



差排密度/類型無所遁形

# TEM分析揪出GaN單晶缺陷

鮑忠興

**現** 在最受市場關注的第三類半導體，以氮化鎵(GaN)和碳化矽(SiC)為主，這兩者亦是高頻通訊元件和功率半導體元件的兩大材料。過去受限於部分材料取得不易且昂貴等因素，主要應用領域僅局限於國防、航太等，近年因半導體技術進展，GaN/SiC成本下降，而逐漸普及化應用到工業、汽車與消費性電子產業。

相較於其他的半導體材料，氮化鎵因有著耐高壓高溫、低電阻、極佳的導電和導熱性，體積小、能耗也小，在全球淨零碳排的趨勢推升下，市場研究公司Yole預測氮化鎵的市值將從2022年的1.84億美元，成長到2028年20.4億美元。但氮化鎵的一大缺點就是，單晶內的差排晶體缺陷密度遠高於其他半導體單晶，而後續元件發生漏電流的機率是否提高而導致功能異常，取決於氮化鎵單晶內的差排密度和類型。

目前穿透式電子顯微鏡(TEM)中的雙束繞射成像，是目前唯一可以辨別差排類型的微奈米材料分析技術。本文將簡單介紹如何分析氮化鎵單晶內的差排類型。進一步討論氮化鎵的差排種類分析之前，將先介紹差排的基礎概念和TEM分析差排型晶體缺陷的技術，助益讀者瞭解如何用

TEM分析氮化鎵晶體內的差排。

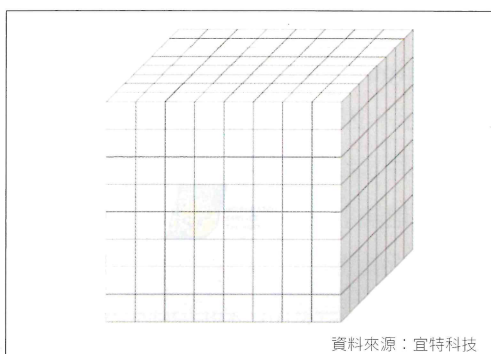
## 差排的基礎概念

在材料科學與工程上，固態無機材料分為二大類型，晶體(Crystal)和非晶質(Amorphous)。兩者的主要區別是原子的排列方式。非晶質固體中的原子排列沒有規則性，或者說只有短程(小於2奈米)的規則性。典型的材料為日常生活中隨處可見的玻璃，所以非晶質也常被稱為玻璃相(Glass Phase)。晶體固體中的原子排列則在三度空間中具有長程的規則性排列，日常生活中使用的固態無機材料，如金、銀、銅、鐵、鋁等都是晶體固體。

晶體固體材料又可分為多晶固體材料和單晶固體材料，前述的金、銀、銅、鐵、鋁都是多晶固體材料，而矽晶圓則是最具代表性的單晶固體材料。單晶固體材料是半導體工業的基礎，從第一類半導體至第三類半導體元件<sup>[1]</sup>都必須使用單晶基板製造半導體元件。

第一類半導體材料為矽和鍺，由於晶圓提煉技術成熟，單晶晶片中的缺陷密度非常低，通常只有零度空間型的空缺(Vacancy)缺陷，一度空間型的差排

(Dislocation)缺陷濃度近乎零。第二類半導體材料砷化鎵(GaAs)等的晶圓品質和矽晶圓品質相同，差排缺陷濃度也近乎零。到了第三類寬能隙半導體材料，其中之一的氮化鎵，因為晶圓成長技術困難，改用



資料來源：宜特科技

圖1 完整晶體示意圖，晶格(或原子)排列整齊

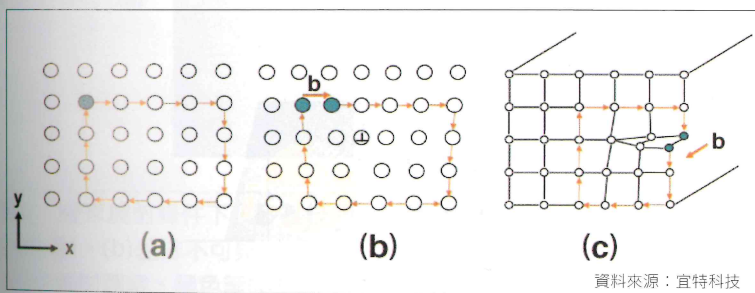
磊晶成長的方式製造氮化鎵半導體單晶。

目前生長氮化鎵磊晶層的單晶基板以藍寶石(Sapphire)基板為大宗，兩者之間的磊晶關係為 $(-1\ 0\ 1\ 0)_{\text{GaN}} // (1\ -2\ 1\ 0)_{\text{sap}}$ ， $(1\ -2\ 1\ 0)_{\text{GaN}} // (1\ 0\ -1\ 0)_{\text{sap}}$ 。藍寶石的 $(1\ 0\ -1\ 0)$ 和 $(1\ -2\ 1\ 0)$ 的晶面間距分別為0.1374 nm和0.2379nm，而氮化鎵的 $(1\ -2\ 1\ 0)$ 和 $(-1\ 0\ 1\ 0)$ 的晶面間距分別為0.1593nm和0.2759nm，因透過異質材料基板生成結晶，氮化鎵磊晶層和藍寶石基板之間有接近16%的晶格失配(Lattice Mismatch)，為了鬆緩如此大的應變產生的應力，氮化鎵磊晶層和藍寶石基板的介面產生大量的差排缺陷，並延伸至整個氮化鎵磊晶層。氮化鎵磊晶層內的差排密度和差排種類亦成為一重要的材料科學與工程研究主題。

### 差排種類與柏格向量

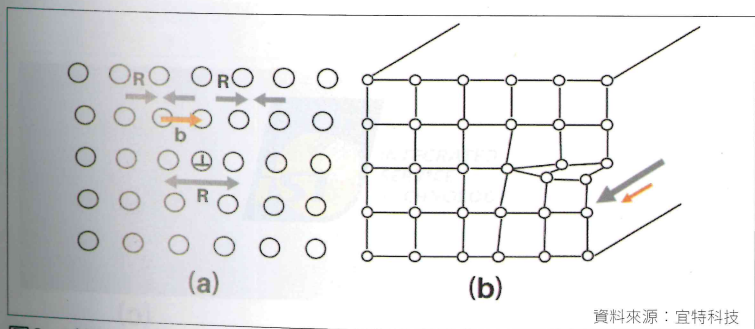
圖1是完整無缺陷的晶體示意圖，晶體中所有的晶格(或原子)整齊排列，沒有錯位的晶格(或原子)。在此完整晶體的任一截面，以任一原子為起點，先向右前進m個原子位移，然後向下前進n個原子位移，再向左前進m個原子位移，最後向上前進n個原子位移，會回到原來的原子位置。上述路徑會形成一個封閉的迴路(Loop)，如圖2(a)所示。

如果前述的迴路中含有一排和迴路平面垂直的錯位原子時，則路徑的終點和起點不同，如圖2(b)所示，必須再加上一個原子位移才能回到起點。此種錯位的原子稱為刃狀差排(Edge Dislocation)，因為這



資料來源：宜特科技

圖2 橫截面差排模型示意圖。(a)完整晶格，封閉迴路；(b)刃狀差排，開放迴路；(c)螺旋差排，開放迴路。b為柏格向量



資料來源：宜特科技

圖3 差排模型和應力場示意圖。(a)刃狀差排，應力場和柏格向量平行，和差排線垂直；(b)螺旋差排，應力場和柏格向量平行，和差排線亦為平行

多出一排原子，就像一薄片刀刃鑲嵌在晶格中，而連接迴路終點和起點的向量定義為柏格向量(Burger's vector)。刃狀差排的差排線(Dislocation Line)和柏格向量垂直。圖2(c)中的差排線是晶體中已位移區域和未位移區域的分界線，和連接迴路終點和起點的柏格向量平行，此種差排稱為螺旋差排(Screw Dislocation)，因為沿迴路走一圈，前進一晶格，好像轉動螺絲一般。

刃狀差排中，多出來的一排原子對鄰近的原子會產生推擠，原子間形成壓應力(Compressive)的應力場。而在此排原子正下方的鄰近原子，因為原子間距被擴大，所以原子彼此產生拉應力(Tensile)，以期回到原來的位置。這兩種應力場都和柏格向量大致平行，但是和差排線垂直，如圖3(a)所示。而在螺旋差排中，造成晶格位移的應力場和柏格向量平行，同時也與差排線平行，如圖3(b)所示。

圖3中的R代表應力方向。這些應力場使差排鄰近的晶格產生局部扭曲，改變晶格面和入射電子束的夾角(圖4)，繞射條件也因此隨著改變，使其TEM影像產生明暗變化，因此在TEM影像中看得到差排線的存在。這種因繞射條件改變而產生影像明暗度變化的機構稱為繞射對比。在TEM觀察中，傾轉試片會使差排鄰近變形的晶格面，和附近未變形的晶格面的繞射條件同時改變。在某些角度下，兩者的繞射條件差異不大，此時差排和鄰近基材的明暗度相同，而無法區別，在影像上相當於消失不見(Invisible)，這是TEM分析

差排的重要繞射條件。

## 雙束條件/差排的不見性

晶體的TEM電子繞射條件有三大主要類型，包含正極軸條件(Exact Zone Condition)、雙束條件(Two Beam Condition)和運動學條件(Kinematic Condition)，三者的典型選區繞射圖案如圖5所示。因為穿透電子束恆存在，雙束繞射條件意指繞射圖案中只剩下一個繞射點，其他繞射點都消失。此繞射條件主要用來分析晶體缺陷，因為此時TEM影像的操作向量(Operating Vector)，或稱g向量

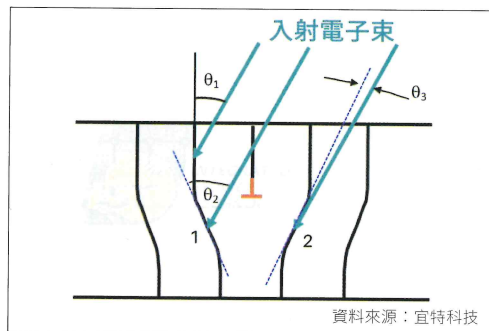


圖4 差排附近變形的晶格面與入射電子束夾角變化示意圖。θ<sub>1</sub>是未變形的晶格面與入射電子束的夾角，θ<sub>2</sub>和θ<sub>3</sub>則是變形的晶格面與入射電子束的夾角

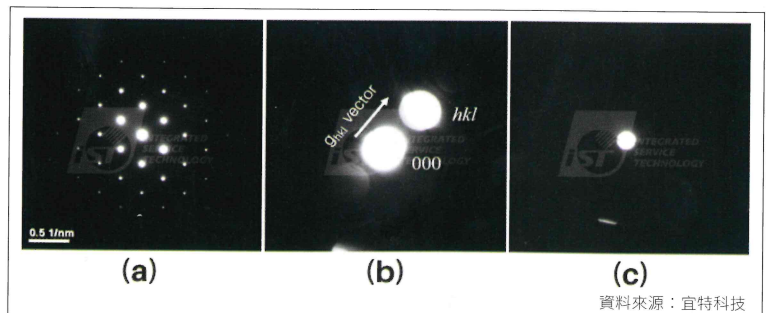


圖5 三種典型的選區繞射圖案。(a)正極軸條件，(b)雙束條件，(c)運動學條件

(g Vector)只剩下唯一，大幅簡化TEM影像明暗變化的操作機構。

當g向量和差排的應力場垂直時，g向量和差排引起的晶格位移R的內積為零。此時差排的明暗度和附近未變形的基材晶格相同，如同忍者的隱形手法一般，差排在TEM明場影像中消失不見。如圖6所示，在圖6(a)左上角白色箭頭指向的差排，在

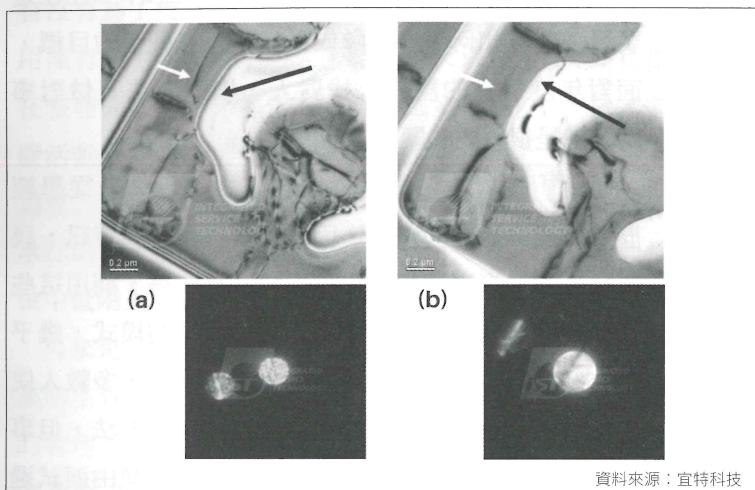


圖6 雙束繞射條件下，矽基板的TEM明場影像。(a)差排可見(白色箭頭指處)，(b)差排不可見(白色箭頭指處)。TEM明場影像下方是對應的CBED繞射圖案，黑色箭頭是伯格向量

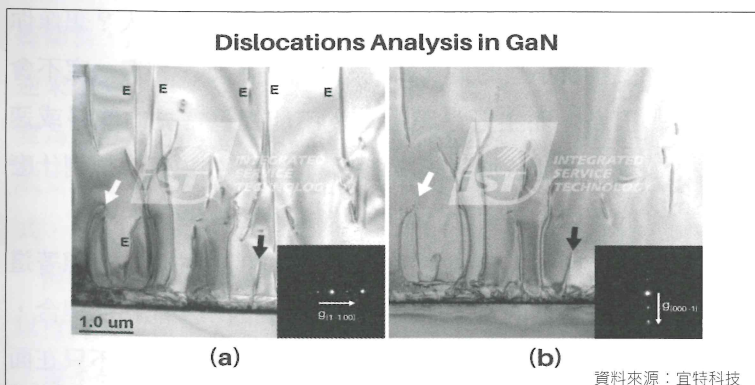


圖7 雙束繞射條件下GaN/Sapphire的TEM明場影像。(a)g向量為[1 -100]，(b) g向量為[000 -1]。TEM明場影像右下角鑲嵌入對應的選區繞射圖案(SADP)

圖6(b)中消失不見。

## 藍寶石基板上氮化鎵磊晶層內的差排分析

圖7是一組典型的雙束繞射條件下的GaN/Sapphire TEM明場影像。圖7(a)的g向量是[1 -100]，而圖7(b)的g向量是[000 -1]，兩個g向量互相垂直。兩個圖像中各有一對黑白的箭頭，用來標示兩個圖像的相關對應位置。比較圖7(a)和圖7(b)，可以明顯看出在圖7(a)中標示「E」的差排在圖7(b)中都消失不見，這些消失不見的差排線平行g向量[0001]，而其應力場則垂直[0001]。根據圖3中差排線和應力場的關係，可以推論這些差排是刃狀差排。

## 氮化鎵差排品質攸關元件功能

隨著氮化鎵的應用日益多元，全面掌控氮化鎵的差排品質，對後續元件功能影響至為關鍵。目前，雖然市面上亦有其他可大量掃描差排密度的儀器，但要進一步深層分析氮化鎵的差排密度和類型，TEM雙束繞射成像是目前唯一可以辨別差排類型的材料分析工具。本文簡單地介紹此分析技術，要進行足量的差排分析以達到統計學上的要求，並歸納出差排類型和密度對元件品質的因果關係，仍需持續累積大量TEM影像拍攝和分析工作。這項工作雖然耗時，但是對於深入了解氮化鎵單晶的性質和影響因素，仍是非常重要的前瞻研究。

(參考資料詳見網站版文章：<https://pse.is/5me9dy>)

(本文作者為宜特科技材料分析專家)