

ベイズ最適化を用いた酸化チタンパッシベーション膜における 水素プラズマ処理条件の最適化

Bayesian optimization of experimental conditions of hydrogen plasma treatment on TiO_x

名大院工¹, 理研 AIP², ○宮川 晋輔¹, 後藤 和泰¹, 沓掛 健太郎², 黒川 康良¹, 宇佐美 徳隆¹

Graduate School of Eng., Nagoya Univ.¹, AIP, RIKEN²

°S. Miyagawa¹, K. Gotoh¹, K. Kutsukake², Y. Kurokawa¹, N. Usami¹

E-mail: miyagawa.shinsuke@b.mbox.nagoya-u.ac.jp

【はじめに】原子層堆積 (ALD) 法を用いて製膜した酸化チタン(TiO_x)は、結晶シリコン(c-Si)と非対称なバンド構造を有し、また高いパッシベーション性能を示すため、新規電子選択層として近年注目されている。我々は、 TiO_x に水素プラズマ処理(HPT)を施すことにより $\text{TiO}_x/\text{c-Si}$ 界面のパッシベーション性能の大幅な向上を達成した[1]。しかし、HPT 条件の最適化には至っておらず、実験条件の最適化はさらなるパッシベーション性能の向上に繋がると考えられる。しかしながら、プロセス温度、時間、水素圧力、プラズマ出力など実験条件が多く、網羅的な実験は不可能である。そこで、多数のパラメータを持つ関数の最適化手法として用いられるベイズ最適化に着目した。ベイズ最適化では、確率的な予測に基づき効率的に実験条件を最適化可能である。そのため、本研究では $\text{TiO}_x/\text{c-Si}$ 界面のパッシベーション性能の向上を目指し、ベイズ最適化による HPT 条件の最適化を行った。

【実験方法】FZ-n 型結晶 Si(100)基板上に膜厚 3 nm の TiO_x を ALD 法によって製膜した。その後、プロセス温度、時間を変えた 10 条件で HPT を行い、実効キャリアライフタイム (τ_{eff}) を測定した。これらの条件及び結果を初期値としてガウス過程回帰を行い、得られた関数の事後確率の期待値と標準偏差を求めた。本実験で

は、期待値と標準偏差の重み付き和である信頼性上限関数 (UCB) に基づいて次の実験条件を算出し、その条件での実験結果から推定値を更新し、実験と計算を逐次的に繰り返すことで最適化を行った。

【結果と考察】図 1 は、時間・温度における τ_{eff} のガウス過程回帰により得られた期待値曲面である。200 °C、1 分の条件付近で期待値が高いことがわかり、また UCB においても約 195 °C、約 0.9 分で最大値を得た。そのため、200 °C、1 分において実験を行い、その結果 407.2 μs という最も高い τ_{eff} が得られた。図 2 はベイズ最適化を用いて実験条件を決定し実際に実験を行った際の τ_{eff} の推移と、仮想実験としてランダムに実験条件を決定し期待値曲面から算出した τ_{eff} の期待値の推移を示している。ベイズ最適化により少ない実験数で効率的に最適化できていることがわかる。このことからベイズ最適化が酸化チタンにおける HPT 条件の最適化に有用であることがわかった。今後、実験条件を追加し、多パラメータにベイズ最適化を用いることでさらなる性能向上を目指す。

【謝辞】本研究は新学術領域研究ハイドロジェノミクス、NEDO の支援の下行われた。

【参考文献】

[1] S. Miyagawa *et al.*, *J. Vac. Sci. Technol. A*, **38**, 022410 (2020).

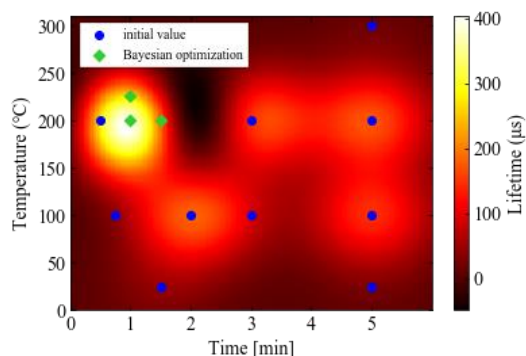


Fig. 1. Curved surface of expectation value of lifetime as a function of time and temperature

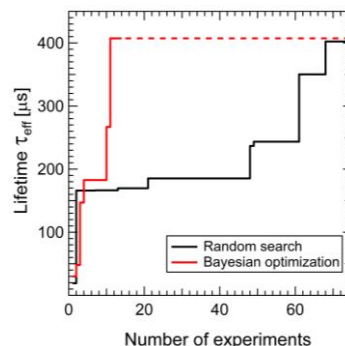


Fig. 2. Transition of lifetime as a function of number of experiments