マテリアル先端リサーチインフラ利用報告書
ARIM User's Report

【Release：2025.07.24】　【Update：2025.07.23】

課題データ / Project Data

課題番号 Project Issue Number	22MS1036
利用課題名 Title	多段階電子遷移による高効率光電変換実現に向けたAlNバンドギャップ中電子状態の解明
利用した実施機関 Support Institute	自然科学研究機構 分子科学研究所 / IMS
機関外・機関内の利用 External or Internal Use	外部利用/External Use
ARIM半導体基盤PF関連課題 Related to ARIM-SETI	指定なし / No Designation
横断技術領域 Cross-Technology Area	物質・材料合成プロセス/Molecule & Material Synthesis 計測・分析/Advanced Characterization
重要技術領域 Important Technology Area	高度なデバイス機能の発現を可能とするマテリアル/Materials allowing high-level device functions to be performed 革新的なエネルギー変換を可能とするマテリアル/Materials enabling innovative energy conversion
キーワード Keywords	ワイドバンドギャップ半導体, 遷移金属, 多段階電子遷移, 蛍光,ワイドギャップ半導体/ Wide gap semiconductor

利用者と利用形態 / User and Support Type

利用者名（課題申請者） User Name (Project Applicant)	今田 早紀
所属名 Affiliation	京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科電子システム工学専攻
共同利用者氏名 Names of Collaborators Excluding Supporters in the Hub and Spoke Institutes	
ARIM実施機関支援担当者 Names of Supporters in the Hub and Spoke Institutes	売市 幹大
利用形態 Support Type	機器利用/Equipment Utilization

利用した主な設備 / Equipment Used in This Project

利用した主な設備 Equipment ID & Name	MS-225：顕微ラマン分光

報告書データ / Report

概要（目的・用途・実施内容） **Abstract (Aim, Use Applications and Contents)**	ウルツ鉱型窒化アルミニウム（AlN）は、深紫外線領域（200 nm、6.2 eV）にバンドギャップエネルギーを持つ。このAlNのAlサイトを、V、Crなどの3d遷移金属（TM）が占有したとき（$Al_{1-x}TM_xN$）、TMの3d軌道が主成分の電子状態がバンドギャップ中に形成される。TM濃度が低い場合には蛍光や燐光などの発光、TM濃度が高い場合には多段階電子遷移による超広帯域（紫外-可視-近赤外光域、UV-vis-NIR）高効率光電変換が起こる可能性がある。本研究は、この$Al_{1-x}TM_xN$のギャップ中電子構造の詳細（多重項構造）と、その光励起（過渡）構造、さらにはこれら多重項間のバイブロニック相互作用や、電荷移動遷移と格子振動の関係のTM依存性を、UV-vis-NIR光照射下の硬X線吸収分光、軟X線吸収/発光分光とラマン散乱分光、フォトルミネッセンス分光と組み合わせて解明しようというものである。 本申請期間中には、特に室温で0.8eV近傍にフォトルミネッセンス（PL）ピークを示す低濃度$Al_{1-x}V_xN$（x:0.021-0.046、図1(a)）薄膜について、後方ラマン散乱励起波長・偏光特性評価を行った。
実験 **Experimental**	使用装置：顕微ラマン分光装置 RENISHAW社製 inVia Reflex 励起波長：488 nm (2.54 eV), 532 nm (2.33 eV), 633 nm (1.96 eV),785 nm (1.58 eV) 測定範囲、温度：100-3200 cm-1 (12-396 meV)、室温
結果と考察 **Results and Discussion**	図1(b)に、-z(xy)zのラマン散乱スペクトルを示す。試料はc軸配向性ウルツ鉱型薄膜である。非添加AlNの場合、-z(xy)z配置ではA_1(LO)フォノン（110meV）は禁制である。しかし、AlVNでは2.33eVを中心に、A_1(LO)フォノンエネルギーに相当する位置にいわゆるBreathing modeが観測された。これは、NからVへの電荷移動遷移が起こっていることを示唆するものである。この結果は、光吸収スペクトル構造解析、共鳴X線非弾性散乱スペクトル解析の結果と矛盾しない。 一方、1.58 eV励起では、BMは観測されず、同配置で許容のE_2(high)およびE_2(low)とこれらの不純物モードが観測された。ここには示していないが、-z(xx)z配置スペクトルも含めた不純物モードの振る舞いと、硬X線吸収分光、共鳴X線非弾性散乱スペクトル解析の結果は、PLスペクトルの0.8 eVピークがサイトシンメトリーT_dあるいはC_{3v}のV^{3+}（$3d^2$）の最低励起一重項1Eから基底状態の3重項$^3A_2$への遷移であることを示唆するものであった。以上のことから、AlVNは、わずかな歪みで発光特性（蛍光/燐光）制御と発光波長制御が可能であることが示された。

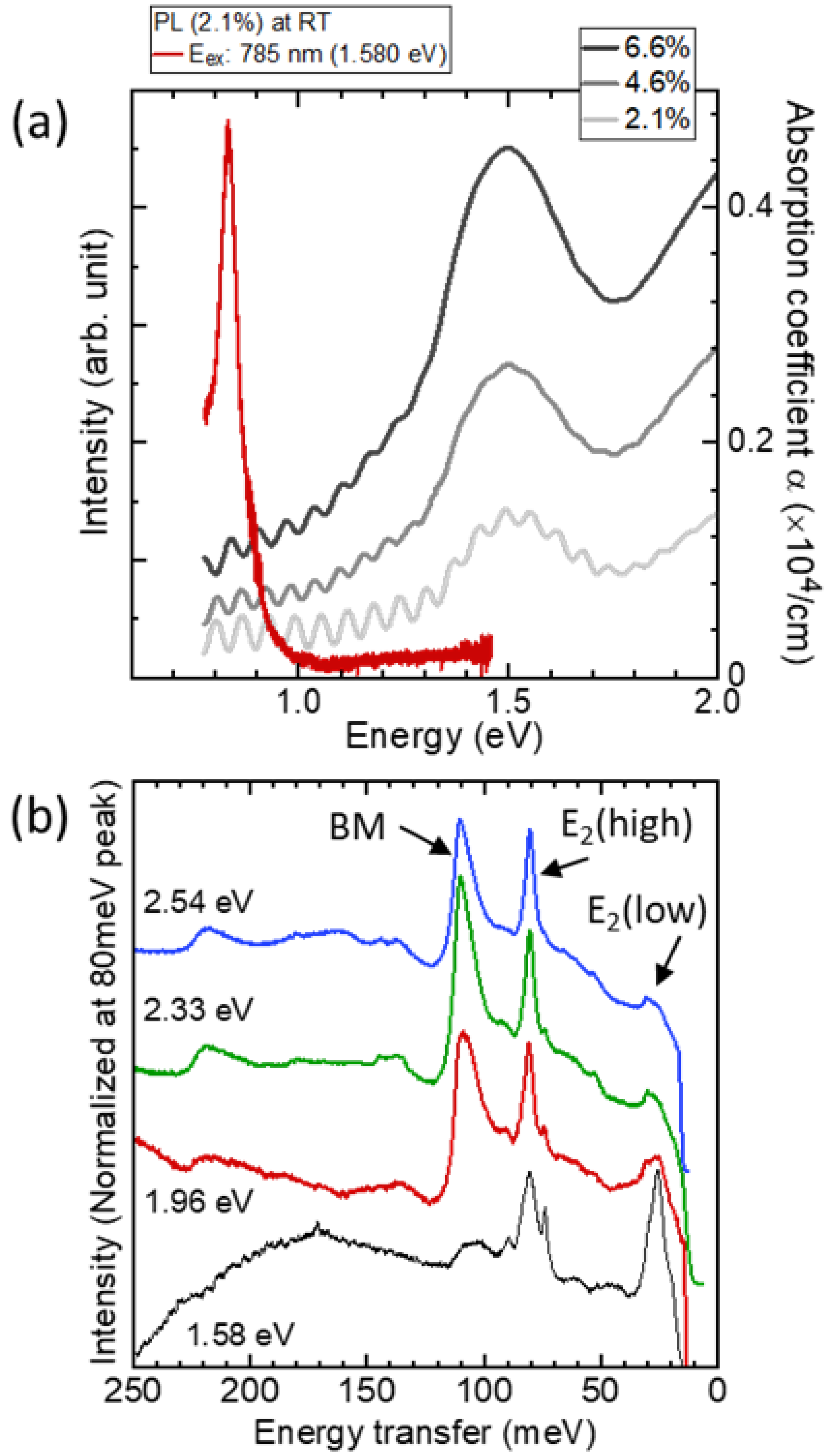
<table>
<tr><td>図・表・数式 1
Figures, Tables and Equations 1</td><td>

Fig.1 (a) Optical absorption and PL (excitation energy: 1.58 eV) spectra of AlVN films. (b) Vis-NIR resonant Raman spectra of AlVN (-z(xy)z.). Peaks at 110 meV are breathing modes (BM) due to CT transition.</td></tr>
<tr><td>その他・特記事項（参考文献・謝辞等）
Remarks(References and Acknowledgements)</td><td></td></tr>
</table>

成果発表・成果利用 / Publication and Patents

DOI（論文・プロシーディング） DOI (Publication and Proceedings)	
口頭発表、ポスター発表および、その他の論文 Oral Presentations etc.	
特許出願件数 Number of Patent Applications	0件
特許登録件数 Number of Registered Patents	0件