



最近の研究と技術

低角入射放射光回折顕微鏡法による 4H-SiC パワーデバイス中の 格子欠陥の観察

Observation of Lattice Defects in 4H-SiC Power Devices by Grazing Incident Synchrotron Radiation Topography

松畑 洋文^a, 山口 博隆^a, 大野 俊之^b

Hirofumi Matsuhata, Hirotaka Yamaguchi and Toshiyuki Ohno

^a産業技術総合研究所

^b日立製作所中央研究所

要 旨 4H-SiC パワーデバイスの歩留まりと信頼性向上を目的として、パワーデバイスの内部構造を観察する手法を開発した。低角入射斜入射放射光回折顕微鏡法と名付けた本手法は、ウエハー内部に多量に存在している格子欠陥のコントラストに邪魔されることなく、ウエハー表面のエピ膜や、パワーデバイスの内部構造を観察する手段として適していることがわかった。本手法は4H-SiC パワーデバイスの開発に有効に利用されている。一方で、本手法では転位は特徴的なコントラストを示すことが分かって来た。本報告ではそれらのコントラストに関するルールを整理し、その原因について動力学回折理論を用いて考察した。

キーワード：4H-SiC, パワーデバイス, 低角入射, 放射光トポグラフィ, 転位

1. はじめに

エネルギー利用効率のさらなる改善を行い、地球温暖化抑制技術を推進させることが社会的に重要な課題として浮上している。日本全国の Si デバイスによる電力制御システムを SiC によるインバーター制御システムに置き換えると 580 万 KW, 原子炉約 5 から 6 基分の電力の節約が見込まれている¹⁾。また、インバーター制御システム自体の軽量小型化が期待されているので、自動車や鉄道用の小型高性能の電力制御システムの開発も期待されている。

しかしながら、SiC パワーデバイスは、歩留まり、容量、信頼性などの問題を現在、抱えている。結晶の格子欠陥、不

純物、最適化されていないデバイス設計、最適化されていないデバイスプロセスなどの要因が複合的にからみ合っていると推察されている。特性不良を起こしている SiC パワーデバイスの内部構造などを調べ、複雑に絡み合っている因子を一つ一つ解明していくことが求められている。ゲート長数 10 ナノメートルの微細で膨大な数の MOS によって構成されている Si-LSI の場合、不良部を利用しないように動作させ、見かけの歩留まりを向上させることも可能である。一方、パワーデバイスの場合、数ミリから十数ミリの大型デバイス中に不良部分が 1箇所存在すると、正常な動作は期待されず、Si-LSI とは別の厳格な技術課題が存在している。

我々は、4H-SiC ウエハー上に試作されたパワーデバイスの内部構造を観察する手法として、単色化した放射光を用い、SiC デバイスの表面すれすれに X 線を入射させ、Bragg-case の回折を起こさせ、表面近傍の構造に敏感な回折顕微鏡法の開発を行って来た。この手法を grazing incident synchrotron X-ray topography (低角入射、あるいは斜入射放射光回折顕微鏡法) と名づけている。この手法では、4H-SiC ウエハー内部に存在している高密度の格子欠陥のコントラストに邪魔されることなく、ウエハー表面に成長させたエピ膜や、そこに作製されたパワーデバイスの内部構造のみの観察が可能である^{2,3)}。この手法を用いて、我々は、試作された 4H-SiC パワーデバイスの内部構造とデバイスの特性との関係について調べている。また、この手法に加え、同一試料を、エミッション顕微鏡によるデバイス動作時の発熱、発光の解析や、極低温顕微フोटルミ分光、PIXE (Particle Induced X-ray Emission) 法、放射光蛍光 X 線分析等で調べ、それらの実験結果を組み合わせることで、今まで知られることのなかった SiC パワーデバイスについてのいくつかの新しい貴重な知見を得ている。これらの解析結果はパワーデバイス研究にフィードバックされ、SiC インバーター制御システムの開発に貢献している。

低角入射放射光回折顕微鏡法で得られたパワーデバイスに関する知見は、デバイス技術の開発そのものに関係している事柄であり、ここでは述べないこととする。一方で、ウエハーやエピ膜には 4H-SiC 特有のさまざまな格子欠陥が存在することは知られており、観察される欠陥を正しく同定する技術を確立することも重要である。本手法では格子欠陥は特徴的なコントラストを示し、転位の場合、転位の種類、バーガース・ベクトル、転位の向きと転位のコントラストの間にはルールが存在することが分かった。本解説では基底面転位にのみ話題を絞り、この特徴的な転位のコントラストについて整理し、コントラストのメカニズムを考察した。

2. 実験方法

実験室の装置では、X 線の平行性やビーム径が不足し、なおかつ輝度が不足するため、本手法では放射光を用いている。高エネルギー加速器研究機構、フォトンファクトリー、BL-15C で実験を行っている。コンピューター制御による 4 軸回

¹⁾ 〒 305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 産業技術総合研究所第 2 事業所エネルギー半導体エレクトロニクス研究ラボ
TEL: 029-861-5532; FAX: 029-861-5402
E-mail: h.matsuhata@aist.go.jp
2009 年 5 月 14 日受付

転機構と3方向平行移動機構を持つゴニオメーターを用いた。像観察作業は高分解能高感度 CMOS センサーアレイにより構成された大面積フラットパネルセンサーを用い、最終的な像の記録は原子核乾板を用いている。試料表面からの X 線の侵入深さは、吸収を考慮した運動学回折理論により求めることができ、X 線の波長と反射を選ぶことによって調節可能である。さまざまな波長の X 線と反射を用いて実験を行っているが、波長 0.15 nm 前後で、Si 面の観察では $g = \bar{1}\bar{1}28$, $11\bar{2}8$, $\bar{2}118$, $1\bar{2}18$, $\bar{1}018$, $01\bar{1}8$, $\bar{1}\bar{1}08$, 00016 などの反射を利用して観察している。これらの反射を選ぶと入射 X 線と結晶表面との角度は 3 から 20 度程度となり、X 線侵入深さは 10–80 μm 程度で変化する。実験時の配置を図 1 に示す。

3. 観察された転位のコントラスト

以下に観察された基底面転位のコントラストについて述べる。図 2 は 4H-SiC の Si 面で観察された基底面転位半ループである。それぞれ (a) $g = \bar{1}\bar{1}28$, (b) $g = 11\bar{2}8$, (c) $g = \bar{1}\bar{1}08$ の各反射が Bragg 条件を満足している状態を示している。図中の白矢印は入射 X 線の方角を示している。紙面に投影された g ベクトルの方向は入射 X 線と反対の方角だが、紙面に垂直な方向に大きな成分を持っている。反射ベクトルは選び方によって紙面にほぼ垂直な方向にもなるので、紙面に投影された g ベクトルの方向ではなく、入射 X 線の方角で回折の条件を示している。図 3 はこの転位半ループの模式図を示す。観察に用いた本試料は、Si 面のウエハー表面が $[0001]$ 方向より 8 度だけ $[11\bar{2}0]$ 方向へ傾いているので、 (0001) 面は表面より 8 度傾いていて点 D の位置では結晶の奥方向へ沈んでいる。この転位半ループは点 D で貫通刃状転位から基底面転位に変化して点 A で表面に抜けて終端している。転位の向きを $E \rightarrow D \rightarrow C \rightarrow B \rightarrow A$ と設定しておく。点 B の位置に着目すると (a) $g = \bar{1}\bar{1}28$ では右側が暗く、左側が明るい。 (b) $g = 11\bar{2}8$ では点 B の反対称なコントラストが逆転し右側が明るく、左側が暗い。 (c) $g = \bar{1}\bar{1}08$ では点 B では黒矢印で示しているようにコントラストが消失している。螺旋転位は、 $g \cdot b = 0$ を満たすとコントラストは消失するので、点 B は基底面転位の螺旋転位部であることが分か

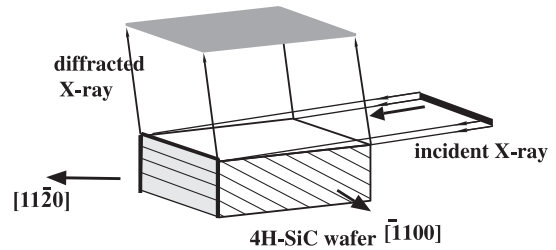


図 1 実験時の、試料、観測装置、入射 X 線、反射 X 線の配置。

る⁴⁾。転位コントラスト消失の回折条件より推察されるように、バーガース・ベクトルは $g = \bar{1}\bar{1}08$ に垂直な方向を向いているので、 $b = 1/3 [\bar{1}\bar{1}20]$ か、あるいは $b = 1/3 [11\bar{2}0]$ である。

図 3 の点 A と点 D に近い点 C の部分はバーガース・ベクトルに転位線の向きがほぼ直交しており点 A と点 D 近傍では基底面刃状転位部であることがわかる。点 A では転位の向きは $[1\bar{1}00]$ 方向を向く基底面刃状転位部であり、点 D 近傍では転位の向きは $[\bar{1}100]$ 方向を向いている基底面刃状転位部である。バーガース・ベクトル $b = 1/3 [\bar{1}\bar{1}20]$ か、あるいは $b = 1/3 [11\bar{2}0]$ に依存して、これらの点 A、あるいは点 D 近傍での基底面刃状転位部のうちいずれかの刃状転位部が extra-half plane の先端部に Si 原子が並ぶ Si コア刃状転位部であり、もう一つの基底面刃状転位部が extra-half plane の先端部に C 原子が並ぶ C コアの刃状転位である。点 B 以外では、刃状転位成分が存在していて、(c) $g = \bar{1}\bar{1}08$ で $g \cdot b = 0$ の条件のみでは消失せず、残留コントラストを示す。点 D のコントラストは貫通刃状転位である。(a) $g = \bar{1}\bar{1}28$ や (b) $g = 11\bar{2}8$ では貫通刃状転位は強いコントラストを示しているが、(c) $g = \bar{1}\bar{1}08$ では $g \cdot (b \times \zeta) = 0$ を満足するため貫通刃状転位のコントラストが著しく低下している。点 A の刃状転位は転位線に沿って常に明るいコントラスト、点 C での刃状転位は転位線に沿って常に暗いコントラストを示している。

ところで、走査型電子顕微鏡の EBIC モードで基底面転位を観察すると、Si コアの転位と考えられる部分転位が電子

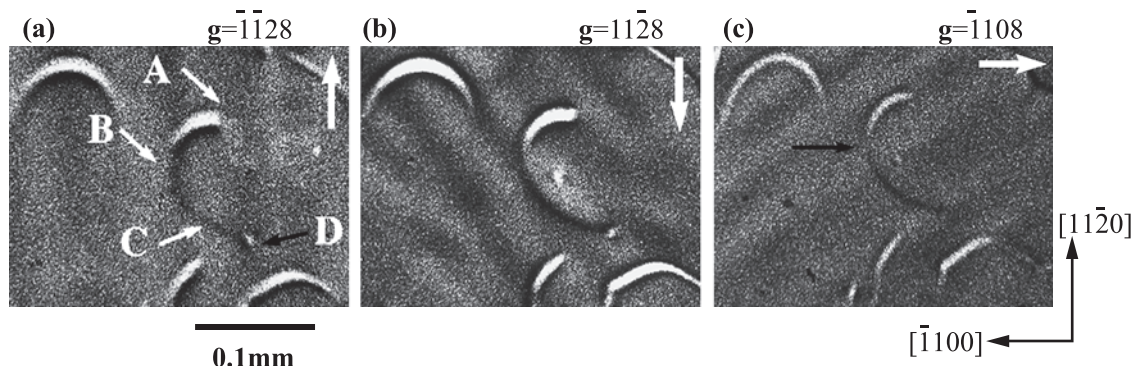


図 2 観察された基底面転位半ループ。白矢印は入射 X 線の方角。

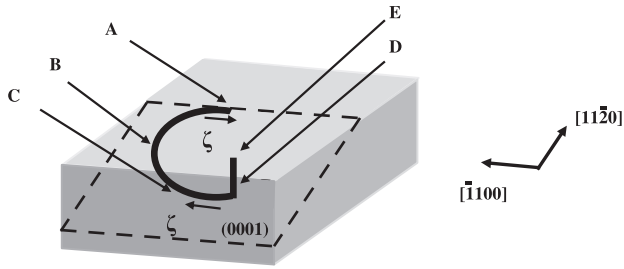


図3 観察された基底面転位半ループの模式図.

ホール対の消滅により放出されたエネルギーにより運動し、転位が拡張し積層欠陥幅が増加することは知られている（例えば文献5）。我々は、EBICモードの観察によりSiコアの部分転位と考えられる転位が動いた後に、本低角入射トポグラフで観察すると白いコントラストを持つ部分転位が運動したことを確認している。この観察より、白いコントラストを持つ転位をSiコアの転位であるとする。しかしながら希であるが、暗いコントラストの転位の動く形跡も検出している。このことより白い転位がSiコアの転位と断定できるかについては将来明確にすべき課題として残し、ここでは白いコントラストを持つ転位がSiコアの転位であるとして解析を進めることにする。図2で観察されている明るい転位はSiコア基底面刃状転位、暗いコントラストを持つ転位がCコア基底面刃状転位であると想定し、転位のバーガース・ベクトルは一応 $\mathbf{b} = 1/3 [\bar{1}\bar{1}20]$ であると同定する。

図2の観察結果より理解されるように、Bragg-caseの斜入射の条件では反射を変えても、暗い基底面刃状転位部はいつも暗いコントラストを示し、明るい基底面刃状転位部はいつでも明るいコントラストを示す。一方、基底面螺旋転位部のコントラストは \mathbf{g} ベクトルの方向に依存して変化する。 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ の時は、コントラストは消失する。それ以外の時には、転位線に沿った白黒の非対称なコントラストを示し、 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} > 0$ の場合と $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} < 0$ の場合では非対称コントラストは逆転する。以上のルールを頭におくと、任意の反射での6つの異なるバーガース・ベクトルの基底面転位ループのコントラストを導き出すことができる。図4は6つの異なるバーガース・ベクトルを持つ基底面転位ループのコントラストの模式図を示す。黒矢印はバーガース・ベクトルの方向を示す。白矢印は入射X線方向を示す。図2(b)、 $\mathbf{g} = \bar{1}\bar{1}28$ の図を $(11\bar{2}0)$ 面で反転操作することにより $\mathbf{g} = \bar{1}\bar{1}20$ 、 $\mathbf{b} = 1/3 [11\bar{2}0]$ の図を求めることができる。図4の上の段の2つの図を60度時計方向と反時計方向に回転することにより残りの4つバーガース・ベクトルの転位ループのコントラストを描くことができる。図4の場合、 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}$ の符号が変化しない反射を選んでいる。図4に見られるようにひと種類の \mathbf{g} ベクトルでの撮影で基底面転位ループの6つの異なるバーガース・ベクトルを一度に決定することが可能となる。

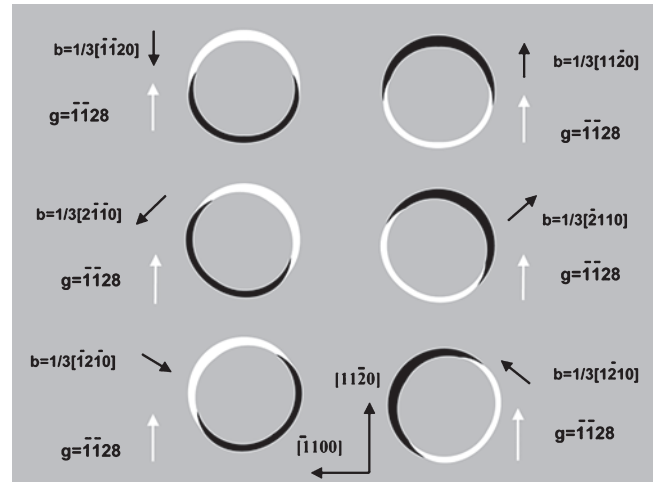


図4 $\mathbf{g} = \bar{1}\bar{1}28$ の回折条件での6つの異なるバーガース・ベクトルの基底面転位ループのコントラストの模式図。黒い矢印は各バーガース・ベクトルの向き。白い矢印は入射X線の向きで、 \mathbf{g} ベクトルの向きではないことに注意。

4. コントラストについての考察

転位のコントラストの起源について考察する。図5は完全結晶で $\lambda = 0.15 \text{ nm}$ で $\mathbf{g} = \bar{1}\bar{1}28$ の回折条件を満足している時のブロッホ波1, 2の分散面と各ブロッホ波の励起の状態を示している。図中の S_0^k は真空中の入射X線の波数ベクトルの起点の軌跡を示す。 N_1, N_2 は試料の表面に垂直な線を示す。我々の実験では通常、入射X線の発散角は $\Delta\omega = 6.65 \text{ arcsec}$ を利用している。この時、分散面の特定の場所が励起されるのではなく図のAB部分とCD部分と広い幅で励起されている。入射X線のブロッホ波1の波数ベクトルの方向は図中の分散面のCD部分より逆格子点Oへ伸びている。入射X線のブロッホ波2の波数ベクトルの方向は図中の分散面のAB部分より逆格子点Oへ伸びている。反射X線のブロッホ波1の波数ベクトルの方向は図中の分散面のCD部分より逆格子点 \mathbf{g} へ伸びている。反射X線のブロッホ波2の波数ベクトルの方向は図中の分散面のAB部分より逆格子点 \mathbf{g} へ伸びている。反射X線のブロッホ波2の励起振幅は点A近傍で最も大きくなり点Bでは弱くなっている。反射X線のブロッホ波1の励起振幅は点C近傍で最も大きくなり点Dでは弱くなっている。反射X線はブロッホ波の反射波成分の線形結合で示され、それぞれの波の励起振幅の比は完全結晶では一定で、場所による変化は無く、反射X線ビームの端部付近を除いて観察されるコントラストは一定である。

図6は $\mathbf{g} = \bar{1}\bar{1}28$ で観察された (a) $\mathbf{b} = 1/3 [11\bar{2}0]$ の基底面転位。 $[1\bar{1}00]$ 方向へ走っているAB部分は暗いコントラストを示す基底面刃状転位部と考えられ、 $[11\bar{2}0]$ 方向へ走っているCD部分は非対称コントラストを示し基底面螺旋転位部である。基底面螺旋転位は点Dの位置で、表面で終端している。基底面刃状転位部は点Aで結晶の深いところへ貫

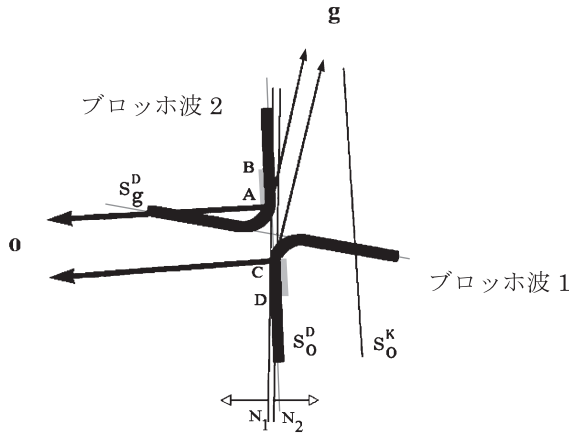


図5 完全結晶で $g = \bar{1}\bar{1}28$ の回折条件を満足している時の励起される各ブロッホ波の分散面とブロッホ波の励起の状態。 S_0^K は、大気中の入射 X 線の波数ベクトルの基点の軌跡。 N_1, N_2 は結晶表面に垂直な線。 N_1 より左側ではブロッホ波2が励起され、 N_2 より左側ではブロッホ波2が励起される。 S_0 は結晶中の入射 X 線の波数ベクトルの基点の軌跡。 S_g は結晶中の回折 X 線の波数ベクトルの基点の軌跡。

通刃状転位で繋がっていると推察される。(b) 同様に $b = 1/3$ $[11\bar{2}0]$ の基底面転位。 $[\bar{1}100]$ 方向へ走っている EF 部分は基底面刃状転位部だが明るいコントラストを示し、 $[11\bar{2}0]$ 方向へ走っている非対称コントラストを示す GH 部分は基底面螺旋転位部である。基底面螺旋転位は点 H で表面で終端している。(a), (b) 両方の転位は、基底面螺旋転位の非対称コントラストが同じであるので、同じパーガース・ベクトルであると想定している。結晶の深い方向から表面への方向を転位の向きと定義すると、(a), (b) では AB, EF 部で、転位の走っている向きが逆になっている。このような2種類の転位コントラストについて考察する。

コントラストに与える歪の効果を示すパラメータ f を次のように定義する⁶⁾。ここで Θ はブラッグ角、 x は g ベクトルの方向を示し、 z は x に垂直な方向で回折を起こす面に沿った方向と定義する。

$$f = \pi \left[\cot\Theta \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \tan\Theta \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] (g \cdot u) \quad (1)$$

上記の式の z による2階の偏微分項は回折を起こす格子面

の曲がりに関する項であり、 x による2階の偏微分は格子面間隔の変化に関する項である。 u は結晶格子の変位である。上記の式は、結晶の数ミクロンに及ぶ広い領域に渡って緩やかに歪みが変わる場合に利用できる式である。この緩やかに変化する歪みの効果は、透過型電子顕微鏡 (TEM) の転位の観察では、観察する像範囲では通常は考慮しない。この歪みの効果 f により、各ブロッホ波の発散点は移動する。図7 (a) は $f > 0$ の状態での各ブロッホ波の発散点の位置とその励起の状態を示し、図7 (b) では $f < 0$ の場合の発散点の位置の移動と励起の状態を示す。完全結晶では各ブロッホ波の発散点 A と C は図5に示す位置にある。 $f > 0$ の歪み場の場合、ブロッホ波の発散点 A と C は図7 (a) に示されるように分散面上を斜め右上へ移動し A', C' へやってくる。この時、入射波はブロッホ波2の成分が大きくなり、回折波はブロッホ波1の成分が大きくなる。 $f > 0$ の歪み場を通過すると各ブロッホ波の光線軌道に曲がりを生じ、ブロッホ波1は回折波方向へ、ブロッホ波2は入射波方向に曲がる。ブロッホ波1は吸収の効果が弱いので、図7 (a) の場合、回折波の強度は増加する。この時、図6 (a) の AB 部分の暗いコントラストが観察されるように回折波の強度が増加すると考えられる。トポグラフィ像の記録媒体として原子核乾板を用いており、X 線強度が強い場所で暗いコントラストを示すので、観察される転位のコントラストと定性的に一致する。

また、 $f < 0$ の歪みの場合、逆の現象が起こる。図7 (b) に示されるように、各ブロッホ波の発散点は分散面上を斜め左下方向へ移動し A'', C'' へやってくる。この場合、回折波はブロッホ波2の成分が強くなる。ブロッホ波2は次第に光線軌道に曲がりを生じながら回折波方向へ向かうようになる。ブロッホ波2は吸収の効果が強く働くため、回折波の強度は減少すると、定性的に推察される。この時、図6 (b) の EF 部分の明るいコントラストに見られるように回折波の強度が減少すると推察される。わずかな f の値の変化に依存して転位のコントラストが敏感に変化することの原因は、図7に示すように f のわずかな変化によりブロッホ波の励起の状態が敏感に変わる分散面の鋭角的な形状と、Bragg-case の分散面の配置によると考えられる。基底面螺旋転位の非対称コントラストや、反射ベクトルに依存してコントラストが

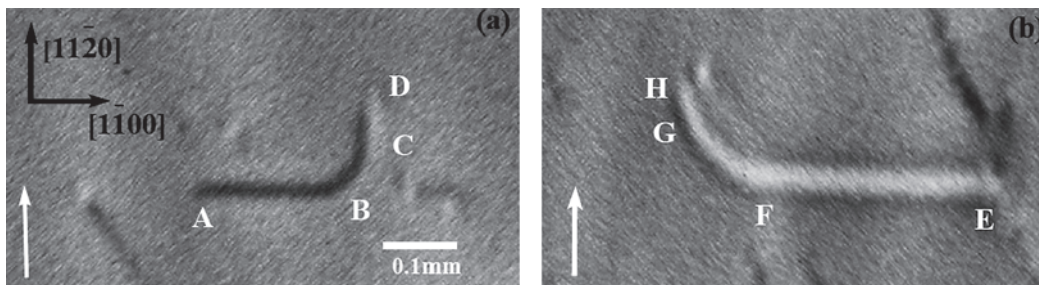


図6 $g = \bar{1}\bar{1}28$ で観察された、(a) $b = 1/3$ $[11\bar{2}0]$ の基底面転位。 $[\bar{1}100]$ 方向へ走っている AB 部分は暗いコントラストを示す基底面刃状転位部。(b) 同様に $b = 1/3$ $[11\bar{2}0]$ の基底面転位。 $[\bar{1}100]$ 方向へ走っている EF 部分は基底面刃状転位部で明るいコントラストを示す。

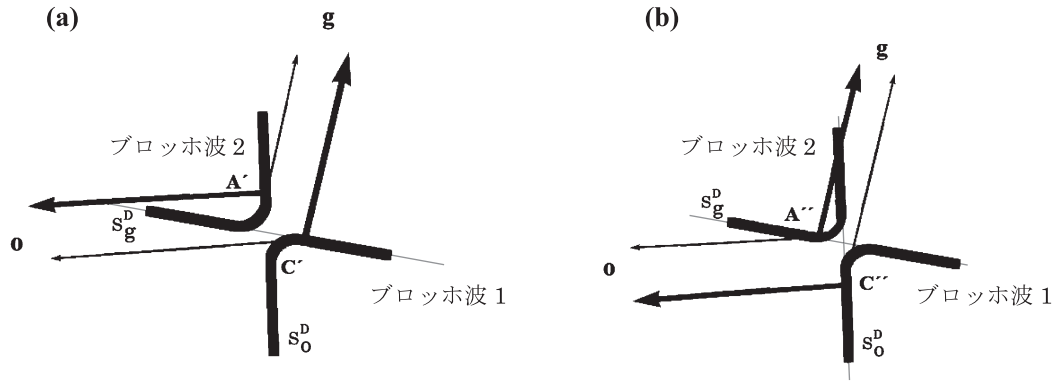


図7 (a) $f > 0$ の場合と、(b) $f < 0$ の場合の発散点の位置の移動と各ブロッホ波の励起の状態。

逆転する現象も、上記と同様な定性的な説明は可能であると
考えられる。

5. まとめ

本手法では、表面近傍の構造に敏感であり、ウエハー内部
に存在している高密度の格子欠陥のコントラストに邪魔され
ることなく、ウエハー表面上に成長したエピ膜や、エピ膜中
に作られているデバイスの内部構造を明確に観察することが
出来る。この長所はウエハー内部に多量の格子欠陥を持つ
SiC パワーデバイスの研究開発にふさわしい手法である。
TEM 法と比較すると、本手法では薄膜化作業の必要が無く、
観察作業が高効率なうえ、デバイスの内部構造すべて、ある
いはウエハー表面すべての場所での観察が可能であることが
長所としてあげられる。また上記で議論したように、回折条
件を変えることなく一つの反射による観察でバーガース・ベ
クトルを求めることも可能である。TEM 法と比較した場合、
本手法の最大の短所は空間分解能が低いことである。平行性
のより良い放射光を用いたウエハー法では格子歪みによ
る像コントラストの分解能が向上し、鮮明な画像として観
察されることを我々は確認している。分解能を必要とする観

察ではウエハー法による観察なども行っているが、
我々の装置では、像の記録に用いている原子核乾板の粒子の
サイズにより最終的に分解能の限界が定められている。将来、
ハードウェアの開発が進めば、像分解能もさらに向上される
ものと予測される。

本研究は NEDO による研究プロジェクト、「パワーエレクト
ロニクスインバーターシステムの基盤技術開発」の一環と
して行われた。

文 献

- 1) 石井 格：工業技術，38 巻 8 号，18 (1997)
- 2) Ohno, T., Yamaguchi, H., Kuroda, S., Kojima, K., Suzuki, T. and Arai, K.: *J. Cryst. Growth*, 260, 209–216 (2004)
- 3) Ohno, T., Yamaguchi, H., Kuroda, S., Kojima, K., Suzuki, T. and Arai, K.: *J. Cryst. Growth*, 271, 1–7 (2004)
- 4) Tanner, B.K.: *X-ray Diffraction Topography*, Pergamon press, Oxford, 100–101 (1976)
- 5) Chen, B., Sekiguchi, T., Chen, J., Oyanagi, T., Matsuhata, H., Kinoshita, A., Okumura, H. and Fabbri, F.: *Appl. Phys. Lett.*, 93, 33514–33517 (2008)
- 6) 加藤範夫：回折と散乱，朝倉書店，東京，259–265 (1978)