

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

2020 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
主席研究員

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。開発の目標は 8K 液晶テレビ用の狭帯域蛍光体および高輝度照明用の耐熱蛍光体である。

2020 年度は、昨年度組成情報から構築した発光波長モデルと発光線幅モデルから提案された新蛍光体候補の実証実験を行い、新蛍光体 2 個を見出した。検証結果をフィードバックし更新したモデルから新たな候補物質が提案され、実証実験で新蛍光体 1 個を見出した。また発光中心の局所構造に注目した開発も進めた。結晶構造中の局所構造を中心イオン-配位子間の距離および配位子-配位子間の距離からなる集合として扱い、最適輸送問題に基づく Wasserstein 距離で評価することで、どのような局所構造でも局所構造間の類似度を定量的に比較できるようにした。本手法を用いて、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の提案と実証実験を行い、新蛍光体 2 個を見出した。計算手法開発では、密度汎関数理論に基づく第一原理計算からのストークスシフトの定量評価を可能とした。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を実験で効率的に収集できるよう、多粒子の同時測定を可能とする手法開発を進め、温度変化特性データの高精度・高確度な取得を可能にした。

§ 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、主席研究員)
- ② 研究項目
 - ・データライブラリ構築・強化
 - ・記述子ライブラリ構築
 - ・データ科学による予測と高速実験による材料開発
 - ・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
 - ・計算科学による発光特性予測

【代表的な原著論文情報】

- [1] “Dissimilarity Measure of Local Structure in Inorganic Crystals using Wasserstein Distance

to Search for Novel Phosphors”, *Sci. Tech. Adv. Mater.*, vol. 22, pp.185–193, 2021.

- [2] “Broadband White Luminescent Phosphor $\text{Ba}(\text{S}_{17-x}\text{Al}_x)\text{Li}_y(\text{N}_{10-x+y}\text{O}_{x-y})\text{:Eu}^{2+}$ with a High Color Rendering Index for Solid State Lighting”, *J. Mater. Chem. C*, vol. 9, pp.5497–5504, 2021.