

ベイズ最適化を適用した Cat-CVD i-a-Si のパッシベーション性能の向上 Improvement in the passivation quality of Cat-CVD i-a-Si by applying Bayesian optimization

北陸先端大¹, 理研² ○(M1)大橋 亮太^{1*}, 沓掛 健太郎², Huynh Thi Cam Tu¹, 大平 圭介¹

JAIST¹, RIKEN², Ryota Ohashi¹, Kentaro Kutsukake², Huynh Thi Cam Tu¹, Keisuke Ohdaira¹

E-mail: s2210034@jaist.ac.jp*

1.はじめに

Si ヘテロ接合(SHJ)太陽電池は、26%以上の変換効率が報告されており¹, 高効率太陽電池として期待されている。SHJ 太陽電池における a-Si 堆積に最も広く使用されているプラズマ化学気相堆積法は、製膜時のプラズマ損傷に留意する必要がある。そこで我々は、プラズマ損傷の無い製膜が可能な触媒化学気相堆積 (Cat-CVD)法に着目している。しかし、基板温度やガス流量など多くの製膜パラメータが存在するため、最適製膜条件を見つけることが困難である。本研究では、ベイズ最適化²⁾を用いることで、良好なパッシベーション性能を持つノンドーパ非晶質 Si (i-a-Si)の製膜条件を効率的に得る検討を行った。

2.実験方法

洗浄した n 型結晶 Si(100)ウエハを、5 wt% HF 溶液に 30 秒間浸漬することで自然酸化膜を除去し、さらに、エピタキシャル成長抑止のため、3 wt% H₂O₂ 溶液に 30 秒間浸漬することでウエハ上に極薄 SiO_x 膜を形成した³⁾。その後、ウエハの両面に Cat-CVD 法で i-a-Si 膜を製膜した。このとき、以下の 2 種の数値を提示させるモデルを使用し、ベイズ最適化を行った。

モデル 1: i-a-Si 膜厚 10 nm でのライフタイムの期待値と標準偏差の和が最大となる製膜条件

モデル 2: モデル 1 の製膜条件での予測膜厚(この予測膜厚を参考に膜厚が 10 nm となるよう製膜時間を調整)。

ベイズ最適化によって変化させる製膜パラメータは、基板温度、製膜圧力、SiH₄ 流量、H₂ 流量とした。製膜後、大気雰囲気中で 275 °C

で 30 分の熱処理を行った。熱処理前の試料に対して分光エリプソメトリーを用いて i-a-Si 膜の膜厚を、熱処理後の試料に対してマイクロ波光導電減衰法を用いてライフタイムを測定した。

3.実験結果

Fig. 1 に、試料のライフタイムと i-a-Si 膜厚の実験回数による変化を示す。初期値を 14 点ランダムに設定し、その結果をもとにベイズ最適化を進めた。その結果、3 回目の実験で、膜厚~10 nm でライフタイムが 1423 μs まで向上する製膜条件が得られた。当日は、さらにベイズ最適化を進めた結果を報告する。

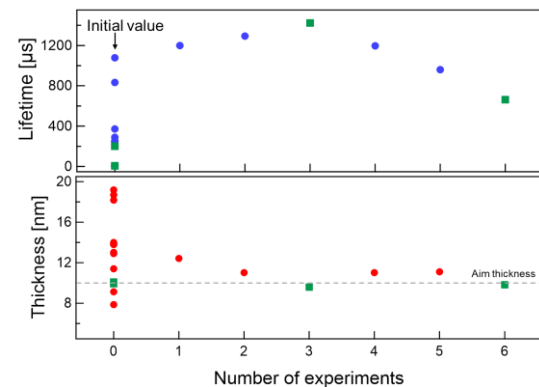


Fig. 1 Lifetime and i-a-Si film thickness of i-a-Si/SiO_x/c-Si/SiO_x/i-a-Si heterostructures as a function of the number of experiments. Green markers show the data points of the samples with a film thickness of 10 ± 0.5 nm.

参考文献

- 1) M. A. Green *et al.*, Prog. Photovolt., **30**, 687 (2022).
- 2) B. Shahriari *et al.*, Proc. IEEE, **104**, 148 (2016).
- 3) T. Oikawa *et al.*, Curr. Appl. Phys., **15**, 1168 (2015).