令和 2 年度　　京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

ペロブスカイト関連構造を有する Eu^{2+}添加水素化物蛍光体の開発
Development of hydride perovskite phosphors doped with Eu^{2+}

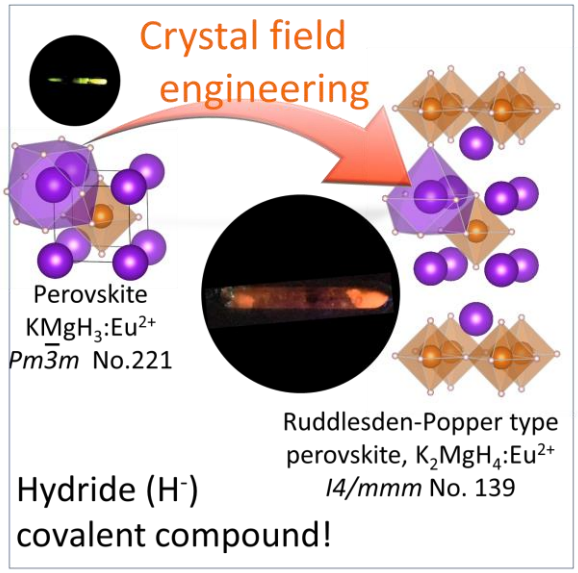
京都大学大学院 人間・環境学研究科　　上田 純平

研究成果概要

Eu^{2+}添加蛍光体は、白色 LED 用蛍光体として広く使用されており、市場の様々な要求により新規蛍光体開発や化学組成の調整による光学特性の制御など活発に研究されている。本蛍光体は、Eu^{2+}の 5d-4f 発光を利用しており、ホストの化学組成と Eu^{2+}の配位環境により電子雲膨張効果と結晶場分裂の度合いが変化し、5d エネルギー準位が上下するため、吸収・発光波長の制御が可能である。Eu^{2+}蛍光体のホスト材料として、酸化物、窒化物、硫化物やその複合イオン化合物において積極的に探索されてきたが、その他ホスト化合物における Eu^{2+}の光学特性の報告は少なく、特に純粋な水素化物となると報告例は 10 例程度である。一方で、水素化物イオンは非常に低い電気陰性度を有するため、共有結合性が高く、電子雲膨張効果による 5d エネルギーの大幅な低下が期待される。

本研究においては、水素化物中における Eu^{2+}の発光特性を理解するため、ペロブスカイト関連構造（ペロブスカイト構造、K_2NiF_4 構造）を有する水素化物をホスト材料として $KMgH_3$ と K_2MgH_4 を選択し、Eu^{2+}:5d-4f 光学特性評価を行った。また、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、それらペロブスカイト関連構造を有する水素化物のバンドギャップと DOS・PDOS を明らかにした。

得られた発光特性から Eu^{2+}発光の長波長シフトは水素化物イオンの配位によるセントロイドシフトの増大と示唆された。また、発光特性と計算されたバンド構造の結果より、新規 K_2MgH_4:Eu^{2+}赤色蛍光体における温度上昇による発光強度の低下は、励起電子が伝導帯へ移動する熱イオン化過程であると結論付けた。



発表論文（謝辞あり）

[1] J. Ueda, T. Wylezich, N. Kunkel, S. Tanabe, J. Mater. Chem. C, 8 (2020) 5124-5130.