

機械学習を用いた有機アモルファス半導体の正孔移動度予測 Prediction of hole mobility of amorphous organic semiconductor using machine learning approach

○藤邨 颯^{1, 2}, 永瀬 隆^{1, 2}, 小林 隆史^{1, 2}, 麻田 俊雄^{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)

○H. Fujimura¹, T. Nagase^{1, 2}, T. Kobayashi^{1, 2}, T. Asada^{1, 2}, H. Naito^{1, 2}

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

E-mail: hayate.fujimura.oe@pe.osakafu-u.ac.jp

1. はじめに

無機半導体とは異なり、k空間が定義できないアモルファス有機半導体の電子物性の予測は容易ではない。正孔輸送性を有するアモルファス有機半導体は電子写真感光体、有機発光ダイオードの正孔輸送層などに用いられているため、効率的な材料開発が重要となる。本研究では、機械学習を用いることで化学構造から正孔移動度の予測を行い、その有用性を示した。

2. 手法

化学構造から正孔移動度を予測する過程を Fig. 1 に示す。前提として、正孔輸送性を有する分子は H、C、N、O のみで構成されるとした。目的変数は、159 種類の正孔輸送性をもつ分子の正孔移動度を文献から収集した。化学構造は SMILES 記法に変換し、さらに One-Hot encoding を用いて前処理を行ったものを説明変数とした。

3. 結果

横軸に正孔移動度の実験値、縦軸に機械学習を用いて予測した移動度を示したものを Fig. 2 に示す。予測値の精度の指標となる決定係数は、テストデータで 0.71 であった。このモデルを用いて典型的な正孔輸送材料である、*N,N'*-bis(3-methylphenyl)-*N,N'*-diphenyl benzidine (TPD)、*N,N'*-di(1-naphthyl)-*N,N'*-diphenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamine (NPD)、*N,N'*-di(biphenyl-3-yl)-*N,N'*-diphenyl-[1,1'-biphenyl]-4,4'-diamine (*m*-BPD) および tri(p-terphenyl-4-yl)amine (*p*-TTA) の移動度予測をした結果を Fig. 3 にまとめた。以上の結果から、上述の元素からなる新規な化学構造をこのモデルに入力することで、正孔移動度の予測が行えることを示せた。

【謝辞】本研究の一部は、科学研究費補助金 (JP19H02599、JP20H02716、JP20K21007 and JP21H04564) の助成を受けて行った。

【参考文献】 [1] H. H. Fong, *et al.*, Chem. Phys. Lett. **353** (2002) 407–413. [2] K. K. Tsung, *et al.*, Org. Electron. **10** (2009) 661–665. [3] K. Okumoto *et al.*, Synth. Met. **111–112** (2000) 473–476. [4] Y. Shirota, *et al.*, Chem. Rev. **107** (2007) 953–1010.

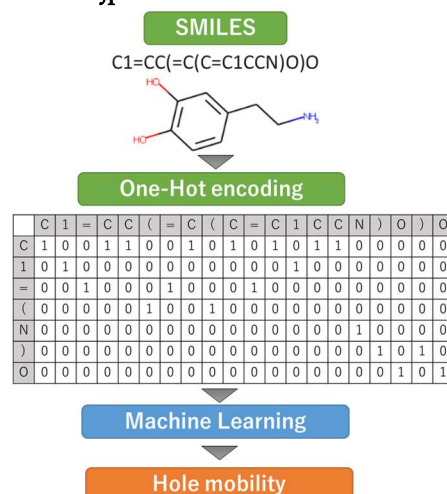


Fig.1 Flowchart for mobility prediction

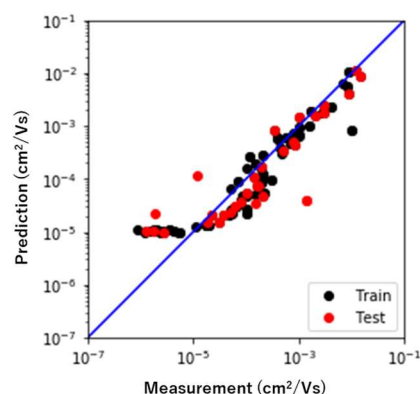


Fig.2 Plot of predicted hole mobility versus experimentally-obtained mobility

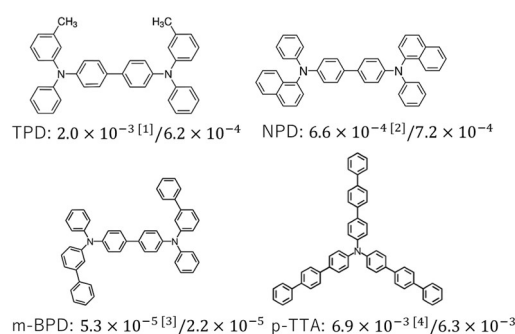


Fig. 3 Hole mobility of TPD, NPD, *m*-BPD and *p*-TTA (experiment / prediction [cm^2/Vs])