

第一原理多電子項計算による V 添加 AlN 光学スペクトル解析

Analysis of the Optical Spectra of V-doped AlN based on First-principles Calculations of Multiplet Structures

京都工繊大¹, 関西学院大理工², 大阪産技研³ ◯園田 早紀¹, 小笠原 一禎², 櫻井 芳昭³Kyoto Institute of Technology¹, Kwansai Gakuin Univ.², Osaka TRI³◯Saki Sonoda¹, Kazuyoshi Ogasawara², Yoshiaki Sakurai³

E-mail: sonoda@kit.ac.jp

「マルチバンド物質」は、A. Luque らによって理論的に提案された高効率光電変換物質で、図 1(A)に示すように禁制帯中に電子に部分的に占有されたバンド(中間バンド、IB)を持つものである¹。このようなバンド構造では、母体の価電子帯(VB)と伝導帯(CB)の間のバンド間遷移(E_g)に加え、VB-IB間(E_{VI})、IB-CB間(E_{IC})の電子遷移が可能となり、結果として E_g より小さなエネルギーの光で電子正孔対生成が可能となると予測されている。

3d 遷移金属(3dTM)を添加したIII族窒化物は、理論的にマルチバンド構造を持つと予測されているが、そのバンド構造は図 1(A)に示されるような単純なものではなく、一電子近似であっても図 1(B)に示すような配位子場分裂、実際には図 1(C)に示すような多電子項分裂を

考慮しなければならない²。

我々は、これまで顕わに取り扱われることがほとんどなかったIII族窒化物中の 3d TM イオンの多重項エネルギー理論解析を、DVME 法³により行い、光学スペクトル構造の起源の解明と、高効率光電変換実現に向けた物質設計を行っている。本講演では、V 添加 AlN について、光吸収・共鳴ラマン散乱スペクトルの理論解析結果を報告する。

参考文献

1. A. Luque, *et al.*, Phys. Rev. Lett., **78**, 5014 (1997).
2. 上村、他、配位子場理論とその応用、裳華房、1969.
3. K. Ogasawara *et al.*, Phys. Rev. B, **61**, 143 (2000).

謝辞

本研究の一部は、NPF の支援を受けて、(独)産業技術総合研究所ナノプロセッシング施設および分子科学研究所において実施されました。ここに謝意を表します。

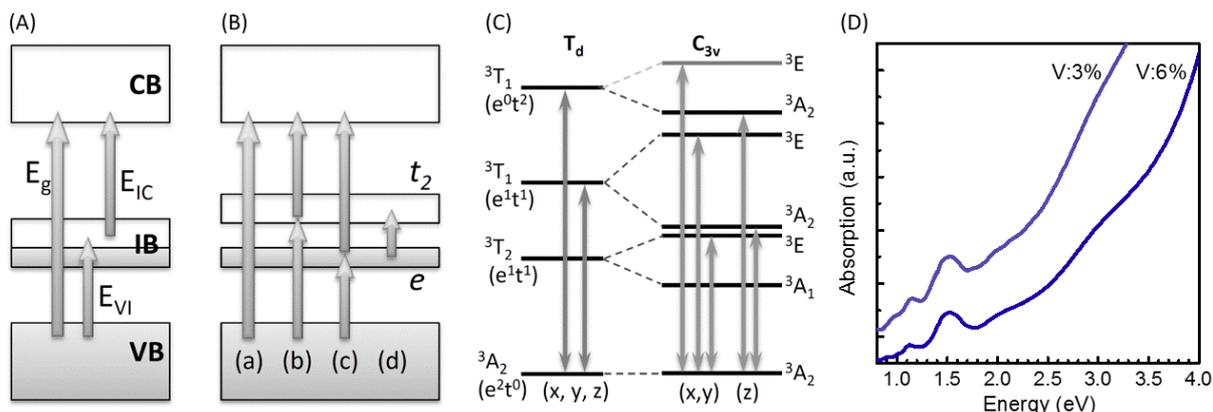


図 1. (A) A. Luque らによって提案された広帯域光電変換マルチバンド物質のバンド構造概念図。灰色部は電子占有状態、白色部は電子非占有状態、矢印は電子遷移を表す。(B) 3d TM 添加によりマルチバンド化した場合のバンド構造概念図。1 電子近似のもとでの 3d 電子状態の配位子場分裂を考慮した場合。添加元素は V^{3+} ($3d^2$) を想定。(a) VB-CB 間遷移。(b) VB から IB の非占有状態を介した CB への遷移。(c) IB の e バンドから CB への遷移に続いて VB から e バンドへ遷移が起こる場合。(d) いわゆる $d-d$ 遷移。(b)、(c)の遷移は、3d 多重項分裂の励起状態を考慮する必要がある。(C) 窒素に 4 配位された V^{3+} の多重項分裂。Td と C_{3v} のターム相関を用いて作成。矢印は電気双極子許容遷移、(x,y,z) は偏光方向を示す。第一原理多電子系電子状態計算プログラムを用いると、この分裂形式、分裂エネルギーと電子遷移強度をシミュレートできる。(D) V 添加 AlN 薄膜(V 濃度:3%、6%)の室温光吸収スペクトル。1.2eV、1.5eV 付近にピーク構造、2.0eV 以上に複数のシヨルダ構造が現れる。