

## 機械学習モデルを活用した BaSi<sub>2</sub> 真空蒸着と MgO バリア層の有効性 Effectiveness of BaSi<sub>2</sub> thermal evaporation using a machine learning model and MgO barrier layer

山梨大クリスタル研 中西 隆陽, 上田 龍斗, 山中 淳二, 有元 圭介, 原 康祐\*

Univ. Yamanashi, T. Nakanishi, R. Ueda, J. Yamanaka, K. Arimoto, K. O. Hara\*

\*現所属：奈良先端大、Present affiliation: NAIST, E-mail: hara.kosuke@naist.ac.jp

BaSi<sub>2</sub>は太陽電池に適した物性を持ち、理論上は2 μmの薄膜で最大31%の変換効率を実現可能である [1]。真空蒸着法により長いキャリア寿命の BaSi<sub>2</sub> 薄膜を高速に作製できるが、蒸気組成が原料 BaSi<sub>2</sub>からずれるため、基板からの Si 供給や事前熔融処理による組成調整が必要である [2]。これは、Si 以外の基板への蒸着において、プロセス最適化に多くの実験が必要という課題をもたらしていた。そこで、我々は機械学習(ML)によりプロセス条件から堆積膜の組成を予測するモデルを構築した [3]。このモデルを用いれば、Si/Ba 比が2となるプロセス条件を逆解析し、予備実験無しに BaSi<sub>2</sub>膜を作製可能である。一方、BaSi<sub>2</sub>には、化学反応性が高く急峻なヘテロ接合形成が困難であるという課題もあり、例えば、SiO<sub>2</sub>とも熱力学的に反応しうするため、MLモデルを用いてもガラス基板上への単相成膜は困難である。本研究では、熱力学的に BaSi<sub>2</sub>と反応しない MgO をバリア層として利用することを提案する。本研究の目的は、MLモデルを活用した BaSi<sub>2</sub>蒸着を実証することと、MgOバリア層の有効性を検証することである。

まず、合成石英ガラス基板上に、100 nm の MgO 薄膜をスパッタリングにより堆積した。次に、BaSi<sub>2</sub> 顆粒を原料として真空蒸着を行った。Si/Ba 比が2となる事前熔融条件を組成予測モデルで算出し利用した。基板温度は450 または 500 °C とし、堆積後にそのまま 10–30 min のアニールを行った。

Fig. 1(a), 1(b)は、成膜温度 500 °C、アニール時間 10 min で作製した試料の XRD パターンと SEM 断面観察画像である。XRD パターンは BaSi<sub>2</sub> と MgO で説明でき、SEM 画像から基板上に2層の形成が確認できた。異相が見られないため、MgO がバリア層として機能したと考えられる。成膜温度 450 °C においても同様に BaSi<sub>2</sub> と MgO の形成を確認した。以上により、MLモデルを利用した BaSi<sub>2</sub>真空蒸着と MgOバリア層の有効性を実証した。

[1] K. O. Hara, *Sol. Energy* **245**, 136 (2022). [2] K. O. Hara, *et al.*, *J. Mater. Res.* **33**, 2297 (2018). [3] R. Ueda, *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.* **62**, SK1011 (2023).

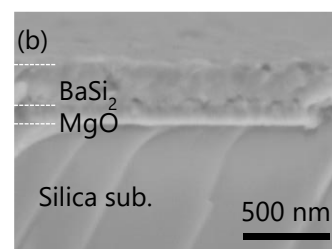
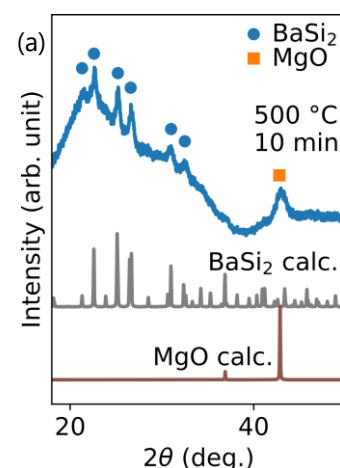


Figure 1 (a) XRD pattern and (b) cross-sectional SEM images of the 500 °C 10 min BaSi<sub>2</sub>/MgO sample fabricated by sputtering and ML-assisted thermal evaporation.