

## Ce<sup>3+</sup>/Eu<sup>2+</sup>付活蛍光体の第一原理計算：発光特性の定量予測

### First-principles calculation of Ce<sup>3+</sup>/Eu<sup>2+</sup>-doped phosphors: optical properties prediction

ルーヴァン・カトリック大<sup>1</sup>、三菱ケミカル(株) 横浜研究所<sup>2</sup>、オックスフォード大<sup>3</sup>

Yongchao Jia<sup>1</sup>, 三上 昌義<sup>2</sup>, Samuel Poncé<sup>3</sup>, Anna Miglio<sup>1</sup>, Xavier Gonze<sup>1</sup>

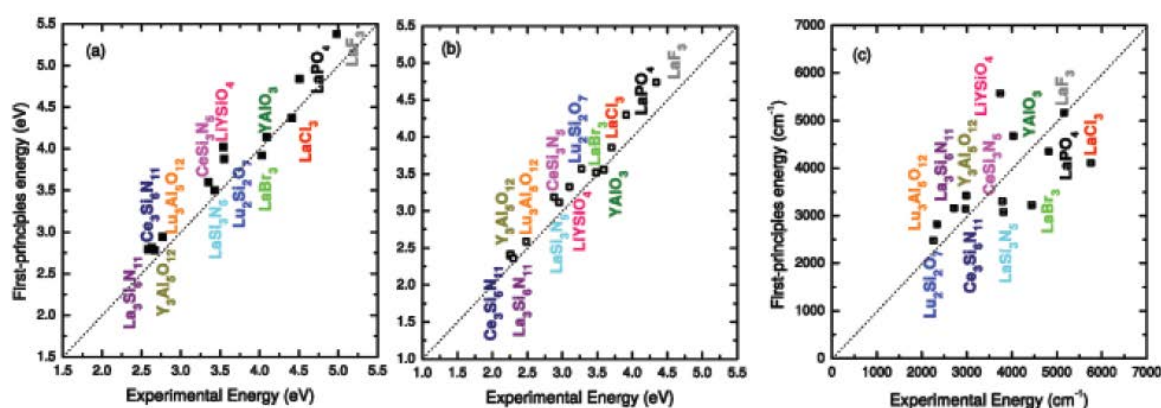
Université Catholique de Louvain<sup>1</sup>, 2. Mitsubishi Chemical Corp.<sup>2</sup>, Oxford Univ.<sup>3</sup>,

Yongchao Jia<sup>1</sup>, Masayoshi Mikami<sup>2</sup>, Samuel Poncé<sup>3</sup>, Anna Miglio<sup>1</sup>, Xavier Gonze<sup>1</sup>

E-mail: mikami.masayoshi.mv@m-chemical.co.jp

InGaN 青色発光ダイオード(LED)の登場により、近紫外光～青色の光励起下で可視光発光する蛍光体探索が精力的に行われ、実際に様々な新規蛍光体が発見されるに至っている。しかし、これらの発見は数多くの合成実験の末に見出されたものが多く、その同定作業には困難が伴うのが普通である。発光特性(励起・発光エネルギー)を母体のイオン結合性～共有結合性及び配位子環境から理解する試みはなされているものの[1]、発光特性を母体組成・結晶構造の情報のみから定量的に理解し設計するレベルに至っているとは言い難い。新規蛍光体の探索効率化～蛍光体設計のためには、母体情報から発光特性を定量的予測する非経験的計算手法の構築が望まれている。

そこで我々は Ce<sup>3+</sup>/Eu<sup>2+</sup>付活蛍光体の発光特性を第一原理バンド計算から定量的に予測する手法を開発してきたので、本発表で報告する。本手法では基底状態及び発光状態における Ce<sup>3+</sup>/Eu<sup>2+</sup>局所構造(準安定構造)を計算で求め、その構造における全エネルギー情報から配位座標モデルに当てはめることで励起・発光エネルギーを評価する[2-3]。下図に Ce<sup>3+</sup>付活の例を示すが[3]、Eu<sup>2+</sup>付活でも同様である。一般に蛍光体探索合成では試料は混相として得られることが多く、組成・結晶構造の推定も容易でないため発光相同定に時間・労力を要するが、このような母体構造から発光特性を定量予測する計算法を援用することで蛍光体探索～設計の効率化・加速化が期待される。



Ce 付活蛍光体の発光特性予測値—実験値比較：(左)励起、(中央)発光、(右)ストークス・シフト[3])

[1] M.Mikami, ECS J.Solid State Sci.Technol. 2 (2013) R3048、及びその中の引用文献.

[2] Y. Jia, A. Miglio, S. Poncé, X. Gonze, and M. Mikami, Phys. Rev. B 93 (2016) 155111.

[3] Y. Jia, S. Poncé, A. Miglio, M. Mikami, and X. Gonze, Adv. Opt. Mater. 5 (2017) 1600997.