

短脉冲激光输出;1992年 A. Seas 报道^[6],运用主动锁模技术获得 60fs,平均功率为 85mW 的超短脉冲激光输出;1992年 A. Sennaroglu 等人运用主动锁模获得 48fs^[7],平均功率为 380mW 的超短脉冲激光输出;1993年 Y. Pang 采用自锁模技术获得 100fs^[8],平均功率为 700mW 的超短脉冲激光输出.最新报道^[9], V. Yanovsky 采用优化腔体散射自锁模技术,获得 25fs 超短脉冲激光输出.

这些 $Mg_2SiO_4:Cr^{4+}$ 激光器输出脉冲的峰值功率都很高,因此很容易在橙红光谱(575—675nm)内产生二次谐波,而这个光谱带过去只能由染料激光器产生.

4 医学应用

在掺 Cr^{4+} 的 Mg_2SiO_4 晶体的发光波段内,发现水的吸收变化非常大(图 1),这一现象作为医学应用潜力将很有趣.既然水是人体组织的主要成分,因此只要通过调节激光器的波长,就能够控制吸收体的穿透深度^[10].

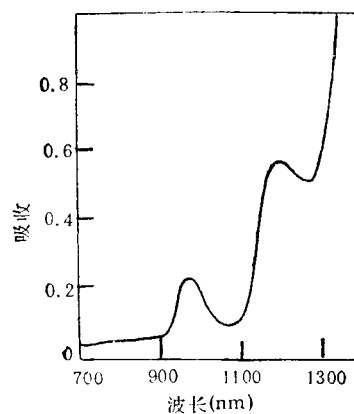


图 1 水的吸收随 $Mg_2SiO_4:Cr^{4+}$ 发光波长的变化^[10]

参 考 文 献

- [1] V. Petricevic, S. K. Gayen and R. R. Alfano, *Appl. Phys. Lett.*, **52**(1988), 1040.
- [2] N. B. Angert, N. Borodin and V. Garmash, *Sov. J. Quantum Electron.*, **18**(1988), 73.
- [3] R. G. Pappalardo, W. J. Miniscalco and T. E. Peters, *Journal of Luminescence*, **55**(1993), 87.
- [4] C. Deka, M. Bass and B.H.T. Chai, *J. Opt. Soc. Am. B*, **10**-9 (1993), 1499.
- [5] A. Seas, V. Petricevic and R. R. Alfano, *Opt. Lett.*, **16**(1991), 1668.
- [6] A. Seas, V. Petricevic and R. R. Alfano, *Opt. Lett.*, **17**(1992), 937.
- [7] A. Sennaroglu, C. R. Pollock and H. Nathel, *Opt. Lett.*, **18** (1993), 826.
- [8] Y. Pang, V. Yanovsky and F. Wise, *Opt. Lett.*, **18**(1993), 14.
- [9] V. Yanovsky, Y. Pang, F. Wise et al., *Opt. Lett.*, **18**(1993), 1541.
- [10] V. Petricevic, A. Seas and R. R. Alfano, *Laser Focus World*, **26**-11 (1990), 109.

一种新型光电材料—— β - $FeSi_2$ 的结构,光电特性及其制备

王连卫 陈向东 林成鲁 邹世昌

(中国科学院上海冶金研究所信息功能材料国家重点实验室,上海 200050)

摘要 β - $FeSi_2$ 是近年来发展起来的新型硅基光电材料.详细介绍了 β - $FeSi_2$ 的结构,电学、光学性质以及它的制备技术.对目前存在的问题以及未来的研究动向作了简要的讨论.

关键词 光电材料, β - $FeSi_2$, 结构,光电特性,制备

1 β - $FeSi_2$ 研究的重要意义

集成电路工业是当今世界的战略性工业,是一个国家进入信息化社会的重要指标.迄今

为止,硅仍是集成电路的主要材料,硅器件工艺是最成熟的工艺.与此同时,光电子学作为信息工程的一个前沿领域,已越来越显示出其优越性,如高容量的信息传输,高的传输及处理速度,可靠性强等特点.目前光电子学技术渗透

到信息产业的诸多方面,包括光通信、光互连乃至光计算等等。很多科学家预言,下个世纪光电子将成为十分重要的领域。然而,由于硅是一种间接带隙半导体,在光电子领域中很难得到广泛应用。为了使成熟的硅集成工艺在光电子领域中得到应用,学术界在探索研究硅基半导体新材料方面做了许多工作。多孔硅曾一度被认为是为硅基光电材料提供了一条可能途径,但由于其存在的某些问题,如发光不稳定,与常规的集成电路工艺不相容等使其实际应用前景不容乐观。与此同时,一种新型半导体材料 β -FeSi₂ 具有 $E_g = 0.85\text{--}0.89\text{eV}$ 的直接带隙,被认为是为制备硅基光电器件提供了可能途径。这方面原因有两点:其一,具有直接带隙的 β -FeSi₂ 能在硅表面外延,与硅器件工艺相匹配;其二, β -FeSi₂ 对应的特征波段是硅的全透明区,因而也是光纤通信中的最重要波段。目前,世界上已有许多大学及研究机构开展这方面的工作^[1]。

由于 β -FeSi₂ 本身的特点,如在硅表面有两种外延取向关系,从而给单晶薄膜的生长带来了许多困难。目前, β -FeSi₂ 研究工作的焦点主要集中在:(1) β -FeSi₂ 单晶薄膜的制备;(2) β -FeSi₂ 的能带结构。在这方面理论和实验的分歧比较大,这是关系到 β -FeSi₂ 能否应用于光电子材料的关键问题;(3) β -FeSi₂ 薄膜的电学、光学性质。本文将针对这些问题,系统地介绍 β -FeSi₂ 的结构,能带特点,电学、光学性质,几种主要的制备方法和目前尚未解决的一些问题。

2 β -FeSi₂ 的晶体结构

2.1 晶体结构^[2]

β -FeSi₂ 属于斜方晶系,其空间群为 $cmca$ (D_{2h}^{14}),晶格常数为 $a = 0.9863\text{nm}$, $b = 0.7791\text{nm}$, $c = 0.7833\text{nm}$,一个原胞中含有 48 个原子。在 β -FeSi₂ 中,Fe, Si 有两种原子环境,通过对称变换而构成整个晶胞。Fe 的两种环境是 $\text{Fe}^{\text{I}}\text{Si}_2$, $\text{Fe}^{\text{II}}\text{Si}_2$,前者属于点群 c_2 ,后者

属于 c_{1s}

根据 XRD(X-ray diffraction) 的测量数据,多晶 β -FeSi₂ 主要有表 1 所示的几种衍射峰。

表 1 β -FeSi₂ 的主要 X 射线衍射峰[采用 $\text{CuK}\alpha_1(\lambda = 0.154\text{nm})$]

面指数	晶面间距(\AA)	2θ	强度
(202)	3.07	29.06°	100
(220)	3.06	29.16°	100
(313)	1.980	45.79°	50
(331)	1.975	45.91°	50
(004)	1.960	46.28°	40
(040)	1.950	46.53°	40
(041)	1.892	48.05°	50
(422)	1.842	49.43°	80

2.2 结构稳定性^[3]

化学组分为 FeSi₂ 的铁的硅化物可以以三种不同的结构形式存在,即 α -FeSi₂, β -FeSi₂, γ -FeSi₂, 其中 γ -FeSi₂ 属于亚稳态, β -FeSi₂ 在室温至 900°C 这一范围内是比较稳定的态,当温度高于 950°C 时, β -FeSi₂ 将逐步转化为具有四方结构(tetragonal)的 α -FeSi₂ (其晶格常数为 $a = b = 0.2695\text{nm}$, $c = 0.5090\text{nm}$)。它是一种金属态。理论研究表明,具有 CaF_2 结构的 γ -FeSi₂ 也是一种金属,它是一种不稳定的态。因为在费米面附近,其态密度很高,具有磁性。基态为简并态。由于 Jahn-Teller^[4] 效应通过晶格扭曲而使对称发生破缺,从而使能量进一步降低,而转变为低对称的 β -FeSi₂。然而最近的实验表明,在膜不太厚时, γ -FeSi₂ 可以稳定存在,从而形成亚稳态。利用激光辐照 β -FeSi₂ 及离子束合成,实现了薄层 γ -FeSi₂ 的在 Si 衬底的外延生长,其机制目前还不清楚。在 300—500°C 时, γ 相会不可逆地转变为比较稳定的 β 相。

2.3 β -FeSi₂/Si 的取向关系

既然 β -FeSi₂ 可在 Si(111) 或 Si(100) 面上外延生长,对其界面及其取向关系的研究也就很有意义。Cherif^[5] 等人对 β -FeSi₂/Si(111) 异质结的界面进行了深入的研究,指出 β -FeSi₂ 在 Si(111) 表面有两种外延方式(见图 1): 一

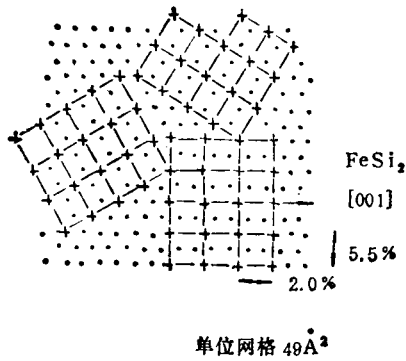
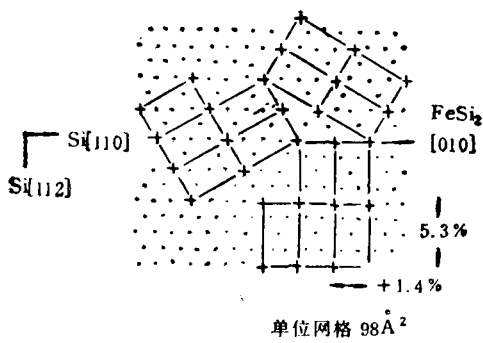


图1 $\beta\text{-FeSi}_2/\text{Si}(111)$ 的晶格匹配关系

是 $\beta\text{-FeSi}_2(101)/\text{Si}(111)$, 取向关系为 $\beta\text{-FeSi}_2[101]//\text{Si}(011)$ (上图); 其二是 $\beta\text{-FeSi}_2(110)/\text{Si}(111)$, 取向关系为 $\beta\text{-FeSi}_2[001]//\text{Si}(011)$ (下图).

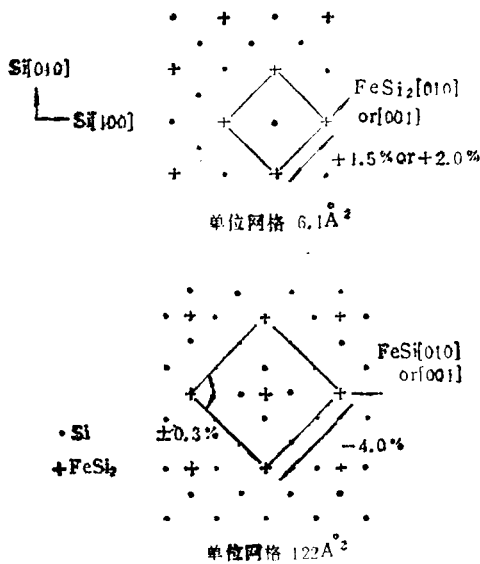


图2 $\beta\text{-FeSi}_2/\text{Si}(100)$ 的晶格匹配关系

$\beta\text{-FeSi}_2$ 在 $\text{Si}(100)$ 表面也有两种外延方

式^[6] (图 2): (1) A 型取向 $\beta\text{-FeSi}_2(100)/\text{Si}(001)$, 取向关系为 $\beta\text{-FeSi}_2[010]//\text{Si}(110)$ (上图), $\beta\text{-FeSi}_2(100)$ 面基本上是正方形(0.0779nm × 0.0783nm), 晶格常数不匹配性仅为 1.4% 和 2.0%; (2) B 型取向 $\beta\text{-FeSi}_2(001)/\text{Si}(001)$, 取向关系为 $\beta\text{-FeSi}_2[010]//\text{Si}(100)$ (下图), 单位网格是 0.779nm × 0.986nm 的长方形, 对两个硅化物原胞, 它和硅基底的晶格不匹配性为 1.4% 和 2.7%.

3 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的电子及能带结构

对 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的能带结构的研究是关系到 $\beta\text{-FeSi}_2$ 能否应用到光电子领域的关键问题. 由于理论与实验结果的不统一, 目前这方面争论还比较大. 实验的测量主要是通过吸收边附近带间跃迁的规律, 即吸收系数与光子能量的关系来判定^[7], 而理论工作主要有从头计算法以及第一原理等. 在吸收边附近, 直接带隙半导体的吸收系数与光子能量关系为

$$a(h\nu) = A(h\nu - E_g^d)^{1/2}, \quad (1)$$

而对间接带隙半导体则有

$$a(h\nu) = A'(h\nu - E_g^{\text{ind}} - E_{\text{ph}})^2. \quad (2)$$

$\beta\text{-FeSi}_2$ 的直接带隙的能带结构正是基于这一原理进行测量的. 图 3 是 $\beta\text{-FeSi}_2$ 薄膜的光吸收系数平方与入射光能量关系的曲线. 顺便指出, 由于不同仪器的定标以及样品的差别, 不同的小组报道的禁带宽度的值也有一定差异, 普遍看法是 E_g 在 0.85—0.89eV 之间.

理论方面的代表性工作有 N. E. Christensen^[8] 等, 他给出的理论计算指出 $\beta\text{-FeSi}_2$ 还存在一个间接带隙, 而且在 $T = 0\text{K}$ 时仅比直接带隙低 35meV, 他认为 $\beta\text{-FeSi}_2$ 中 Γ 点的跃迁为 d-d 跃迁. 针对 $\beta\text{-FeSi}_2$ 中是否真正存在间接带隙, Giannini^[9] 等人研究了不同的温度下厚度为 450nm 的多晶 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的光吸收特性, 对吸收带尾进行了间接跃迁的拟合. 然而, 所测量的样品本身存在很多缺陷, 无法排除直接带隙的吸收边以下的起源于缺陷的吸收或其他带尾的吸收, 因此该实验也无法确定带尾

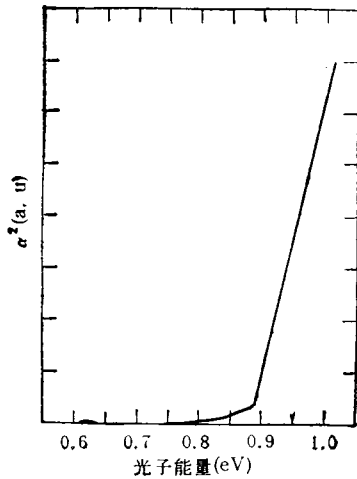


图3 β -FeSi₂ 直接带隙的光吸收法确定

吸收起源于间接带隙跃迁。Avarez 等^[10]利用紫外光电子能谱 (UPS) 对 β -FeSi₂ 的电子结构进行了研究,指出费米面紧靠价带边缘,并且被高密度的缺陷所钉扎,这种结构也说明了含有高密度缺陷的 β -FeSi₂ 为空穴导电。

4 β -FeSi₂ 的电学和光学性质

4.1 β -FeSi₂ 的导电性^[7]

目前的许多报道都认为多晶 β -FeSi₂ 为空穴导电,这种空穴来源于多晶 β -FeSi₂ 中存在大量 Fe 的空位,主要载流子为空穴也导致费米面紧靠价带边缘。一些研究还指出,在掺 As 的 n 型 Si 衬底上生长的 β -FeSi₂ 薄膜形成的异质结具有 p-n 结的特性。Bost^[11] 等的报道表明,在高温下空穴型载流子更容易被激发。

早期的工作还研究了 β -FeSi₂ 的掺杂特性,对 β -FeSi₂ 来说, Ni 是施主杂质, Cr 是受主杂质。在 β -FeSi₂ 中, Fe 原子可以处于 I 和 II 两种位置。S. Kondo^[11] 等的穆斯堡尔分析指出,掺 Cr 以后, Cr 原子较多地占据了 I 位置,掺 Ni 以后, Ni 原子较多占据了 II 位置。

β -FeSi₂ 的迁移率也是人们关心的焦点之一。现有的大多数报道所给出的迁移率都很低,只有 1—4cm²/N·s。如何从根本上提高迁移率是人们关心的问题。这个问题的解决可能主

要依靠薄膜晶体质量的提高。

4.2 薄膜 β -FeSi₂ 的光学常数

对 β -FeSi₂ 光学常数的研究,已有 Dimitriadis^[7] 以及 Henrion^[12] 等利用椭圆偏振光谱仪做的工作。在近红外至紫外波段,主要为带间激发,其介电函数、折射率及消光系数与大块材料相似。Henrion^[12] 的紫外波段的工作,说明了在等离激元情况下的介电函数的特点,但二者的工作都没有给出详细的讨论。

4.3 晶格振动研究

对薄膜 β -FeSi₂ 的研究,目前最主要的工作就是红外反射及拉曼谱的工作。Guizetti^[13] 和 Birkholz 等人^[14]从远红外谱分别求出了氧化了的硅衬底表面 100—300nm 的 β -FeSi₂ 薄膜和 β -FeSi₂ 体材料光学声子振动特征频率(见表 2)。拟合主要是依据(3)式进行的,其中 $\epsilon(\omega)$ 为介电函数, ω_T 为特征频率, Q 为振子强度, γ 为摇摆因子。

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} + \sum_{k=1}^n \frac{Q_k \omega_{T_k}^2}{\omega_{T_k}^2 - \omega^2 - i\gamma_k \omega_{T_k} \omega} \quad (3)$$

表 2

振子	文献[13]			文献[14]		
	ω_T	Q	γ	ω_T	Q	γ
	$\epsilon_{\infty} = 12.0$			$\epsilon_{\infty} = 18.7$		
1	263.6	1.42	0.058	265.2	4.44	0.053
2	294.9	2.04	0.030			
3	308.4	3.45	0.025	306.3	11.30	0.037
4	345.0	1.26	0.040	345.5	4.14	0.047
5	392.3	0.48	0.068	395.9	0.34	0.035
6	426.4	0.60	0.033	446.2	1.32	0.059

K. Lefki 等^[15]通过对 β -FeSi₂ 的四种格点 Si(I), Si(II), Fe(I), Fe(II) 所属对称群的分析,给出了红外活性和拉曼活性的振动模式,并对 (200nm)/Si(111), 多晶 β -FeSi₂ 及 β -FeSi₂(1 μ m)/FeSi(110) 的红外及拉曼谱进行了研究,给出了主要的红外及拉曼谱线,结果见表 3。

4.4 荧光特性、光电导与内部光发射^[8,16]

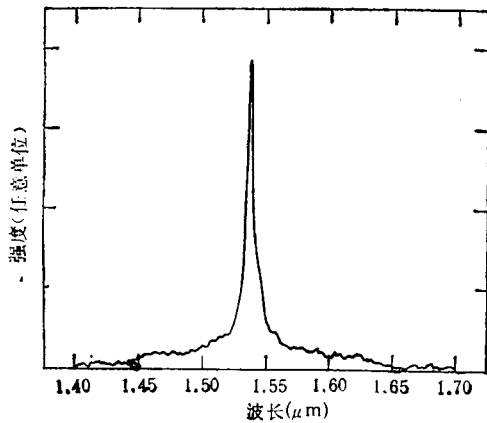
Hunt 等人^[16]采用 IBS (ion beam synthesis) 合成半导体 β -FeSi₂, 测量了它的光致发

表 3

	$\beta\text{-FeSi}_2(200\text{nm})/\text{Si}$ (111)	$\beta\text{-FeSi}_2(1\mu\text{m})/\text{FeSi}$ (110)	多晶 $\beta\text{-FeSi}_2$
主要红外谱线 (cm^{-1})	259 305 & 310 345	267 315 & 324 360 & 375	263 316 350
主要拉曼谱线 (平行极化) (cm^{-1})	176 195 & 200 247	179 197 & 206 253	

光,观察到在 $1.54\mu\text{m}$ 有较强的荧光信号(见图4)。类似的工作还有 Dimitriadis 等的报道。

对 $\beta\text{-FeSi}_2/\text{Si}$ 系统的光电效应的研究,主要有 Lefki^[15] 等工作,他观察到光学阈值是温度的函数,并在一些具有较高晶体质量的 $\beta\text{-FeSi}_2/\text{Si}$ 异质结中观察到了可能起源于内部光发射的阈值异常。

图4 埋层 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的光致荧光

5 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的制备技术

目前发展起来的制备 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的技术很多,主要有固相外延法(SPE)、反应淀积外延(RDE)、共蒸发法与分子束外延(MBE)、化学束外延(CBE)、化学气相沉积(CVD)以及离子束直接合成(IFS)等。

5.1 固相外延法

固相外延法就是在室温下先在硅表面沉积铁薄膜,然后在一定温度下进行退火,通过 Fe,

Si 在界面上的相互间的扩散,实现固相反应,形成铁硅化合物。铁硅化合物形成的种类是由退火温度及退火时间决定的,与铁硅系统的界面行为有关。对铁硅系统的界面行为^[17],一种看法认为 Fe/Si(111) 界面由一层一层的 Fe 在 Si(111) 表面形成突变,而另一些工作则表明由于相互扩散而在界面形成混合相。对表面混合组分的形成看法也有一定的差异。有的学者认为,在小于 0.4nm 界面形成了 FeSi,紧接着则为 Fe_3Si ,而在外侧则为纯铁薄膜。而另一种看法认为,在界面 $0.1\text{—}0.2\text{nm}$ 的区域已经有 $\beta\text{-FeSi}_2$ 形成。最近,Wallart^[18] 等利用 AES, EELS (electron energy loss spectroscopy) 等分析手段对 Fe/Si(111) 界面的形成及退火特性进行了深入的研究,指出在室温研究发现界面的反应伴随着电子从铁原子向硅原子的转移,并且在小于 0.4nm 的范围内铁原子周围的化学环境发生了变化,而界面的径向分布函数更清楚地说明最初淀积在硅衬底上的铁原子的局域环境已经不再是纯铁,在 0.19nm 附近的最近邻的峰是与硅相联系的。这说明 Si(111) 表面的组分不是突变的,而是伴随有界面化合物的生成。Wallart 等^[14] 还对 7nm 厚淀积在 Si(111) 上的 Fe 薄膜的退火特性进行了研究,发现在 $T < 300^\circ\text{C}$ 时主要形成 Fe_3Si , 在 $300^\circ\text{C} < T < 400^\circ\text{C}$ 时主要为 FeSi, 而在 $450^\circ\text{C} < T < 500^\circ\text{C}$ 时已经形成 $\beta\text{-FeSi}_2$ 。Charalabos^[19] 等还认为, $\beta\text{-FeSi}_2$ 的形成还与固相外延时铁薄膜的厚度有关,另外退火时间也是一个因素。基于上述情况以及 930°C 时 $\beta\text{-FeSi}_2$ 将转变为 $\alpha\text{-FeSi}_2$ 这一事实,一般固相

反应都是在高真空下在硅片上淀积铁,在800—900℃的温度下进行退火。在 β -FeSi₂形成以后,其厚度为原来铁薄膜厚度的三倍。通过生长过程的研究,利用HREELS (high resolution electron energy loss spectroscopy)^[20]发现首先形成的是 β -FeSi₂的小圆柱,然后这些圆柱不断扩大,这使得多晶 β -FeSi₂表面由于晶格的部分失配而出现许多针孔。由于存在多种取向关系,采用固相外延法制备 β -FeSi₂的晶体质量都比较差。

5.2 反应淀积外延法

反应淀积外延^[21]是制备 β -FeSi₂的另一种方法,即直接把铁沉积到热的硅基片上而形成 β -FeSi₂。由于基片温度较高,硅的扩散系数较大与沉积上的铁直接反应生成 β -FeSi₂。J. Alvarez等^[21]研究在Si(100)面上外延生长 β -FeSi₂时发现,反应开始时AES谱显示低能Fe47/Si92的俄歇峰迅速升到0.24并保持不变。在AES比值上升的同时,LEED (low energy electron diffraction) 像为 2×1 , EELS谱显示Si和 β -FeSi₂特征能量损失的同时存在。这些结果显示,在用RDE法制备的早期,大片的表面是硅而 β -FeSi₂呈岛状生长。当蒸发了8ML的铁以后,Fe/SiAES的比值达到稳定值,说明形成了有确定化学组分的Fe-Si化合物,LEED图像消失,EELS谱只显示 β -FeSi₂在20.4和13.9eV的特征能量损失。这些实验数据表明,连续的 β -FeSi₂薄膜已经形成。但对RDE法制备 β -FeSi₂中形成过程与衬底温度及沉积速率的关系还没有报道。Mahan等人的工作说明采用RDE制备的 β -FeSi₂薄膜是真正的单晶,但其形貌比较差。最近Jedrecy等的研究还表明,在一定的速率下,当薄膜达到一定厚度时,观察到了FeSi的存在。这说明采用RDE制备薄膜是有其局限性的。改进的方法有我们最近提出的反应沉积固相外延法,即首先将Fe蒸发在热的衬底Si上,在其Fe/Si界面形成薄的 β -FeSi₂层,然后再进行热退火。

5.3 分子束外延与共蒸发法

N. Onda^[22]等采用MBE成功地制备了

β -FeSi₂薄膜。Kanel^[23]较为详细地报道了采用MBE制备 β -FeSi₂的过程:

(1) 在基片上沉积0.1—0.2nm纯净的铁,然后按一定的化学比例蒸发一定量的Fe和Si在基片上,基片保持室温,则在Si(111)表面生成具有带缺陷CsCl结构的Fe_{0.5}Si,而在Si(001)面上仍保持无定形态。

(2) 在400—500℃下退火生成 β -FeSi₂样板,Kane等用RHEED研究发现,在Si(111)面上外延生长的 β -FeSi₂薄膜的表面结构从 (1×1) 重构变为 (2×2) 重构。在Si(001)面上外延生长的 β -FeSi₂薄膜主要是A型取向。

(3) 在生成的 β -FeSi₂样板上用MBE法增加薄膜的厚度,Fe和Si总的沉积速率为0.1nm/s。为了得到较厚的薄膜(>220nm),基片温度可保持在650—700℃。

H. V. Kanel^[23]认为,用MBE法制备的 β -FeSi₂仍为多晶,其中存在两种匹配关系,但晶粒尺寸没有增大,晶体质量有明显提高,因为沟道产额已经很小,说明用MBE法制备的 β -FeSi₂的RBS谱有明显的沟道效应。测试还表明,载流子的霍尔迁移率也有明显提高。

共蒸发法是由MBE法发展起来的另一种制备 β -FeSi₂的方法。这种方法可以与MBE归入一类。它是在超高真空中把铁和硅按一定比例用电子束同时蒸发到基片上,基片温度为50—800℃,Si的蒸发速率为0.2—0.4nm/s,Fe的蒸发速率为0.07—0.12nm/s。Powlla和Herz^[24]指出,生成产物取决于基片的温度,当温度小于250℃时生成一种非晶态的金属物质,当温度高于250℃时开始生成 β -FeSi₂。这期间电阻率不断升高,当基片温度为325℃时,电阻率达到最大值,当基片温度为610℃时,从XRD图可以看出产物为单晶态的 β -FeSi₂。生成的中间产物退火后生成较高质量的 β -FeSi₂。

5.4 离子束合成

由于采用埋层 β -FeSi₂制备异质结发光二极管可能具有较高的发光效率,欧洲的许多实验室致力于采用高能离子注入制备埋层硅化物。离子束合成法是制备埋层 β -FeSi₂普遍使

用的方法。通过在硅基片中注入能量为 400keV—2MeV (典型的为 400keV 至 2MeV), 剂量为 10^{17} — 10^{19} cm⁻² 的 Fe⁺, 然后在一定温度下退火, 形成 β -FeSi₂ 埋层^[25]。由于离子注入过程中的加热效应, 可直接合成 α 相或 γ 相的 FeSi₂, 经过退火后可形成高质量的 β -FeSi₂。

6 目前应注意解决的几个主要问题

由于光电新材料 β -FeSi₂ 在发展新型硅基近红外光源和探测器件, 并进而利用成熟硅工艺实现光电器件与 VLSI 及 ULSI 的集成方面具有潜在的应用前景, 不失时机地开展 β -FeSi₂ 新材料的研究应当给予十分重视。根据现有文献报道, 目前主要存在的问题有以下几个方面:

(1) 稳定单晶薄膜的制备: 由于 β -FeSi₂ 与衬底硅外延关系存在着多种可能性, 在何种条件下, 哪一种外延关系占主导地位是值得注意的问题。在几种外延关系并存的情况下, 要得到具有较高质量的单晶薄膜是不可能的, 这是选择何种生长方法, 衬底温度以及退火温度所必须考虑的。此外, 要真正达到制备器件的要求, 所得到的薄膜还必须具有一定的厚度(如 0.1—1 μ m), 这是现有的制备方法的研究所应考虑的。

(2) β -FeSi₂ 的电学性能的改善: 现有的文献报道所给出的 β -FeSi₂ 的迁移率都较低, 这也是将来研究器件时所必须解决的问题。较低的迁移率可能来自缺陷及杂质的散射。

(3) β -FeSi₂ 的能带结构: 对 β -FeSi₂ 是否属于直接带隙, 现有的说法不一, 还需更多的理论和实验工作去研究。

(4) 电学光学性质: 目前的工作还都是初步的, 特别是由于样品质量问题没有解决, 许多工作还有待于深入。

(5) 电致发光: 这是 β -FeSi₂ 能否真正地得到应用的关键, 然而到现在为止, 还没有这方面的报道。

(6) 掺杂特性: 尽管已经发现了一些施主

杂质和受主杂质, 但对掺杂所形成的三元硅化物的能带结构及电学、光学性质的研究, 还有许多工作要做。

参 考 文 献

- [1] M.C. Bost and J.E. Mahan, *J. Appl. Phys.*, **58** (1985), 2696; **63**(1988), 839.
- [2] P.Y. Dusauoy and J. Protas, *Acta Cryst.*, **B27** (1971), 1209.
- [3] H. Von Kanel et al., *Appl. Surf. Sci.*, **10/71** (1993), 559.
- [4] U. Birkholz and J. Schelm, *Phys. Stat. Solidi*, **27**(1968), 413; **34**(1969), K177.
- [5] N. Cherief et al., *Appl. Surf. Sci.*, **41/42** (1989), 241.
- [6] K. Konuma et al. *J. Appl. Phys.*, **73**(1993), 1104.
- [7] C.A. Dimitriadis et al., *J. Appl. Phys.*, **68**(1990), 1726.
- [8] N.E. Christensen, *Phys. Rev. B*, **42**(1990), 7148.
- [9] C. Giannini et al., *Phys. Rev. B*, **45**(1991), 8822.
- [10] J. Avarez et al., *Phys. Rev. B*, **45**(1992), 14042.
- [11] S. Kondo et al., *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res.*, **B76**(1993), 383.
- [12] W. Henrion et al., *Appl. Surf. Sci.*, **70/71** (1993), 569.
- [13] A. Borghesi et al., in Proceedings of the 20th International Conference on the Physics of Semiconductors, edited by E. M. Anastassakis and J.D. Joannopoulos, World Scientific, Singapore, (1990), 2001.
- [14] J. Birkholz et al., *Phys. Status Solidi*, **30**(1968), K81.
- [15] K. Lefki and P. Muret, *J. Appl. Phys.*, **74**(1993), 1130; *Appl. Surf. Sci.*, **65/66**(1993), 772.
- [16] T. D. Hunt et al., E-MRS'93, Symposium G; published, (1993).
- [17] F. Y. Shian, H. C. Cheng and L. J. Chen. *J. Appl. Phys.*, **59**(1986), 2784.
- [18] X. Wallart et al., *Appl. Surf. Sci.*, **56—58**(1992), 427.
- [19] Charalabos A. Dimitriadis and Jurgen H. Werner, *J. Appl. Phys.*, **68**(1990), 93.
- [20] Ch. Stulmann, J. Schmidt and H. Ibach, *J. Appl. Phys.*, **72**(1992), 5905.
- [21] J. Avarez et al., *Appl. Phys. Lett.*, **59**(1991), 99.
- [22] N. Onda et al., *Appl. Surf. Sci.*, **56—58**(1992), 421; N. Onda et al., *Helv. Phys. Acta*, **64**(1991), 197.
- [23] H. von Kanel et al., Proceedings of MRS'93, Symposium D, Boston, (1993).
- [24] M. Powilla and K. Herz, *Appl. Surf. Sci.*, **70—71**(1993), 593.
- [25] K. Radermacher et al., *Appl. Phys. Lett.*, **59** (1991), 2145.