

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

2019年度 実績報告書

武田 隆史

物質・材料研究機構 機能性材料研究拠点
主幹研究員

実験とデータ科学の循環による蛍光体開発

§ 1. 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全て高速実験で合成・評価することにより高性能蛍光体を開発するとともに、多重項励起状態計算手法を開発し理論的検証を行う。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。液晶テレビの色域拡大のためには発光スペクトルの半値幅が 40nm 以下の狭帯域蛍光体が求められている。屋外照明、自動車ヘッドライトなどの高輝度照明では、レーザの高出力励起光による 300°C への温度上昇でも発光が低下しない優れた温度特性(耐熱性)を持ち、輝度飽和の点から蛍光寿命が短い蛍光体が必要とされている。この両蛍光体を実験とデータ科学の循環により開発する。

2019 年度は予測に必要であるデータライブラリの構築と強化のための蛍光体合成と発光特性の収集を進めた。約 100 種類の既知蛍光体の合成を完了させ、単一相が得られたものは粉末で発光スペクトル測定を行い、不純物を多量含むものは、混合成生物の中から目的粒子を取り出して測定を行った。

狭帯域蛍光体開発に向け、既知蛍光体の化学組成情報と発光スペクトル情報を用いて、狭帯域緑発光を化学組成から予測するモデルの構築を行なった。497 種類の記述子を用いてモデルを構築し、モデル構築で使用しなかった既知物質の中からの狭帯域緑発光および赤発光の候補の提案を行った。

高輝度照明用の耐熱蛍光体のモデル構築で必要となる発光の温度変化特性や蛍光寿命情報は、発光スペクトルに比べて少なくデータ収集が特に重要である。粒子を用いた測定では 1 粒子ごとの長時間測定のため多数の粒子の測定を行う本研究には不向きである。そこで多粒子の同時測定を可能とする手法開発を進めた。

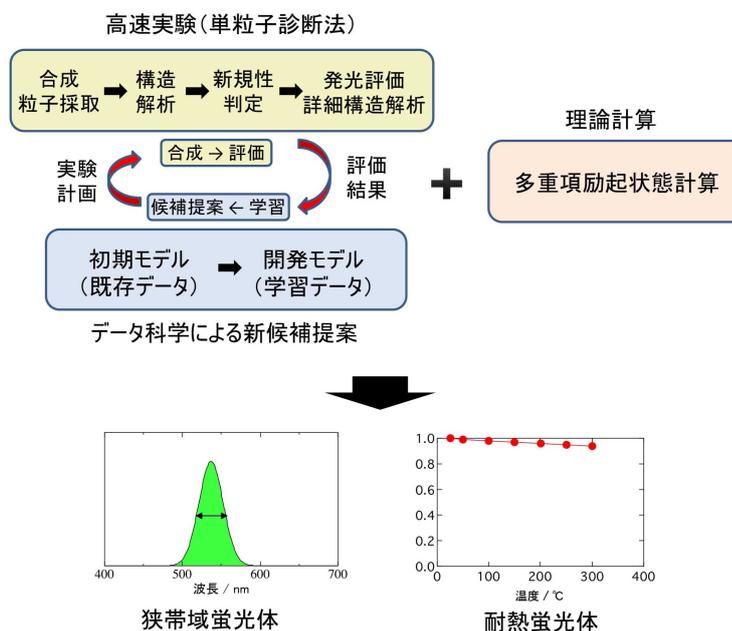


図 1 実験とデータ科学の循環による蛍光体開発

【代表的な原著論文】

なし

§ 2. 研究実施体制

(1)「武田」グループ

- ① 研究代表者:武田 隆史 (物質・材料研究機構機能性材料研究拠点 主幹研究員)
- ② 研究項目
 - ・データライブラリ構築
 - ・データ科学による予測
 - ・評価計測手法開発

(2)「池野」グループ

- ① 主たる共同研究者:池野 豪一 (大阪府立大学大学院工学研究科 准教授)
- ② 研究項目
 - ・計算手法開発