**Детальний зміст проєкту**

**Назва проєкту \_** Розробка методів акусто-керованої модифікації та машинно-орієнтованої характеризації кремнієвих сонячних елементів**\_**

**Науковий керівник проєкту \_\_**Оліх Олег Ярославович, доктор фіз.-мат. наук, доцент**\_\_\_\_\_**

**3. Детальний зміст проєкту** (українською та англійською мовами)

3.1 Сучасний стан проблеми (до 2 сторінок)

Для сучасної цивілізації використання відновлюваних джерел енергії є життєво необхідним. Серед різноманітних технологій, спрямованих на вирішення цього завдання, особливе місце займає безпосереднє перетворення сонячного випромінювання на електроенергію. Унікальність такого підходу 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. Як наслідок, на сьогодні сонячна фотовольтаїка характеризується найшвидшими темпами зростанням серед усіх енергетичних технологій у світі.

Понад 90% серед тих десятків гігават енергії, яка виробляється на сучасному етапі внаслідок застосування фотовольтаїчних перетворювачів, припадає на КСЕ. Ці системи створюється з використанням аморфного, полікристалічного чи кристалічного кремнію, причому частка останніх складає близько 40%. Як і для інших напівпровідникових пристроїв, одним з визначальних чинників властивостей КСЕ є система дефектів, зокрема домішковий склад. Зауважимо, що задля здешевлення кінцевої продукції, для створення КСЕ переважно використовуються кристали достатньо невисокої чистоти. Так, однією з найпоширеніших і водночас з найшкідливіших домішок, є атоми заліза та інших перехідних металів. Чимало зусиль науковців спрямовані на розробку на реалізацію технологічних методів, що мають на меті переведення подібних дефектів у електрично-неактивний стан, зокрема внаслідок їхнього гетерування. Проте коефіцієнти корисної дії реальних елементів суттєво нижчі теоретичної межі. З цієї точки зору зрозуміло, що питання розуміння поведінки дефектів та керування їхнім станом мають фундаментальне значення для покращення експлуатаційних характеристик пристроїв.

Загальновизнаними методами зовнішньої активації технологічно функціональних дефектів для управління властивостями напівпровідникових структур є опромінення та термообробка, які, проте, суттєво впливають і на стан кристала загалом. Іншим варіантом модифікації дефектної підсистеми є збудження у кристалі пружних коливань. У літературі, зокрема, показано, що акустичні хвилі у неп’єзоелектричних матеріалах здатні викликати перерозподіл домішок та викликати перебудову окремих точкових дефектів, причому такий спосіб характеризується вибірковістю впливу саме на області з порушеннями періодичності та може бути реалізований при кімнатних температурах. Крім того, показано слушність використання ультразвукового навантаження як додаткового фактору впливу під час технологічних операцій, таких як, наприклад, іонна імплантація. Водночас, наявної інформації недостатньо для формування цілісних уявлень щодо акусто-дефектної взаємодії у напівпровідникових, зокрема кремнієвих, кристалах. Як наслідок, можливості активного ультразвукового впливу не використовуються під час виготовлення сонячних елементів, на відміну від багатьох інших технологічних процесів.

Неруйнівні методи, що мають на меті оцінку концентрації домішок, у тому числі перехідних металів, у напівпровідникових кристалах та структурах на їхній основі, зокрема сонячних елементах, мають важливе значення з прикладної точки зору. На сьогодні розроблено чимало як прямих (інфрачервона томографія, електронно-парамагнітний резонанс, нестаціонарна спектроскопія і т.п.), так і непрямих (поверхневої фотоерс, виміри часу життя неосновних носіїв) методів, що дозволяють вирішити подібне завдання. Проте практично всі вони вимагають чи спеціальної підготовки об’єктів для досліджень, чи спеціалізованого обладнання. Водночас, чи не найпоширенішим методом характеризації сонячних елементів є вимірювання вольт-амперних характеристик (ВАХ), який, зокрема, дозволяє отримати такі фундаментальні параметри даних пристроїв як коефіцієнт корисної дії, напруга холостого ходу та струм короткого замикання. Очевидно, що ці характеристики зокрема та процеси поширення носіїв загалом залежать від наявності електрично активних дефектів і тому існує принципова можливість визначення концентрації останніх за виглядом ВАХ. Однією з найголовніших перепон на шляху розробки подібного зручного для використання та експресного методу є багатопараметричність взаємозв’язку концентрації рекомбінаційних центрів та параметрів ВАХ, які можуть бути визначені шляхом апроксимації експериментальних кривих. Проте в останнє десятиліття методи глибокого навчання, спрямовані, зокрема, на вирішення задач, де не передбачається можливість чіткої алгоритмізації, знаходять успішне застосування у різних галузях теоретичної та прикладної фізики. Це дозволяє сподіватись на можливість реалізації вказаного методу характеризації сонячних елементів з використання подібних підходів.

3.2 Новизна проєкту (до 1 сторінки )

Перша частина проєкту пов’язана з експериментальним встановленням закономірностей динамічних акусто-індукованих ефектів у КСЕ. На відміну від багаточисленних попередніх досліджень, у яких акустичні хвилі використовувались як одноосібний інструмент незворотної модифікації неп’єзоелектричної напівпровідникової системи шляхом виведення її зі стабільного (метастабільного) стану, даний проєкт передбачає з’ясування фізичних особливостей та механізмів впливу ультразвукового навантаження на процеси перебудови дефектних комплексів, ініційовані іншим активаційним чинником (освітленням) чи викликані термодинамічними силами у випадку повернення до стану рівноваги. Тобто, проект орієнтований на розробку фізичних основ методу, що базується на використанні комплексних процесів, де ультразвуку відведена роль додаткового чинника та певного підстроювального фактору. Крім того, новизна проєкту пов’язана з вибором об’єкту для вивчення акустичної активності: а саме, домішки атомів перехідних металів та комплексів за їхньою участю у монокристалічному кремнії.

Друга частина проєкту спрямована на розробку нового експрес-методу оцінки концентрації рекомбінаційних центрів, який є простим за реалізацією доповненням стандартної процедури характеризації КСЕ за допомогою ВАХ. Запропонований підхід передбачає низку нових підходів, зокрема використанні величини фактору неідеальності як кількісного показника концентрації рекомбінаційних центрів та застосуванні методів глибокого навчання для встановлення взаємозв’язку вказаних величин.

3.3 Методологія дослідження (до 2 сторінок)

Експериментальна частина проєкту має на меті встановити фізичні закономірності та механізми впливу акустичних хвиль на процес перебудови дефектних комплексів, пов’язаних із атомами перехідних металів та передбачає наступні етапи: 1) підбір реальних КСЕ з базою, легованою бором, та високою концентрацією домішкового заліза; 2) визначення впливу світло-індукованого розпаду пар Fe-B на параметри вольт-амперних характеристик (фактор неідеальності, струм насичення, шунтуючий опір, напруга холостого ходу, струм короткого замикання) КСЕ; 3) з’ясування кількісних характеристик кінетики зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B; 4) визначення закономірностей змін параметрів КСЕ внаслідок світло-індукованої деградації в умовах ультразвукового навантаження (повздовжні та поперечні хвилі з частотою (1-30) МГц та інтенсивністю (0,1-1Вт/см2) в температурному діапазоні 290-350 К) та порівняння із беззвуковим випадком; 5) визначення кінетичних характеристик зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B в умовах ультразвукового навантаження та порівняння з беззвуковим випадком; 6) розробка рекомендацій щодо спрямованої зміни експлуатаційних характеристик КСЕ шляхом акустостимульованої деактивації дефектів.

Вибір домішкової пари Fe-B як безпосереднього об’єкту акусто-керованої модифікації в КСЕ зумовлений декількома факторами. А саме

а) поширеністю даного дефекту у реальних сонячних елементах та його суттєвим впливом на ефективність фотоелектричного перетворення;

б) високим ступенем вивченості параметрів Fe-B;

в) легкістю ініціації перебудови комплексу: пара руйнується під впливом освітленні і відновлюється у темряві, причому характерний час останнього процесу при кімнатних температурах складає десятки хвилин;

г) з компонентами пари пов’язана зміна об’єму кристалу ∆Ω різного знаку: бор є домішкою заміщення з іонним радіусом, який менший ніж для атомів кремнію Sі, тоді як для міжвузлового заліза ∆Ω > 0 – а саме для дефектів такого типу, відповідно до попередніх досліджень, очікується найбільша ефективність акусто-дефектної взаємодії.

Розробка методу характеризації домішкового складу сонячних елементів на основі вимірювання ВАХ передбачається шляхом теоретичного моделювання кремнієвих *n*+-*p*-*p*+ структур з домішками атомів перехідних металів (на прикладі заліза). Ця частина включає розрахунки ВАХ для структур з різною товщиною (150-240 мкм) та ступенем легування (1015÷1017 см-3) бази при варіації концентрації домішки в інтервалі 1010÷1013 см-3 для температурного діапазону 290-340 К. При цьому буде враховано можливість знаходження атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари Fe-B, а також різні зарядові стани дефекту. Розрахунки будуть здійснені за допомогою симулятора сонячних елементів SCAPS 3.3.08 з врахуванням отриманих в результаті аналізу літературних джерел реальних величин та температурних залежностей параметрів кремнію (ширини та звуження забороненої зони, рухливості, теплової швидкості та ефективної маси носіїв, коефіцієнтів власної рекомбінації тощо) та рекомбінаційних центрів. Наступний етап – визначення фактору неідеальності для розглянутих структур шляхом апроксимації отриманих ВАХ. Апроксимація буде здійснюватися відповідно до дво-діодної моделі з використанням мета-еврістичного методу оптимізації Jaya. Останній етап – налаштовування (підбір кількостей схованих шарів та нейронів в них, методу регуляризації, активаційної функції, швидкості навчання) та навчання (на основі масиву даних, отриманих попередньо) штучної нейронної мережі, спроможної передбачити концентрацію домішкових атомів заліза на основі параметрів сонячного елементу, умов вимірювання ВАХ та отриманого в результаті апроксимації ВАХ значення фактору неідеальності. Орієнтовний інструмент роботи зі штучною нейронною мережею – пакет Keras.

3.4 Обґрунтування спроможності виконання проєкту учасником Конкурсу (до 3 сторінок).

Надається інформація про:

– попередній досвід роботи та науковий доробок наукового керівника та виконавців у галузях, дотичних до поданого проєкту;

– наявну матеріально-технічну базу, обладнання та устаткування, необхідні для виконання проєкту.

Досвід наукової роботи Оліха О.Я. – 24 роки., він є автором понад 70 наукових публікацій, серед яких 40 статей (з них 10 – одноосібних робіт у фахових періодичних виданнях, індексованих у Scopus; зокрема 2 та 3 подібні роботи у виданнях 1-го та 2-го квартилів відповідно). Індекс Хірша (Scopus) дорівнює 7. Основна тематика досліджень: використання ультразвуку для характеризації та модифікації властивостей напівпровідникових структур. Ним вперше проведено дослідження перенесення заряду в кремнієвих p-n структурах та структурах з бар’єром Шотки за умов ультразвукового навантаження; запропоновано модель акустоактивного комплексного дефекту. Він є спеціалістом в області визначення параметрів бар’єрних структур з вольт-амперних характеристик, зокрема з використанням мета-еврістичних методів (Journal of Applied Physics, **118**, 024502). Також він є автором роботи, де проаналізовано зв’язок величини фактору неідеальності кремнієвої *n*+-*p* з концентрацією атомів заліза ([Superlattices and Microstructures](https://www.sciencedirect.com/science/journal/07496036), **136**, 106309), яка є підґрунтям запропонованого у проєкті методу.

Наявна матеріально-технічна база:

- установка для вимірювання вольт-амперних характеристик ((-5÷5) В, (10-8÷2⋅10-2) А, точність 0,1%, швидкість – до 50 вимірів/с);

- термостат на базі пропорційно-інтегрально-диференційного контролера (температурна стабільність ±0,02 К);

- п’єзоелектричні перетворювачі для збудження повздовжніх та поперечних хвиль у діапазоні (1÷30) МГц;

- комплекс для ультразвукового навантаження (генератор Г3-41, частотомір Ч3-34, цифровий осцилограф GDS-806S, характерограф Х1-48);

- комп’ютер AMDA4–3400, 2.7GHz CPU, 3072 MB RAM.

3.5 Обґрунтування необхідності придбання за рахунок гранту обладнання та устаткування, а також напрямів їх використання після завершення гранту (Інформація заповнюється у разі подання заявки, яка передбачає придбання обладнання та устаткування для реалізації проєкту) (до 1 сторінки ).

За рахунок гранту передбачається придбання наступного обладнання:

- Параметричний аналізатор Keithley 4200A-SCS. Цей прилад дозволяє проводити швидкі та точні вимірювання вольт-амперних характеристик (у діапазоні струмів 10-15÷1 А та напруг 10-6÷210 В), вольт-фарадних характеристик (10-14÷10-6 Ф, до 400 В у частотному діапазоні 103÷107 МГц). Необхідність його придбання у даному проєкті пов’язана з 1) можливістю реалізації швидкісних вимірювань ВАХ: у імпульсному режимі часове розділення даного приладу досягає 10 нс, що суттєво перевищує можливості наявного обладнання; водночас характерні часи процесів перебудови та перезарядки дефектів у напівпровідникових пристроях найчастіше знаходяться у діапазоні 10-6÷10-2 с і тому використання даного приладу дозволить безпосередньо визначати фізичні закономірності подібних процесів та впливу на них акустичних хвиль; 2) розширенням можливостей тестування КСЕ та підготовки рекомендацій для модифікації технологічних процесів завдяки проведенню вольт-фарад досліджень у широкому частотному діапазоні. Після завершення гранту аналізатор Keithley 4200A-SCS буде використовуватися для тестування різноманітних напіпровідникових пристроїв та структур. Зокрема, завдяки можливостям надшвидких вимірювань малих струмів, він буде використовуватись для характеризації наноелектронних пристроїв.

- Ноутбук Asus TUF FX505DU-AL079. Сучасні підходи до глибоко навчання передбачають роботу з великими об’ємами даних, що висуває достатньо жорсткі вимоги до швидкодії та оперативної пам’яті обчислювальних пристроїв. Зокрема, широко використовуються процеси паралельних обчислень з використанням відео-процесорів, що підтримують технологію CUDA. Більшість розроблених інструментів для роботи зі штучними нейронними мережами, зокрема Keras, який планується використати під час реалізації проекту, оптимізовані саме для використання подібних технологій. На жаль, наявний комп’ютерний парк з цієї точки зору є застарілим і для ефективної роботи зі штучною нейронною мережею, спроможною передбачити концентрацію домішкових атомів заліза на основі параметрів сонячного елементу необхідне обладнання з більшою розрахунковою потужністю. Після завершення гранту ноутбук буде і надалі використовуватися для реалізації процесів глибокого навчання.

3.6 Обсяг фінансування, необхідний для виконання наукового дослідження (розробки), з відповідним обґрунтуванням за статтями витрат згідно з таблицями у Розділі VII (до 2 сторінок).

Витрати на оплату праці, включно з нарахуваннями передбачають фінансування у обсязі 2065601 грн (416573 грн у 1 рік, 1649027 грн у 2 рік). Вони передбачають оплату відповідно до схеми посадових окладів Київського національного університету імені Тараса Шевченка за роботи, виконані відповідно до наступної таблиці

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| ПІП | Завдання під час етапів | Зайнятість, міс |
| Оліх О.Я., д.ф-м.н., доцент, науковий керівник проєкту | Розробка розрахункової моделі кремнієвої n+-p-p+ структури, розробка програмного забезпечення для автоматизації моделювання та обробки результатів, проведення моделювання, розробка методики оцінювання кінетичних характеристик ВАХ в умовах ультразвукового навантаження, розробка методики екстрагування параметрів дефектних комплексів з ВАХ, проведення відповідних розрахунків, розробка архітектури штучної нейронної мережі, визначення механізмів механізмів акусто-дефектної взаємодії, розробка рекомендацій щодо методу кількісної оцінки електрично-активних дефектів у бар’єрних структурах за величиною фактору неідеальності, підготовка доповідей на конференції, наукових статей, звітів. | 16 |
| Костильов В.П. д.ф-м.н., ст.н.с | Підбір кремнієвих сонячних елементів, розробка методики вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в КСЕ, визначення кількісних характеристик кінетики зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B, визначення механізмів механізми впливу акустичних хвиль на процес перебудови дефектних комплексів, розробка рекомендацій щодо практичного використання ультразвукового навантаження під час виробництва КСЕ, підготовка доповідей на конференції, наукових статей, звітів. | 16 |
| к.ф-м.н | Закупівля обладнання, відпрацювання режимів вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в КСЕ, вимірювання характеристик впливу світло-індукованого розпаду пар Fe-B на параметри ВАХ за умов ультразвукового навантаження та без нього, підготовка доповідей на конференції, наукових статей, звітів. | 16 |
| Лозицький О.В. | Розробка програмного забезпечення для автоматизації моделювання та обробки результатів, проведення моделювання, програмна реалізація мета-еврістичного методу оптимізації Jaya, налаштування та навчання штучної нейронної мережі, підготовка доповідей на конференції, наукових статей, звітів. | 16 |
| молодий учений, к.ф-м.н | Практична реалізація методики оцінювання кінетичних характеристик ВАХ в умовах ультразвукового навантаження, проведення відповідних вимірювань. | 9 |
| молодий учений, к.ф-м.н | Вимірювання кінетики зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B за умов ультразвукового навантаження та без нього, проведення закупівель | 9 |
| студент | Практична реалізація методики оцінювання кінетичних характеристик ВАХ в умовах ультразвукового навантаження, підготовка зразків до вимірювань | 9 |

Фінансування на матеріали, необхідні для виконання робіт, крім спец устаткування складає 4743 грн (2 рік) пов’язане з необхідністю підготовки звітів і передбачає витрати на папір та витратні матеріали.

Витрати на спецустаткування (обладнання) 202999 грн (1 рік) – обґрунтування наведене у п.3.5.

Витрати на відрядження пов’язані з необхідністю представлення результатів науковій спільноті та ознайомлення з найсучаснішими досягненнями і передбачають участь у закордонних (1 відрядження для кожного з виконавців проєкту) та українських (2 відрядження сумарно) конференціях. Передбачений обсяг фінансування – 256000 грн (2 рік).

Інші витрати 120000 грн (2 рік) призначені на сплату публікаційнийних внесків передбачених в очікуваних результатах проекту 2 статей у міжнародних і вітчизняних фахових журналах.

Загальний обсяг фінансування проекту - 4973713 грн (2723683 грн у 1 рік, 2250030 грн у 2 рік)

3.7 Очікувані результати виконання проєкту (до 1 сторінки ):

а) Опис наукової або науково-технічної продукції (за її наявності), яка буде створена в результаті виконання проєкту (із зазначенням її якісних та кількісних характеристик).

б) Обґрунтування переваг очікуваної наукової або науково-технічної продукції (за її наявності) у порівнянні з існуючими аналогами.

в) Обґрунтування практичної цінності запланованих результатів проєкту для економіки та суспільства (стосується проєктів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок).

Очікувана в результаті виконання проєкту наукова продукція полягає у

- з’ясуванні фізичних закономірностей та механізмів взаємодії дефектних комплексів, пов’язаних із атомами перехідних металів, у КСЕ з пружними хвилями ультразвукового діапазону;

- оцінці можливостей цілеспрямованого керування характеристиками кремнієвих сонячних елементів шляхом застосування ультразвукового навантаження під час виробництва та розробці рекомендацій щодо практичного використання даного підходу;

- розробці фізичних основ методу оцінки концентрації електрично-активних дефектів у бар’єрних структурах за величиною фактору неідеальності;

- створенні масиву даних (близько 15 тисяч наборів) розрахованих величин фактору неідеальності для кремнієвих структур *n*+-*p*-*p*+ з різними геометричними та електрофізичними характеристиками;

- налаштуванні штучної нейронної мережі для оцінки концентрації атомів заліза в кремнієвих *n*+-*p*-*p*+ структурах;

- підготовка не менше 2 статей у міжнародних і вітчизняних фахових журналах;

- підготовка не менше 3 доповідей на конференціях міжнародного рівня.

3.8 Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання проєкту в суспільній практиці (до 1 сторінки ).

Встановлені фізичні закономірності впливу ультразвукового навантаження на процеси перебудови домішкових центрів, пов’язаних з атомами перехідних металів, можуть бути використані для модифікації стандартних технологічних операцій, що використовуються при створенні кремнієвих сонячних елементів, з метою деактивації вказаних дефектів. Визначенні особливості акусто-дефектної взаємодії дозволять налаштувати параметри ультразвукового впливу задля отримання найбільшої ефективності. Крім того, отримані результати можуть стати основою для розробки методів акусто-інженерії дефектів у напівпровідникових пристроях.

З’ясовані кількісні характеристики взаємозв’язку величини фактору неідеальності та концентрації рекомбінаційних центрів можуть бути покладені в основу експрес-методу оцінки домішкового складу реальних сонячних елементів. Налаштована штучна нейронна мережа може бути безпосередньо використана для оцінки концентрації атомів заліза в кремнієвих *n*+-*p*-*p*+ структурах, де вказані дефекти є основними рекомбінаційними центрами.

3.9 Можливі ризики, що можуть вплинути на реалізацію проєкту (до 1 сторінки )

Можлива низька акустична активність пари Fe-B стане на заваді ефективної практичної реалізації методу акусто-підсиленого гетерування.

Введення карантину перешкодять виконанню експериментальних досліджень у повному обсязі.