

量子化学計算と機械学習を活用した有機 EL 材料の開発

(阪大院工¹) ○相澤 直矢¹Development of OLED materials with Inverted Singlet and Triplet Excited States (¹Graduate School of Engineering, Osaka University) ○Naoya Aizawa¹

Organic light-emitting diodes (OLEDs) are highly valued for thin, flexible displays but are limited by a maximum 25% efficiency due to the 1:3 singlet to triplet exciton ratio in electron-hole recombination. Researchers are addressing this limitation by using thermally activated delayed fluorescence (TADF) materials, which convert non-emissive triplet excitons into emissive singlet excitons through reverse intersystem crossing (RISC).¹ However, challenges such as slow RISC and efficiency roll-off at high currents persist. To screen TADF materials with fast RISC, this study combines density functional theory calculations and a machine learning technique, Bayesian optimization. The presentation will cover the virtual screening process, experimental validation, and an analysis of feature importance on fast RISC.

Keywords : OLED; TADF; DFT; Bayesian optimization; Virtual screening

次世代の有機 EL 材料として注目されている熱活性遅延蛍光 (TADF) 材料は、通常発光しない三重項励起状態から発光可能な一重項励起状態への遷移である逆項間交差により、有機 EL の内部量子効率を 100%まで高めることが可能である。しかし、逆項間交差が遅い場合、デバイスの劣化や高輝度時の発光効率の低下につながるため、より速い逆項間交差を示す TADF 材料の開発が求められている。量子化学計算や機械学習により、逆項間交差の速度定数 (k_{RISC}) の予測が可能となれば、材料開発のさらなる加速が期待できる。本研究では、量子化学計算とベイズ最適化を組み合わせた仮想スクリーニングにより、速い逆項間交差を示す TADF 材料の探索を行った。本発表では、仮想スクリーニングの結果や実験検証に加えて、速い逆項間交差に重要な特徴量について議論する (図 1)。

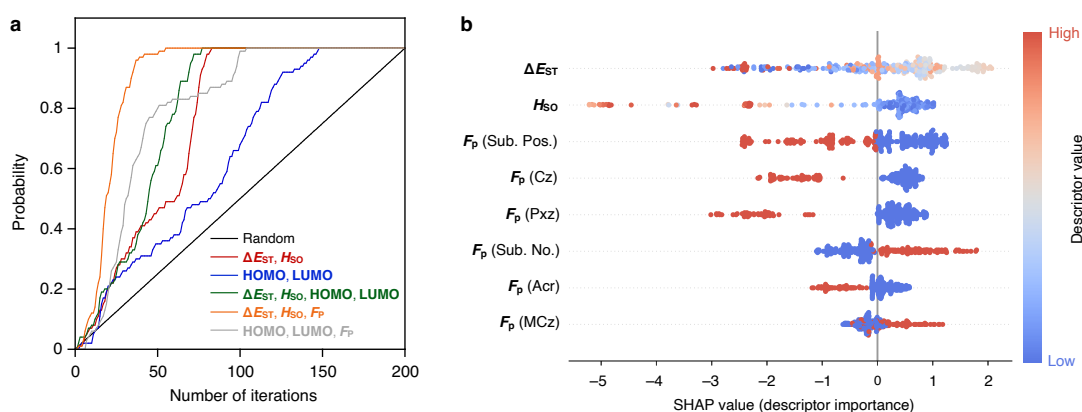


図 1. **a**, 様々な特徴量を用いたベイズ最適化の結果 (縦軸: 最大の k_{RISC} を見出す確率、横軸: 計算更新回数) **b**, SHAP (SHapley Additive exPlanations)による特徴量解析

1) H. Uoyama, K. Goushi, K. Shizu, H. Nomura, C. Adachi, *Nature* **2012**, 492, 234.