

局所構造の非類似度を用いたデータベースからの結晶構造の抽出

Extraction of crystal structure from database using the dissimilarity of local structures

物材機構¹, 大阪府大工²○竹村翔太¹, 武田隆史¹, 中西貴之¹, 小山幸典¹, 池野豪一², 広崎尚登¹NIMS¹, Osaka Prefecture Univ.²○Shota Takemura¹, Takashi Takeda¹, Takayuki Nakanishi¹, Yukinori Koyama¹, Hidekazu Ikeno², Naoto Hirosaki¹

E-mail: TAKEMURA.Shota@nims.go.jp

【緒言】機能性材料の物性は原子配列によって制御されており、結晶構造をはじめドーパントや欠陥周りの局所構造に基づく物性が極めて重要である。特に照明やディスプレイに用いられる蛍光体は母体結晶に賦活された金属イオン周りの局所構造がその発光特性の大部分を支配しており、求められる性能を発現させるためには、特定の局所構造を持つ母体結晶の選択が重要になってくる。近年、インフォマティクスを用いて新規蛍光体を探索する研究が盛んである。我々は効率的な新規蛍光体探索のために、Wasserstein 距離を用いた無機結晶中の局所構造における定量的な非類似度(W)を求める手法を開発し、その非類似度と既知蛍光体の発光半値幅との相関を考察することで、その有用性を実証している[1]。本研究では、基準局所構造と類似する局所構造を持つ結晶構造の抽出を目的として、無機結晶構造データベース ICSD に登録されている結晶から様々な局所構造を切り出し、基準局所構造との非類似度測定を行った。今回は実用蛍光体の母体結晶である Y₃Al₅O₁₂ (YAG)および CaAlSiN₃ (CASN)を基準物質とした。

【手法】ICSD に登録されている結晶構造データを、いくつかの条件でスクリーニングしたイオン性結晶約 4 万 5 千件の結晶構造を対象とした。それらの結晶構造から発光イオンの Eu, Ce の置換サイトとなる Ca, Sr, Ba, Y, La 中心の局所構造を抽出した。基準局所構造として、YAG の Y サイト(8 配位)、CASN の Ca サイト(5 配位)を用い、それらと抽出した局所構造との非類似度を求めた。

【結果】YAG の Y サイトに対する非類似度 W の分布を Figure 1 に示す。W が小さい 0.04 までの局所構造は YAG と同じガーネット構造のものがほとんどであり、基準局所構造と類似する局所構造を持つ結晶構造が抽出されている。Ca では稀な 5 配位構造を持つ CASN の場合でも、類似した構造を持つ結晶構造の抽出に成功した。したがって、この局所構造の非類似度を用いてデータベース検索を行うことで効率的な結晶構造の探索が可能である。

【謝辞】本研究は JST-CREST, JPMJCR19J2 の支援を受けたものである。

【参考文献】 [1] S. Takemura et al., Sci. Technol. Adv. Mater. 22 (2021) 186.

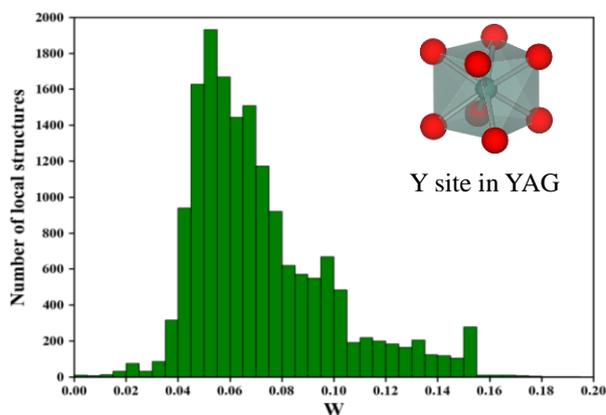


Fig. 1. Distributions of the W of the local structures to Y site in YAG.