

27aB05 擬AlN様Li<sub>3</sub>AlN<sub>2</sub>の合成と物性評価  
(窒化物(3), 第34回結晶成長国内会議)

栗山, 一男 / KUSHIDA, Kazumasa / KURIYAMA, Kazuo /  
KANEKO, Yoshitaro / 串田, 一雅 / 金子, 理太郎

---

(出版者 / Publisher)

日本結晶成長学会

(雑誌名 / Journal or Publication Title)

日本結晶成長学会誌 / 日本結晶成長学会誌

(号 / Number)

3

(開始ページ / Start Page)

265

(終了ページ / End Page)

265

(発行年 / Year)

2004-08-25

## 27aB05

擬 AlN 様  $\text{Li}_3\text{AlN}_2$  の合成と物性評価Synthesis and characterization of AlN-like  $\text{Li}_3\text{AlN}_2$ 

○金子理太郎 栗山一男 \*申田一雅

法政大学 \*大阪教育大学

○Yoshitaro Kaneko Kazuo Kuriyama \*Kazumasa Kushida

Hosei University \*Osaka Kyoiku University

$\text{Li}_3\text{AlN}_2$ , [hypothetical zincblende  $(\text{Li}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{N}) + \text{He-like Li}^+$  interstitials] is synthesized by direct reaction between  $\text{Li}_3\text{N}$  and Al at 1023 K for 5 hours, while with the reaction above 1273 K, wurtzite-AlN tended to be obtained. As-grown white polycrystalline bulk is a single phase of  $\text{Li}_3\text{AlN}_2$  (space group:  $Ia\bar{3}$ ) with the band gap of  $\sim 4.4$  eV and the lattice parameter 9.427 Å.

$\text{LiMgN}$  [閃亜鉛鉱型 AlN 様  $(\text{MgN}) + \text{Li}^+$ ] 等の立方晶を有する窒化物半導体はウルツ鉱型 III-V 族窒化物半導体 (AlN, GaN) の代替材料として考えられる [1, 2]。  $\text{Li}_3\text{AlN}_2$  は、閃亜鉛鉱型 AlN 中の 50% の Al を Li で置換した AlN と価電子的に等価な擬閃亜鉛鉱型格子  $(\text{Li}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{N})$  の格子間に He 様原子 Li が挿入された構造を有し、  $\text{LiMgN}$  と同様に立方晶ワイドギャップ半導体であることが予測される。本研究では、  $\text{Li}_3\text{AlN}_2$  を合成し光学物性評価を行った。出発材料として  $\text{Li}_3\text{N}$  (純度 99.5%) 及び Al (99.999%) を分子量子比  $\text{Li}_3\text{N} : \text{Al} = 1 : 1$  で混合し Ta りつばに導入後、700 Torr の窒素雰囲気中で 750°C、5 時間の熱処理を行った。生成物は白色粉末を呈しており、X線回折法により  $\text{Li}_3\text{AlN}_2$  (空間群  $Ia\bar{3}$ ) [3] の単一相で、格子定数は  $a = 9.427$  Å であった。また、ラマン分光測定により 12 本のラマン散乱ピークが観測された。ファクターグループ解析結果より、  $\text{Li}_3\text{AlN}_2$  は空間群  $Ia\bar{3}$  に起因する 8 本のラマン活性モード ( $A_g + 2E_g + 2E_g + 3F_g$ ) を有するため、残り 4 本は Al-N ボンド長の縮小による対称性の低下 [3] に起因するものと思われる。光吸収及び光音響分光測定において 281 nm (4.4 eV) 付近に吸収端が観測された。この結果は、  $\text{Li}_3\text{AlN}_2$  が立方晶ワイドギャップ半導体 ( $E_g = \sim 4.4$  eV) であることを示唆している [4]。

熱処理温度が 1050°C の場合、熱処理過程において原材料から Li と  $\text{N}_2$  の蒸発のためウルツ鉱型 AlN が合成される傾向を示した。生成物は灰色粉末を呈しており、X線回折法により AlN (空間群  $P6_3mc$ ) の単一相で、格子定数は  $a = 3.135$  Å,  $c = 4.979$  Å であった。ラマン分光法により、AlN の空間群  $P6_3mc$  に起因する 4 本のラマン活性モード ( $1A_1(TO) + 1E_1(TO) + 2E_2$ ) が観測された。

参考文献: [1] K. Kuriyama, K. Nagasawa, and K. Kushida, *J. Cryst. Growth* 237-239, 2019 (2002).

[2] K. Kuriyama and T. Katoh, *Phys. Rev. B* 37, 7140 (1988).

[3] R. Juza, and F. Hund, *Zeitschrift für Anorganische Chemie*. 257, 13 (1948).

[4] K. Kushida, Y. Kaneko, and K. Kuriyama, *Phys. Rev. B* (to be submitted).