

機械学習による CdSe 系量子ドット発光ダイオードの効率支配因子に関する研究

A machine-learning study on efficiency-limiting factors of CdSe based quantum dot light emitting diodes

○(M1)木下 喬之¹, 永瀬 隆^{1,2}, 小林 隆史^{1,2}, 内藤 裕義^{1,2}

(1. 大阪公立大, 2. 大阪公立大分子エレクトロニックデバイス研)

○T. Kinoshita¹, T. Nagase^{1,2}, T. Kobayashi^{1,2}, H. Naito^{1,2}

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

E-mail: sb22099y@st.omu.ac.jp

1. はじめに

コロイダル量子ドット(CQD)は、粒径を変化させることで発光波長を制御でき、高い発光量子効率を有する無機半導体である [1]。我々は、機械学習により CdSe 系 CQD 発光ダイオード (QLED) において、正孔輸送層 (HTL) から QD への正孔注入障壁が電流効率の支配因子であることを示し、さらに、実験的に正孔輸送層(HTL)の電子移動度も効率支配因子であることを示した [2]。

本研究では、CdSe CQD を発光層に有する順構造 QLED のデバイスシミュレーションデータを用いて、電子物性と発光効率の関係を機械学習させ、QLED 特性を予測するモデルを構築することを目的とした。この結果、実験的に明らかにした効率支配因子[2]の妥当性を示すことができ、さらに、効率予測モデルから HTL 等の電子物性値を最適化することにより QLED の高効率化指針を得ることができた。

2. 実験

デバイスシミュレーション (Atlas, Silvaco) により CdSe CQD を発光層に有する典型的な順構造 QLED (Fig. 1)において、5 つの物理量 (HTL の電子、正孔移動度、LUMO、HOMO、ETL の電子移動度)を変化させることで J-L-V 特性を算出した。また J-L-V 特性から内部量子効率(IQE)を求め、ランダムフォレスト回帰により、電子物性と IQE の関係を機械学習させることで IQE を予測するモデルを構築した。

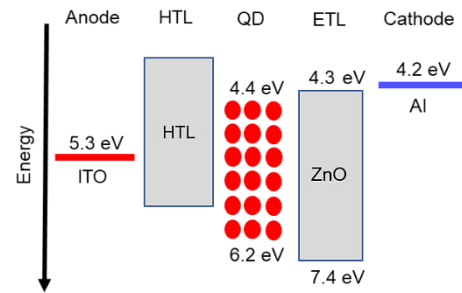


Fig. 1 Energy band diagram.

3. 結果

デバイスシミュレーションにより生成したデータを用いて行った機械学習では、上記の 5 つの物理量を説明変数、得られた IQE を目的変数とした。Fig. 2 に予測された IQE と IQE の値の比較を示した。決定係数は 0.997、平均平方二乗誤差 (RMSE)は 0.0108 となった。また、Fig. 3 には特徴量の重要度を示しており、QD 層内への電子の閉じ込め(HTL の LUMO)、HTL の電子移動度、QD への正孔注入障壁 (HTL の HOMO) が高い重要度となった。さらに、本研究で得られた機械学習モデルにより実験結果 [2]を説明することができ、QLED の高効率化指針が得られた。

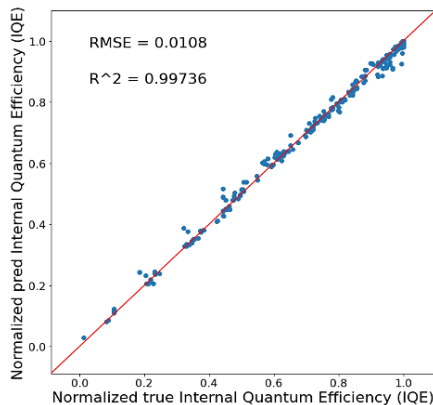


Fig. 2 Plot of predicted device efficiency versus true experimental efficiency using random forest regression algorithm.

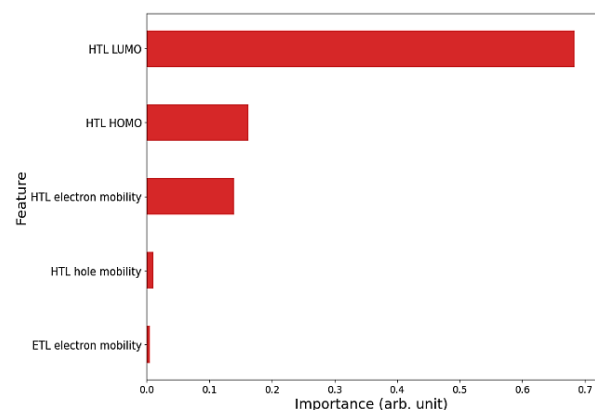


Fig. 3 Feature importance based on the random forest algorithm.

【参考文献】 [1] L. Wu, *et al.*, *Information Display* **37**, 6 (2021). [2] S. Sano, *et al.*, *Org. Electron.* **86**, 105865 (2020).

【謝辞】 本研究は、科学研究費補助金 (JP20H02716, JP21H04564) の助成を受けたものであり、関係者各位に深く感謝をいたします。