

LSS 法を用いて探索されたフッ化物狭帯域蛍光体の粉末合成

Powder synthesis of narrow-band emitting fluoride phosphor using LSS method

物材機構¹, 大阪公立大²

○中西昭博¹, 小山幸典¹, 中西貴之¹, 高橋向星¹, 広崎尚登¹, 池野豪一², 武田隆史¹

NIMS¹, Osaka Metro. Univ.²

°Akihiro Nakanishi¹, Yukinori Koyama¹, Takayuki Nakanishi¹, Kohsei Takahashi¹, Naoto Hirosaki¹, Hidekazu Ikeno², Takashi Takeda¹

E-mail: NAKANISHI.Akihiro@nims.go.jp

【緒言】8K テレビの規格である BT.2020 を満たすために、狭帯域発光を示す蛍光体が求められている。狭帯域蛍光体の例として $\text{SrLiAl}_3\text{N}_4:\text{Eu}^{2+}$ [1]などが知られているが、 Eu^{2+} 周りの局所構造と半値全幅との関係は解明されていない。そのため狭帯域発光を示す蛍光体の母体材料探索には、大量の結晶構造データを用いた、データ駆動型の探索が効果的である。我々は局所構造の定量的な類似度 (LSS: local structure similarity[2]) を用いることで、無機結晶構造データベース ICSD から、既知狭帯域蛍光体の賦活剤周りの局所構造に類似したサイトを有する結晶構造を探索した。その結果、 $\text{SrLiAl}_3\text{N}_4:\text{Eu}^{2+}$ 蛍光体の Sr サイトに類似した局所構造を有する、 $\text{Na}_5\text{Al}_3\text{F}_{14}$ が選択された。 $\text{Na}_5\text{Al}_3\text{F}_{14}:\text{Eu}^{2+}$ を合成したところ、狭帯域発光が観測された。

【手法】ICSD 上の結晶構造をいくつかの条件でスクリーニングしたイオン性結晶を探索対象とした。アルカリ金属、アルカリ土類金属イオン中心の 8 配位局所構造を探索範囲とした。参照構造としていくつかの既知狭帯域蛍光体の局所構造も用意した。参照構造と類似している局所構造を探索するために、ICSD 上の結晶構造と、参照構造を加えたすべての組み合わせについて類似度を求め、t-distributed stochastic neighbor embedding (t-SNE) 法によって局所構造を 2 次元散布図に可視化した。散布図上のデータ点は結晶構造中のサイトの局所構造を示しており、類似度が高いデータ点はより近くに配置される。

【結果】8 配位局所構造の t-SNE 図を Fig. 1 に示す。狭帯域発光を示す $\text{SrLiAl}_3\text{N}_4:\text{Eu}^{2+}$ の Sr サイト付近に $\text{Na}_5\text{Al}_3\text{F}_{14}$ の Na サイトが存在することから、 $\text{Na}_5\text{Al}_3\text{F}_{14}:\text{Eu}^{2+}$ を合成した。粉末 XRD の結果より $\text{Na}_5\text{Al}_3\text{F}_{14}:\text{Eu}^{2+}$ の単一相合成に成功し、発光ピーク波長 393 nm、半値全幅 30 nm の狭帯域発光が観測された。

【謝辞】本研究は JST-CREST, JPMJCR19J2 の支援を受けたものである。

【参考文献】 [1] P. Pust et al., *Nature Mater.* **13** (2014) 891-896.

[2] S. Takemura et al., *Sci. Technol. Adv. Mater.* **22** (2021) 185-193.

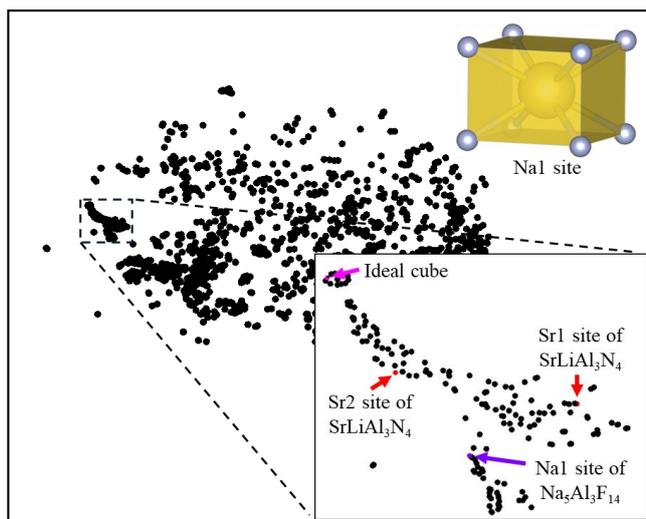


Fig. 1 2D t-SNE plot for 8-coordinated alkali-centered local structures.