広帯域近赤外発光を示す新規酸窒化物蛍光体（I）結晶構造

Broadband Near Infrared Emitting Novel Oxynitride Phosphor (I)Crystal Structure

物材機構 [1]，デンカ株式会社 [2]，°舟橋 司朗 [1]，武田 隆史 [1]，広崎 尚登 [1]，
坂野 広樹 [2]，豊島 広朗 [2]，江本 秀幸 [2]
NIMS [1], Denka Co., Ltd.[2] °Shiro Funahashi[1], Takashi Takeda[1], Naoto Hirosaki[1],
Hiroki Banno[2], Hiroaki Toyoshima[2], Hideyuki Emoto[2]
E-mail: FUNAHASHI.Shiro@nims.go.jp

【緒言】　蛍光体の発光特性は、主に発光中心元素の種類と近接する配位子に依存している。発光中心元素として用いられる元素種は限られていることから、新規発光特性を示す蛍光体の開発に向けて、新しい結晶構造の母体材料を求めて新物質探索が行われている 。

本発表では、単粒子診断法（Single-Particle-Diagnosis approach）[1]を用いた Ba-Si-O-N 系物質探索において見出した、近赤外にピークを有する広帯域な発光を示す新規酸窒化物蛍光体について、結晶構造を中心に報告する。

【実験】　原料粉末（SiN_4, Ba_3N_2, EuN）をグローブボックス内で混合し、1MPa の窒素ガス雰囲気 2000℃で焼成した粉末試料を探索に用いた。得られた粉末試料を UV-LED を照射しながら顕微鏡観察し、発光色・形態について異なる単粒子試料を全種類採取した後、単結晶X線回折法により決定した格子定数・ブラベー格子のデータベース照合と顕微分光測定を行い、新規性がみられた試料について SEM-DES 元素分析と結晶構造解析を行った。

【結果】　顕微分光測定により可視域から近赤外に亘る広帯域な発光スペクトルを示す新規性の見られる粒子を確認した。その粒子に SEM-EDS による元素分析と単結晶X構造解析を行った結果、格子定数 $a=b=c=16.5209(6)$ [Å]，立方晶系／空間群 P-43n に属し、組成式は $Ba_{26}Si_{51}O_2N_{84}$ と求められた。結晶構造中には $Si(O,N)_4$ 四面体により構成されるフレームワークにディスオーダー構造を有する。この物質は ICSD，ICDD や論文等に該当情報が無いことから新物質であると判明した。組成式に含まれる酸素は原料中に含まれていたものと考えられる。

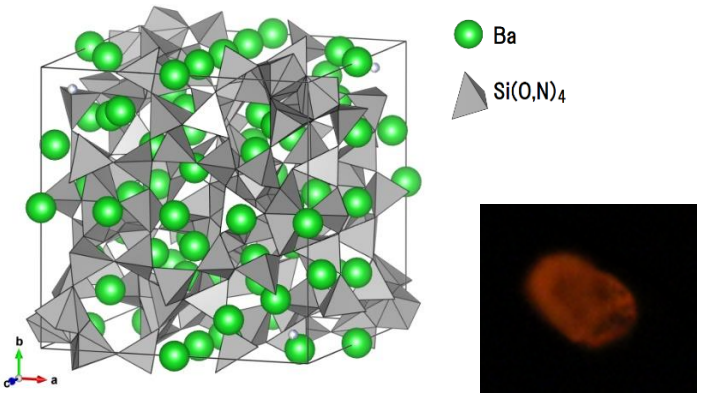

Fig.1 Crystal Structure and Photograph of $Ba_{26}Si_{51}O_2N_{84}$

[1] Naoto Hirosaki, et al., *Chemistry of Materials*, **26**(2014), 4280−4288.