

(様式第 5 号)

酸化ガリウムの X 線トポグラフィによる結晶欠陥の解析 Analysis of Defects in Gallium Oxide by X-ray Topography

山口博隆¹、渡邊幸志²

Hiroataka Yamaguchi¹ and Hideyuki Watanabe²

¹産業技術総合研究所 先進パワーエレクトロニクス研究センター

²産業技術総合研究所 電子光技術研究部門

¹*Advanced Power Electronics Research Center, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST),*

²*Electronics and Photonics Research Institute, AIST*

- ※ 1 先端創生利用（長期タイプ）課題は、実施課題名の末尾に期を表す（Ⅰ）、（Ⅱ）、（Ⅲ）を追記してください。
- ※ 2 利用情報の公開が必要な課題は、本利用報告書とは別に利用年度終了後 2 年以内に研究成果公開（論文（査読付）の発表又は研究センターの研究成果公報で公表）が必要です（トライアル利用を除く）。
- ※ 3 実験に参加された機関を全てご記載ください。
- ※ 4 共著者には実験参加者をご記載ください（各実験参加機関より 1 人以上）。

1. 概要（注：結論を含めて下さい）

β 型酸化ガリウム (β -Ga₂O₃) の結晶欠陥を X 線トポグラフィ法によって観察した。とくに、転位のバーガスベクトルを決定し、われわれが提案している酸素副格子が構成する最密充填構造によるすべり面モデルを検証した。その結果、同モデルによるすべり面のほか、(001)面がすべり面の可能性があること、および、バーガスベクトル同定に用いられる $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ での消失条件が適用できない可能性があることがわかった。

Defects in β -Ga₂O₃ crystals have been investigated by X-ray topography. The experiments were focused on the identification of the Burgers vector of dislocations to verify our slip-plane model previously proposed based on the close-packed oxygen sub-cell in the crystal. We found that (001) plane is possible for a slip plane. In addition, we present an example of dislocations that do not satisfy the invisible condition, $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$, which is probably due to the monoclinic crystal symmetry.

2. 背景と目的

β -Ga₂O₃ はエネルギーバンドギャップ幅が 4.3eV と、ダイヤモンドに次いで大きく、次世代のパワーエレクトロニクス素子材料として期待されている[1]。しかし、転位等の欠陥の形態はよくわかっていない。転位や積層欠陥などの結晶欠陥は半導体素子において重要な問題であり、その解明が急がれる。転位の形態や性質は、古くはシリコンをはじめ、最近の SiC などの結晶について詳細に研究され、転位論として体系化されている。しかし、 β -Ga₂O₃ はこれまでの半導体素子研究の対象物質にない単斜晶系という、対称性の低い複雑な結晶構造をもつ物質であることから、転位の基礎となるすべり面の解明から始めなくてはならない。

私たちは、O 副格子が構成する最密充填構造[2]を基礎にすべり面を提案するとともに、X 線トポグラフ法によりこのモデルの検証を行ってきた[3]。これまで、一部の転位についてはこのモデルで理解されることがわかったほか、 $(\bar{2}01)$ 面には積層欠陥が見出された[4]。しかし、転位の同定は一部に限られており、十分に検証されているとは言えない。本課題では、検証をさらに進めるために、X 線トポグラフ法による評価実験を行った。

3. 実験内容 (試料、実験方法、解析方法の説明)

試料は、ノベルクリスタルテクノロジー社製の edge-defined film-fed (EFG) 法による結晶ウェーハであり、表面方位は $(\bar{2}01)$ あるいは (001) である。すべり面モデルから期待されるバーガースベクトルと直交するブラッグ面を選択し、 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ による転位コントラストの消失条件からバーガースベクトルの同定を試みた。実験はBL15の多軸回折計を用い、反射配置 (ブラッグケース) の回折条件によるX線トポグラフを原子核乾板 (ILFORD L4) に記録した。低角入射の非対称反射により高分解能なトポグラフを得るために、波長を 0.12 - 0.17 nm の範囲で選択し、最適な配置に設定した (図 1)。

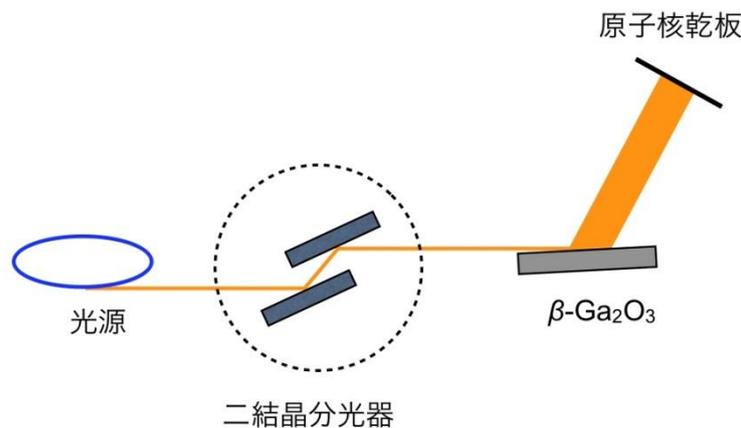


図 1 実験のレイアウト

4. 実験結果と考察

O 副格子に基づいたすべり面モデルは表 1 のとおりである[3]。表中の面上ですべり転位が起きたと仮定すると、各面上の並進ベクトルがバーガースベクトル \mathbf{b} の候補となる。そこで、その中から、 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ の条件でコントラストが消失する転位を探索した。 $(\bar{2}01)$ ウェーハでは、 $\mathbf{b} = \langle 010 \rangle$ と認められる転位が複数検出された。

一方、 (001) ウェーハにおいて、 (001) 面内に伸びる転位が観察された。これまで、表 1 のすべり面に基づいて転位解析を進めてきたが、そのほかに (001) 面もすべり面として可能性が高いことが示唆される。この場合、面内の並進ベクトルで最も短い $\mathbf{b} = \langle 010 \rangle$ が考えられ、実際に $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ の消失条件を満たしている転位が確認された。

図 2 に示した X 線トポグラフは (001) ウェーハの例であるが、623反射で、 A_1, A_2 などの記号で示した部分を含む一続きの転位が観察される。これらの転位を $\bar{4}04$ 反射で見ると、上記記号で例示した部分が消失している。 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ から、消失した部分は $\mathbf{b} = \langle 010 \rangle$ をもたらせん転位と同定される。一方、方向の変わる節点

面	並進ベクトル	長さ (nm)
$(\bar{2}01)$	$\langle 010 \rangle$	0.304
	$\frac{1}{2}\langle 112 \rangle$	0.752
	$\frac{1}{2}\langle 1\bar{1}2 \rangle$	0.752
(101)	$\langle 010 \rangle$	0.304
	$\langle 10\bar{1} \rangle$	1.472
$(\bar{3}\bar{1}0)$	$\langle 001 \rangle$	0.580
	$\frac{1}{2}\langle 1\bar{3}0 \rangle$	0.763
	$\frac{1}{2}\langle 1\bar{3}2 \rangle$	0.866
$(\bar{3}10)$	$\langle 001 \rangle$	0.580
	$\frac{1}{2}\langle 130 \rangle$	0.763
	$\frac{1}{2}\langle 132 \rangle$	0.866

表 1 O 副格子の最密充填面と各面内の並進ベクトルと長さ [3]。

で別の転位が交差する様子などは観察されないため、消失していない部分は消失した部分と同一のバーガースペクトルを持たなければならない。 $g \cdot b = 0$ であるにもかかわらず消失しないとすれば、原因として刃状転位成分による残留コントラストという可能性はある。しかし、他のブラッグ面のX線トポグラフと比較してコントラストが弱くなっていると認めることはできなかった。したがって、消失していない部分には $g \cdot b = 0$ によるバーガースペクトルの判定条件が単純に適用できないようである。これは、 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ の結晶構造が単斜晶系であることが一因と考えられ、転位解析にもこれを考慮する必要があると考えられる。

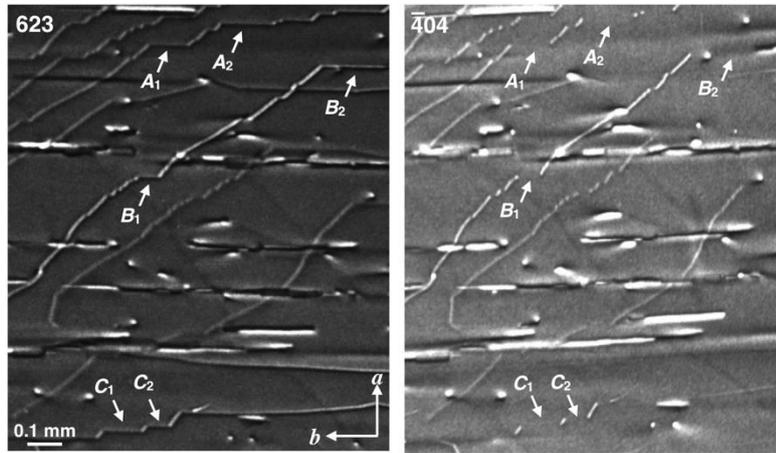


図2 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ (001) ウェーハのX線トポグラフ。623反射（左）および $\bar{4}04$ 反射（右）

5. 今後の課題

我々は $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ の O 副格子の最密充填面を出発点に、転位構造の基礎となるすべり系を考察してきた（表1）。しかし、X線トポグラフ法により、(001)面など、別の可能性も考えられる。また、X線トポグラフ法による転位のバーガースペクトルの同定には $g \cdot b$ 解析が有力な手段であるが、単斜晶系である $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ に対して、適用限界がある可能性を示した。今後はこのような知見を踏まえて、転位解析をする必要があると考えている。

6. 参考文献

- [1] Higashiwaki et al., Appl. Phys. Lett. **100**, 013504 (2012).
- [2] Geller, J. Chem. Phys. **33**, 676 (1960).
- [3] Yamaguchi et al., Superlattice Microstruc., **99**, 99 (2016).
- [4] Yamaguchi and Kuramata, J. Appl. Cryst. **51**, 1372 (2018).

7. 論文発表・特許（注：本課題に関連するこれまでの代表的な成果）

6. 参考文献の[3]、[4]

8. キーワード（注：試料及び実験方法を特定する用語を2～3）

$\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 、X線トポグラフ、転位

9. 研究成果公開について（注：※2に記載した研究成果の公開について①と②のうち該当しない方を消してください。また、論文（査読付）発表と研究センターへの報告、または研究成果公報への原稿提出時期を記入してください（2018年度実施課題は2020年度末が期限となります）。

長期タイプ課題は、ご利用の最終期の利用報告書にご記入ください。

① 論文（査読付）発表の報告

（報告時期：2019年 8月）