

## 硅中氧的 FTIR 研究\*

马碧兰<sup>1)</sup> 朱景兵<sup>2)</sup> 邬建根<sup>1)</sup>  
张继昌<sup>3)</sup> 周寿通<sup>4)</sup> 屈逢源<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>复旦大学物理系, 上海, 200433;

<sup>2)</sup>中国科学院上海技术物理研究所红外物理国家实验室, 上海, 200083;

<sup>3)</sup>同济大学物理系, 上海, 200092;

<sup>4)</sup>上海无线电十七厂, 上海, 200010)

**摘要:** 对不同氧含量的硅片在 300 K 到 4.2 K 温度范围进行红外吸收测量表明: 低温 (80~4.2 K) 下硅的红外吸收谱中  $1127\text{ cm}^{-1}$  处的吸收是硅中氧的吸收峰.

**关键词:** 硅, 氧, 红外吸收.

### 引言

对硅中氧的红外吸收仍存在着一些不一致的看法. 室温下硅中的氧在  $1106\text{ cm}^{-1}$  处有较强的吸收, 这是由填隙氧的 Si-O 键反对称伸张振动引起的, 此峰在温度降低时向高频方向移动. 当温度降到约 120 K 或更低时, 则出现  $1127\text{ cm}^{-1}$  和  $1136\text{ cm}^{-1}$  两个吸收峰, Mead<sup>[1]</sup>和许振嘉<sup>[2]</sup>等认为这两个峰都是硅中氧引起的, 而 Pardhan 等<sup>[3]</sup>认为  $1127\text{ cm}^{-1}$  的吸收是晶格振动的三声子 $[2\text{TO}(\Gamma)+\text{TA}(\text{L})]$ 吸收引起. 为此, 本文作者在这方面进行了进一步的实验和研究.

### 1 实验

用 Bruker IFS-113V 型傅里叶变换红外光谱仪进行硅中氧的红外吸收测量. 波长范围为  $400\sim 2000\text{ cm}^{-1}$ , 样品用流动的液氮致冷, 同时用可自动控温的电阻加热器变温.

双面抛光硅样品分三类: 第 I 类是含氧量较高厚度较薄的硅样品, 该样品从直拉单晶硅切取, 电阻率为  $0.1\sim 10\Omega\cdot\text{cm}$ , 厚度为  $0.1\sim 1.0\text{ mm}$ ; 第 II 类样品含氧量很低 (低于红外吸收的检测极限) 而厚度较厚, 该类样品从真空区熔单晶硅切取, 电阻率为  $10^2\sim 10^4\Omega\cdot\text{cm}$ , 厚度均为  $10\text{ mm}$ ; 第 III 类样品也是真空区熔单晶硅, 其电阻率和厚度与 II 类样品相同,

本文 1991 年 5 月 28 日收到, 修改稿 1991 年 10 月 20 日收到.

\*红外物理国家重点实验室部分资助课题.

为了引入少量氧, 对该类样品在高纯  $N_2$  气氛下进行热处理 (闪光退火,  $1050^\circ\text{C}$ , 2min), 这时硅片表面自然氧化层 (约几到几十  $\text{\AA}$ ) 中的氧将向硅片内部扩散, 使硅片含氧量低于检测极限. 对这三类样品在  $300\sim 4.2\text{K}$  温度下分别进行红外吸收测量和分析.

## 2 结果与讨论

### 2.1 第 I 类样品的红外吸收

第 I 类样品以 1 号样品 ( $\rho = 0.32\ \Omega\cdot\text{cm}$ ,  $d = 0.354\ \text{mm}$ ) 为例, 在  $300\sim 80\text{K}$  下的红外吸收分别如图 1 和 2 所示. 由图 1 和图 2 可知, 低温下  $1127\text{cm}^{-1}$  峰是由氧引起的吸收峰.

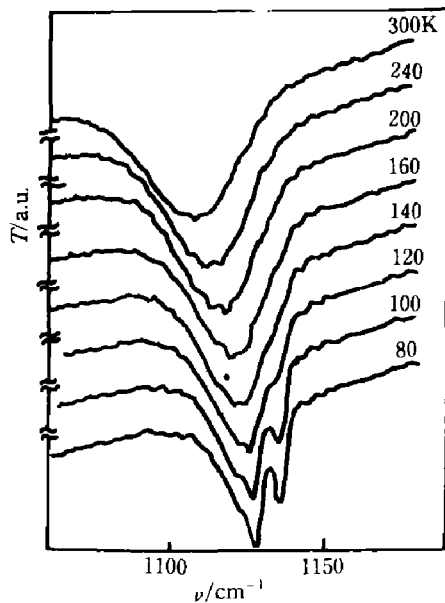


图 1 1 号样品在  $300\sim 80\text{K}$  区间的红外透射谱  
Fig. 1 IR transmission spectra of sample 1 at  $300\sim 80\text{K}$

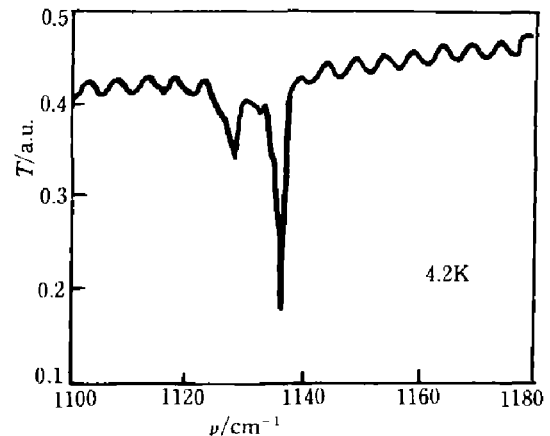


图 2 1 号样品  $4.2\text{K}$  时的红外透射谱  
Fig. 2 IR transmission spectrum of sample 1 at  $4.2\text{K}$

按室温下红外吸收计算硅中氧浓度公式  $[\text{O}] = 3.03 \times 10^{17} \alpha \text{cm}^{-3}$  [4], 从图 1 中可得到  $[\text{O}] \approx 0.63 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ;  $80\text{K}$  下按公式  $[\text{O}] = 1.17 \times 10^{17} \alpha \text{cm}^{-3}$  [4] (其中  $\alpha = \alpha_{1127} + \alpha_{1136}$ ), 可得  $[\text{O}] \approx 0.70 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ;  $4.2\text{K}$  按公式  $[\text{O}] = (1\sim 2) \times 10^{16} \alpha \text{cm}^{-3}$  [2,4] (其中  $\alpha = \alpha_{1136} + \alpha_{1127}$ ), 从图 2 可得  $[\text{O}] \approx (0.33\sim 0.65) \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ . 三种温度下测得样品中氧浓度值基本相符, 再次表明  $1127\text{cm}^{-1}$  吸收峰是氧峰.

### 2.2 第 II 类样品的红外吸收

第 II 类样品以 5 号样品 ( $\rho = 3940\ \Omega\cdot\text{cm}$ ,  $d = 10\ \text{mm}$ ) 为例, 在  $300\text{K}$ ,  $4.2\text{K}$  下的红外吸收谱如图 3 和 4 所示. 图 3 所示低温  $20\text{K}$  和  $4.2\text{K}$  下半宽度为  $62\text{cm}^{-1}$  的  $1136\text{cm}^{-1}$  处吸收带是图 4 所示室温下半宽度为  $64\text{cm}^{-1}$  的  $1123\text{cm}^{-1}$  处吸收带移动而来. 这表明低温下硅红外吸收谱中  $1136\text{cm}^{-1}$  处的宽吸收带是晶格吸收带.

### 2.3 第 III 类样品的红外吸收

第 III 类样品在  $1050^\circ\text{C}$   $N_2$  气氛下经 2min 热处理时, 硅片表面自然氧化层中的氧在高

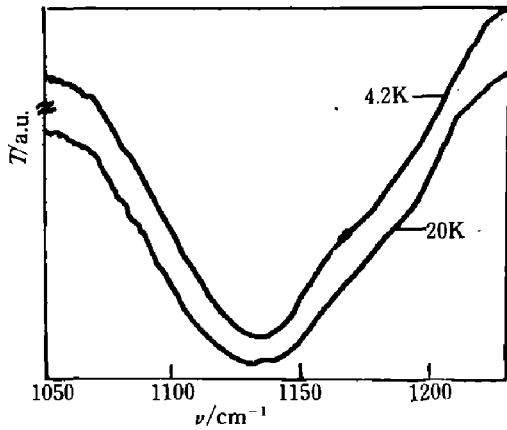


图 3 5号样品在 20 K 和 4.2 K 时在  $1136\text{ cm}^{-1}$  处的吸收带

Fig. 3  $1136\text{ cm}^{-1}$  absorption band of sample 5 at 20 K and 4.2 K

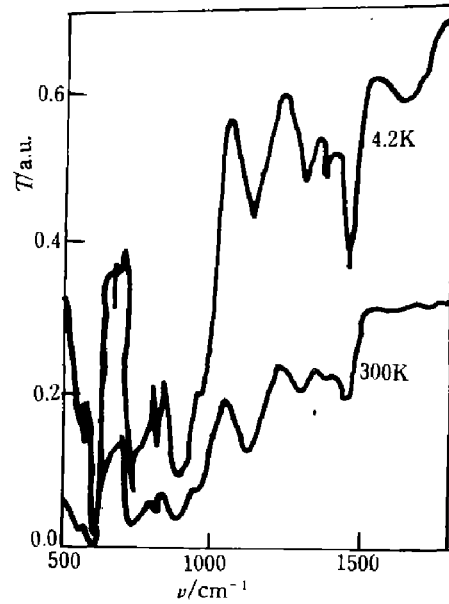


图 4 5号样品在 300 K 和 4.2 K 下的红外透射谱

Fig. 4 IR transmission of sample 5 at 300 K and 4.2 K

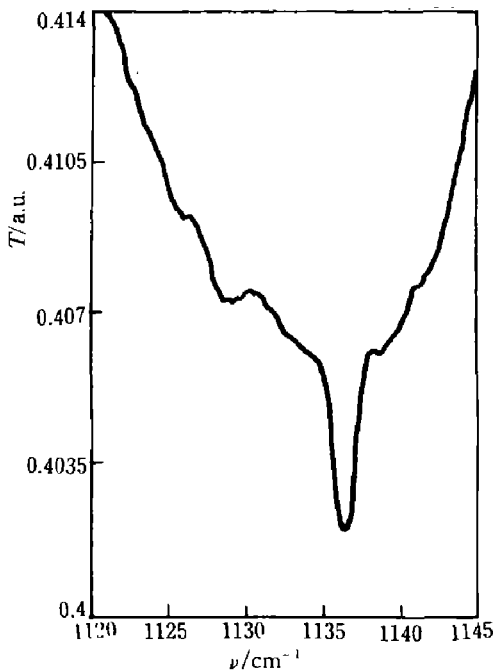


图 5 2号样品 20 K 时的红外透射谱

Fig. 5 IR transmission spectrum of sample 2 at 20 K

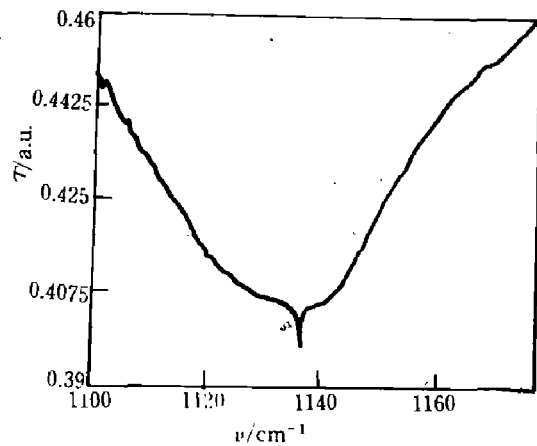


图 6 2号样品 4.2 K 时的红外透射谱

Fig. 6 IR transmission spectrum of sample 2 at 4.2 K

温下将向硅片体内扩散. 单位表面积扩散进入硅片内氧的量  $Q$  可用恒定表面浓度的扩散公式  $Q = 2N_s \sqrt{Dt/\pi}$  来计算. 其中  $N_s$  是硅片表面氧的恒定浓度, 取该温度下氧在硅中的固体浓度  $N_s = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  [5],  $D$  为该温度下氧在硅中的扩散系数  $D = 10 \times 10^{-10} \text{ cm}^2/\text{s}$ , 可得  $Q = 0.62 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ , 考虑到相对两表面同时扩进氧, 样品厚为  $1 \text{ cm}$ , 因此扩散进入样品中氧的平均浓度为  $[O] = 1.24 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ . 该类样品以 2 号样品 ( $\rho = 900 \Omega\cdot\text{cm}$ ,  $d = 10 \text{ mm}$ ) 为例, 在 20 K 和 4.2 K 时的红外吸收谱分别如图 5、6 所示. 图 5 清楚地表明, 在多声子吸收带  $1136\text{ cm}^{-1}$  上同时还叠有  $1136\text{ cm}^{-1}$  和  $1127\text{ cm}^{-1}$  两个尖锐小

峰, 而图 3 中没有. 同样, 图 6 中所示 2 号样品在 4.2 K 时吸收谱中的  $1136\text{ cm}^{-1}$  吸收带上也叠有  $1136\text{ cm}^{-1}$  处的尖锐小峰, 而图 3 中也没有. 考虑到第 II 类和第 III 类样品只是氧含量有些微差别, 其它条件完全一致, 可以认为叠在  $1136\text{ cm}^{-1}$  宽带 (半宽带约  $60\text{ cm}^{-1}$ ) 上的  $1127\text{ cm}^{-1}$  和  $1136\text{ cm}^{-1}$  两个尖锐小峰都是由硅中氧引起的. 按图 5 中叠在  $1136\text{ cm}^{-1}$  宽带上的  $1136\text{ cm}^{-1}$  和  $1127\text{ cm}^{-1}$  两个小峰, 采用 4.2 K 下红外吸收计算硅中氧浓度公式  $[O] = (1 \sim 2) \times 10^{16} \alpha \text{ cm}^{-3}$  [2,4], 可得红外吸收法测得硅样品中氧浓度  $[O] = (1.5 \sim 3.0) \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , 这也与前面热扩散法计算值大致相符. 进一步表明低温下  $1136\text{ cm}^{-1}$  处宽吸收带是晶格吸收, 而叠在此宽吸收带上的  $1127\text{ cm}^{-1}$  和  $1136\text{ cm}^{-1}$  处两个尖锐小峰都是硅中氧的吸收峰.

### 参考文献

- 1 MEAD. *Applied Spectroscopy*, 1980, **34**(2): 171
- 2 许振嘉等. *物理学报*, 1980, **29**(7): 867
- 3 Pardan et al. *Infrared Physics*, 1987, **27**(4): 207
- 4 田岛道夫. *应用物理(日)*, 1984, **53**(6): 504
- 5 原撒 et al. *Handbook of VLSI Process Data (In Japanese)*, 日本东京都, 元山裕孝 ed., 1982, 188

## FTIR STUDY OF OXYGEN IN SILICON\*

Ma Bilan<sup>1)</sup>, Zhu Jinbin<sup>2)</sup>, Wu Jiange<sup>1)</sup>

Zhang Jichang<sup>3)</sup>, Zhou Shoutong<sup>4)</sup>, Qu Fengyuan<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>Physics Department, Fudan University, Shanghai 200433, China;

<sup>2)</sup>Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical Physics,

Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China;

<sup>3)</sup>Physics Department, Tongji University, Shanghai 200092, China;

<sup>4)</sup>Shanghai No. 17 Radio Factory, Shanghai 200010, China)

**Abstract:** Silicon crystals of different oxygen contents have been investigated by means of infrared absorption spectroscopy at 300 K and 4.2 K. It is seen from the experiments that the absorption band at  $1127\text{ cm}^{-1}$  at low temperatures ( $80 \sim 4.2\text{ K}$ ) is due to oxygen absorption.

**Key words:** silicon, oxygen, infrared absorption.

\* The project partly supported by the National Laboratory for Infrared Physics, Chinese Academy of Sciences.