

1. 評価対象研究課題

(1) 研究課題名：データ科学と単粒子診断法を融合した新規赤外蛍光体開発の高速化

(2) 研究代表者：物質・材料研究機構 森田 孝治

(3) 研究期間：令和4年度～令和8年度（予定）

2. 中間評価の実施概要

実施日：令和6年10月18日

場所：TKP秋葉原カンファレンスセンター

評価委員：未来工学研究所 理事長、上席研究員／東京大学 名誉教授

平澤 洽（委員長）

長岡技術科学大学 副学長・教授

井原 郁夫

産業技術総合研究所 上級執行役員

兼 エネルギー・環境領域領域長

小原 春彦

東京科学大学 工学院 電気電子系 教授

梶川 浩太郎

東京農工大学 名誉教授

佐藤 勝昭

国立感染研究所 客員研究員

四ノ宮 成祥

科学技術振興機構 研究開発センター 企画運営室長、フェロー

中山 智弘

量子科学技術研究開発機構 高崎量子技術基盤研究所

先端機能材料研究部長

八巻 徹也

情報通信研究機構 電磁波研究所 総括研究員

山本 真之

（委員長以外は五十音順・敬称略）

3. 研究の進捗状況

研究の概要

本研究では、グループが独自に開発を進めてきた単粒子診断法を駆使して、①近赤外発光 (750-2500nm) を示す新しい無機蛍光体の創出と②可視-近赤外の 380-2500nm の広帯域を自在にカバーできる革新的な次世代高輝度・広帯域光源材料の創製を目指す。また、これら課題解決に向け、スマートラボとデータ科学との融合を通じ、近赤外蛍光体開発を中心とした③新材料創成に向けた高速循環実験法に関する基盤技術の構築を目指す。

①～③の目的達成には、「合成」、「評価」および「候補材選定」の各課題においてボトルネックとなっている開発速度の高速化技術の確立がカギとなる。そこで本研究では、『単粒子診断法』を基盤に、本手法とスマートラボの構築とデータ科学を活用した候補材選定を両輪とした高速循環実験法の確立を目指す。高速循環実験法の実現により、試行数の増大と探索領域の拡大を可能とすることで、これまでに無い高効率な蛍光体材料開発手法を確立する。本研究課題の最終目標は、以下の特性を有する新規赤外蛍光体の創出と新規な次世代高輝度・広帯域光源材料の実現を目指すことである。

- ・対象波長域：750-2500nm の広帯域をカバーする 4 種以上の新規赤外蛍光体群の開発
- ・蛍光特性：上記波長域における光変換効率 50%以上の蛍光体を 1 つ以上発見
- ・開発手法①：『単粒子診断法』の高度化による高速分析手法（スマートラボ）を確立し、赤外蛍光体の光学特性を 100 個／日以上計測を実現
- ・開発手法②：データ駆動型外挿的材料探索手法を構築し、本手法により提案された新規赤外蛍光体を 4 種以上発見
- ・赤外光源：開発蛍光体を搭載した可視-近赤外の新しい光源の試作

進捗状況

主な実施項目に対する進捗は以下の通り。

(1) 新規赤外蛍光体の合成

750-2000nm 域での発光が期待できる賦活型蛍光体を中心に、新しいホスト結晶系の赤外蛍光体の新規開拓を目指し、既に高発光効率な新規蛍光体 4 種類の発見に至った。特に、 Cr^{4+} を発光種にした新規赤外蛍光体 $\text{Na}_2\text{ZnGeO}_4:\text{Cr}$ は、世界トップレベルの量子効率(QY=78%)と光吸収(67%)特性を達成した。現在は、特許出願が完了して論文化の準備に着手するとともに、デバイス化や焼結ステップに展開を開始した。

(2) 高速分析手法の確立

近赤外の波長域を対象にした「単粒子診断法」の実現に向け、近赤外分光マニピュレータの設計・整備、赤外分光計装置群とスマートラボの環境整備を行った。特に、目的の達成度を評価するため 2000nm 以上の蛍光波長計測が可能

な高感度赤外分光計装置の整備に加え、自動計測・評価システムを装備した近赤外分光マニピュレータにより約 50 個／日程度の計測を達成した。

(3) データ駆動型外挿的材料探索手法の構築

文献中のテキスト情報に対してテキストマイニング処理を施し、データ科学に不可欠なデータベース (DB) の充実を図るとともに、独自の DB システムを構築した。赤外蛍光体のデータ駆動型外挿的材料探索手法などの構築と DB を活用した候補材の提案と検証実験を通じて、Eu 系で新規蛍光体 8 種類 (650nm～840nm)、Cr 系で新規蛍光体 19 種類 (700nm～1368nm) の発見に至った。

(4) 新規光源の試作

蛍光体を分散したホスト候補材の低温バルク化により、蛍光体に変質することなく蛍光発光を維持した光源化の可能性を確認した。さらに、新規なホスト候補材の探索を実施した。

4. 中間評価の評点

A 進捗は順調であり、研究計画に沿って進めてよい。

5. 総合コメント

新しい蛍光材料の探索というチャレンジングなテーマであり、機械学習による材料探索で有力な材料の候補が見つかっていると評価できる。

一方で、今後計画している長波長側の蛍光材料の発見に至るためには、材料探索のためのアプローチの更なる検討が必要と考えられる。また、データベースの構築に関しては有用な方法やノウハウを蓄積していただきたい。

今後、マテリアルインフォマティクスに関して先導的に取り組み、インパクトの高い成果が出てくることを期待する。

6. 主な個別コメント

- ・ 現時点での進捗は概ね順調である。チャレンジングな試みであるので今後の成果に期待したい。
- ・ 機械学習と独創的な実験方法を活用した、優れた研究を実施している。問題はないと考える。
- ・ 中間目標の達成度の観点では進捗は十分であり、今後の進展が期待できる内容である。
- ・ 単粒子診断法に機械学習を組み合わせた本課題の研究開発手法の優位性と限界を見定めてほしい。
- ・ 材料探索の範囲を広げるべきではないか。