

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2016 年 10 月 20 日(20.10.2016)



(10) 国際公開番号

WO 2016/166949 A1

- (51) 国際特許分類:
H01L 21/205 (2006.01) H01L 29/778 (2006.01)
H01L 21/20 (2006.01) H01L 29/812 (2006.01)
H01L 21/338 (2006.01) H01L 29/872 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2016/001896
- (22) 国際出願日: 2016 年 4 月 4 日(04.04.2016)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2015-084187 2015 年 4 月 16 日(16.04.2015) JP
- (71) 出願人: 株式会社デンソー(DENSO CORPORATION) [JP/JP]; 〒4488661 愛知県刈谷市昭和町 1 丁目 1 番地 Aichi (JP).
- (72) 発明者: 井口 紘子(IGUCHI, Hiroko); 〒4801192 愛知県長久手市横道 4 1 番地の 1 株式会社豊田中央研究所内 Aichi (JP). 成田 哲生(NARITA, Tetsuo); 〒4801192 愛知県長久手市横道 4 1 番地の 1 株式会社豊田中央研究所内 Aichi (JP). 伊藤 健治(ITO, Kenji); 〒4801192 愛知県長久手市横道 4 1 番地の 1 株式会社豊田中央研究所内 Aichi (JP). 近藤 嘉代(KONDO, Kayo); 〒4801192 愛知県長久手市横道 4 1 番地の 1 株式会社豊田中

央研究所内 Aichi (JP). 大竹 伸幸(OTAKE, Nobuyuki); 〒4488661 愛知県刈谷市昭和町 1 丁目 1 番地株式会社デンソー内 Aichi (JP). 星 真一(HOSHI, Shinichi); 〒4488661 愛知県刈谷市昭和町 1 丁目 1 番地株式会社デンソー内 Aichi (JP).

(74) 代理人: 金 順姫(KIN, Junhi); 〒4600003 愛知県名古屋市中区錦 2 丁目 1 3 番 1 9 号 瀧定ビル 6 階 Aichi (JP).

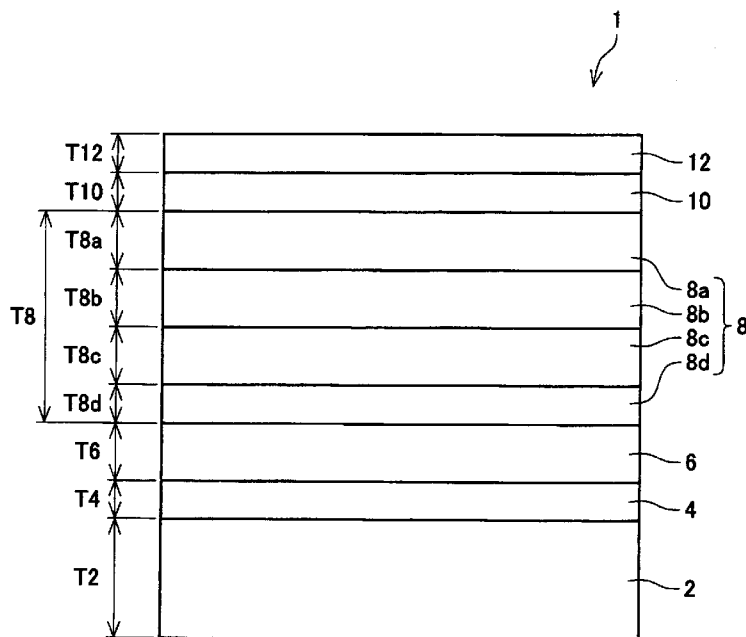
(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ユーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC,

[続葉有]

(54) Title: SEMICONDUCTOR WAFER AND SEMICONDUCTOR DEVICE

(54) 発明の名称: 半導体ウエハ及び半導体装置



(57) Abstract: A semiconductor wafer is provided with a substrate and a group III nitride semiconductor layer provided on the substrate with a multilayer buffer layer interposed therebetween. The multilayer buffer layer includes at least a first buffer layer and a second buffer layer. The first buffer layer is in contact with the group III nitride semiconductor layer. The second buffer layer is in contact with the first buffer layer, and has a different composition from the first buffer layer. The average lattice constant of the multilayer buffer layer is lower than that of the group III nitride semiconductor layer, and the interface lattice distortion of the group III nitride semiconductor layer at the interface between the group III nitride semiconductor layer and the first buffer layer is lower than the interface lattice distortion of the first buffer layer at the interface between the first buffer layer and the second buffer layer.

(57) 要約: 半導体ウエハは、基板と、基板上に多層バッファ層を介して設けられた III 族窒化物半導体層とを備える。前記多層バッファ層は、少なくとも第 1 バッファ層と第 2 バッファ層を含んでいる。前記第 1 バッファ層は、前記 III 族窒化物半導体層に接している。前記第 2 バッファ層は、前記第 1 バッファ層に接しており、前記第 1 バッファ層とは組成が異なる。前記多層バッファ層の平均格子定数が、前記 III 族窒化物半導体層より小さい、前記 III 族窒化物半導体層と前記第 1 バッファ層との界面における前記 III 族窒化物半導体層の界面格子歪みが、前記第 1 バッファ層と前記第 2 バッファ層の界面における前記第 1 バッファ層の界面格子歪みより小さい。

WO 2016/166949 A1



MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, 添付公開書類:
TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, — 国際調査報告 (条約第 21 条(3))
KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

明 細 書

発明の名称：半導体ウエハ及び半導体装置

関連出願の相互参照

[0001] 本出願は、2015年4月16日に出願された日本特許出願番号2015-84187号に基づくもので、ここにその記載内容を援用する。

技術分野

[0002] 本開示は、半導体ウエハ及び半導体装置に関するものである。

背景技術

[0003] 基板上にIII族窒化物半導体層を気相成長させて半導体ウエハを製造する技術の研究が行われている。特許文献1には、シリコン基板上に多層バッファ層を成長させ、多層バッファ層上にIII族窒化物半導体層（機能層）を成長する技術が開示されている。特許文献1は、組成が異なる第1単位層と第2単位層を繰り返し積層した組成変調層と、組成変調層上に成長させた終端層と、終端層上に成長させた中間層（歪強化層）とを単位積層構造とし、複数の単位積層構造を備える多層バッファ層を開示している。III族窒化物半導体層を成長させる基板としてIII族窒化物半導体より熱膨張係数が小さい材料を用いると、III族窒化物半導体が高温（気相成長中）から低温（典型的に室温）に冷却されるときに、内部に引張歪みが生じる。多層バッファ層は、圧縮歪みを有している。特許文献1は、III族窒化物半導体層と接する部分に中間層（歪強化層）を設けることにより、多層バッファ層の圧縮歪みを強め、III族窒化物半導体層の引張歪みを相殺している。

[0004] しかしながら、III族窒化物半導体層と接する部分において多層バッファ層の圧縮歪みが強いと、III族窒化物半導体層は、圧縮歪みを内在したまま成長する。その結果、III族窒化物半導体層に歪み誘因ステップバンチングが発生しやすくなり、III族窒化物半導体層の表面を平滑にすることができない。

先行技術文献

特許文献

[0005] 特許文献1：特表2011-155496号公報

発明の概要

[0006] 本開示は、III族窒化物半導体層の表面が平滑な半導体ウエハ及び半導体装置を提供することを目的とする。

[0007] 本開示の第一の態様において、半導体ウエハは、基板と、基板上に多層バッファ層を介して設けられたIII族窒化物半導体層とを備える。前記多層バッファ層は、少なくとも第1バッファ層と第2バッファ層を含んでいる。前記第1バッファ層は、前記III族窒化物半導体層に接している。前記第2バッファ層は、前記第1バッファ層に接しており、前記第1バッファ層とは組成が異なる。前記多層バッファ層の平均格子定数が、前記III族窒化物半導体層より小さい。前記III族窒化物半導体層と前記第1バッファ層との界面における前記III族窒化物半導体層の界面格子歪みが、前記第1バッファ層と前記第2バッファ層の界面における前記第1バッファ層の界面格子歪みより小さい。

[0008] 上記半導体ウエハでは、III族窒化物半導体層と第1バッファ層との界面におけるIII族窒化物半導体層の界面格子歪み（以下、III族窒化物半導体層の界面格子歪みという）が、第1バッファ層と第2バッファ層の界面における第1バッファ層の界面格子歪み（以下、第1バッファ層の界面格子歪みという）より小さい。そのため、III族窒化物半導体層は、第1バッファ層の圧縮歪みを内在したまま成長することが抑制される。III族窒化物半導体層の界面格子歪みを第1バッファ層の界面格子歪みより小さくすることにより、III族窒化物半導体層に歪み誘因ステップバンチングが発生することを抑制することができる。上記の半導体ウエハは、III族窒化物半導体層の表面を平滑にすることができる。

[0009] 本開示の第二の態様において、半導体装置は、基板と、基板上に多層バッファ層を介して設けられたIII族窒化物半導体層とを備える。そのIII族窒化物半導体層の表面側に半導体素子が形成されている。前記多層バッファ層は、少なくとも第1バッファ層と第2バッファ層を含んでいる。前記第1バッファ層は、前記III族窒化物半導体層に接している。前記第2バッファ層は、

前記第1バッファ層に接しており、前記第1バッファ層とは組成が異なる。

前記多層バッファ層の平均格子定数が、前記III族窒化物半導体層より小さい。前記III族窒化物半導体層と前記第1バッファ層との界面における前記III族窒化物半導体層の界面格子歪みが、前記第1バッファ層と前記第2バッファ層の界面における前記第1バッファ層の界面格子歪みより小さい。

[0010] 上記半導体装置では、III族窒化物半導体層と第1バッファ層との界面におけるIII族窒化物半導体層の界面格子歪み（以下、III族窒化物半導体層の界面格子歪みという）が、第1バッファ層と第2バッファ層の界面における第1バッファ層の界面格子歪み（以下、第1バッファ層の界面格子歪みという）より小さい。そのため、III族窒化物半導体層は、第1バッファ層の圧縮歪みを内在したまま成長することが抑制される。III族窒化物半導体層の界面格子歪みを第1バッファ層の界面格子歪みより小さくすることにより、III族窒化物半導体層に歪み誘因ステップバンチングが発生することを抑制することができる。上記の半導体ウエハは、III族窒化物半導体層の表面を平滑にすることができる。

図面の簡単な説明

[0011] 本開示についての上記目的およびその他の目的、特徴や利点は、添付の図面を参照しながら下記の詳細な記述により、より明確になる。その図面は、
[図1]図1は、第1実施例の半導体ウエハの断面図を模式的に示し、
[図2]図2は、第1実施例の半導体ウエハの特性を示し、
[図3]図3は、第2実施例の半導体ウエハの断面図を模式的に示し、
[図4]図4は、第2実施例の半導体ウエハの特性を示し、
[図5]図5は、第3実施例の半導体ウエハの特性を示し、
[図6]図6は、比較例1の半導体ウエハの特性を示し、
[図7]図7は、比較例2の半導体ウエハの特性を示し、
[図8]図8は、実施例及び比較例について、半導体ウエハの表面粗さの結果を示す。

発明を実施するための形態

[0012] 本明細書で開示する半導体ウエハは、基板上に多層バッファ層を介してIII族窒化物半導体層が設けられている。多層バッファ層は、平均格子定数がIII族窒化物半導体層より小さい。多層バッファ層は、少なくとも第1バッファ層と第2バッファ層を含んでいる。第1バッファ層は、III族窒化物半導体層に接している。第2バッファ層は、第1バッファ層に接している。第1バッファ層と第2バッファ層は組成が異なる。本明細書で開示する半導体ウエハでは、III族窒化物半導体層と第1バッファ層との界面におけるIII族窒化物半導体層の界面格子歪みが、第1バッファ層と第2バッファ層の界面における第1バッファ層の界面格子歪みより小さい。

[0013] 上記半導体ウエハでは、III族窒化物半導体層と第1バッファ層との界面におけるIII族窒化物半導体層の界面格子歪み（以下、III族窒化物半導体層の界面格子歪みという）が、第1バッファ層と第2バッファ層の界面における第1バッファ層の界面格子歪み（以下、第1バッファ層の界面格子歪みという）より小さい。そのため、III族窒化物半導体層は、第1バッファ層の圧縮歪みを内在したまま成長することが抑制される。III族窒化物半導体層の界面格子歪みを第1バッファ層の界面格子歪みより小さくすることにより、III族窒化物半導体層に歪み誘因ステップバンチングが発生することを抑制することができる。上記の半導体ウエハは、III族窒化物半導体層の表面を平滑にすることができる。

[0014] なお、本明細書でいう「多層バッファ層」とは、基板と半導体素子層の間の格子定数差を緩和するための所謂「低温バッファ層」を意味するものではなく、III族窒化物半導体層に面方向の力を加え、III族窒化物半導体層が成膜後に高温から低温に変化するときIII族窒化物半導体層に生じる熱歪みを緩和するためのものである。また、「歪み誘因ステップバンチング」とは、T e r s o f f らが発見し、提唱したステップバンチング発生メカニズムであり、「Physical Review Letters Volume 75 2730 (1995)」に開示されている。そのメカニズムは、周期的なステップ・テラスで形成される半導体表面に歪みが発生すると、歪

みの2乗に比例し、ステップ間の距離に反比例したステップ間引力が働くというものである。ステップ間引力がステップの束（ステップバンチング）を次々と形成し、半導体ウエハの表面に段差が形成され、半導体ウエハの表面平滑性が低下する。そのため、半導体表面の歪みを小さくすることにより、ステップバンチングの発生を抑制することができる。

[0015] また、歪み誘因ステップバンチングは、成長面の垂線に対して主軸が微傾斜したウエハ（所謂オフ角を有するウエハ）において、より顕著となる。例えばIII族窒化物半導体の場合、一般的にc軸が主軸となる。そのため、III族窒化物半導体の場合、c軸が成長面の垂線に対して傾斜している状態がオフ角を有するといえる。典型的に、オフ角を設けることにより、成長表面をステップ・テラスが規則的に繰り返す周期構造となり、ウエハ表面の平坦性を向上させることができる。また、オフ角を設けることにより、急峻なヘテロ接合を実現したり、ウエハ上に形成する半導体素子の界面特性が向上するといった利点も得られる。しかしながら、歪み誘因ステップ間引力が働く状況下では、オフ角を有するウエハ表面のステップ間距離が小さい。よって、オフ角を有するウエハにおいては、ステップ間引力が無視できない働きをする。そのため、歪み誘因ステップ間引力が働く状況下では、半導体ウエハの表面にステップバンチングが発生しやすい。

[0016] また、窒化物半導体層における歪み誘因ステップバンチングは、III族元素としてガリウムを主成分とするIII族窒化物半導体でより顕著である。ステップバンチングは、テラス上のIII族原子種が表面拡散してステップ端に取り込まれる過程で起こる。そのため、ステップバンチングは、「ステップ間平均距離 $\times (1/2) \leq$ III族原子種の表面拡散長」の条件を満足する環境下で起こりやすい。III族原子種において、ガリウムは、アルミニウムやインジウムと比較して表面拡散長が長いことが知られている。そのため、歪み誘因ステップバンチングは、ガリウムを主成分とするIII族窒化物半導体、特に窒化ガリウムで発生しやすい。なお、本明細書でいう「窒化ガリウム」には、1%未満の不純物（B, Al, In, C, Si, Ge, Mg, S, Fe, As,

S b等)を含有している窒化ガリウムも含まれる。

[0017] また、「多層バッファ層は、III族窒化物半導体層より格子定数が小さい」とは、多層バッファ層の全体とIII族窒化物半導体層の全体を比較したときに、多層バッファ層の格子定数（平均格子定数）が、III族窒化物半導体層の格子定数（平均格子定数）より小さいことを意味する。そのため、多層バッファ層の一部分とIII族窒化物半導体層の一部分とを比較したときに、多層バッファ層の一部分の格子定数が、III族窒化物半導体層の一部分の格子定数より大きくなることもある。

[0018] なお、本明細書では、「平均格子歪み」と「界面格子歪み」という用語が用いられている。ここで、「平均格子歪み」と「界面格子歪み」について、第1層が第2層の表面に積層されている場合について説明する。第1層の面方向（結晶成長する方向と直交する方向）の理想格子定数（理論上の格子定数）を a_1 、実際の格子定数を a_1' とし、第2層の面方向の理想格子定数を a_2 、実際の格子定数を a_2' とする。第1層の平均格子歪み ε_1 、第2層の平均格子歪み ε_2 、第1層と第2層の界面における第1層の界面格子歪み ε_{1f1} 、第1層の第2層に対する歪み緩和率 R_1 は、以下の式で示される。

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= (a_1' - a_1) / a_1 \\ \varepsilon_2 &= (a_2' - a_2) / a_2 \\ \varepsilon_{1f1} &= (a_2' - a_1) / a_1 \\ R_1 &= (a_1' - a_2') / (a_1 - a_2') \end{aligned}$$

本明細書で開示する半導体装置は、基板上に多層バッファ層を介してIII族窒化物半導体層が設けられており、そのIII族窒化物半導体層の表面側に半導体素子が形成されている。多層バッファ層は、少なくとも第1バッファ層と第2バッファ層を含んでいる。第1バッファ層は、III族窒化物半導体層に接している。第2バッファ層は、第1バッファ層に接している。第1バッファ層と第2バッファ層は組成が異なる。多層バッファ層は、平均格子定数がIII族窒化物半導体層より小さい。III族窒化物半導体層と第1バッファ層との界面におけるIII族窒化物半導体層の界面格子歪みが、第1バッファ層と第2バ

ッファ層の界面における第1バッファ層の界面格子歪みより小さい。

[0020] 以下、本明細書で開示される技術の特徴を整理する。なお、以下に記す事項は、各々単独で技術的な有用性を有している。

[0021] 半導体ウエハは、基板と、基板上に設けられている多層バッファ層と、多層バッファ層上に設けられているIII族窒化物半導体層を備えている。基板は、III族窒化物半導体層より熱膨張係数が小さい。具体的には、基板は、300～1300Kの線膨張係数の温度積分値が、III族窒化物半導体層を構成する材料のa軸方向の300～1300Kの線膨張係数の温度積分値より小さい。より具体的には、基板の材料は、シリコン(Si)、シリコンカーバイド(SiC)である。基板の厚みは0.1～2mmである。好ましくは、基板と多層バッファ層の間に、界面層、窒化アルミニウム(AlN)層を設ける。界面層の材料は、 Al_2O_3 、AlON等を用いることができる。界面層を設けることにより、窒化アルミニウム層の配向性が向上し、多層バッファ層、III族窒化物半導体層の結晶性を向上させることができる。なお、界面層は省略することもできる。窒化アルミニウム層の厚みは10～500nmである。なお、基板がシリコンの場合、窒化アルミニウム層の厚みは50～500nmであることが好ましい。基板がシリコンカーバイドの場合、窒化アルミニウム層の厚みは10～100nmであることが好ましい。窒化アルミニウムは、III族窒化物半導体の中で最も格子定数が小さい。そのため、窒化アルミニウム層を設けることにより、後述する多層バッファ層に必要な量の圧縮歪みを与えることができる。なお、上記したように、界面層、窒化アルミニウム層を省略し、基板の表面に直接多層バッファ層を形成することもできる。

[0022] 多層バッファ層は、少なくとも、III族窒化物半導体層に接する第1バッファ層と、第1バッファ層に接する第2バッファ層を含んでいる。なお、多層バッファ層は、第2バッファ層に接する第3バッファ層、第3バッファ層に接する第4バッファ層等を含むこともある。すなわち、多層バッファ層は、2層以上の層を備える多層構造である。第1バッファ層は、多層バッファ層

を構成する層のうち、最も表面側（III族窒化物半導体層側）に位置する層である。第1バッファ層と第2バッファ層は組成が異なっている。また、第1バッファ層は、第2バッファ層に対してコヒーレントではない。具体的には、第1バッファ層の平均格子定数と第2バッファ層の平均格子定数とをオングストローム単位で小数点以下3桁まで比較したときに、両者が異なっている。第1バッファ層が第2バッファ層に対してコヒーレントでないことにより、第1バッファ層内で歪み緩和が起こる。そのため、第2バッファ層の歪みがIII族窒化物半導体層にそのまま引き継がれることを防止することができる。すなわち、第1バッファ層が第2バッファ層に対してコヒーレントでないことにより、III族窒化物半導体層の歪みを低減し、歪み誘因ステップバンチングを抑制することができる。好ましくは、第1バッファ層の第2バッファ層に対する歪み緩和率（ R_1 ）は0.8以上である。歪み緩和率（ R_1 ）を0.8以上とすることにより、第1バッファ層で十分な歪み緩和が起こり、I-II族窒化物半導体層の歪みを効果的に低減することができる。

[0023] 第1バッファ層の厚みは、0.05 μm 以上とすることにより、第1バッファ層が第2バッファ層に対してコヒーレントに成長することを防止することができる。より好ましくは、第1バッファ層の厚みは、0.2 μm 以上である。第1バッファ層の厚みを0.2 μm 以上とすることにより、第1バッファ層の界面格子歪みの大きさ、第1バッファ層の成長条件に係らず、より確実に第1バッファ層が第2バッファ層に対してコヒーレントに成長することを防止することができる。

[0024] 多層バッファ層の全体とIII族窒化物半導体層の全体を比較したときに、多層バッファ層の平均格子定数が、III族窒化物半導体層の平均格子定数より小さい。また、多層バッファ層の全体と窒化アルミニウムを比較したときに、多層バッファ層の平均格子定数が、窒化アルミニウムの格子定数より大きい。なお、多層バッファ層は、全体として、圧縮歪みを有していることが好ましい。多層バッファ層が圧縮歪みを有していることにより、III族窒化物半導体層の温度が成膜後に成長温度（高温）から室温（低温）に変化するとき

、III族窒化物半導体層に生じる引張歪みを相殺することができる。第1バッファ層には、引張歪みが残留していないことが好ましい。換言すると、第1バッファ層は、歪みが残留していないか、圧縮歪みが残留している。より好ましくは、第1バッファ層は、圧縮歪みが残留している。なお、「第1バッファ層に圧縮歪みが残留している」とは、第1バッファ層の平均格子歪みが負の値であることに相当する。本明細書で開示する半導体ウエハでは、多層バッファ層を構成している多層構造の各層において、平均格子歪みの絶対値が最も大きい層は、第1バッファ層以外の層である。すなわち、第1バッファ層の平均格子歪みの絶対値は、多層バッファ層を構成している多層構造の各層のうち、最大ではない。

[0025] 多層バッファ層の材料は、 $A_{1-x}Ga_{1-x}N$ ($0 < x < 1$) で示される窒化物半導体を用いることができる。また、第1バッファ層は、 $A_{1-x}Ga_{1-x}N$ ($0 < x < 0.5$) で示される窒化物半導体であることが好ましい。より好ましくは、第1バッファ層は、 $A_{1-x}Ga_{1-x}N$ ($0 < x < 0.2$) で示される窒化物半導体である。第1バッファ層の平均格子定数が $A_{1-x}N$ よりも GaN (窒化物半導体) に近くなるので、III族窒化物半導体層と第1バッファ層の平均格子定数の差が小さくなり、III族窒化物半導体層の界面格子歪みを小さくすることができる。

[0026] 多層バッファ層が $A_{1-x}Ga_{1-x}N$ ($0 < x < 1$) で示される窒化物半導体の場合、多層バッファ層の各層は「 x 」の値が異なることがある。なお、「 x 」の値は、表面 (III族窒化物半導体層側) に向かうに従って小さくなっていることが好ましい。すなわち、多層バッファ層は、表面に向かうに従って A_{1-x} 組成が小さくなる多層構造であることが好ましい。あるいは、多層バッファ層は、異なる材料を繰り返し積層した構造とすることもできる。例えば、多層バッファ層は、 $A_{1-x}N$ と GaN の積層構造が繰り返し設けられている構造とすることができる。あるいは、多層バッファ層は、 $A_{1-x}N$ と $A_{1-x}Ga_{1-x}N$ の積層構造が繰り返し設けられている構造とすることもできる。多層バッファ層の厚みは $0.5 \sim 10 \mu m$ とすることができる。

[0027] III族窒化物半導体層は、単層であってもよいし、複層であってもよい。なお、単層のIII族窒化物半導体層とは、III族窒化物半導体層の表面から裏面までの組成が同一であることを意味する。また、複層のIII族窒化物半導体層とは、III族窒化物半導体層がIII族元素の組成が異なる複数の層を備えていることを意味する。単層のIII族窒化物半導体層の場合、III族窒化物半導体層の材料は、ガリウム（Ga）を主体とするIII族窒化物半導体であることが好ましい。また、複層のIII族窒化物半導体層の場合、複数の層のうち、少なくとも第1バッファ層に接する層の材料がガリウムを主体とするIII族窒化物半導体であることが好ましい。なお、「ガリウムを主体とするIII族窒化物半導体」とは、典型的には窒化ガリウム（GaN）を意味し、不純物としてGaNに対して1%未満の原子%のオーダーでB, Al, In, C, Si, Ge, Mg, S, Fe, As, Sb等の元素を含有している窒化ガリウムも含まれる。

[0028] III族窒化物半導体層は、炭素を含んでいることが好ましい。III族窒化物半導体層が炭素を含むことにより、半導体装置がオフ状態のときにリーク電流が流れることを抑制することができる。III族窒化物半導体層は、機能層（半導体素子を構成する層）として利用することができる。単層のIII族窒化物半導体層を機能層として利用することもできる。また、複層のIII族窒化物半導体層のうちの、第1バッファ層に接する層より表面側に設けられたIII族窒化物半導体層を機能層として利用することもできる。本明細書で開示する半導体ウエハでは、III族窒化物半導体層と第1バッファ層との界面における窒化物半導体素子の界面格子歪み（窒化物半導体素子の界面格子歪み）が、第1バッファ層と第2バッファ層の界面における第1バッファ層の界面格子歪み（第1バッファ層の界面格子歪み）より小さい。窒化物半導体素子の界面格子歪みが第1バッファ層の界面格子歪みより小さいことにより、III族窒化物半導体層に歪み誘因ステップバンチングが発生することを抑制することができる。

（第1実施例）

図1を参照し、半導体ウエハ1について説明する。半導体ウエハ1は、シリコン基板2と、シリコン基板2上に形成された界面層4と、界面層4上に形成されたAlN層6と、AlN層6上に形成された多層バッファ層8と、多層バッファ層8上に形成されたIII族窒化物半導体層10と、III族窒化物半導体層10に形成された窒化物半導体機能層12を備えている。シリコン基板2の厚みT2は675 μm である。界面層4の材料は Al_2O_3 である。界面層4の厚みT4は3 nm未満になるように調整されている。AlN層6の厚みT6は0.3 μm に調整されている。多層バッファ層8の材料は $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ である。多層バッファ層8の厚みT8は2.5 μm に調整されている。

[0029] 多層バッファ層8は、第1バッファ層8a、第2バッファ層8b、第3バッファ層8c及び第4バッファ層8dを備えた4層構造である。第1バッファ層8aがIII族窒化物半導体層10に接しており、第4バッファ層8dがAlN層6に接している。なお、第1バッファ層8aから第4バッファ層8dに向かうに従って $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ の「x」の値が大きくなっている。第1バッファ層8aの厚みは0.8 μm に調整されており、第2バッファ層8bの厚みは0.2 μm に調整されており、第3バッファ層8cの厚みは0.5 μm に調整されており、第4バッファ層8dの厚みは1.0 μm に調整されている。なお、界面層4は、原子層堆積法（ALD法）を用いて形成されている。界面層4の原料として、Al原料はトリメチルアルミニウム、O原料はオゾンが用いられている。また、AlN層6及び多層バッファ層8は、有機金属気相成長法（MOCVD法）を用いて形成されている。AlN層6及び多層バッファ層8の原料として、Al原料はトリメチルアルミニウム、Ga原料はトリメチルガリウム、N原料はアンモニアが用いられている。なお、成長温度はおよそ1000℃である。

[0030] III族窒化物半導体層10の材料は、窒化ガリウム（GaN）である。III族窒化物半導体層10の厚みは0.6 μm に調整されており、窒化物半導体機能層12の厚みは0.4 μm に調整されている。III族窒化物半導体層10

は、炭素を $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 含んでいる。III族窒化物半導体層 10 に導入されている炭素は、窒化物半導体機能層 12 に作りこまれた半導体素子とシリコン基板 2 の間にリーク電流が流れることを防止する。窒化物半導体機能層 12 は、不純物を含まない i 型である（不可避の炭素を含んでいることはある）。窒化物半導体機能層 12 を用いて半導体素子を形成することができる。

[0031] 図 2 は、半導体ウエハ 1 について、AlN 層 6、多層バッファ層 8 及び III 族窒化物半導体層 10 の特性を示している。なお、Al 組成 (x) は、各層を $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ で示したときの「x」の値に相当する。以下、各層の特性の算出方法について説明する。なお、以下の計算式では、III族窒化物半導体層 10 を GaN とし、第 1 バッファ層 8a を TOP とし、第 1 バッファ層 8a から「i」番目のバッファ層を i と示す。例えば、第 2 バッファ層 8b は「i = 1」であり、第 3 バッファ層 8c は「i = 2」である。

[0032] 各層の平均格子定数は、X線逆格子マッピングによって測定した。具体的には、114 回折と 004 回折の逆格子マッピングのピークから、GaN, TOP, 「i」の 114 面の面間隔 d_{114j} と 004 面の面間隔 d_{004j} を求めた ($j = \text{GaN}, \text{TOP}, i$)。面間隔 d_{114j} と d_{004j} を用いて、a 軸方向の平均格子定数 a'_j と c 軸方向の平均格子定数 c'_j を下記式 (1), (2) より算出した。図 2 には、下記式 (1) により算出した平均格子定数 a'_j を示している。

$$\text{式 (1)} : a'_j = 2 \times d_{110j} = 2 \times \{ (1/d_{114j}^2) - (1/d_{004j}^2) \}^{-0.5}$$

$$\text{式 (2)} : c'_j = 4 \times d_{004j}$$

次に、Al 組成 (x) について説明する。Al 組成 (x) は、X線逆格子マッピングによって得られた面間隔 d_{114j} , d_{004j} , 上記式 (1), (2) で得られた結果を用いて、下記式 (3) の「x」を求めることにより算出した。なお、 a_{AlN} は AlN の a 軸の理想格子定数であり、 c_{AlN} は AlN の c 軸の理想格子定数である。AlN の理想格子定数 a_{AlN} , c_{AlN} は、各々 3.

112 Å (=0.3112 nm), 4.980 Å (=0.4980 nm) である。また、Ga_Nの理想格子定数 a_{GaN} , c_{GaN} は、各々 3.189 Å (=0.3189 nm), 5.185 Å (=0.5185 nm) である。なお、ポアソン比として $\sigma = 0.38$ を用いた。ポアソン比については、「T. Detchprohm et al., Jpn. J. Appl. Phys. 31, L454 (1992)」に開示されている。

式(3) : $(1 + \sigma) \times (a_{\text{GaN}} - a_{\text{AlN}}) \times (c_{\text{GaN}} - c_{\text{AlN}}) \times x^2 - \{ [(1 + \sigma) \times c_{\text{GaN}}] - c'_{\text{j}} \} \times (a_{\text{GaN}} - a_{\text{AlN}}) + [(1 + \sigma) \times a_{\text{GaN}} - \sigma \times a'_{\text{j}}] \times (c_{\text{GaN}} - c_{\text{AlN}}) \} \times x + \sigma \times c_{\text{GaN}} \times (a_{\text{GaN}} - a'_{\text{j}}) + a_{\text{GaN}} \times (c_{\text{GaN}} - c'_{\text{j}}) = 0$

次に、バッファ層のa軸の理想格子定数の算出方法について説明する。上記したように、Ga_Nの理想格子定数 a_{GaN} は、3.189 Å (=0.3189 nm) であり、Al_Nの理想格子定数 a_{AlN} は、3.112 Å (=0.3112 nm) である。バッファ層の各層(TOP, i)の理想格子定数 a_{j} は、各層を $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ で示したときの各層の「x」の値を変数として下記式(4)より算出した。

式(4) : $a_{\text{j}} = 3.112 \times x + 3.189 \times (1 - x)$

次に、平均格子歪み ε_{j} ($\text{j} = \text{GaN}, \text{TOP}, \text{i}$) と、III族窒化物半導体層の界面格子歪み $\varepsilon_{\text{if_GaN}}$ と、第1バッファ層の界面格子歪み $\varepsilon_{\text{if_TOP}}$ と、歪み緩和率 R_{j} ($\text{j} = \text{GaN}, \text{TOP}, \text{i}$) について説明する。 ε_{j} , $\varepsilon_{\text{if_GaN}}$, $\varepsilon_{\text{if_TOP}}$, R_{j} は、上記式(1)～(4)で得られた結果を用いて、下記式(5)～(8)より算出した。なお、平均格子歪み、界面格子歪みは、正の値の場合は引張歪みであり、負の値の場合は圧縮歪みである。そのため、格子歪みの大小関係は、実際の数値を比較するのではなく、絶対値を比較する。また、下記式(8)において、 $\text{j} = \text{GaN}$ の場合、 $\text{j}+1$ は TOP に相当する。同様に、 $\text{j} = \text{TOP}$ の場合、 $\text{j}+1$ は $\text{i} = 1$ に相当する。

式(5) : $\varepsilon_{\text{j}} (\text{j} = \text{GaN}, \text{TOP}, \text{i}) = (a'_{\text{j}} - a_{\text{j}}) / a_{\text{j}}$

式(6) : $\varepsilon_{\text{if_GaN}} = (a'_{\text{TOP}} - a_{\text{GaN}}) / a_{\text{GaN}}$

$$\text{式 (7)} : \varepsilon_{\text{if_TOP}} = (a'_{-1} - a_{\text{TOP}}) / a_{\text{TOP}}$$

$$\text{式 (8)} : R_j (j = \text{Ga N, TOP, i}) = (a'_j - a_{j+1}') / (a_j - a_{j+1}')$$

図2に示すように、半導体ウエハ1では、III族窒化物半導体層10の界面格子歪み($\varepsilon_{\text{if_Ga N}}$)が、第1バッファ層8aの界面格子歪み($\varepsilon_{\text{if_TOP}}$)より小さい。また、第2バッファ層8bの平均格子歪み ε'_{-1} が、バッファ層8a~8dの平均格子歪みのなかで最大である。すなわち、第1バッファ層8aの平均格子歪み(ε_{TOP})は、多層バッファ層8を構成する層の平均格子歪み($\varepsilon_{1\sim3}$)のなかで最大ではない。なお、第1バッファ層8aの平均格子定数が3.1815 Å (=0.31815 nm)であり、第2バッファ層8bの平均格子定数が3.1378 Å (=0.31378 nm)である。そのため、第1バッファ層8aは、第2バッファ層8bに対してコヒーレントではないといえる。なお、X線逆格子マッピング測定における誤差(X線逆格子マッピング測定の精度)によって、第1バッファ層と第2バッファ層がコヒーレントな状態であっても、両者の平均格子定数が異なることもある。しかしながら、X線逆格子マッピング測定の精度を考慮しても、オングストローム(Å)の単位で平均格子定数の小数点以下3桁までを比較したときに第1バッファ層と第2バッファ層の平均格子定数に相違が見られれば、第1バッファ層と第2バッファ層はコヒーレントではないといえる。

(第2実施例)

図3を参照し、半導体ウエハ11について説明する。半導体ウエハ11は、半導体ウエハ1の変形例である。半導体ウエハ11は、多層バッファ層18を構成する層の数が半導体ウエハ1よりも多い。半導体ウエハ11について、半導体ウエハ1と実質的に同じ構造については、半導体ウエハ1と同じ参照番号を付すことにより説明を省略することがある。

[0033] 半導体ウエハ11では、多層バッファ層18が、第1バッファ層18a、第2バッファ層18b、第3バッファ層18c、第4バッファ層18d及び第5バッファ層18eを備えた5層構造である。なお、第1バッファ層18

aは、Al組成(x)が0.08~0.03の組成傾斜層である。第1バッファ層18aの平均Al組成(x)は、0.033である。なお、図4では、小数点第3以下を四捨五入した値(すなわち、 $x=0.03$)を示している。多層バッファ層18の厚み T_{18} は、 $2.43\mu\text{m}$ である。第1バッファ層18aの厚み T_{18a} は $0.63\mu\text{m}$ に調整されている。第2~第5バッファ層18b~18eの厚み $T_{18b}\sim T_{18e}$ は、各々0.1, 0.2, 0.5, $1.0\mu\text{m}$ に調整されている。

[0034] 図4に、半導体ウエハ11について、AlN層6、多層バッファ層18及びIII族窒化物半導体層10の特性を示す。図4に示すように、III族窒化物半導体層10の界面格子歪み($\varepsilon_{\text{if_GaN}}$)が、第1バッファ層18aの界面格子歪み($\varepsilon_{\text{if_TOP}}$)より小さい。また、第2バッファ層18bの平均格子歪み ε'_1 が、バッファ層18a~18eの平均格子歪み(絶対値)のなかで最大である。すなわち、第1バッファ層18aの平均格子歪み(ε_{TOP})は、多層バッファ層18を構成する層の平均格子歪み($\varepsilon_{1\sim4}$)のなかで最大ではない。なお、第1バッファ層18aの平均格子定数が $3.1804\text{\AA}$ (= 0.31804nm)であり、第2バッファ層18bの平均格子定数が $3.1421\text{\AA}$ (= 0.31421nm)である。そのため、第1バッファ層18aは、第2バッファ層18bに対してコヒーレントではないといえる。

[0035] なお、半導体ウエハ11では、III族窒化物半導体層10は、厚みが $0.75\mu\text{m}$ に調整されており、炭素を $4\times 10^{19}\text{cm}^{-3}$ 含んでいる。窒化物半導体機能層12は、厚みが $0.48\mu\text{m}$ に調整されており、i型である。一例として、半導体ウエハ11では、窒化物半導体機能層12の表面に、AlGaIn障壁層20nm、GaNキャップ層5nmが形成される。それにより、ヘテロ接合の2次元電子ガスとチャネルとして動作するHEMT構造を備える半導体装置を製造することができる。

[0036] なお、上記した半導体ウエハ11を用いて種々の半導体装置を製造することができる。一例として、半導体ウエハ11の表面にゲート電極、ソース電極及びドレイン電極を形成し、電界効果トランジスタを製造するこ

とができる。この場合、ゲート電極は、絶縁膜を介して窒化物半導体機能層 12 に対向させる。また、ソース電極及びドレイン電極は、窒化物半導体機能層 12 にオーミック接触させる。窒化物半導体機能層 12 は、電界効果トランジスタのチャネル層として機能する。また、他の一例として、半導体ウエハ 1, 11 の表面にショットキー電極とオーミック電極を形成し、ショットキーダイオードを製造することもできる。この場合、窒化物半導体機能層 12 は、ショットキーダイオードの通電層として機能する。

(第3実施例)

第3実施例の半導体ウエハについて説明する。本実施例の半導体ウエハの構造は、第1実施例の半導体ウエハ1と実質的に同じである。しかしながら、本実施例の半導体ウエハは、各層の特性が異なる。以下、図5を参照し、半導体ウエハ1との相違点を説明する。

[0037] 本実施例の半導体ウエハは、第1バッファ層8aの平均格子歪み ε'_{TOP} が、バッファ層8a～8dの平均格子歪み（絶対値）のなかで最大である点が、第1実施例の半導体ウエハ1と異なる。すなわち、バッファ層のIII族窒化物半導体層10と接する部分が、最も高い圧縮歪みを有している。この相違は、製造条件（バッファ層の成長条件）を調整することで生じさせることができる。なお、本実施例の半導体ウエハにおいても、III族窒化物半導体層10の界面格子歪み（ ε_{if_GaN} ）が第1バッファ層8aの界面格子歪み（ ε_{if_TOP} ）より小さいという点において、第1実施例の半導体ウエハ1と共通の特性を有している。

(実験例)

実施例1から3の半導体ウエハについて、表面粗さの測定を実施した。結果を、図8に示す。表面粗さは、50 μ m角領域における原子間力顕微鏡（Atomic Force Microscope）の二乗平均面粗さ（RMS）である。併せて、比較例1, 2の半導体ウエハの表面粗さの測定も実施した。まず、比較例1, 2の半導体ウエハの特徴を説明する。

[0038] 比較例1の半導体ウエハの特性を図6に示す。比較例1の半導体ウエハは

、A l 組成 (x) が異なる4層のバッファ層を備えている。第1バッファ層の厚みは、 $0.5 \mu\text{m}$ である。III族窒化物半導体層は、炭素が $4 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 含まれており、厚みは $0.4 \mu\text{m}$ である。比較例1では、III族窒化物半導体層の表面にi型の窒化物半導体機能層が積層されている。窒化物半導体機能層の厚みは $0.6 \mu\text{m}$ である。比較例1の半導体ウエハは、第1バッファ層の平均格子歪み $\varepsilon'_{\text{TOP}}$ が、第1～第4バッファ層の平均格子歪み(絶対値)のなかで最大である。また、III族窒化物半導体層の界面格子歪み($\varepsilon_{\text{if_GaN}}$)が、第1バッファ層の界面格子歪み($\varepsilon_{\text{if_TOP}}$)より大きい。

[0039] 比較例2の半導体ウエハの特性を図7に示す。比較例1の半導体ウエハは、A l 組成 (x) が異なる4層のバッファ層を備えている。第1バッファ層の厚みは、 $0.44 \mu\text{m}$ である。III族窒化物半導体層は、炭素が $1.5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 含まれており、厚みは $0.66 \mu\text{m}$ である。比較例2では、III族窒化物半導体層の表面にi型の窒化物半導体機能層が積層されている。窒化物半導体機能層の厚みは $0.33 \mu\text{m}$ である。また、比較例2では、i型の窒化物半導体機能層の表面に、A l GaN障壁層 20nm 、GaNキャップ層 5nm が形成されている。比較例2の半導体ウエハは、第1バッファ層の平均格子歪み $\varepsilon'_{\text{TOP}}$ が、第1～第4バッファ層の平均格子歪み(絶対値)のなかで最大である。また、III族窒化物半導体層の界面格子歪み($\varepsilon_{\text{if_GaN}}$)が、第1バッファ層の界面格子歪み($\varepsilon_{\text{if_TOP}}$)より大きい。

[0040] 実施例1から3、比較例1及び2について、X線回折によりIII族窒化物半導体層のc軸の成長面に対する傾斜角を測定した。実施例1から3のIII族窒化物半導体層のc軸は、成長面の垂線に対してm軸方向に各々 0.22 度、 0.31 度、 0.30 度傾斜していた。また、比較例1及び2のIII族窒化物半導体層のc軸は、成長面の垂線に対してm軸方向に各々 0.26 度、 0.33 度傾斜していた。

[0041] 図8では、III族窒化物半導体層の界面格子歪み($\varepsilon_{\text{if_GaN}}$)が、第1バッファ層aの界面格子歪み($\varepsilon_{\text{if_TOP}}$)より小さいという条件(条件1)を満足する実験例に○を記し、満足しない実験例に×を記している。また、第

1 バッファ層の平均格子歪み（絶対値， $|\varepsilon_{\text{TOP}}|$ ）が多層バッファ層を構成する層のなかで最大でないという条件（条件2）を満足する実験例に○を記し、満足しない実験例に×を記している。また、RMSの値が5.0以下の実験例に◎を記し、10.0以下の実験例に○を記し、10.0以上の実験例に×を記している。

[0042] 図8に示すように、条件1を満足すると、RMS値が小さくなり、表面が平滑な半導体ウエハが得られることが確認できる（実施例1～3）。特に、条件1と条件2の双方を満足すると、RMS値が5.0以下となり、半導体ウエハの表面が極めて平滑であることが確認できる。なお、実施例の半導体ウエハは、III族窒化物半導体層の平均格子歪み（絶対値）が $3.97 \times 10^{-4} \sim 1.03 \times 10^{-3}$ であり、比較例のIII族窒化物半導体層の平均格子歪み（ 2.44×10^{-3} ， 2.04×10^{-3} ）の半分以下である。III族窒化物半導体層の界面格子歪み（ $\varepsilon_{\text{if_GaN}}$ ）を第1バッファ層aの界面格子歪み（ $\varepsilon_{\text{if_TOP}}$ ）より小さくすることにより、III族窒化物半導体層の歪が低減され、歪み誘因ステップバンチングが抑制されることを示している。なお、実施例1～3の半導体ウエハは、第1バッファ層の第2バッファ層に対する歪み緩和率（ R_{TOP} ）が、各々0.974，0.863，0.837である（図2，4及び5を参照）。すなわち、実施例1～3の半導体ウエハは、歪み緩和率（ R_{TOP} ）が0.8以上である。それに対して、比較例1及び2の半導体ウエハは、歪み緩和率（ R_{TOP} ）が、各々0.464，0.431であり、実施例1～3の半導体ウエハと比較して小さい（図6及び7を参照）。

[0043] また、実施例1及び2のIII族窒化物半導体層の平均格子歪み（ 3.97×10^{-4} ， 4.96×10^{-4} ）は、条件1と条件2の双方を満足することにより、比較例のIII族窒化物半導体層の平均格子歪みの4分の1以下である。このことは、第1バッファ層の平均格子歪みを小さくすることにより、III族窒化物半導体層が歪みを内在したまま成長することを抑制し、歪み誘因ステップバンチングの発生を抑制することができることを示している。すなわち、第1バッファ層の平均格子歪みが多層バッファ層のなかで最大であると、III

族窒化物半導体層が歪みを引き継いだ状態で成長し易くなる。

[0044] 上記したように、実施例1と3は、III族窒化物半導体層より上層の構造が等しい。実施例1と3は、条件2を満足するか否かが相違している。実施例1と3についてX線半値幅の比較を行ったところ、螺旋成分転位に関する004回折半値幅は、各々390sec（実施例1）、470sec（実施例3）であった。また、刃状成分転位の情報を含む114回折半値幅は、各々540sec（実施例1）、740sec（実施例3）であった。条件1と2の双方を満足することにより、X線半値幅が狭く、結晶性が良くなることを示している。特に、刃状転位密度は、実施例1は実施例3の $1/2 \sim 1/3$ 程度に抑制されていた。このことは、条件1と2の双方を満足することにより、界面格子歪みは大きい、平均格子歪みの小さい第1バッファ層が形成され、第1バッファ層内で大きな歪み緩和が起こり、その過程で逆極性のバーガースベクトルを有する刃状転位が対消滅したためと考えられる。条件1と2の双方を満足することにより、転位密度の低減効果があることも示された。なお、逆極性のバーガースベクトルを有する転位の対消滅が起こる場合、第1バッファ層は成長温度で圧縮歪みであり、室温において残留する歪みは圧縮または無歪みである。すなわち、室温において、第1バッファ層には、少なくとも引っ張り歪みは残留していない。

[0045] 半導体ウエハの反りは、III族窒化物半導体層の「歪み」と「膜厚」の積に応じて変化する。すなわち、III族窒化物半導体層の歪みが大きいと、僅かな膜厚の変化によって半導体ウエハの反り量が大きく変化する。そのため、III族窒化物半導体層が歪みを内在したまま成長すると、半導体ウエハの反り量を制御することが困難になる。本明細書で開示する技術によると、III族窒化物半導体層が歪みを内在したまま成長することを抑制されるので、膜厚に誤差が生じて、バッチ間の反り量のばらつきを抑制することができる。半導体ウエハ1は、反り量の制御のロバスト性を向上させることもできる。

[0046] なお、上記実施例では、式2及び式3を用いて多層バッファ層の各層のA1組成(x)を算出した。しかしながら、A1組成(x)は、バッファ層の

断面についてカソードルミネッセンス測定（CL測定）を行い、バンド端発光ピーク E_{Gap} （eV）から光学的に求めることもできる。すなわち、バンド端発光ピーク E_{Gap} （eV）を測定し、下記式（8）の「x」を算出することにより、Al組成（x）を求めることができる。なお、下記式の「b」は、ボーイングパラメータと呼ばれ、例えば $b = 0.82 \text{ eV}$ が用いられる。ボーイングパラメータについては、（T. Onuma et al., J. Appl. Phys. 95, 2495（2004））に開示されている。

式（8）： $E_{Gap}(x) = 3.4 \times (1 - x) + 6.2 \times x - b \times x \times (1 - x)$

また、多層バッファ層にAlN/GaN等の多層周期構造を用いる場合の平均組成xは、AlN/GaNの膜厚比を断面TEM（Transmission Electron Microscope）等で求めることによって算出することができる。また、AlN/AlGa_{1-x}N、Al_xGa_{1-x}N/Al_yGa_{1-y}Nを含む多層周期構造の場合、CL測定により各層のAl組成（x）を算出し、断面TEMによる膜厚測定を組み合わせることにより平均Al組成（x）に換算することができる。

[0047] また、上記実施例では、多層バッファ層が4層又は5層の半導体ウエハについて説明した。しかしながら、多層バッファ層は、少なくとも2層（III族窒化物半導体層に接する第1バッファ層と、第1バッファ層に接する第2バッファ層）存在すればよい。また、多層バッファ層が6層以上である構造も取り得る。なお、多層バッファ層にAlN/GaN等の多層周期構造が用いられている場合であって、多層バッファ層内において層の周期・膜厚比が異なる場合、周期・膜厚比が一定の領域ごとに多層バッファ層を仮想的に分割し、仮想的に分割した層における平均格子定数 a'_j （ $j = \text{TOP}, i$ ）を各バッファ層 j （ $j = \text{TOP}, i$ ）とすることができる。また、上記したように、バッファ層内の一部の層が組成傾斜層である場合、その組成傾斜層内の平均格子定数で a'_j （ $j = \text{TOP}, i$ ）を決定することができる。

[0048] 上記実施例では、III族窒化物半導体層の表面に i 型の半導体機能層を設ける例について説明したが、さらに、n 型又は p 型の不純物を含む層を設けることもできる。また、ヘテロ接合を構成する場合、I n N との混晶のヘテロ接合が含まれる構造も取り得る。

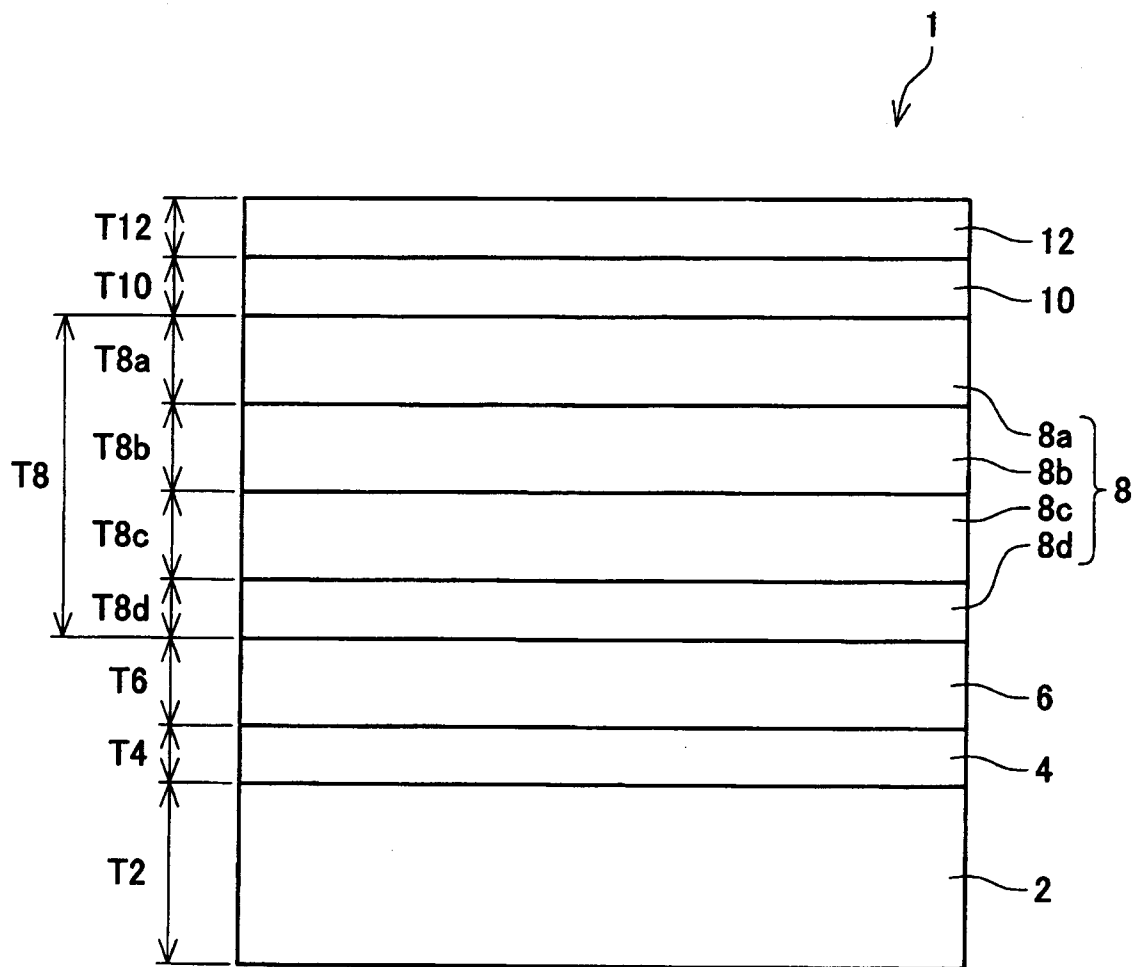
[0049] 本開示は、実施例に準拠して記述されたが、本開示は当該実施例や構造に限定されるものではないと理解される。本開示は、様々な変形例や均等範囲内の変形をも包含する。加えて、様々な組み合わせや形態、さらには、それらに一要素のみ、それ以上、あるいはそれ以下、を含む他の組み合わせや形態をも、本開示の範疇や思想範囲に入るものである。

請求の範囲

- [請求項1] 基板と、
 基板上に多層バッファ層を介して設けられたIII族窒化物半導体層とを備え、
 前記多層バッファ層は、少なくとも第1 バッファ層と第2 バッファ層を含んでおり、
 前記第1 バッファ層は、前記III族窒化物半導体層に接しており、
 前記第2 バッファ層は、前記第1 バッファ層に接しており、前記第1 バッファ層とは組成が異なり、
 前記多層バッファ層の平均格子定数が、前記III族窒化物半導体層より小さく、
 前記III族窒化物半導体層と前記第1 バッファ層との界面における前記III族窒化物半導体層の界面格子歪みが、前記第1 バッファ層と前記第2 バッファ層の界面における前記第1 バッファ層の界面格子歪みより小さい半導体ウエハ。
- [請求項2] 前記多層バッファ層の各層において、平均格子歪みが最も大きい層が前記第1 バッファ層以外の層である請求項1 に記載の半導体ウエハ。
- [請求項3] 前記第1 バッファ層は、前記第2 バッファ層に対してコヒーレントではない状態である請求項1 又は2 に記載の半導体ウエハ。
- [請求項4] 前記第1 バッファ層の前記第2 バッファ層に対する歪み緩和率が、0.8以上である請求項3 に記載の半導体ウエハ。
- [請求項5] 前記第1 バッファ層は、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($0 < x < 0.2$) で示される窒化物半導体である請求項1 から4 のいずれか一項に記載の半導体ウエハ。
- [請求項6] 前記III族窒化物半導体層のc軸が、成長面の垂線に対して傾斜している請求項1 から5 のいずれか一項に記載の半導体ウエハ。

- [請求項7] 前記III族窒化物半導体層は単層であり、その材料が窒化ガリウムである請求項1から6のいずれか一項に記載の半導体ウエハ。
- [請求項8] 前記III族窒化物半導体層は、III族元素の組成が異なる複数の層を備えており、
前記複数の層のうち、前記第1バッファ層に接する層の材料が窒化ガリウムである請求項1から6のいずれか一項に記載の半導体ウエハ。
。
- [請求項9] 前記基板の材料が、シリコンである請求項1から8のいずれか一項に記載の半導体ウエハ。
- [請求項10] 基板と、
基板上に多層バッファ層を介して設けられたIII族窒化物半導体層とを備え、
そのIII族窒化物半導体層の表面側に半導体素子が形成されており、
前記多層バッファ層は、少なくとも第1バッファ層と第2バッファ層を含んでおり、
前記第1バッファ層は、前記III族窒化物半導体層に接しており、
前記第2バッファ層は、前記第1バッファ層に接しており、前記第1バッファ層とは組成が異なり、
前記多層バッファ層の平均格子定数が、前記III族窒化物半導体層より小さく、
前記III族窒化物半導体層と前記第1バッファ層との界面における前記III族窒化物半導体層の界面格子歪みが、前記第1バッファ層と前記第2バッファ層の界面における前記第1バッファ層の界面格子歪みより小さい半導体装置。

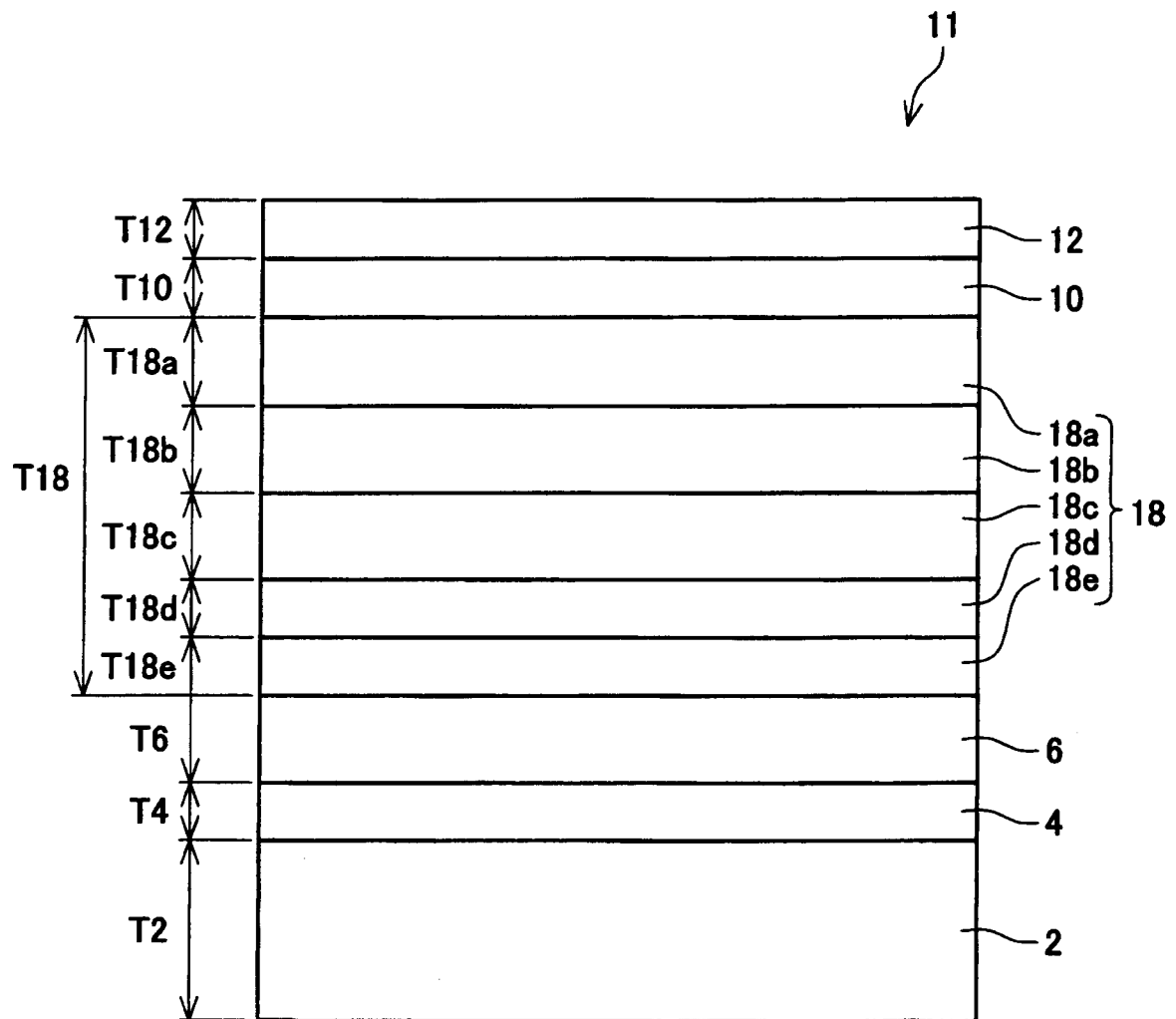
[図1]



[図2]

		平均格子定数 a'_j [Å]	理想格子定数 a_j [Å]	Al組成(x)	平均格子歪み ε_j	界面格子歪み ε_{If_j}	歪み緩和率 R_j
窒化物半導体層	(j = GaN)	3.1877	3.1890	0.00	-3.97E-04	-2.35E-03	0.831
第1バツプア層	(j = TOP)	3.1815	3.1827	0.08	-3.71E-04	-1.41E-02	0.974
第2バツプア層	(j = 1)	3.1378	3.1440	0.58	-1.99E-03	--	0.277
第3バツプア層	(j = 2)	3.1354	3.1348	0.70	1.92E-04	--	--
第4バツプア層	(j = 3)	3.1309	3.1256	0.82	1.69E-03	--	--
AlN層		3.1219	3.1120	1.00	--	--	--

[図3]



[図4]

	平均格子定数 a'_j [Å]	理想格子定数 a_j [Å]	Al組成(x)	平均格子歪み ϵ_j	界面格子歪み $\epsilon_{if,j}$	歪み緩和率 R_j
窒化物半導体層 (j = GaN)	3.1874	3.1890	0.00	-4.96E-04	-2.71E-03	0.817
第1バッファ層 (j = TOP)	3.1804	3.1864	0.03	-1.90E-03	-1.39E-02	0.863
第2バッファ層 (j = 1)	3.1421	3.1633	0.33	-6.71E-03	--	0.192
第3バッファ層 (j = 2)	3.1370	3.1473	0.54	-3.26E-03	--	--
第4バッファ層 (j = 3)	3.1340	3.1372	0.67	-1.01E-03	--	--
第5バッファ層 (j = 4)	3.1279	3.1272	0.80	2.26E-04	--	--
AlN層	3.1205	3.1120	1.00	--	--	--

[図5]

	平均格子定数 a'_j [Å]	理想格子定数 a_j [Å]	Al組成(x)	平均格子歪み ε_j	界面格子歪み ε_{If_j}	歪み緩和率 R_j
窒化物半導体層 (j = GaN)	3.1857	3.1890	0.00	-1.03E-03	-4.21E-03	0.756
第1バツプア層 (j = TOP)	3.1756	3.1830	0.08	-2.33E-03	-1.43E-02	0.837
第2バツプア層 (j = 1)	3.1375	3.1441	0.58	-2.11E-03	--	0.266
第3バツプア層 (j = 2)	3.1351	3.1348	0.70	6.84E-05	--	--
第4バツプア層 (j = 3)	3.1295	3.1258	0.82	1.18E-03	--	--
AlN層	3.1221	3.1120	1.00	--	--	--

[図6]

	平均格子定数 a'_j [Å]	理想格子定数 a_j [Å]	Al組成(x)	平均格子歪み ε_j	界面格子歪み $\varepsilon_{\text{If}_j}$	歪み緩和率 R_j
窒化物半導体層 (j = GaN)	3.1812	3.1890	0.00	-2.44E-03	-9.88E-03	0.753
第1バツファ層 (j = TOP)	3.1575	3.1721	0.22	-4.61E-03	-8.60E-03	0.464
第2バツファ層 (j = 1)	3.1448	3.1523	0.48	-2.36E-03	--	0.523
第3バツファ層 (j = 2)	3.1367	3.1350	0.70	5.51E-04	--	--
第4バツファ層 (j = 3)	3.1316	3.1259	0.82	1.85E-03	--	--
AlN層	3.1226	3.1120	1.00	--	--	--

[図7]

	平均格子定数 a_j [Å]	理想格子定数 a_j [Å]	Al組成(x)	平均格子歪み ε_j	界面格子歪み ε_{If_j}	歪み緩和率 R_j
窒化物半導体層 (j = GaN)	3.1825	3.1890	0.00	-2.04E-03	-1.16E-02	0.825
第1バツプア層 (j = TOP)	3.1520	3.1693	0.26	-5.47E-03	-9.60E-03	0.431
第2バツプア層 (j = 1)	3.1389	3.1501	0.50	-3.58E-03	---	0.341
第3バツプア層 (j = 2)	3.1330	3.1327	0.73	8.85E-05	---	---
第4バツプア層 (j = 3)	3.1275	3.1244	0.84	9.89E-04	---	---
AlN層	3.1206	3.1120	1.00	---	---	---

[図8]

	条件1	条件2	RMS	表面粗さ
実施例1	○	○	4.2	◎
実施例2	○	○	4.2	◎
実施例3	○	×	5.5	○
比較例1	×	×	23.3	×
比較例2	×	×	17.4	×

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/001896

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

H01L21/205(2006.01)i, H01L21/20(2006.01)i, H01L21/338(2006.01)i,
H01L29/778(2006.01)i, H01L29/812(2006.01)i, H01L29/872(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

H01L21/205, H01L21/20, H01L21/338, H01L29/778, H01L29/812, H01L29/872

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2016
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2016	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2016

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y	JP 2014-192226 A (Sharp Corp.), 06 October 2014 (06.10.2014), paragraphs [0020] to [0022]; fig. 1 (Family: none)	1-5, 8-10 6-8
X Y	JP 2013-021124 A (DOWA Electronics Materials Co., Ltd.), 31 January 2013 (31.01.2013), paragraphs [0022] to [0054]; fig. 1 to 2 & US 2014/0209862 A1 paragraphs [0025] to [0057]; fig. 1 to 2 & WO 2013/008461 A1 & TW 201318202 A & CN 103782375 A	1-5, 8-10 6-8

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
14 June 2016 (14.06.16)

Date of mailing of the international search report
28 June 2016 (28.06.16)

Name and mailing address of the ISA/
Japan Patent Office
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/001896

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y	JP 2007-067077 A (Nippon Telegraph and Telephone Corp.), 15 March 2007 (15.03.2007), claims; paragraphs [0017] to [0033]; fig. 3, 6 to 9 (Family: none)	1-7, 9-10 6-8
A	WO 2013/108733 A1 (Sharp Corp.), 25 July 2013 (25.07.2013), & JP 2013-145821 A & US 2014/0353587 A1 & CN 104054166 A	1-10

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl. H01L21/205(2006.01)i, H01L21/20(2006.01)i, H01L21/338(2006.01)i, H01L29/778(2006.01)i, H01L29/812(2006.01)i, H01L29/872(2006.01)i

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl. H01L21/205, H01L21/20, H01L21/338, H01L29/778, H01L29/812, H01L29/872

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	1922-1996年
日本国公開実用新案公報	1971-2016年
日本国実用新案登録公報	1996-2016年
日本国登録実用新案公報	1994-2016年

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X Y	JP 2014-192226 A (シャープ株式会社) 2014. 10. 06, 段落【0020】 - 【0022】, 第1図 (ファミリーなし)	1-5, 8-10 6-8
X Y	JP 2013-021124 A (DOWAエレクトロニクス株式会社) 2013. 01. 31, 段落【0022】 - 【0054】, 第1-2図 & US 2014/0209862 A1, 段落【0025】 - 【0057】, 第1-2図 & WO 2013/008461 A1 & TW 201318202 A & CN 103782375 A	1-5, 8-10 6-8

☑ C欄の続きにも文献が列挙されている。

☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの

「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの

「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)

「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

「&」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

14. 06. 2016

国際調査報告の発送日

28. 06. 2016

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/J P)

郵便番号100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

桑原 清

50

9375

電話番号 03-3581-1101 内線 3559

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X Y	JP 2007-067077 A (日本電信電話株式会社) 2007. 03. 15, 特許請求 の範囲, 段落【0017】 - 【0033】, 第 3, 6-9 図 (ファミリーなし)	1-7, 9-10 6-8
A	WO 2013/108733 A1 (シャープ株式会社) 2013. 07. 25, & JP 2013-145821 A & US 2014/0353587 A1 & CN 104054166 A	1-10