

新規蛍光体探索のための局所構造の非類似度測定

Dissimilarity Measure of Local Structure to Search for Novel Phosphors

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¹

NIMS¹, 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】ディスプレイ色域増大のため、8KTV 用蛍光体として狭帯域発光を示す緑、赤色の Eu^{2+} 蛍光体が求められている。 Eu^{2+} 蛍光体の発光特性は賦活された Eu^{2+} 周りの局所構造の変化で制御することができ、半値幅も局所構造に依存することが経験的に知られている。半値幅が最も小さくなる理想的な局所構造は理論的に明らかになっていないため、最近ではインフォマティクスを用いた蛍光体探索が行われている。効率的な新規蛍光体探索の方法の一つは、既知の蛍光体を持つ局所構造と似ている局所構造を持つ結晶構造を探すことである。似ている局所構造を抽出するためには、2つの局所構造の間の定量的な類似度を求める手法が必要である。そこで本研究では、局所構造を中心イオンと配位子からなる幾何学構造として定義し、中心イオン-配位子間距離と配位子-配位子間距離からなる原子間距離の分布として表すことで、分布間の距離であるワッサーズタイン距離(W)による非類似度測定を行った。この方法は、任意の形状の局所構造に適用でき、 W の値が小さければ2つの局所構造は類似、大きい場合は非類似となる。

【手法】ワッサーズタイン距離 W による非類似度測定が新規蛍光体の探索に有用であることを実証するために、①立方体などの特徴的な理想構造同士、②理想構造と既知蛍光体中の実構造、③既知蛍光体中の実構造同士の3つの場合について、さまざまな局所構造間の W を計算した。蛍光体中の実構造については、アルカリ金属、アルカリ土類金属、希土類イオンが中心のものを抜き出した

【結果】8配位の Cubic 構造と Cubic からのねじれ角 θ を持つ Square antiprism 構造において、 θ を変化させたときの W を Figure 1 に示す。 W は θ の変化に対し単調に変化しており、 W の変化が局所構造の構造変化に対応している。②、③の場合においても得られた非類似度は正確に局所構造の類似性を表現しており、ワッサーズタイン距離を用いた非類似度測定は新規蛍光体探索に有用である。

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

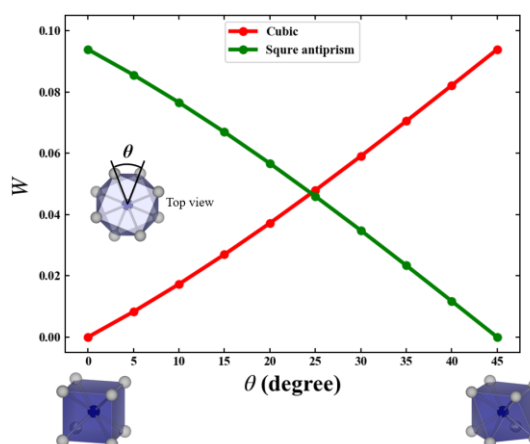


Fig. 1. Variations of the W which correspond to the structural variation of the helix angle θ from a cubic to a square antiprism.