ハイスループット実験と機械学習を活用した蓄光材の長寿命化検討

Phosphorescent material research by combination of high throughput experiment and machine learning

豊田中研[1]，デンソー[2] ○間広文[1]，祖父江進[2]，田島伸[1]，旭良司[1]

Toyota Central R&D Labs., Inc.[1], Denso Corporation[2]

○Hirofumi Hazama[1], Susumu Sobue[2], Shin Tajima[1], Ryoji Asahi[1]

E-mail: e1375@mosk.tytlabs.co.jp

データ駆動型新機能材料探索の一環として、無機物の蓄光材表面に半導体薄膜を接合させることで残光の長寿命化を検討した。図１のように蓄光材（(株）ネモト・ルミマテリアル「ルミノーバ」）の表面に、４つの酸化物半導体ターゲットを用いて系統的に組成を制御しながら７×７点成膜してコンビケム試料を作製した。その試料に大気または還元雰囲気で熱処理を施し、それぞれの条件で残光特性を評価することで、800 データセットを得た。この際、遮光後の 200-300s の残光強度 I_t を用いて $I_t = I_0\exp(-t/\tau)$ により求めた τ を残光の光寿命とした。

得られたデータセットを用いて、機械学習によりデータの補間を行い、残光が長寿命化する条件を探索した。800 データセットの内ランダムに抽出した 640 データセット（トレーニングデータ）で光寿命の予測モデルを作成し、残りの 160 データセット（テストデータ）でそのモデルを評価した。検討した回帰モデルの中では、ランダムフォレストが残光の光寿命の実験値と予測値に対してテストデータで最も低い平均平方二乗誤差（RMSE）を示した（図２）。図２では、蓄光材の残光の光寿命を１としているので、光寿命が１以上であれば半導体接合により長寿命化していることを意味する。この予測モデルを用いることで、残光が長寿命化する半導体組成、仮焼条件がわかった。半導体接合による電荷分離[1]により、長寿命化したと考えられる。

[1] R. Kabe, C. Adachi, Nature 550, 384-387 (2017).

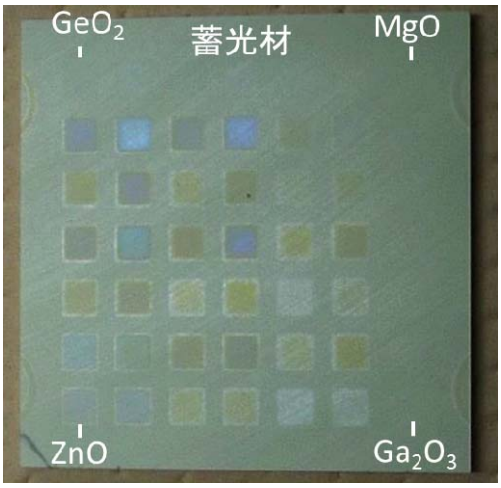


Fig. 1 Photograph of the as deposited sample sputtered by 4 targets with systematical composition change.

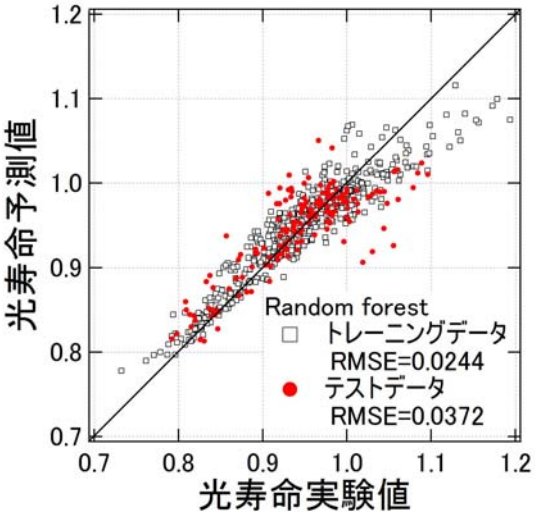


Fig. 2 Experimental afterglow lifetime dependence of the predicted value by random forest. 640 training and 160 test data set were chosen in 800 data set randomly.

© 2019年 応用物理学会