

## 機械学習を用いた新規緑色 Eu<sup>2+</sup>賦活蛍光体の探索

### Exploration of New Green-Emitting Eu<sup>2+</sup>-Activated Phosphors Using Machine Learning

物材機構<sup>1</sup>, 大阪公立大<sup>2</sup> ○小山 幸典<sup>1</sup>, 池野 豪一<sup>2</sup>, 原田 昌道<sup>1</sup>,

舟橋 司朗<sup>1</sup>, 武田 隆史<sup>1</sup>, 広崎 尚登<sup>1</sup>

NIMS<sup>1</sup>, Osaka Metropolitan Univ.<sup>2</sup>, Yukinori Koyama<sup>1</sup>, Hidekazu Ikeno<sup>2</sup>, Masamichi Harada<sup>1</sup>,

Shiro Funahashi<sup>1</sup>, Takashi Takeda<sup>1</sup>, Naoto Hirosaki<sup>1</sup>

E-mail: KOYAMA.Yukinori@nims.go.jp

近年、データ駆動型研究による蛍光体の開発が盛んに試みられているが、ホスト結晶によって発光色が様々に変化する Eu<sup>2+</sup>賦活蛍光体では、特定の発光色の蛍光体を発見することは未だ大きな課題である。そこで、我々は Eu<sup>2+</sup>賦活蛍光体の発光ピーク波長の機械学習を行ってきた<sup>[1]</sup>。本研究では、この機械学習モデルを使用して、新規な緑色 Eu<sup>2+</sup>賦活蛍光体を探索した。

探索の母集団として、化合物データベースに登録されている典型元素酸化物を選択した。機械学習モデルを使用して、緑色発光(発光ピーク波長がおおよそ 530 nm)と予測された化合物を抽出した。Eu を添加した候補化合物を固相法で合成した。得られた試料は、まず、粉末 XRD とフォトルミネッセンス(PL)測定で分析した。試料は全て複数相の混合物だったことから、粉末試料の PL 測定で Eu<sup>2+</sup>由来の発光が観測された試料から粒子を採取し、単結晶 XRD 測定と PL 測定を行った。

新規蛍光体の候補として合成を試みた酸化物のうち、Li<sub>2</sub>Ca<sub>4</sub>Si<sub>4</sub>O<sub>13</sub>, Na<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub>, SrLaGaO<sub>4</sub> から Eu<sup>2+</sup>由来の発光を確認した。これらの粉末試料から採取した粒子と、その発光スペクトルを Fig. 1 に示す。単結晶 X 線構造解析により、これらの粒子が目的相であることを確認した。Li<sub>2</sub>Ca<sub>4</sub>Si<sub>4</sub>O<sub>13</sub> と Na<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub> は緑色発光(ピーク波長はそれぞれ 520 nm, 527 nm)を示した。SrLaGaO<sub>4</sub> は Eu<sup>2+</sup>由来の青緑色発光(ピーク波長 502 nm)と Eu<sup>3+</sup>由来の発光が同時に観測された。機械学習を使用することで、所望の発光色の蛍光体を効率的に探索できることが示された。

本研究は JST CREST (JPMJCR19J2)の支援を受けたものである。

#### 参考文献

[1] 小山幸典 他、「Eu<sup>2+</sup>賦活蛍光体の発光ピークの機械学習」、2022 年 第 69 回応用物理学会春季学術講演会、22p-D316-2。

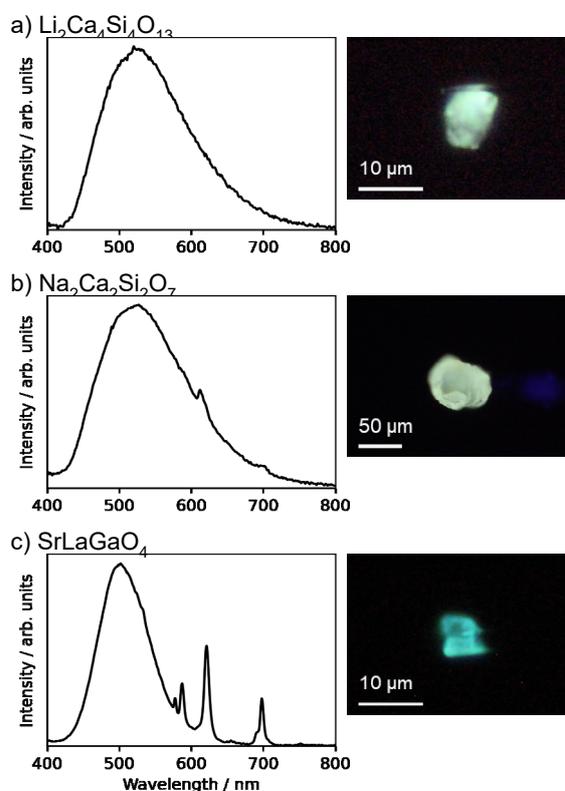


Fig. 1. Emission spectra and photo images of particles of a) Li<sub>2</sub>Ca<sub>4</sub>Si<sub>4</sub>O<sub>13</sub>:Eu, b) Na<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub>:Eu, c) SrLaGaO<sub>4</sub>:Eu.