



# Bi<sup>3+</sup>/Yb<sup>3+</sup>共添加ダブルペロブスカイト型波長変換材料の開発

早川知克, 松岳航世, 榊原雅紘, 岡亮平, 橋本晴人  
名古屋工業大学 工学専攻 生命応用化学系プログラム

キーワード : ダブルペロブスカイト構造、波長変換、固相反応、エネルギー移動

## 1. 背景と研究目的

Yb<sup>3+</sup>をドープした鉛ハライドペロブスカイトは <sup>2</sup>F<sub>5/2</sub>→<sup>2</sup>F<sub>7/2</sub> 遷移に由来する近赤外発光を持ち、その量子効率の高さから[1]、太陽光発電の低い発電効率を向上させる波長変換材料として有望である。しかしながら、鉛による毒性や低い化学的安定性が問題視されている。そこで本研究では、酸化物系の鉛フリーなダブルペロブスカイト結晶である Ba<sub>2</sub>GdNbO<sub>6</sub> に着目した。Ba<sub>2</sub>GdNbO<sub>6</sub> に Yb<sup>3+</sup>を 5mol% ドープし、Yb<sup>3+</sup>発光のエネルギードナー(供与体)となりえる Bi<sup>3+</sup>で Gd<sup>3+</sup>を置き換えた Ba<sub>2</sub>(Gd,Bi)NbO<sub>6</sub>:0.05Yb<sup>3+</sup>が現在調査中の組成である。今回、放射光 XRD 測定を行い、結晶構造解析を行ったので報告する。

## 2. 実験内容

試料は固相反応法により合成した Ba<sub>2</sub>Gd<sub>(0.95-x)</sub>Bi<sub>x</sub>NbO<sub>6</sub>:0.05Yb 粉末試料 (Bi 濃度 : x=0~0.8 (BGNO#1~5 と称す)) で、BL5S2 ビームラインにて放射光エネルギー15.5 keV (波長 0.80 Å)、回折角 2θ=5.0~94.5° で X 線回折データを取得した。Ba<sub>2</sub>GdNbO<sub>6</sub> 結晶情報に文献[2]を参照し、RIETAN-FP [3]にて SR-XRD パターンのシミュレーション及びリートベルト解析を行った。

## 3. 結果および考察

Ba<sub>2</sub>GdNbO<sub>6</sub>:Bi,Yb 粉末試料 (BGNO#1~#5) の放射光 XRD パターンを Fig.1 に示す。推定構造のいくつかで XRD シミュレーション結果と比較したところ、すべての試料で XRD パターンは正方晶 I4/m 系 Ba<sub>2</sub>GdNbO<sub>6</sub> と合致すると見て取れた。しかしながら、Bi 濃度の増加とともに X 線反射ピークは低角度側へ幾分かシフトしており、イオン半径の異なる Bi<sup>3+</sup>が Gd<sup>3+</sup>サイトを置換固溶 (Bi<sup>3+</sup>:103pm, Gd<sup>3+</sup>:93.8pm) していることが推察された。得られたデータには若干のバックグラウンドも見られたため、ベースライン

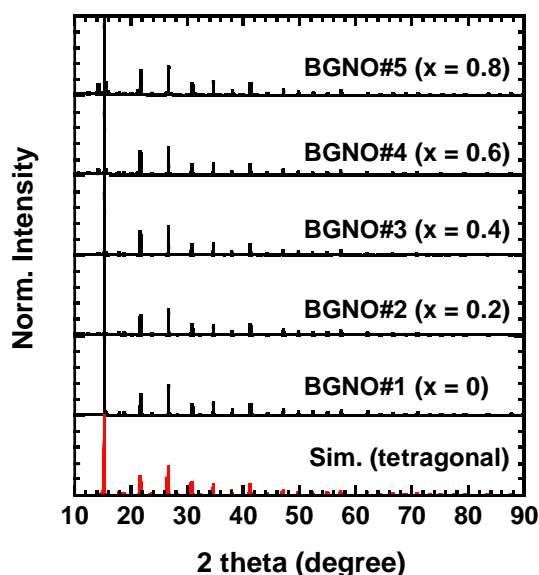


Fig.1 SR-XRD patterns (15.5 keV; λ=0.80 Å) of Ba<sub>2</sub>Gd<sub>1-x</sub>Yb<sub>0.05</sub>Bi<sub>x</sub>NbO<sub>6</sub> powder samples (x=0~0.8) and simulated SR-XRD pattern using the structural parameters (tetragonal I4/m) in literature [2].

フィッティングとともにリートベルト解析を行った。x=0 試料の結果を一例に Fig.2 に示す。良好な解析結果が得られ、格子定数 (a=b= 6.0019 Å, c=8.51952 Å, α=β=γ=90.0°) 等の構造パラメータを決定することができた。

## 4. 参考文献

[1] S.M.Ferro, et al., *Mater.Horiz.* **8** (2021) 1072-1083. [2] W.T.Fu, D.J.W.IJdo, *J.Solid State Chem.* **179** (2006) 1022-1028. [3] F.Izumi, K.Momma, *Solid State Phenom.* **130** (2007) 15-20.

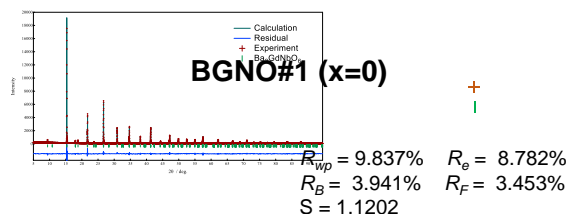


Fig.2 Result of Rietveld refinement for SR-XRD data of BGNO#1 (x=0).