

主論文の要約

論文題目 顕微ラマンマッピングによる GaN 基板中の貫通転位のひずみ場解析
(Strain Field Analysis of Threading Dislocations in GaN Substrate by Micro Raman Mapping)

氏名 小久保 信彦

論文内容の要約

本研究では、ラマン分光法を用いて窒化ガリウム(GaN)単結晶基板における貫通転位のひずみ場を解析した。

第一章では GaN 単結晶における転位の解析手法やデバイスへの悪影響に関する研究背景、ならびに本研究の目的を述べた。GaN バルク単結晶は、その優れた物性値から次世代パワーデバイス用基板として期待されている。デバイス製造では、エピタキシャル成長によって基板の上にデバイス層を堆積させる。基板中に転位が存在すると、エピタキシャル成長時に転位がデバイス層へと伝播し、それらがリーク電流や高抵抗の要因となるため、デバイス品質が劣化する。また、転位の密度や種類、さらには伝播方向によっても、デバイス特性への影響が異なることが知られている。現在市販されている GaN 単結晶基板には多くの転位が存在していることから、転位の特性を解明するためにも基板における転位の評価が重要である。GaN 単結晶の転位の評価には X 線トポグラフィ、エッチング等が用いられる。X 線トポグラフィは、転位の分布および転位種を解析できる一方で実験設備が少ない。また、エッチングは転位の分布を解析できるが破壊分析である。このように、これらの手法はどれも一長一短であるため、研究の目的に応じて使い分けられる。また現状では、非破壊かつ実験室規模の装置で転位のバーガスベクトルを解析できるような手法は存在しない。そこで我々は、ラマン分光法を活用した歪み場解析による転位評価の可能性に着目した。ラマン分光法は、物質にレーザー光を照射し、入射光と少し波長のずれたラマンスペクトルを解析することにより、物質を評価する手法である。ラマンスペクトルには、結晶

中のひずみによってピークシフトが生じるという性質がある。また、ひずみの作用する方向に応じて、ピークのシフト方向が異なることが知られている。この現象を利用し、ピークシフトのマッピングから転位のひずみ場を観察できれば、ひずみ場の分布から転位のバーガスベクトルを同定できると考えられる。しかし、転位が形成するひずみは局所的に分布し、かつ小さいことから、ラマン分光法の分解能では転位のひずみの観測は困難であると考えられていた。そのため、これまでラマン分光法により転位のひずみ場を観測し、バーガスベクトルを解析した例はなかった。そこで我々は、ラマン分光法を用いて GaN 単結晶中の貫通転位のひずみ場を解析することを目的とし、既存の手法による転位の解析結果との比較や、ラマン分光法における測定および解析時の工夫、さらにはシミュレーションを行うことで、転位のバーガスベクトルの解析を行った。

第二章では本研究に関連する理論として、ラマン散乱光の特性、ひずみ場計算ならびに畳み込みニューラルネットワークについて記述した。はじめにラマン散乱光におけるピークシフトの要因について記述し、特定のピークにおいてひずみによるシフトが支配的であることを示した。次に六方晶における連続弾性体近似による転位のひずみ場の式を導出した。この理論は、転位近傍におけるピークシフトのシミュレーションに利用した。最後に、畳み込みニューラルネットワークの計算やネットワークモデルの最適化の方法について記述した。この理論は、第六章における転位の分類に利用した。

第三章では転位の解析に使用した結晶および測定装置、さらにはシミュレーションの手法を説明した。ピークシフトのマッピングでは、本実験条件において最も S/N 比の大きい E_2^H ピークに着目した。転位の局所的かつ小さなひずみを測定するために、測定時の分解能を向上させる工夫について記述した。

第四章では、 E_2^H ピークシフトのマッピング測定の結果を、エッチングや X 線トポグラフィ、さらには TEM 観察と比較することにより、ラマン分光法を用いることで貫通転位のひずみ場を測定でき、バーガスベクトルの刃状成分を解析できることを示した。顕微ラマンによるピークシフトのマッピング像では、複数のピークシフトのコントラストが観察された。この結果を、同一箇所におけるエッチピットの光学顕微鏡像と比較すると、コントラストとエッチピットの位置が一致したため、マッピング像において観察された局所ひずみは貫通転位に起因するものであることがわかった。マッピング像におけるコントラストを詳細に観察すると、高波数側と低波数側にシフトした領域が対となっていることがわかった。ここで、高波数側と低波数側へのピークシフトはそれぞれ圧縮ひずみと引張ひずみの存在を示す。圧縮ひずみと引張ひずみの位置関係がわかればバーガスベクトルの刃状成分の方向を推測できる。これにより推測した結果は、TEM 観察を用いてバーガスベクトルを特定した結果と一致した。したがって、マッピング像における高波数領域と低波数領域が対となったコントラストは、貫通転位の刃状成分のひずみ場に起因し、ピークシフトの分布からバーガスベクトルを推定できることが示された。さらに、0006 回折による X 線トポグラフィ像から転位のらせん成分を解析したところ、らせん成分の有無に関わ

らずマッピング像におけるコントラストが存在していたことから、貫通刃状転位(TED)と貫通混合転位(TMD)の刃状成分をどちらも解析できることがわかった。

第五章では、ピークシフトのマッピングシミュレーションをおこない、マッピング測定の結果と比較することで、バーガースベクトルの大きさや方向、転位線の傾きを解析した。これまでは、理論的に転位近傍のひずみがどの程度のピークシフトを生じさせるか、また、バーガースベクトルの方向や大きさによってピークシフトの分布がどのように変化するかについてはわかっていなかった。そこで、貫通転位近傍におけるピークシフトのマッピング結果をシミュレーションし、マッピング測定の結果を定量的に分析した。その結果、TEDとTMDをモデルとした場合、バーガースベクトルの刃状成分の方向に応じて、高波数領域と低波数領域が対となったコントラストが再現された。また、TSDをモデルとした場合はピークシフトが現れなかった。TEDおよびTMDのシミュレーション結果は、第四章において得られた結果と一致した。また、TSDの位置において、X線トポグラフィ像とマッピング像を比較すると、コントラストが存在しないことがわかった。TSD周辺でピークシフトが現れなかった原因としては、せん断ひずみは E_2^H ピークシフトへの寄与が小さいことが報告されており、せん断ひずみ成分のみを持つTSD周辺でのピークシフトを検出できなかったためと考えられる。以上より、シミュレーションによって転位近傍のピークシフトを再現できたと考えられる。次に、このシミュレーションを用いてバーガースベクトルの大きさや転位の傾きによるピークシフトの変化を調査した。ピークシフトのマッピング像において、高波数領域と低波数領域の位置関係が等しくピークシフトの大きさが異なる2つのコントラストが観察された。これらはバーガースベクトルの方向は等しく大きさの異なる転位であると考えられることから、 $1a \cdot 2a$ 成分をもつ転位のシミュレーションを行った。すると、実験とシミュレーション結果におけるピークシフトのプロファイルの形状が一致したことから、ピークシフトの大きさからバーガースベクトルの大きさを推定できることを示した。さらにマッピング像を観察すると、一方向に伸長した弱いコントラストが確認された。60°傾いた転位のコントラストをシミュレーションしたところ、傾斜方向に伸長した弱いコントラストを再現できた。これより、マッピング像におけるコントラストの伸長およびピークシフトの大きさから、転位の傾きを推定できることを示した。最後に、TEDとTMDに起因するコントラストを比較した。ピークシフトの最大値と最小値の差分を比較すると、TEDとTMDの平均値はそれぞれ 0.043 cm^{-1} 、 0.035 cm^{-1} となった。らせん成分がピークシフトに与える影響は小さいことから、この違いの要因は、らせん転位の有無以外にもあると考えられる。GaN薄膜の先行研究では、TEDはc軸と平行となる一方で、TMDはc軸から約12°傾く結果が報告されている。このことから、TEDとTMDのピークシフトの大きさに違いが現れた原因は、転位の傾きの違いによるものであると考えられる。ここでは、ピークシフトの大きさの差異は確認できた一方で、TEDとTMDにおけるピークシフトの大きさの分布が重なるため明確に分類できなかった。

第六章では、機械学習を用いてラマン分光法から得られたデータを解析した結果につい

て述べた。これまでに、TED と TMD にはピークシフトの大きさの差異があることを発見し、その要因の一つは、転位線の傾きの違いであると考察した。そうであれば、ピークシフトの大きさだけでなく分布にも影響を与えているはずであり、コントラストの画像を詳細に解析することで、TED と TMD を明確に分類できることが期待される。そこで本章では、畳み込みニューラルネットワークを用いて転位の TED と TMD を分類した。同時に、貫通転位の刃状成分の自動分類を試みた。はじめに、TED と TMD の分類を行った。正則化係数、畳み込み層のチャンネル数および全結合層のニューロンの数を変数としてグリッドサーチをすることでモデルのチューニングを行った。その後、同じネットワークモデルを用いてバーガスベクトルの刃状成分の分類を行った。その結果、ピークシフトのマッピング像における転位のコントラストを、80%の確率で TED と TMD に分類し、100%の確率で 6 方向のバーガスベクトルに分類した。TED と TMD を 100%分類できなかった原因は、バーガスベクトルの大きさや転位の傾き、さらには測定ノイズがピークシフトに影響を与えるためと考えられる。以上より、ラマン分光法と機械学習を組み合わせることにより、転位のらせん成分の有無ならびに刃状成分の 6 方向である、計 12 種類の転位を自動的に判定できることが示された。

第七章では結論として本論文の総括を述べた。