

2023 年度年次報告書

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

武田 隆史

物質・材料研究機構 電子・光機能材料研究センター
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:

松石 聡 (物質・材料研究機構 ナノアーキテクトニクス材料研究センター 主幹研究員)

研究成果の概要

本研究では、発光波長や発光半値幅など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。開発蛍光体は、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。発光スペクトルの計算手法開発による理論的検証、蛍光体1粒子の発光特性評価の手法開発も行う。

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、結晶構造、電子状態、DFT 計算値からの記述子を用いて発光モデルの更新を行うとともに、蛍光体ホストの発光中心置換元素をこれまでのアルカリ土類金属から、アルカリ金属やアルカリ土類金属にも拡張して候補物質の提案を行った。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たところ、4個の新蛍光体を見つけ、一部の蛍光体は目的波長と異なるものの狭帯域発光を示した。発光中心の局所構造に注目した開発では、狭帯域発光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、文献収集した発光の温度特性データを用いて作成した発光の温度変化モデルの妥当性の検討を行うとともに、温度特性データの改良に向けた取り組みを行った。計算手法の開発では、第一原理分子動力学計算(AIMD)を用いて、 Ce^{3+} 蛍光体の励起・発光スペクトルや発光スペクトル形状の温度変化を計算する手法開発を進めた。計測手法の開発では、波長可変な集光キセノン光と配光測定の組み合わせにより 20 μm 程度の微小粒子1粒でも測定できる量子効率測定装置の開発や、蛍光体1粒子の高密度レーザー励起下での発光評価手法の開発などを進めた。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Kohsei Takahashi, Shin-ichi Todoroki, Takashi Takeda, Naoto Hirosaki, “Quantum Efficiency Measurement of Single-Particle Phosphor by Proximity Method”, ECS J. Solid State Sci. Technol., vol. 12, pp.076002, 2023.