RPD 誘起欠陥 DLTS スペクトルのベイズ最適化を用いた回帰解析

DLTS analysis of RPD-induced defects using Bayesian optimization

豊田大工[1]，○(D)原　知彦[1]，大下祥雄[1]

Toyota Technol Ins.[1], ○Tomohiko Hara[1], Taichi Tanaka[1], Yoshio Ohshita

E-mail: sd20501@toyota-ti.ac.jp

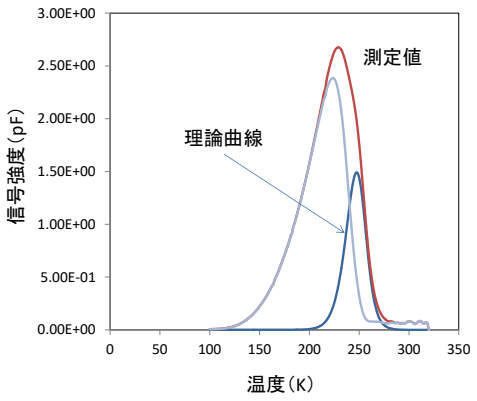
【はじめに】キャリア選択型コンタクト(CSC)太陽委電池の製造過程において TCO 堆積に使用する反応性プラズマ蒸着法(RPD)は、SiO_2/Si 構造に界面及び界面近傍に 10^{12} ㎝$^{-2}$ eV^{-1} 程度の欠陥を導入し、少数キャリア寿命を低下させる[1]。これら RPD 誘起欠陥に対し、我々は DLTS 測定からミッドギャップに欠陥準位を持つ欠陥が複数導入され、その特性値からこれらの一部が再結合中心であることを報告してきた[2]。しかし、RPD 誘起欠陥の欠陥特性値評価を行い SRH 再結合によるキャリア寿命低下を説明するには、従来 DLTS では議論が困難な界面欠陥と界面近傍欠陥の両方を考慮した新たな解析モデルが必要である。さらに、本系のような欠陥特性値の近い場合では、測定でそれら欠陥信号全てを単一の欠陥ごとに分離することは困難である。

本研究では、欠陥特性値の連続性を考慮に入れた DLTS スペクトルの回帰的解析による信号分離及び欠陥特性値評価を行った。ここで、回帰的解析には、ベイズ最適化を使用し、欠陥準位、捕獲断面積、過渡応答強度をパラメータとした。

【実験】RPD 誘起欠陥の DLTS スペクトルを得るため、Cz n 型及び p 型 Si(100)基板を使用し、Al/SiO_2/Si/Al MOS ダイオードを作製した。熱酸化により SiO2 層(約 12 nm)を形成し、RPD 法により酸化膜上にインジウム添加スズ酸化物（ITO）を堆積させた。HCl を用いて ITO をエッチングし、Al 電極を抵抗加熱蒸着により堆積した。

測定から得られた DLTS スペクトルに対して回帰解析を行った。最適化するパラメータである欠陥特性値を使用して理論曲線を生成し、目的となる DLTS スペクトルとの信号強度差、ピーク頂点温度差を評価値として使用した。ここで、各パラメータの感度を補正するため、理論曲線パラメータである捕獲断面積は対数を取った値をパラメータとして使用し、評価値においては、強度差、ピーク温度差の arctan を取り足し合わせた。

【結果】試行回数事前学習 100 回、試行回数 1000 回で得られた結果を示す。測定値データを構成する特性値は、欠陥絶対値の誤差範囲が準位約で 90%、の捕獲断面積で約 70%範囲まで最適化した。以上得られた結果より、これら欠陥は、再結合中心として機能するものと考えられる。



図：回帰解析結果

【謝辞】本研究の一部はスマートエネルギー研究センターを通じた文部科学省の支援により
行われた。また、試料作製に関して豊田工大、森村 元勇氏に感謝致します。

[1] T. Kamioka,et.al, AIP Advances, 9, 105219(2019).
[2]原ら第 68 回応用物理学会春季学術講演会,(2021) 18a-Z29-1

© 2021年 応用物理学会