



BiYbEu 共添加ダブルペロブスカイト型波長変換材料の開発

早川知克、岡亮平、松岳航世、Cassam Sulliman Elyas Mateo
名古屋工業大学 工学専攻 生命応用化学系プログラム

キーワード : ダブルペロブスカイト構造、波長変換、固相反応、エネルギー移動

1. 背景と研究目的

希土類イオンを添加した酸化物ペロブスカイトは高効率白色 LED 応用や太陽電池用波長変換材料としての応用が期待されている。Yb³⁺イオン添加では ²F_{5/2}→²F_{7/2} 遷移に由来する近赤外発光を示し、太陽光発電の低い発電効率を向上させる波長変換材料として有望である[1]。また、赤色発光を示す Eu³⁺イオンを添加すると、⁵D₀-⁷F_J 遷移により橙色から赤色の可視発光を得ることができ、白色 LED 照明の R 成分を提供する材料である [2]。しかしながら、発光源の効率を決める希土類イオンのサイト分布や局所構造については情報は限定的である。そこで本研究では、Eu³⁺イオン添加 Ba₂GdNbO₆ ダブルペロブスカイト結晶について、放射光 XRD 測定を行い、結晶構造解析を行ったので報告する。

2. 実験内容

試料は固相反応法により合成した Ba₂Gd_(0.75-x)Bi_{0.2}NbO₆:xEu 粉末試料 (Eu 濃度 : x=0.01~0.25) で、BL5S2 ビームラインにて放射光エネルギー15.5 keV (波長 0.80 Å)、回折角 2θ=0.13~94.7°で X 線回折データを取得した。Ba₂GdNbO₆ 結晶情報に文献[3]を参照し、RIETAN-FP [4]にて SR-XRD パターンのシミュレーション及びリートベルト解析を行った。

3. 結果および考察

Ba₂(Gd,Bi)NbO₆:Eu 粉末試料の放射光 XRD パターンを Fig.1 に示す。推定構造のいくつかで XRD シミュレーション結果と比較したところ、すべての試料で XRD パターンは正方晶 I4/m 系 Ba₂GdNbO₆ と合致することが分かった。今回、Gd³⁺を Eu³⁺で置換することを試みた。0.01Eu 添加試料の XRD データをリートベルト解析した結果を Fig.2 に示す。良好なフィッティングが得られ、無添加に比べて a, b 方向の格子定数は増加、c 方向の格子定数は減少することが分かった (a=b= 6.00795 Å, c=8.47556 Å)。また、このことは Bi³⁺イオンが添加されていない B09 試料を除く他の異なる Eu 濃度試料で同じであり、Gd³⁺と Eu³⁺のイオン半径はほぼ等しいことから Eu³⁺イオンは Gd³⁺イオンと同じ B サイトを占有したと結論付けた。

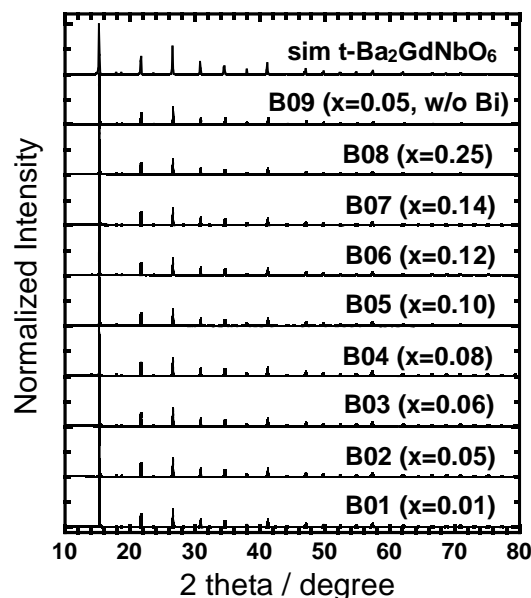


Fig.1 SR-XRD patterns (15.5 keV; $\lambda=0.80$ Å) of Ba₂Gd_{1-x}Eu_xBi_{0.2}NbO₆ powder samples (x=0.01~0.25) and simulated SR-XRD pattern using the structural parameters (tetragonal I4/m) in literature [2].

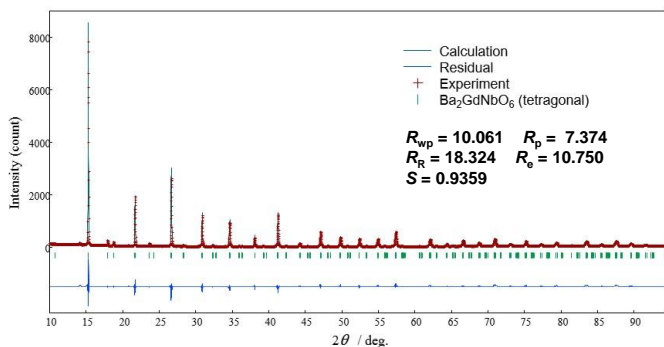


Fig.2 Result of Rietveld refinement for SR-XRD data of B05 (x=0.10).

4. 参考文献

- [1] S.M.Ferro, et al., *Mater.Horiz.* **8** (2021) 1072-1083. [2] S.W. Wi, et al., *J.Alloys Compds.* **976** (2024) 173102, [3] W.T.Fu, D.J.W.IJdo, *J.Solid State Chem.* **179** (2006) 1022-1028. [4] F.Izumi, K.Momma, *Solid State Phenom.* **130** (2007) 15-20.