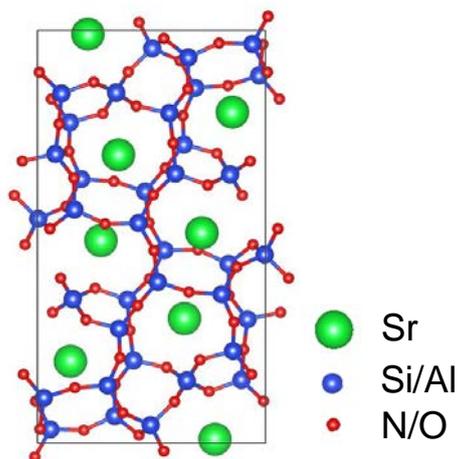


黄色発光蛍光体  $\text{Sr}_2\text{Si}_7\text{Al}_3\text{ON}_{13}:\text{Ce}$  の結晶構造と電子状態Crystal and electronic structure of  $\text{Sr}_2\text{Si}_7\text{Al}_3\text{ON}_{13}:\text{Ce}$ 東芝研開セ<sup>1</sup>, ロスアラモス国立研究所<sup>2</sup> °石田 邦夫<sup>1</sup>, Graham King<sup>2</sup>,Katharine Page<sup>2</sup>, 福田 由美<sup>1</sup>, 加藤 雅礼<sup>1</sup>, 福島 伸<sup>1</sup>Corporate Research and Development Center, Toshiba Corporation<sup>1</sup>Los Alamos National Laboratory<sup>2</sup>, °Kunio Ishida<sup>1</sup>, Graham King<sup>2</sup>,Katharine Page<sup>2</sup>, Yumi Fukuda<sup>1</sup>, Masahiro Kato<sup>1</sup>, and Noburu Fukushima<sup>1</sup>

E-mail: ishida@arl.rdc.toshiba.co.jp

酸窒化物蛍光体  $\text{Sr}_2\text{Si}_{8-x}\text{Al}_{2+x}\text{O}_x\text{N}_{14-x}:\text{Ce}$  は、白色 LED 用材料として近年注目されている[1,2]。その基礎物性を知る上で、結晶構造は最も基本的かつ重要な要素の一つであるが、Al/Si あるいは N/O の占有サイトの区別が X 線回折による構造解析では困難なため、十分な情報が得られていなかった。そこで今回、中性子線回折による構造解析により、本物質の詳細な結晶構造を求めることを試みた。

本物質には 10 個の Sr/Al サイトおよび 14 個の N/O サイトがあるが、中性子線回折構造解析によって Al および O の占有サイト候補がそれぞれ 4 通り、2 通りに絞られた。しかし、完全なサイト秩序が存在するわけではなく、部分的な占有状態が実現していることがわかってきた。そこで、さらに詳細に占有サイトについての議論を行なうため、 $x=1$  の場合について第一原理電子状態計算を用いて各構造の全エネルギーを比較した。計算には平面波基底密度汎関数法プログラム PHASE を用いた。



$\text{Sr}_2\text{Si}_{8-x}\text{Al}_{2+x}\text{O}_x\text{N}_{14-x}$  の結晶構造を c 軸方向から見た図。VESTA[3]を用いて描いた。

各占有候補サイトのいずれかを Al あるいは O が占めていると仮定した全ての構造について構造最適化を行なった結果、最低エネルギーを取る構造が一通りに定まることがわかった。特に、c 軸方向に延びる辺共有四面体から成る 1 次元鎖中の Si/Al サイトには、(1)全て Si が占有、(2)全て Al が占有、(3)Si,Al が交互に占有、といったサイト秩序が考えられ、これらの構造間に存在するわずかなエネルギー差が、本物質の構造的特徴を決める要因となっていることがわかった。

[1]J. Ruan, *et al.*, J. Solid State Chem. **208**, 50 (2013).

[2]福田他, 特開 2013-104041, 2011-11-16.

[3]K. Momma and F. Izumi, J. Appl. Crystallogr. **44**, 1272 (2011).