in the future.

Рецензент має рацію щодо можливих шляхів покращення SCAPS моделювання. В даній роботі ми були зосереджені на розгляді процесів рекомбінації в області бази СЕ, які переважно визначають значення фактору неідеальності. Неоднорідність емітеру та BSF-шару впливають на величину n значно слабше. У будь-якому випадку, пропозиції Рецензента є дуже цікавими і повинні бути реалізовані в майбутньому.

Why a voltage sweep restricted to 0.45 V? This is rather low when compared to the voltages at the maximum power point of BSF solar cells...Wouldn't it influence in the extraction of the ideality factor values?}

We used the two-diode model to fit the simulated data. According to the two-diode model, the dark SC current is given by

(1)

where I\_01 and I\_02 are the saturation currents, R\_sh and R\_s are the shunt and series resistances. The two-diode model is often applied for the description of real Si SCs and the first diode represents the ``ideal'' diode and first term in Eq.(1) is due to recombination in the base deep and the emitter, including their surfaces; the second diode is the so-called recombination diode and the second term is due to recombination within the depletion region [].

Ми використовували 2-діодну модель для апроксимації симульованих даних. Відповідно до 2-діодної моделі темновий струм сонячного елементу описується виразом

(1)

де І\_01 та І\_02 - струми насичення, R\_sh and R\_s – шунтуючий та послідовний опори. 2-діодна модель часто використовується для опису реальних кремнієвих СЕ, причому перший діод є «ідеальним» діодом і перший доданок в (1) пов’язаний з рекомбінацією в глибині бази та емітері, включаючи їхні поверхні; другий діод – це так званий рекомбінаційний діод і другий доданок зв’язаний з рекомбінацією у збідненому шарі.

The typical IV curves are shown in Fig.2. It is seen that the contribution of recombination diode current is essential at low bias only. At V=0.25 V the first term in Eq.(1) is by an order of magnitude larger than the second one. A similar situation is observed for experimental IV curves --- see Fig.~9 in Manuscript. The ideality factor value is related to the slope of recombination current dependence on voltage in a semi-logarithmic scale. Therefore the voltage range (0-0.45)V is quite sufficient for an accurate determination of the ideality factor values.

Типові вольт-амперні характеристики показані на Рис.1. Видно, що внесок рекомбінаційного діоду є суттєвим лише при низьких значеннях напруги. При V=0.25 V перший доданок в (1) майже на порядок більший ніж другий. Подібна ситуація спостерігається і для експериментальних кривих – див. Рис.9 в Рукописі. Величина фактор неідеальності пов’язана з нахилом залежності рекомбінаційного струму від напруги у напів-логарифмічному масштабі. Отже, діапазону напруг (0-0.45)V цілком достатньо для акуратного визначення величини фактору неідеальності.

The information was added on page 5, the first paragraph from the top.

Інформація додана на сторінці 5, перший параграф зверху.

*I am not sure that I interpret well the results in table 5. In the text the authors state that "the results even exceed expectations". But what I see is that the predictions fail in general, largely for the trained dataset cases, but also for the full dataset. There is some discussion on why DNN\_FeFeB-Fe performs worse than DNN\_FeFeB and that is Ok... but DNN$\_{FeFeB}$ also fails in many cases, isn't it? (temperatures higher than 300K for the higher Fe content, 100\% or more error for the training dataset...).*

On the one hand, the Reviewer is right. Unfortunately, the DNNs which was trained by synthetic data was disabled to measure iron concentration

with extremely high precision in real solar cells (with a certain mismatch in their parameters and those used in the simulation). From this point of view ``glass is half empty''.

З одного боку, Рецензент правий. На жаль глибокі мережі, треновані з використанням синтетичних даних, виявилися неспроможними визначити концентрацію заліза з надзвичайно високою точністю в реальних сонячних елементах (параметри яких трохи відрізнялися від тих, що були використані при моделюванні). З цієї точки зору, дійсно «склянка наполовину порожня».

On the other hand, some reasons for ``glass is half full'' are present as well.

First of all, in our opinion, the low cost express method which uses a widely applied setup and is able to approximate estimate the range of iron concentration

(even with 100\% error) can be useful. And the possible pathways for precision improvement are discussed in the Conclusion. Moreover, the results in Table~5 prompt the correct utilization of the proposed method in practice. Namely, the near room temperature of IV measurement is preferable (this conclusion is similar to those drawn from the analysis of synthetic IVs); the time between the FeB pair dissociation and IV measurement must be as short as possible. Finally, in some cases (300 K, «full» dataset) the DNN\_FeFeB yields acceptable results.

З іншого боку, існує і декілька підстав для того, щоб «склянка було наполовину повною». Щонайперше, на нашу думку, дешевий та експресний метод, який передбачає використання широко поширеного обладнання і дозволяє приблизно оцінити діапазон концентації [присутнього] заліза (навіть з похибкою 100%) може бути корисним. Крім того, можливі шляхи підвищення точності обговорені у Висновках. Далі, результати Таблизі 5 підказують шляхи більш доречного (правильного) застосування запропонованого методу на практиці. А саме, краще проводити вимірювання вольт0амперних характеристик поблизу кімнатної температури (цей висновок збігається з тим, що був зроблений з аналізу синтетичних даних); проміжок часу між вимірюванням ВАХ та розпадом пар FeB має бути щонайменшим. Нарешті, в деяких випадках (300 К, «повний» набір даних) мережа DNN\_FeFeB досягає цілком прийнятних результатів.

We hope that the use of deep learning for retrieval of deep level parameters from the current-voltage curve will find further development.

Ми сподіваємося, що використання глибокого навчання для визначення параметрів глибоких рівнів з вольт-амперних характеристик знайде подальший розвиток.

*In the jargon, we do not talk of surface resistance, but sheet resistance.*

*Also, it is the first time that I read the "anti-recombination isotype barrier" for a high-low junction or a BSF.*

The Reviewer is absolutely right. We have revised the text accordingly.

Рецензент повністю правий. Текс був змінений відповідним чином.

*It is mentioned in the paper that there is Suplementary Material, but I have not had the opportunity to read it.*

We apologize for the embarrassment. But we are in confusion: Reviewer #2 mentioned the data in the table of Supplementary Material.

Ми перепрошуємо за незручності. Проте ми у замішанні (*українською мовою також не дуже вийшло*): Рецензент №2 згадує дані з Таблиці в Додаткових Матералах.

*On the other hand, the paper needs a thorough revision of English, preferably by a native or bilingual speaker. English is not my mother tongue, but I think that there are many expressions that are not correct, and make the reading difficult. From the abstract ("The low-cost and express...", "an ideality factor values"...) to the conclusions ("not numerous input parameters can be multiplied and transformed to the picture and apply a vision model..."(?), and a lot in between: "both for microelectronics, logic technologies and solar cells", "the various semiconductor barrier structures", "practical using", "Fours", "SFB", "in our further calculation", "simulated with using", "in comparing with", "more narrow", etc. etc.*

We are sorry for the English. The text was revised by the bilingual speaker, and we hope for language improvement.

Ми перепрошуємо за англійську мову. Текст був редактований двомовним спеціалістом і ми сподіваємося на покращення мови.

*It is assumed that all SRH recombination in the device come from iron impurities and the associated deep level defects. It seems necessary to discuss its validity, and it could be interesting to put it against the fact that Al-BSF devices based on Czochralski silicon wafers are considered. More generally, if another type of defects is present in the solar cell, also inducing SRH recombination, is it possible to estimate to what extend are the DNNs trained here still accurate ?*

The speculations about the applicability of the trained DNNs to different SC structures must be based on assumption that the ideality factor distinguishes depletion-region recombination from most other sources of recombination []. Certainly, there are some differences from this rule for real structures. For instance, our simulation reveals the n dependence on base thickness []. But this dependence is weak and the ideality factor value is mainly determined by depletion-region recombination nevertheless.

Обговорення застосовності натренованих DNNs до різних за типом структур сонячних елементів повинно відштовхуватися від припущення, що фактор ідеальності дозволяє вирізнити рекомбінацію в області збіднення від інших джерел рекомбінації []. Звичайно, для реальних структур спостерігаються відхилення від цього правила. Наприклад, проведене нами моделювання показало, що n залежить від товщини бази []. Але ця залежність є слабкою і значення фактору неідеальності все-таки переважно визначається саме рекомбінацією у збідненій області.

First of all, the DNNs applicability is related to the requirement of predominating of Shockley–Read–Hall recombination. In the cases of another mechanism of free carrier concentration decrease the models which diverge from two-diode is proposed (e.g., tree-diode []). Moreover, the base must be doped by boron. For example, if SC is prepared from Si:Al wafer, the simulation model which is used for training dataset preparation must be modified: the parameters of FeAl pair are needed to take into consideration as well as the changes of defect distribution (Eq.(9)). Finally, if another type of defect (in addition to iron--related deep levels) is present in the solar cell, also inducing intensive SRH recombination, the simulation model must be more complicated as well. The primary competitors of FeB are boron-oxygen complexes [] and oxide precipitates [] in Cz-Si; and the corresponding model can be a next step. By the way, it is pertinent to note that the indicator of the presence of another defect can be a high n value: in our simulation n<1.4 is observed. Last may be a most limiting factor of the DNNs applicability; in particular, it confined SCs selection for experimental verification of the proposed method.

По-перше, застосовність DNNs визначається виконанням умови, що рекомбінація Шоклі-Ріда-Хола є переважаючою. Для опису випадків, коли суттєвими є інші механізми зменшення концентрації вільних носіїв заряду, запропоновані інші моделі, які відрізняються від 2-діодної (наприклад, 3-діодні []). Крім того, база має бути легована бором. Наприклад, якщо СЕ виготовлені з Si:Al (кремнію, легованого бором), симуляційна модель , яка використовується для підготовки тренувального набору, повинна бути змінена: вона повинна використовувати параметри пари FeAl, а також враховувати зміну розподілу дефектів (формула (9)). Нарешті, якщо інші дефекти (на додачу до глибоких рівнів, пов’язаних із залізом) присутні в сонячному елементі і також є причиною інтенсивної рекомбінації Шоклі-Ріда-Хола, розрахункова модель має бути більш складною. Основними конкурентами FeB в CZ-Si є комплекси бор-кисень [] та кисневмістні преципітати []; побудова відповідної моделі може бути наступним кроком. До речі, зауважимо, що показником наявності інших типів дефектів може бути високе значення n: в наших симуляціях отримане значення n не перевищувало 1.4. Останнє обмеження може бути найбільш лімітуючим фактором застосування DNNs; зокрема, це звузило вибір СЕ для екпериментальної перевірки запропонованого методу.

Thus the trained DNNs can be applied to BSF solar cells prepared from Si:B wafers. It would be noted that the modern technique allows to substantially restrict oxygen concentration in even Cz-Si. On the one hand, the Al is used to produce the doped p+ region at the industrial level []. But a boron BSF is one of the promising techniques for achieving high quality back contact [] and the p+ layer, which is doped by boron, was under our consideration. On the other hand, the p+-layer influence on the depletion-region recombination process is rather determined by the electric field. Therefore the kind of doping atom in p+-layer is not very important for simulation, and in our opinion, the DNNs is applicable for Al BSF cell as well.

Таким чином, натреновані DNNs можна застосовувати до BSF сонячних елементів, виготовлених з Si:B пластин. Варто зауважити, що сучасний технологічний рівень вирощування кристалів дозволяє суттєво обмежити концентрацію кисню навіть у Cz-Si. З одного боку, на промисловому рівні для створення легованої р+ області найчастіше використовується алюміній. Проте BSF з використанням бору є багатообіцяючим підходом для створення тилового контакту високої якості [] і саме р+ шар, легований бором розглядався в наших дослідженнях. З іншого боку, вплив р+-шару на рекомбінаційні процеси у збідненій області визначається швидше за все лише створеним ним електричним полем. А отже тип легуючих атомів р+ шару не є дуже важливим для моделювання і, на нашу думку, мережі цілком застосовні і до Al BSF елементів.

Some speculations were added to the Manuscript (last tree paragraph before Conclusion).

Відповідні міркування були додані в рукопис (останні три параграфи перед Висновками)

*When Fe-FeB and Fe cases are presented, it could be clearer to provide very few more explanations on both types of defects, and the important fact that iron-boron pairs can be temporarily dissociated, providing the Fe case, through the heat treatment or high illumination already mentioned.*

The corresponding corrections were done on page 4, the third paragraph from the top.

Відповідні зміни були зроблені на сторінці 4, третій абзац зверху.

*It is clear how the main training dataset is created, and how the 4 \* 9 \* 11 \* 19 = 7524 IV curves are generated. However, the definition of the test datasets and the values for temperature, base thickness, iron concentration and doping level are not clear for each T-varied, d-varied, etc. test set.*

The sample of values used for the Fe-varied dataset was added (the last paragraph on page 5, the first paragraph on page 6)

Приклад значень параметрів, які використовувалися при створенні Fe-varied набору додані (останній параграф на сторінці 5, перший параграф на ст.6)

*For instance, in the case of the T-varied test set, it is mentioned that the same base thickness, iron concentration and doping level values are used as in training dataset. However, 4 \* 9 \* 19 = 684 and the amount of 894 IVs can’t be explained by multiplying with any number of temperature values. In Supplementary Material, the associated summary table do neither explain this value 894. More generally these tables are difficult to interpret. It is possible that the subset of 144 values for T-varied test has been duplicated.*

The Reviewer is right:

i) the subset of 144 values for the T-varied test dataset has been duplicated;

ii) Table in Supplementary Material has mistakes and is not clear.

The correct values of d\_p, N\_B, T and N\_Fe were listed in Table, but we have some problems with addition and multiplication. We apologize for the inattention. The Table in Supplementary Material was revised.

Рецензент має рацію: 1) підмножина із 144 значень для T-varied набору була дійсно продубльована; 2) Таблася в Додаткових Матеріалах містить помилки і не є очевидною.

В Таблиці були наведено правильні значення d\_p, N\_B, T та N\_Fe, проте в нас виникли певні проблеми з множенням та додаванням. Ми просимо вибачення за неуважність. Таблиця в Додаткових Матеріалах виправлена.

*On figures 4, 5, 6 and 7, very interesting results are presented, and analyses of the dependence of estimation error with temperature, boron or iron densities and base thickness are well done. However, it seems that the same error statistics of results obtained on test datasets (instead of training dataset) would more directly assess the quality of predictions by the DNNs. For instance, the Fe-varied dataset has been identified to be the closest to “real demand” or results obtained with the all-varied dataset would also be most probably very useful. Such results could be showed in Supplementary Material, in the same form as figures 4, 5, 6 and 7.*

The Supplementary Material was completed by figures (Figs.8S-10S)

which represent similar results for test datasets.

Додаткові Матеріали доповнені графіками (Рис.8S – 10S), які демонструють подібні результати для тестових наборів.

But it would be noted that error statistics for the training dataset are more correct and informative. For instance, let's consider temperature dependence (Fig.~4(a)). In fact, the averaging over 684 values was performed for each of 11 points in the training dataset. And this values correspond to data which uniformly distributed in range of used (N\_Fe, N\_B, d\_p)-space.

Проте потрібно зауважити, що статистика похибок для тренувального набору є більш коректною та інформативною. Наприклад, розглянемо температурну залежність (Рис.4(а))). Дійсно, для тренувального набору для кожної з 11 проводиться усереднення по 684 значенням. І ці значення відповідають даним, що рівномірно розподілені по (N\_Fe, N\_B, d\_p)-простору.

In contrast, only 55 IV characteristics correspond to T=295 K in the Fe-varied dataset (see Table in Supplementary Material). In the All-varied dataset 6 used temperature values locate in range (290-315) K and only 3 values are in range (315-340) K. Besides, 8 IV characteristics were simulated at T=293 K for N\_Fe=(5-9)10^12 cm-3 (high values) whereas 60 ideality factor values are available at T=292 K and N\_Fe=1.1 10^12-510^12 cm-3 were used for simulation of corresponding IV curves. The comparing data at T=292 K with data at T=293 K does not seems absolutely correct.

І навпаки, лише 55 вольт-амперних характеристик відповідають T=295 К в Fe-varied наборі (див. Таблицю в Додаткових Матеріалах). Для All-varied набору 6 використаних значень температури знаходяться в діапазоні (290-315) K і лише 3 – в (315-340) K. Крім того, 8 вольт-амперних характеристик було змодельовано для T=293 K, при цьому N\_Fe=(5-9)10^12 cm-3 (високі значення). Тоді як для T=292 K доступні 60 значень фактору неідеальності, причому при отриманні відповідних ВАХ були використані значення N\_Fe=1.1 10^12-510^12 cm-3. Порівняння значень для T=292 K та для T=293 K не виглядає повністю коректним.