

# ベイズ最適化を援用した高性能パッシベーションコンタクトの実現 ～TiO<sub>x</sub>/結晶Si ヘテロ構造への適用～

## Realization of high-performance passivating contact via Bayesian optimization: Application to TiO<sub>x</sub>/crystalline silicon heterostructure

名大院工<sup>1</sup>, 理研 AIP<sup>2</sup>, <sup>○</sup>宮川 晋輔<sup>1</sup>, 後藤 和泰<sup>1</sup>, 沓掛 健太郎<sup>2</sup>, 黒川 康良<sup>1</sup>, 宇佐美 徳隆<sup>1</sup>

Graduate School of Eng., Nagoya Univ.<sup>1</sup>, AIP, RIKEN<sup>2</sup>

<sup>○</sup>S. Miyagawa<sup>1</sup>, K. Gotoh<sup>1</sup>, K. Kutsukake<sup>2</sup>, Y. Kurokawa<sup>1</sup>, N. Usami<sup>1</sup>

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

【導入】シリコンヘテロ接合型太陽電池の高効率化を目指し、高性能パッシベーションコンタクト技術の研究が盛んに行われている。変換効率の向上には、接触抵抗( $\rho_c$ )および飽和電流密度( $J_0$ )の同時低減が必要であり、以下の式に示す $\rho_c$ と $J_0$ を組み合わせたキャリア選択層の性能を表す指標である選択能( $S_{10}$ )の向上が求められる[1]。

$$S_{10} = \log_{10} \frac{V_{th}}{J_0 \rho_c}$$

ここで $V_{th}$ は25℃における熱起電力を表す。一般に、材料系や製膜技術を限定しても、基板の前処理、製膜プロセスなどを含め多くのパラメータがあり、網羅的な実験による実験条件の最適化は困難である。

本研究では、原子層堆積(ALD)法を用いて製膜した酸化チタン(TiO<sub>x</sub>)/結晶シリコン(c-Si)ヘテロ構造の高性能化を $S_{10}$ を指標として達成するという課題に対し、ベイズ最適化(BO)を援用し確率的な予想に基づき取り組んだ。具体的には、3種類の溶液処理、TiO<sub>x</sub>膜厚を制御するALDサイクル数( $C_{ALD}$ )及び製膜後の水素プラズマ処理(HPT)の6つの実験パラメータ(プロセス温度: $T_{HPT}$ 、プロセス時間: $t_{HPT}$ 、チャンバー圧力: $p_{H_2}$ 、水素流量: $R_{H_2}$ 、プラズマ出力: $P_{RF}$ 、電極間距離: $d$ )の最適化を行った。

【実験方法】n型c-Si(100)基板に異なる3種類の溶液処理を施した後、ALD法によりTiO<sub>x</sub>を製膜した。溶液処理としては(a)HF洗浄のみ、(b)HF洗浄後にSC2洗浄、(c)HF洗浄後にH<sub>2</sub>O<sub>2</sub>浸漬を用いて3種類のTiO<sub>x</sub>/c-Siヘテロ構造を作製した。初期条件として、ランダムなTiO<sub>x</sub>

膜厚及びHPT条件で10条件施し、3種類の構造における $S_{10}$ を実験的に求めた。これらの条件及び結果を初期値として、それぞれの構造に対してガウス過程回帰を行い、 $S_{10}$ の事後確率の期待値と標準偏差を求めた。本実験では3種類の構造の中から信頼性上限関数(UCB)が最大となる実験条件を次の実験条件として適用した。得られた条件での実験結果を加えて回帰モデルを更新し、さらに次の実験条件を求めた。以上の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】BOを用いて実験条件を決定し実際に実験を行った際の $S_{10}$ の推移を図1に示す。BOによって、少ない実験数で効率的に $S_{10}$ の向上を達成できた。表IにBO12回目まで得られた最適条件及びその条件での $S_{10}$ を示す。TiO<sub>x</sub>製膜前にSC2洗浄を施した構造において表Iの条件で最大の $S_{10}=13.633$ を得た。3種類の構造の中でUCBが最大となる条件を次の実験条件に適用することで各構造における条件を最適化しつつ、どの構造が優れているか判別できた。

【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] R. Brendel *et al.*, IEEE J. Photovoltaics, **6**, 1413 (2016).

Table I Optimized experimental conditions and  $S_{10}$

	$T_{HPT}$ [°C]	$t_{HPT}$ [min]	$p_{H_2}$ [Pa]	$R_{H_2}$ [sccm]	$P_{RF}$ [W]	$d$ [mm]	$C_{ALD}$	$S_{10}$
(a)HF	100	0.75	100	70	390	10	15	13.267
(b)HF+SC2	200	1.5	200	70	300	20	30	13.633
(c)HF+H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	200	1.5	200	70	300	20	30	13.630

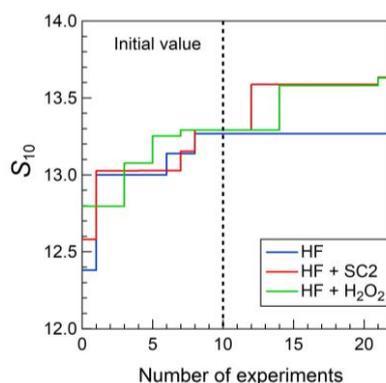


Fig. 1. Transition of  $S_{10}$  as a function of number of experiments