

SiC 外延层表面化学态的研究*

马格林[†] 张玉明 张义门 马仲发

(宽禁带半导体材料与器件教育部重点实验室,西安电子科技大学微电子学院,西安 710071)

(2007 年 9 月 4 日收到,2007 年 9 月 13 日收到修改稿)

用高分辨 X 射线光电子能谱仪(XPS)和傅里叶变换红外(FTIR)光谱仪研究了 SiC 外延层表面的组分结构. XPS 宽扫描谱、红外掠反射吸收谱及红外镜面反射谱的解析结果说明 SiC 外延层表面是由 Si—O—Si 和 Si—CH₂—Si 聚合物构成的非晶 SiC_xO_y. SiC 外延层表面的化学态结构为 Si(CH₂)₄, Si(CH₂)₃, SiO₂(CH₃)₂, SiO₃(CH₃)₂, Si—Si 游离 H₂O 缔合 OH, Si—OH 和 O₂. 根据化学态结构和元素电负性确定了化学态的各原子芯电子束缚能顺序,并与 XPS 窄扫描谱拟合结果相对比,建立了化学态与其束缚能的对应关系,进而用 Si(CH₂)₄ 的实际 C 1s 束缚能值进行校正,确定了各化学态的束缚能. 结果发现,除了 SiC_xO_y (x=1, 2, 3, 4, x+y=4) 的 Si 2p 束缚能彼此不同外,其 C 1s 和 O 1s 彼此也不相同,其中 SiO₂(CH₃)₂ 和 SiO₃(CH₃)₂ 的 C 1s 束缚能与 CH_m 和 C—O 中 C 1s 的相近,对此从化学态结构、元素电负性和邻位效应进行了解释.

关键词: SiC, 化学态, XPS, FTIR

PACC: 3320E, 3365F, 3640B, 6890

1. 引言

为了研究 SiC 的氧化机理,降低 SiC/SiO₂ 界面的陷阱密度,人们对 SiC/SiO₂ 界面的化学态进行了大量的研究. 对这些结果进行对比分析发现,当前研究者在 SiC/SiO₂ 界面化学态的主要观点为: 1) SiC/SiO₂ 界面的化学态为 Si—C, Si—O—C, C=C, C—H, C—C, C—O 等,其中 Si—O—C 为 SiC_xO_y 对应的化学态^[1]; 不同 SiC_xO_y 的 Si 2p 不同,但其 C 1s 和 O 1s 束缚能彼此相同; 2) SiC/SiO₂ 界面的化学态为 SiC_xO_y 的四种化学态和 C=C 石墨相^[2-4],在此除了不同 SiC_xO_y 的 Si 2p 不同外,其 C 1s 和 O 1s 束缚能彼此也不相同. 无论是通过湿法、干法氧化,还是通过外延淀积形成的 SiC/SiO₂ 结构,其界面主要化合物为过渡氧化物 SiC_xO_y 和石墨相^[4]. 当前, SiC/SiO₂ 界面化学态结构和其束缚能对应关系方面分歧的主要原因在于人们不了解 SiC 表面的组分结构. 当 SiC 外延片长期暴露在大气时,表面只能生成

SiC_xO_y 不能生成 SiO₂^[5]. 在本文中,作者用傅里叶变换红外谱和 X 射线光电子能谱(XPS)对 SiC 外延片进行了表征,解析了所得红外掠反射吸收谱、红外镜面反射谱、XPS 宽扫描谱和原位窄扫描谱,确定了 SiC 化学态结构和其相应的束缚能. 从化学态结构、元素电负性和邻位效应解释了与文献的比较结果.

2. 实验

实验所用的样品为在常温下长期暴露在大气中的表面未经抛光和清洗处理的 4H—SiC 外延片. 样品表面的宽扫描和原位窄扫描 XPS 谱是在西安理工大学材料测试中心用 Axis Ultra Kratos (UK) 型高分辨光电子能谱仪测量的. 辐射源为单色 Al K α 射线,源功率为 150 W,源电压为 15 kV. AlK α 射线能量为 1486.6 eV, K α 射线入射角为 15°. 样品室真空度为 1.33×10^{-7} Pa.

样品表面的红外掠反射吸收谱和红外镜面反射谱是在室温下,用 EQUINOX55 型傅里叶变换红外光谱仪,在与 XPS 谱相同的取样位置,以 4 cm^{-1} 分辨

* 国家重点基础研究发展计划(973)项目(批准号: 51327020201, 51327020202),国家自然科学基金(批准号: 60376001)教育部重点项目(批准号: 306150)资助的课题.

[†] E-mail: greenemagl@163.com

率,在 $650\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ 扫描范围内,扫描 16 次获得的.

3. 结果及讨论

图 1 为 SiC 表面 XPS 宽扫描谱. 从主光电子峰的束缚能值,确定表面存在 Si, C, O 三种元素. 在图 1 中,伴峰出现主光电子峰高束缚能端,说明 SiC 表面存在不饱和侧链或者具有不饱和骨架的高聚物. 1000 eV 附近的光电子峰是 C KVV 的俄歇峰.

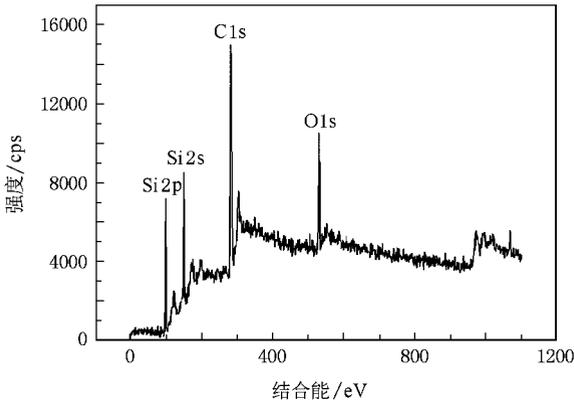


图 1 SiC 表面的宽扫描 XPS 谱

在 FTIR 谱的几种工作模式中,红外掠反射吸收谱的灵敏度与透射谱的相当,峰位置和峰形与透射谱的相同,且对样品厚度没有限制,非常适合表征 SiC 表面化学结构.

图 2 为样品表面红外掠反射吸收谱,图中各吸

收峰的位置及其对应官能团的振动模式列于表 1 中. 宽吸收带 $3200\text{--}3700\text{ cm}^{-1}$ 和 $1590\text{--}1680\text{ cm}^{-1}$ 分别是游离 O—H 和缔合 O—H 的伸缩振动和弯曲振动吸收峰. 1039 cm^{-1} 是 Si—OH 中 Si—O 伸缩振动的特征峰^[5]. 这些吸收峰的存在与吸附 H_2O 与 Si—H 的作用有关. 2924 cm^{-1} 和 2852 cm^{-1} 分别是 CH_2 不对称伸缩振动和对称伸缩振动吸收峰. 2955 cm^{-1} 是 CH_3 不对称伸缩振动吸收峰. 1462 cm^{-1} 是 CH_3 不对称弯曲振动和 CH_2 弯曲振动吸收峰. 1422 cm^{-1} 和 1258 cm^{-1} 均是 Si— CH_3 中 CH_3 弯曲振动特征峰^[5]. 吸收峰 1403 cm^{-1} 和 1238 cm^{-1} 与 Si— CH_2 有关. Si—H, Si— H_2 和 Si— H_3 伸缩振动吸收峰在 $2000\text{--}2200\text{ cm}^{-1}$ 范围内,图 2 在这一范围内没有吸收峰,意味着表面 Si— H_n ($1 \leq n < 4$)量在红外

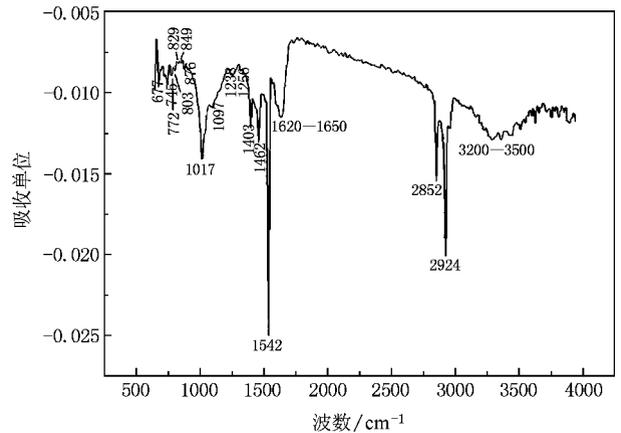


图 2 SiC 表面的掠反射吸收红外谱

表 1 图 2 中各吸收峰的波数及其对应的振动模式

波数/ cm^{-1}	官能团的振动模式	波数/ cm^{-1}	官能团的振动模式
3200—3500	O—H 伸缩振动	1567	苯环骨架振动
1624—1649	O—H 弯曲振动	1515	C=C 伸缩振动
2952	CH_3 中 C—H 伸缩振动	1495	C=C 伸缩振动
2924	CH_2 中 C—H 不对称伸缩振动	1017	Si—O—Si 中 Si—O 的伸缩振动
2852	CH_2 中 C—H 对称伸缩振动	1076—1097	Si—O—Si 中 Si—O 的伸缩振动
1462	CH_3 和 CH_2 中 C—H 弯曲振动	1039	Si—OH 中 Si—O 的伸缩振动
1403	Si— CH_2 中 CH_2 的 C—H 弯曲振动	876	$\text{Si}(\text{CH}_2)_4$ 中 CH_2 的摇摆振动
1258	Si— CH_3 中 CH_3 的 C—H 弯曲振动	849	$\text{SiO}_2(\text{CH}_2)_2$ 中 CH_3 的摇摆振动
1238	Si— CH_2 中 CH_2 的 C—H 弯曲振动	829	$\text{SiO}(\text{CH}_2)_3$ 中 CH_2 的摇摆振动
1155	$\text{Si}(\text{CH}_2)_4$ 中 Si— CH_2 伸缩振动	772	$\text{SiO}(\text{CH}_2)_2$ 中 CH_2 的摇摆振动, TO_{SiC}
1542	2TO_{SiC}	697	Si— CH_2 中 Si—C 伸缩振动
1600	苯环骨架振动	677	Si—Si— CH_2 中 Si—C 伸缩振动

掠反射吸收谱的探测限之下. 1017 cm^{-1} , $1076\text{—}1097\text{ cm}^{-1}$ 和 1155 cm^{-1} 分别是 Si—O—Si 或 Si—CH₂—Si 三聚体, 四聚体, 多聚体和笼状结构中 Si—O 或 Si—CH₂ 伸缩振动吸收峰^[6,7]. 图 2 中没有 Si—H_n ($n = 1, 2, 3$) 特征峰, 存在谱形较宽的 Si—O—Si 聚合体特征峰, 表明样品表面的 Si—H 已完全被氧化. Si—CH₂—Si 聚合体与生长结束后, 残留在室内的 Si 源和 C 源裂解后产物形成的中间体, 随着生长温度降低, 沉积在外延片表面而成 SiC 表面化合物, 而 SiH₂ = CH₂ 是主要中间体的结果一致. 876 cm^{-1} 是 Si—O—Si 或 Si—CH₂—Si 笼状结构中 Si—O 或 Si—CH₂ 弯曲振动吸收峰^[8]. 图 2 在 2817 cm^{-1} 处没有吸收峰, 1090 cm^{-1} 处也没有双峰出现, 意味着样品表面不存在 Si—O—C 结构. 849 cm^{-1} 和 803 cm^{-1} 分别是 SiO₂(CH₃)₂ 中 CH₃ 平面摇摆振动和 Si—C 伸缩振动特征峰^[8]. 830 cm^{-1} 和 745 cm^{-1} 分别是 SiO(CH₂)₃ 中 CH₂ 平面摇摆振动和 Si—C 伸缩振动吸收峰. SiC 横光学振动(TO)吸收峰与 SiO₃CH₃ 特征吸收峰重叠于 772 cm^{-1} 处, 其倍频(2TO)吸收峰位于 1542 cm^{-1} 处. 677 cm^{-1} 是 Si—Si—CH₂ 中 Si—C 弯曲振动吸收峰^[9]. 697 cm^{-1} 是 —CH₂—Si—CH₂—Si—结构中 Si—C 弯曲振动吸收峰. 1603 cm^{-1} , 1567 cm^{-1} , 1514 cm^{-1} , 1495 cm^{-1} 分别是苯环中 C=C 振动和苯环骨架振动特征峰, 1125 cm^{-1} 是苯环骨架振动与 Si—C 伸缩振动的偶合峰^[6]. 红外掠反射吸收谱中苯环特征峰的出现与宽扫描 XPS 谱中伴峰的出现相一致.

除了红外掠反射谱和透射谱外, 红外镜面反射谱也适于表征 SiC 表面化学结构, 但灵敏度比红外掠反射吸收谱的低. 图 3 为红外光的入射方向与样品表面垂直时的红外镜面反射谱. $770\text{—}1000\text{ cm}^{-1}$ 间的高反射率区是 SiC 晶格振动与红外光谱产生的剩余射线带. 与体单晶 SiC 的剩余射线带相比, 带形相同, 反射率为 62%, 低于体单晶 SiC 的反射率 95%—98%. 这意味着样品的单晶层表面可能存在非晶层. 在 $1000\text{—}1300\text{ cm}^{-1}$ 波数范围内没有反射峰, 说明样品表面不存在非晶 SiO₂(笼状 Si(O)₄), 图 2 中的吸收峰 1155 cm^{-1} 和 876 cm^{-1} 与笼状 Si(CH₂)₄ 结构有关. 这与 SiC 表面的类聚合物非晶层, 在室温下氧化不生成 SiO₂^[5] 相一致. 1567 cm^{-1} 处变形的干涉条纹与样品表面苯环结构有关, 这与前面的解析结果相一致.

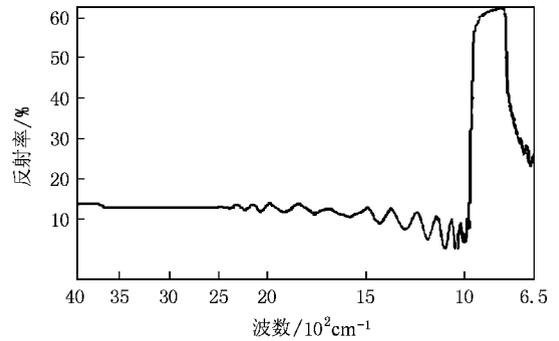


图 3 SiC 外延层红外镜面反射谱

在红外掠反射吸收谱中, $4000\text{—}1330\text{ cm}^{-1}$ 为基团特征吸收频率区, $1300\text{—}650\text{ cm}^{-1}$ 为指纹区. 图 2 的特征吸收频率区内有游离 O—H, 缔合 O—H, CH₃, CH₂, 苯环, 2TO_{SiC}, Si—CH₃ 和 Si—CH₂ 的特征峰; 指纹区有 Si—O—Si 和 Si—CH₂—Si 聚合体, CH₂—Si—CH₂—Si, Si—OH, Si(CH₂)₄, SiO(CH₂)₃, SiO₂(CH₃)₂, SiO₃(CH₃), Si—Si—CH₂ 和 TO_{SiC} 吸收峰. 由此可以推断: SiC 表面主要是由 Si—O—Si 和 Si—CH₂—Si 聚合体构成的非晶 SiC_xO_y:H, H₂O 吸附于其表面, 这与文献[10]相一致; 表面化学态为 Si—OH, Si(CH₂)₄, SiO(CH₂)₃, SiO₂(CH₃)₂, SiO₃(CH₃), Si—Si, 游离 OH 和缔合 OH. 当 SiC 生长结束, 切断电源, Si 源和 C 源后, 生长室内残留的 Si 源和 C 源在生长温度下的分解产物形成的中间体, 在 H₂ 气氛中, 沉积在温度不断降低的衬底上形成非晶 SiC:H, 其中 C 原子和 Si 原子以 SiH₂=CH₂ 的形式掺入, 这与图 2 中 CH₂ 的量远高于 CH₃ 的结果相一致. 常温下, 当非晶 SiC:H 长期暴露在大气中时, 非晶 SiC:H 中的 Si—H 被氧化为 Si—O—Si, Si—C 键能较大未被氧化. 而使非晶 SiC:H 转变为非晶 SiC_xO_y:H. 大气中的 O₂ 渗透到非晶 SiC:H 膜中, 而使 Si—H 氧化, 因此除了前面的化学态外, SiC 表面的化学态还有 O₂ 和其离解的 O 原子. 在 Si(CH₂)₄, SiO(CH₂)₃, SiO₂(CH₃)₂ 和 SiO₃(CH₃) 中, C 原子和 O 原子同时与 Si 原子以单键成键, C 原子和氧原子间不成键, 碳原子和氧原子数之和为 4, 可用 SiC_xO_{4-x} ($x = 1, 2, 3, 4$) 结构表示. 从图 1 中 C, O 光电子峰的面积和其灵敏度因子得到样品表面的 C/O = 7.13 > 1, 与 Wang 等人^[3]所认为的当 C/O 比大于 1 时, SiC_xO_y ($x = 1, 2, 3, 4, x + y = 4$) 为类 SiC 的结果相一致.

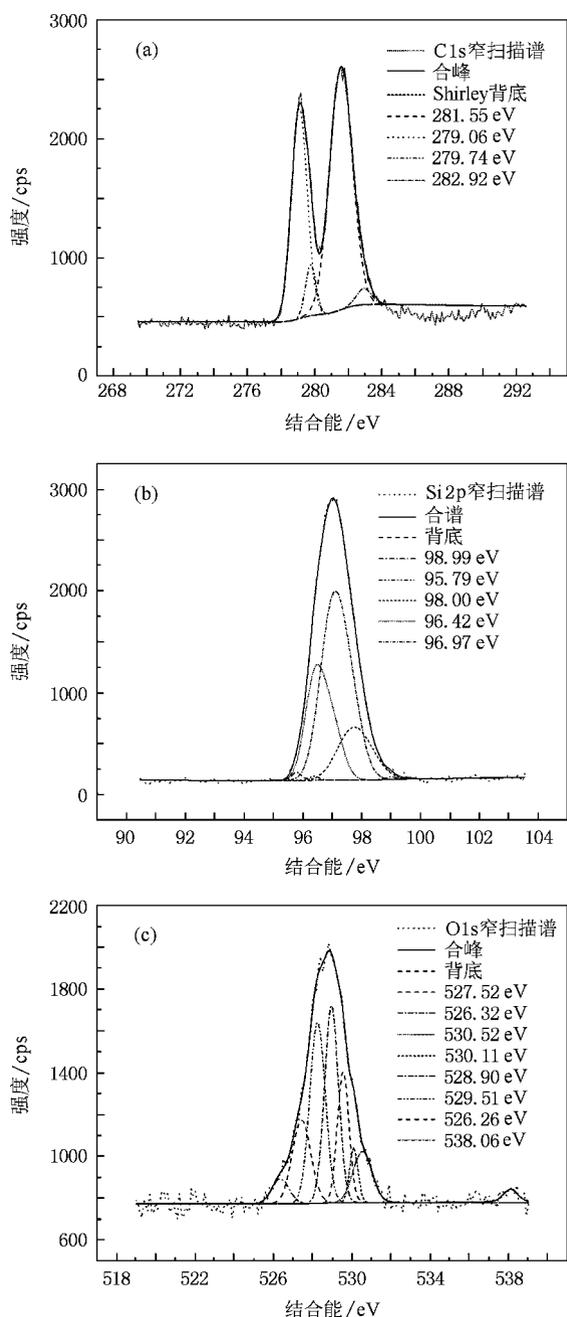


图 4 SiC 外延层表面原位窄扫描谱的拟合结果 (a) C 1s; (b) Si 2p; (c) O 1s

与 FTIR 相比, XPS 是一种方便快捷的化学态表征方法, 其灵敏度比 FTIR 的低. 图 4 为用 XPS 拟合软件所能提供最大数目的, 无位置、半高宽和峰面积限制的高斯型峰, 在 Shirley 背景下拟合后, 所得的与 XPS 宽扫描谱、红外掠反射吸收谱和红外镜面反射谱解析结果一致的拟合结果. 图 4(a)(b)和(c)分别为原位 C 1s, Si 2p 和 O 1s 窄扫描谱拟合结果.

根据元素电负性顺 $H < Si < C < O$, 确定化学态

C 1s 束缚能顺序为 $Si(CH_2)_4 < SiO(CH_2)_3 < \text{苯环} < SiO_2(CH_3)_2 < SiO_3(CH_3)$; Si 2p 束缚能顺序为 $Si-Si < Si(CH_2)_4 < SiO(CH_2)_3 < SiO_2(CH_3)_2 < SiO_3(CH_3)$; O 1s 束缚能顺序为 $H_2O < \text{缔合 O-H} < Si-OH < SiO(CH_2)_3 < SiO_2(CH_3)_2 < SiO_3(CH_3) < O < O_2$. 将 C 1s 束缚能顺序与图 4(a) 相对照, $Si(CH_2)_4$ 的 C 1s 束缚能为 279.06 eV, 文献中其 C 1s 束缚能值为 282.50 eV^[11]. 以 $Si(CH_2)_4$ 的 C 1s 束缚能 282.50 eV 为化学态束缚能校正标准. 校正前后的化学态结构和其原子的芯电子束缚能值列于表 2 中. 表 2 中校正后 C 1s 束缚能中没有苯环的 C 1s 束缚能 284.50 ± 0.10 eV, 这可用红外掠反射吸收谱中苯环的特征峰强度较弱, 其量在高分辨 XPS 探测限之下解释. SiC_xO_{4-x} ($x = 1, 2, 3, 4$) 校正后的 Si 2p 束缚能值与 Anna 等的结果完全相同^[11], $SiO(CH_2)_3$ 校正后的 C 1s 束缚能与 Shieh 等^[10]的结果非常接近. SiC_xO_{4-x} ($x = 1, 2$) 校正后的 C 1s 束缚能与 Yeom 等^[11]的结果一致, SiC_xO_{4-x} ($x = 1, 2, 3$) 校正后的 O 1s 束缚能与 Thomas 等^[12]的结果相符. 本文中除了 SiC_xO_{4-x} ($x = 1, 2, 3$) 的 Si 2p 束缚能彼此不同外, C 1s, O 1s 束缚能彼此也不同, 这与 Anna 等研究者所认为的 SiC_xO_{4-x} ($x = 1, 2, 3$) 的 Si 2p 束缚能彼此不同, C 1s 和 O 1s 束缚能彼此相同的观点不同.

图 2 中没有 CH_m 的特征峰 733 cm^{-1} 和 Si—C—O 的特征峰 2817 cm^{-1} 等, 意味着样品表面不存在 CH_m 和 C—O. Anna 等将本文 SiC_xO_{4-x} ($x = 1, 2, 3$) 校正后的 C 1s 束缚能值分别指定给 Si—C, CH_m 和 C—O 的主要原因在于其对 SiC 表面组分结构不了解. SiC_xO_{4-x} ($x = 1, 2, 3$) 中的 C 1s 束缚能分别与 Si—C, CH_m 和 C—O 的 C 1s 束缚能相近. $SiO(CH_2)_3$ 的束缚能被指定 SiC 表面相, 只考虑到表面 SiC 结构中的悬挂键, 没有考虑到大气中的 H_2O 和 O_2 的化学吸附作用使表面 SiC 的不饱和键饱和, 而使 SiC 表面相变为 $SiO(CH_2)_3$. 将 284.99 eV 制定给外来碳污染 CH_m , 只考虑了外来碳污染 CH_m 在 SiC 表面的物理吸附在其表面, 但没有考虑到 XPS 样品室内的低压对其的解吸作用. 将 286.36 eV 指定给 C—O, 考虑到了 SiC 氧化会生成 CO, 但没有考虑到常压下 CO 的饱和蒸气压很低, 以致 CO 一旦生成马上逸出 SiC. $SiO(CH_2)_3$ 的 C 1s 束缚能比 $Si(CH_2)_4$ 的高, $SiO_2(CH_3)_2$ 和 $SiO_3(CH_3)$ 的 C 1s 束缚能分别与 CH_m 和 C—O 的 C 1s 束缚能相近, 可以用 SiC_xO_{4-x} ($x =$

1 2 3) 结构、其元素电负性和邻位效应来解释. 在 $\text{SiC}_x\text{O}_{4-x}$ ($x = 3$) 中, 3 个 C 原子和一个 O 原子同时与一个 Si 原子成键. 在 Si, C, O 三种元素中, Si 元素电负性最小, 使 $\text{SiC}_x\text{O}_{4-x}$ ($x = 3$) 中的 Si 外层电子云同时偏向 C 原子和 O 原子. 同时由于 O 元素电负性大于 C 元素电负性, 而使偏向 $\text{SiC}_x\text{O}_{4-x}$ ($x = 3$) 中每个 C 原子的电子云较偏向 $\text{Si}(\text{CH}_2)_4$ 中每个 C 原子的电子云少, 导致前者的 C 1s 束缚能比后者的高. $\text{SiC}_x\text{O}_{4-x}$ ($x = 2$) 中两个 C 原子和两个 O 原子同时与

一个 Si 原子成键. 在两个 O 原子吸电子力作用下, 除了 Si 原子外层电子云完全偏向 O 原子, 两个 C 原子的外层电子云也部分地偏离, 而使 $\text{SiC}_x\text{O}_{4-x}$ ($x = 2$) 的 C 1s 束缚能与 CH_m 的 C 1s 束缚能相近, 但比其稍高. 在 $\text{SiC}_x\text{O}_{4-x}$ ($x = 1$) 中, 一个 C 原子和三个 O 原子同时与一个 Si 原子成键. 在三个 O 原子强吸电子力作用下, Si 原子的外层电子云完全偏向 O 原子外, C 原子的外层电子云也极大地偏离, 使其 C 1s 束缚能与 C—O 的 C 1s 束缚能相近, 但比其稍低.

表 2 SiC 表面的化学态结构及用非晶 $\text{SiC}(\text{Si}(\text{CH}_2)_4)$ 的 C 1s 束缚能 282.50 eV 校正前后的芯电子束缚能.

A— $\text{Si}(\text{CH}_2)_4$, B— $\text{Si}(\text{O}(\text{CH}_2)_3)$, C— $\text{SiO}_2(\text{CH}_2)_2/\text{SiO}_2(\text{CH}_3)_2$, D— $\text{SiO}_3(\text{CH}_3)$

化学态结构		芯电子束缚能/eV									
		A	B	C	D	Si—Si	H ₂ O	缔合 OH	Si—OH	间隙 O	O ₂
校正前芯电子的束缚能/eV	C 1s	279.06	279.74	281.55	282.92						
	Si 2p	96.42	96.97	98.00	98.99	95.79					
	O 1s		528.90	529.51	530.11		526.32	527.52	528.26	530.52	538.06
校正后芯电子的束缚能/eV	C 1s	282.50	283.18	284.99	286.36						
	Si 2p	99.86	100.41	101.44	102.43	99.23					
	O 1s		532.34	532.95	533.55		529.76	530.96	531.70	533.96	541.50

4. 结 论

本文用 FTIR 和 XPS 表征了 SiC 外延层的表面组分结构, 解析了所得的 XPS 宽扫描谱、红外掠反射吸收谱和红外镜面反射谱, 获得了与前面谱解析结果一致的 XPS 窄扫描谱拟合结果. XPS 宽扫描谱、红外掠反射吸收谱和红外镜面反射谱解析结果表明, 样品表层是由 Si—CH₂—Si 和 Si—O—Si 聚合物构成的非晶 SiC_xO_y , H₂O 吸附于其表面, O₂ 和 O 原子分散在其中; 表面化学态为, 游离 OH, 缔合 OH, Si—OH, 苯环, $\text{Si}(\text{CH}_2)_4$, $\text{SiO}(\text{CH}_2)_3$, $\text{SiO}_2(\text{CH}_3)_2$, $\text{SiO}_3(\text{CH}_3)$, Si—Si, O₂ 和 O 原子, 其中苯环量在高分辨 XPS 谱探测限之下. 由化学态结构和元素 Si, C, O 电负性, 确定了化学态原子的芯电子束缚

能顺序. 将此顺序与 XPS 窄扫描谱的拟合结果相对照, 确定了化学态的原子芯电子束缚能. $\text{SiC}_x\text{O}_{4-x}$ ($x = 1, 2, 3, 4$) 校正后的 Si 2p 束缚能值与 Anna 等所得的完全相同, $\text{Si}(\text{O}(\text{CH}_2)_3)$ 校正后的 C 1s 束缚能与 Shieh 等人的结果非常接近. $\text{SiC}_x\text{O}_{4-x}$ ($x = 1, 2$) 校正后的 C 1s 束缚能与 Yeom 等人的结果一致, $\text{SiC}_x\text{O}_{4-x}$ ($x = 1, 2, 3$) 校正后的 O 1s 束缚能与 Thomas 等的结果相符. 除了 $\text{SiC}_x\text{O}_{4-x}$ ($x = 1, 2, 3$) 的 Si 2p 束缚能彼此不同外, C 1s, O 1s 束缚能彼此也不同, 这与 Anna 等认为的 $\text{SiC}_x\text{O}_{4-x}$ ($x = 1, 2, 3$) 的 Si 2p 束缚能彼此不同, C 1s 和 O 1s 束缚能彼此相同的观点不同. $\text{SiC}_x\text{O}_{4-x}$ ($x = 1, 2$) 的 C 1s 束缚能分别与 CH_m 和 C—O 的 C 1s 束缚能相近, 对此作者从 $\text{SiC}_x\text{O}_{4-x}$ ($x = 1, 2, 3$) 结构, 元素电负性和邻位效应进行了合理的解释.

- [1] Anna C Ö 1997 *Ph. D. Thesis* (The Pennsylvania State University).
 [2] Hornetz B, Michel H J, Halbritter J 1996 *J. Mater. Res.* **19** 3088
 [3] Wang Qiang, Pantano C G, Annett J F 1999 *Phys. Stat. Sol.* **216** 909

- [4] Koh K, Kestle A, Wright C, Wilks S P, Mawby P A, Bowen W R 2001 *Applied Surface Science* **174** 210
 [5] Baunack S, Oswald S, Tönshoff H K, von Alvensleben F, Temme T 1999 *Fresenius J. Anal. Chem.* **365** 173

- [6] Wu J G 1994 *Modern Fourier Transformation infrared spectroscopy technology and application* (Beijing : Scientific Technical Documents Publishing House) p573 (in Chinese) [吴瑾光 1994 近代傅里叶变换红外光谱技术及应用(北京 : 科学技术文献出版社) 第 573 页]
- [7] Bastl Z , Bürger H , Fajgar R , Pokorný D , Pola J , Senzlober M , Šubrt J , Urbanová M 1996 *Applied Organometallic Chemistry* **10** 83
- [8] Kim M T , Lee J 1997 *Thin Solid Films* **303** 173
- [9] Mandracci P , Ferrero S , Ricciardi L , Scaltrito C , Richieri G , Sgorlon C 2003 *Thin Solid Films* **427** 142
- [10] Shieh Jia-Min , Tsai Kou-Chiang , Dai Bau-Tong 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 1294
- [11] Yeom H W , Shimomura M , Kono S , Kitamura J , Hara S , Mun B S www.als.lbl.gov/als/compendium/AbstractManager/uploads/yeom.pdf
- [12] Thomas B C 2005 *Ph. D. Thesis* (Massachusetts institute of technology)

Study on the chemical states of the surface of SiC epilayer^{*}

Ma Ge-Lin[†] Zhang Yu-Ming Zhang Yi-Men Ma Zhong-Fa

(Key Laboratory of Wide Band-gap Materials and Devices of Ministry of Education , Microelectronics School of Xidian University , Xi ' an 710071 , China)

(Received 4 September 2007 ; revised manuscript received 13 September 2007)

Abstract

In this paper , the composition structures of SiC epilayer surface are characterized by high resolution X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and Fourier transform infrared (FTIR) spectrum . The results of XPS wide scan spectroscopy , infrared glancing reflection absorption spectrum and infrared specular reflection spectroscopy show that the amorphous phase SiC_xO_y:H is made up of Si-O-Si and Si-CH₂-Si polymers . The chemical state structures are composed of Si(CH₂)₄ , SiO(CH₂)₃ , SiO₂(CH₃)₂ , SiO₃(CH₃) , Si-Si , dissociative H₂O , combined OH Si-OH , O and O₂ . The order of the atom core electron binding energy values is determined by chemical state structures and element electronegativity . Compared with the XPS narrow scan spectrum fitting results , the corresponding relation between chemical states and its binding energies is established , and all chemical state binding energies are obtained using the calibration of C 1s binding energy of Si(CH₂)₄ . The result shows that the C 1s and O 1s binding energy values of SiC_xO_{4-x} (x = 1 , 2 , 3) are different from each other , similar as their Si 2p binding energies , of which the C 1s of SiO₂(CH₃)₂ and SiO₃(CH₃) are respectively close to those of CH_m and C—O . The reasonable explanation is presented in terms of chemical state structures , electronegativity and neighbouring site effects .

Keywords : SiC , chemical state , XPS , FTIR

PACC : 3320E , 3365F , 3640B , 6890

^{*} Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant Nos. 51327020201 , 51327020202) , the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60376001) and the Key Project of Ministry of Education (Grant No. 106150) .

[†] E-mail : greenemag@163.com