Розробка фізичних засад акусто-керованої модифікації та машинно-орієнтованої характеризації кремнієвих сонячних елементів

Development of physical base of both acoustically controlled modification and machine learning-oriented characterization for silicon solar cells

**8. Спеціальність (обирається з переліку наукових спеціальностей МОН) (для мультидисциплінарних проєктів інформація наводиться в порядку від основної спеціальності до факультативної)**

104 - Фізика та астрономія

(01.04.07 Фізика твердого тіла)

104 - Physics and astronomy

(01.04.07 Solid state physics)

**9. Стисла інформація про зміст проєкту.**

**9.1 Анотація проєкту (українською та англійською мовами, до 1000 знаків кожною – для оприлюднення на сайті)**

Проєкт передбачає два основних напрями досліджень. Перший має на меті розробку фізичних засад методу акустостимульованої деактивації дефектів, які пов’язані з атомами перехідних металів у кремнієвих сонячних елементах (КСЕ), та базується на експериментальному з’ясуванні фізичних закономірностей та механізмів перебудови дефектних комплексів за умов поширення пружних хвиль ультразвукового діапазону. Передбачається, що подібний підхід дозволить покращити ефективність та світлодеградаційну стійкість КСЕ.

Другий напрям передбачає розробку засад експрес-методу кількісної оцінки електрично-активних дефектів у бар’єрних структурах за величиною фактору неідеальності. При цьому передбачається а) моделювання вольт-амперних характеристик КСЕ з різними геометричними і електрофізичними параметрами з врахуванням наявності рекомбінаційних центрів; б) використання методів глибокого навчання для виявлення взаємозв’язків концентрації дефектів та параметрів вольт-амперних характеристик.

Two main research direction are provided in the project. First one aims to develop the physical basis of the method of acoustically stimulated deactivation of defects, which associated with transition metal atoms.

The first aims to develop the physical basis of the method of acoustic-stimulated deactivation of defects associated with transition metal atoms in silicon solar cells (CSE), and is based on experimental elucidation of physical laws and mechanisms of reconstruction of defective complexes under elastic wave propagation.

Перший має на меті розробку фізичних засад методу акустостимульованої деактивації дефектів, які пов’язані з атомами перехідних металів у кремнієвих сонячних елементах (КСЕ), та базується на експериментальному з’ясуванні фізичних закономірностей та механізмів перебудови дефектних комплексів за умов поширення пружних хвиль ультразвукового діапазону. Передбачається, що подібний підхід дозволить покращити ефективність та світлодеградаційну стійкість КСЕ.

Другий напрям передбачає розробку засад експрес-методу кількісної оцінки електрично-активних дефектів у бар’єрних структурах за величиною фактору неідеальності. При цьому передбачається а) моделювання вольт-амперних характеристик КСЕ з різними геометричними і електрофізичними параметрами з врахуванням наявності рекомбінаційних центрів; б) використання методів глибокого навчання для виявлення взаємозв’язків концентрації дефектів та параметрів вольт-амперних характеристик.

**9.2. Короткий опис проєкту (українською та англійською мовами, до 5000 знаків кожною)**

На сьогодні сонячна фотовольтаїка характеризується найшвидшими темпами зростанням серед усіх технологій у світі, спрямованих на використання відновлюваних джерел енергії. При цьому практичне використання даного способу створення енергії переважно реалізується за допомогою кремнієвих сонячних елементів. Задля здешевлення кінцевої продукції, для створення КСЕ використовуються кристали достатньо невисокої чистоти, причому однією з найпоширеніших і водночас з найшкідливіших домішок, є атоми заліза та інших перехідних металів. Питання щодо з’ясування поведінки дефектів та реалізації можливості їхнього керованого переведення у електрично-неактивний стан мають фундаментальне значення для покращення експлуатаційних характеристик пристроїв. Одним з варіантів модифікації дефектної підсистеми є збудження у кристалі пружних коливань. Проте, наявних на сьогодні знань недостатньо для формування цілісних уявлень щодо акусто-дефектної взаємодії у напівпровідникових кристалах загалом та практичного використання можливостей активного ультразвуку під час виготовлення сонячних елементів зокрема. Особливістю даного проєкту є те, що він передбачає з’ясування фізичних особливостей та механізмів впливу ультразвукового навантаження на процеси перебудови дефектних комплексів, ініційовані іншим активаційним чинником (освітленням) чи викликані прагненням системи повернутися до стану термодинамічної рівноваги. Тобто, проєкт орієнтований на розробку фізичних засад методу, що базується на використанні комплексних процесів, де ультразвуку відведена роль додаткового чинника та певного фактору коригування.

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 визначення закономірностей змін параметрів КСЕ (фактор неідеальності, струм насичення, шунтуючий опір, напруга холостого ходу, струм короткого замикання) 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 випадком відсутності звуку; визначення кінетичних характеристик зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B в умовах ультразвукового навантаження та порівняння з беззвуковим випадком; розробку 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, зокрема, поширеністю даного дефекту у реальних сонячних елементах та його суттєвим впливом на ефективність фотоелектричного перетворення, а також тим, що з компонентами пари пов’язана зміна об’єму кристалу різного знаку, а саме, для дефектів такого типу, відповідно до попередніх досліджень, очікується найбільша ефективність акусто-дефектної взаємодії.

Неруйнівні методи, що мають на меті оцінку концентрації домішок у напівпровідникових структурах, зокрема в КСЕ, мають важливе значення з прикладної точки зору. На сьогодні розроблено чимало як прямих, так і непрямих 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). Параметри КСЕ 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. Цей проєкт передбачає подолання цієї перешкоди завдяки використанню методів глибокого навчання, які орієнтовані на вирішення задач, де не передбачається можливість чіткої алгоритмізації. Для успішного застосування глибокого навчання є необхідним наявність значної за об’ємом бази даних. У цьому проєкті передбачено створення відповідного масиву даних шляхом моделювання ВАХ для кремнієвих структур *n*+-*p*-*p*+ з різною товщиною (150-240 мкм) та різним 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. Останнім етапом цього напряму проєкту буде налаштовування (підбір кількостей схованих шарів та нейронів в них, методу регуляризації, активаційної функції, швидкості навчання) та навчання штучної нейронної мережі, спроможної передбачити концентрацію домішкових атомів заліза на основі параметрів сонячного елементу, умов вимірювання та значення фактору неідеальності.

**10. Ключові слова (українською та англійською мовами, від 5 до 10 слів кожною)**

Кремній, сонячні елементи, ультразвук, рекомбінаційні центри, вольт-амперні характеристики, глибоке навчання, фактор неідеальності, акусто-дефектна взаємодія

Silicon, solar cells, ultrasound, recombination centers, current-voltage characteristics, deep learning, ideality factor, acousto-defect interaction

**11. Тривалість виконання проєкту (українською та англійською мовами):**

дворічний проєкт

two-year project

**12. Загальна вартість проєкту, грн.**

6508830\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**Вартість проєкту по роках, грн.:**

1-й рік - 3019860\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

2-й рік - 3488970\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**1. Мета проєкту (до 500 знаків)**

Розробка фізичних засад методу акустостимульованої деактивації дефектів, пов’язаних з атомами перехідних металів, у монокристалічних кремнієвих сонячних елементах (КСЕ) з метою покращення експлуатаційних характеристик (ефективності, світлодеградаційної стійкості). Розробка експрес-методу оцінки концентрації електрично-активних центрів у кремнієвих бар’єрних структурах на основі вимірювання вольт-амперних характеристик з використанням методів глибокого навчання.

**2. Основні завдання проєкту (до 1000 знаків)**

Розробити методику оцінювання кінетичних характеристик перебудови дефектів у бар’єрних структурах в умовах ультразвукового навантаження. Встановити фізичні закономірності та механізми впливу акустичних хвиль на процес перебудови дефектних комплексів, пов’язаних із атомами перехідних металів, у КСЕ залежно від температури, інтенсивності та типу коливань.

Шляхом моделювання з’ясувати вплив геометричних особливостей, ступеню легування та наявності різних типів дефектів на особливості формування вольт-амперних характеристик типових кремнієвих сонячних елементів в широкому температурному діапазоні. Використовуючи методи глибокого навчання, встановити взаємозв’язок між величиною фактору неідеальності та концентрацією рекомбінаційних центрів. Запропонувати метод кількісної оцінки електрично-активних дефектів у бар’єрних структурах за величиною фактору неідеальності.