

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特許公報(B2)

(11) 特許番号

特許第6153623号
(P6153623)

(45) 発行日 平成29年6月28日(2017.6.28)

(24) 登録日 平成29年6月9日(2017.6.9)

(51) Int. Cl. F I
 GO 1 N 23/207 (2006.01) GO 1 N 23/207
 HO 1 L 21/66 (2006.01) HO 1 L 21/66 L

請求項の数 9 (全 24 頁)

(21) 出願番号	特願2015-542932 (P2015-542932)	(73) 特許権者	512328201
(86) (22) 出願日	平成25年5月31日 (2013.5.31)		コリア リサーチ インスティテュート
(65) 公表番号	特表2016-505816 (P2016-505816A)		オブ スタンダーズ アンド サイエンス
(43) 公表日	平成28年2月25日 (2016.2.25)		大韓民国 デジョン 34113 ユソン
(86) 国際出願番号	PCT/KR2013/004828		ーグ ガジョンーロ 267
(87) 国際公開番号	W02014/077480	(74) 代理人	100106002
(87) 国際公開日	平成26年5月22日 (2014.5.22)		弁理士 正林 真之
審査請求日	平成27年5月15日 (2015.5.15)	(74) 代理人	100120891
(31) 優先権主張番号	10-2012-0130433		弁理士 林 一好
(32) 優先日	平成24年11月16日 (2012.11.16)	(72) 発明者	キム チャン ス
(33) 優先権主張国	韓国 (KR)		大韓民国 ギョンギード 463-869
			ソンナムーシ ブンダンーグ ジョンジ
			ャイルーロ 15 ナンバー101-16
			01

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 高分解能X線ロックンクカーブ測定を用いた単結晶ウェーハの面方位測定方法

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

単結晶の結晶面垂直軸とウェーハの表面垂直軸とがなす面方位を決定するための測定方法であって、

前記ウェーハをその表面垂直軸を中心として所定の方位角()だけ回転させて、最適のブラッグ(Bragg)回折条件下で選択した回折平面の高分解能X線ロックンクカーブを測定し、前記高分解能X線ロックンクカーブの最大ピークが現れる位置()が、下記式により決定されることを特徴とする、高分解能X線ロックンクカーブ測定を用いた単結晶ウェーハの面方位測定方法。

【数1】

$$\omega_{\phi} = \omega_0 + \Delta\omega_{\phi} = \theta_B + \delta_0 - \delta_{P(R)}$$

(式中、 ω_0 はX線の入射角、 θ_B はブラッグ角、 δ_0 は測定装置の回転軸と表面垂直軸とがなす偏心角、 $\delta_{P(R)}$ は測定装置の回転軸と だけ回転された回折平面上の表面垂直軸との角度を表す。)

【請求項2】

前記ウェーハの表面垂直軸の傾斜($\delta_{S(R)}$)が、下記式により決定されることを特徴とする、請求項1に記載の高分解能X線ロックンクカーブ測定を用いた単結晶ウェーハ

の面方位測定方法。

【数 2】

$$\delta_{S(R)} \cong \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) - \kappa_{S(R)}$$

(式中、 ϕ_s は表面垂直軸の位相、 $\kappa_{S(R)}$ は幾何学的微小角成分を表す。)

【請求項 3】

前記方位角 $\phi = 0$ であるときに、前記高分解能 X 線ロッキングカーブの最大ピークが現れる位置 ($\phi = 0$) が、下記式により決定されることを特徴とする、請求項 1 に記載の高分解能 X 線ロッキングカーブ測定を用いた単結晶ウェーハの面方位測定方法。

10

【数 3】

$$\omega_\phi \cong \theta_B + \delta_0 \cdot \cos(-\phi_s) - \kappa_{S(R)}(\phi=0) - \delta_{P(R)}$$

(式中、 ϕ_s は表面垂直軸の位相、 $\kappa_{S(R)}$ は幾何学的微小角成分を表す。)

【請求項 4】

前記回折平面上において、 ϕ 関数を有する結晶面軸と回転軸との角度 ($\phi_{P(R)}$) が、下記式により決定されることを特徴とする、請求項 1 に記載の高分解能 X 線ロッキングカーブ測定を用いた単結晶ウェーハの面方位測定方法。

20

【数 4】

$$\delta_{P(R)} \cong \delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p) + \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) - \kappa_{P(R)}$$

(式中、 $\delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p)$ は表面垂直軸の周りに沿って移動する結晶面軸の角度成分、 $\delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s)$ は回転軸の周りに沿って移動する表面垂直軸の角度成分を表す。)

【請求項 5】

30

前記ウェーハが回転する回転軸の偏心を考慮すると、前記高分解能 X 線ロッキングカーブの最大ピークが現れる位置 ($\phi = 0$) は、下記式により決定されることを特徴とする、請求項 1 に記載の高分解能 X 線ロッキングカーブ測定を用いた単結晶ウェーハの面方位測定方法。

【数 5】

$$\omega_\phi \cong -\delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p) - \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) + \kappa_{P(R)}$$

$$+ \theta_B + \delta_0 \cdot \cos(-\phi_s) - \kappa_{S(R)}(\phi=0)$$

40

(式中、 δ_1 は表面垂直軸に対して結晶面軸がなす角度 (表面角)、 ϕ_p は表面角が現れる方向、 δ_0 は回転軸と表面垂直軸とがなす偏心角、 ϕ_s は偏心軸の方向、 $\kappa_{P(R)}$ は微小角成分、 θ_B はブラッグ角、残りは定数を表す。)

【請求項 6】

前記ウェーハの表面角 (ϕ_1) と、前記表面角が現れる方向 (ϕ_p) が下記式により決定され、

【数 6】

$$\omega_{\phi} - \omega'_{\phi} \cong 2\delta_1 \cdot \sin \frac{\Delta\phi_p}{2} \cdot \sin \left(\phi - \phi_p - \frac{\Delta\phi_p}{2} \right)$$

(式中、 ϕ_p はウェーハホルダーの設計時に適用された位相変化値、 $\omega_{\phi} - \omega'_{\phi}$ は前記 ϕ_p に応じてそれぞれ測定された高分解能 X 線ロックアップカーブのピークの角度差を表す。)

前記方位角 () 関数に応じたウェーハの面方位の変位 ($\delta_{P(S)}$) が、下記式により決定されることを特徴とする、請求項 5 に記載の高分解能 X 線ロックアップカーブ測定を用いた単結晶ウェーハの面方位測定方法。

10

【数 7】

$$\delta_{P(S)} \cong \delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p)$$

【請求項 7】

前記高分解能 X 線ロックアップカーブは、 $\phi = \phi_1$ であるときと、 $\phi = \phi_2$ であるときに 2 回測定され、前記 ϕ_p が下記式により決定されることを特徴とする、請求項 6 に記載の高分解能 X 線ロックアップカーブ測定を用いた単結晶ウェーハの面方位測定方法。

20

【数 8】

$$\Delta\phi_p = \phi_2 - \phi_1$$

【請求項 8】

前記方位角 () 関数に応じた回転軸から表面垂直軸の傾斜変位 ($\delta_{S(R)}$) が、下記式により決定されることを特徴とする、請求項 6 に記載の高分解能 X 線ロックアップカーブ測定を用いた単結晶ウェーハの面方位測定方法。

【数 9】

$$\delta_{S(R)} \cong \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s)$$

30

(式中、 δ_0 は回転軸と表面垂直軸とがなす偏心角、 ϕ_s は偏心軸の方向を表す。)

【請求項 9】

$0 \sim 180^\circ$ 方向に沿った前記ウェーハの面方位の角度成分 ($\delta_1 \cdot \cos \phi_p$) は、下記式により決定され、

【数 10】

$$\delta_1 \cdot \cos \phi_p = \frac{1}{2} (\omega'_0 - \omega_0)$$

40

$90 \sim 270^\circ$ 方向に沿った前記ウェーハの面方位の角度成分 ($\delta_1 \cdot \sin \phi_p$) は、下記式により決定され、

【数 1 1】

$$\delta_1 \cdot \sin \phi_p = \frac{1}{2} (\omega'_{90} - \omega_{90})$$

$\phi_p = 180^\circ$ の 2 つのサンプル方位のそれぞれで、 90° 間隔で高分解能 X 線ロッキングカーブを 2 回測定するだけで単結晶ウェーハの面方位を測定することができることを特徴とする、請求項 6 乃至 8 の何れか一項に記載の高分解能 X 線ロッキングカーブ測定を用いた単結晶ウェーハの面方位測定方法。

10

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、単結晶ウェーハの面方位測定方法に関し、より詳細には、高分解能 X 線回折法のロッキングカーブ測定を用いて、ウェーハの表面角および表面角の方向を決定し、測定装置の回転軸とウェーハの表面垂直軸とがなす偏心角および方向も測定できる、高分解能 X 線ロッキングカーブ測定を用いた単結晶ウェーハの面方位測定方法に関する。

【背景技術】

【0002】

20

半導体素子製作用のシリコン、サファイア、ガリウムヒ素などの単結晶ウェーハは、所定の結晶学的な方向性を有するように製作される。単結晶ウェーハは、ウェーハの面方位に関する一般的な情報を提供し、単結晶が良好に加工されているため、X 線を用いてウェーハの軸方位を決定することができる。

【0003】

通常の単結晶ウェーハは、(100) ウェーハまたは (111) ウェーハに対して表面と結晶面とがなす角度が $0 \pm 0.5^\circ$ と $4 \pm 0.5^\circ$ 、または水平面方位 $0.2 \pm 0.05^\circ$ と垂直面方位 $0 \pm 0.1^\circ$ などの規格にしたがって生産されている。一般に、半導体素子の材料として用いられる通常の単結晶ウェーハとしては、表面の垂直軸がシリコン結晶面軸に対して $0^\circ \sim 4^\circ$ 程度傾いたものが用いられる。このような角度 (表面角: surface orientation、off-cut angle、surface miscut または surface misorientation) とウェーハの表面垂直軸が傾いた方向 (off-cut または miscut direction) は、製造された半導体素子の物性に影響を与える。そのため、このような角度および方向、すなわち、面方位を正確に測定することは非常に重要であり、素子の生産性を決定する重要な要因であるため、半導体素子用ウェーハ生産ラインで重要に制御されている。

30

【0004】

上記のような理由で、面方位を測定および検査する装置の正確さは、生産ラインの生産性だけでなく、製品の品質を決定する決定的な要因となる。したがって、研磨およびポリッシング (polishing) などの後続加工工程を経る前に、ウェーハの面方位を測定する装置を正確に校正する必要がある。

40

【0005】

このウェーハの表面垂直軸と結晶面の垂直軸とがなす正確な角度と、その角の方向を正確に決定するために、X 線回折分析装置 (以下、XRD) を用いる測定法が要求されている。

【0006】

一方、XRD を用いて単結晶ウェーハの結晶学的な面方位を測定する規格は、標準手順書 ASTM F2687a (Standard Test Method for Determining the Orientation of a Semiconductive Single Crystal) に規定されている。ASTM F26

50

87a規格は、半導体単結晶の結晶学的な方位を測定する規格であって、XRDを用いる方法と光学的な方法について記述している。XRDを用いる方法には、半導体単結晶の方位を測定するためのX線回折理論、測定機器、測定方法、分析方法などの手順が記述されている。

【0007】

しかし、この規格は、ウェーハの表面垂直軸と測定装置の回転軸とが互いに同一であるという仮定の下で記述されたものであり、通常の場合は、ウェーハの表面垂直軸と測定装置の回転軸とが互いに一致しないため、一致していない角度だけの測定誤差をもたらす。したがって、高精度の面方位が要求される単結晶ウェーハの表面垂直軸と測定装置の回転軸とが互いに大きく異なる場合、ウェーハの面方位測定において大きい不正確さをもたらすという問題点がある。

10

【先行技術文献】

【特許文献】

【0008】

【特許文献1】韓国特許出願公開第10 2007 0074971号

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0009】

本発明は、上記の問題点を解決するためになされたものであって、本発明の目的は、高分解能X線回折法のロッキングカーブ測定を用いて、単結晶ウェーハの面方位、すなわち、表面角だけでなく表面角の方向も高精度に決定することができる単結晶ウェーハの面方位測定方法を提供することにある。

20

【0010】

特に、本発明は、面方位測定装置の回転軸とウェーハの表面垂直軸とが互いに一致しない場合にも、面方位標準物質を用いて上記2つの軸を整列しなくても、上記の2つの軸の偏心を考慮してウェーハの面方位を正確に測定することができる方法を提供するとともに、測定装置の回転軸とウェーハの表面垂直軸とが互いになす角度およびその方向も測定できる、高分解能X線ロッキングカーブ測定を用いた単結晶ウェーハの面方位測定方法を提供する。

【課題を解決するための手段】

30

【0011】

本発明の単結晶ウェーハの面方位測定方法は、単結晶の結晶面垂直軸とウェーハの表面垂直軸とがなす面方位を決定するための測定方法であって、前記ウェーハをその表面垂直軸を中心として所定の回転角()だけ回転させて、最適のブラッグ(Bragg)回折条件下で選択した回折平面の高分解能X線ロッキングカーブを測定し、前記高分解能X線ロッキングカーブの最大ピークが現れる位置()が、下記式により決定されることを特徴とする。

【0012】

【数1】

$$\omega_{\phi} = \omega_0 + \Delta\omega_{\phi} = \theta_B + \delta_0 - \delta_{P(R)}$$

40

(式中、 ω_0 はX線の入射角、 θ_B はブラッグ角、 δ_0 は回転軸と表面垂直軸とがなす偏心角、 $\delta_{P(R)}$ は測定装置の回転軸と だけ回転された回折平面上の表面垂直軸との角度を表す。)

【0013】

また、前記ウェーハの表面垂直軸の傾斜($\delta_{S(R)}$)が、下記式により決定されることを特徴とする。

【0014】

50

【数2】

$$\delta_{S(R)} \cong \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) - \kappa_{S(R)}$$

(式中、 ϕ_s は表面垂直軸の位相、 $\kappa_{S(R)}$ は幾何学的微小角成分を表す。)

【0015】

また、前記回転角 $\theta_B = 0$ であるときに、前記高分解能X線ロックアップカーブの最大ピークが現れる位置 (ϕ) が、下記式により決定されることを特徴とする。

【0016】

【数3】

$$\omega_\phi \cong \theta_B + \delta_0 \cdot \cos(-\phi_s) - \kappa_{S(R)}(\phi=0) - \delta_{P(R)}$$

(式中、 ϕ_s は表面垂直軸の位相、 $\kappa_{S(R)}$ は幾何学的微小角成分を表す。)

【0017】

また、前記回折平面上において、 ω_ϕ 関数を有する結晶面軸と回転軸との角度 ($\phi_{P(R)}$) が、下記式により決定されることを特徴とする。

【0018】

【数4】

$$\delta_{P(R)} \cong \delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p) + \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) - \kappa_{P(R)}$$

(式中、 $\delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p)$ は表面垂直軸の周りに沿って移動する結晶面軸の角度成分、 $\delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s)$ は回転軸の周りに沿って移動する表面垂直軸の角度成分を表す。)

【0019】

この際、前記ウェーハが回転する回転軸の偏心を考慮すると、前記高分解能X線ロックアップカーブの最大ピークが現れる位置 (ϕ) は、下記式により決定されることを特徴とする。

【0020】

【数5】

$$\omega_\phi \cong -\delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p) - \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) + \kappa_{P(R)}$$

$$+ \theta_B + \delta_0 \cdot \cos(-\phi_s) - \kappa_{S(R)}(\phi=0)$$

(式中、 δ_1 は表面垂直軸に対して結晶面軸がなす角度 (表面角)、 ϕ_p は表面角が現れる方向、 δ_0 は回転軸と表面垂直軸とがなす偏心角、 ϕ_s は偏心軸の方向、 $\kappa_{P(R)}$ は微小角成分、 θ_B はブラッグ角、残りは定数を表す。)

【0021】

また、前記ウェーハの表面角 (δ_1) と、前記表面角が現れる方向 (ϕ_p) が下記式により決定され、

10

20

30

40

【数6】

$$\omega_{\phi} - \omega'_{\phi} \cong 2\delta_1 \cdot \sin \frac{\Delta\phi_p}{2} \cdot \sin \left(\phi - \phi_p - \frac{\Delta\phi_p}{2} \right)$$

(式中、 ϕ_p はウェーハホルダーの設計時に適用された位相変化値、 $\omega_{\phi} - \omega'_{\phi}$ は前記 ϕ_p に応じてそれぞれ測定された高分解能 X 線ロックアップカーブのピークの角度差を表す。)

前記方位角 () 関数に応じたウェーハの面方位の変位 ($\delta_{P(S)}$) が、下記式により決定されることを特徴とする。 10

【0022】

【数7】

$$\delta_{P(S)} \cong \delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p)$$

【0023】

また、前記高分解能 X 線ロックアップカーブは、 $\phi = \phi_1$ であるときと、 $\phi = \phi_2$ であるときに 2 回測定され、前記 ϕ_p が下記式により決定されることを特徴とする。 20

【0024】

【数8】

$$\Delta\phi_p = \phi_2 - \phi_1$$

【0025】

また、前記方位角 () 関数に応じた回転軸から表面垂直軸の傾斜変位 ($\delta_{S(R)}$) が、下記式により決定されることを特徴とする。

【0026】

【数9】

$$\delta_{S(R)} \cong \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s)$$

30

(式中、 ϕ_0 は回転軸と表面垂直軸とがなす偏心角、 ϕ_s は偏心軸の方向を表す。)

【0027】

尚、 $0 \sim 180^\circ$ 方向に沿った前記ウェーハの面方位の角度成分 ($\delta_1 \cdot \cos \phi_p$) は、下記式により決定され、

【数10】

$$\delta_1 \cdot \cos \phi_p = \frac{1}{2} (\omega'_0 - \omega_0)$$

40

$90 \sim 270^\circ$ 方向に沿った前記ウェーハの面方位の角度成分 ($\delta_1 \cdot \sin \phi_p$) は、下記式により決定され、

【数 1 1】

$$\delta_1 \cdot \sin \phi_p = \frac{1}{2}(\omega'_{90} - \omega_{90})$$

$\phi_p = 180^\circ$ の 2 つのサンプル方位のそれぞれで、 90° 間隔で高分解能 X 線ロックアップカーブを 2 回測定するだけで単結晶ウェーハの面方位を測定することができることを特徴とする。

【発明の効果】

【0028】

上記の構成を有する本発明による高分解能 X 線ロックアップカーブ測定を用いる単結晶ウェーハの面方位測定方法によれば、ウェーハの表面角だけでなく前記表面角の方向も正確に決定することで、ウェーハの生産性および製品の品質を向上させることができる。また、ウェーハの面方位を測定するための測定装置の回転軸とウェーハの表面垂直軸とが一致しない場合にも、標準物質を用いて二つの軸を整列しなくてもウェーハの面方位を正確に決定し、また、前記測定装置の回転軸と表面垂直軸とがなす偏心角および方向も測定することができる。

【図面の簡単な説明】

【0029】

【図 1】測定装置の回転軸 n_R と表面垂直軸 n_S とが平行であるときに、表面方位角 ϕ_1 の結晶面を有する単結晶ウェーハの逆格子空間を示す図面である。 10

【図 2】表面垂直軸 n_S が測定装置の回転軸 n_R に対して傾斜角 θ_0 を持って傾斜しているときに、表面方位角 ϕ_1 の結晶面を有する単結晶ウェーハの逆格子空間を示す図面である。

【図 3】逆格子点 R がブラッグ回折条件を満たすときに、表面垂直軸と回転軸とが平行である場合（図 1 参照）における回折面上の $P(S)$ の変位を示す図面である。

【図 4】 $\phi_1 = 1.0^\circ$ を有するサンプルの $P(S)$ が ϕ_1 から $-\phi_1$ に移動するときに、 $P(S)$ 値の結果を示す図面である。

【図 5】位相角 $\phi_p = 0$ であると仮定したときに、 $\phi_1 = 1.0^\circ$ であるときに方位角の関数として計算された $P(S)$ 値の結果を示す図面である。 30

【図 6】基準エッジから $\phi_1 = 0.201^\circ$ および $\phi_p = 9.59^\circ$ のミスカット (miscut) を有するサンプルウェーハを示す図面である。

【図 7】正弦関数による $\phi_1 - \phi_p$ の最小二乗法を示す図面である。

【発明を実施するための形態】

【0030】

以下、上記の本発明の一実施例について、図面を参照して詳細に説明する。

【0031】

理論的モデル

図 1 には、測定装置の回転軸 n_R と表面垂直軸 n_S とが平行であるときに、表面方位角 ϕ_1 を有する単結晶ウェーハの逆格子空間が図示されている。ロックアップカーブ測定のために選択された反射面に対する逆格子点は、結晶面軸 n_p の方向に沿って P 点で図示される。 40

【0032】

入射 X 線ビームと反射 X 線ビームからなる回折平面は、図示されたように紙面の方向である垂直方向に置かれ、原点 O を通過する。 k_0 は、入射される X 線のウェーブベクトルを表し、 k_H は、反射される X 線のウェーブベクトルを表す。図 1 は、 $\phi_p = 0$ であるときに結晶面軸が回折平面上に正確に置かれている仮定の下で図示された。したがって、いかなる回転なしに最適のブラッグ条件を満たすという仮定の下で図示された。

【0033】

方位角 $\phi_p = 0$ で X 線の入射角が θ_0 であるときに、逆格子点 P はブラッグ法則を満たす 50

。屈折率補正を無視すれば、ロッキングカーブのピークが現れる入射角 ω_0 は、次のとおりである。

【 0 0 3 4 】

【数 1 2】

$$\omega_0 = \frac{\pi}{2} - \alpha - \delta_1 = \theta_B - \delta_1$$

(数式 1)

【 0 0 3 5 】

10

ここで、 $\alpha = (\theta_B / 2) - \theta_B$ であり、 θ_B はブラッグ角である。ウェーハが回転軸 n_R を中心として ϕ_q だけ回転すると、P 点は、 δ_1 を半頂角 (semi-apex angle) とする円錐に沿って Q 点に動く。Q は、正確なブラッグ反射条件を満たすために n 軸に沿って ϕ_q だけ回転し、回折平面上の R 点に移動する。ブラッグ法則を満たす格子点 R の入射角 ω_ϕ 、すなわち、ロッキングカーブのピーク位置は次のとおりである。

【 0 0 3 6 】

【数 1 3】

$$\omega_\phi = \omega_0 + \Delta\omega_\phi = \theta_B - \delta_{P(S)}$$

20

(数式 2)

【 0 0 3 7 】

図 1 に図示された直角三角形 $OA'Q$ 、 $OA'R'$ 、および $A'R'Q$ から、次の式が得られる。

【 0 0 3 8 】

【数 1 4】

$$\tan(\delta_{P(S)} + \kappa_{P(S)}) = \tan\delta_1 \cdot \cos\phi_q$$

30

(数式 3)

【 0 0 3 9 】

また、 $\kappa_{P(S)} \ll 1$ であるときに、数式 3 は次のように表されることができる。

【 0 0 4 0 】

【数 1 5】

$$\delta_{P(S)} \cong \delta_1 \cdot \cos\phi_q - \kappa_{P(S)}$$

40

(数式 4)

【 0 0 4 1 】

この際、数式 4 は、 ϕ_p を介して方位角 ϕ が回転軸により回転する結晶面軸の位相 ϕ_q を考慮して、次の数式のように一般化することができる。

【 0 0 4 2 】

【数 1 6】

$$\delta_{P(S)} \cong \delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p) - \kappa_{P(S)}$$

50

(数式5)

【0043】

$\rho_{P(S)}$ は、 ϕ 角の関数であり、回折平面上での結晶面垂直軸と表面垂直軸との角を表し、 $\rho_{P(S)}$ も ϕ に応じて可変する。また、数式2と数式5から、方位角 ϕ の変化に応じた入射角の変化は、次の式のとおりである。

【0044】

【数17】

$$\omega_{\phi} \cong -\delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p) + \theta_B + \kappa_{P(S)}$$

10

(数式6)

【0045】

サンプルの表面垂直軸と測定装置の回転軸とが平行ではない場合、状況はさらに複雑になる。図2には、測定装置の回転軸 n_R と表面垂直軸 n_S とが平行ではないときに、表面ミスカット ϕ_1 の結晶面を有する単結晶ウェーハの逆格子空間が図示されている。

【0046】

ϕ_0 は、回転軸 n_R を考慮した表面垂直軸 n_S の偏心角である。図2は、 $\phi_0 = 0$ であるときに結晶面垂直軸と表面垂直軸とが回折平面上に正確に置かれている仮定を前提とする。したがって、いかなる ϕ_0 回転なしに最適のブラッグ条件を満たすという仮定の下で図示された。

20

【0047】

図2を参照すれば、逆格子点Pは $\phi = \phi_q$ だけ回転するとき、逆格子点Pはq点に移動する。q点は、 $\phi = \phi_q$ 回転によって回折平面上のr点に移動する。同時に、面垂直軸 n_S は $\phi = \phi_q$ および $\phi = \phi_q$ だけ回転する。この際、 $\phi_1 = \phi_0$ であるため、表面垂直軸は回折平面上に存在しない。図面上の n'_S は、 $\phi = \phi_q$ および $\phi = \phi_q$ だけ回転した後の表面垂直軸 n'_S を回折平面上に投影したことを表す。表面垂直軸が $\phi = \phi_q$ および $\phi = \phi_q$ であることを考慮して ϕ_0 および ϕ_1 に沿ってそれぞれ回転すると、図2に図示されたように、サンプルの表面位置は S_0 から S_1 まで可変する。

30

【0048】

方位角 $\phi = 0$ であるときに逆格子点Pがブラッグ法則を満たす場合、入射角 ω_0 は $\omega_0 = \theta_B - \phi_1$ として与えられる。図2に図示されたように、入射角 ω_0 、すなわち、ロッキングカーブのピーク位置は、 ϕ_0 および ϕ_1 回転による格子点rのブラッグ条件によって次の式で定義される。

【0049】

【数18】

$$\omega_{\phi} = \omega_0 + \Delta\omega_{\phi} = \theta_B + \delta_0 - \delta_{P(R)}$$

40

(数式7)

【0050】

ここで、 $\delta_{P(R)} = \phi_1 + \phi_0 - \rho_{P(R)}$ である。この際、回折面平面上的表面垂直軸と回転軸との傾斜角を数式5により類推して $\rho_{P(R)}$ 関数で表すれば、次のとおりである。

【0051】

【数19】

$$\delta_{S(R)} \cong \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) - \kappa_{S(R)}$$

50

(数式7-1)

【0052】

ここで、 ϕ_s は、数式5のような動きに対する位相である。数式7の ϕ_0 は、図2に図示されたような条件で $\phi = 0$ であるときに、回転軸から表面垂直軸の傾斜角である。

【0053】

数式7-1を用いると、 $\phi = 0$ であるときにおける表面垂直軸の傾斜は、 $\phi_{S(R)}(\phi = 0) = \phi_0 \cdot \cos(-\phi_s) - \phi_{S(R)}(\phi = 0)$ に一般化される。したがって、数式7は次のように表されることができる。

【0054】

【数20】

10

$$\omega_\phi \cong \theta_B + \delta_0 \cdot \cos(-\phi_s) - \kappa_{S(R)}(\phi=0) - \delta_{P(R)}$$

(数式8)

【0055】

図2に図示された直角三角形 $Oa'q$ 、 $Oa'r'$ 、および $Oa'r'q$ と、数式3の条件から、次の式が得られる。

【0056】

【数21】

20

$$\tan(\delta_{P(R)} + \kappa_{P(R)}) = \tan(\delta_1 + \delta_0) \cdot \cos\phi_q$$

(数式9)

【0057】

$\delta_1 + \delta_0 \ll 1$ の場合、数式9は次のように表されることができる。

【0058】

【数22】

30

$$\delta_{P(R)} \cong \delta_1 \cdot \cos\phi_q + \delta_0 \cdot \cos\phi_q - \kappa_{P(R)}$$

(数式10)

【0059】

数式10も数式5により一般化され、数式5および数式7-1により定義された任意の位相 ϕ_p および ϕ_s を考慮すると、数式10のそれぞれの余弦関数は次のように表されることができる。

【0060】

【数23】

40

$$\delta_{P(R)} \cong \delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p) + \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) - \kappa_{P(R)}$$

(数式11)

【0061】

$\phi_{P(R)}$ は、回折平面上での関数として結晶面軸と回転軸との角である。また、 $\phi_{P(R)}$ は関数によって可変される。 $\delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p)$ は、数式5のように表面垂直軸の周りに沿った結晶面軸の移動成分を表し、 $\delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s)$ は、数式7-1のように回転軸の周りに沿った表面垂直軸の移動成分を表す。

【0062】

50

したがって、数式 8 に数式 1 1 を代入すれば、次の式が得られる。

【 0 0 6 3 】

【数 2 4】

$$\omega_{\phi} \cong -\delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p) - \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) + \kappa_{P(R)}$$

$$+ \theta_B + \delta_0 \cdot \cos(-\phi_s) - \kappa_{S(R)}(\phi=0)$$

(数式 1 2)

10

【 0 0 6 4 】

数式 1 2 により、表面垂直軸と回転軸とが平行ではない場合にも、方位角 関数によって選択される反射面のロッキングカーブのピーク位置の変化を表示することができる。したがって、 δ_0 が 0 であると、数式 1 2 は数式 6 のようになる。

【 0 0 6 5 】

数式 6 によれば、余弦関数の位相 ϕ_p が ϕ_p だけ変化すると、入射角の変化は次の式のように表されることができる。

【 0 0 6 6 】

【数 2 5】

$$\omega'_{\phi} \cong -\delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p - \Delta\phi_p) + \theta_B + \kappa'_{P(S)}$$

20

(数式 1 3)

【 0 0 6 7 】

数式 6 および数式 1 3 から次の式が導出されることができる。

【 0 0 6 8 】

【数 2 6】

$$\omega_{\phi} - \omega'_{\phi} = 2\delta_1 \cdot \sin\left(\frac{\Delta\phi_p}{2}\right) \cdot \sin\left(\phi - \phi_p - \frac{\Delta\phi_p}{2}\right) + \kappa_{P(S)} - \kappa'_{P(S)}$$

30

(数 1 4)

【 0 0 6 9 】

数式 1 2 と類似に、位相 ϕ_p が $\phi_p + \Delta\phi_p$ だけ変化するが、 ϕ_s の動きに係る位相 ϕ_s は固定された状態を維持する。したがって、数式 1 2 は次のように表されることができる。

【 0 0 7 0 】

【数 2 7】

$$\omega'_{\phi} \cong -\delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p - \Delta\phi_p) - \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) + \kappa'_{P(R)}$$

$$+ \theta_B + \delta_0 \cdot \cos(-\phi_s) - \kappa_{S(R)}(\phi=0)$$

40

(数式 1 5)

【 0 0 7 1 】

数式 1 2 および数式 1 5 から、数式 1 6 を次のように導出することができる。

【 0 0 7 2 】

50

【数 2 8】

$$\omega_{\phi} - \omega'_{\phi} = 2\delta_1 \cdot \sin\left(\frac{\Delta\phi_p}{2}\right) \cdot \sin\left(\phi - \phi_p - \frac{\Delta\phi_p}{2}\right) + \kappa_{P(R)} - \kappa'_{P(R)}$$

(数式 1 6)

【0 0 7 3】

図 3 には、逆格子点 R がブラッグ回折条件を満たすときに、表面垂直軸と回転軸とが平行である場合 (図 1 参照) における回折平面上の $\delta_{P(R)}$ の変位が図示されている。図示されたように、O A' R' から次の関係式が成立される。

10

【0 0 7 4】

【数 2 9】

$$\tan(\delta_{P(S)} + \kappa_{P(S)}) = \frac{\sin\delta_{P(S)}}{\cos\delta_1}$$

(数式 1 7)

【0 0 7 5】

したがって、 $\delta_{P(S)}$ は次の式として与えられることができる。

20

【0 0 7 6】

【数 3 0】

$$\kappa_{P(S)} = \tan^{-1}\left(\frac{\sin\delta_{P(S)}}{\cos\delta_1}\right) - \delta_{P(S)}$$

(数式 1 8)

【0 0 7 7】

数式 1 8 に数式 5 を代入すれば、次のような式を導出することができる。

30

【0 0 7 8】

【数 3 1】

$$\kappa_{P(S)} \cong \tan^{-1}\left(\frac{\sin(\delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p) - \kappa_{P(S)})}{\cos\delta_1}\right) - \delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_p) + \kappa_{P(S)}$$

(数式 1 9)

【0 0 7 9】

数式 1 9 は、表面垂直軸が回転軸に平行であるときに、関数による $\delta_{P(S)}$ の変位を示す。

40

【0 0 8 0】

実験例

LED用基板として用いられ、数値上の面方位角が 0.2° である 6 インチ (0 0 . 1) サファイアウェーハの面方位を、上述の理論的モデルを用いて測定した。測定装置としては、4 バウンス (4 - bounce) Ge (0 2 2) 分光器を含む高分解能 X 線回折分析装置 (XRD) および 4 サークル測角器 (4 - circle goniometer) を活用した。また、ウェーハホルダーにより、ウェーハの表面がホルダーの基準面に密着されるようにした。ウェーハホルダーは、 120° の角度差のある互いに異なる 2 つの方位角 θ_1 と θ_2 を有する狭くて長いスリットを含む。2 つのスリットは、 θ_1 と θ_2 を有するウェーハの基準エッジに平行であるように構成される。

50

【0081】

ロックンクカーブの測定は次のように行った。 $\theta = \theta_1$ であるときにサンプルウェーハの何れか1つの方位角で、サファイア(00・6)結晶面に対する最適のブラッグ条件のロックンクカーブを、それぞれ異なる方位で 60° 間隔で6回測定した(例えば、 $\theta = 0$ 、 60 、 120 、 180 、 240 、および 360)。そして、それぞれのロックンクカーブのピーク位置を記録した。 $\theta = \theta_1$ で測定した後、ウェーハをホルダーから分離し、 $\theta = \theta_2$ となるようにサンプルをホルダーにさらに固定した。そして、ロックンクカーブを上述と同様に6回測定した。ロックンクカーブを測定する前に、ホルダーに装着されたウェーハの方位角は正確に決定された。ウェーハの基準エッジに平行なホルダーの狭くて長いスリットは、 θ スキャンを介してX線の方向に平行に整列された。この際、ピーク位置は $\theta = \theta_1$ として決定された。 $\theta = \theta_2$ にウェーハを回転させた後、 θ スキャンを介して、ホルダーの他のスリットをX線の方向に平行であるように整列した。この際、ピーク位置は $\theta = \theta_2$ として決定された。 $\Delta p = \theta_2 - \theta_1$ の差が面方位測定に対する位相変化となる。

10

【0082】

結果

位相角 $\Delta p = 0$ と仮定すると、図1に図示された回折平面上での結晶面垂直軸と表面垂直軸との角 $\Delta p(\theta)$ は、方位角 θ が0から θ_1 まで回転するとき、 θ_1 から $-\theta_1$ に可変する。 $\Delta p(\theta)$ は、 $\theta_1 = 1.0^\circ$ を有するサンプルの $\Delta p(\theta)$ が θ_1 から $-\theta_1$ に移動するとき、数式18により計算される。その結果を図4に示す。 $\Delta p(\theta)$ の最大および最小値は $\pm 5.9 \times 10^{-5} (^\circ)$ であり、 $\Delta p(\theta)$ 値は表面角 $\theta_1 = 1.0^\circ$ に比べ相対的に微小である。

20

【0083】

表1には、 $\theta_1 = 0.2$ 、 1.0 、 1.5 、 2.0 、 2.5 、および 3.0 であるそれぞれのサンプルに対して数式18により計算された $\Delta p(\theta)$ の最大および最小値が図示されている。前記最大および最小値は、表面各に比べ非常に小さいことが分かる。

【0084】

【表 1】

δ_1 (°)	$\kappa_{P(S)}$ (°)	$\kappa_{P(S)} - \kappa'_{P(S)}$ (°)
	max.(+)/min.(-)	max.(+)/min.(-)
0.2	$\pm 4.7 \times 10^{-7}$	$\pm 4.7 \times 10^{-7}$
1.0	$\pm 5.9 \times 10^{-5}$	$\pm 5.9 \times 10^{-5}$
1.5	$\pm 2.0 \times 10^{-4}$	$\pm 2.0 \times 10^{-4}$
2.0	$\pm 4.7 \times 10^{-4}$	$\pm 4.7 \times 10^{-4}$
2.5	$\pm 9.2 \times 10^{-4}$	$\pm 9.2 \times 10^{-4}$
3.0	$\pm 1.6 \times 10^{-3}$	$\pm 1.6 \times 10^{-3}$

10

20

30

【0085】

したがって、 $\kappa_{P(S)}$ は考慮される δ_1 より極めて小さいため、数式 19 の右側項の $\kappa_{P(S)}$ を無視すれば、数式 19 は次のように表されることができる。

【0086】

【数 32】

$$\kappa_{P(S)} \cong \tan^{-1} \left(\frac{\sin(\delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_P))}{\cos \delta_1} \right) - \delta_1 \cdot \cos(\phi - \phi_P)$$

(数式 20)

40

【0087】

位相角 $\phi_P = 0$ であると仮定すると、 $\kappa_{P(S)}$ は数式 20 により、 $\delta_1 = 1.0^\circ$ であるときに方位角関数として計算される。その結果を図 5 に示す。変位は $\phi = 180^\circ$ の周りで対称をなし、 $\kappa_{P(S)}$ 値は、図 1 に図示されたように $\phi = 0, 90, 180, \text{および } 270$ であるときに 0 である。数式 20 の余弦関数の位相が ϕ_P だけ変わるときに、 $\delta_1 = 1.0^\circ$ のウェーハに対して、数式 14 における 2 つの値の差 $\kappa_{P(S)} - \kappa'_{P(S)}$ は、 $\phi_P = 125^\circ$ であるときに 5.9×10^{-5} (°) の最も小さい最大値を有する。この場合における値は、 $\kappa_{P(S)}$ の最大値と等しくなる。 $\kappa'_{P(S)}$ および $\kappa_{P(S)} - \kappa'_{P(S)}$ の変位は、 $\phi_P = 125^\circ$ だけ変わるときにおける方位角

50

の関数であって、 $P(\phi)$ 値とともに図 5 に図示されている。それぞれ異なる ϕ_1 の $\phi = 125^\circ$ であるときにおける $P(\phi) - P(\phi_1)$ 、 $P(\phi) + P(\phi_1)$ それぞれの最大値および最小値は、それぞれ $P(\phi)$ 値とともに表 1 に図示されている。この実験では、ウェーハホルダーの設計時に $\phi = 125^\circ$ の位相変化を適用し、 $\phi = 125^\circ$ であるときに位相変化による $P(\phi) - P(\phi_1)$ 差は分析で無視した。

【 0 0 8 8 】

上述のように、サファイア (00・6) 結晶面に対する最適のブラッグ条件のロックイングカーブは、サンプル方位角が $\phi = \phi_1$ であるときに 6 回測定され、サンプル方位角が $\phi = \phi_2$ であるときにさらに 6 回測定される。表 2 に、それぞれの方位でのロックイングカーブのピーク位置が図示されている。また、測定した位相変化 $\Delta\phi_p = \phi_2 - \phi_1$ は、 120.19° であった。

10

【 0 0 8 9 】

【表 2】

$$\delta_{P(S)} = OCA, \delta_{S(R)} = \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) (\Delta\phi_p = 120.19)$$

ϕ (°)	ω_ϕ	ω'_ϕ	$\omega_\phi - \omega'_\phi$	$\delta_{P(S)}$	$\omega_\phi + \delta_{P(S)}$
0	20.6318	20.9591	-0.3273	0.1979	20.8297
60	20.6797	20.7389	-0.0592	0.1279	20.8076
90	20.7664				
120	20.8680	20.5985	0.2695	-0.0700	20.7980
180	21.0074	20.6816	0.3258	-0.1979	20.8095
240	20.9587	20.9013	0.0574	-0.1279	20.8308
270	20.8744				
300	20.7753	21.0408	-0.2655	0.0700	20.8453

20

30

【 0 0 9 0 】

測角器の回転軸はサンプルの表面垂直軸と殆ど平行ではないため、ウェーハの面方位分析のために数式 16 を用いた。表 2 の ω_ϕ および ω'_ϕ から、それぞれの ϕ での $\omega_\phi - \omega'_\phi$ を計算した。これも表 2 に図示されている。それぞれの ϕ での $\omega_\phi - \omega'_\phi$ は、数式 16 に従う最小二乗法を用いて正弦関数で定義されることができる。 $P(\phi) - P(\phi_1)$ のターム (term) は無視され得る。これは、表 1 に示すように $\phi_1 = 120.2^\circ$ である場合、その値が無視できるほど小さいためである。したがって、 $\omega_\phi - \omega'_\phi$ は次の式のように決定される。

40

【 0 0 9 1 】

【数 3 3】

$$\omega_{\phi} - \omega'_{\phi} \cong 2\delta_1 \cdot \sin \frac{\Delta\phi_p}{2} \cdot \sin \left(\phi - \phi_p - \frac{\Delta\phi_p}{2} \right)$$

(数式 2 1)

【0 0 9 2】

数式 2 1 によれば、 $\phi_p = 120.19^\circ$ を用いて $\phi_1 = 0.201^\circ$ および $\phi_p = 9.59^\circ$ が得られる。したがって、サンプルウェーハは、サンプルの基準エッジから $\phi_1 = 0.201^\circ$ および $\phi_p = 9.59^\circ$ の表面ミスカットを有する。その結果を図 6 に概略的に示した。数式 5 から、関数によるウェーハの面方位の変位 $\delta_{P(S)}$ が次の式で定義されることができる。

10

【0 0 9 3】

【数 3 4】

$$\delta_{P(S)} \cong 0.201 \cdot \cos(\phi - 9.59)$$

(数式 2 2)

【0 0 9 4】

正弦関数による $\delta_{P(S)}$ の数式 2 1 における最小二乗法が図 7 に図示されている。フィッティング (fitting) に対する χ^2 値は 3.7×10^{-6} と非常に小さい値であり、これは、フィット (fit) の信頼水準が非常に高いことを示す。

20

【0 0 9 5】

数式 5 を用いると、数式 1 2 は次のように表されることができる。

【0 0 9 6】

【数 3 5】

$$\omega_{\phi} + \delta_{P(S)} \cong -\delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) + \theta_B + \delta_0 \cdot \cos(-\phi_s)$$

30

$$- \kappa_{S(R)}(\phi=0) + \kappa_{P(R)} - \kappa_{P(S)}$$

(数式 2 3)

【0 0 9 7】

それぞれの ϕ での $\delta_{P(S)}$ および $\theta_B + \delta_{P(S)}$ は、ピーク位置 ϕ_p および ϕ_s 測定値とともに表 2 に図示されたように計算される。数式 2 3 によれば、 $\theta_B + \delta_{P(S)}$ 値は、最小二乗法を用いた関数として余弦関数により定義される。その結果は次の式のとおりである。

40

【0 0 9 8】

【数 3 6】

$$\omega_{\phi} + \delta_{P(S)} \cong -0.023 \cdot \cos(\phi - 297.85) + 20.820$$

(数 2 4)

【0 0 9 9】

したがって、関数による回転軸から表面垂直軸の傾斜変位 $\delta_{S(R)}$ は、次のように決定される。

【0 1 0 0】

50

【数 3 7】

$$\delta_{S(R)} \cong 0.023 \cdot \cos(\phi - 117.85)$$

(数式 2 5)

【0 1 0 1】

ここで、数式 2 3 の $\delta_{S(R)}(\phi=0) + \delta_{P(R)} - \delta_{P(S)}$ のターム (term) を無視すると (表 1)、数式 2 5 は、 $\phi = 117.85^\circ$ であるときに、表面垂直軸の最大偏心が $\theta_0 = 0.023^\circ$ であることを示す。

【0 1 0 2】

サンプルウェーハの面方位の水平および垂直成分は ASTM 標準 (ASTM F 2687a、Standard Test Method for Determining the Orientation of a Semiconductive Single Crystal) により測定し、この実験結果と比較した。 $\delta_{P(R)}$ を無視し、 $\phi = 0^\circ$ および $\phi = 180^\circ$ であるときに、数式 1 2 はそれぞれ次の式のように定義されることができる。

【0 1 0 3】

【数 3 8】

$$\omega_0 \cong -\delta_{P(S)(\phi=0)} - \delta_{S(R)(\phi=0)} + \theta_B + \delta_0 \cdot \cos(-\phi_S) - \kappa_{S(R)(\phi=0)}$$

(数式 2 6)

【0 1 0 4】

【数 3 9】

$$\omega_{180} \cong -\delta_{P(S)(\phi=180)} - \delta_{S(R)(\phi=180)} + \theta_B + \delta_0 \cdot \cos(-\phi_S) - \kappa_{S(R)(\phi=0)}$$

(数式 2 7)

【0 1 0 5】

前記数式 2 6 および数式 2 7 から、次の式が得られる。

【0 1 0 6】

【数 4 0】

$$\frac{\omega_{180} - \omega_0}{2} = -\frac{\delta_{P(S)(\phi=180)} - \delta_{P(S)(\phi=0)}}{2} - \frac{\delta_{S(R)(\phi=180)} - \delta_{S(R)(\phi=0)}}{2}$$

(数式 2 8)

【0 1 0 7】

ここで、ASTM による $(\phi_{180} - \phi_0) / 2$ 値は、表 2 で $\phi = 0^\circ$ および 180° であるときに ϕ_0 から得られ、数式 2 8 は次のように定義されることができる。

【0 1 0 8】

【数 4 1】

$$\frac{\Delta\omega}{2} + \frac{\Delta\delta_{S(R)}}{2} = -\frac{\Delta\delta_{P(S)}}{2}$$

(数式 2 9)

【0 1 0 9】

10

20

30

40

50

表3は、ASTM方法と、この実験と、数式29により得られる2つの値間の関係と比較したことを示す。ASTM方法による $90^\circ \sim 270^\circ$ 方向に沿った垂直成分は、表2の $\theta = 90^\circ$ および 270° で得られる。ASTM方法は、回転軸から表面垂直軸の偏心 $\delta_{S(R)}$ を含まないため、 $\Delta\omega/2$ および $-\delta_{P(S)}/2$ が互いに一致しない。しかし、 $\delta_{S(R)}$ を $\Delta\omega/2$ に含ませて考慮すると、 $\Delta\omega/2 + \delta_{S(R)}/2$ と $-\delta_{P(S)}/2$ は測定誤差内でほぼ同じである。

【0110】

【表3】

Surface orientation($^\circ$)	$-\Delta\delta_{P(S)}/2$	$\Delta\omega/2$	$\Delta\delta_{S(R)}/2$	$(\Delta\delta_{S(R)} + \Delta\omega)/2$
Horizontal(0-180)	0.198	0.188	0.011	0.199
Vertical(90-270)	0.033	0.054	-0.020	0.034

10

【0111】

本実験では、フィッティングの精度を増加させるために、2つの互いに異なるサンプル方位角で 60° 毎に6回ずつ、12回のロッキングカーブを測定した。しかし、2つの互いに異なるサンプル方位角で 90° 毎に4回ずつ、8回のロッキングカーブを測定するだけでも、面方位および表面垂直軸の整列不良を得るに十分である。また、この実験で、ロッキングカーブの測定回数をさらに増やすと、分析の精度をさらに増加させることができる。

20

【0112】

数式25で説明されたように、この実験に用いられたサンプルの表面垂直軸は、測角器で決定された回転軸から $\theta_s = 117.85^\circ$ であるときに最大偏心角、すなわち、傾斜角(tilt angle) $\theta_0 = 0.023^\circ$ を有する。表面垂直軸と測角器の回転軸との偏心角を調節するために、 $\theta_s = 117.85^\circ$ であるときに偏心角を -0.023° だけ細かく調整することで、サンプルの表面垂直軸が $\theta_0 = 0^\circ$ となるようにして、さらに測定した。

30

【0113】

表4に測定値結果を示し、関数によるサンプルの面方位の可変を次の式で表す。

【0114】

【数42】

$$\delta_{P(S)} \cong 0.201 \cdot \cos(\phi - 10.06)$$

(数式30)

【0115】

40

【表 4】

$$\delta_{P(S)} = OCA, \delta_{S(R)} = \delta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) (\Delta\phi_p = 120.06)$$

ϕ (°)	ω_ϕ	ω'_ϕ	$\omega_\phi - \omega'_\phi$	$\delta_{P(S)}$	$\omega_\phi + \delta_{P(S)}$
0	20.6327	20.9610	-0.3283	0.1980	20.8307
60	20.6961	20.7576	-0.0615	0.1294	20.8255
120	20.8917	20.6241	0.2676	-0.0686	20.8231
180	21.0247	20.6977	0.3270	-0.1980	20.8267
240	20.9612	20.9008	0.0604	-0.1294	20.8318
300	20.7679	20.0332	-0.2653	0.0686	20.8365

10

【0 1 1 6】

上記式は、数式 2 2 の結果とほぼ同じである。回転軸から表面垂直軸の傾斜変化、すなわち、偏心は次の式で表される。

【0 1 1 7】

【数 4 3】

$$\delta_{S(R)} \cong 0.006 \cdot \cos(\phi - 114.03)$$

(数式 3 1)

20

【0 1 1 8】

調節された表面垂直軸の最大傾斜は $\theta_0 = 0.006^\circ$ であり、前記傾斜は、調整前の元の値 $\theta_0 = 0.023^\circ$ に比べ非常に小さい。

【0 1 1 9】

数式 2 3 の $\theta_B + \theta_0 \cdot \cos(\phi - \phi_s) - \delta_{S(R)}$ ($\theta_0 = 0$) 値は表 2 および 4 の測定結果から得られ、 $\delta_{S(R)}$ ($\theta_0 = 0$) を無視すると、 20.820° および 20.829° と同じである。用いられた回折面に対するブラッグ角はそれぞれ 20.831° および 20.832° である。この 2 つのブラッグ角は、それぞれ実験誤差内でほぼ同じであり、サファイア結晶面 (00・6) の理論的値 20.838° と比較可能である。

【0 1 2 0】

L. D. Doucette (L. D. Doucette et al, Review of Scientific Instruments 76, 036106, 2005) は、2 つのそれぞれ異なるサンプル方位 ($\phi_p = 180^\circ$) で、方位角の関数として 90° 毎に 4 回ずつ、8 回ロッキングカーブを測定することで、 5° 以下のミスカットを有する単結晶ウェーハの面方位を測定した。彼らは、回転軸に対するこの実験の数式 7 1 による表面垂直軸の傾斜角度である $\delta_{S(R)}$ を考慮した。

30

40

【0 1 2 1】

$\theta_{P(R)}$ および $\theta'_{P(R)}$ を無視し、数式 1 2 および数式 1 5 を用いると、 $0 \sim 180^\circ$ 方向に沿った面方位の水平成分が求められ、水平成分は L. D. Doucette の数式 4 と次のような関係を有する。

【0 1 2 2】

50

【数44】

$$\begin{aligned}\delta_1 \cdot \cos\phi_p &= \frac{1}{4} \{ (\omega_{180} - \omega_0) - (\omega'_{180} - \omega'_0) \} \\ &= -\frac{1}{4} \{ (\omega'_1 - \omega'_2) + (\omega'_{2t} - \omega'_{1t}) \}\end{aligned}$$

(数式32)

【0123】

ここで、符号関係は異なるが、二つの結果は互いに同じである。

【0124】

非常に小さい表面ミスカットのウェーハの場合、 $0 \sim 180^\circ$ 方向に沿った面方位の水平成分 $\delta_1 \cdot \cos\phi_p$ を求めるためには、 $\phi_p = 180^\circ$ の2つのサンプル方位で2つのロッキングカーブを測定するだけで十分である。したがって、 $\phi_{p(R)}$ および $\phi_{p(L)}$ を無視し、数式12および数式15を用いると、 $0 \sim 180^\circ$ に沿った角度成分は次のとおりである。

【0125】

【数45】

$$\delta_1 \cdot \cos\phi_p = \frac{1}{2} (\omega'_0 - \omega_0)$$

(数式33)

【0126】

これと類似に、 $90 \sim 270^\circ$ に沿った角度成分は次のとおりである。

【0127】

【数46】

$$\delta_1 \cdot \sin\phi_p = \frac{1}{2} (\omega'_{90} - \omega_{90})$$

(数式34)

【0128】

したがって、 $\phi_p = 180^\circ$ の2つのサンプル方位それぞれを 90° 間隔で2回測定する、4回のロッキングカーブ測定のみで単結晶ウェーハの面方位を求めることができる。

【0129】

結論

本発明によれば、ウェーハの表面垂直軸と測角器の回転軸とが平行であるか、または平行ではない両方の場合において、ロッキングカーブのピーク位置の変化を方位角度の関数として完璧に説明する理論的モデルが提案された。このモデルに基づいて、表面ミスカット 3° 未満の小さい表面を有する単結晶ウェーハの面方位に対する正確な測定方法が、高分解能X線回折分析装置を用いたロッキングカーブ測定によって提案された。本方法によれば、ウェーハの面方位だけでなく、測角器の回転軸を考慮したサンプルの表面垂直軸の傾斜角である偏心角を求めることができる。面方位は、本発明でLED基板に適用される6インチサファイアウェーハに対して測定された。面方位は、ウェーハの基準エッジから時計回り方向に $\phi_p = 9.59^\circ$ であるときに $\phi_1 = 0.201^\circ$ に測定された。また、回転軸から表面垂直軸の偏心は、 $\phi_0 = 117.85^\circ$ であるときに $\phi_0 = 0.023^\circ$ に測定され、 0.006° に再調整された。分析中に、幾何学的角度成分 $\phi_{p(S)}$ および ϕ_p

10

20

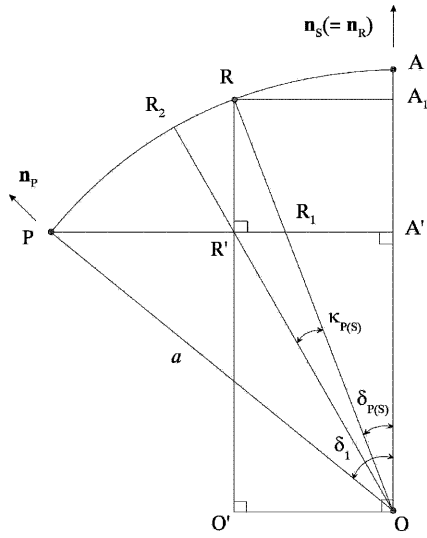
30

40

50

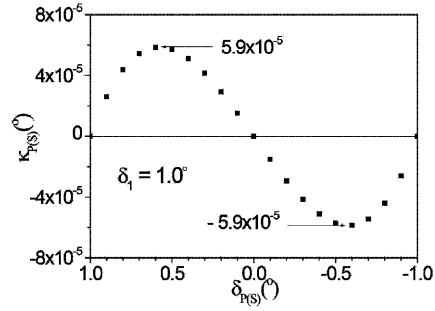
【 図 3 】

[Fig. 3]



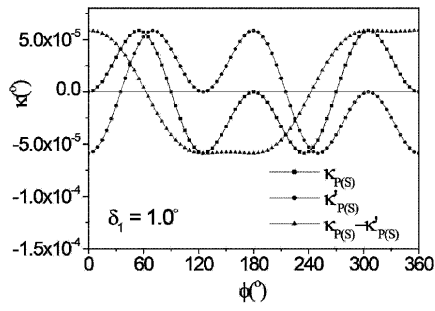
【 図 4 】

[Fig. 4]



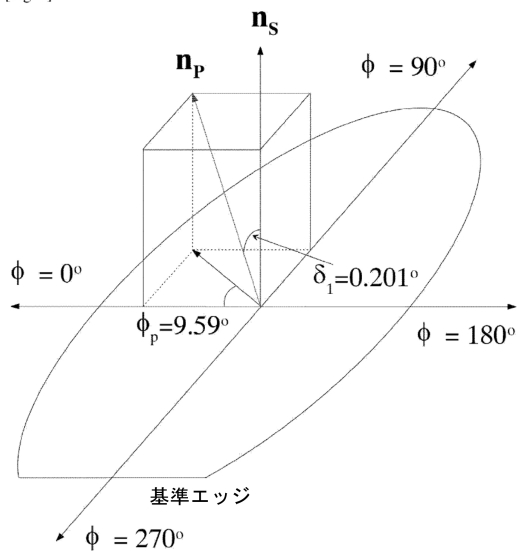
【 図 5 】

[Fig. 5]



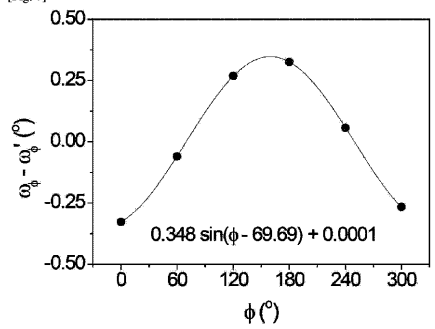
【 図 6 】

[Fig. 6]



【 図 7 】

[Fig. 7]



フロントページの続き

(72)発明者 ビン ソク ミン

大韓民国 デジョン 301-213 ジュン-グ プリゴンウォン-ロ 23ベオン-ギル 1
6 ナンバー-エー-301

審査官 越柴 洋哉

(56)参考文献 特開昭53-020354(JP,A)

特開昭57-136151(JP,A)

特開平11-064252(JP,A)

特開平11-037958(JP,A)

特開2002-139463(JP,A)

特開昭59-225339(JP,A)

特開平03-019250(JP,A)

特開平10-253553(JP,A)

米国特許出願公開第2012/0140889(US,A1)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

G01N 23/00 - 23/227

H01L 21/66