

# 酸窒化物蛍光体の構造生成 AI とナローバンド蛍光体への応用

## Exploration of novel oxide/nitride crystal structures of narrow band phosphors by deep learning generative model

工学院大院工<sup>1</sup>, 工学院大先進工<sup>2</sup> <sup>○(M2)</sup>阿部 仁哉<sup>1</sup>, 宮川雅矢<sup>2</sup>, 高羽洋充<sup>2</sup>

Kogakuin Univ.<sup>1</sup>, Dept of Env. Chem&Chem.Eng., Kogakuin Univ..<sup>2</sup>,

<sup>○(M2)</sup> Masaya Abe<sup>1</sup>, Hiromitsu Takaba<sup>2</sup>, Masaya Miyagawa<sup>2</sup>

E-mail: bm23004@ns.kogakuin.ac.jp

### 1. 緒言

近年、注目されるナローバンド蛍光体は、発光バンドの半値幅が小さく高い色純度で発光を示すため、ディスプレイ分野での応用が期待されている。しかしながら、開発されたナローバンド蛍光体は限られており、試行錯誤的な実験で新しい蛍光体を開発するには多大な労力と時間がかかる。一方、実験で得られたデータベースを利用した機械学習による材料設計が注目されているが、蛍光体のような結晶系への応用例はほとんど報告されていない。そこで、本研究では、結晶構造の特徴量の算出方法を工夫した生成モデルを構築し、結晶構造データベースの学習から新規ナローバンド蛍光体の探索を試みた。

### 2. 計算方法

結晶構造生成モデルとしては、2つのニューラルネットワークをトレーニングして互いに競合させ、特定のトレーニングデータセットからより本物に近い、新しいデータを生成する敵対的生成ネットワーク (GAN) を改良したモデル Physics Guided Crystal Generative Model (PGCGM)<sup>[1]</sup> と Cubic GAN<sup>[2]</sup> の2種類の生成モデルを用いた。

生成モデルによって生成された結晶構造の半値幅を推定するために、回帰モデルを構築した。回帰モデルでは、報告されている文献から採取した蛍光体結晶構造を対象として、説明変数を蛍光体の母体結晶を表す記述し、目的変数を半値幅とした。探索の全体のイメージを Fig.1 に示す。

### 3. 結果及び考察

構築した PGCGM と Cubic GAN から Eu<sup>2+</sup>付活を想定し、Sr を組成に含む結晶構造を生成した。結晶構造データベース (ICSD) で報告されていない構造が多数生成されていることを確認した。次に、生成した結晶構造を対象に半値幅の予測を行った。生成した結晶構造の半値幅と結晶密度の相関を Fig.2 に示した。さらに、半値幅が 60 nm 以下のものを対象としたところ PGCGM では全体の 63.1%、Cubic GAN では全体の 92.0% が範囲内となった。

さらに、ICSD で報告されていない結晶構造に絞り込み、現実的な密度を持つ結晶を求めた。それらの構造の組成から、価数が 0、または水素原子を削除することで価数を 0 に合わせられるものに絞り、第一原理計算 (DFT 計算) で構造緩和シミュレーションを実施した。結果の詳細は発表にて説明する。

[参考論文]

[1] Y Zhao et al., *arXiv:2203.14352v3* (2022)

[2] Y Zhao et al., *Adv. Sci.* (2021)

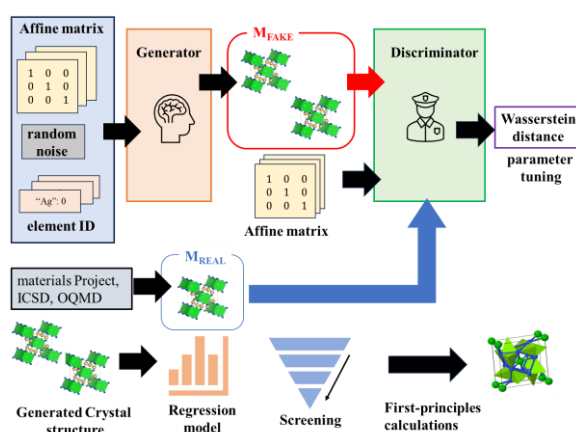


Fig.1 Schematic figure of phosphor crystal structures.

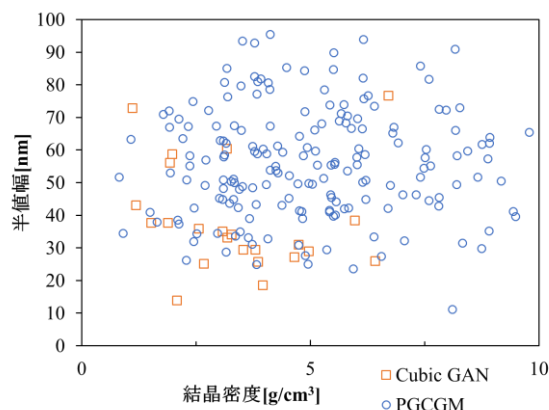


Fig.2 Relationship between generated crystal density and half-width of emission peak.