

放射光を利用した蛍光体の精密結晶構造解析

山田 浩志

産業技術総合研究所 生産計測技術研究センター

蛍光体は光の波長を変換する機能性セラミックス材料として、その時々 of 技術要請に応じて最適化された材料の開発が行われてきた。例えば蛍光灯では、励起された水銀原子から発する波長 254nm の紫外線をよく吸収し、効率よく白色光を実現する蛍光体が開発された。一方、プラズマディスプレイパネルでは微小のガラスセルに封入されたキセノンガスから発せられる波長 147nm および 172nm の共鳴線により効率よく発光し、青・緑・赤の色再現性の優れた蛍光体が開発されている。このような蛍光材料の開発や改良は悪く言えば経験や勘、網羅的な探索によるものが少なからずウェイトを占めており、材料科学屋にとっては工学的手法を用いて使用目的に最適化された材料を効率的に開発することが一つの目標となっている。

材料科学分野では、材料の結晶構造からその機能発現の原因を追究するアプローチがよく取られる。放射光を用いた粉末 X 線結晶構造解析はわずかな粉末試料からその結晶構造を精密に決定できる強力なツールとして以前から認識されていたが、ここ数年の国内放射光施設の充実と優れた国産ソフトウェアの開発が相乗効果となって広く利用されるようになってきた。放射光を使うメリットとしては、まず実験室では得られないような高ダイナミックレンジ・高分解能の回折データを短時間で取得することができる点にある。この恩恵により最近では結晶構造のみならず原子の周りの電子分布状態を可視化することが可能となっている。手前味噌で恐縮ではあるが、その一例をご紹介します。図 (a) はプラズマディスプレイパネルの青色蛍光体として使われている $\text{BaMgAl}_{10}\text{O}_{17}:\text{Eu}^{2+}$ の結晶構造を示している。その右側には放射光データを解析して得られた電子密度分布を可視化して図示した (図 (b))。アルミニウムと酸素間の共有結合状態や Ba イオンが孤立して存在している様子などがはっきりと確認できる。また発光中心として機能する Eu イオンに関しても、添加量を変えて解析結果を比較検討することにより原子位置を特定することに成功した (図 (c))。このような精密結晶構造解析から得られた情報は、電子エネルギー状態計算等と併用することで材料設計の指針確立へと活用されている。

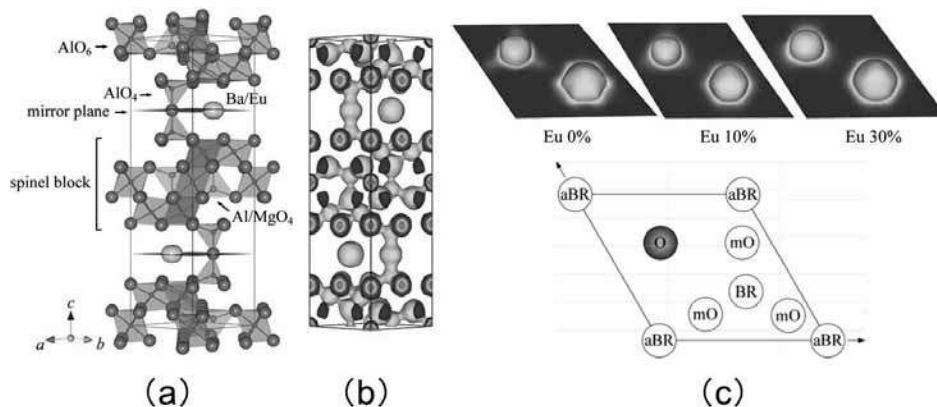


図 (a) $\text{BaMgAl}_{10}\text{O}_{17}:\text{Eu}^{2+}$ の結晶構造モデル。(b) 同左の電子密度分布図。(c) Eu^{2+} 添加量を変えた際のミラー面内の電子密度分布変化の様子とミラー面内のイオン分布モデル。

放射光を用いた
蛍光体の精密結晶構造解析

産業技術総合研究所
生産計測技術研究センター
山田浩志

産業技術総合研究所・九州シンクロtron光研究センター合同シンポジウム
2013年7月31日(水) サンメッセ鳥栖

蛍光体ってどこで使われているの？

LED照明
X線増感紙
蛍光灯
各種蛍光体と蛍光粉末
PDPパネル
シンチレータ

蛍光体の制御因子

原料
焼成
表面処理

純度
粒度
温度
雰囲気
フラックス
コート物質

発光特性
色度
残光
寿命
温度特性
工程劣化
粒度
分散度
分布
表面形状

結晶構造と関係

セラミックス 41(2006)No. 9 751-753「セラミックスアーカイブズ」より引用

蛍光体の基本構造と電子構造

母体：不純物イオン(発光中心)

伝導帯(Valence Band)
基底状態
励起状態
価電子帯(Valence Band)

配位座標モデルによる発光素過程

基底状態
励起状態
配位座標
 Q_0

発光特性は発光中心周りの
原子配置に依存！

発光中心の構造情報

発光中心の位置とその配位状況

平均構造：(粉末)X線回折
局所構造：X線吸収微細構造

PDP用青色蛍光体 $\text{BaMgAl}_{10}\text{O}_{17}:\text{Eu}^{2+}$
について紹介

