

‘25년 사내 교육 세미나
- 한국아이티에스 (Korea ITS) -

X-선 토포그라피 (X-Ray Topography, XRT)
원리 및 응용

2025. 03. 10

김창수 고문 / 박사
(changsoo.kim@koreaits.com)

한국아이티에스 (KITS)

● 내용

1. X-선 회절 이론
2. X-선 흡수
3. 전위 (dislocation)
4. X-선 토포그라피 (X-ray Topography, XRT)
5. 정리

참고

- 본 세미나 자료의 충분한 이해를 위한 선결 사항들...
 - 결정의 기하학 (geometry of crystals)
 - crystal systems & unit cells: cubic, hexagonal, ...
 - crystal planes and directions
 - Miller (-Bravais) indices: (100), (111), (210), ... (10-10), ... planes
 - [100], [111], [210], ... [10-10] directions
 - Bragg 법칙: $n\lambda = 2d \sin \theta$

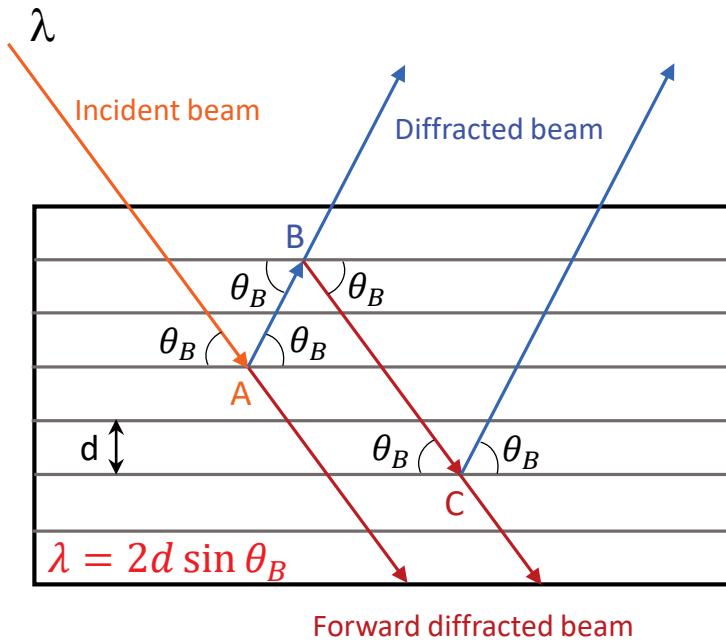
1. X-선 회절 이론

- 정역학/운동학 (Kinematical) 및 동역학 회절 (Dynamical Diffraction)
- Bragg 법칙

• X-선 회절 이론 (X-ray Diffraction Theories)

X-선 회절 이론 (X-ray Diffraction Theories)

- 1) 정역학/운동학 회절 (Kinematical Diffraction)
- 2) 동역학 회절 (Dynamical Diffraction)

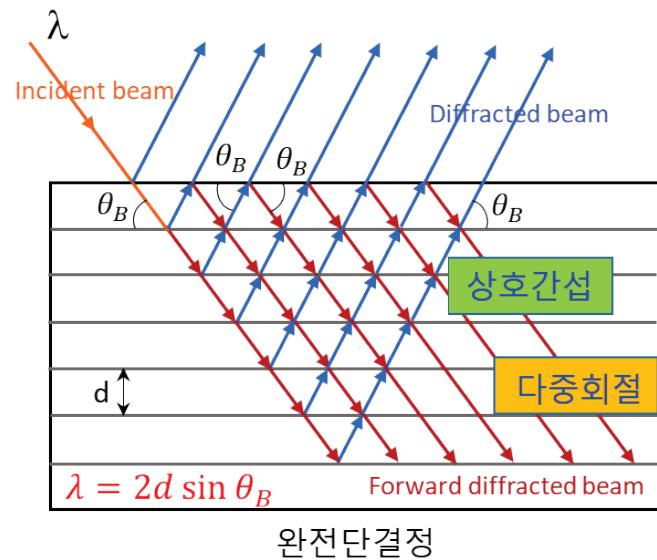


완전단결정 → Multiple Scattering/Diffraction(다중산란/회절)

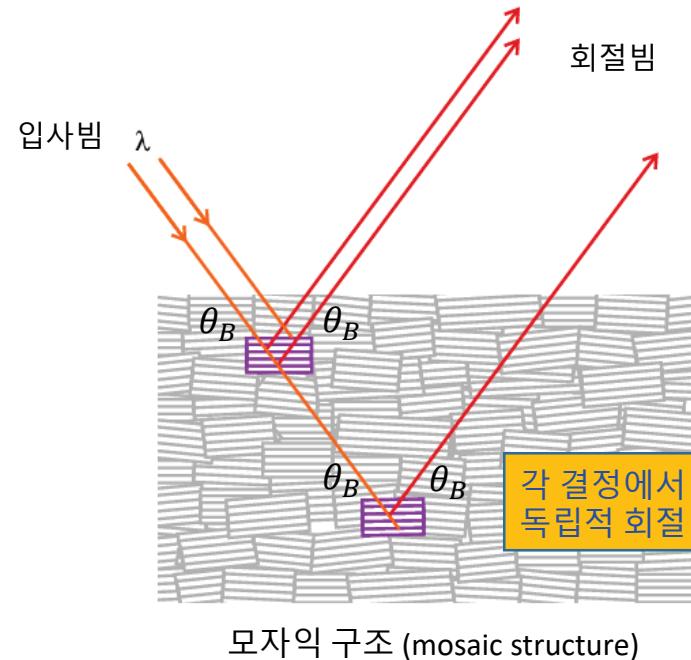
동역학 회절

X-선 회절 이론 (X-ray Diffraction Theories)

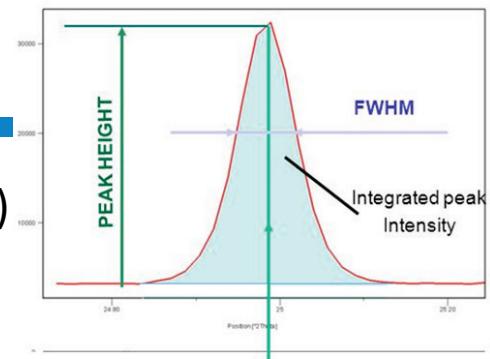
- 1) 정역학 회절 (Kinematical Diffraction)
- 2) 동역학 회절 (Dynamical Diffraction)



동역학 회절



정역학 회절



Angular peak position

1) 정역학 X-선 회절 이론 (Kinematical X-ray Diffraction Theory)

- 입사빔과 회절빔의 상호간섭 무시

- 전체 회절빔의 진폭(→ 강도)은 각 회절빔 진폭의 단순 합

정역학 회절에서의 회절빔의 (적분) 강도

$$I_h^{crystal} \propto |F_h|^2$$

(F_h : 구조인자)

반도체산업에서의
단결정/단결정에 가까운 결정의
회절에 적용 불가

→ 매우 얇거나, 작은 결정 (very thin or very small crystallites) 적용



2) 동역학 X-선 회절 이론 (Dynamical X-ray Diffraction Theory)

- 접근 1: 단결정의 파동방정식 (Maxwell's Eq.)의 解 (solution) 구함
 - 물질 주기성의 Bloch wave 고려, 결정의 굴절율 고려한 파장/파수벡터 고려
- 접근 2: 결정 내에서의 다중산란 (multiple scattering) 적용
 - 다중회절 및 입사빔/회절빔, 회절빔/회절빔의 상호간섭 고려

동역학 회절에서의 회절빔의 (적분) 강도

$$I_h^{crystal} \propto |F_h|$$

동역학 회절 응용 측정법
→ 고분해능 XRD
→ X-선 토포 (XRT)



→ 이상적인 큰 단결정 (ideal large single crystal, 완전단결정)에 적용

• Bragg 법칙

Bragg 법칙

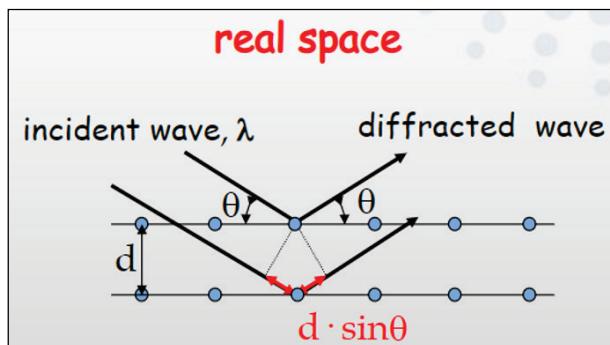
1. 정역학 이론 (Kinematical theory)

$$n\lambda = 2d \sin \theta_B \quad (1)$$

- 회절이 결정 내부에서의 간섭현상이지만 물질의 굴절율 무시한 진공에서의 $|k| = 1/\lambda$ 적용
- 역격자 공간에서 표현 $\rightarrow \mathbf{h} = \mathbf{k}_h - \mathbf{k}_0$

2. 동역학 이론 (Dynamical theory)

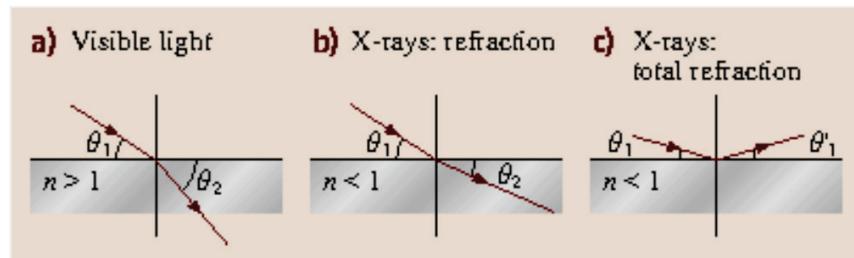
- 물질 내부의 입사빔 \mathbf{K} 은 굴절율 n 을 고려한 $\mathbf{K} = n\mathbf{k}$ ($|K| < |k|$) 적용 (\mathbf{k} 는 진공 중의 파수벡터)
- 굴절율 및 다중회절에 의한 간섭현상을 고려함으로 염밀하게는 Bragg 각도가 정역학 회절식 (1)에서 수 arcsec 벗어남
- 다만, 고분해능 XRD 및 XRT 사용/응용에는 동역학 회절 기본 개념의 이해가 요구되고 또한 시뮬레이션 계산 과정에 적용되기 때문에, 정역학 Bragg 회절식 (1)을 적용해도 단결정 및 에피층 분석에 전혀 무리가 없음



Bragg 법칙

$$\lambda = 2d \sin \theta_B$$

scalar form of Bragg's law



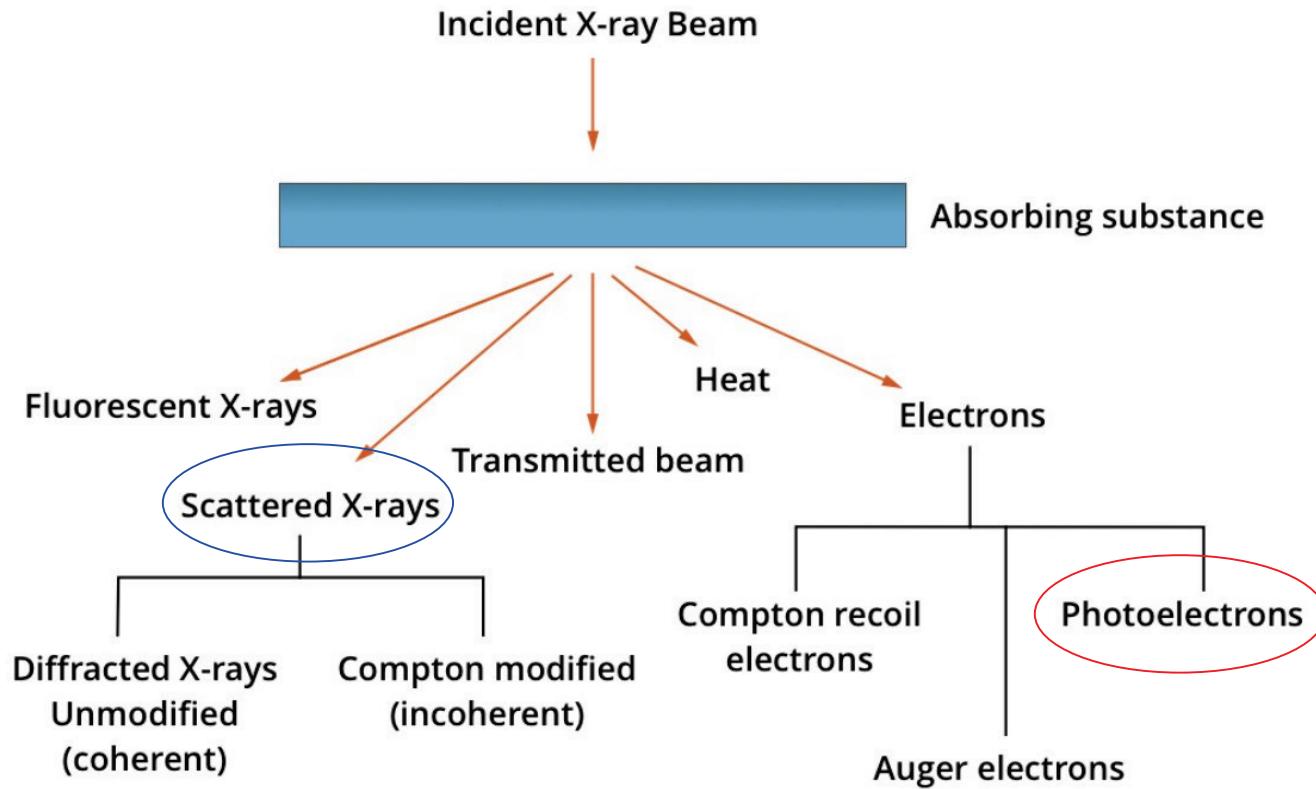
X-선 굴절 (b)

2. X-선 흡수 및 침투깊이

- 일반적인 경우의 X-선 흡수: 광전 흡수 현상
- Lambert-Beer 법칙 및 X-선 침투깊이
- 단결정에서의 특이 흡수 현상
 - X-선 소광 (extinction) 및 비정상 투과 (anomalous transmission)

• X-선 흡수 (X-ray absorption)

X-선과 물질의 상호작용 (Interaction of X-rays with matter)



Attenuation of X-rays :

- Scattering
- Absorption

Scattering

- Elastic and **inelastic scattering**

Absorption

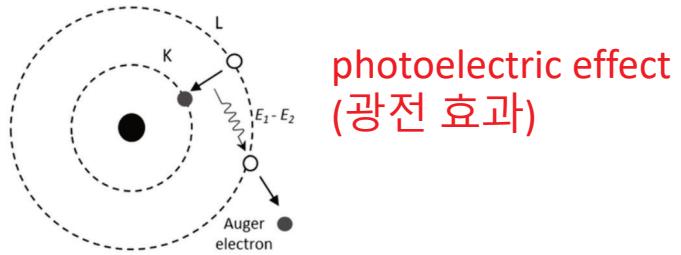
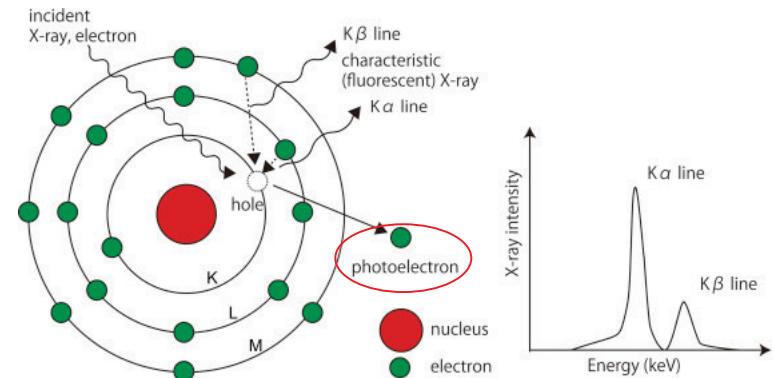
- **photoelectric absorption (광전 흡수)**

- **Lambert-Beer 법칙**

$$I = I_0 \cdot e^{-\mu \cdot l}$$

(I_0 : 입사빔 강도, I : l 진행 후 강도 μ : 선흡수계수)

(μ : linear absorption coefficient : 선흡수계수)



**photoelectric effect
(광전 효과)**

• X-선 흡수 vs. 침투깊이 -- 일반적인 경우

일반적인 경우의 X-선 침투깊이 (Penetration Depth)

- X-선이 물질 속으로 침투하는 깊이

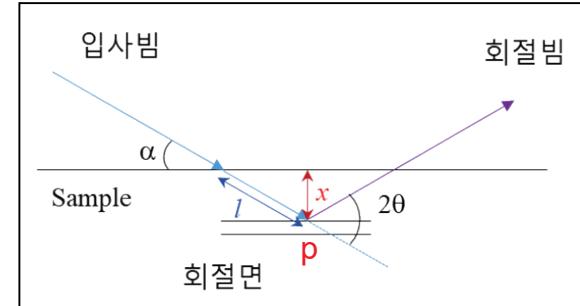
• Lambert-Beer 법칙

$$I = I_0 \cdot e^{-\mu \cdot l} = I_0 \cdot e^{-\mu \cdot \frac{x}{\sin \alpha}}$$

(I_0 : 입사빔 강도, I : l 진행후 강도 μ : 선흡수계수)

$I/I_0 = \frac{1}{e}$ 일 때, 즉, 강도 비율이 약 36.8%일 때의 깊이

$$\rightarrow (1/e) 침투깊이 : x_t \quad \Rightarrow \quad x_t = \frac{\sin \alpha}{\mu}$$



대칭회절 구조
(α : 입사각, x : 침투깊이, l : 진행길이)

일반적으로 침투깊이는

$$x_t = c_1 \cdot \frac{\sin \alpha}{\mu}$$

($c_1 = 0.5 \sim 3$ 정도의 상수로서 침투깊이에 대한 강도비율 (I/I_0)의 정의에 의존 예, $I/I_0 = 36.8\%, 20\%, 10\%, 1\%, \dots$)

- 예를 들어, X-선의 입사각도가 45° 일 때 Silicon ($\mu = 141.14 \text{ /cm}$, Cu K α)에 대한 침투깊이는

$$x_t = 50.1 \mu\text{m} \quad (c_1 = 1) \rightarrow \text{침투깊이 정의: } I/I_0 = 1/e (36.8\%)$$

$x_t = 25.1 \mu\text{m} \quad (c_1 = 0.5) \rightarrow$ 표면으로 다시 나와서 감지되어 내부 정보를 갖고 있는 깊이: information depth

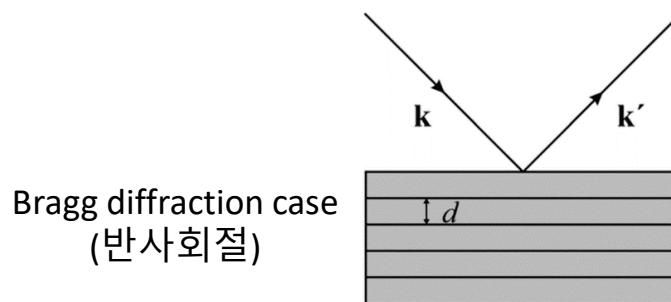
$x_t = 230.7 \mu\text{m} \quad (c_1 \approx 4.6) \rightarrow$ 다른 침투깊이 정의: $I/I_0 = 0.01 (1\%)$

• 단결정 회절에서의 특이 흡수 현상

동역학 회절 (Dynamical Diffraction, DD)에 의한 Bragg 회절을 만족하는 조건

1) X-선 (회절) 소광 (Extinction)

- Bragg 반사회절 경우



• 단결정에서 회절이 만족

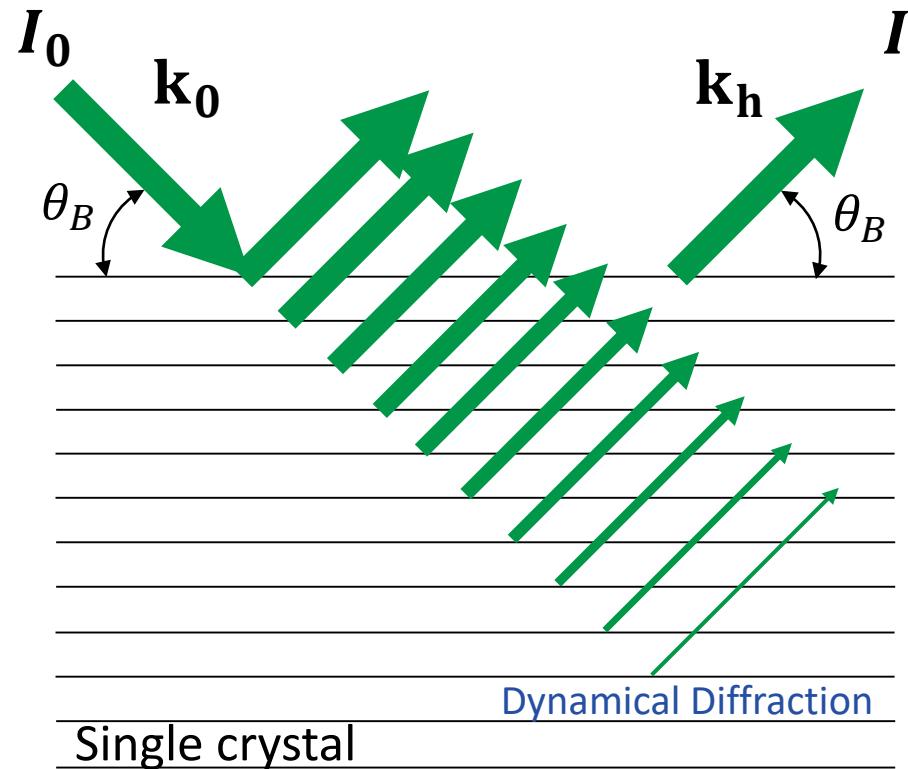
- 입사빔에서 회절빔으로 에너지 전이
- 입사빔의 강도 감소
- 깊이 방향으로 입사빔이 진행,
각 회절면에서 계속 회절 만족,
에너지 전이 계속 진행 (동역학 회절)

⇒ 입사빔 강도가 점점 줄어드는 현상

• 초기 강도의 $1/e$ ($= I/I_0$)로 줄어드는 깊이

: 소광길이 (extinction length)

⇒ 일반적으로 소광길이는 일반 흡수로 인한
X-선 침투깊의 $1/10$ 정도, 대개 $1\sim10 \mu\text{m}$



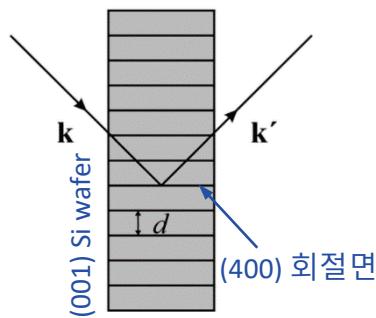
단결정 회절에서의 깊이 방향 X-선 소광 개념도

동역학 회절 (Dynamical Diffraction)에 의한 Bragg 회절을 만족하는 조건

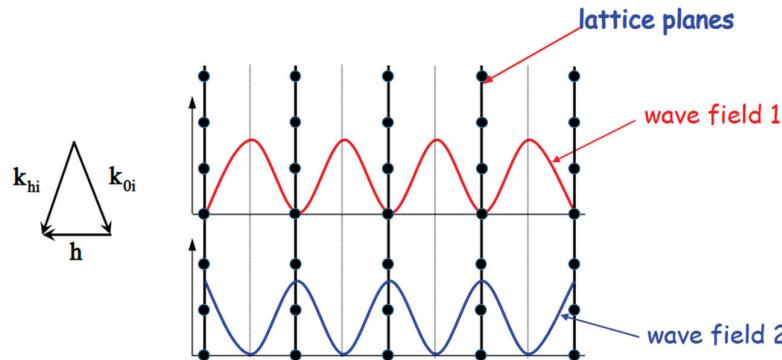
2) X-선 비정상 투과 (Anomalous transmission, Borrman effect)

- Laue 투과회절 경우 (transmission)
- 완전 단결정의 정확한 Bragg 회절을 만족하는 경우

→ 동역학 회절에 의하여 회절면에 평행한 방향으로 일반 흡수가 거의 없이 투과



Laue diffraction case
(투과회절)

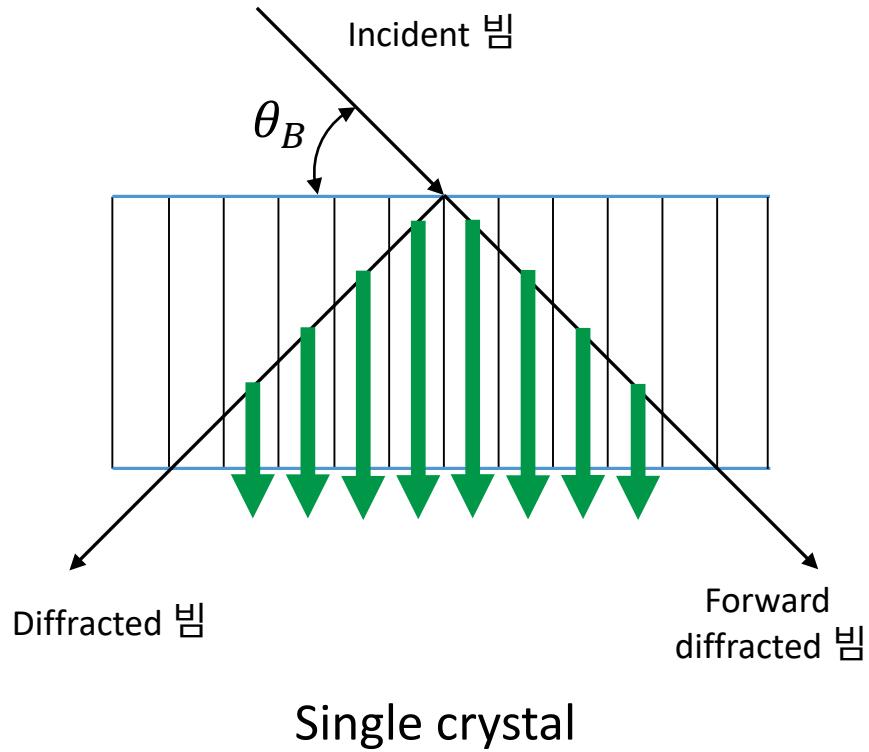


Bragg 각도에서 두 wavefields (Bloch waves)의 intensity

회절조건에서 동역학 회절에 의해 두 정지파 patterns이 형성

- WF 1: 원자면에서 **최소** intensity (nodes 형성)
→ 흡수가 거의 없음
- WF 2: 원자면에서 **최대** intensity (antinodes 형성)
→ 전자와의 광전 흡수 과정 (photoelectric absorption process)으로 대부분 흡수

Anomalous transmission (비정상 투과)



완전 단결정에서의 비정상 투과 개념도

X-선 비정상 투과 (Anomalous transmission, Borrman effect)

- 적절한 조건에서는 일반 흡수 $\mu t > 30\text{-}50$ 의 두께까지 투과 가능 (at 8.0 keV, Cu K α)

$$I = I_0 \cdot e^{-\mu \cdot t}$$

예: Silicon에 대하여,

일반적인 흡수라고 가정하면 $\mu t = 30$ 의 두께는 ?

- for Cu K α , μ (Si)=140.88 (/cm)
 $\rightarrow I/I_0 = \exp(-30) = \exp(-140.88 \times t)$

→ 두께 $t \approx 2.13$ mm 에 해당

-
- 결정 결함 (전위, 점결함 등)은 결정의 주기성을 왜곡
→ 비정상 투과 현상 왜곡 (없어지거나 줄어듦)
→ 투과법 X-선 topo에서 결함 부위의 명암 (contrast) 변화로 결함 관찰

3. 전위 (dislocations)

- 전위: Burgers 벡터 및 전위선 (dislocation line)
- Hexagonal 결정구조 (SiC) 에서의 전위
: Burgers 벡터 및 전위선 (dislocation line)

• 전위 (Dislocation)

- 전위 (dislocation):

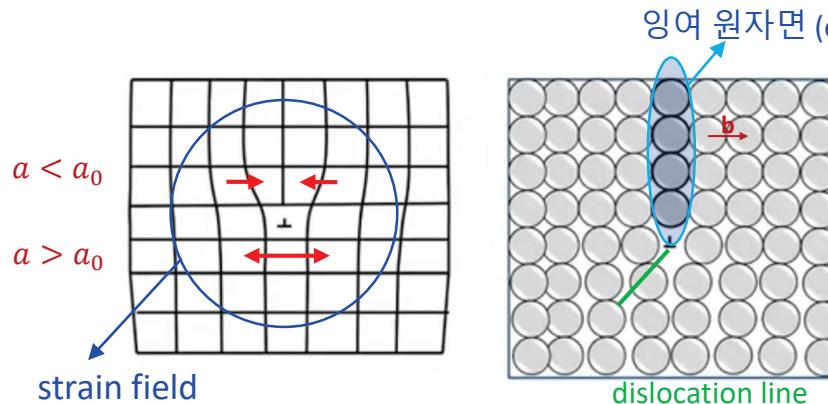
- 일정한 결정구조를 갖는 물질 내에서
- 원자의 배열이 어긋난 선형의 결함 (line defect)
- 전위의 주변에 격자 변형이 나타남
→ imperfect crystal 영역으로 perfect crystal 과 구분

- 종류

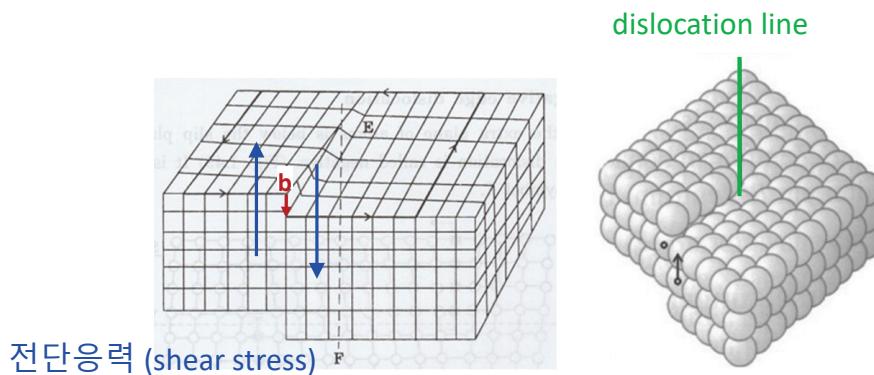
- 칼날 전위 (Edge dislocation)
- 나선 전위 (Screw dislocation)
- 혼합 전위 (Mixed dislocation)

- Burgers 벡터

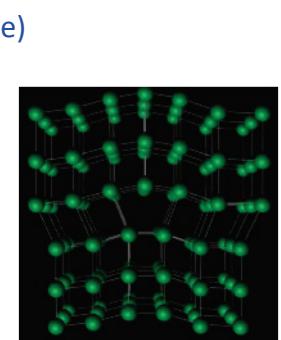
- 하나의 전위 생성에 의한 변형의 크기로
- 주로 한 원자 간격임



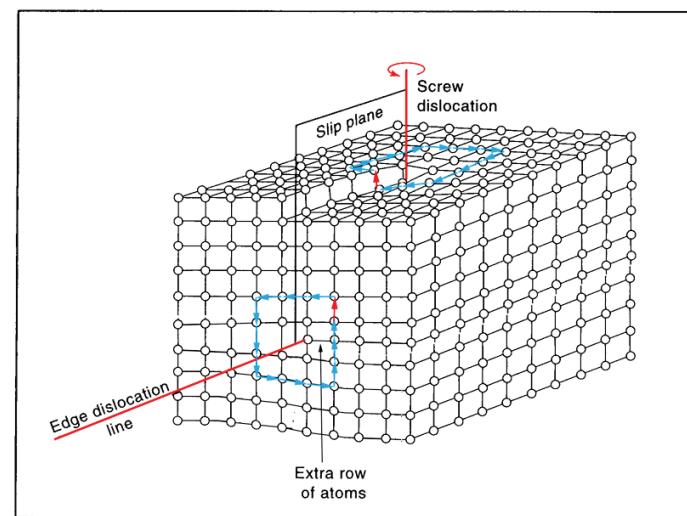
Edge dislocation



Screw dislocation



전위 영역의 격자변형



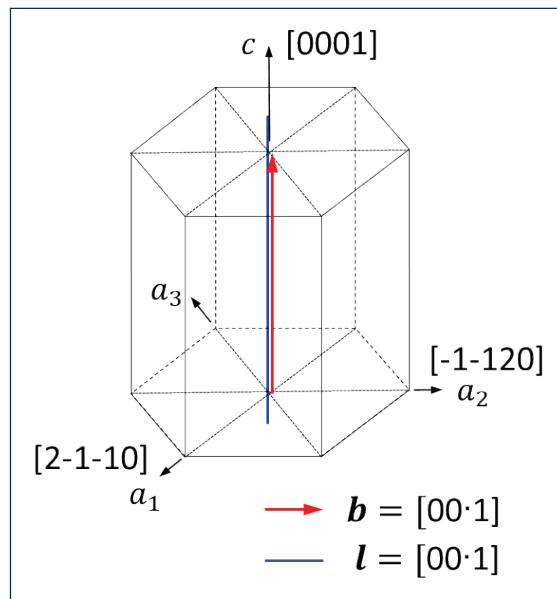
Dislocation line

Hexagonal 결정구조 (SiC, GaN 등)

- 전위의 Burgers 벡터 및 전위선 (dislocation line)

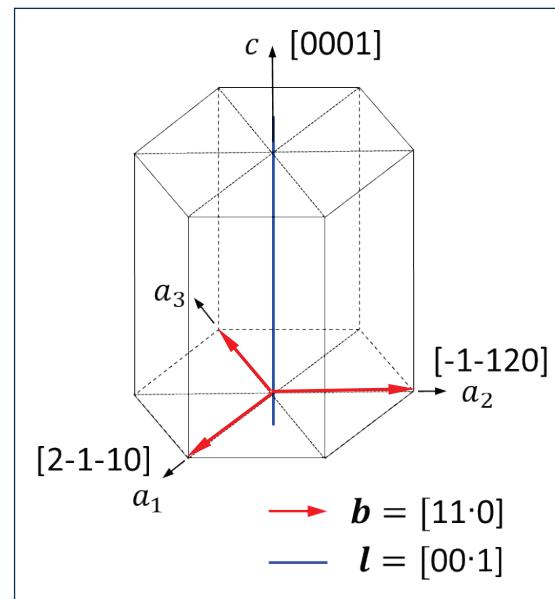
	TSD	TED	BPD
Burgers vector (\mathbf{b})	$<001>$	$<110>$	$<110>$
Dislocation line (\mathbf{l})	$<001>$	$<001>$	$<110>^*$

* arbitrary in (001) plane,
but $<110>$ stable



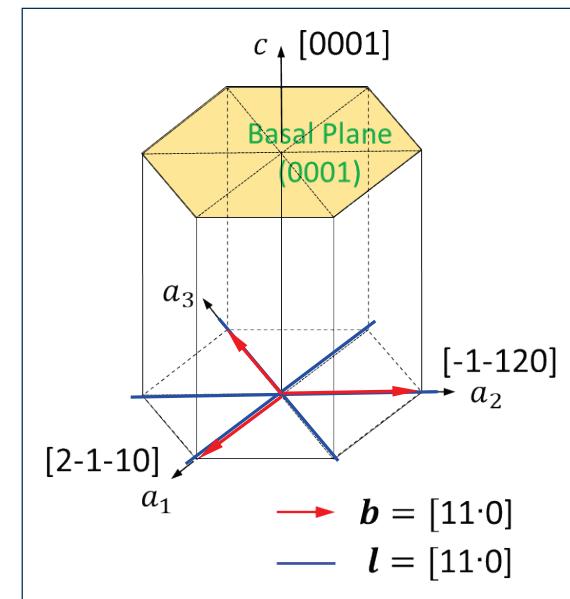
TSD

(Threading Screw Dislocation)



TED

(Threading Edge Dislocation)



BPD

(Basal Plane Dislocation)

4. X-선 토포그라피 (X-ray Topography, XRT)

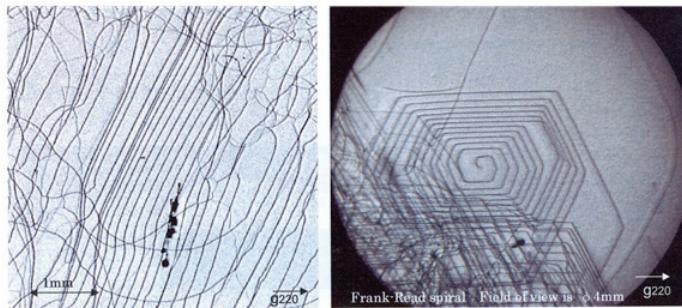
- 특징
- 이미지 명암차이 원리 (Image Contrast Mechanisms)
- XRT 측정법 및 시료 준비
- 토포 이미지 및 측정 예
 - 반사 및 투과 측정법을 이용한 결함 이미징

• X-Ray Topography (XRT / X-선 토포)

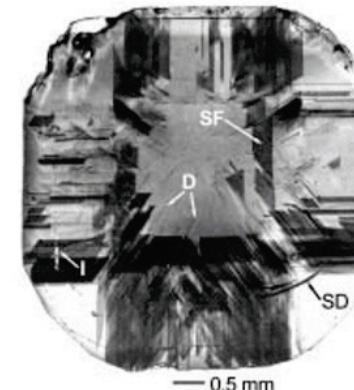
• X-ray topography (XRT) 원리

1) 특징

- x-선의 회절 (diffraction) 특성 이용 → “X-ray diffraction imaging”
 - 회절빔의 intensity 분포 및 명암차이 (contrast)로 이미지 형성
 - 완전결정 및 결함 영역의 회절강도 (scattering power) 차이에 의한 contrast 형성
- 비파괴적 평가기술: 결정 결함 (crystal defect) 이미지의 비파괴적 관찰
- 관찰 결함 크기: μm – cm 크기
- 관찰 결정결함: 전위(\perp) 분포/밀도, 불균일 strain 분포, grain boundary/subgrain 구조, 결함 깊이, inclusions/voids, 적층결함(SF), 2차 상(phase), 쌍정(twin), 표면손상(surface damage)
- 응용 소재: Microelectronics, Optoelectronics, 단결정 기판, 태양전지 Si, Optics, 합성 diamonds, 전력소자



x-선 토포 이미지: 전위 (dislocations)



Diamond 결정의 x-선 투과 토포 이미지:
전위(D), 적층결함(SF), inclusions(I), 표면 손상(SD)

XRT의 기본 개념

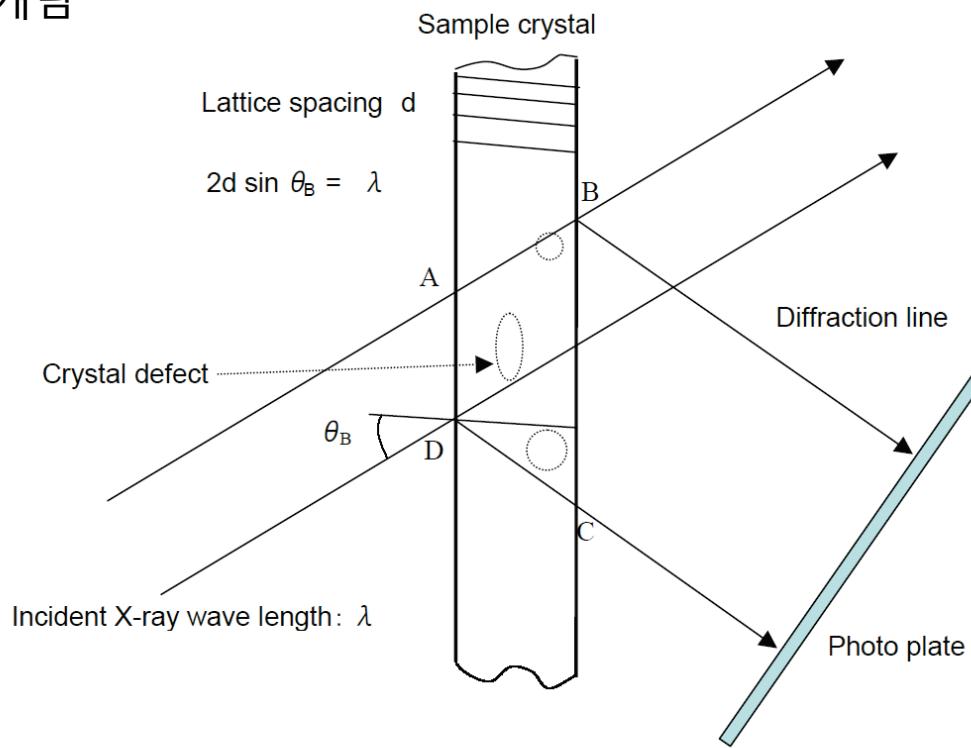


Fig.2.1 Concept of X-ray topography

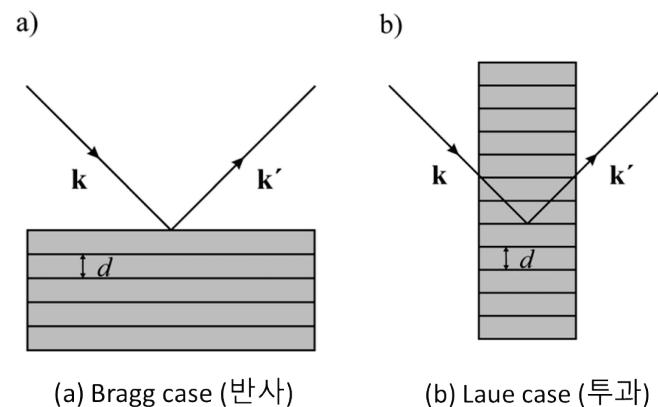
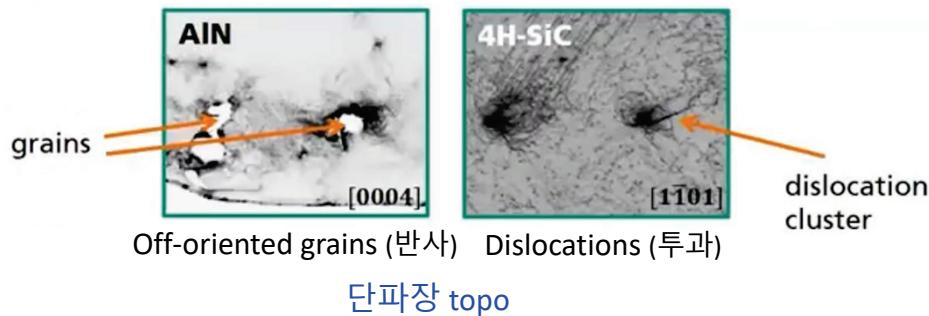
• X-ray topography (XRT) 원리

2) 반사법 및 투과법

- 반사법 (Bragg case, Reflection Topo)
 - 주로 $1 \mu\text{m} - 10 \mu\text{m}$ 깊이의 결정 표면 영역의 미세구조 (microstructure) 이미지 관찰
- 투과법 (Laue case, Transmission Topo)
 - 결정 내부의 bulk 미세구조 관찰

3) 백색광 및 단파장 topo

- 백색광 (White beam, polychromatic beam) topo
 - 소스에서 오는 모든 파장의 x-선을 사용
 - 결함의 변형 영역, 서로 다른 결정면도 해당 영역에 맞는 파장에 의해 Bragg 회절을 만족
- 단파장 (Monochromatic) topo
 - 단일 파장의 x-선 이용
 - 변형 영역은 Bragg 회절이 제한적이며
higher sensitivity to strain/misorientation

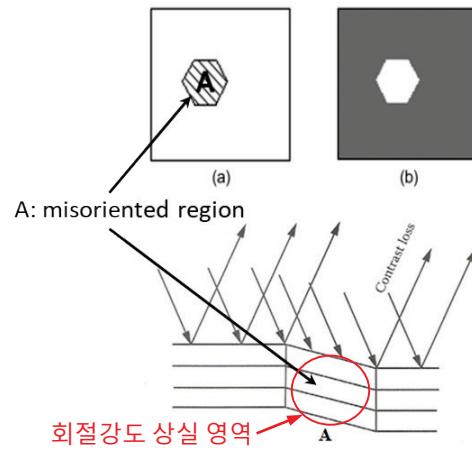


• X-ray topography (XRT) 원리

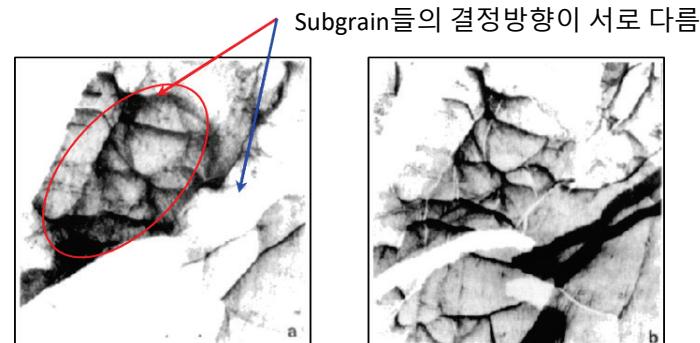
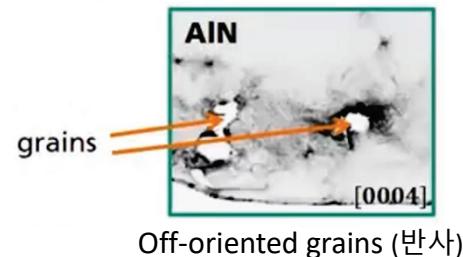
4) 이미지 명암차이 발생 원리 (contrast mechanisms)

a) Orientation contrast

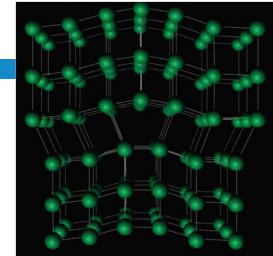
- 결정방위 차이로 인한 이미지의 명암차이 발생
- 결정면 방향이 다른 영역 → Bragg 회절 만족 유무 → 회절 강도 차이 → 명암차이 발생



Orientation contrast: a) crystal, b) image



Images for Bragg reflection of a LiF crystal with subgrains.
a) Lang topograph (단파장), b) white beam topograph



전위 영역의 격자변형

• X-ray topography (XRT) 원리

4) 이미지 명암차이 발생 원리 (mechanisms)

b) Extinction contrast

- 소광 (extinction) 현상의 유무에 따른 이미지 명암 차이 (contrast) 발생

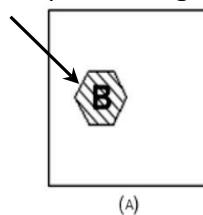
- 단결정 영역은 동역학 회절 (dynamical diffraction: DD)) 진행,
격자가 변형된 결합 영역은 동역학 회절조건이 깨지면서 정역학 (kinematical: KD) 회절이 진행
→ 동역학 ⇔ 정역학 회절 간의 회절강도 차이로 이미지 명암차이 발생

1) 완전 단결정 영역 → 동역학 회절 (DD): X-선 소광 유 \Rightarrow (적분) 회절강도 $\propto |F|$ (F: 구조인자)

2) 변형된 결합 영역 → 정역학 회절 (KD): X-선 소광 무 \Rightarrow (적분) 회절강도 $\propto |F|^2$

→ 결합 영역의 회절강도가 증가 \Rightarrow 이미지 명암차이 발생

B: imperfect region



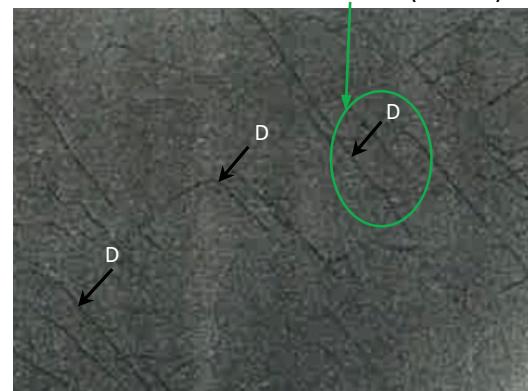
(A)



(B)

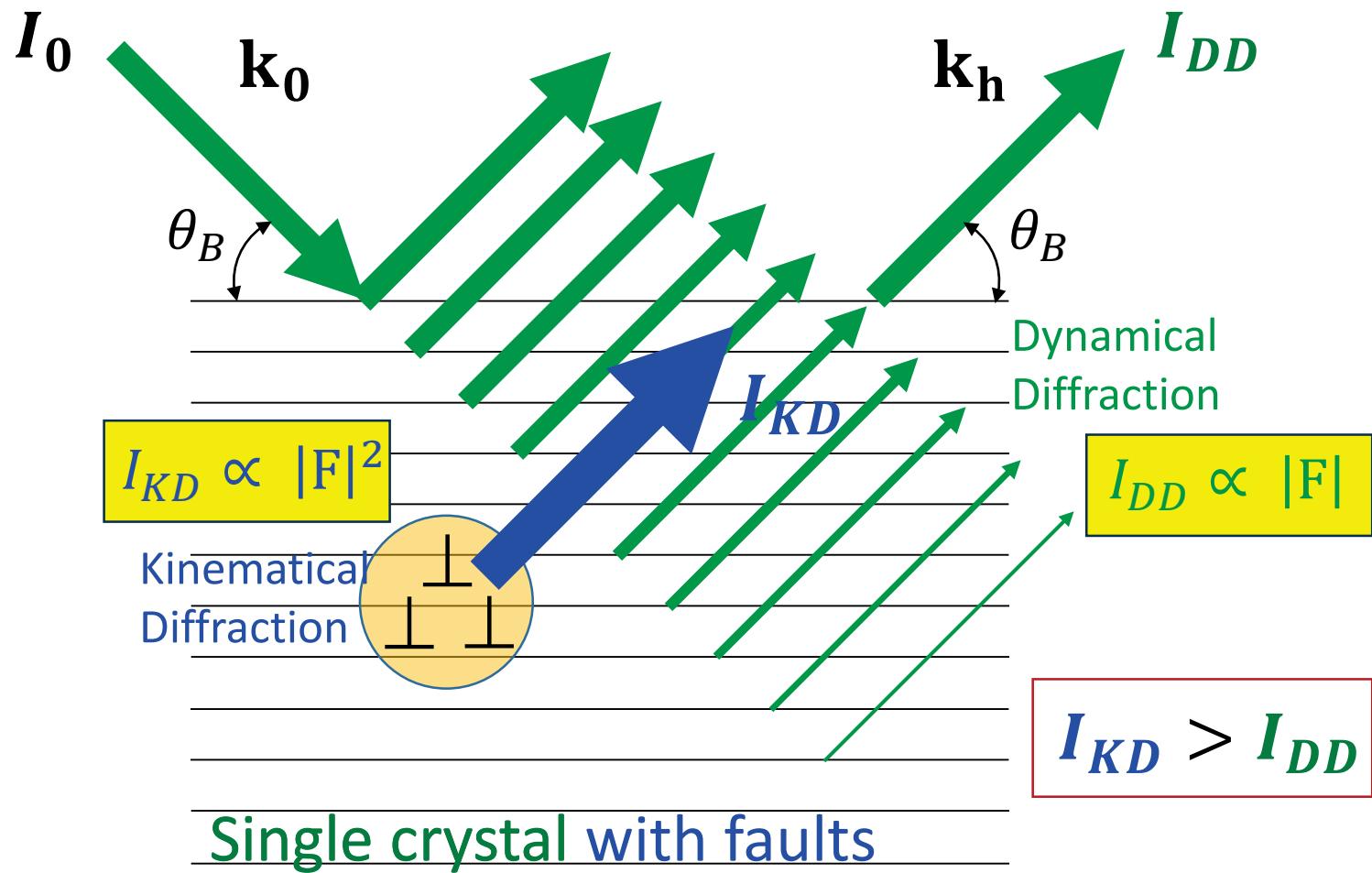
Extinction contrast; a) crystal, b) image
(B: imperfect region,
but same orientation as the matrix)

D: 전위: 단결정 영역 (matrix)보다 진한 명암



Extinction contrast
Symmetric reflection (00·12) of sapphire

Extinction contrast (소광 변화에 의한 명암차이)



결함 영역에서 DD 및 KD 변화와 소광 변화에 의한 명암차이 개념도

- X-ray topography (XRT) 원리

- 4) 이미지 명암차이 발생 원리 (mechanisms)

- c) Contrast due to **anomalous transmission** (비정상 투과): 투과법 경우

- 단결정은 **동역학 회절** (DD)로 **회절면에 평행한 방향으로** 비정상 투과 진행하나

- 결함 영역**은 비정상 투과 현상 소실

- 투과법 x-선 토포에서 결함 영역에서 회절강도 감소의 명암 차이 발생

- 두꺼운 단결정 웨이퍼에 응용

- d) 구조인자 contrast (structure factor contrast)

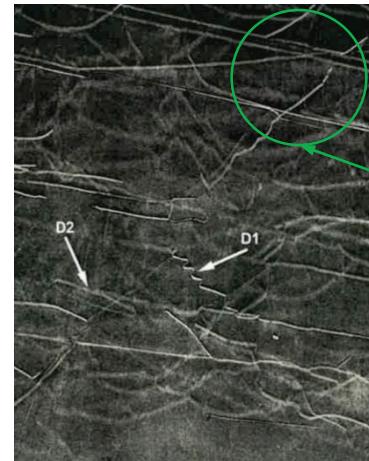
- 구조인자의 차이에 의한 contrast

- e) Pendellosung contrast

- f) Moire fringe contrast ...

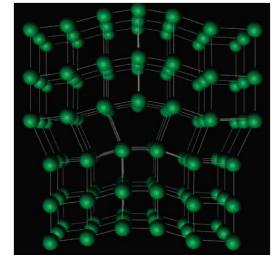


대개 **복합적인 contrast** 발생 원리가 작용

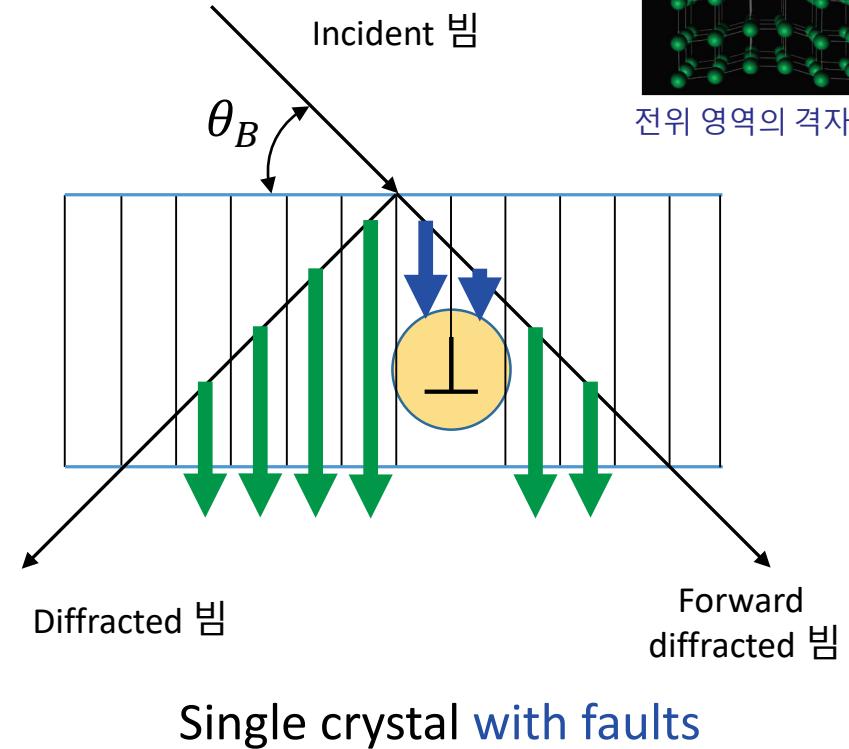
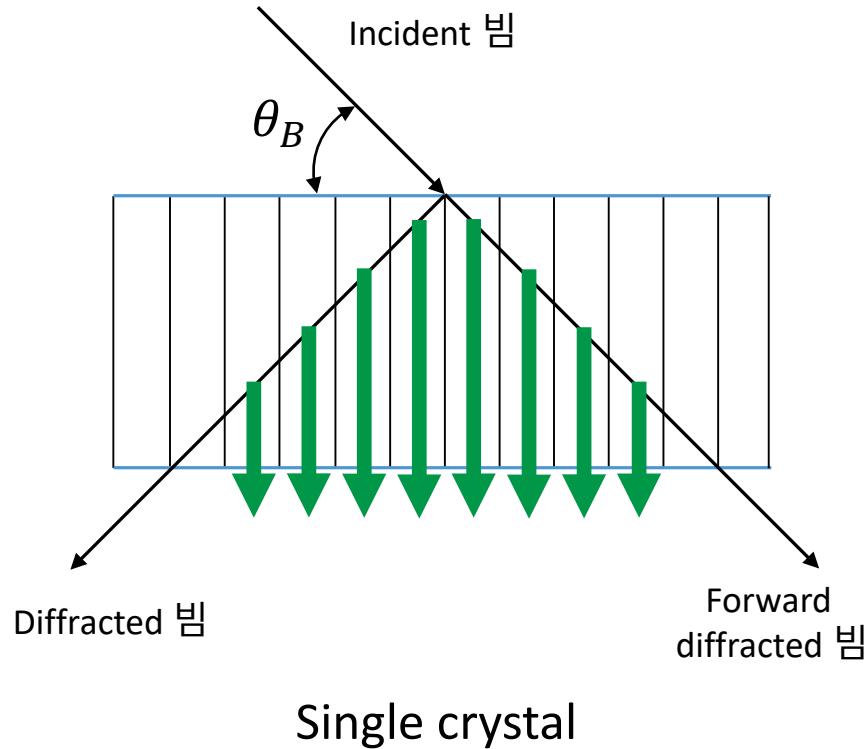


Symm. Transmission image (anomalous transmission)
Sapphire wafer, 2 mm thick, $\mu_0 t = 25$ at 8 keV
(D1: \perp near exit surface, D2: \perp near entrance surface)

Anomalous transmission contrast (비정상 투과 변화에 의한 명암차이)



전위 영역의 격자변형



결합 영역에서 비정상 투과 소실에 의한 명암차이 개념도

• XRT 측정법

• X-ray topography (XRT) 측정법

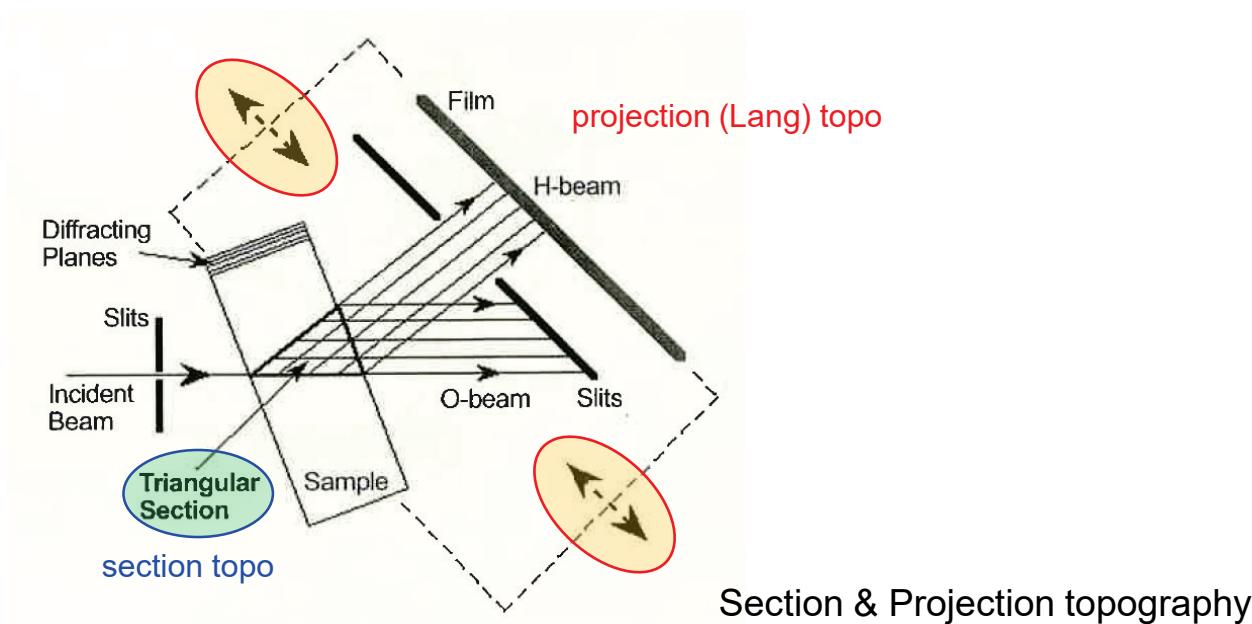
a) 투과법 (transmission): Section topo, Projection (Lang) topo

b) 반사법 (reflection) : Berg-Barrett topo, Double-crystal topo

a) 투과법 (transmission-diffraction geometry)

- Section topography: 단색빔, 좁은 슬릿 ($10 \mu\text{m}$)
- 전방회절 O-빔, 회절 H-빔의 두 빔이 만나는 삼각형 section 형성
- 삼각형 section의 이미지 관찰: 격자결함 등의 격자 변형으로 인한 이미지 contrast 형성
- 동역학회절의 Takagi-Taupin eq.으로 정량화 해석 가능

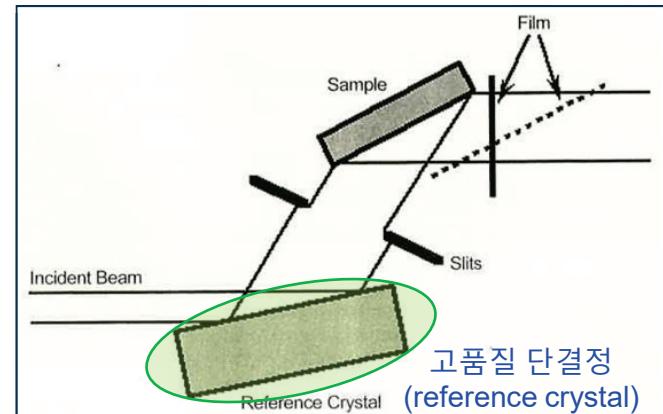
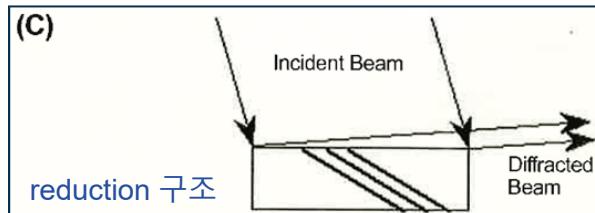
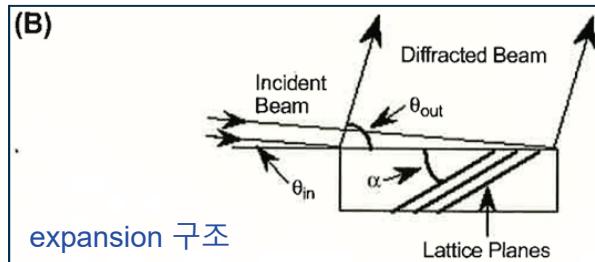
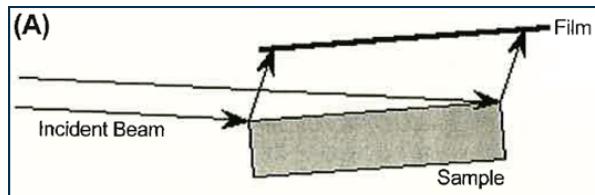
→ Projection (or Traverse) topography: 샘플과 film을 동시 scan, 샘플 전체 이미지 관찰 (슬릿: 0.25 mm)
: Lang (transmission) topo 또는 Lang camera 등으로 상업화



- X-ray topography (XRT) 측정법

- 투과법 (transmission): Section topo, Projection (Lang) topo
- 반사법 (reflection) : Berg-Barrett topo, Double-crystal topo
- 반사법 (reflection-diffraction geometry)
 - Berg-Barret topography

- 비대칭 회절 (asymmetric diffraction)을 이용하여 샘플을 scan 없이 시료 전체 이미지 형성
- Projection topo와 함께 실험실/연구실에서 널리 사용
- 고품질의 단결정 이용 double-crystal 구조로 이미지 분해능 향상
 - 분해능은 높지만 이미지 노출시간이 긴 단점 → 높은 강도의 방사광 소스 사용



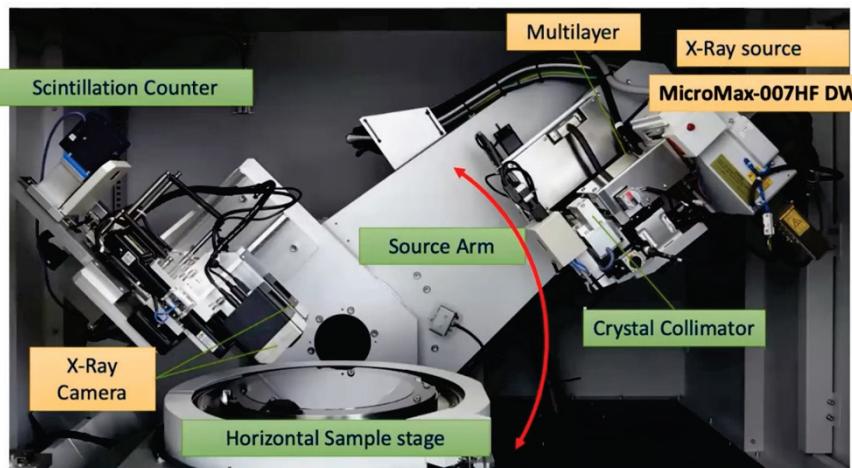
Double-crystal topography

Berg-Barrett topography

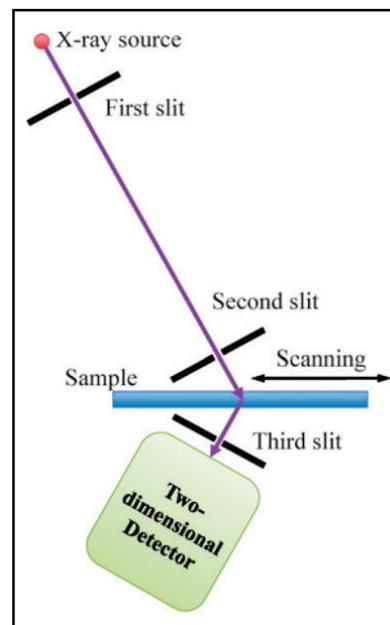
- X-ray topography (XRT) 측정 구조
- XRTmicron (RIGAKU)

X-ray Topography Imaging System

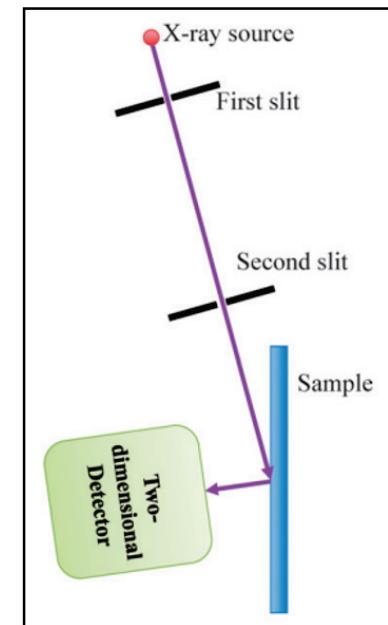
- Dual X-ray source: Cu and Mo
- 반사(Reflection) 및
투과(transmission) 측정



XRTmicron

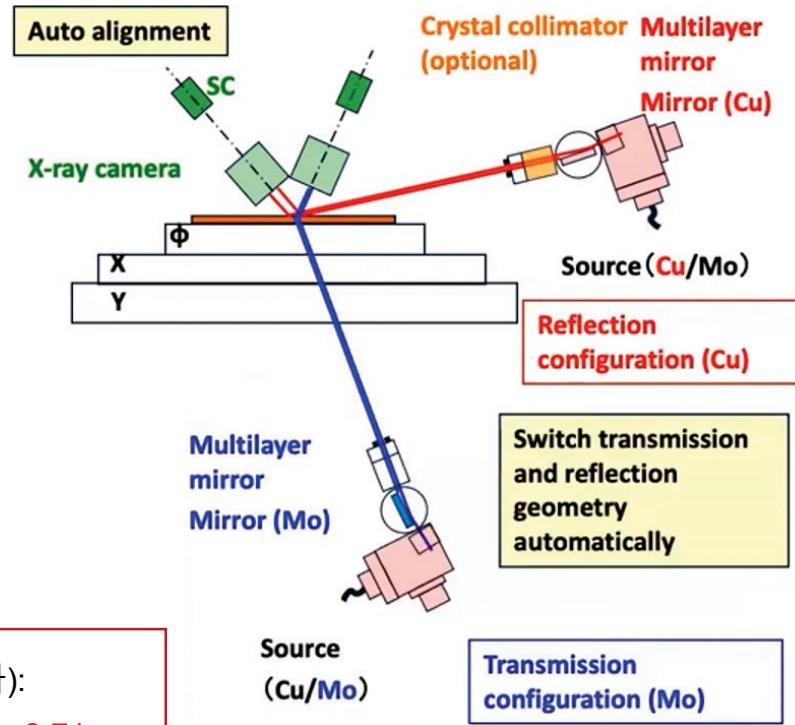


Transmission (Lang)
topography



Reflection (Berg-Barret)
topography

- X-ray topography (XRT) 측정 구조
- XRTmicron (RIGAKU)



($1/e$) X-선 침투깊이 (Si, 수직입사):

Cu Ka: $x = \sim 0.07$ mm, Mo Ka: $x = \sim 0.71$ mm

X-선 토포 시스템 (XRT micron)
(반사법: Cu/Mo 소스, 투과법: Mo 소스)

Rigaku Journal, 30(1), 2014

• 시료 준비 (Sample Preparation)

- 시료준비는 좋은 이미지를 얻기 위한 핵심 요소

- Flat, smooth and damage-free surface: 측정시료의 표면/내부 조직 이미지를 차단하지 않는 상태
- 특히 비대칭 회절 topo 측정은 표면 상태에 극히 민감
- 투과 topo는 내부 결함을 관찰함으로 표면 상태에 다소 덜 민감

- 일반적으로 polished and etched surface condition

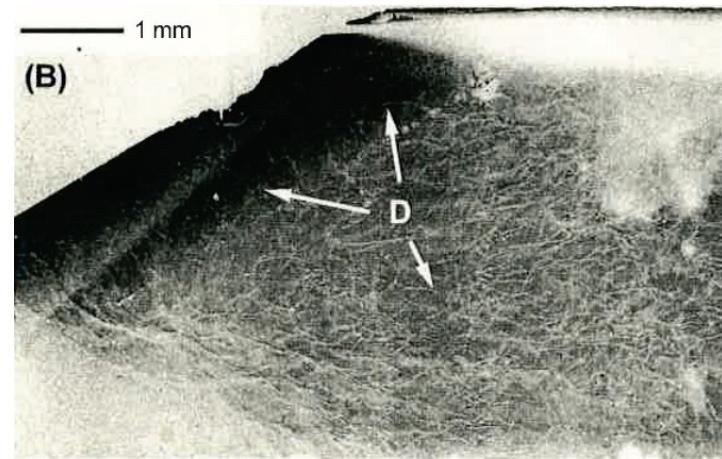
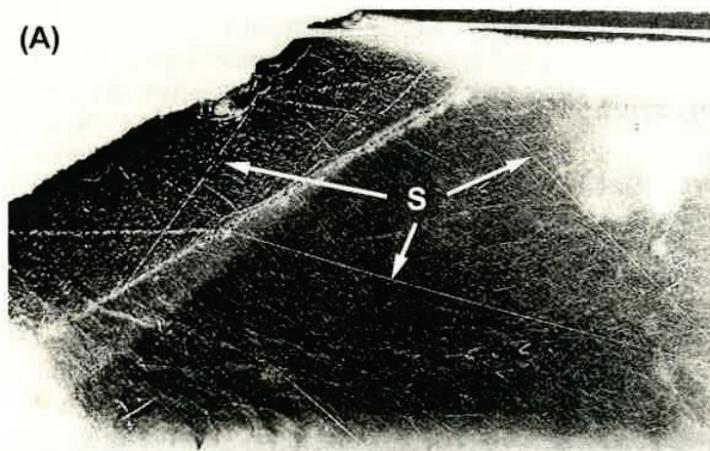


그림. (A) 폴리싱 후의 경면 상태의 투과 topo 이미지: scratches가 주도적이고 내부 결함 확인 어려움
(B) 폴리싱 및 에칭 후의 투과 topo 이미지: scratches가 없어지고 내부 전위 결함 확인 가능

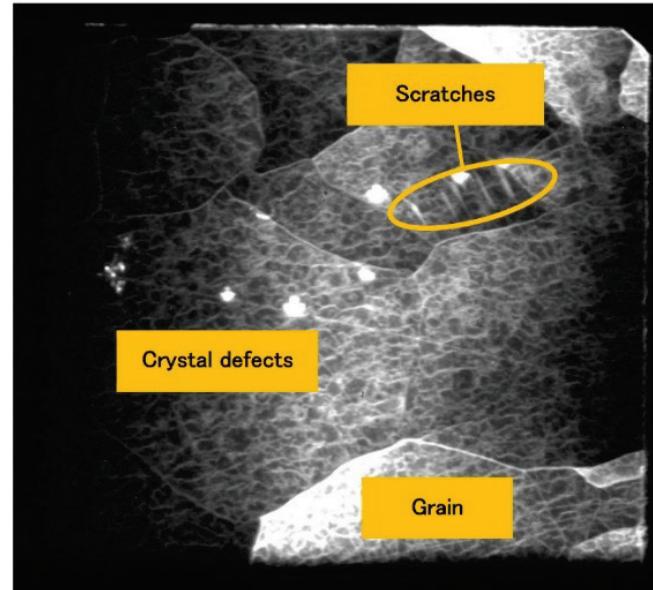
• XRT 이미지: 일반적인 예

• X-ray reflection topography

- MgO 024 reflection, 입사각 $\omega = 28.3^\circ$, 회절각 $2\theta = 109.8^\circ$, exposure time = 120 sec



MgO single crystal
(10 mm × 10 mm)



MgO (024) 반사 topo image

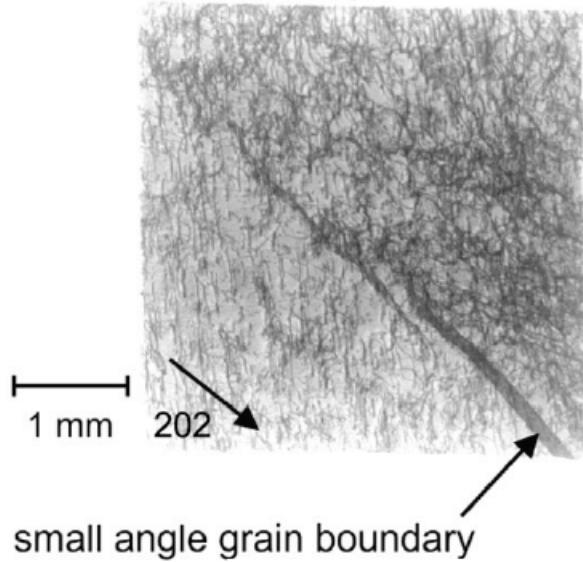
에피택시용 기판

- 박막 성장 전에 기판 품질 평가 필요
- 단결정?
- 에피택시용 기판으로 충분?

(Rigaku Application Note B-XRD2022)

- 투과 XRT

- 방사광 소스: white beam (백색광)
- 태양전지용 다결정 Si (multicrystalline Si)의 투과 토포 이미지

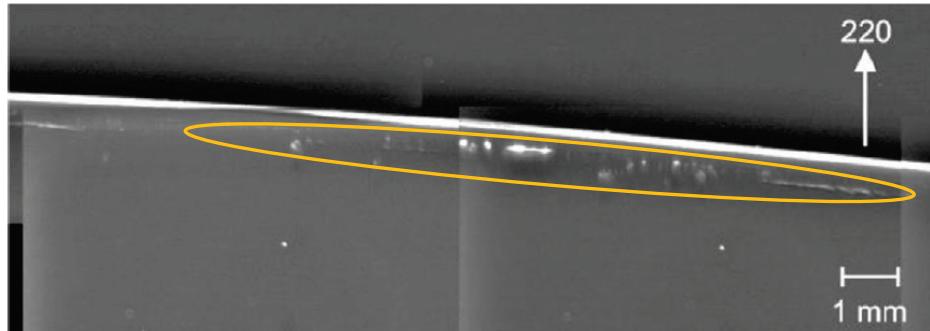


태양전지용 다결정 Si의 투과 토포 이미지

- (202) 회절면 이용
- X-ray film: Dark contrast → high intensity
- Small angle GB 및 dislocations 관찰

- 투과 XRT

- 방사광 소스: white beam (백색광)
- 450 mm (001) Si 웨이퍼의 투과 토포 이미지 일부: (220) 회절면 이용
- Full wafer mapping 이미지의 edge 일부

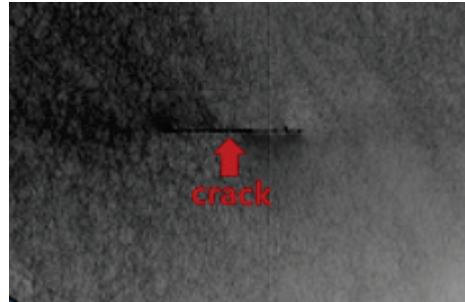


450 mm Si (001) 웨이퍼의 투과 토포 이미지

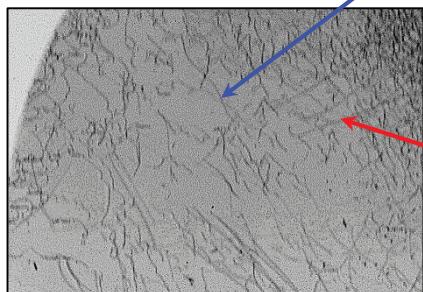
- (220) 회절면 이용
- 2D detector: Bright contrast → high intensity
- Microcracks 관찰 (\leftarrow edge grinding or wafer handling)
→ invisible by other characterization methods

- 투과 XRT

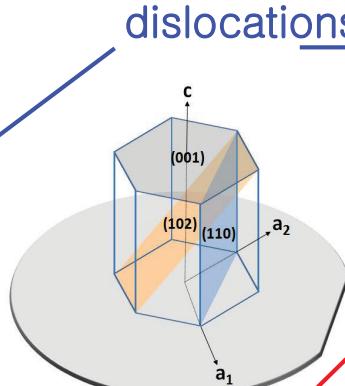
- Lang 투과법: Al₂O₃ (sapphire) wafer



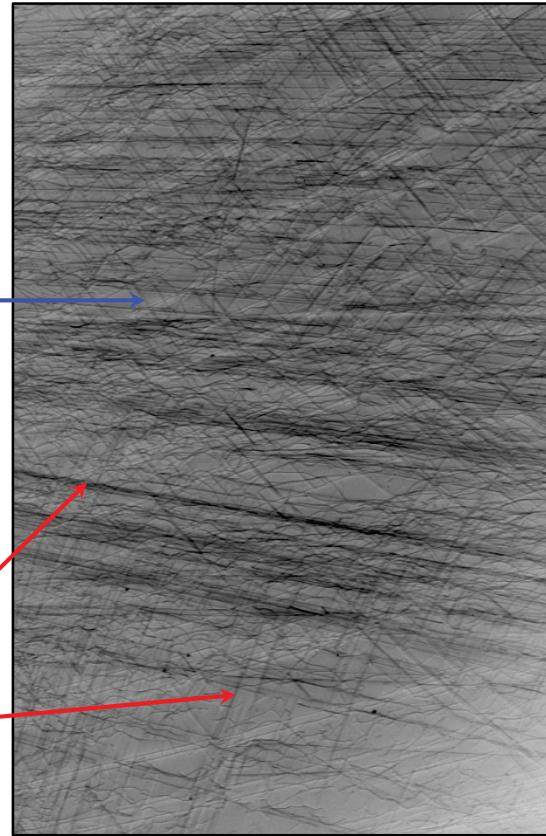
Al₂O₃ (102) 투과 토포



Al₂O₃ (330) 투과 토포



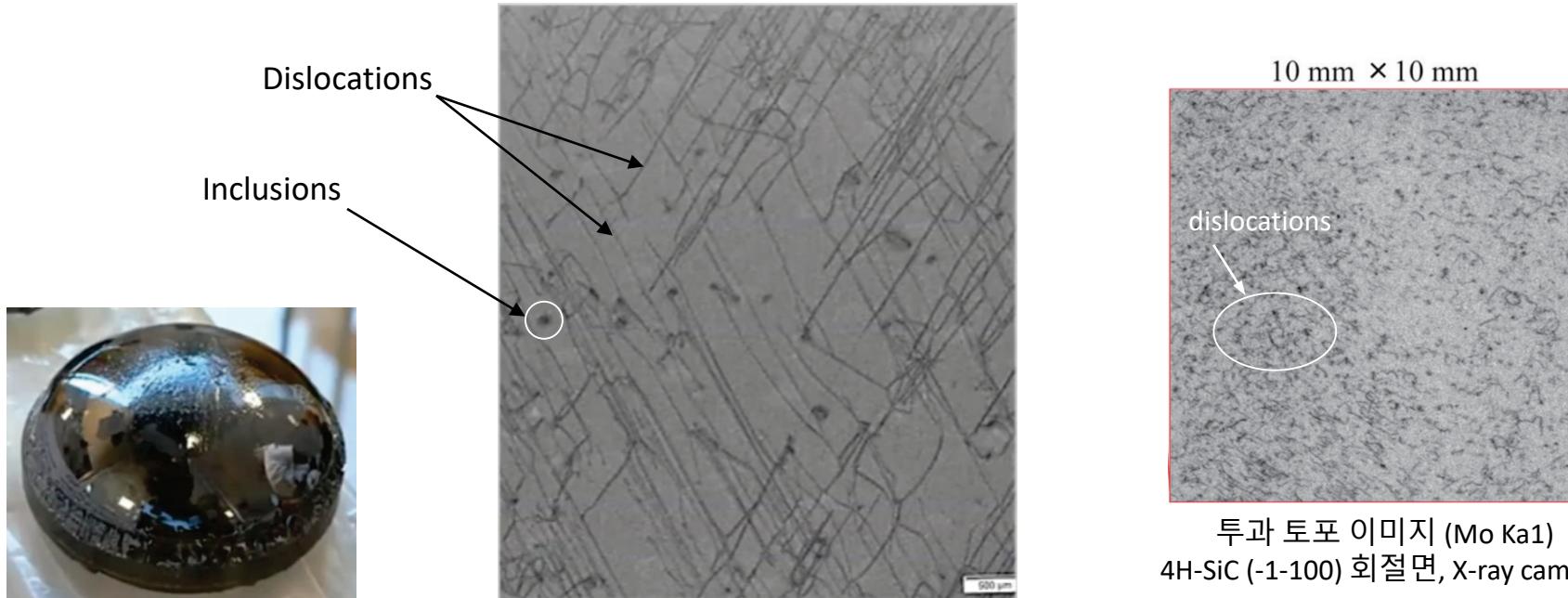
scratches



Al₂O₃ (110) 투과 토포, 전위 및 scratches
→ 표면 연마 상태 개선 필요

• SiC 토포 이미지: 예

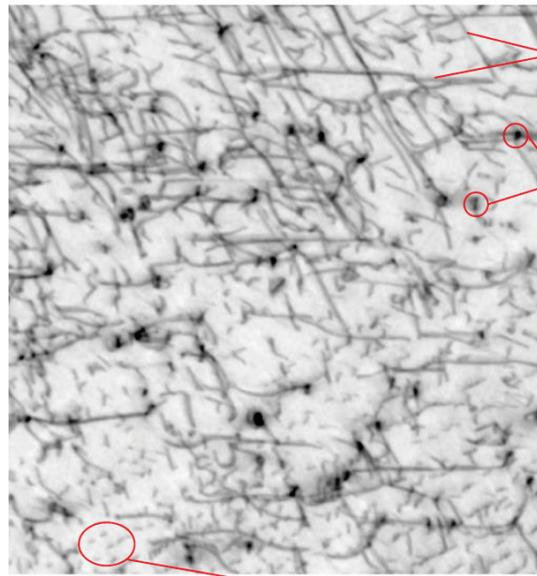
- SiC 단결정의 토포 이미지
 - 단결정 성장 후의 품질 평가



성장한 SiC 단결정 및 x-선 토포 이미지
- Dislocations 및 inclusions 관찰

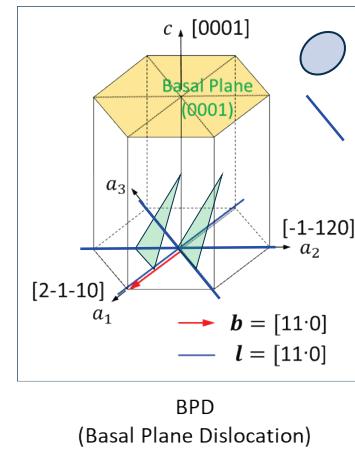
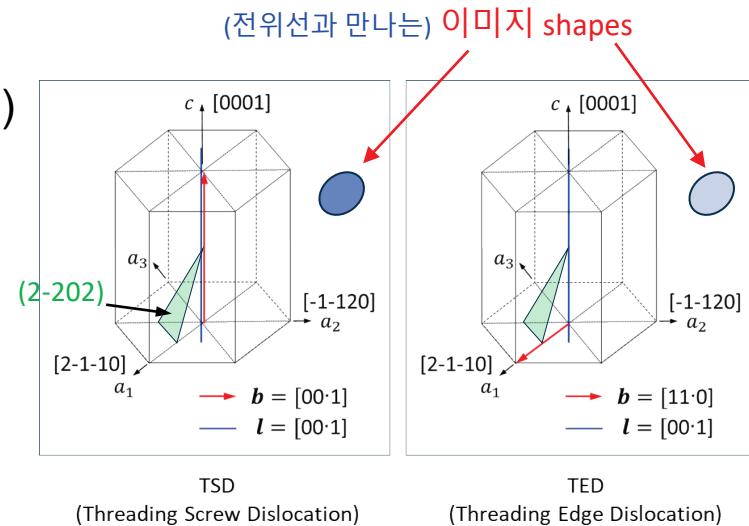
• SiC 토포 이미지

- SiC: hexagonal 결정구조
- (2-202) 투과 토포 이미지 (\leftarrow XRT micron)



투과 토포 이미지 (Mo Ka1)
4H-SiC (2-202) 회절면, X-ray camera

$g \bar{2}202$
 g : diffraction vector
(scattering vector)



전위 종류 판별법

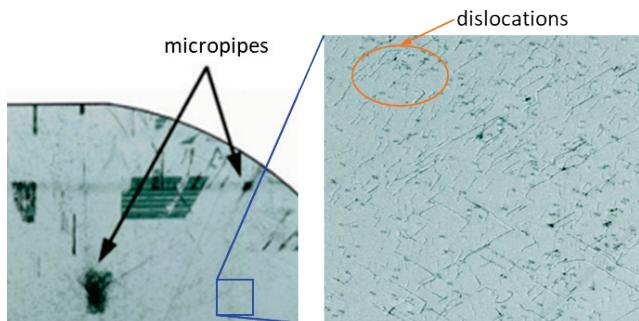
scalar product of g and b

$$g \cdot b = 0 \rightarrow \perp : \text{invisible}$$

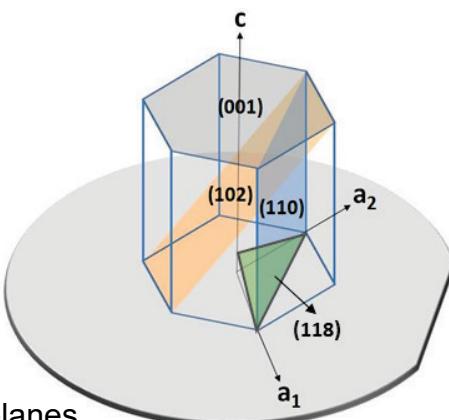
$$g \cdot b \neq 0 \rightarrow \perp : \text{visible}$$

- SiC 토포 이미지

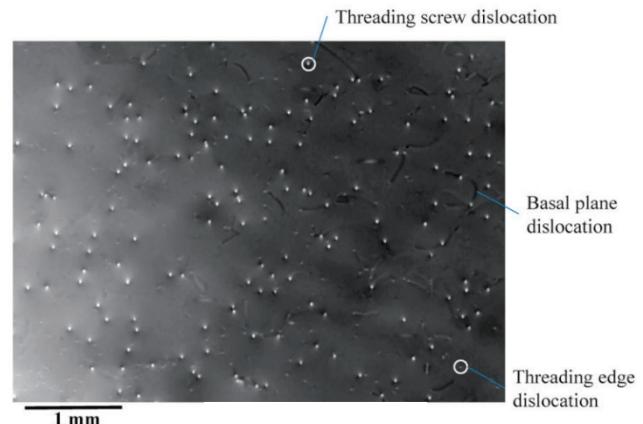
- (-1100) 투과 토포 이미지
- (-1-128) 반사 토포 이미지



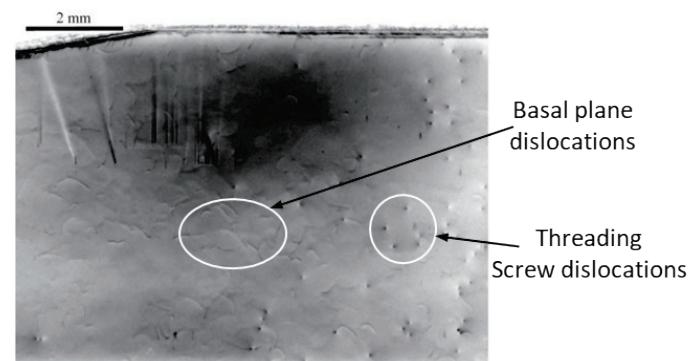
Lang 투과 토포 이미지
(4H-SiC (-1100) 회절면, 랩소스, 필름)



SiC (11·0) & (118) planes



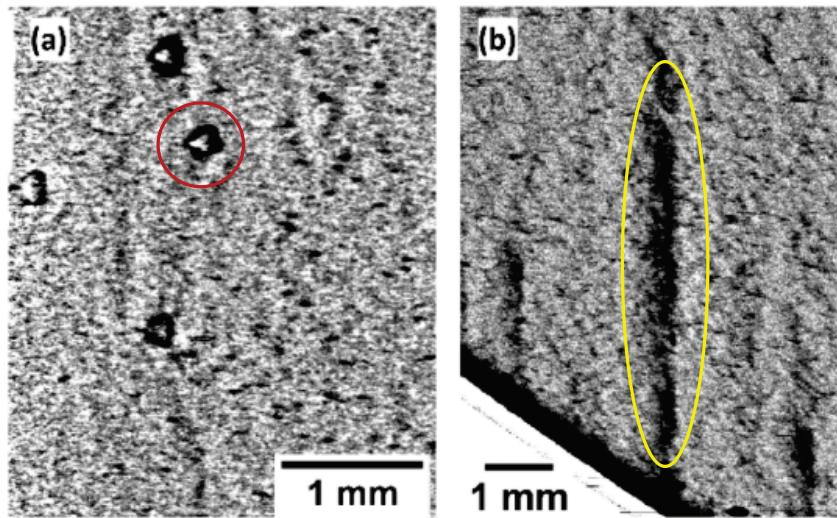
반사 토포 이미지
(SiC (-1-128) 회절면, 방사광)



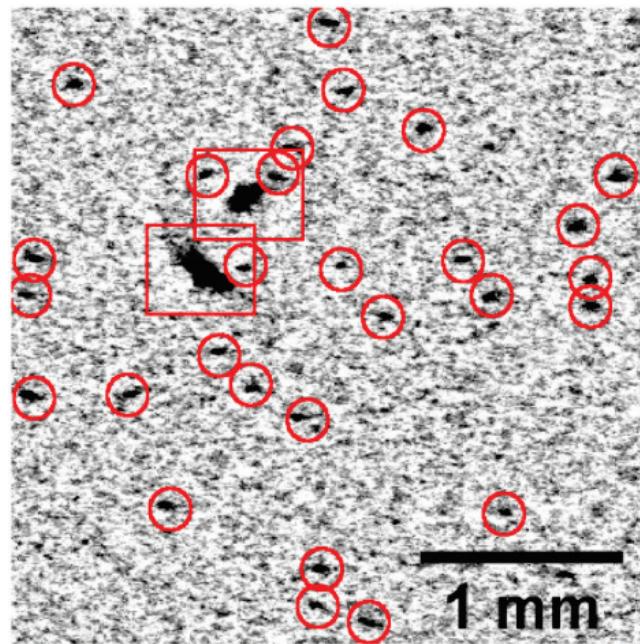
고분해능 반사 토포 이미지 (Cu K α 1)
(4H-SiC 에피, (11-28) 회절면, X-ray camera)

- SiC 토포 이미지

- 적층결함 (stacking faults)
- TSD 이미지 및 자동 분석

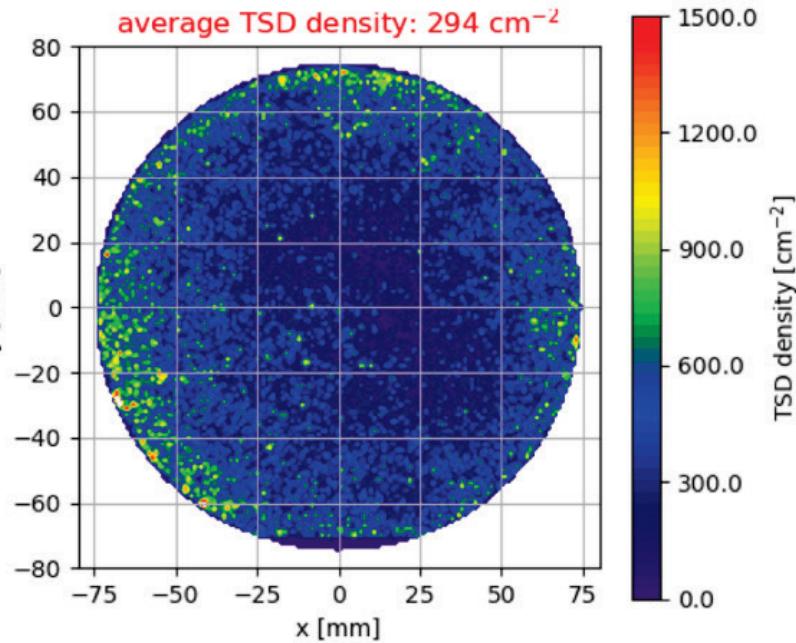
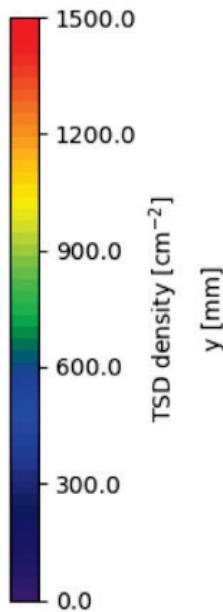
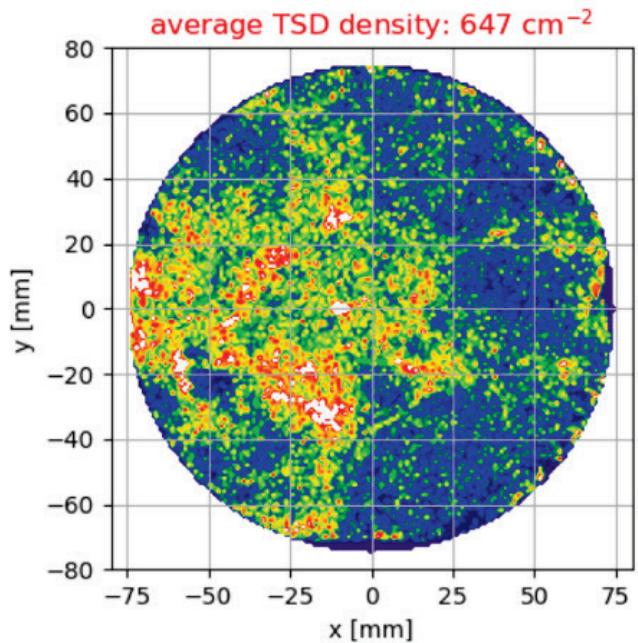


에피층의 다른 종류의 적층결함 (SF)
a) Triangle-shaped SF, b) bar-shaped SF



→ 자동 분석 algorithm 사용

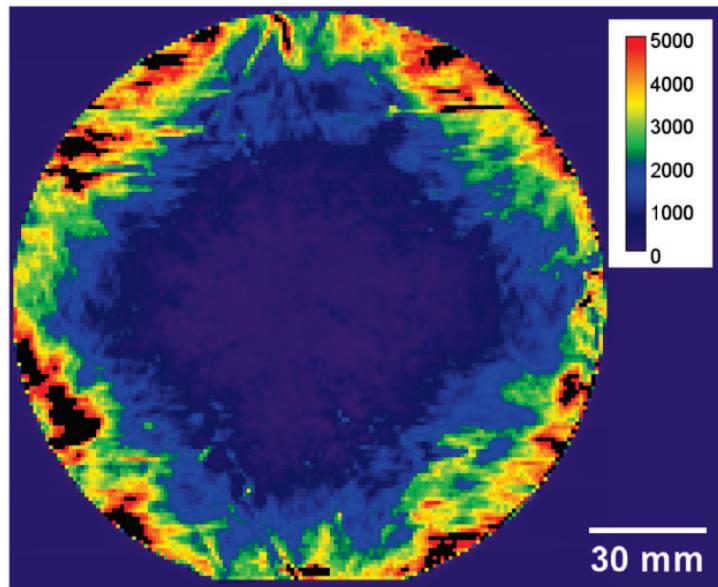
- SiC 토포 이미지
 - Full-wafer TSD density maps
 - TSD 자동 분석 알고리즘



TSD density [cm^{-2}]

TSD 자동 분석 algorithm을 사용하여 작성한
Full-wafer TSD density maps, a) with higher TSD density, b) with lower TSD density

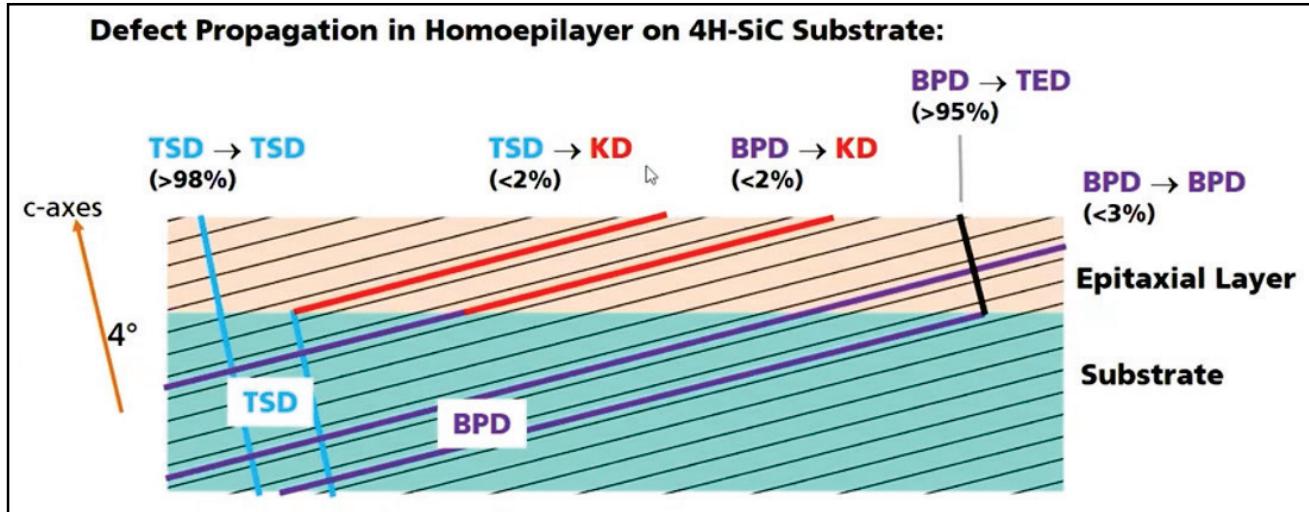
- SiC 토포 이미지
 - Full-wafer BPD density maps
 - BPD 자동 분석 알고리즘



BPD (basal plane dislocation) density map

• 왜 SiC 결함 분석 ?

- SiC 기판의 결함 전파 (defect propagation)
 - 에피층에서 TSD, TED, BPD & KD 등으로 전파
 - Device-Killing Defects (KD): stacking faults, carrots, triangle 등



~ 2% of TSD and BPD convert into killing defects

TSD: Threading Screw Dislocation
BPD: Basal Plane Dislocation
TED: Threading Edge Dislocation
KD: Device-Killing Defect
(i.e. Stacking Faults, Carrots, Triangle, etc.)

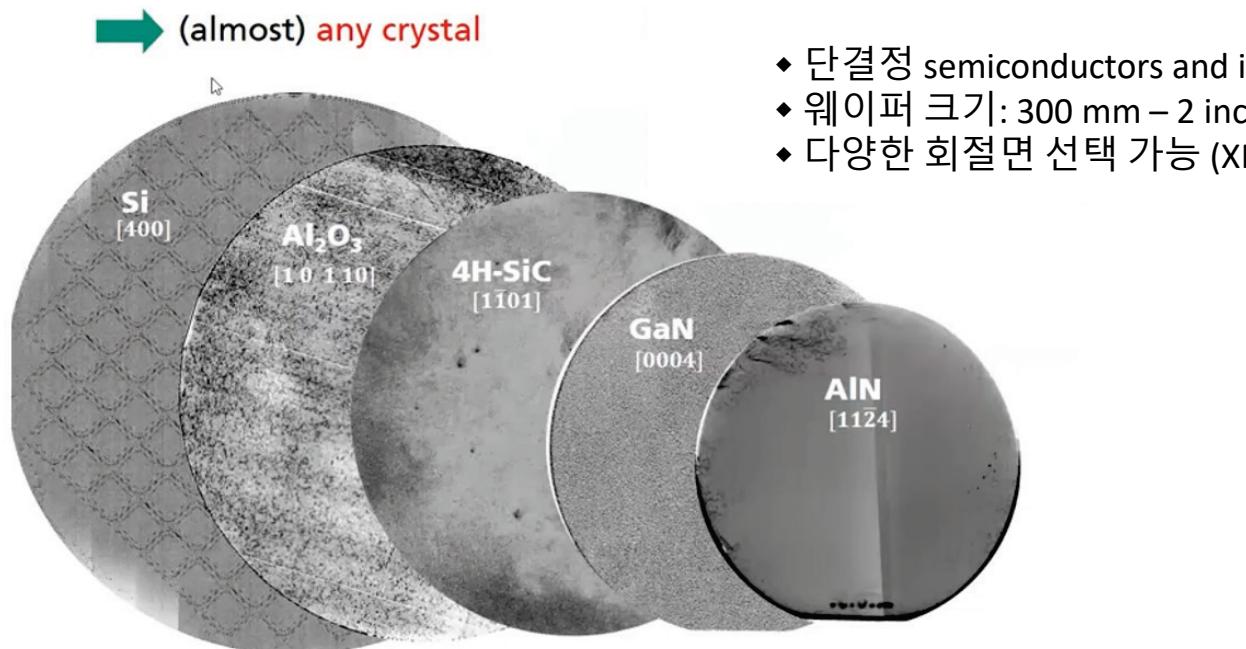
5. 정리

- XRT 기타 특징: 분해능, 전위밀도 측정 한계 등
- Summary

• XRT 응용 측정 소재 ?

• XRT 응용 측정 소재

- 단결정 또는 단결정에 가까운 결정
- Si, sapphire, 4H-SiC, GaN, AlN, GaAs & Ge...



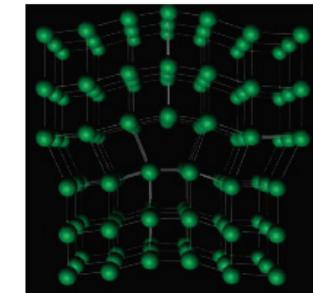
- ◆ 이외에도: InP, CdTe, CaF₂ 등

- ◆ 단결정 semiconductors and insulators
- ◆ 웨이퍼 크기: 300 mm – 2 inch (XRTmicron)
- ◆ 다양한 회절면 선택 가능 (XRTmicron)

• XRT 이미지 분해능 및 검출한계 ?

• XRT 이미지

- 전위 (dislocations): 원자 스케일의 결함 (atomic-scale defect)
→ 전위 이미지: μm 스케일 이미지

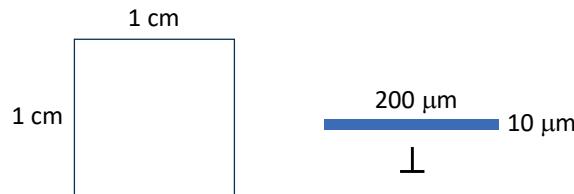


전위 영역의 격자변형

→ Effective image size: $W = bg\xi/2\pi$
(b : burgers vector, g : diffraction vector, ξ : extinction length (소광거리))
→ (예) AI 단결정 (FCC, $a=0.404 \text{ nm}$, $\mathbf{b}=1/2[110]$, Cu K α) → 전위 이미지 크기: $4.7 \mu\text{m}$

→ 전위 주변의 strain field, 소광거리와 XRT의 높은 strain 민감도 (sensitivity)

▪ 검출한계 ?



→ XRT에서의 전위밀도 검출한계 (upper detection limit): $\sim 10^4 - 10^5/\text{cm}^2$

• Dislocation 확인을 위해 왜 XRT가 요구?

- 전위밀도 ρ (dislocation density) 측정한계 비교
 - XRT, TEM & HRXRD 비교

XRT, TEM, HRXRD의 전위밀도 측정한계 비교

	측정한계 (ρ / cm^2)		참고 사항
	Lower limit	Upper limit	
XRT	0	$10^4 \sim 10^5$	
TEM	$\sim 10^4$	10^{10}	
HRXRD	$\sim 10^4$	-	Hirsch's model 적용 (FWHM $\rightarrow \rho$)

* 참고: 상용 SiC 웨이퍼의 일반적인 전위밀도

	b	$\rho (\text{/cm}^2)$
TSD	[00·1]	$10^2 - 10^3$
TED	$1/3 \langle 11 \cdot 0 \rangle$	$10^3 - 10^4$
BPD	$1/3 \langle 11 \cdot 0 \rangle$	$10^3 - 10^4$

→ For higher quality wafer ($\rho < 10^4$)
XRT characterization is needed

(The Rigaku Journal, 29(1), 2013)

• XRT vs. TEM 특징 비교

XRT vs. TEM

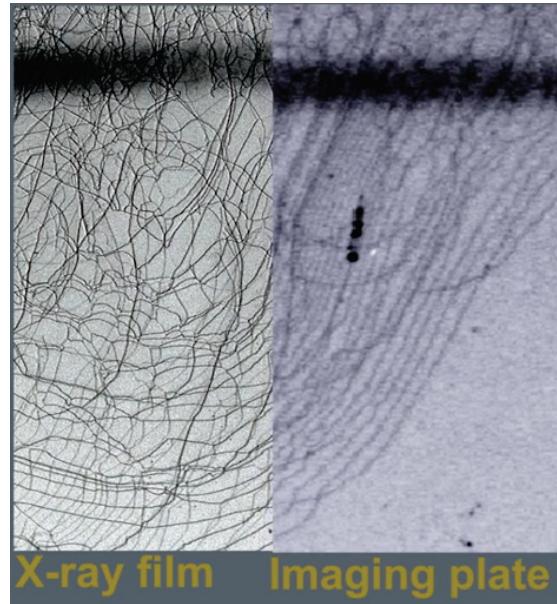
비교 항목	XRT	TEM
공간 분해능 (spatial resolution)	μm	nm
관찰 영역 (Field of view)	mm to 수 cm	μm
변형/방위 민감도 (Strain/misorientation sensitivity)	10^{-3} to 10^{-7}	10^{-2} to 10^{-3}
측정 전위밀도 ($/\text{cm}^2$)	0 to 10^5	10^4 to 10^{10}
Sample size	Large size possible (e.g. 300 mm full wafers)	Small size
샘플 파괴 여부	Non-destructive	Destructive

X-ray Bragg diffraction imaging (“topography”) at the
ESRF

• Resolution of XRT Detectors

• XRT Detectors and Resolutions

Detector	Typical Resolution (μm)
X-ray Film	2 ~ 5
Imaging Plate	50
Digital Detector	50 (20 - XRTmicron)



● Summary

- XRT 기술은 현재 국내에서 SK 실트론, 포항 가속기연구소에서 측정/연구로 활용하고, 아직 대중화되지 않은 측정법이나 전력반도체용 SiC 단결정을 비롯한 단결정 산업의 발전과 함께 XRT 응용성도 크게 확대될 가능성 큼
- 더 깊이 있는 이해/도움이 필요하신 분은
 - 언제 어디서든 얘기하시면 됩니다~^^
 - 세부 주제 (예: X-선 침투깊이 등), 또는 궁금 내용의 개별 미팅도 가능합니다~^^

THANK YOU
FOR YOUR ATTENTION !

Korea I.T.S. Co., Ltd.
Application Group

김창수 박사/고문

010-5545-5323
changsoo.kim@koreaits.com