

Suppression of Si desorption and residual stress relaxation in 4H-SiC wafers via powder-stacked annealing techniques

Gyeong-Jun Song, Na-Kyeong Kim, Chan-Ho Park, Gwang-Hee Jung, Yun-Ji Shin*, Seong-Min Jeong*, Kap-Ryeol Ku**, Jung-Gon Kim† and Won-Jae Lee†

Department of Advanced Materials Engineering, Dong-Eui University, Busan 47340, Korea

**Korea Institute of Ceramic Engineering and Technology, Jinju 52851, Korea*

***EIN Crystal Co., Ltd., Cheonan 31040, Korea*

(Received September 1, 2026)

(Revised September 9, 2026)

(Accepted September 11, 2026)

Abstract In this study, a crucible configuration with SiC powder loaded in both the upper and lower regions was proposed to suppress surface Si desorption and relax residual stress during high-temperature annealing of 4H-SiC wafers. After annealing at 1,900°C and 750 Torr, the elevated Si partial pressure (24.65 mTorr) and temperature (1,901.0°C) at the wafer edge successfully prevented surface degradation. HR-XRD analysis demonstrated that the Bragg angle shifted closest to the stress-free reference value (17.7914°), achieving maximum stress relaxation. The Raman FTO peak also shifted from 776.4 cm^{-1} to the stress-free value of 776.9 cm^{-1} . Furthermore, wafer warpage was significantly improved, as shown by a decrease in macroscopic BOW and an increase by a factor of approximately 2.8 in microscopic curvature. XRT analysis confirmed the conversion of basal plane dislocations (BPDs) into threading edge dislocations (TEDs) near the surface, and a BPD-to-TED conversion mechanism was proposed.

Key words Silicon carbide, Annealing, Residual stress, BOW, Curvature, Basal plane dislocation, Threading edge dislocation, X-ray topography

SiC 원료 적층 열처리를 통한 4H-SiC 웨이퍼의 Si 탈착 억제 및 잔류응력 완화

송경준, 김나경, 박찬호, 정광희, 신윤지*, 정성민*, 구갑렬**, 김정곤†, 이원재†

동의대학교 신소재공학과, 부산, 47340

*한국세라믹기술원, 진주, 52851

**EIN Crystal(주), 천안, 31040

(2026년 9월 1일 접수)

(2026년 9월 9일 심사완료)

(2026년 9월 11일 게재확정)

요약 본 연구에서는 4H-SiC 웨이퍼의 고온 열처리 시 표면 Si 탈착을 억제하고 잔류 응력을 완화하기 위해 도가니 상/하부 모두 분말을 장입하는 구조를 제안하였다. 1,900°C, 750 Torr 조건에서 열처리 진행 결과, 가장자리 Si 부분압(24.65 mTorr)과 온도(1,901.0°C) 상승으로 웨이퍼 표면의 열화가 방지됨을 확인하였다. HR-XRD 분석에서 브래그 각이 무응력 기준치(17.7914°)에 가장 가까운 이동을 보이며 최대 응력 완화($\Delta\sigma$)를 나타내었고, 라만 FTO 피크는 776.4 cm^{-1} 에서 무응력 값인 776.9 cm^{-1} 로 시프트되었다. 또한, 거시적 BOW 값 감소와 미시적 Curvature 값이 약 2.8배 증가하며 웨이퍼 휨이 크게 개선되었으며, XRT 분석을 통해 표면 부근 BPD가 TED로 전환됨을 확인하였고 전환 매커니즘을 제시하였다.

†Corresponding author

E-mail: kimjg@deu.ac.kr, leewj@deu.ac.kr

Copyright © 2026 The Korean Association of Crystal Growth Open

Access article under the CC BY-NC 4.0 license

(<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

1. 서 론

SiC 전력반도체는 전 세계적으로 전기차의 핵심구동시스템, AI 데이터 센터의 효율적 전력관리, 신재생에너지 인프라를 중심으로 수요가 급증하고 있다. 현재, 이에 대응하기 위한 생산성 증대와 원가절감이 가능한 8인치 대구경 고품질 SiC 단결정 기판 생산 기술 개발이 활발히 진행되고 있다. SiC는 Si(Silicon) 대비 약 3배 넓은 밴드갭 에너지(Band gap energy), 10배에 달하는 절연 파괴전압(Breakdown Voltage), 뛰어난 전자 포화 전자 속도(electron saturation velocity) 및 높은 열전도를 나타낸다. SiC의 이러한 우수한 물성은 소자의 고밀도화, 고속 스위칭 및 열적 전기적으로 극한 환경에서 안정적인 구동이 가능한 차세대 전력반도체 소자의 실현을 가능하게 한다.

현재 산업계에서 SiC 단결정 제조에 보편적으로 사용되는 물리적 기상수송법인 PVT(Physical Vapor Transport) 법은 특정 온도와 압력 조건에서 SiC가 액상을 거치지 않고 승화하는 특성을 이용한 단결정 성장기술이다. PVT 법은 공정 비용 효율성과 대구경화 측면에서 우수한 장점을 제공하지만, 성장 시 열장(Thermal Field)의 정밀한 제어가 어렵다는 단점을 가진다. 특히, 열 환경의 불균일성은 핫존 구성요소(흑연 도가니, 흑연 리드, 종자 정 등)간 열팽창계수(Coefficient of Thermal Expansion, CTE) 차이에 의한 기계적 응력 및 온도구배를 유발하게 된다. 이는 SiC 결정 내부 격자 변형(Lattice distortion) 및 결정다형 (Polytype) 혼입을 초래해 최종 단결정 내 잔류 응력을 형성하게 된다[1]. 나아가 성장된 SiC 결정은 절단, 연삭 및 폴리싱과 같은 웨이퍼링 공정 중 가해지는 기계적응력에 의해서 추가적인 잔류응력이 유입된다. 결정성장 중 결정 내 집적된 잔류 응력은 기저면 전위(Basal Plane Dislocation, BPD)와 관통 나선 전위(Threading Screw Dislocation, TSD)의 형성과 전이를 일으키며, 최종 소자의 누설전류 증가 및 항복전압 저하를 촉진한다[2].

결정 내부의 잔류 응력을 완화하기 위한 4H-SiC 기판 소재의 열처리에 대한 연구는 현재까지 제한적으로 이루어져 왔다. SiC 웨이퍼의 고온 열처리 시 표면의 Si 탈착에 의한 Si 국소부분압(local partial pressure)이 증가하며, 표면에서 멀어질수록 국소부분압이 감소하므로 표면의 열화를 일으키게 된다. 해당 조건에서는 BPD(Basal Plane Dislocation)가 TED(Threading Edge Dislocation)로 전환되는 경우가 드물어 전기적 성능 향상에 한계가 있을 수 있기 때문에 최근에는 개방 표면 열처리가 보다 효과적인 접근법으로 주목받고 있다[3]. 개방 표면 열처리의 경우, Si 휘발이 발생하는 1,300°C 이상의 고온에서 웨이퍼의 표면 보호 없이 열처리를 수행할 경우 Si

탈착이 일어나 표면 흑연화와 품질저하를 야기한다[4].

따라서, 본 연구에서는 Si 면을 원료 분말층으로 하향 배치한 4H-SiC 웨이퍼 표면의 Si 휘발을 억제하기 위해 새롭게 설계한 도가니 구조를 적용하여 고온 열처리 공정을 실시하였다. Si 분압의 영향과 열장분포를 확인하기 위해 도가니 내 SiC 분말을 장입하지 않은 경우(디자인 A), 하부에만 장입한 경우(디자인 B), 상부/하부 모두 장입한 경우(디자인 C)를 포함한 세 가지 SiC 분말 적층 구조를 제안하였다. 도가니 내부 Si 분압과 온도의 공간적 분포는 STR사의 Virtual Reactor 9.0을 사용해 실제 실험과 동일한 조건으로 시뮬레이션을 실시하였다. 이 후 3가지 디자인을 적용하여 1,900°C, 750 torr의 Ar 분위기에서 열처리를 진행하였다. 각 디자인 이용한 열처리 전/후의 SiC 웨이퍼 표면의 Si 탈착 거동은 광학이미지와 편광이미지를 통해 확인하였고, 열처리 전/후 4H-SiC 웨이퍼의 결정 품질과 응력 상태를 HR-XRD(High-Resolution X-ray Diffractometer)와 라만 분광법(Raman scattering spectroscopy)을 이용해 비교/분석하였다. 추가적으로 열처리에 의한 내부 전위의 거동을 XRT(X-ray Topography)를 통해 평가하였다.

2. 실험 방법

Figure 1(a)에 Si면 하향의 Bare 4H-SiC 웨이퍼의 열처리에 이용한 도가니 핫존 구조를 나타내었다. 열처리 는 SiC 분말 장입 구조에 따라 세 가지 디자인(Design A, B, C)을 적용하여 진행하였다. Design A(Fig. 1(b))는 도가니에 SiC 분말을 장입하지 않는 구조, Design B(Fig. 1(c))는 하부 영역에만 SiC 분말을 장입한 구조, Design C(Fig. 1(d))는 도가니 상/하부 영역 모두 SiC 분말을 장입한 구조이다. <11-20> 방향으로 4° off-axis를 갖는 Epi-ready 4인치 *n*-type 4H-SiC 웨이퍼를 사용하였으며, SiC 원료는 입도 분포(75~150 μm)의 분말을 사용하였다. Figure 1(a)에 도시한 것과 같이 흑연 도가니는 등방성 흑연을 사용하였으며, 흑연 단열재는 도가니 상/하부에 일정 두께를 갖는 Rigid 단열재를 적용하였다. 특히, 상대적으로 두께가 얇은 측면부는 도가니로부터 외부로의 열 손실을 고려하여 단열 성능이 우수한 Soft 단열재를 사용하였다. 세 가지 디자인 모두 도가니 내 SiC 웨이퍼 지지가 가능한 튜브형 구조물을 배치하였으며, 특히 상부에 SiC 소스 분말을 장입한 Design C(Fig. 1(d))의 경우, 열처리 도중 분말의 형상변형을 방지하기 위한 원료분말 지지 구조물을 추가하였다.

SiC 웨이퍼 열처리를 위한 세 가지 디자인 설정 후, 도가니 내부의 Si 부분압 및 온도 분포를 정량적으로 계산하기 위해 STR사의 Virtual Reactor 9.0 소프트웨어를

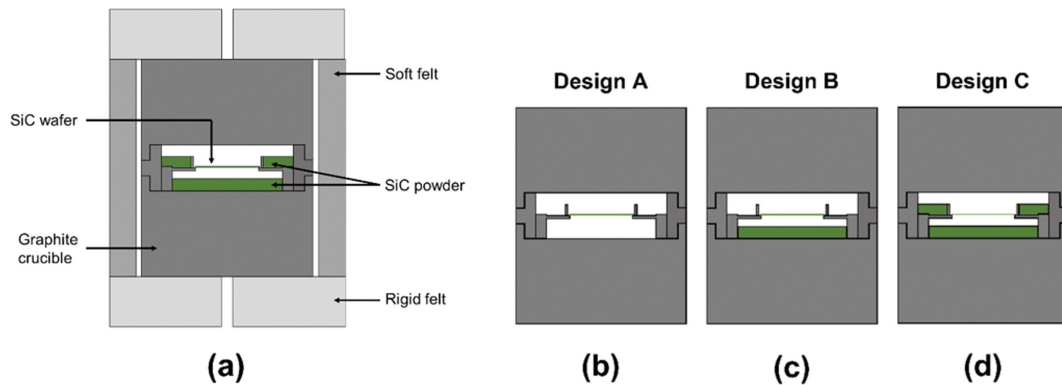


Fig. 1. Schematic diagram of the hot-zone for the powder stacking configuration of the SiC powder and wafer in the graphite crucible. (b) Design A: without setting powder in the crucible, (c) Design B: setting SiC powder at the bottom of the crucible, and (d) Design C: setting SiC powder at both sides and the bottom of the crucible.

이용하여 시뮬레이션을 진행하였다. 세 가지 디자인을 이용한 열처리에는 유도가열 로 내에서 온도 $1,900^{\circ}\text{C}$, 압력 750 Torr를 적용하여 10시간 동안 Ar 분위기에서 동일한 조건으로 진행하였다. 본 연구에서는 Epi-ready 표면 품질을 갖는 4H-SiC 웨이퍼의 Si면의 물성치를 기준으로 열처리 전/후 잔류응력 상태와 결정 품질을 평가하였다. 고분해능 X선 회절(High Resolution X-ray Diffraction, X'Pert PRO MRD, Panalytical, Anode: Cu, Generator: 40 V, Tube current 30A 조건)의 회절각(θ) 시프트를 통해 열처리 전/후 결정 내 잔류 응력을 계산하였으며, Rocking Curve(ω -scan)의 반치폭(Full Width at Half Maximum, FWHM)을 통해 결정 품질 조사하였다. 라만 분광법(Raman Spectroscopy, RamMics M532, Enspectr, Inc.)에서는 Free-standing 4H-SiC Lely crystal의 FTO (Folded Transverse Optical: FTO) 모드의 파수인 777 cm^{-1} 를 기준으로 열처리 전/후의 파수 시프트와 FWHM 분석을 통해 잔류 응력과 결정 품질을 비교하였다. 라만 분광의 경우, 4H-SiC 결정성장 축인 c축 방향으로 파장 532 nm 레이저를 입사시키고 다시 c축으로 되돌아오는 산란광을 검출하는 c면 후방산란 배치로 라만스펙트럼을 취득하였다. 열처리 전/후의 4H-SiC 웨이퍼 표면 부근의 전위 거동을 확인하기 위해 XRT(X-ray topography,

POSTECH PAL 9D XRT, Penetration depth: $10\text{ }\mu\text{m}$)를 이용하였다.

3. 결과 및 고찰

Figure 2에 STR사 Virtual Reactor 9.0 시뮬레이션을 이용한 Design A(Fig. 2(a)), B(Fig. 2(b)), C(Fig. 2(c)) 기반 핫존 구성을 나타내었다. 도가니 중심(0 mm)을 기준으로 좌측 반쪽면은 분말 장입 디자인을 도시하였고, 우측 반쪽면은 도가니 내부의 Si 부분압을 나타내었다. Fig. 2(d)에 각 디자인에 따른 Si 부분압을 4인치 4H-SiC 웨이퍼 반경방향의 거리(0~50 mm)에 대해 플롯하였다.

4H-SiC 웨이퍼의 중심부(0 mm)에서 디자인 A, B, C의 Si 부분압은 각각 24.30 mTorr, 24.30 mTorr, 24.33 mTorr로 거의 변화가 없었으나 가장자리부(50 mm)에서는 24.37 mTorr, 24.40 mTorr, 24.65 mTorr로 다소 증가됨이 확인되었다. 특히, Design C의 경우 반경방향으로 갈수록 Si 부분압이 선형적으로 상승하는 경향을 보였다. 이는 Si 부분압이 온도의 함수로서 표준 깁스 자유에너지(standard Gibbs free energy, ΔG^0)에 의해 지배

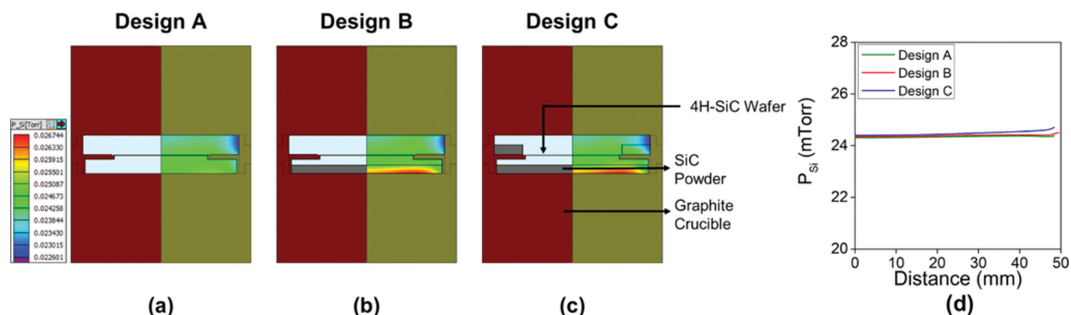


Fig. 2. Simulated hot zone configurations and Si partial pressure distributions for (a) Design A, (b) Design B, and (c) Design C (left: powder loading; right: Si partial pressure). (d) Radial pressure profiles of Si partial pressure across the 4H-SiC wafer (0~50 mm).

되기 때문이며, 계 내의 온도가 증가할수록 Si 부분압이 지수적으로 상승하게 된다[6,7].

$$\ln P_{\text{Si}}(T) = - \frac{\Delta G^0(T)}{RT} \quad (1)$$

위 식(1)에서 $P_{\text{Si}}(T)$ 는 Si 평형부분압[atm], ΔG^0 는 표준 깁스 자유에너지 변화량[J/mol], R 은 기체상수[J/mol·K], T 는 절대온도[K]이다. 이 관계식은 온도상승에 의해 4H-SiC 웨이퍼 표면에서의 Si 휘발이 폭발적으로 증가함을 뜻하며, 표면 열화방지를 위해 적절한 도가니 설계와 표면 부동태화(passivation)가 필수적임을 시사한다. 결과적으로, Fig. 2(d)에서 Design C를 적용한 4H-SiC 웨이퍼 가장자리부의 Si 부분압 상승은 온도증가의 영향임을 알 수 있다.

Figure 3(a)는 세 가지 디자인에서 Si면을 기준으로 4H-SiC 웨이퍼 반경 방향의 온도 분포를 시뮬레이션으로 계산한 결과이며, 4H-SiC 웨이퍼 반경방향에 따른 온도분포를 Fig. 3(b)에 플롯하였다. 열처리 과정에서

Design A, B, C를 적용한 4H-SiC 웨이퍼 중심부(0 mm)의 온도는 각각 1,899.9°C, 1,899.9°C, 1,900.0°C로 나타났다. 가장자리부(50 mm)의 온도는 각각 1,900.1°C, 1,900.2°C, 1,901.0°C로 각 디자인 모두 비교적 균일한 온도를 형성하고 있다. Design C에서 웨이퍼 가장자리로 갈수록 온도가 상승하며, 웨이퍼 가장자리의 분말 지지구조물 벽면에 국소적으로 높은 온도를 형성(Fig. 3(a), 빨간색 점선 사각형영역)하는 영역을 볼 수 있다. 이는 원료분말 지지구조물에 의한 추가적인 복사열 방출이나 가장자리부에 위치한 SiC 분말층(다공성)에 의한 단열효과 개선에 의한 것으로 이해할 수 있다[5].

Figure 4에 Design A, B, C를 적용하여 열처리를 완료한 4인치 4H-SiC 웨이퍼의 광학 이미지(윗열)와 편광 이미지(아랫열)를 나열하였다. Figure 4(a)의 SiC 분말을 장입하지 않은 구조(Design A)에서는 Si 탈착에 의한 표면 탄화가 웨이퍼 전체에 뚜렷하게 관찰된다. 한편, 편광 이미지에서 검은 라인들이 관찰되는데 이는 연마 스크래치 부위로 상대적으로 높은 표면에너지에 의한 Si

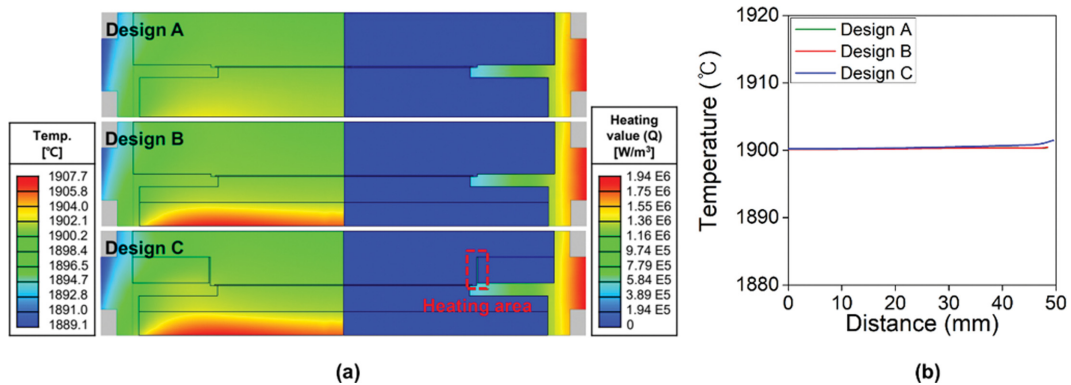


Fig. 3. Numerical simulation results of 4-inch 4H-SiC wafer annealing with various powder stacking configurations of the SiC powder designs. (a) Simulated temperature distributions on the Si-face of 4H-SiC wafers for designs A, B, and C, and (b) corresponding radial temperature profiles along the wafer.

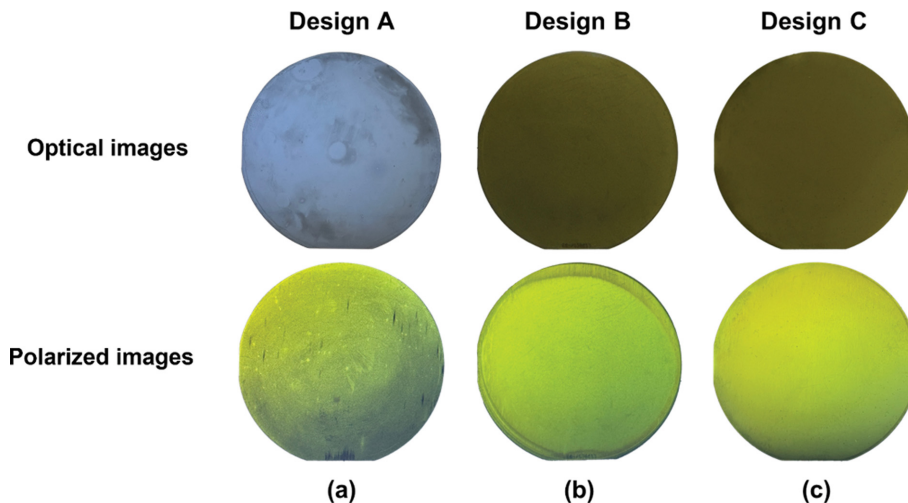


Fig. 4. Optical (top row) and cross-polarized (bottom row) images of 4-inch 4H-SiC wafers after annealing for Designs A, B, and C.

회발이 가속된 영역임을 알 수 있다. Figure 4(b)의 하부 영역에만 SiC 분말을 장입한 구조인 Design B에서는 열처리 전과 비교해 전체적인 색조가 다소 어두워졌으며, 가장자리 영역의 부분적 탄화는 튜브형 웨이퍼 지지구조물과의 접촉에 따른 영향으로 보인다. Figure 4(c)의 상/하부 영역 SiC 분말을 장입한 구조인 Design C에서는 웨이퍼 지지구조물과의 접촉부를 제외 하면 열처리 전과 동일한 색조와 외관을 유지하였다. SiC 분말을 상/하부 모두 장입한 구조(Design C)에서는 열처리 공간 내 Si 부분압을 높게 유지되어 Si 탈착이 억제된 결과로 높은 Si 부분압과 온도 분포가 얻어진 시뮬레이션 경향과 일치한다.

SiC 분말 장입 구조(Design A, B, C)를 적용한 열처리 후 4H-SiC 웨이퍼의 응력상태와 결정품질을 확인하기 위해 HR-XRD 측정을 실시하였다. θ -scan을 통해 열처리 전/후의 회절각 위치 변화를 기반으로 각디자인별 웨이퍼 내의 잔류 응력 상태를 평가하였다. Figure 5에 디자인 A, B, C를 이용한 열처리 전/후의 HR-XRD 측정 시 데이터 취득 위치(Fig. 5(a))와 θ -scan 결과(Fig. 5(b), Fig. 5(c))를 나타내었다. 브래그 법칙에 의해 θ 가 기준값(Free standing, 4H-SiC (0004) 격자면, 17.7914°)에 수렴할수록 격자 간격이 무응력 상태에 가까워짐을 의미한다. θ 기준값은 열처리 전/후 4H-SiC 웨이퍼의 회절각과의 비교를 위해 Fig. 5(b)와 Fig. 5(c)에 수직점선으로 표기하였다.

세가지 구조 중 Design C가 가장 큰 회절각 이동을 보이며 무응력 회절 각도인 17.7914° 에 근접한 것을 알 수 있다. 열처리 전/후 회절각 변화를 대칭 반사에서 얻은 격자간격 변화($\langle 0001 \rangle$ 방향 변형률)를 기반으로 4H-SiC 탄성 상수를 적용해 면 내 응력(잔류 응력)으로 환

Table 1

Summary of FWHM values and calculated residual stress (σ) before and after heat treatment

Si-Face	FWHM (arcsec)		σ (MPa)		
	Before	After	Before	After	$\Delta\sigma$
Design A	13.3	12.4	169.7	-210	-380
Design B	11.9	12.8	0	365	365
Design C	14.1	14	1003	237	-766

산하였으며, 이를 Table 1에 나타내었다[8]. 응력 환산결과에서 알 수 있듯이 Design C에서 응력 완화($\Delta\sigma$)가 가장 크게 나타났으며, 이러한 응력 완화는 상/하부 SiC 분말 장입을 통한 4H-SiC 표면의 높은 Si 부분압 형성에 기인한 것으로 해석된다. Si 탈착 억제 및 Si 공공 유발을 최소화함으로써 화학적/열적 변형을 완화하고 무응력 상태로 회복시킨 결과로 이해할 수 있다. 열처리 전/후 결정 품질 평가를 위해 HR-XRD Rocking curve를 수행하였으나, 열처리 전(후)의 반치폭(FWHM)은 디자인 A, B, C에서 13.3 arcsec(12.4 arcsec), 11.9 arcsec(12.8 arcsec), 14.1 arcsec(14.0 arcsec)로 얻어졌다. 측정에 사용된 장비의 피크 분해능(1.8 arcsec)을 고려했을 때 모든 디자인에서 반치폭 차이가 거의 없다고 할 수 있다.

Figure 6에 열처리 전/후 4H-SiC Si면의 9곳의 측정 영역(Fig. 5에 도시한 영역과 동일)별 라만산란 측정에서 얻은 FTO(Folded Transverse Optical, $q/q_{\max} = 2/4$) 피크 위치를 플롯하였다. FTO 격자진동의 경우, SiC 결정의 면내 진동모드(In-plane)로 결정 내 면내 응력 변화에 민감하게 반응하는 모드로 다른 모드보다 가장 높은 강도로 관측된다. 세 가지 디자인에서의 FTO(2/4) 피크의 반치폭은 열처리 전후 $\sim 5 \text{ cm}^{-1}$ 정도로 결정품질의 변화는

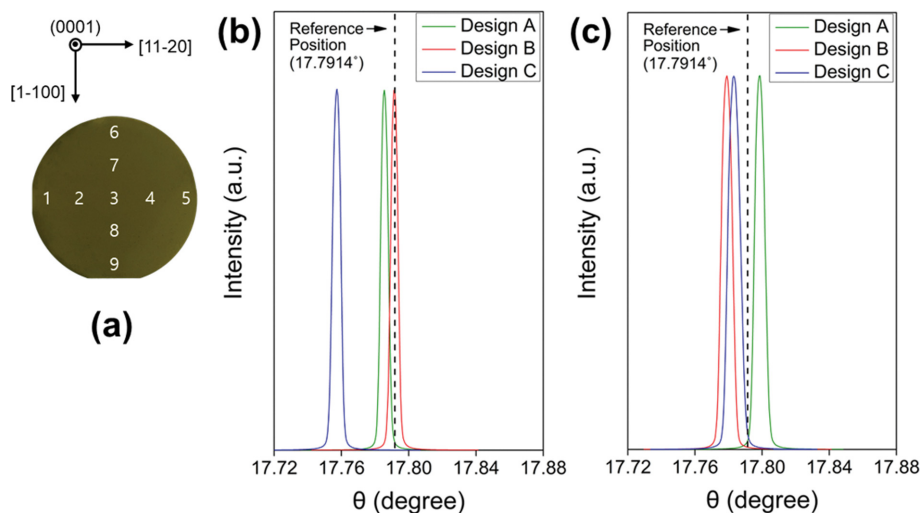


Fig. 5. HR-XRD θ -scan results of the Si-face after annealing. (a) HR-XRD measurement positions, and θ -scan results (b) before and (c) after annealing for Designs A, B, and C.

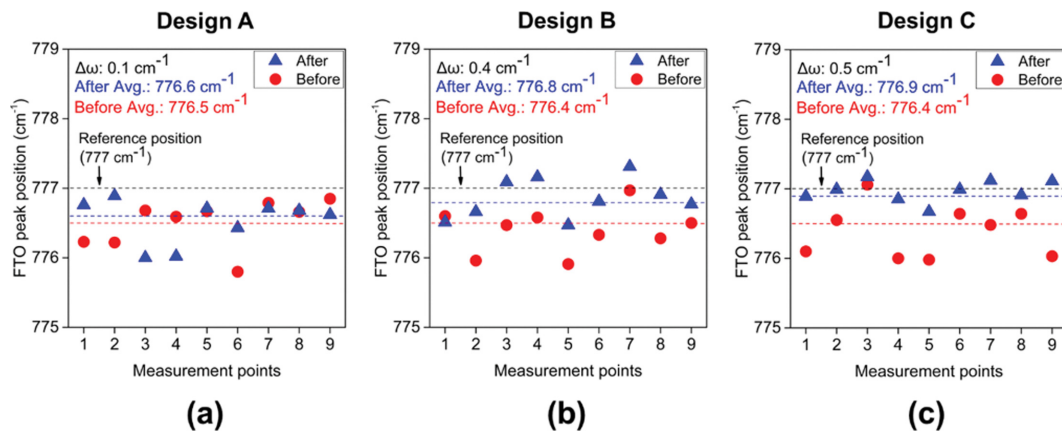


Fig. 6. Peak positions of the folded transverse optical (FTO, $q/q_{\max} = 2/4$) mode measured at 9 measurement regions on the 4H-SiC Si-face (indicated in Fig. 5) before and after annealing.

미미했다. 이는 앞서 살펴본 HR-XRD Rocking curve의 경향과 일치하며 열처리에 의한 결정성 개선이 미미함을 보여준다. 한편, FTO(2/4) 피크 위치는 $776.4 \sim 776.9 \text{ cm}^{-1}$ 로 0.5 cm^{-1} 이내에서 변화하였다. 사용한 라만분광시스템의 파수분해능이 0.5 cm^{-1} 인 점을 감안할 때 이 파수 이하의 변화는 오차범위라고 할 수 있지만, 열처리 후 Design A에서는 $776.5 \rightarrow 776.6 \text{ cm}^{-1}$ ($\Delta\omega \approx +0.1 \text{ cm}^{-1}$), Design B에서는 $776.4 \text{ cm}^{-1} \rightarrow 776.8 \text{ cm}^{-1}$ ($\Delta\omega \approx +0.4 \text{ cm}^{-1}$)로의 시프트가 관찰되었으나, Design C에서 $776.4 \text{ cm}^{-1} \rightarrow 776.9 \text{ cm}^{-1}$ ($\Delta\omega \approx +0.5 \text{ cm}^{-1}$)로 시프트 하므로 free standing 파수(777 cm^{-1})에 근접하여 유의미한 응력 개선이라고 할 수 있다. 특히, Design A, B와 달리 Design C에서 9곳의 측정영역의 파수 분포(파란색 삼각형)가 무응력 결정의 파수에 부위에 균일하게 분포하는 것으로 보아 웨이퍼 전체적으로 응력 완화가 있었음을 시사한다.

추가적으로 세 가지 디자인을 적용한 열처리 전/후 4H-SiC 웨이퍼의 편평도 측정을 통해 웨이퍼 BOW 값과 HR-XRD 회절 각도를 기반으로 계산한 Curvature 값을 Table 2에 나타내었다. 먼저 거시적인 관점에서의 웨이퍼 휨은 BOW 값으로 평가되었다. Design A와 Design B의 경우, 열처리 후에 BOW값이 다소 커졌으므로 휨이 증가한 것으로 판단할 수 있으나 Design C에서는 열처

리 후 BOW 값이 작아졌으므로 휨이 개선(평평해짐)되었음을 알 수 있다. 한편, 미시적 관점에서의 웨이퍼 휨은 HR-XRD 측정에서 회절각을 기반으로 Curvature(κ) 계산을 통해 평가되었다. Design A의 경우, 열처리 후 부호값의 역전과 값의 증가를 동반한 불안정한 변화를 보이는 것을 알 수 있으며, Design B의 경우는 열처리 후 값이 감소하였으므로 결정 격자 내 수직 방향의 열 비대칭성이 심화되어 휨이 더 커졌음을 알 수 있다. 한편, Design C에서는 열처리 후 값이 약 2.8배로 대폭 증가하였는데 이는 미시적 격자 수준에서 휨이 크게 완화되어 4H-SiC 웨이퍼가 상당히 평탄 해졌음을 의미한다. 따라서, Design C가 균일한 열 환경을 형성함으로써 4H-SiC 웨이퍼의 미시적 결정 격자 변형부터 거시적 전체 외형에 이르기까지 웨이퍼 휨을 실질적으로 완화하는데 가장 효과적인 구조라고 할 수 있다.

Figure 7은 앞서 살펴본 Design A, B, C 중 4H-SiC의 잔류 응력과 결정품질 개선이 두드러졌던 Design C를 이용한 열처리를 진행 시 결정 표면($\sim 10 \mu\text{m}$)의 전위 거동을 XRT 분석을 통해 확인한 결과이다. XRT 측정은 열처리 전/후의 동일한 영역과 배율에서 데이터를 취득하였다. 열처리 전 샘플에서 관찰된 빨간색 화살표로 표시한 BPD(Fig. 7(a), (b))가 열처리 후에는 사라졌으며, 흰색 대비를 갖는 작은 점인 TED로 전환(Fig. 7(d), (e))된 것을 확인할 수 있다. 이는 기저면에 평행하게 누워있는 BPD가 기저면에 수직 방향으로 상승하며 4H-SiC 표면 부근에서 국부적 영역으로만 회절되었기 때문이다. 이는 열처리가 결함 밀도를 감소시키는 것이 아닌 BPD에서 TED 전환을 유도하였기 때문으로 해석할 수 있으나, 에너지적인 관점에서는 $1,900^\circ\text{C}$ 의 열처리 온도에서 BPD가 TED로 전환되는 것은 어렵다고 할 수 있다. 이는 $1,900^\circ\text{C}$ 의 열 에너지는 $\sim 0.2 \text{ eV}$ 로 매우 작기 때문이다. 부분 전위가 수축될 때, 필요한 에너지 장벽(U)을 선 장력으로 추정하면 아래와 같은 식(결함형성에

Table 2

Summary of wafer bow and curvature values obtained from flatness measurements and HR-XRD diffraction angles before and after annealing (+ and - denote convex and concave shapes, respectively, relative to an undeformed wafer.)

Si-Face	BOW (μm)		κ (1/m)	
	Before	After	Before	After
Design A	-15.5	-15.7	83.5	-302
Design B	-16.2	-16.9	-462.9	-337
Design C	-17.5	-16.8	-257.8	-721.2

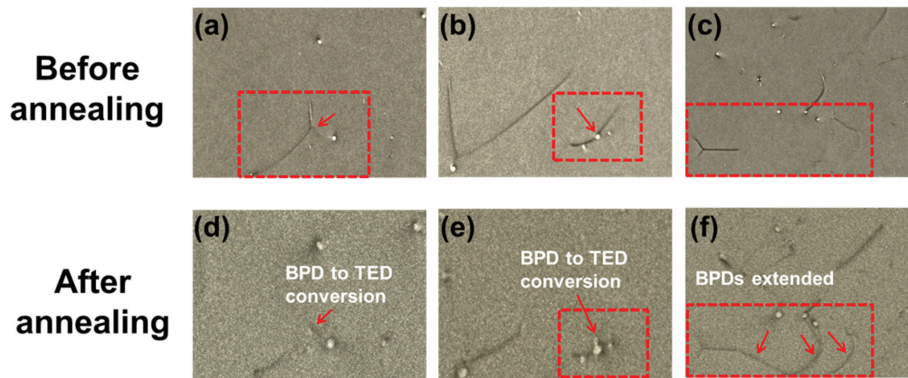


Fig. 7. XRT analysis of dislocation behavior near the surface ($\sim 10 \mu\text{m}$) of a 4H-SiC wafer annealed with Design C, which showed the most significant improvement in residual stress among Designs A, B, and C.

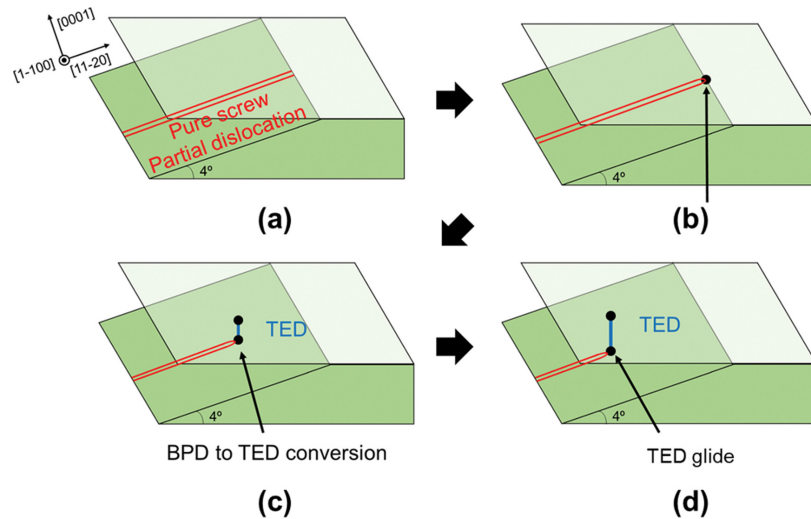


Fig. 8. BPD-to-TED conversion mechanism. (a) Partially separated basal plane dislocations (BPDs). (b) Coalescence of BPDs via image-force-induced partial contraction. (c) TED segment formation through surface BPD bending onto the c-plane. (d) Line tension-driven glide of the TED segment.

너지)으로 표현할 수 있다.

$$U = \frac{1}{30} G b^2 w \left(\log \frac{w}{b} \right)^{1/2} \quad (2)$$

U 는 결함영역에 축적된 결함 형성 에너지[eV]이며, G 는 전단 탄성계수[Pa], b 는 버거스 벡터[nm], w 는 특성너비[nm], $(\log w/b)^{1/2}$ [무단위]로써, 4H-SiC의 기저면 전단탄성계수(C_{44})를 160 GPa로 설정하고[9], BPD의 부분 전위 사이 간격을 10 nm, 버거스 벡터 크기를 0.307 nm로 가정하면 부분 전위들의 수축을 형성하는데 필요한 에너지는 약 58.8 eV로 계산된다. 4H-SiC 단결정 내부가 아닌 표면에서는 BPD 수축을 위한 약 30 eV의 에너지가 필요하게 되는데, 이는 1,900°C 열에너지(0.2 eV)보다 두 orders 높다. 다만 본연구에서 BPD-TED 전환이 관측된 것은 1,900°C의 열에너지(0.2 eV)가 웨이퍼 표면 근처의 자유 표면에 의한 영상력(Image force)이 부분 전위를 국소적으로 수축시켜 반응 장벽을 대폭 낮추는 역할을 했

고, 전체 전위 길이를 줄여 결함 에너지를 최소화하려는 선 장력(Line tension)과 고온에서의 전위 운동성 개선 등이 복합적으로 작용한 결과로써 해석할 수 있다.

BPD-TED 전환 메커니즘을 Fig. 8에 나타내었다. 열처리 환경에서 4H-SiC 웨이퍼 기저면에 존재하는 부분 전위들(Fig. 8(a))은 Image force(영상력: 표면근처에서 부분전위를 표면쪽으로 끌어당기는 정전기적 힘)에 의해 간격이 수축하여 결함(혹은 재결함)하며(Fig. 8(b)), 표면 부근의 BPD 일부가 c축인 프리즘면으로 구부러져 TED 세그먼트(segment, Fig. 8(c) [0001] 방향 파란색 선)가 형성(Fig. 8(c))된다. 그 후, 선 장력(line tension)에 의해 TED 세그먼트가 활주(Fig. 8(d))하게 된다. 이 과정에서 선 장력은 전체 전위 길이를 축소시키고 결과적으로 전위 에너지를 감소시킬 수 있다[3]. 이러한 이론은 이상적인 순수 나선 BPD(pure screw BPD)에 대해서 설명 가능하며, 정확한 원인은 아직 완전한 이해가 이루어지지 않았다[10].

4. 결 론

본 연구에서는 4H-SiC 웨이퍼의 1,900°C 열처리 시 표면의 Si 탈착을 억제하고 잔류 응력 완화와 결정 품질을 향상시키기 위해 흑연 도가니에 상/하부 모두 SiC 분말을 장입하는 구조(Design C)를 제안하였다. Virtual Reactor 시뮬레이션 및 1,900°C 열처리 실험 결과, Design C는 도가니 내 Si 부분압을 높고 균일하게 유지하여 웨이퍼 표면의 열화를 성공적으로 방지하였다. HR-XRD 및 라만 분광 분석을 통해 Design C 적용 시 웨이퍼 면 내 잔류 응력이 크게 완화되고, 거시적·미시적 웨이퍼 휨(Warping)이 대폭 개선됨을 확인하였다. 또한 XRT 분석을 통해 영상력(Image force)과 선 장력(Line tension)의 복합 작용으로 표면 부근의 BPD가 TED로 전환되는 전위 거동을 입증하였다. 결과적으로 도가니 상/하부에 분말을 장입하는 구조가 공간적 Si 부분압 및 열장 제어를 가능하게 함으로써 대구경 SiC 웨이퍼의 응력 완화와 결함 구조 개선에 매우 효과적인 기술임을 밝혔다.

감사의 글

This work was supported by Technology Innovation Program (Project Number: 00402234, Project Name: Development of highly flat, highly clean large area polished SiC single crystal wafers by utilizing advanced process technology for power semiconductor application) funded by the Ministry of Trade, Industry and Energy.

References

- [1] K. Shioura, N. Shinagawa, T. Izawa and N. Ohtani, "Structural characterization of the grown crystal/seed interface of physical vapor transport grown 4H-SiC crystals using Raman microscopy and x-ray topography", *J. Cryst. Growth* 515 (2019) 58.
- [2] X. Zhang, Y. Lou, T. Gong, G. Wang, J. Yao, Q. Yong, T. Peng, J. Yang and C. Liu, "Effects of defects in a 4H-SiC material on the breakdown behavior of a Schottky barrier diode", *CrystEngComm* 25 (2023) 6622.
- [3] X. Zhang and H. Tsuchida, "Conversion of basal plane dislocations to threading edge dislocations in 4H-SiC epilayers by high temperature annealing", *J. Appl. Phys.* 111 (2012) 123512.
- [4] O.J. Guy, M. Lodzinski, K.S. Teng, T.G.G. Maffei, M. Tan, I. Blackwood, P.R. Dunstan, O. Al-Hartomy, S.P. Wilks, T. Wilby, N. Rimmer, D. Lewis and J. Hopkins, "Investigation of the 4H-SiC surface", *Appl. Surf. Sci.* 254 (2008) 8098.
- [5] M. Arzig, J. Steiner, M. Salamon, N. Uhlmann and P.J. Wellmann, "Influence of morphological changes in a source material on the growth interface of 4H-SiC single crystals", *Materials* 12 (2019) 2591.
- [6] J. Drowart, G. De Maria and M. G. Inghram, "Thermodynamic study of SiC utilizing a mass spectrometer", *J. Chem. Phys.* 29 (1958) 1015.
- [7] S.Y. Karpov, Y.N. Makarov and M.S. Ramm, "Simulation of sublimation growth of SiC single crystals", *Phys. Stat. Sol. (b)* 202 (1997) 201.
- [8] Y. Tamura, H. Sakakima, S. Takamoto, A. Hatano and S. Izumi, "Reaction pathway analysis for the conversion of perfect screw basal plane dislocation to threading edge dislocation in 4H-SiC", *Jpn. J. Appl. Phys.* 58 (2019) 081005.
- [9] K. Kamitani, M. Grimsditch, J.C. Nipko, C.-K. Loong, M. Okada and I. Kimura, "The elastic constants of silicon carbide: A Brillouin-scattering study of 4H and 6H SiC single crystals", *J. Appl. Phys.* 82 (1997) 3152.
- [10] X. Xie, X. Hu, X. Chen, F. Liu, X. Yang, X. Xu, H. Wang, J. Li, P. Yu and R. Wang, "Characterization of the three-dimensional residual stress distribution in SiC bulk crystals by neutron diffraction", *CrystEngComm* 19 (2017) 6527.