

X線トポグラフによる転位測定とSiC転位密度解析ソフトウェア

表 和彦*

1. はじめに

X線トポグラフは、転位や積層欠陥などの結晶欠陥を、単結晶ウェーハ状態のまま全面を容易に非破壊で測定し、それらを画像として捉えることのできる極めてユニークな方法として、半世紀以上の長い歴史を持っている。例えばLSI製造にはなくてはならないシリコンにおいては、結晶の無転位化、大口径化の歴史において重要な役割を果たしてきた。その結果、現在300 mmウェーハが主流となっている半導体デバイス用シリコン単結晶ウェーハは基本的に無転位となり、X線トポグラフで観測できる結晶欠陥は通常存在しない。しかしながら、LSIデバイス製造においては、高温処理やイオン注入、エピタキシャル成長など、シリコン基板に多くのストレスが加わるプロセスにより、時として転位が発生することがある。そのような場合、X線トポグラフによる観察は極めて有効で、シリコンウェーハ評価の重要なツールの一つとして、原料ウェーハが無転位化した現在でも活用され続けている。

ところで近年、電力変換におけるロスを大幅に削減するためのSiCやGaNを用いた、高効率・高耐圧パワー半導体が注目を集めている。これらの結晶材料は、高い絶縁破壊電圧や高温動作、高い飽和ドリフト速度など、現状のシリコンに比べてパワーデバイスに適した特性を有している。そのため、これらを材料としたデバイスが普及すると、電力変換や電力輸送におけるエネルギー損失が大幅に低減され、地球温暖化防止の効果が大きいと期待されている。したがって、その実用化推進のため、米国、欧州、日本などにおいても、それぞれ官民をあげた開発競争が激化している。しかしながら、これらの結晶はシリコンと異なり、原料ウェーハ内に非常に多くの転位などの結晶欠陥を含むものとなっている。例えば、一昨年ノーベル賞の対象となったGaNは、LEDとしてはすでに実用化され、市場に普及している一方、パワー半導体として使う場

合、現状において多数存在する結晶欠陥が、デバイス製作の歩留まりや信頼性向上の大きな障害となっている。同様に、最も研究開発が進み、一部で製品化が始まっているSiCにおいても、ウェーハ基板中やエピタキシャル層成膜時に形成される結晶欠陥が多数含まれ、その普及の大きな障害となっている。その中には、1つでも存在すればデバイス性能を決定的に損なうようなキラ欠陥があり、それらをなくすることが重要である。しかしそれだけでは不十分で、結晶中に多数含まれる結晶欠陥も、デバイスの歩留まりや信頼性の向上に対し重大な影響を及ぼしていることがわかっている。

このようななか、X線トポグラフの測定装置に関して、XRTmicronの開発により、ほぼ全自動で高分解能X線カメラによるデジタルデータの収集し、そこで得られた画像から、転位の種類を区別して同定することが可能となった⁽¹⁾。それに加えて、従来専門家が1つ1つ時間をかけて行っていた転位種の同定と密度計測をコンピュータの画像認識によって自動的に行うことができれば、極めて効率的に結晶品質を定量化することが可能となる。これにより、デバイス特性と転位密度の関係を系統的に検討することが可能になるだけでなく、ウェーハの品質向上やデバイス製造プロセスの管理にも役立つものと期待される。リガクでは、そのような要望に応え、X線トポグラフ画像から転位の種類を同定するとともに、それぞれの密度を定量計測するソフトウェアを開発した。本稿では、その機能とSiCに対する適用例を詳しく紹介する。

2. X線トポグラフによるSiC転位の観測

図1に、(0001)面カット4H-SiCウェーハの方位関係を示す。また図2は、そのウェーハをXRTmicronによって、反射指数 $g=2\bar{2}02$ で測定した透過トポグラフ画像である。SiC結晶中には、貫通らせん転位(Threading Screw Dislocation, TSD)、貫通刃状転位(Threading Edge Dislocation, TED)、および基底面転位(Basal Plane Dislocation, BPD)が存在することが知ら

* 株式会社リガク X線研究所

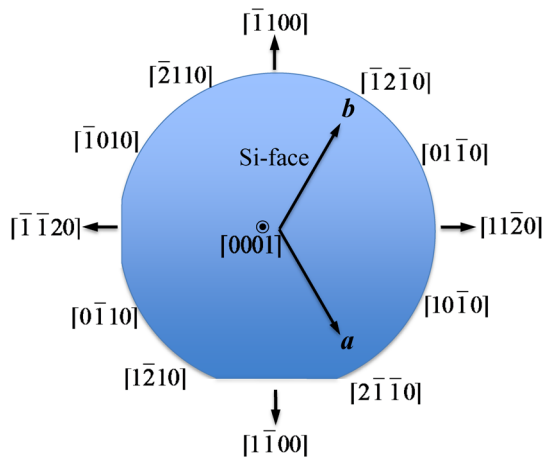


図1. 現在標準的に使われている SEMI 規格で定められた 4H-SiC ウェーハをシリコン面から見た結晶方位関係.

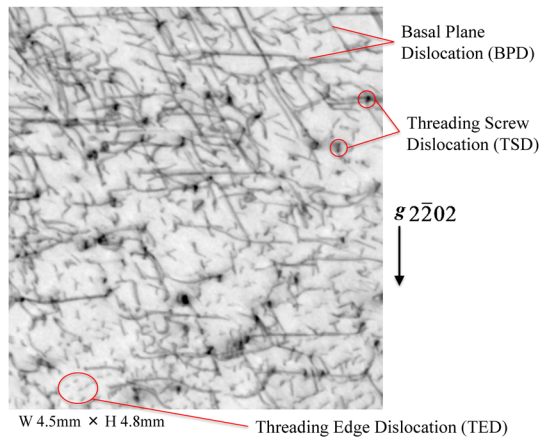


図2. $\text{MoK}\alpha_1$ 線を用いた $2\bar{2}02$ 反射による透過トポグラフ像. 本文に示した3つの結晶転位である TSD, TED および BPD を識別することが可能である.

れている⁽²⁾. まず、濃く大きな点状の像は、最も大きな Burgers ベクトル $b=nc[0001]$, ($n=1, 2, \dots$) を持ち、転位線の方向が c 軸に平行な TSD とみなされる. この転位は、結晶表面付近で大きな格子歪みを伴うため、図で見られるように、濃くかつ大きな転位像となる. その中でも特に n が3以上のものは、非常に大きな歪みを持つだけでなく、転位芯に小さな中空の穴ができる場合がある. この欠陥はマイクロパイプと呼ばれ、デバイスの機能を大きく損なうキラー欠陥として知られている. 次に、TSD 同様転位線の方向が c 軸と平行で、かつ Burgers ベクトル $a/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ を持つものが TED である. この転位は、薄く小さな点あるいは短い線状の像として観測される. 最後に、BPD は、TED と同じ Burgers ベクトルを持ち、転位線が、 c 面内に存在している. したがって、通常の (0001) ウェーハにおいては、転位線の方向がウェーハ表面にほぼ平行となり、線状の転位像として観測される.

次に、実験室の X 線トポグラフ装置の性能を確認するため、主に TSD に注目して、SiC 転位計測の標準とされている放射光トポグラフ⁽³⁾と比較した例を図3に示す. 放射光では、 $g=11\bar{2}8$ による反射配置で波長 $1.5 \text{ \AA}$ の X 線によって測定を行った. 一方実験室系では、反射配置で、 c 軸に平行な Burgers ベクトルを持つ転位 (TSD) に高い感度を持つ指数 0008 による $\text{CuK}\alpha$ 線による測定と、透過配置の $g=2\bar{2}02$ 反射による $\text{MoK}\alpha$ 線による測定を実施した. 放射光トポグラフにおける白いはっきりした点は TSD に相当しており、実験室における $g=0008$ 反射において TSD と同定される黒い点と、ほぼ完全に一致している. 一方、実験室透過配置

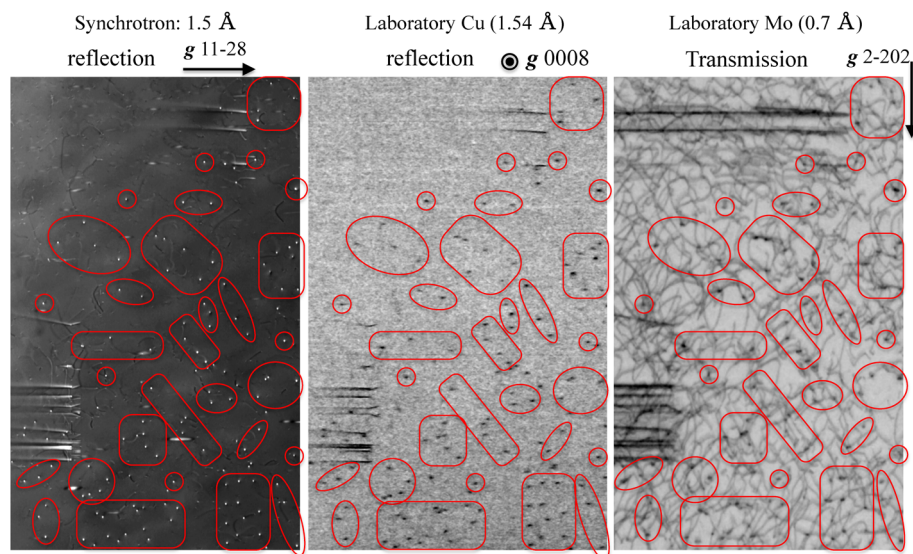


図3. 放射光反射 X 線トポグラフと反射および透過配置の実験室トポグラフの比較. 赤枠で囲った部分は、放射光と2つの実験室トポグラフで同じものと同定された TSD. 反射の 0008 ではほぼ 100%, 透過の $2\bar{2}02$ 反射でも 70% から 80% が一致している. また透過トポグラフ像には、多数の BPD も見られる.

の $g=2\bar{2}02$ 反射においては、赤い枠で囲ったかなりの部分はTSDと認識されるが、一部明確でないものも存在し、70%から80%程度の適合率と考えられる。反射指数による転位像のコントラストの違いは、主に反射の散乱ベクトル g と転位のBurgersベクトル b の関係によって決まり、特に、 $g \cdot b=0$ のときに転位像が消失する⁽²⁾。図3の0008反射において、BPDが観測されていないのはそのためである。したがって、注目する転位の持つ b によって、適切な反射指数 g を選択することが、転位の評価には重要なポイントとなる。

3. SiC 転位密度自動解析ソフトウェア

前章で述べたように、結晶転位は、X線トポグラフ像において、その種類によって特徴的なコントラストを与える。しかし、たとえ1枚のウェーハであっても、膨大な量の転位が存在し、それを1つ1つ数えて転位密度を算出することは、極めて時間を要する仕事となる。そこでリガクでは、SiC結晶に存在する上記3種類の転位の特徴を捉え、区別して認識したうえで、それぞれの転位密度（単位面積中の個数あるいは、単位

体積中の転位線の長さ）を算出する機能を有する自動解析ソフトウェアを開発した。その解析例を図4に示す。解析結果は、TSD, TSD (High), TEDおよびBPDそれぞれについて、右上に個/cm²の単位で表示される。ここで、TSD (High) は、前章で述べたキラ欠陥であるマイクロパイプを念頭におき、転位像が特別強く現れているものを区別するために用意したものである。また、BPDに関しては、通常の個/cm²という単位の他に、cm/cm³という単位でも表示している。これは、透過トポグラフにより結晶内部に存在するすべての欠陥を観測する場合、BPDのように線状の転位では、それらが絡みあって長く伸び、独立した本数として数えることが困難なためである。このときは、転位密度の基本的な定義⁽⁴⁾にしたがい、転位の全長を計測し、測定体積で規格化することによって転位密度を求めている。そのため、測定体積を求めるうえで、指定のフィールドにウェーハ試料の厚さを入力する必要がある。以上述べた転位解析に際し、より正確な同定を実現するために、それぞれの転位種ごとにユー

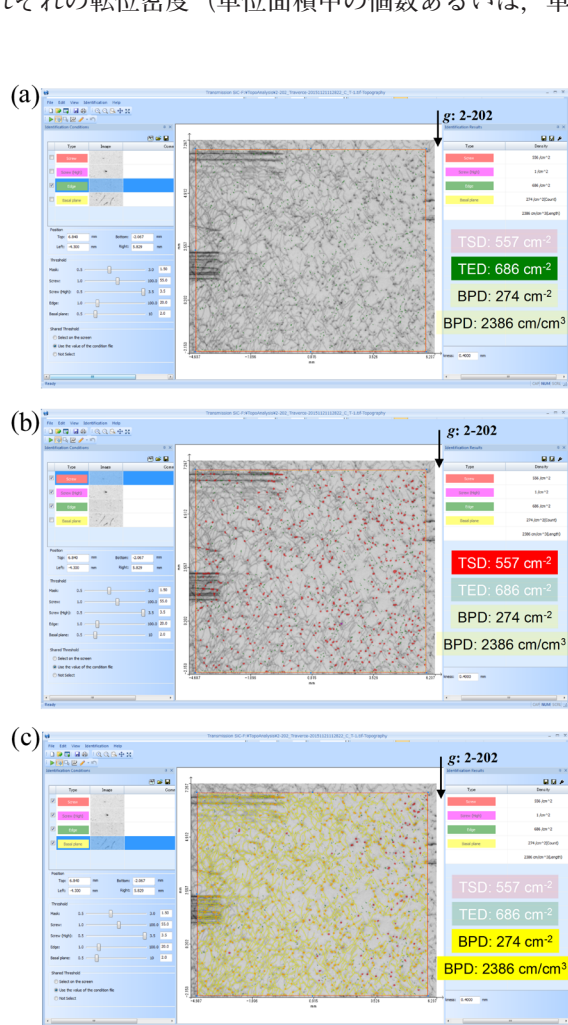


図4. 本ソフトウェアによって、透過配置における $2\bar{2}02$ トポグラフ像を解析し、(a) TED, (b) TSD, (c) BPDの結果を示している。

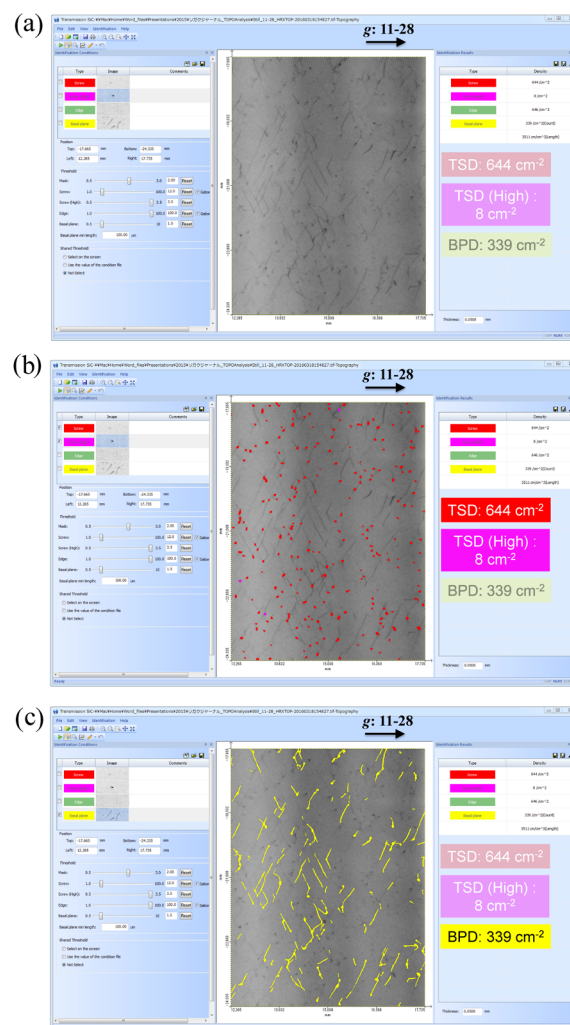


図5. 本ソフトウェアによって、反射配置における $11\bar{2}8$ トポグラフ像を解析し、(a) 元画像, (b) TSD, (c) BPDの結果を示している。

ザーが閾値を調整することができるようになっている。また、図5には、反射配置の $g=11\bar{2}8$ 反射のデータの例を示す。この反射指数の場合、放射光との比較によって、TEDはコントラストが弱いため検出できていないことが分かった。したがってここでは、TSDおよびBPDの解析結果のみを示している。この測定におけるX線の入射角は 17° であり、 $1/e$ 侵入深さは約 $30\text{ }\mu\text{m}$ で、その程度の範囲にあるBPDが観測されていると考えられる。この場合、それぞれの転位線が十分に分離していれば、「本数」を数えて、転位密度とすることが可能である。しかし、図5cに見られる黄色線で同定されたBPDを見ると、何割かが連結し、転位密度としてはやや少なめに計測されている可能性がある点には注意を要する。

本ソフトウェアには、以上述べてきたように、転位の種類を区別して転位密度を測定する機能の他に、トポグラフ像のコントラストを解析する機能も有している。その解析例を図6に示す。ここでは、1つ1つの

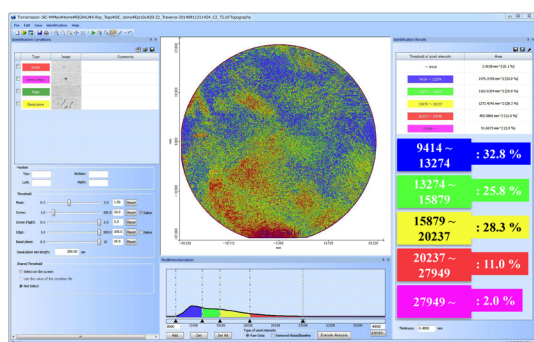


図6. 1つ1つの転位ではなく、トポグラフ像のコントラストを分類する機能。得られた各点の回折強度を分類し、色分けするとともに、それぞれの面積比を解析した結果。

転位を数えるのではなく、コントラストの強さを分類して表示する。X線回折強度の強い領域は、平均して転位密度が高いと考えられ、ウェーハ全体について、回折強度の強弱を図5のように俯瞰して見る事ができる。さらに、それぞれの領域を定量的な面積値（面積比）として算出することも可能で、例えば、〇〇以上コントラストの強い領域の割合が××%を超えたウェーハを不合格にする、といった使い方も有効だと考えられる。

4. 転位密度のウェーハマッピング

第1章で述べたように、結晶転位は、デバイス特性と深く相関していると考えられている。したがって、X線トポグラフによって得られた転位密度とデバイス特性の関係を検討するうえで、場所を特定して解析することは有効と考えられる。そのために、XRTmicronにおいては、測定したウェーハ全体のトポグラフを任意の位置と大ききで切り出し、あらかじめ設定しておいた閾値を含む解析条件を使って場所ごとに転位密度解析を自動で実施する機能を持っている。測定・解析の流れと、TSDおよびBPDに関するマッピング測定結果を図7に示す。ここで切り出すサイズをデバイスのチップサイズに合わせて調整すれば、各デバイスの特性と転位密度との相関をとることが可能である。ただし、ここで用いたウェーハは、BPD密度がほとんどの領域で 2000 cm^{-2} のため、コントラストの弱いTEDはそれに埋もれて解析できなかったため表示していない。ただし、デバイス特性に対するTEDの影響は小さいと考えられており、デバイスに対する影響の大きいTSD,BPDについてのウェーハマップが測定できることでも、十分な意味があるものと考えられる。

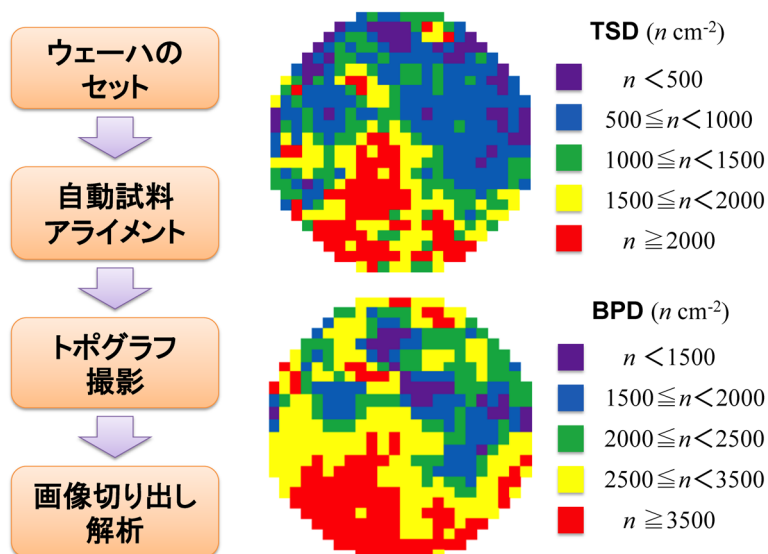


図7. 測定から解析まで自動で行う流れとウェーハマッピングの解析結果。分割した各セルについて、TSDおよびBPDの密度で色分けして表示した。

5. おわりに

本稿では、主に次世代のパワーデバイスの主役となるであろう SiC に対し、測定したトポグラフ画像を用いて典型的な転位を同定し、その密度を測定する転位密度自動解析ソフトウェアの基本的機能を紹介した。さらに、XRTmicron によるトポグラフ測定の自動化と、本ソフトウェアによる転位密度解析機能を結びつけると、図7に示したような流れで、測定から解析までの自動化が実現する。これにより、従来非常に手間のかかる作業であったウェーハレベルでの転位密度測定が、極めて効率的に実行できるようになった。特に、X線は非破壊であるため、デバイスを形成するためのプロダクトウェーハを直接測定することが可能で、その後の生産プロセスへ流すことにより、転位の種類や密度とデバイスパフォーマンスとの関係を詳しく調べることができる。このようにして、SiC を用いたパワーデバイスの性能向上や生産における歩留まりの改

善を進め、市場への普及を促進するうえで、X線トポグラフが有効なツールとなると期待される。第1章で述べたように SiC 以外にも、GaN や AlN などが新しいデバイス材料として注目を浴びている。また、他にも Al_2O_3 , Ga_2O_3 など、結晶性評価の必要性が高まってくるものと考えられる多くの材料が存在する。そのような要求に応えるためにも、本転位密度自動解析ソフトを SiC 以外の多くの結晶へ拡張していくことが、今後の課題である。

参考文献

- (1) 表 和彦：リガクジャーナル, 43 (2012), No. 2, 12–18.
- (2) 松波弘之他編：「半導体 SiC 技術と応用」第2版, 6.2章, 日刊工業新聞社 (2011).
- (3) H. Tsuchida, I. Kamata and M. Nagano: *J. Cryst. Growth*, **310** (2008), 757–765.
- (4) 加藤雅治：「入門転位論」, 第1章, 裳華房 (1999).