

機械学習を用いた量子ドット発光ダイオードの効率支配因子の解明とデバイス作製

Factors governing the efficiency of QLED by machine learning approach and QLED fabrication based on the results of machine learning approach

○佐野 翔一¹, 高田 誠¹, 永瀬 隆^{1,2}, 小林 隆史^{1,2}, 内藤 裕義^{1,2}

(1. 大阪府立大, 2. 大阪府立大分子エレクトロニックデバイス研)

○S. Sano¹, M. Takada¹, T. Nagase^{1,2}, T. Kobayashi^{1,2}, H. Naito^{1,2}

(1. Osaka Pref. Univ., 2. RIMED)

E-mail: syoichi.sano.oe@pe.osakafu-u.ac.jp

1. はじめに 量子ドット(QD)は、粒径を変化させることで発光波長を制御でき、高い量子効率を有する無機半導体である[1]。このような特長を有する QD を発光層として用いた QD light-emitting diode (QLED)に関する材料開発、デバイス作製が盛んに行われている。典型的なエネルギーダイアグラムを図 1 に示す。QD 層への電子注入障壁はほぼ無視できる一方、Cd 系 QD 層への正孔注入障壁は 1.0 eV 程度とかなり大きくなるが、実際には高い電流効率が報告されている[2][3]。このため、我々は図 1 における正孔注入機構を明らかにしてきた[4]。本報告では、機械学習から得られた効率支配因子に関する知見を基に、デバイス作製、デバイスシミュレーションにより QLED の高効率化に関する考察を行った。

2. 解析 機械学習の解析手法としては、Cd 系 QD を用いた約 100 個の順構造 QLED に関する文献を収集し、正孔注入層 (HIL)、正孔輸送層 (HTL)、QD 層、電子輸送層 (ETL)のエネルギー準位、膜厚などを特徴量として、ランダムフォレスト回帰により電流効率に対する各特徴量の重要度を評価した。

3. 結果 QLED の電流効率における各特徴量の重要度を算出すると、QD 層の価電子帯端のエネルギー準位が電流効率における重要度として一番高くなった。これは正孔輸送層から QD 層への正孔注入が電流効率に大きく寄与していることを示している。そこで、正孔注入障壁と電流効率の相関を確認するために、HOMO レベルの異なる正孔輸送材料 poly(9,9-dioctylfluorene-co-N-(4-(3-methylpropyl))diphenylamine) (TFB) と poly(9-vinylcarbazole) (PVK)を用いて電流効率の比較を行った結果を図 2 に示す。正孔注入障壁が大きい TFB (HOMO:5.3 eV)を用いた QLED の最高電流効率は 1.55 cd/A、正孔注入障壁が小さい PVK (HOMO:5.8 eV)を用いた QLED の最高電流効率は 8.26 cd/A となった。これより、正孔注入障壁低減が電流効率向上に寄与することが示された。

機械学習のために文献を精査していく中で、正孔注入障壁とともに HTL の電子移動度が電流効率と関連していることを見出した (HTL の電子移動度はほとんどの文献に記載がないため、機械学習では考慮していない)。この HTL の電子移動度と電流効率との関連をデバイスシミュレーションにより明らかにした。

機械学習において QD 層の価電子帯端のエネルギー準位と同程度の重要度を示している特徴量として、QD 層の伝導帯端のエネルギー準位がある。当日は QD 層への電子注入と電流効率との相関についても議論する予定である。

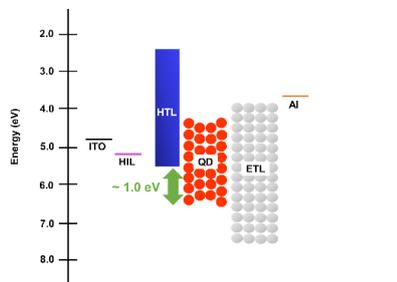


Fig. 1 Typical energy level diagram of QLED

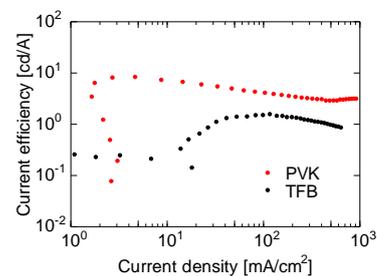


Fig. 2 Current efficiency of QLEDs with different HTLs

【参考文献】 [1] Y. Shirasaki *et al.*, Nat. Photonics, **12**, 445-451 (2013). [2] J. Yang *et al.*, Diamond & Related Materials **73**, 154-160 (2017). [3] W. K. Bae *et al.*, Adv. Mater. **21**, 1690-1694 (2009). [4] 佐野他：第79回秋応物 18p-PA5-7(2018).

【謝辞】 本研究の一部は、科学研究費補助金 (JP17H01265) 及び村田学術振興財団の助成を受けた。また、本研究で用いた PEI を提供して頂いた株式会社日本触媒に深く感謝いたします。