Комплекс Fe-B як об’єкт акустодефектної взаємодії та визначальний фактор коефіцієнту неідеальності кремнієвих сонячних елементів.

**1. Мета проекту (до 500 знаків)**

Експериментально встановити особливості впливу пружних хвиль ультразвукового діапазону на динаміку перебудови дефектів, пов’язаних із залізом, у структурах на основі монокристалічного кремнію. Розробити основи методу оцінки концентрації електрично-актривних дефектів у сонячних елементах на основі вимірювання вольт-амперних характеристик з використанням методів глибокого навчання.

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

Розробити методику оцінювання динамічних характеристик перебудови дефектів у бар’єрних структурах в умовах ультразвукового навантаження. Провести експериментальне дослідження характеристик впливу акустичних хвиль на процес перебудови дефектних комплексів, пов’язаних із залізом, у кремнієвих сонячних елементах залежно від температури, інтенсивності та типу коливань. Встановити особливості та механізми акусто-дефектної взаємодії.

Провести моделювання вольт-амперних характеристик типових кремнієвих сонячних елементів з різними геометричними та електрофізичними параметрами в широкому температурному діапазоні за умови наявності домішкового заліза в різних станах. Використовуючи методи глибокого навчання, встановити взаємозв’язок між величиною фактору неідеальності та концентрацією домішкового заліза.

**3. Детальний зміст проекту.**

**3.1 Сучасний стан проблеми.**

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 кремнієві сонячні елементи (КСЕ). Ці системи створюється з використанням аморфного, полікристалічного чи кристалічного кремнію, причому частка останніх останнього 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 розширення можливостей 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, багато аспектів акусто-дефектної взаємодії у напівпровідникових, зокрема кремнієвих, кристалах залишаються поза увагою і, на відміну від багатьох інших галузей, ультразвукове навантаження не є стандартною частиною процесу виготовлення сонячних елементів.

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 як з прикладної точки зору, так і для наукових досліджень. 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 зразків 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 машинного 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).**

Проєкт має дві складові. Перша пов’язана з експериментальним дослідженням динамічних акусто-індукованих ефектів в кремнієвих сонячних елементах, друга – з розробкою основ методу оцінки концентрації рекомбінаційних центрів за величиною фактору неідеальності.

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 вивчення процесів впливу ультразвукового навантаження на процеси перебудови дефектних комплексів, ініційовані іншим активаційним чинником (освітленням) чи викликані термодинамічними силами у випадку повернення до стану рівноваги. Тобто йде мова про вивчення 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: домішкове заліза та комплексів за його участю у монокристалічному кремнії.

Новизна запропонованого методу полягає у 1) використанні величини фактору неідеальності як кількісного показника концентрації рекомбінаційних центрів; 2) застосуванні методів глибокого навчання для встановлення взаємозв’язку вказаних величин.

**3.3 Методологія дослідження (до 2 сторінок).**

Вибір саме домішкової пари Fe-B як об’єкту дослідження акусто-дефектної взаємодії в кремнієвих сонячних елементах 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.

Експериментальне дослідження впливу акустичних хвиль на процес перебудови дефектних комплексів, пов’язаних із залізом передбачає наступні етапи: 1) підбір кремнієвих сонячних елементів (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) вимірювання кінетики зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B; 4) дослідження змін параметрів КСЕ при освітленні в умовах ультразвукового навантаження та порівняння з без звуковим випадком; 5) вимірювання кінетики зміни параметрів ВАХ внаслідок відновлення пар Fe-B в умовах ультразвукового навантаження та порівняння з без звуковим випадком.

Передбачається проведення досліджень при варіювання частоти (1-30 МГц), інтенсивності (0,1-1Вт/см2) та типу (повздовжні, поперечні) акустичних хвиль в температурному діапазоні 290-350 К.

Розробка основ методу характеризації домішкового складу сонячних елементів на основі вимірювання ВАХ передбачається на основі моделювання реальних структур. А саме, будуть розраховані ВАХ структури *n*+-*p*-*p*+ з домішками атомів заліза. Розрахунки будуть проведені для температурного діапазону 290-340 К, для структур з різною товщиною (150-240 мкм) та ступенем легування (1015÷1017 см-3) бази та різною концентрацією домішки (1010÷1013 см-3). При цьому враховуватиметься можливість знаходження атомів заліза або у міжвузольному стані, або 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 тa 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 лягла в основу запропонованого у проекті 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).

**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 )**

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

**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 здійснення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок.***

Очікувана в результаті виконання проєкту наукова продукція полягає у

- з’ясуванні особливостей та механізмів взаємодії пар Fe-B та міжвузольних атомів заліза в монокристалах кремнію з пружними хвилями ультразвукового діапазону;

- розробці рекомендацій щодо застосуванні акустичного навантаження та його режимів під час виробництва кремнієвих сонячних елементів;

- розробці основ методу оцінки концентрації електрично-актривних дефектів у сонячних елементах 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 штучна нейронна мережа для оцінки концентрації атомів заліза в кремнієвих *n*+-*p*-*p*+ структурах.

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

Отримані результати щодо 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 підсилення гетерування 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.

Результати щодо 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 практичної реалізації методи акусто-підсиленого гетерування.