

機械学習を用いた BaSi₂ 蒸着膜の組成比予測モデルの予測精度改善

Improving the machine learning prediction of the composition ratio of BaSi₂ thin films deposited by vacuum evaporation

山梨大クリスタル研¹, 山梨大機器分析² ○上田 龍斗¹, 有元 圭介¹, 山中 淳二², 原 康祐¹
CCST, Univ. of Yamanashi¹, CIA, Univ. of Yamanashi², ○Ryuto Ueda¹, Keisuke Arimoto¹, Junji Yamanaka², Kosuke O. Hara¹

E-mail: g21tz004@yamanashi.ac.jp

【はじめに】BaSi₂ は太陽電池に適したバンドギャップや高い光吸収係数を持つため、有望な太陽電池の材料として期待されている。また、薄膜作製には、高速な真空蒸着が利用可能である。しかし、Si と Ba の蒸気圧が異なる為、Si/Ba 比を 2:1 となるように成膜することが難しく、実験ごとに成膜条件を最適化する必要がある。この最適化の作業には時間とコストがかかる。そこで、機械学習を用いて BaSi₂ の組成比予測モデルを作成した。また、予測モデルを実用的なものにする為、予測精度の向上を図った。

【方法】高真空チャンバー (~10⁻⁴ Pa) 中において、BaSi₂ 顆粒の抵抗加熱によりステンレス鋼 (SUS304) 基板上へ蒸着を行った。この際、堆積組成を制御するため、蒸着初期に一定時間シャッターを閉めておくことで Ba の堆積を抑制した。この操作を事前溶融と呼び、その間の水晶振動子への堆積量を事前溶融膜厚と呼ぶ。原料重量と事前溶融膜厚を変化させて成膜し、SEM・EDX で組成比を測定した。そして、Si/Ba 比を目的関数としてカーネル Ridge 回帰を行い、組成比予測モデルを作成した。モデルの評価には、1 個抜き交差検証誤差を用いた。

【結果】Si/Ba 比を目的変数、原料重量・事前溶融膜厚・W ボート重量・水晶振動子の振動数・顆粒の数を説明変数としてカーネル Ridge 回帰を行った。R² スコアは 0.6465 であり、予測精度が不十分な回帰結果となった。そこで、事前溶融膜厚と顆粒の数は原料重量と相関があることに着目し、事前溶融膜厚と顆粒の数を、原料重量で割った値を説明変数として、再度回帰を試した。その結果、事前溶融膜厚を原料重量で割ることで R² スコアは 0.9999 まで向上した。この時の回帰結果を Fig. 1 に示す。凡例の数値は原料重量を示している。グラフからも、フィッティング結果が実験値をうまく表現できている事が分かる。しかし、交差検証誤差は 0.092 で、もう少し改善が必要である。今後、ベイズ推定を行い、予測誤差の大きい箇所について集中的にデータを取得し、データ数を増やしてモデルの汎化性能を向上させる予定である。

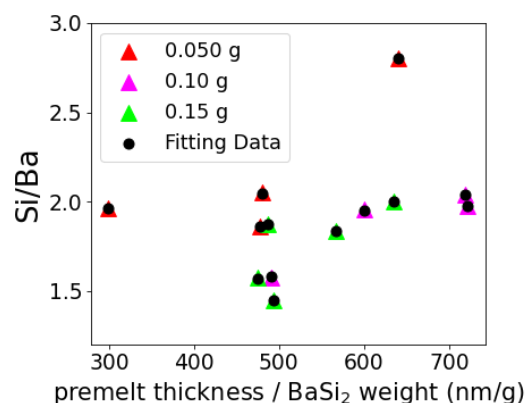


Fig.1 Experimental values and regression data of Si/Ba vs. premelt thickness / BaSi₂ weight