

## Ca<sub>x</sub>La<sub>1-x</sub>B<sub>6</sub> の光学特性解析

### Optical property analysis of Ca<sub>x</sub>La<sub>1-x</sub>B<sub>6</sub>

住友金属鉱山株式会社 ○吉尾 里司, 足立 健治

Sumitomo Metal Mining Co., Ltd.

E-mail: satoshi.yoshio.w5@smm-g.com

ランタノイドメタルの RB<sub>6</sub> は一般的に、高導電性、高硬度、超伝導性などのユニークな物性を持っており、その中でも LaB<sub>6</sub> はナノ微粒子にすると近赤外光領域に強い吸収を生じるとともに可視光領域では大きな透明性が得られることが見出され、以来、LaB<sub>6</sub> ナノ微粒子は自動車や建物の窓用フィルムや合わせガラス、ポリカーボネートガラスへの応用が広がり、また光熱変換や癌治療などへの応用研究も増加している。

LaB<sub>6</sub> は透明導電材料である ITO や同じプラズモン材料である Cs<sub>0.33</sub>WO<sub>3</sub> と比較して、可視光領域での吸収に起因する緑色の着色が強く、可視光の透明性が劣るという課題がある。LaB<sub>6</sub> の可視光透明性を高めることができれば、遮熱透明体の色調の調整がより容易となり、また可視光透過率に対する近赤外光の吸収・遮蔽の割合が向上して、更なる省エネルギー化に貢献することが可能になる。

そこで本研究では、第一原理計算を用いて、LaB<sub>6</sub> の可視光透明性の向上について詳細に検討した。LaB<sub>6</sub> の透過性を向上させる置換材料として、CaB<sub>6</sub> を選択し、Ca<sub>x</sub>La<sub>1-x</sub>B<sub>6</sub> の最安定構造を網羅的に探索し、6 つの基底構造を見出した。それらの基底構造の光学特性を詳細に調べた結果、Ca 置換の影響は、その置換位置、置換割合によって大きく異なり、光学特性の変化は一様ではないことがわかり、Ca<sub>x</sub>La<sub>1-x</sub>B<sub>6</sub> の基底状態においては 0 < x < 1/4 の範囲では、可視光領域の透過性が向上することが明らかとなった。

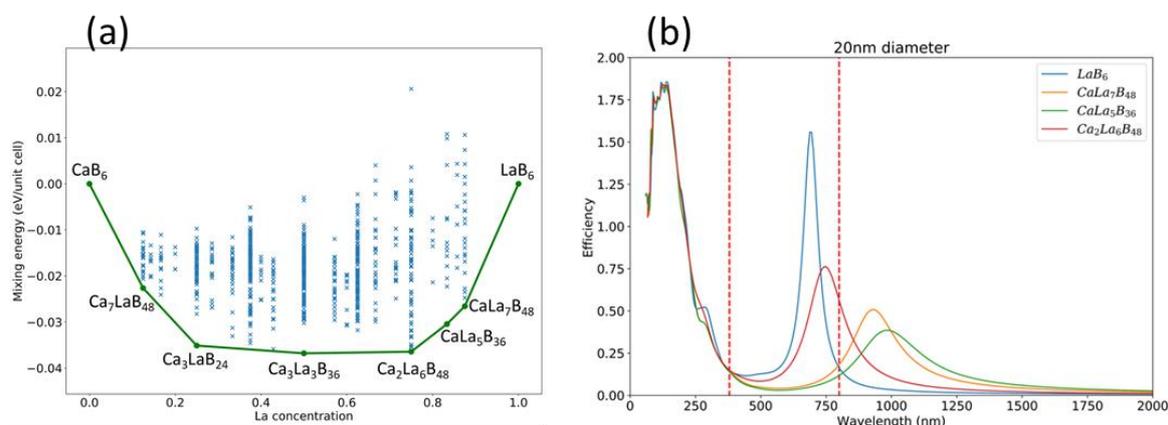


Figure 1. (a) Mixing energy of Ca<sub>x</sub>La<sub>1-x</sub>B<sub>6</sub> by exhaustive search showing eight compositions as the most stable ground state and (b) absorption efficiency of Ca<sub>x</sub>La<sub>1-x</sub>B<sub>6</sub> nanoparticles of diameter 20 nm calculated using Mie scattering theory