

X 射线形貌方法在 4H-SiC 晶圆缺陷表征中的应用*

莫秋祺¹⁾²⁾³⁾ 赵昌哲¹⁾³⁾ 郑理^{1)†} 李中亮^{3)‡}

1) (中国科学院上海微系统与信息技术研究所, 集成电路材料国家重点实验室, 上海 200050)

2) (上海科技大学物质科学与技术学院, 上海 100084)

3) (中国科学院上海高等研究院, 上海光源, 上海 201204)

(2026 年 1 月 4 日收到; 2026 年 1 月 14 日收到修改稿)

晶体缺陷作为制约半导体器件电学性能、成品率及可靠性的关键物理因素, 其对材料宏观物性的限制已成为根本性科学问题. X 射线形貌术是研究近完美晶体中远程应变场的关键技术, 其理论依据是 X 射线在周期性畸变晶格中的动力学衍射理论. 本研究以宽禁带半导体的典型代表——碳化硅 (SiC) 单晶为模型系统, 运用 X 射线形貌学方法对其中存在的螺旋位错、刃型位错及基平面位错进行系统的物理表征. 重点探讨了基于消衬准则定量判定位错柏氏矢量的方法学, 并分析了不同衍射几何条件下的衬度特征. 本文揭示了 X 射线形貌技术作为定量探究晶体缺陷物理的科学方法所具有的内在价值.

关键词: X 射线形貌, 晶体缺陷, 碳化硅**DOI:** 10.7498/aps.75.20260007**CSTR:** 32037.14.aps.75.20260007

1 引言

晶体缺陷在物理学上可被定义为晶体周期性势场的破缺^[1,2], 其被认为是决定材料电学、光学、热学及力学性质的关键因素, 尤其在半导体器件中扮演着非辐射复合中心与漏电通道的角色^[3]. 晶格缺陷的存在必然在其周围晶格中引入一个远程的弹性应变场^[4,5]. 对该应变场的理解与表征, 构成了理解缺陷物理行为的基础. 碳化硅 (SiC) 因其晶体生长过程常伴随类型丰富的位错结构的形成, 故可被视为一个研究六方晶系中位错物理及相关动力学衍射现象的理想模型^[6,7]. 同时 SiC 凭借其高击穿电场、高热导率、高电子饱和漂移速率和优异的化学稳定性, 在高温、高压、高频以及抗辐射等极

端条件的电力电子器件领域展现出不可替代的优势, 研究其位错物理对产业应用具有重要作用^[8,9].

晶体缺陷的常规表征方法如透射电子显微镜尽管能够提供原子尺度的空间分辨率, 然其破坏性的样品制备流程以及极度受限的观测视场, 使其在获取宏观统计信息及进行无损分析方面存在固有局限, 尤其限制了其在直径普遍为百毫米级的各种半导体晶圆的应用^[10]. 化学腐蚀法 (如熔融 KOH) 虽然可以揭示位错在表面的“开口” (蚀坑), 但同样是破坏性的, 且难以区分不同类型的位错, 也无法提供缺陷在体内的三维信息^[11,12]. 光致发光法技术虽然可以无损地评估应力和缺陷, 但探测深度有限, 无法有效区分非辐射中心缺陷^[13,14]. X 射线作为探测晶体结构的经典物理探针^[15-17], 其与晶格的相互作用的衍射过程对晶格的微观畸变表现出

* 上海市科学技术委员会项目 (批准号: 14JD1406300)、国家自然科学基金 (批准号: 12475332)、东方英才计划领军项目 (批准号: QNKJ2024057) 和中国科学院青年创新促进会和集成电路材料国家重点实验室自主部署项目 (批准号: SKLJC-Z2025-A02) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhengli@mail.sim.ac.cn

‡ 通信作者. E-mail: lizhongliang@sari.ac.cn

高度的敏感性^[18-20]. X射线形貌术 (X-ray topography, XRT) 能够以非破坏性、大面积的方式对体材料的内部应变场进行成像, 从而构建了连接微观缺陷结构与宏观材料物性之间的桥梁^[21-23].

本文利用 XRT 系统研究了 4H-SiC 晶圆中的主要晶体缺陷. 首先阐述了 XRT 对晶格缺陷的衬度形成机制, 随后介绍了包括反射形貌、透射形貌和掠入射形貌在内的多种实验模式. 通过选择合适的衍射条件, 成功对 SiC 晶圆内关键缺陷进行了识别和表征, 并分析了它们在晶圆中的分布特征. 本研究为 4H-SiC 材料的缺陷控制和器件性能优化提供了可靠的技术和数据支撑.

2 X 射线形貌技术的物理基础与实验方法

2.1 晶格缺陷的衬度形成物理机制

晶体缺陷 (如位错、层错等) 的本质是晶格严格周期性的破坏. 这种结构上的不完整性在其周围诱导产生长程弹性位移场 $\mathbf{R}(\mathbf{r})$, 使得晶格常数与晶面取向发生局部改变. 当 X 射线波场传播至该畸变区域时, 位移场引入的附加相移 $\Phi(\mathbf{r})$ 对波场产生调制作用:

$$\Phi(\mathbf{r}) = 2\pi\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

其中 \mathbf{g} 为衍射矢量. 在实际的 X 射线形貌实验中, 针对不同的衍射几何配置 (透射或反射), 缺陷应变场与波场的相互作用机制表现出显著差异. 这种差异决定了衬度的具体特征, 并指导我们针对 4H-SiC 材料特性选择最佳的实验参数.

2.1.1 反射几何

在反射几何中, X 射线通常无法穿透整个晶圆, 衬度机制主要由 X 射线的消光距离 (extinction distance, Λ). 此时, 缺陷的可视性取决于其是否位于 X 射线的有效作用体积内. 消光距离是晶体动力学衍射性质的内在标度, 一般定义为衍射信号强度衰减至其表面值 $1/e$ 时光束所在深度, 其数值与晶体结构因子、衍射几何以及 X 射线波长等因素直接相关, 具体为

$$\Lambda_{\text{ext}} = \frac{V_c \sin \theta_B}{2\lambda r_0 |F_g|}, \quad (2)$$

其中, V_c 是晶胞原胞的体积, λ 是 X 射线的波长,

r_0 是经典电子半径, $|F_g|$ 是该衍射矢量 \mathbf{g} 所对应的结构因子, 与 SiC 材料性质与所发生衍射的晶格面指数有关. 消光距离是晶体动力学衍射性质的内在标度, 其量级通常在几微米到几十微米. 反射模式允许我们在不破坏样品的前提下, 获取一定深度范围内的缺陷三维形态及应变特征.

2.1.2 透射几何

透射几何下, 缺陷衬度的形成机制高度依赖于晶体的线性吸收系数 μ 与厚度 t 的乘积, 即吸收因子 μt . 高吸收情形 ($\mu t > 10$, 厚晶体) 条件下, 波尔曼效应起主导作用. 完美晶体中仅有节点位于原子面上的 α 支波场因光电吸收被极大抑制而能异常透射穿过晶体. 然而, 在缺陷核心附近的强畸变区, 波场的相干传播条件被破坏, 导致携带能量的异常透射波发生“分支间散射”, 能量转移至高吸收的 β 支从而被晶体强烈吸收. 因此, 在形貌图上, 缺陷表现为高透射背景下的强度缺失 (“阴影”), 即动力学像. 此类衬度通常较为宽大且模糊, 不利于高密度缺陷的分辨.

低吸收情形 ($\mu t < 1$, 薄晶体) 条件下, 吸收效应不再显著, 两个波场均可穿透晶体. 此时, 在缺陷核心附近的强畸变区 (其有效曲率半径远小于消光距离 Λ), 动力学衍射的严格角度条件失效, 衍射行为退化为运动学近似. 该区域的衍射强度不再受消光效应抑制, 显著高于完美晶体的背景强度, 从而形成明亮的直接像, 亦称运动学像. 直接像通常具有较高的空间分辨率, 且直观反映了缺陷的空间位置.

动力学像和运动学像之间衬度机制的选择, 对于大尺寸晶圆的缺陷统计至关重要. 对于本研究中厚度为 350 μm 的 4H-SiC 晶圆, 若使用实验室常规 Cu K_α 辐射 (8.04 keV), 其吸收因子 $\mu t \approx 5.12$. 样品处于“中等厚度”区域, 形成的衬度往往是黑白交替的中间像, 包含复杂的动力学干涉条纹, 极易造成缺陷计数误差.

图 1 为 μ 随 E 的变化曲线, 可以看出 μ 随 E 升高而迅速降低 ($\mu_0 \propto E^{-3}$), 考虑到运动学像更加清晰以及大气对高能硬 X 射线的散射更弱, 在非真空环境中一般选取更高的能量在 $\mu t > 10$ 的情况下观察运动学像. 利用同步辐射光源能量连续可调的优势, 本研究特意选取高能 X 射线 (如 $E > 13.6 \text{ keV}$) 进行透射形貌表征. 在此能段下,

μt 降至 1 以下. 高能 X 射线有效抑制了复杂的动力学干涉和阴影衬度, 使位错主要表现为衬度鲜明的直接像. 这不仅极大地简化了图像分析难度, 也显著提升了对位错类型识别准确率.

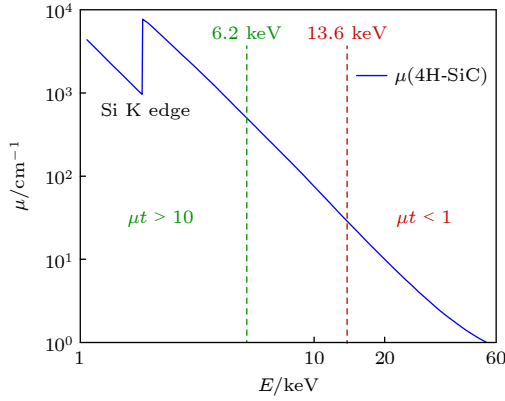


图 1 吸收系数随能量变化
Fig. 1. Absorption coefficient varies with energy.

此外, 晶格畸变对衬度的影响还与达尔文宽度 (Darwin width, ω_D) 相关. 是完美晶体发生衍射的极窄的角度范围 (通常为几角秒)^[24,25]. 位错应变场 $u(\mathbf{r})$ 导致局域晶格的有效失配 $\Delta\theta(\mathbf{r})$ 的梯度 $\nabla\Phi(\mathbf{r})$ 越大, 位错衬度更强. SiC 中位错可根据位错走向主要分为基平面位错 (basal plane dislocation, BPD) 和贯穿型位错, 其中贯穿型位错可根据形态进一步分为贯穿螺型位错 (threading screw dislocation, TSD)、贯穿刃型位错 (threading edge dislocation, TED), 其应变场强度大, 其核心周围的晶格畸变远超 ω_D , 这也是其易于形成清晰运动学像的物理原因^[26,27].

2.2 位错可见性

位错在形貌图中的衬度强弱, 直接取决于衍射矢量 \mathbf{g} 与位错柏氏矢量 \mathbf{b} 之间的几何耦合关系. 根据 (2) 式, 当位移场 \mathbf{u} 与衍射矢量 \mathbf{g} 正交时, 该缺陷不产生附加相移. 这构成了 X 射线形貌学中核心的消光准则: 当 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ 时, 位错引起的晶格位移主要分量平行于衍射面, 对衍射波不产生调制, 位错线在形貌图中消失或仅呈现因三维晶格畸变而产生的极弱的衬度; 当 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} \neq 0$ 时, 位错可见. 衬度强度通常随 $|\mathbf{g} \cdot \mathbf{b}|$ 的增大而增强^[27].

这一准则是鉴定 4H-SiC 中缺陷类型 (如区分螺旋位错 TSD、刃型位错 TED 及基平面位错 BPD) 并定量测定其柏氏矢量的物理依据. 为了直

观展示该准则在实际实验中的指导作用, 表 1 总结了 4H-SiC 中 3 种主要位错类型在本文所采用的典型衍射几何下的可见性特征.

表 1 不同位错在不同衍射配置下可见性

Table 1. Visibility of different types of dislocations in different diffraction setups.

位错类型	柏氏矢量 \mathbf{b}	反射形貌	透射形貌	掠入射形貌
		$\mathbf{g} = 000\bar{2}4$	$\mathbf{g} = 2\bar{2}44$	$\mathbf{g} = 2\bar{2}4\bar{1}6$
TSD	$\langle 0001 \rangle$	可见	不可见	可见
TED	$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$	不可见	可见	可见
BPD	$\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$	不可见	可见	可见(仅表面)

2.3 实验配置

本研究样品选用商用 N 型 4H-SiC, 表面为 (0001) 取向, 并有 4° 斜切朝向 $[11\bar{2}0]$. 衬底晶圆, 双面抛光. 晶圆直径为 6 英寸 (1 英寸 = 2.54 cm), 厚度为 $350 \mu\text{m}$. X 射线形貌实验在上海光源 (SSRF) 的 X 射线光学测试光束线 (31124.02.SSRF.BL09B) 实验站进行, 通过调节狭缝控制入射 X 射线的束斑尺寸^[28]. X 射线能量经 Si(111) 双晶单色器单色化, 能量选择在测试示意图中标注.

2.3.1 反射形貌

反射形貌采用 Bragg 衍射几何, 即衍射束从 X 射线的入射表面出射. 通过选择不同的 (hkl) 衍射面, 可以由 (1) 式改变 Λ_{ext} 的值. 例如, 对于 4H-SiC (0001) 晶圆, 采用 (00024) 这样的高指数衍射时, 选取的对应入射 X 射线能量较高, 其结构因子 $|F_{\mathbf{g}}|$ 较小、 λ 较小, 导致 Λ_{ext} 增大; 而采用低指数衍射 (0008) 时, 选取的对应入射 X 射线能量较低, Λ_{ext} 则较浅. 这使得反射形貌能够实现了对近表面几微米到几十微米深度的缺陷进行层析观测, 特别适用于对 TSD 的表征. 对于本文中如图 2(a) 中所描述的 15 keV 的 (00024) 反射, 其对应消光深度 $\Lambda_{\text{ext}} \approx 3.43 \mu\text{m}$.

2.3.2 掠入射形貌

入射 X 射线与样品表面成一个极小的角度, 远小于 Bragg 角. 这使得 X 射线仅在表层发生衍射, 对近表面应变极其敏感. 在图 1(b) 中 GIT 采用的 18.2 keV 下 ($2\bar{2}4\bar{1}6$) 衍射进行, 此时布拉格角 $\theta_B = 44.29^\circ$ 衍射面与表面夹角 $\alpha = 43.27^\circ$, 入射角 $\theta_{\text{in}} = 1.02^\circ$, 出射角 $\theta_{\text{out}} = 88.59^\circ$, 这个非对称式反

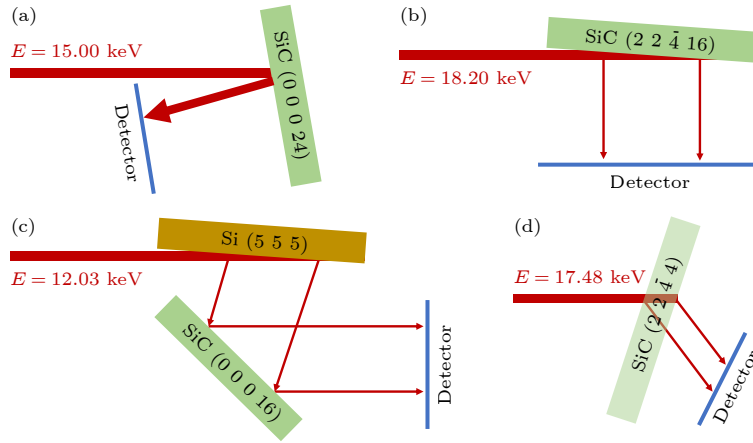


图 2 光路示意图 (a) 反射形貌; (b) 掠入射形貌; (c) 平面波形貌; (d) 透射形貌

Fig. 2. Schematic view of optical path: (a) Reflection topography; (b) grazing incident topography; (c) plane wave topography; (d) transmission topography.

射的消光深度 $A_{\text{ext_asym}}$ 在 (1) 式基础上根据反射几何修正为

$$A_{\text{ext_asym}} = A_{\text{ext_sym}} \cdot \sqrt{\frac{\sin(\theta_{\text{in}})}{\sin(\theta_{\text{out}})}}, \quad (3)$$

其中, 将出射角与入射角的正弦函数比值定义为非对称因子:

$$b = \frac{\sin(\theta_{\text{in}})}{\sin(\theta_{\text{out}})} = \frac{\sin(\theta_{\text{B}} - \alpha)}{\sin(\theta_{\text{B}} + \alpha)}. \quad (4)$$

经计算此时非对称因子 $b = 0.0178$, 意味着消光深度 $A_{\text{ext_sym}} \approx 15.43 \mu\text{m}$ 从降低到 $A_{\text{ext_asym}} \approx 2.06 \mu\text{m}$ ($A_{\text{ext_sym}}$ 的具体计算过程见补充材料 (online)).

通过采取这样的 GIT 配置, 可以将表征范围限定在表面, 适用于分析最影响半导体器件制造与性能、可靠性的表层的缺陷。

掠入射具有扩束效果, 对光斑放大倍数 M 为

$$M = \frac{\sin(\theta_{\text{out}})}{\sin(\theta_{\text{in}})} = \frac{1}{b}. \quad (5)$$

同时根据刘维尔定理 (Liouville's theorem), 出射光束宽度的增大意味着角发散的减小, 对称地, 入射光束 $\delta\theta_{\text{in}}$ 的接收角增大:

$$M = \frac{\sin(\theta_{\text{out}})}{\sin(\theta_{\text{in}})} = \frac{1}{b}. \quad (6)$$

在图 2(b) 所示配置中, 意味着出射光斑扩大 56.2 倍, 入射方向的接收角扩大 7.5 倍, 这两者共同使得单次表征的面积大大提升。

2.3.3 平面波形貌与摇摆曲线形貌

平面波形貌 (plane wave topography, PWT)

是指利用一块晶体对入射光进行高度单色化与准直后再使用样品进行衍射成像。高度准直之后的光束可以近似为平面波处理, 故称之为平面波形貌, 也可以根据图 2(c) 所描述的核心光路需要由样品与准直晶体两块晶体组成而称之为双晶形貌术 (double-crystal topography, DCT)。高度单色准直的入射光使得被测晶体中由缺陷引起的微小晶格畸变都会导致衬度的急剧变化。

在晶体绕 Bragg 角“摇摆”的过程中, 连续采集一系列二维 $I(x, y)$ 图像, 形成一个三维数据集 $I(x, y, \theta)$ 。通过对每个像素 (x, y) 的强度随 θ 的变化的摇摆曲线进行峰值强度、峰位、半高宽等信息进行提取, 可以获得整个视场定量的晶体应变信息。

需要注意的是, 摇摆曲线形貌 (rocking curve image, RCI) 作为一种计算成像的方法, 本质上是一种数据处理方法, 并不与 PWT 绑定。但因为 RCI 目的是通过这样的数据处理获得定量化数据以实现更高精度的表征结果, 所以常常与 PWT 这种高精度实验方法配合实现超高精度的定量化表征。

2.3.4 透射形貌

体材料内部缺陷的表征需要使用透射的几何配置, 当 X 射线以劳厄透射的形式穿过晶圆, 晶圆体内缺陷的图像会叠加投影在出射的衍射光束中。通过选择合适的 X 射线能量 (例如图 2(d) 中的对应 $\text{Mo K}\alpha_1$ 的 17.48 keV), 使得 $\mu t < 1$, 确保图像中衬度表现为明显的运动学像 (亮衬度), 而不是模糊的中间像或动力学阴影。样品衍射过程中移动扫描、相机同步采集, 以获得整个大面积的缺陷投影

图. 此方法主要用于研究 BPD, TED 等在晶体内部延伸的缺陷.

2.3.5 截面形貌

在透射形貌 (transmission topography, TT) 基础上用狭缝将入射光限制在几微米宽, 拍摄“静止”的形貌图. 该图像揭示了缺陷线在晶体厚度方向上的投影, 可用于分析位错线的空间走向. 样品衍射过程中移动扫描、相机同步采集不同位置的截面信息, 可重构出三维位错分布信息.

3 结果与讨论

3.1 近表面缺陷分析

对于反射形貌与掠入射形貌, 按照 2.3.1 节与 2.3.2 节中计算, 其消光深度分别为 $34.3 \mu\text{m}$ 和 $2.06 \mu\text{m}$, 这对于 $350 \mu\text{m}$ 厚的晶体而言属于近表面的范围. 非常适合用于检测和研究的贯穿型的 TSD 与 TED 和近表面的 BPD. 如图 3(a) 所示, 反射形貌由于消光条件, 仅能够观察到 TSD, TED 和 BPD 不可见, 部分混合位错由于位错线走向保留微弱的残余衬度. 单一的位错可见性虽然使得表征对象受到了限制, 但也意味着, 利用反射形貌能够获得明显地、几乎没有 BPD 和 TED 衬度干扰的 TSD 位错的形貌图像. 这对于区分 TSD 这种主要影响器件反向漏电流、击穿电压等关键指标的“杀手级”缺陷至关重要.

掠入射形貌由于使用了 3 个矢量都有贡献的混合衍射矢量 g , 所有位错类型都清晰可见. 但由于其探测深度只在表面微米级, 所以如图 3(b) 所示只有少量分布在表面的 BPD 可被观察. 而贯穿

型位错由于沿 c 轴生长, 所以在表面仍可清晰被观测到表现为一个强度较高的圆点. 同时, 在此配置下 TSD 的由于 $|g \cdot b|$ 比 TED 的更大, 图像衬度更明显, 因此, 如图 3(b) 所示, 衍射峰值强度 TSD 约为 TED 的两倍. 由于 TSD 的在表面的弛豫会导致更大应力场范围, 图像上 TSD 的圆点直径约为 $68.0 \mu\text{m}$ (8 个像素点) 会比 TED 的 $42.5 \mu\text{m}$ (5 个像素点) 更大, 因此可根据圆点的亮度、大小来区分观察到的贯穿型位错是 TSD 还是 TED.

掠入射形貌的最大优势在于, 其速度因为掠入射的光斑扩束和接收角增大而显著快于其他方法. 弯铁光束线站的横向光斑大尺寸特性使得一张如图 4(a) 的 6 英寸掠入射形貌的数据采集时间只需要数十秒. 极高的表征速度同时还保留了对贯穿型位错的高敏感性, 这使得量化地统计大面积晶圆的位错密度成为可能. 图 4(b) 为对于图 4(a) 晶圆级的贯穿型位错进行分割识别与统计后的反映位错密度的热力图. 可以看到边缘的位错密度显著高于中心, 这是 PVT 生长过程中, 晶体边缘存在较大的径向温度梯度, 导致局部热弹性应力集中. 量化的位错密度分布统计与直观的位错密度热力图相较单一的形貌图可以更好地辅助位错形成机理研究与晶体质量控制.

3.2 TSD 的应力场定量分析

对于位错具体的研究需要 2.3.3 节所描述的高精度的实验方法及量化的分析手段. 图 5 展示了在图 2(c) 的 PWT 配置下的对于 TSD 的 RCI 图像. 图 5(a) 为峰位的偏移图像, 可以看出 TSD 的分布以及对于周围晶格的影响从而导致 $\pm 1.5''$ 的峰位偏移, 峰位的偏移表现为一侧区域的峰位往低角

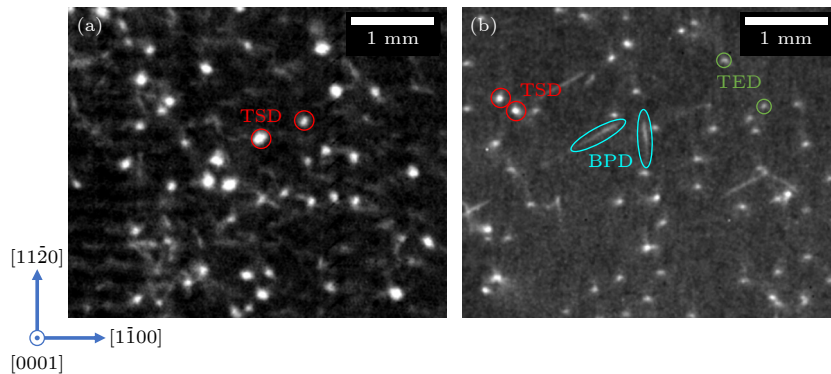


图 3 (a) 反射形貌; (b) 掠入射形貌

Fig. 3. (a) Reflection topography; (b) grazing incident topograph.

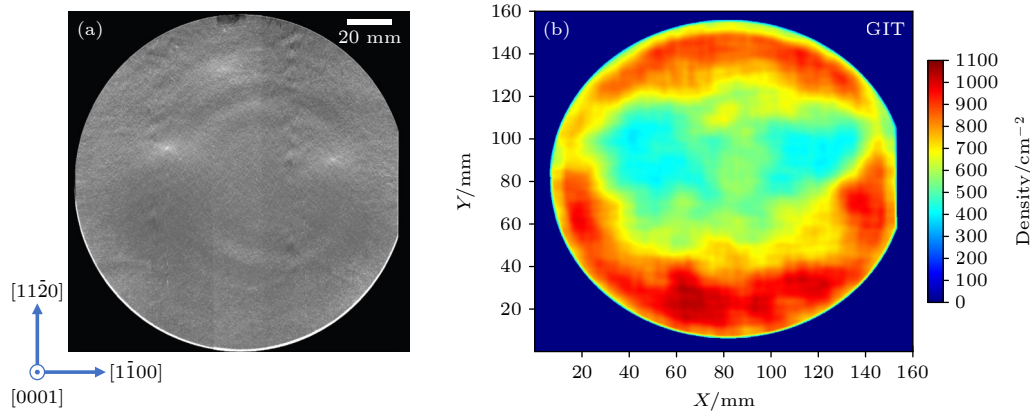


图 4 (a) 掠入射形貌; (b) 贯穿型位错密度

Fig. 4. (a) Grazing incident topograph; (b) density of threading dislocations.

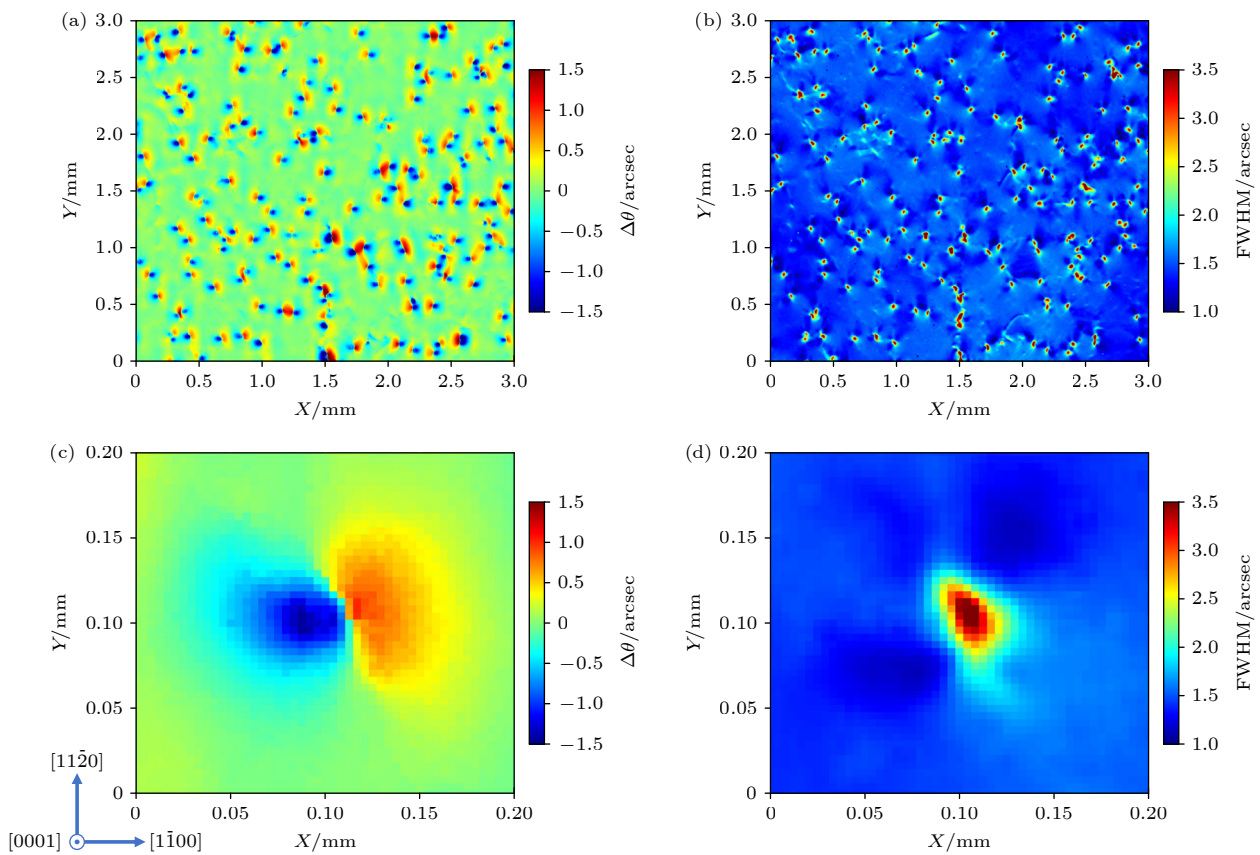


图 5 (a) TSD 衍射角度变化; (b) TSD 峰宽变化; (c) 单个左旋 TSD 及其应变区域衍射角度变化; (d) 单个左旋 TSD 及其应变区域衍射峰宽变化

Fig. 5. (a) Variation of TSD diffraction angle; (b) variation of TSD peak width; (c) the diffraction angle variation of a single left-hand TSD and its strain region; (d) variation of diffraction peak width in a single left-hand TSD and its strain region.

的偏移, 另一侧的高角偏移, 反映了 TSD 螺旋台阶面引起的晶格旋转与位错产生的长程应力场共同对衍射波长的调制作用, 这种应力场的影响范围远超过位错柏氏矢量的纳米量级, 而延伸至图 5(c) 所示的百微米量级, 这表明单一位错在完美晶体中的应力场的空间范围, 这也是我们可以使用空间分

辨率远大于原子级的照相方法在 X 射线形貌观察到位错的基础. 图 5(b) 展示了从摇摆曲线半高宽的来观察位错的影响, 与峰位偏移图像不同的是半高宽图像中并不表现为一组对称“峰位低角-高角偏移”的组合, 而是一个相对集中的半高宽从本征的 1.1'' 逐渐展宽到 3.5'' 以上的对称中心. 具体地,

从图 5(d) 可以看到, 对于图 5(c) 中的同一个 TSD, 其峰位向低角、高角偏移的晶格畸变部分半高宽并没有特别变化, 但中心的“晶格压缩-膨胀”的中心位置, 也就是 TSD 实际所在位置的半高宽会极大展宽, 表明了应力场的中心所在. 结合峰位与半高宽图像也可以进一步区分 TSD 的手性, 从而区分为左旋 TSD 与右旋 TSD, 图 5(c), (d) 所展示的就是一个台阶面逆时针旋转的左旋 TSD.

3.3 缺陷的三维结构

透射形貌可快速得到如图 6(a) 中的体内缺陷在探测器平面的二维投影, 借助同步辐射的高通量优势, 可以在几分钟内扫描得到这种对于一个区域体内所有位错的“俯视”图. 同步辐射的高准直特性也使得图像质量可以满足按照形态在二维图中轻松判断位错的走向以区分 TSD, TED 和 BPD. 但确定缺陷所在深度还需要借助截面形貌的方法.

截面形貌经过步进式扫描, 从而获取一系列沿晶体深度方向分布的截面衍射图像. 上述扫描获得的三维截面体数据通过最大强度投影算法, 在二维平面上合成出该区域的形貌图如图 6(b) 所示. 与

图 6(a) 相同区域的俯视形貌图相比, 这种重构图像不仅保留了完整的缺陷分布信息, 还通过逐层扫描显著增大了采样率并抑制了体背景噪声, 使得不同位错的区分度得到极大提升. 图 6(c)–(f) 进一步展示了从透射截面中重排得到的晶圆表面下不同深度截面的缺陷信息, 可以看到单个 BPD 的分布只在单一的深度, 是严格的水平走向, 这也是在掠入射形貌中只能观察到少量的分布、在近表面的 BPD, 而且这些可观测到的 BPD 的形态是完整的原因. 贯穿的 TED 和 TSD 的分布随着深度变化均可见, 所以在掠入射的配置下也可以分辨.

丰富的具有足够空间分辨的截面数据可以进一步重构出缺陷的三维数据, 这对研究缺陷的形成、生长与演变至关重要. 图 7(a) 所示为一个区域重构后的三维体数据, 并按缺陷的形态、大小、走向区别出 TSD, TED 与 BPD, 并分别染色标注. 据我们掌握的研究进展, 实现如此大范围的三维缺陷图谱绘制与自动化识别, 此前未见相关报道.

在大范围的缺陷图谱基础上, 清晰的高质量光源与实验方法配合图像可同时对单一位错的形态进行具体分析. 从图 7(b) 中观察到的 BPD, 这些

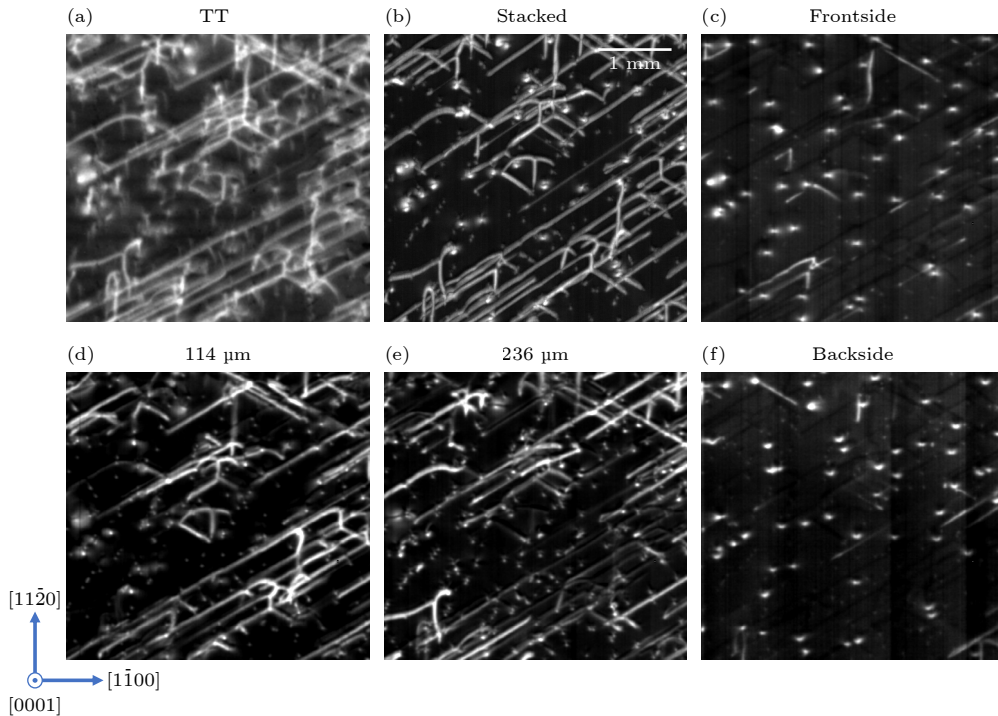


图 6 (a) 透射形貌; (b) 俯视叠加截面形貌; (c) 面表面形貌; (d) 正表面下 114 μm 截面形貌; (e) 正表面下 236 μm 截面形貌; (f) 背面表面形貌

Fig. 6. (a) Transmission topograph; (b) top-view stacked cross-sectional topograph; (c) front surface topograph; (d) cross-sectional topograph at 114 μm below the front surface; (e) cross-sectional topograph at 236 μm below the front surface; (f) back surface topograph.

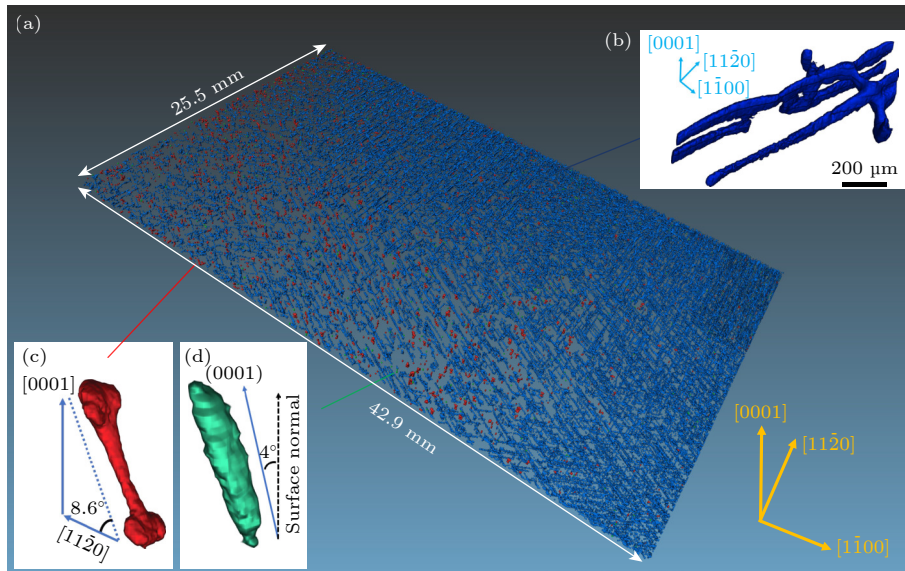


图 7 (a) 三维位错形貌; (b) 基平面位错; (c) 贯穿螺型位错/贯穿混合型位错; (d) 贯穿刃型位错

Fig. 7. (a) Three-dimensional topograph of dislocations; (b) basal plane dislocation; (c) threading screw dislocation/threading mixed dislocation; (d) threading edge dislocation.

图像生动地捕捉到了 BPD, 其特征是在基面内线性延伸. 图 7(c) 中显示的 TSD, 沿 $[11\bar{2}0]$ 方向的投影测量为 $53.1 \mu\text{m}$, 与 $[0001]$ 方向形成 8.6° 的明显角度. 相对应的图 7(d) 中的 TED 相对于晶片表面法线显示出 3.9° 的测量倾斜度, 该值与样品的 4° 斜切角一致. 这种 TSD 非严格沿 $[0001]$ 方向的位错线走向现象, 主要来自其柏氏矢量在包含 c 轴分量基础上含有 a 轴分量. 该位错属于贯穿混合型位错 (threading mixed dislocation, TMD), 其混合特性伴随着螺旋位错在生长界面的手性, 导致 TMD 在晶体台阶流生长中受到沿台阶流动方向的拖拽力时其倾斜角度具有多样性^[29-31].

4 结论

本文基于上海光源 X 射线光学测试光束线, 建立了针对 4 H-SiC 晶圆缺陷的系统性 X 射线形貌表征方法. 阐明了不同 XRT 实验几何对特定缺陷的敏感性. 反射与掠入射模式利用较小的消光深度, 有效分离了近表面的贯穿型位错 (TSD, TED) 与深层的基平面位错 (BPD). 利用掠入射几何的扩束效应, 显著提高了检测效率, 成功绘制了 6 英寸晶圆的位错密度热力图. 利用平面波摇摆曲线成像技术, 突破了传统形貌术仅能定性观测的局限. 实验不仅直观显示了 TSD 的螺旋特征, 还通过对摇摆曲线半高宽与峰位偏移的分析, 定量提取

了缺陷诱导的局部晶格旋转数据, 为校验晶体生长理论模型提供了高精度数据支撑. 通过截面形貌术与逐层重构技术, 在 SiC 中构建了包含 TSD, TED 及 BPD 的三维缺陷网络图谱, 直观展现了缺陷在晶体生长方向上的演化与交互行为. 综上所述, 本研究不仅提供了一套完善的 SiC 缺陷无损检测方案, 更为理解宽禁带半导体中的缺陷动力学行为及应力弛豫机制提供了新的物理视野, 对提升国产 SiC 衬底质量与器件良率具有重要的工程实用价值.

感谢中国科学院微系统与信息技术研究所狄增峰研究员、俞文杰研究员、欧欣研究员, 以及中国科学院高能物理研究所张小威研究员的慷慨帮助.

参考文献

- [1] Authier A, Balibar F, Epelboin Y 1970 *Phys. Status Solidi (b)* **41** 225
- [2] Authier A 2012 *Acta Crystallogr A Found Crystallogr* **68** 40
- [3] Moens P, Masloukas S, Avramenko M, Gomez-Garcia G, Kuzmanoska S 2024 *2024 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)* San Francisco, CA, USA, December 07-11, 2024 pp1-4
- [4] Peng H, Chen Z, Liu Y, Raghothamachar B, Huang X, Assoufid L, Dudley M 2022 *J. Appl. Crystallogr.* **55** 544
- [5] Chen Z Y, Liu Y F, Cheng Q Y, Hu S S, Raghothamachar B, Dudley M 2024 *J. Cryst. Growth* **627** 127535
- [6] Fujie F, Peng H, Ailihumaer T, Raghothamachar B, Dudley M, Harada S, Tagawa M, Ujihara T 2021 *Acta Mater.* **208** 116746
- [7] Takahashi K, Matsubara Y, Kawase M, Seo K, Mizutani S,

- Mizutani Y, Mizutani S, Murayama K, Harada S 2025 *Acta Mater.* **290** 120923
- [8] Chen X F, Yang X L, Xie X J, Peng Y, Xiao L F, Shao C, Li H D, Hu X B, Xu X G 2023 *Light: Sci. Appl.* **12** 28
- [9] Hu Q, Zhu S, Zhu Y, Gu C, Liu S, Huang R, Wu Y 2025 *Nat. Electron.* **8** 803
- [10] Wu F Z, Wang H H, Raghothamachar B, Dudley M, Mueller S G, Chung G, Sanchez E K, Hansen D, Loboda M J, Zhang L H, Su D, Kisslinger K, Stach E 2014 *J. Appl. Phys.* **116** 104905
- [11] Sintonen S, Rudziński M, Suihkonen S, Jussila H, Knetzger M, Meissner E, Danilewsky A, Tuomi T O, Lipsanen H 2014 *J. Appl. Phys.* **116** 083504
- [12] Yang G, Luo H, Li J J, Shao Q Q, Wang Y Z, Zhu R Z, Zhang X, Song L H, Zhang Y Q, Xu L B, Cui C, Pi X D, Yang D R, Wang R 2022 *J. Semicond.* **43** 122801
- [13] Wolfowicz G, Anderson C P, Yeats A L, Whiteley S J, Niklas J, Poluektov O G, Heremans F J, Awschalom D D 2017 *Nat. Commun.* **8** 1876
- [14] Luo H, Li J J, Yang G, Zhu R Z, Zhang Y Q, Wang R, Yang D R, Pi X D 2022 *ACS Appl. Electron. Mater.* **4** 1678
- [15] Shang W L, Sun A, Du H B, Yang G H, Wei M X, Xie X F, Che X S, Hou L F, Zhang W H, Li M, Shi J, Wang F, He H E, Yang J M, Jiang S E, Zhang B H 2021 *Chin. Phys. B* **30** 116101
- [16] Bai J L, Dong Q X, Zhang L B, Liu Q Y, Cheng J W, Liu P Y, Li C D, Sun Y R, Huang Y, Ren Z A, Chen G F 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 127501
- [17] Li P Y, Bi J C, Zhang S D, Cai R, Su G H, Qi F G, Zhang R Y, Wei Z Y, Cao Y W 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 087401
- [18] Pan Y H, Lei B, Qiao J S, Hu Z X, Zhou W, Ji W 2020 *Chin. Phys. B* **29** 86801
- [19] Zhao C Z, Si S Y, Zhang H P, Xue L, Li Z L, Xiao T Q 2022 *Acta Phys. Sinica* **71** 046101 (in Chinese) [赵昌哲, 司尚禹, 张海鹏, 薛莲, 李中亮, 肖体乔 2022 物理学报 **71** 046101]
- [20] Zhang Y, Li Z L, Si S Y, Xue L, Luo H X, Zhang X W, Hu J 2024 *Nucl. Sci. Tech.* **35** 110
- [21] Lider V V 2021 *Phys. Solid State* **63** 189
- [22] Tanner B K 2023 *Crystal Growth Design* **23** 3026
- [23] Zhang Q R, Lv S Y, Liu L, Wang S Z, Wang G D, Yu J X, Lv L S, Xu X G, Zhang L 2024 *J. Appl. Phys.* **135** 180701
- [24] Mai Z H, Ge P W, Cui S F, Xiao N, Wu L S 1981 *Acta Phys. Sin.* **30** 999 (in Chinese) [麦振洪, 葛培文, 崔树范, 肖楠, 吴兰生 1981 物理学报 **30** 999]
- [25] Li C R, Mai Z H, Cui S F 1992 *Acta Phys. Sin.* **41** 603 (in Chinese) [李超荣, 麦振洪, 崔树范 1992 物理学报 **41** 603]
- [26] Peng H Y, Zhu C, Gao C 2025 *Eng. Chem.* **10** 1
- [27] Cheng Q Y, Chen Z Y, Hu S S, Liu Y F, Raghothamachar B, Dudley M 2024 *Mater. Sci. Semicon. Proc.* **174** 108207
- [28] Xue L, Si S, Zhang H, He Y, Tian N, Zhao C, Zhang Y, Mo Q, Sun H, Li Z, Luo H 2024 *International Conference on Optical and Photonic Engineering* **13069** 1306918
- [29] Onda S, Okamoto T, Uehigashi H, Kondo H, Saka H 2016 *Mater. Sci. Forum* **858** 401
- [30] Mitani T, Eto K, Komatsu N, Hayashi Y, Suo H, Kato T 2021 *J. Cryst. Growth* **568-569** 126189
- [31] Hu S S, Raghothamachar B, Chen Z Y, Kayang K W, Gersappe D, Dudley M, Torres V, Dukes D, Lang D, Martin A, Briccetti H, Griswold S, Kegg T, Griffin N 2025 *Mater. Sci. Forum* **1156** 57

Application of X-ray topography in defect characterization of 4H-SiC wafer*

MO Qiuqi¹⁾²⁾³⁾ ZHAO Changzhe¹⁾³⁾ ZHENG Li^{1)†} LI Zhongliang^{3)‡}

1) (*State Key Laboratory of Materials for Integrated Circuits, Shanghai Institute of Microsystem and Information Technology, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, China*)

2) (*School of Physical Science and Technology, ShanghaiTech University, Shanghai 100084, China*)

3) (*Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201204, China*)

(Received 4 January 2026; revised manuscript received 14 January 2026)

Abstract

Crystal defects significantly constrain the electrical performance, yield, and reliability of semiconductor devices, making their physical characterization a fundamental scientific imperative. X-ray topography (XRT) serves as a pivotal non-destructive metrology tool for investigating long-range strain fields in nearly perfect crystals, grounded in the dynamical diffraction theory of X-rays. Using 4H-SiC—a representative wide-bandgap semiconductor—as a model system, this study systematically investigates the physical characteristics of threading screw dislocations (TSDs), threading edge dislocations (TEDs), and basal plane dislocations (BPDs). We comprehensively employ multiple synchrotron X-ray diffraction geometries, including reflection, grazing incidence, plane-wave rocking curve imaging (RCI), and transmission topography.

A rigorous methodology for the quantitative determination of dislocation Burgers vectors based on extinction criteria is established. Notably, utilizing the beam expansion effect in grazing incidence topography, a macroscopic dislocation density map of a full 6-inch 4H-SiC wafer is successfully extracted, enabling highly efficient defect statistical analysis. Furthermore, by utilizing plane-wave RCI, we quantitatively map the local lattice rotations and stress fields induced by single TSDs through full width at half maximum (FWHM) and peak shift variations, intuitively verifying their spiral characteristics. Finally, through cross-sectional transmission topography and three-dimensional volumetric reconstruction, an unprecedented three-dimensional defect network map is achieved, directly visualizing the spatial distribution and interactive evolution of TSDs, TEDs, and BPDs along the crystal growth direction. The findings and the established comprehensive XRT protocol provide profound physical insights into defect dynamics and stress relaxation mechanisms, offering critical engineering value for optimizing SiC crystal growth processes and enhancing the yield of next-generation power electronics.

Keywords: X-ray topography, crystal defects, silicon carbide

DOI: [10.7498/aps.75.20260007](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260007)

CSTR: [32037.14.aps.75.20260007](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20260007)

* Project supported by the Program of Science and Technology Commission of Shanghai Municipality, China (Grant No. 14JD1406300), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12475332), the Eastern Talent Plan Leading Program (Grant No. QNKJ2024057), and the Youth Innovation Promotion Association CAS and Autonomous Deployment Project of State Key Laboratory of Materials for Integrated Circuits (Grant No. SKLJC-Z2025-A02).

† Corresponding author. E-mail: zhengli@mail.sim.ac.cn

‡ Corresponding author. E-mail: lizhongliang@sari.ac.cn

X射线形貌方法在4H-SiC晶圆缺陷表征中的应用

莫秋祺 赵昌哲 郑理 李中亮

Application of X-ray topography in defect characterization of 4H-SiC wafer

MO Qiuqi ZHAO Changzhe ZHENG Li LI Zhongliang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 100808 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260007

CSTR: 32037.14.aps.75.20260007

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260007>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

碳化硅中点缺陷对热传导性能影响的分子动力学研究

Molecular dynamics study of effects of point defects on thermal conductivity in cubic silicon carbide

物理学报. 2022, 71(3): 036501 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211434>

基于二次溅射的4H-SiC/Ti/TaSi₂/Pt耐高温引线电极制备

Preparation of 4H-SiC/Ti/TaSi₂/Pt high-temperature lead electrodes based on secondary sputtering

物理学报. 2025, 74(20): 207101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250801>

B₂S₃对[111]晶向高压合成金刚石的影响

Influence of B₂S₃ additive on [111]-oriented diamond crystal synthesized under high pressure condition

物理学报. 2025, 74(8): 080701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250028>

元素掺杂对储氢容器用高强度钢性能影响的第一性原理和分子动力学模拟

First principles and molecular dynamics simulations of effect of dopants on properties of high strength steel for hydrogen storage vessels

物理学报. 2024, 73(6): 067101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231735>

双沟槽SiC MOSFET总剂量效应

Total ionizing dose effect of double-trench SiC MOSFET

物理学报. 2025, 74(5): 056101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241641>

光纤腔耦合碳化硅薄膜的理论计算

Theoretical calculation of fiber cavity coupling silicon carbide membrane

物理学报. 2022, 71(6): 060303 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211797>