

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

2021 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

## § 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、これまでの組成記述子、結晶構造記述子に加え、電子状態、DFT 計算値を取り入れる開発準備を進めた。組成情報からのモデルでは組成を指定するだけで発光特性が予測できる利点がある。Sr<sub>3</sub>N<sub>2</sub>-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-AlN 擬 3 元系などで目的発光特性が得られる可能性が高い組成領域で仮想組成を生成させ、実証実験することで 3 個の新物質の新蛍光体を見出した。発光波長は予測に近い値であった。また、組成、構造モデルを様々な化合物系に適用することで 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を行い、新蛍光体 3 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を多重同型置換して新物質の蛍光体とするための手法開発を行った。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について、対称性の低い系での計算を進めるとともに、多重項を厳密に取り扱うことができる量子化学計算を用いた手法についても検討した。高輝度照明用の耐熱蛍光体のモデル構築で必要となるデータ収集を進めるとともに、粒子の励起発光スペクトルを簡便に測定する手法開発や高温特性に優れた粒子を見つける手法開発を進めた。

## § 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 グループリーダー)
- 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

### (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) Shota Takemura, Yukinori Koyama, Takayuki Nakanishi, Shiro Funahashi, Naoto Hirosaki, Hidekazu Ikeno, Takashi Takeda, “Narrow-Band Phosphor  $K_2ZnP_2O_7:Eu^{2+}$  Discovered Using Local Structure Similarity”, *Scripta Mater.*, vol. 215, pp.114686, 2022
- 2) Jian Xu, Shiro Funahashi, Kohsei Takahashi, Takayuki Nakanishi, Naoto Hirosaki, Takashi Takeda, “Cyan-Emitting Sialon-Polytypoid Phosphor Discovered by a Single-Particle-Diagnosis Approach”, *ECS J Solid State Sci. Technol.*, Vol. 10, pp.116002, 2021
- 3) Takashi Takeda, Shiro Funahashi, Kohsei Takahashi, Rong-Jun Xie, Naoto Hirosaki, “Structure Elucidation of Luminescent Centers in Green Emitting  $Eu^{2+}$  doped  $Si_{6-z}Al_zO_zN_{8-z}$  Phosphors”, *Scripta Mater.*, vol. 207, pp.114238, 2022
- 4) Yukinori Koyama, Atsuto Seko, Isao Tanaka, Shiro Funahashi, Naoto Hirosaki, “Combination of Recommender System and Single-Particle Diagnosis for Accelerated Discovery of Novel Nitrides”, *J. Chem. Phys.* vol 154, pp.224117, 2021