

シンクロトロン光平面波による無転位 Si 単結晶内の微小欠陥観察と 動力学的回折理論を用いたシミュレーション

九州工業大学・大学院工学研究院
富山大学・理学部
九州シンクロトロン光研究センター
九州大学シンクロトロン光利用研究センター

鈴木芳文
飯田 敏
川戸清爾
近浦吉則

Topographic observation of minute defects in a dislocation-free Si single crystal wafer by a synchrotron radiation plane-wave, and computer simulation with dynamical diffraction theory

Y. Suzuki^{a*}, S. Iida^b, S. Kawado^c, Y. Chikaura^d,

^aFac. of Eng., Kyushu Institute of Technology, Tobata-ku, Kitakyushushi 804-8550,

^bFac. of Sci., Toyama University, Toyama-shi, Toyama 930-8555

^cKyushu Synchrotron Light Research Center, Tosu-Shi, Saga, 841-0005

^dResearch Center for Synchrotron Light Applications, Kyushu University, Kasuga, Fukuoka 816-8580

*e-mail: ysuzuki@xe-lab.kyutech.ac.jp

We developed various kinds of X-ray scattering topography, and have realized imaging and crystal structure analysis of various materials. Evaluation by plane-wave X-rays topography is effective for a silicon wafer which includes a minute defect, at BL20XU (undulator light source beamline), and at BL20B2 (bending-magnet light source beamline) in SPring-8, and the experiments have been performed.

The experimental results of the plane-wave X-rays topography for the silicon single crystal in BL20XU is shown, and discussion on observation results is represented. We made a program including the Takagi-Taupin equation which is a basic equation of dynamical diffraction theory, made the simulation from which we obtain a numerical solution of Laue-transmission case by a single crystal silicon and talked on the spatial resolution.

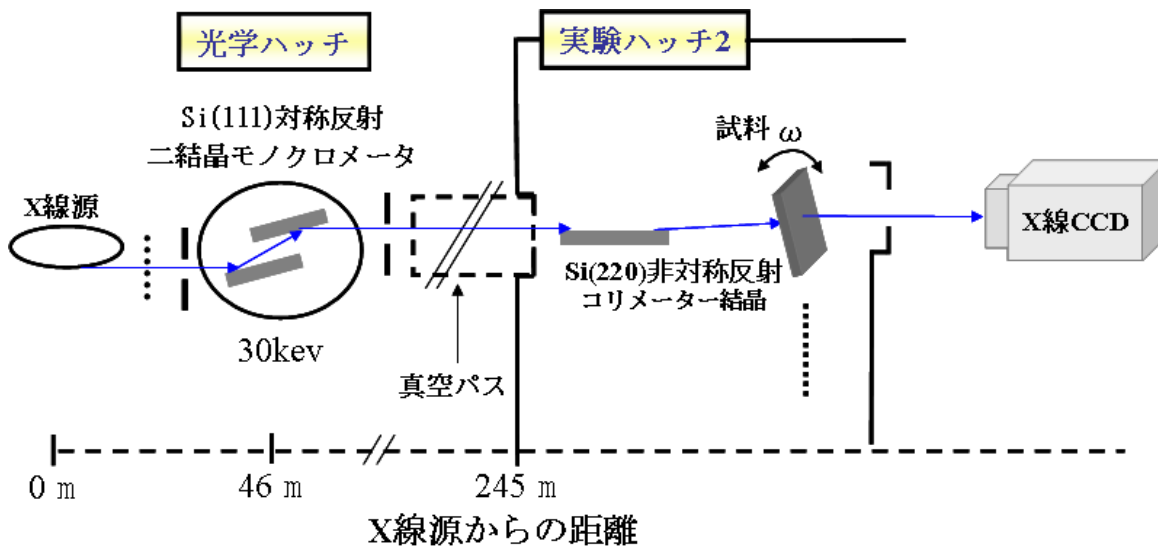


Fig. 1 Schematic illustration of the experimental arrangement for plane-wave x-ray diffraction topography at BL20XU, SPring-8. The double-crystal monochromator was in the optics hutch, and the collimator and sample crystals were set on precision goniometers installed in the second experimental station.

1. はじめに

私どもは、様々なX線散乱トポグラフィの開発を行い材料のイメージングや結晶構造解析を実現できた。その中で SPring-8 の偏向電磁石を光源に用いた BL20B2¹⁾ やアンジュレータ光源である BL20XU において微小欠陥を含むシリコンウェーハの評価に有効な平面波X線トポグラフィの評価・考察を行ってきた。そこで、ここでは BL20XU におけるシリコン単結晶の平面波X線トポグラフィの実験結果を示し、計算機シミュレーションを用い、観察結果の考察・評価を行う。

2. 方法

実験は BL20XU 実験ハッチ 2 で行った。光学ハッチの Si (111) 二結晶モノクロメーターで 30 keV X線を取り出した。実験ハッチ 2 で Si 220 非対称反射コリメーターを設置し、X線の平行度を高めるとともに上下方向の幅を拡大させた。その後、試料であるシリコンウェーハの (220) 面回折の平面波トポグラフィの X線入射角依存性(ω 軸依存性)を可視光変換型の X線 CCD カメラで測定した。(図 1 参照)

SPring-8 で行った実験条件から、シミュレーションを行うに必要な次のような定数を求めた。格子定数、面間隔、ブラッグ角、原子散乱因子、構造因子、電気感受率である。次にこれらの値を用いて、タカギ-タウパンの式をプログラム化させてある。また、C 言語には用いることのできない複素関数については、扱いやすくするために関数マクロを設定してある。プログラムは、タカギ-タウパンの式をアップルポーインの近似式²⁾を利用して作成したものを使用した。言語には C 言語を用いている。図 2 に計算プロセスを示す。

高木方程式^{3,4)}は、以下の式に示すように

$$\frac{\partial}{\partial S_0} D_0 = -i\pi K \chi_{\bar{h}} D_h(\mathbf{r})$$

$$\frac{\partial}{\partial S_h} D_h = -i\pi K \chi_h D_0(\mathbf{r}) + 2i\pi [K\beta_h - \frac{\partial}{\partial S_h} \{\mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})\}] D_h(\mathbf{r})$$

D_0 : 透過波の振幅, D_h : 回折波の振幅, χ : 電気感受率, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$: 原子の格子点からの変位, \mathbf{r} : 結晶の変位ベクトル, \mathbf{h} : 回折波のベクトル, S_h : 回折方向, S_0 : 透過方向, K : 波数, β_h : ブラッグ角からのずれを示すパラメータ 等で、表せる。

BL20XU における欠陥のない部分での回折強度曲線と、ひずみの中心で回折強度曲線を図 3 に示す。これは 5×5 pixels 内の回折強度曲線はひずみ中

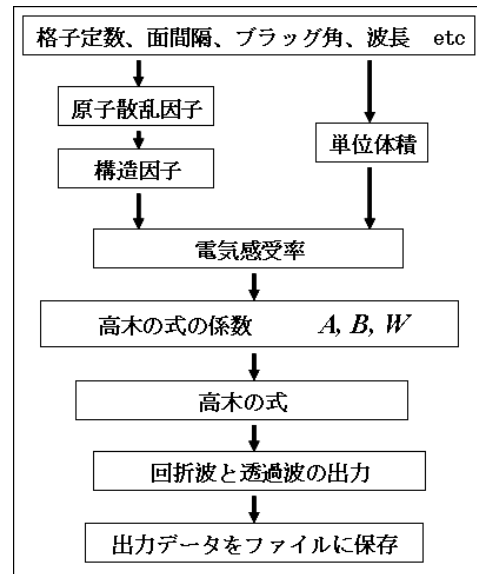
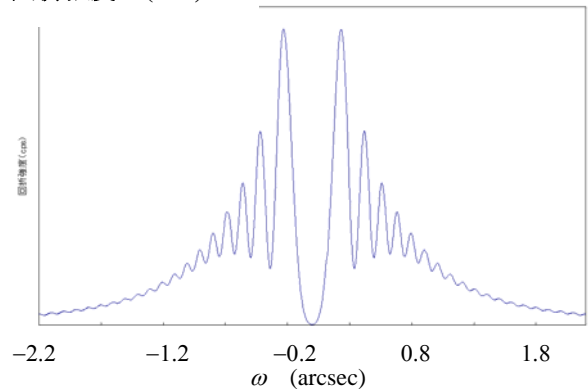
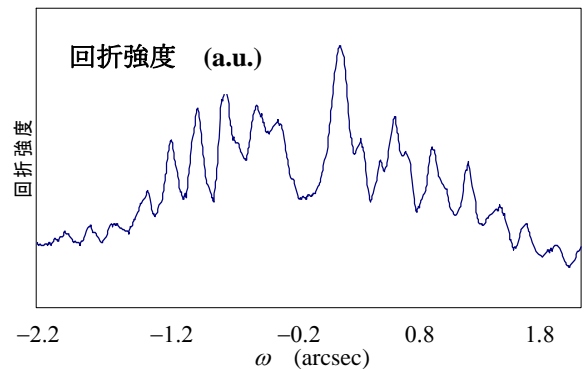


Fig. 2 Flow chart of Program.

回折強度 (a.u.)



(a)



(b)

Fig. 3 Rocking curves of the Si 220 reflection: measured in a symmetric Laue case.

(a) no strain. (b) with strain

心の範囲内では変わらなかった。これは 2.5 $\mu\text{m}/\text{pixel}$ と分解能が高いためだと考えられる。

この観察結果より欠陥の無い箇所での回折強度曲線は、動学的回折理論から予想される強度振幅を示しているが、欠陥がある箇所での回折強度曲線は、曲線の左右非対称性や、強度振幅の減少がみられた。

そこで歪の位置や大きさを調べるため、シミュレーション結果と観察結果であるロッキングカーブが一致するまで歪の大きさを変えて計算を行う。また、図 4 の実験結果 (赤い line) は、完全結晶の部位にもかかわらず振幅が落ちきっていないのは実験に使用した X 線が完全平面波でないということが原因であると考えている。このため、平行度を考慮するため、プログラムの改良 (角度広がり平面波の convolution することによって、) を行った。シミュレーションから算出した結果 (青い line)、X 線の角度広がり $4.3 \times 10^{-7} \text{ rad}$ で観察結果とよく一致することがわかった。また、平行度を高めるため

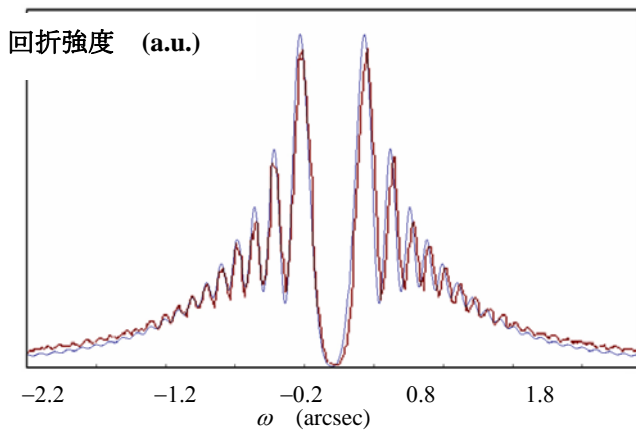


Fig.4 An experimental result (red) at no strained area .
The simulation of diffraction profiles (blue).

に使用した 200 m 離れた真空パスや、Si 220 非対称反射コリメーターから算出した角度広がり $4.4 \times 10^{-7} \text{ rad}$ となり、このシミュレーションは正確であると考えている。これらのパラメータもふまえてシミュレーションを行った。

3. 実験結果

図5 に歪ありの実験結果 (図3(b)) とシミュレーションが一致した条件のひずみの大きさ $C=7.0 \times 10^{-16} [\text{m}^3]$ でひずみの中心位置を試料表面近く (a)、中心 (b)、底面近く (c) と変えたシミュレーション結

果を示す。

ひずみの位置によるロッキングカーブの変化より試料表面近くにひずみの中心位置はないと考えられる。あえて場所を特定すると、中心部分と考えられる。また、欠陥の大きさ $C=7.0 \times 10^{-16} [\text{m}^3]$ という値から、欠陥の最小半径 R_0 を計算によって求

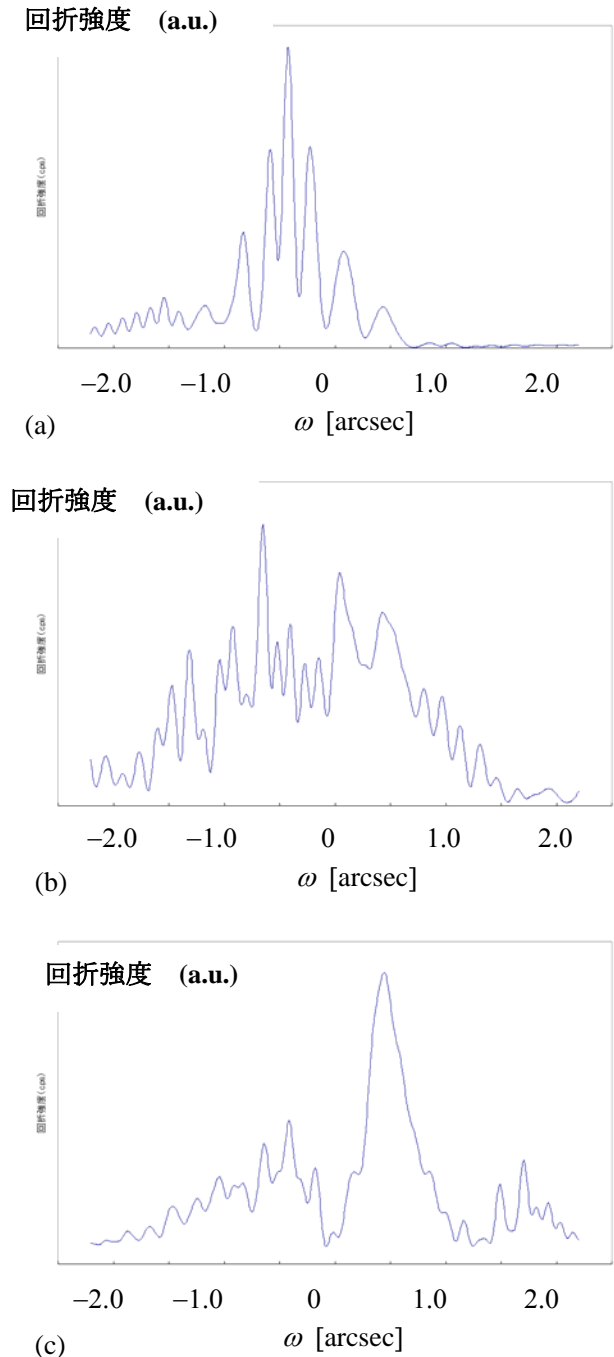
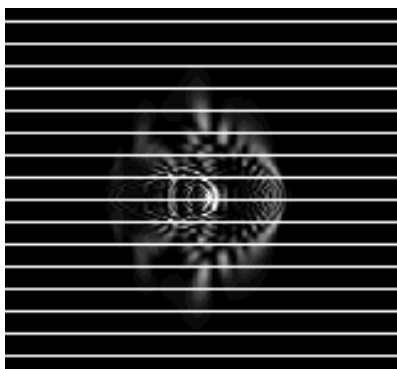


Fig. 5 The simulation of diffraction profiles including strain. Strain centers are set different positions. (a) near the surface. (b) the center. (c) near the base.

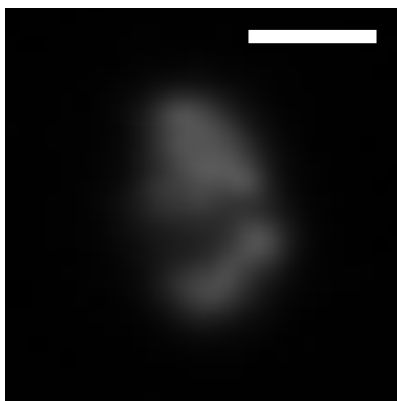
めると、 $R_0=12.8[\mu\text{m}]$ が求められた。以上の結果より、シリコンウェーハ中には半径が $12.8[\mu\text{m}]$ 程度の微小欠陥の歪場が含まれていることが、コンピュータシミュレーションにより確認された。また参考文献等によると、この欠陥はシリコンの低速育成であることから、転位クラスターであると推測される。

次に、実験では確認することのできない Si 内部の X 線の状態を調べるため、底面の像のシミュレーションを行った結果を図 6(a) に示す。計算した全ての値を強度によって色分けすることにより実現した。

強度は不連続で、強い部分と弱い部分が交互におとずれていることが確認できる。今回実験に使用した試料厚さのパラメータでシミュレーションを行ったのだが、底面部では弱い強度領域になっていることが確認できるため、今後の実験においては強度が強くなるような試料厚さを設定することにより、さらに強度差のある実験結果が得られると期待できる。



(a) 100 μm



(b)

Fig. 6

(a) Computer simulation image.

(b) Topographic images of grown-in microdefects in a slowly grown CZ-Si wafer.

次に、実際に撮影された平面波トポグラフと、シミュレーションによる出射面からの強度から描いた底面図を比較する。図 6 にシミュレーション結果 (a) と観察結果 (b) を示す。

実験結果とシミュレーションを比較すると、シミュレーションの方が鮮明な画像になっている。これは、平行度を考慮してもあまり変化しないため、分解能の違いであると考えられる。実験で使用した CCD カメラも高分解能を有しているが、シミュレーションはビーム一本一本を強度データとしているためである。しかし、このような鮮明な画像は今まで知られていなかったため、得られたこと自体が有益なことであるのである。

4 まとめ

- ① シミュレーションにおいて、平行度を考慮することができより実際の実験結果に近い状態でのシミュレーションを行うことができた。今回用いた BL20XU でのビーム発散角は 4.3×10^{-7} rad と見積もれる。
- ② 実験結果とシミュレーション結果を比較することにより、ひずみの位置や、ひずみの大きさをひずみの大きさ $C=7.0 \times 10^{-16}[\text{m}^3]$ でひずみの中心位置を試料表面近くではなく、中心部分と見積もることができた。
- ③ この結果から、動力学的回折理論を用いた実験の評価として、シミュレーションを用いることは定量的な数値をも議論でき、大変有益であると結論できる。

参考文献

- 1) S. Iida, S. Kawado, M. Maehama, K. Kajiwara, S. Kimura, J. Matsui, Y. Suzuki and Y. Chikaura: Plane Wave Synchrotron X-ray Topography Observation of Grown-in Microdefects in Slowly Pulled CZ-Silicon Crystals, J. Phys. D: Appl.Phys., Vol. **38**, No. 5A, pp. A23-A27 (2005).
- 2) Y. Epelboin, Acta Cryst. **A33**, 758-767(1977).
- 3) S. Takakgi: Acta Cryst. Vol. **15** (1962) 1311.
- 4) B. Klar and F. Rustichelli : Dynamical Neutron Diffraction by Ideally Curved Crystals (1973).