

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新  
2019年度採択研究代表者

2022年度  
年次報告書

武田 隆史

物質・材料研究機構 機能性材料研究拠点  
グループリーダー

実験とデータ科学の循環による蛍光体開発

主たる共同研究者:

小笠原 一禎 (関西学院大学 理学部 教授)

## 研究成果の概要

本研究では、多数のデータを用いた機械学習が提案する多数の候補物質を高速実験で合成・評価することにより高性能蛍光体を開発するとともに、理論的検証を行う。開発する蛍光体は、8K液晶テレビ用の狭帯域蛍光体と高輝度照明用の耐熱蛍光体である。

発光モデル(発光波長、発光線幅)を用いた新蛍光体開発では、組成記述子、結晶構造記述子、電子状態、DFT 計算値からの記述子の構築を完成させるとともに、発光モデルの更新を進めた。発光線幅の予測精度には改善の余地があったため、結晶構造と関連させて学習データの見直しを行うことで、これまでよりも高精度で発光線幅を予測できるようになった。これら構築モデル、相安定性、バンドギャップの計算値も考慮して新物質の新蛍光体の提案を行なった。以前のモデルで提案された候補物質も合わせて実証実験を進め、8 個の新蛍光体を見つけた。発光中心の局所構造に注目した開発では、既知狭帯域蛍光体の局所構造と類似した局所構造を持つ物質提案と実証実験から新蛍光体 1 個を見出した。また、優れた発光特性が期待できる局所構造を持つ物質の多重同型置換からの候補の実証実験を行い、1 個の新蛍光体を見つけた。

高輝度照明用の耐熱蛍光体開発では、昨年度までに収集した発光の温度特性や蛍光寿命のデータ、発光モデル(発光波長、発光線幅)でも利用した記述子を用いて発光の温度特性のモデル作成を進めた。

計測手法の開発では、粒子の励起発光スペクトルを簡便に測定する手法開発、粒子の高密度レーザー励起下での発光評価手法の開発、高温特性に優れた粒子を見つける手法開発、共焦点レーザー顕微鏡を用いた粒子内部観察などを進めた。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) Yukinori Koyama, Hidekazu Ikeno, Masamichi Harada, Shiro Funahashi, Takashi Takeda, Naoto Hirosaki, “Rapid discovery of new  $\text{Eu}^{2+}$ -activated phosphors with a designed luminescence color using a data-driven approach”, *Materials Advances* **4**, 231 (2023).
- 2) Kohsei Takahashi, Takashi Takeda, Naoto Hirosaki, “Luminescence of single-particle ceramic phosphor by proximity measurement”, *Jpn. J. Appl. Phys.* **62**, 016510 (2023)..
- 3) Shota Takemura, Yukinori Koyama, Takayuki Nakanishi, Shiro Funahashi, Naoto Hirosaki, Hidekazu Ikeno, Takashi Takeda, “Narrow-Band Emitting Phosphor  $\text{Na}_2\text{Cs}_2\text{Sr}(\text{B}_9\text{O}_{15})_2:\text{Eu}^{2+}$  Discovered from Local Structure Similarity with Sulfate Phosphor”, *J. Phys. Chem. Lett.* **13**, 11878 (2022).