

量子ドット発光ダイオードの効率向上に関する研究

○佐野 翔一¹ 小林 隆史^{1,2} 永瀬 隆^{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究所

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

量子ドット(QD)を発光材料とした量子ドット発光ダイオード(QLED)において、機械学習の手法を用いて、QLEDの効率支配因子に関する知見を得た。その知見を基に、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うとともに、QLED の効率向上のために適切に機械学習を用いるための課題についても議論した。

<緒言>

量子ドット(Quantum-dot: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材料である[1]。表面を化学修飾した QD は、無機材料でありながら塗布プロセスでのデバイス作製が可能である特長があり、このような特長を有する QD を発光材料として用いた Quantum-dot light-emitting diode (QLED)における材料開発、デバイス開発が盛んに行われている。QLED は発光スペクトルの半値幅が狭いため、色純度が高い利点から有機発光ダイオード(OLED)に代わる次世代ディスプレイ(8K テレビ)として注目を集めている[2]。

典型的な QLED では、Cd 系 QD 層への電子注入障壁はほぼ無視できる一方、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[3-5]。このため、QLED における効率向上のための知見を得ることと同時に正孔注入機構を明らかにすることが重要となる。

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うとともに、QLED の効率向上のため、機械学習を用いる際の課題についても議論する。

<実験>

機械学習の解析手法としては、Cd 系 QD を用いた順構造 QLED に関する文献を 100 程度収集し、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。

<結果・考察>

QLED の電流効率における各特徴量の重要度を機械学習により算出した結果を図 1 に示す。図 1 の結果から、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ており、HIL や HTL の HOMO も重要度として高くなっていることがわかった。これらは正孔輸送層から 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。また、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。これは、今回収集した ETL はほとんどが ZnO であること、様々な発光波長の QD の実験結果を用いていること、による QD のバンドギャップの違いに由来していると考えられる。

図 1 は、順構造 QLED における特徴量の重要度を示す水平棒グラフである。Y 軸には特徴量のリストが、X 軸には重要度の値(0.000 から 0.200)が示されている。最も重要度の高い特徴量は VLE_EH0 であり、これは QD 層の価電子帯端のエネルギー準位を示している。これに次いで重要なのは CB_EH0 (QD 層の伝導帯端のエネルギー準位)と HOMO_HIL (HIL の HOMO 準位)である。HOMO_HIL と HOMO_HTL (HTL の HOMO 準位)の重要度も比較的高い。その他の特徴量としては、LUMO_HIL、LUMO_HTL、LUMO_QD、LUMO_ETL、HOMO_QD、HOMO_ETL、HOMO_ETL2、HOMO_ETL3、HOMO_ETL4、HOMO_ETL5、HOMO_ETL6、HOMO_ETL7、HOMO_ETL8、HOMO_ETL9、HOMO_ETL10、HOMO_ETL11、HOMO_ETL12、HOMO_ETL13、HOMO_ETL14、HOMO_ETL15、HOMO_ETL16、HOMO_ETL17、HOMO_ETL18、HOMO_ETL19、HOMO_ETL20、HOMO_ETL21、HOMO_ETL22、HOMO_ETL23、HOMO_ETL24、HOMO_ETL25、HOMO_ETL26、HOMO_ETL27、HOMO_ETL28、HOMO_ETL29、HOMO_ETL30、HOMO_ETL31、HOMO_ETL32、HOMO_ETL33、HOMO_ETL34、HOMO_ETL35、HOMO_ETL36、HOMO_ETL37、HOMO_ETL38、HOMO_ETL39、HOMO_ETL40、HOMO_ETL41、HOMO_ETL42、HOMO_ETL43、HOMO_ETL44、HOMO_ETL45、HOMO_ETL46、HOMO_ETL47、HOMO_ETL48、HOMO_ETL49、HOMO_ETL50、HOMO_ETL51、HOMO_ETL52、HOMO_ETL53、HOMO_ETL54、HOMO_ETL55、HOMO_ETL56、HOMO_ETL57、HOMO_ETL58、HOMO_ETL59、HOMO_ETL60、HOMO_ETL61、HOMO_ETL62、HOMO_ETL63、HOMO_ETL64、HOMO_ETL65、HOMO_ETL66、HOMO_ETL67、HOMO_ETL68、HOMO_ETL69、HOMO_ETL70、HOMO_ETL71、HOMO_ETL72、HOMO_ETL73、HOMO_ETL74、HOMO_ETL75、HOMO_ETL76、HOMO_ETL77、HOMO_ETL78、HOMO_ETL79、HOMO_ETL80、HOMO_ETL81、HOMO_ETL82、HOMO_ETL83、HOMO_ETL84、HOMO_ETL85、HOMO_ETL86、HOMO_ETL87、HOMO_ETL88、HOMO_ETL89、HOMO_ETL90、HOMO_ETL91、HOMO_ETL92、HOMO_ETL93、HOMO_ETL94、HOMO_ETL95、HOMO_ETL96、HOMO_ETL97、HOMO_ETL98、HOMO_ETL99、HOMO_ETL100、HOMO_ETL101、HOMO_ETL102、HOMO_ETL103、HOMO_ETL104、HOMO_ETL105、HOMO_ETL106、HOMO_ETL107、HOMO_ETL108、HOMO_ETL109、HOMO_ETL110、HOMO_ETL111、HOMO_ETL112、HOMO_ETL113、HOMO_ETL114、HOMO_ETL115、HOMO_ETL116、HOMO_ETL117、HOMO_ETL118、HOMO_ETL119、HOMO_ETL120、HOMO_ETL121、HOMO_ETL122、HOMO_ETL123、HOMO_ETL124、HOMO_ETL125、HOMO_ETL126、HOMO_ETL127、HOMO_ETL128、HOMO_ETL129、HOMO_ETL130、HOMO_ETL131、HOMO_ETL132、HOMO_ETL133、HOMO_ETL134、HOMO_ETL135、HOMO_ETL136、HOMO_ETL137、HOMO_ETL138、HOMO_ETL139、HOMO_ETL140、HOMO_ETL141、HOMO_ETL142、HOMO_ETL143、HOMO_ETL144、HOMO_ETL145、HOMO_ETL146、HOMO_ETL147、HOMO_ETL148、HOMO_ETL149、HOMO_ETL150、HOMO_ETL151、HOMO_ETL152、HOMO_ETL153、HOMO_ETL154、HOMO_ETL155、HOMO_ETL156、HOMO_ETL157、HOMO_ETL158、HOMO_ETL159、HOMO_ETL160、HOMO_ETL161、HOMO_ETL162、HOMO_ETL163、HOMO_ETL164、HOMO_ETL165、HOMO_ETL166、HOMO_ETL167、HOMO_ETL168、HOMO_ETL169、HOMO_ETL170、HOMO_ETL171、HOMO_ETL172、HOMO_ETL173、HOMO_ETL174、HOMO_ETL175、HOMO_ETL176、HOMO_ETL177、HOMO_ETL178、HOMO_ETL179、HOMO_ETL180、HOMO_ETL181、HOMO_ETL182、HOMO_ETL183、HOMO_ETL184、HOMO_ETL185、HOMO_ETL186、HOMO_ETL187、HOMO_ETL188、HOMO_ETL189、HOMO_ETL190、HOMO_ETL191、HOMO_ETL192、HOMO_ETL193、HOMO_ETL194、HOMO_ETL195、HOMO_ETL196、HOMO_ETL197、HOMO_ETL198、HOMO_ETL199、HOMO_ETL200、HOMO_ETL201、HOMO_ETL202、HOMO_ETL203、HOMO_ETL204、HOMO_ETL205、HOMO_ETL206、HOMO_ETL207、HOMO_ETL208、HOMO_ETL209、HOMO_ETL210、HOMO_ETL211、HOMO_ETL212、HOMO_ETL213、HOMO_ETL214、HOMO_ETL215、HOMO_ETL216、HOMO_ETL217、HOMO_ETL218、HOMO_ETL219、HOMO_ETL220、HOMO_ETL221、HOMO_ETL222、HOMO_ETL223、HOMO_ETL224、HOMO_ETL225、HOMO_ETL226、HOMO_ETL227、HOMO_ETL228、HOMO_ETL229、HOMO_ETL230、HOMO_ETL231、HOMO_ETL232、HOMO_ETL233、HOMO_ETL234、HOMO_ETL235、HOMO_ETL236、HOMO_ETL237、HOMO_ETL238、HOMO_ETL239、HOMO_ETL240、HOMO_ETL241、HOMO_ETL242、HOMO_ETL243、HOMO_ETL244、HOMO_ETL245、HOMO_ETL246、HOMO_ETL247、HOMO_ETL248、HOMO_ETL249、HOMO_ETL250、HOMO_ETL251、HOMO_ETL252、HOMO_ETL253、HOMO_ETL254、HOMO_ETL255、HOMO_ETL256、HOMO_ETL257、HOMO_ETL258、HOMO_ETL259、HOMO_ETL260、HOMO_ETL261、HOMO_ETL262、HOMO_ETL263、HOMO_ETL264、HOMO_ETL265、HOMO_ETL266、HOMO_ETL267、HOMO_ETL268、HOMO_ETL269、HOMO_ETL270、HOMO_ETL271、HOMO_ETL272、HOMO_ETL273、HOMO_ETL274、HOMO_ETL275、HOMO_ETL276、HOMO_ETL277、HOMO_ETL278、HOMO_ETL279、HOMO_ETL280、HOMO_ETL281、HOMO_ETL282、HOMO_ETL283、HOMO_ETL284、HOMO_ETL285、HOMO_ETL286、HOMO_ETL287、HOMO_ETL288、HOMO_ETL289、HOMO_ETL290、HOMO_ETL291、HOMO_ETL292、HOMO_ETL293、HOMO_ETL294、HOMO_ETL295、HOMO_ETL296、HOMO_ETL297、HOMO_ETL298、HOMO_ETL299、HOMO_ETL300、HOMO_ETL301、HOMO_ETL302、HOMO_ETL303、HOMO_ETL304、HOMO_ETL305、HOMO_ETL306、HOMO_ETL307、HOMO_ETL308、HOMO_ETL309、HOMO_ETL310、HOMO_ETL311、HOMO_ETL312、HOMO_ETL313、HOMO_ETL314、HOMO_ETL315、HOMO_ETL316、HOMO_ETL317、HOMO_ETL318、HOMO_ETL319、HOMO_ETL320、HOMO_ETL321、HOMO_ETL322、HOMO_ETL323、HOMO_ETL324、HOMO_ETL325、HOMO_ETL326、HOMO_ETL327、HOMO_ETL328、HOMO_ETL329、HOMO_ETL330、HOMO_ETL331、HOMO_ETL332、HOMO_ETL333、HOMO_ETL334、HOMO_ETL335、HOMO_ETL336、HOMO_ETL337、HOMO_ETL338、HOMO_ETL339、HOMO_ETL340、HOMO_ETL341、HOMO_ETL342、HOMO_ETL343、HOMO_ETL344、HOMO_ETL345、HOMO_ETL346、HOMO_ETL347、HOMO_ETL348、HOMO_ETL349、HOMO_ETL350、HOMO_ETL351、HOMO_ETL352、HOMO_ETL353、HOMO_ETL354、HOMO_ETL355、HOMO_ETL356、HOMO_ETL357、HOMO_ETL358、HOMO_ETL359、HOMO_ETL360、HOMO_ETL361、HOMO_ETL362、HOMO_ETL363、HOMO_ETL364、HOMO_ETL365、HOMO_ETL366、HOMO_ETL367、HOMO_ETL368、HOMO_ETL369、HOMO_ETL370、HOMO_ETL371、HOMO_ETL372、HOMO_ETL373、HOMO_ETL374、HOMO_ETL375、HOMO_ETL376、HOMO_ETL377、HOMO_ETL378、HOMO_ETL379、HOMO_ETL380、HOMO_ETL381、HOMO_ETL382、HOMO_ETL383、HOMO_ETL384、HOMO_ETL385、HOMO_ETL386、HOMO_ETL387、HOMO_ETL388、HOMO_ETL389、HOMO_ETL390、HOMO_ETL391、HOMO_ETL392、HOMO_ETL393、HOMO_ETL394、HOMO_ETL395、HOMO_ETL396、HOMO_ETL397、HOMO_ETL398、HOMO_ETL399、HOMO_ETL400、HOMO_ETL401、HOMO_ETL402、HOMO_ETL403、HOMO_ETL404、HOMO_ETL405、HOMO_ETL406、HOMO_ETL407、HOMO_ETL408、HOMO_ETL409、HOMO_ETL410、HOMO_ETL411、HOMO_ETL412、HOMO_ETL413、HOMO_ETL414、HOMO_ETL415、HOMO_ETL416、HOMO_ETL417、HOMO_ETL418、HOMO_ETL419、HOMO_ETL420、HOMO_ETL421、HOMO_ETL422、HOMO_ETL423、HOMO_ETL424、HOMO_ETL425、HOMO_ETL426、HOMO_ETL427、HOMO_ETL428、HOMO_ETL429、HOMO_ETL430、HOMO_ETL431、HOMO_ETL432、HOMO_ETL433、HOMO_ETL434、HOMO_ETL435、HOMO_ETL436、HOMO_ETL437、HOMO_ETL438、HOMO_ETL439、HOMO_ETL440、HOMO_ETL441、HOMO_ETL442、HOMO_ETL443、HOMO_ETL444、HOMO_ETL445、HOMO_ETL446、HOMO_ETL447、HOMO_ETL448、HOMO_ETL449、HOMO_ETL450、HOMO_ETL451、HOMO_ETL452、HOMO_ETL453、HOMO_ETL454、HOMO_ETL455、HOMO_ETL456、HOMO_ETL457、HOMO_ETL458、HOMO_ETL459、HOMO_ETL460、HOMO_ETL461、HOMO_ETL462、HOMO_ETL463、HOMO_ETL464、HOMO_ETL465、HOMO_ETL466、HOMO_ETL467、HOMO_ETL468、HOMO_ETL469、HOMO_ETL470、HOMO_ETL471、HOMO_ETL472、HOMO_ETL473、HOMO_ETL474、HOMO_ETL475、HOMO_ETL476、HOMO_ETL477、HOMO_ETL478、HOMO_ETL479、HOMO_ETL480、HOMO_ETL481、HOMO_ETL482、HOMO_ETL483、HOMO_ETL484、HOMO_ETL485、HOMO_ETL486、HOMO_ETL487、HOMO_ETL488、HOMO_ETL489、HOMO_ETL490、HOMO_ETL491、HOMO_ETL492、HOMO_ETL493、HOMO_ETL494、HOMO_ETL495、HOMO_ETL496、HOMO_ETL497、HOMO_ETL498、HOMO_ETL499、HOMO_ETL500、HOMO_ETL501、HOMO_ETL502、HOMO_ETL503、HOMO_ETL504、HOMO_ETL505、HOMO_ETL506、HOMO_ETL507、HOMO_ETL508、HOMO_ETL509、HOMO_ETL510、HOMO_ETL511、HOMO_ETL512、HOMO_ETL513、HOMO_ETL514、HOMO_ETL515、HOMO_ETL516、HOMO_ETL517、HOMO_ETL518、HOMO_ETL519、HOMO_ETL520、HOMO_ETL521、HOMO_ETL522、HOMO_ETL523、HOMO_ETL524、HOMO_ETL525、HOMO_ETL526、HOMO_ETL527、HOMO_ETL528、HOMO_ETL529、HOMO_ETL530、HOMO_ETL531、HOMO_ETL532、HOMO_ETL533、HOMO_ETL534、HOMO_ETL535、HOMO_ETL536、HOMO_ETL537、HOMO_ETL538、HOMO_ETL539、HOMO_ETL540、HOMO_ETL541、HOMO_ETL542、HOMO_ETL543、HOMO_ETL544、HOMO_ETL545、HOMO_ETL546、HOMO_ETL547、HOMO_ETL548、HOMO_ETL549、HOMO_ETL550、HOMO_ETL551、HOMO_ETL552、HOMO_ETL553、HOMO_ETL554、HOMO_ETL555、HOMO_ETL556、HOMO_ETL557、HOMO_ETL558、HOMO_ETL559、HOMO_ETL560、HOMO_ETL561、HOMO_ETL562、HOMO_ETL563、HOMO_ETL564、HOMO_ETL565、HOMO_ETL566、HOMO_ETL567、HOMO_ETL568、HOMO_ETL569、HOMO_ETL570、HOMO_ETL571、HOMO_ETL572、HOMO_ETL573、HOMO_ETL574、HOMO_ETL575、HOMO_ETL576、HOMO_ETL577、HOMO_ETL578、HOMO_ETL579、HOMO_ETL580、HOMO_ETL581、HOMO_ETL582、HOMO_ETL583、HOMO_ETL584、HOMO_ETL585、HOMO_ETL586、HOMO_ETL587、HOMO_ETL588、HOMO_ETL589、HOMO_ETL590、HOMO_ETL591、HOMO_ETL592、HOMO_ETL593、HOMO_ETL594、HOMO_ETL595、HOMO_ETL596、HOMO_ETL597、HOMO_ETL598、HOMO_ETL599、HOMO_ETL600、HOMO_ETL601、HOMO_ETL602、HOMO_ETL603、HOMO_ETL604、HOMO_ETL605、HOMO_ETL606、HOMO_ETL607、HOMO_ETL608、HOMO_ETL609、HOMO_ETL610、HOMO_ETL611、HOMO_ETL612、HOMO_ETL613、HOMO_ETL614、HOMO_ETL615、HOMO_ETL616、HOMO_ETL617、HOMO_ETL618、HOMO_ETL619、HOMO_ETL620、HOMO_ETL621、HOMO_ETL622、HOMO_ETL623、HOMO_ETL624、HOMO_ETL625、HOMO_ETL626、HOMO_ETL627、HOMO_ETL628、HOMO_ETL629、HOMO_ETL630、HOMO_ETL631、HOMO_ETL632、HOMO_ETL633、HOMO_ETL634、HOMO_ETL635、HOMO_ETL636、HOMO_ETL637、HOMO_ETL638、HOMO_ETL639、HOMO_ETL640、HOMO_ETL641、HOMO_ETL642、HOMO_ETL643、HOMO_ETL644、HOMO_ETL645、HOMO_ETL646、HOMO_ETL647、HOMO_ETL648、HOMO_ETL649、HOMO_ETL650、HOMO_ETL651、HOMO_ETL652、HOMO_ETL653、HOMO_ETL654、HOMO_ETL655、HOMO_ETL656、HOMO_ETL657、HOMO_ETL658、HOMO_ETL659、HOMO_ETL660、HOMO_ETL661、HOMO_ETL662、HOMO_ETL663、HOMO_ETL664、HOMO_ETL665、HOMO_ETL666、HOMO_ETL667、HOMO_ETL668、HOMO_ETL669、HOMO_ETL670、HOMO_ETL671、HOMO_ETL672、HOMO_ETL673、HOMO_ETL674、HOMO_ETL675、HOMO_ETL676、HOMO_ETL677、HOMO_ETL678、HOMO_ETL679、HOMO_ETL680、HOMO_ETL681、HOMO_ETL682、HOMO_ETL683、HOMO_ETL684、HOMO_ETL685、HOMO_ETL686、HOMO_ETL687、HOMO_ETL688、HOMO_ETL689、HOMO_ETL690、HOMO_ETL691、HOMO_ETL692、HOMO_ETL693、HOMO_ETL694、HOMO_ETL695、HOMO_ETL696、HOMO_ETL697、HOMO_ETL698、HOMO_ETL699、HOMO_ETL700、HOMO_ETL701、HOMO_ETL702、HOMO_ETL703、HOMO_ETL704、HOMO_ETL705、HOMO_ETL706、HOMO_ETL707、HOMO_ETL708、HOMO_ETL709、HOMO_ETL710、HOMO_ETL711、HOMO_ETL712、HOMO_ETL713、HOMO_ETL714、HOMO_ETL715、HOMO_ETL716、HOMO_ETL717、HOMO_ETL718、HOMO_ETL719、HOMO_ETL720、HOMO_ETL721、HOMO_ETL722、HOMO_ETL723、HOMO_ETL724、HOMO_ETL725、HOMO_ETL726、HOMO_ETL727、HOMO_ETL728、HOMO_ETL729、HOMO_ETL730、HOMO_ETL731、HOMO_ETL732、HOMO_ETL733、HOMO_ETL734、HOMO_ETL735、HOMO_ETL736、HOMO_ETL737、HOMO_ETL738、HOMO_ETL739、HOMO_ETL740、HOMO_ETL741、HOMO_ETL742、HOMO_ETL743、HOMO_ETL744、HOMO_ETL745、HOMO_ETL746、HOMO_ETL747、HOMO_ETL748、HOMO_ETL749、HOMO_ETL750、HOMO_ETL751、HOMO_ETL752、HOMO_ETL753、HOMO_ETL754、HOMO_ETL755、HOMO_ETL756、HOMO_ETL757、HOMO_ETL758、HOMO_ETL759、HOMO_ETL760、HOMO_ETL761、HOMO_ETL762、HOMO_ETL763、HOMO_ETL764、HOMO_ETL765、HOMO_ETL766、HOMO_ETL767、HOMO_ETL768、HOMO_ETL769、HOMO_ETL770、HOMO_ETL771、HOMO_ETL772、HOMO_ETL773、HOMO_ETL774、HOMO_ETL775、HOMO_ETL776、HOMO_ETL777、HOMO_ETL778、HOMO_ETL779、HOMO_ETL780、HOMO_ETL781、HOMO_ETL782、HOMO_ETL783、HOMO_ETL784、HOMO_ETL785、HOMO_ETL786、HOMO_ETL787、HOMO_ETL788、HOMO_ETL789、HOMO_ETL790、HOMO_ETL791、HOMO_ETL792、HOMO_ETL793、HOMO_ETL794、HOMO_ETL795、HOMO_ETL796、HOMO_ETL797、HOMO_ETL798、HOMO_ETL799、HOMO_ETL800、HOMO_ETL801、HOMO_ETL802、HOMO_ETL803、HOMO_ETL804、HOMO_ETL805、HOMO_ETL806、HOMO_ETL807、HOMO_ETL808、HOMO_ETL809、HOMO_ETL810、HOMO_ETL811、HOMO_ETL812、HOMO_ETL813、HOMO_ETL814、HOMO_ETL815、HOMO_ETL816、HOMO_ETL817、HOMO_ETL818、HOMO_ETL819、HOMO_ETL820、HOMO_ETL821、HOMO_ETL822、HOMO_ETL823、HOMO_ETL824、HOMO_ETL825、HOMO_ETL826、HOMO_ETL827、HOMO_ETL828、HOMO_ETL829、HOMO_ETL830、HOMO_ETL831、HOMO_ETL832、HOMO_ETL833、HOMO_ETL834、HOMO_ETL835、HOMO_ETL836、HOMO_ETL837、HOMO_ETL838、HOMO_ETL839、HOMO_ETL840、HOMO_ETL841、HOMO_ETL842、HOMO_ETL843、HOMO_ETL844、HOMO_ETL845、HOMO_ETL846、HOMO_ETL847、HOMO_ETL848、HOMO_ETL849、HOMO_ETL850、HOMO_ETL851、HOMO_ETL852、HOMO_ETL853、HOMO_ETL854、HOMO_ETL855、HOMO_ETL856、HOMO_ETL857、HOMO_ETL858、HOMO_ETL859、HOMO_ETL860、HOMO_ETL861、HOMO_ETL862、HOMO_ETL863、HOMO_ETL864、HOMO_ETL865、HOMO_ETL866、HOMO_ETL867、HOMO_ETL868、HOMO_ETL869、HOMO_ETL870、HOMO_ETL871、HOMO_ETL872、HOMO_ETL873、HOMO_ETL874、HOMO_ETL875、HOMO_ETL876、HOMO_ETL877、HOMO_ETL878、HOMO_ETL879、HOMO_ETL880、HOMO_ETL881、HOMO_ETL882、HOMO_ETL883、HOMO_ETL884、HOMO_ETL885、HOMO_ETL886、HOMO_ETL887、HOMO_ETL888、HOMO_ETL889、HOMO_ETL890、HOMO_ETL891、HOMO_ETL892、HOMO_ETL893、HOMO_ETL894、HOMO_ETL895、HOMO_ETL896、HOMO_ETL897、HOMO_ETL898、HOMO_ETL899、HOMO_ETL900、HOMO_ETL901、HOMO_ETL902、HOMO_ETL903、HOMO_ETL904、HOMO_ETL905、HOMO_ETL906、HOMO_ETL907、HOMO_ETL908、HOMO_ETL909、HOMO_ETL910、HOMO_ETL911、HOMO_ETL912、HOMO_ETL913、HOMO_ETL914、HOMO_ETL915、HOMO_ETL916、HOMO_ETL917、HOMO_ETL918、HOMO_ETL919、HOMO_ETL920、HOMO_ETL921、HOMO_ETL922、HOMO_ETL923、HOMO_ETL924、HOMO_ETL925、HOMO_ETL926、HOMO_ETL927、HOMO_ETL928、HOMO_ETL929、HOMO_ETL930、HOMO_ETL931、HOMO_ETL932、HOMO_ETL933、HOMO_ETL934、HOMO_ETL935、HOMO_ETL936、HOMO_ETL937、HOMO_ETL938、HOMO_ETL939、HOMO_ETL940、HOMO_ETL941、HOMO_ETL942、HOMO_ETL943、HOMO_ETL944、HOMO_ETL945、HOMO_ETL946、HOMO_ETL947、HOMO_ETL948、HOMO_ETL949、HOMO_ETL950、HOMO_ETL951、HOMO_ETL952、HOMO_ETL953、HOMO_ETL954、HOMO_ETL955、HOMO_ETL956、HOMO_ETL957、HOMO_ETL958、HOMO_ETL959、HOMO_ETL960、HOMO_ETL961、HOMO_ETL962、HOMO_ETL963、HOMO_ETL964、HOMO_ETL965、HOMO_ETL966、HOMO_ETL967、HOMO_ETL968、HOMO_ETL969、HOMO_ETL970、HOMO_ETL971、HOMO_ETL972、HOMO_ETL973、HOMO_ETL974、HOMO_ETL975、HOMO_ETL976、HOMO_ETL977、HOMO_ETL978、HOMO_ETL979、HOMO_ETL980、HOMO_ETL981、HOMO_ETL982、HOMO_ETL983、HOMO_ETL984、HOMO_ETL985、HOMO_ETL986、HOMO_ETL987、HOMO_ETL988、HOMO_ETL989、HOMO_ETL990、HOMO_ETL991、HOMO_ETL992、HOMO_ETL993、HOMO_ETL994、HOMO_ETL995、HOMO_ETL996、HOMO_ETL997、HOMO_ETL998、HOMO_ETL999、HOMO_ETL1000、HOMO_ETL1001、HOMO_ETL1002、HOMO_ETL1003、HOMO_ETL1004、HOMO_ETL1005、HOMO_ETL1006、HOMO_ETL1007、HOMO_ETL1008、HOMO_ETL1009、HOMO_ETL1010、HOMO_ETL1011、HOMO_ETL1012、HOMO_ETL1013、HOMO_ETL1014、HOMO_ETL1015、HOMO_ETL1016、HOMO_ETL1017、HOMO_ETL1018、HOMO_ETL1019、HOMO_ETL1020、HOMO_ETL1021、HOMO_ETL1022、HOMO_ETL1023、HOMO_ETL1024、HOMO_ETL1025、HOMO_ETL1026、HOMO_ETL1027、HOMO_ETL1028、HOMO_ETL1029、HOMO_ETL1030、HOMO_ETL1031、HOMO_ETL1032、HOMO_ETL1033、HOMO_ETL1034、HOMO_ETL1035、HOMO_ETL1036、HOMO_ETL1037、HOMO_ETL1038、HOMO_ETL1039、HOMO_ETL1040、HOMO_ETL1041、HOMO_ETL1042、HOMO_ETL1043、HOMO_ETL1044、HOMO_ETL1045、HOMO_ETL1046、HOMO_ETL1047、HOMO_ETL1048、HOMO_ETL1049、HOMO_ETL1050、HOMO_ETL1051、HOMO_ETL1052、HOMO_ETL1053、HOMO_ETL1054、HOMO_ETL1055、HOMO_ETL1056、HOMO_ETL1057、HOMO_ETL1058、HOMO_ETL1059、HOMO_ETL1060、HOMO_ETL1061、HOMO_ETL1062、HOMO_ETL1063、HOMO_ETL1064、HOMO_ETL1065、HOMO_ETL1066、HOMO_ETL1067、HOMO_ETL1068、HOMO_ETL1069、HOMO_ETL1070、HOMO_ETL1071、HOMO_ETL1072、HOMO_ETL1073、HOMO_ETL1074、HOMO_ETL1075、HOMO_ETL1076、HOMO_ETL1077、HOMO_ETL1078、HOMO_ETL1079、HOMO_ETL1080、HOMO_ETL1081、HOMO_ETL1082、HOMO_ETL1083、HOMO_ETL1084、HOMO_ETL1085、HOMO_ETL1086、HOMO_ETL1087、HOMO_ETL1088、HOMO_ETL1089、HOMO_ETL1090、HOMO_ETL1091、HOMO_ETL1092、HOMO_ETL1093、HOMO_ETL1094、HOMO_ETL1095、HOMO_ETL1096、HOMO_ETL1097、HOMO_ETL1098、HOMO_ETL1099、HOMO_ETL1100、HOMO_ETL1101、HOMO_ETL1102、HOMO_ETL1103、HOMO_ETL1104、HOMO_ETL1105、HOMO_ETL1106、HOMO_ETL1107、HOMO_ETL1108、HOMO_ETL1109、HOMO_ETL1110、HOMO_ETL1111、HOMO_ETL1112、HOMO_ETL1113、HOMO_ETL1114、HOMO_ETL1115、HOMO_ETL1116、HOMO_ETL1117、HOMO_ETL1118、HOMO_ETL1119、HOMO_ETL1120、HOMO_ETL1121、HOMO_ETL1122、HOMO_ETL1123、HOMO_ETL1124、HOMO_ETL1125、HOMO_ETL1126、HOMO_ETL1127、HOMO_ETL1128、HOMO_ETL1129、HOMO_ETL1130、HOMO_ETL1131、HOMO_ETL1132、HOMO_ETL1133、HOMO_ETL1134、HOMO_ETL1135、HOMO_ETL1136、HOMO_ETL1137、HOMO_ETL1138、HOMO_ETL1139、HOMO_ETL1140、HOMO_ETL1141、HOMO_ETL1142、HOMO_ETL1143、HOMO_ETL1144、HOMO_ETL1145、HOMO_ETL1146、HOMO_ETL1147、HOMO_ETL1148、HOMO_ETL1149、HOMO_ETL1150、HOMO_ETL1151、HOMO_ETL1152、HOMO_ETL1153、HOMO_ETL1154、HOMO_ETL1155、HOMO_ETL1156、HOMO_ETL1157、HOMO_ETL1158、HOMO_ETL1159、HOMO_ETL1160、HOMO_ETL1161、HOMO_ETL1162、HOMO_ETL1163、HOMO_ETL1164、HOMO_ETL1165、HOMO_ETL1166、HOMO_ETL1167、HOMO_ETL1168、HOMO_ETL1169、HOMO_ETL1170、HOMO_ETL1171、HOMO_ETL1172、HOMO_ETL1173、HOMO_ETL1174、HOMO_ETL1175、HOMO_ETL1176、HOMO_ETL1177、HOMO_ETL1178、HOMO_ETL1179、HOMO_ETL1180、HOMO_ETL1181、HOMO_ETL1182、HOMO_ETL1183、HOMO_ETL1184、HOMO_ETL1185、HOMO_ETL1186、HOMO_ETL1187、HOMO_ETL1188、HOMO_ETL1189、HOMO_ETL1190、HOMO_ETL1191、HOMO_ETL1192、HOMO_ETL1193、HOMO_ETL1194、HOMO_ETL1195、HOMO_ETL1196、HOMO_ETL1197、HOMO_ETL1198、HOMO_ETL1199、HOMO_ETL1200、HOMO_ETL1201、HOMO_ETL1202、HOMO_ETL1203、HOMO_ETL1204、HOMO_ETL1205、HOMO_ETL1206、HOMO_ETL1207、HOMO_ETL1208、HOMO_ETL1209、HOMO_ETL1210、HOMO_ETL1211、HOMO_ETL1212、HOMO_ETL1213、HOMO_ETL1214、HOMO_ETL1215、HOMO_ETL1216、HOMO_ETL1217、HOMO_ETL1218、HOMO_ETL1219、HOMO_ETL1220、HOMO_ETL1221、HOMO_ETL1222、HOMO_ETL1223、HOMO_ETL1224、HOMO_ETL1225、HOMO_ETL1226、HOMO_ETL1227、HOMO_ETL1228、HOMO_ETL1229、HOMO_ETL1230、HOMO_ETL1231、HOMO_ETL1232、HOMO_ETL1233、HOMO_ETL1234、HOMO_ETL1235、HOMO_ETL1236、HOMO_ETL1237、HOMO_ETL1238、HOMO_ETL1239、HOMO_ETL1240、HOMO_ETL1241、HOMO_ETL1242、HOMO_ETL1243、HOMO_ETL1244、HOMO_ETL1245、HOMO_ETL1246、HOMO_ETL1247、HOMO_ETL1248、HOMO_ETL1249、HOMO_ETL1250、HOMO_ETL1251、HOMO_ETL1252、HOMO_ETL1253、HOMO_ETL1254、HOMO_ETL1255、HOMO_ETL1256、HOMO_ETL1257、HOMO_ETL1258、HOMO_ETL1259、HOMO_ETL1260、HOMO_ETL1261、HOMO_ETL1262、HOMO_ETL1263、HOMO_ETL1264、HOMO_ETL1265、HOMO_ETL1266、HOMO_ETL1267、HOMO_ETL1268、HOMO_ETL1269、HOMO_ETL1270、HOMO_ETL1271、HOMO_ETL1272、HOMO_ETL1273、HOMO_ETL1274、HOMO_ETL1275、HOMO_ETL1276、HOMO_ETL1277、HOMO_ETL1278、HOMO_ETL1279、HOMO_ETL1280、HOMO_ETL1281、HOMO_ETL1282、HOMO_ETL1283、HOMO_ETL1284、HOMO_ETL1285、HOMO_ETL1286、HOMO_ETL1287、HOMO_ETL1288、HOMO_ETL1289、HOMO_ETL1290、HOMO_ETL1291、HOMO_ETL1292、HOMO_ETL1293、HOMO_ETL1294、HOMO_ETL1295、HOMO_ETL1296、HOMO_ETL1297、HOMO_ETL1298、HOMO_ETL1299、HOMO_ETL1300、HOMO_ETL1301、HOMO_ETL1302、HOMO_ETL1303、HOMO_ETL1304、HOMO_ETL1305、HOMO_ETL1306、HOMO_ETL1307、HOMO_ETL1308、HOMO_ETL1309、HOMO_ETL1310、HOMO_ETL1311、HOMO_ETL1312、HOMO_ETL1313、HOMO_ETL1314、HOMO_ETL1315、HOMO_ETL1316、HOMO_ETL1317、HOMO_ETL1318、HOMO_ETL1319、HOMO_ETL1320、HOMO_ETL1321、HOMO_ETL1322、HOMO_ETL1323、HOMO_ETL1324、HOMO_ETL1325、HOMO_ETL1326、HOMO_ETL1327、HOMO_ETL1328、HOMO_ETL1329、HOMO_ETL1330、HOMO_ETL1331、HOMO_ETL1332、HOMO_ETL1333、HOMO_ETL1334、HOMO_ETL1335、HOMO_ETL1336、HOMO_ETL1337、HOMO_ETL1338、HOMO_ET

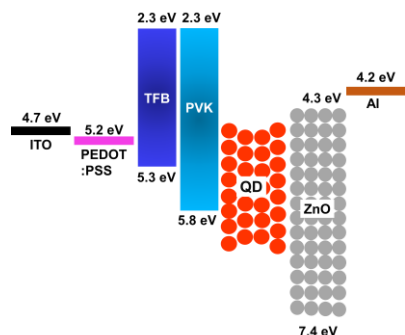


図 2 作製した QLED のエネルギーダイアグラム

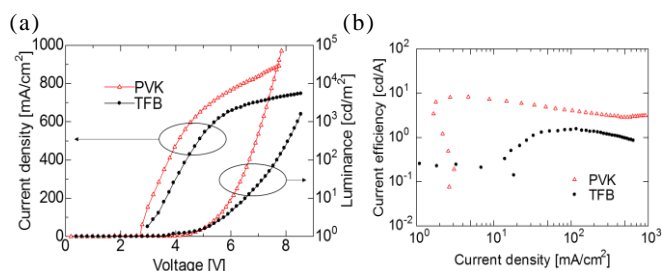


図 3 TFB、または PVK を HTL として用いた QLED の (a) J - L - V 特性 (b) 電流効率-電流密度特性。

電荷注入による発光過程を調べるため、QLED のデバイスシミュレーション (SILVACO 社、ATLAS) を行った。印加電圧を 1.0 V、2.0 V 印加時のバンドダイアグラムを図 4 に示す。HTL/QD 層界面に蓄積された正孔と QD 層のエネルギー準位に対して HTL のエネルギー準位が大きくシフトしていることがわかった。これにより、QD 層内に正孔が注入され、QD からの発光が観測されると考えられる。

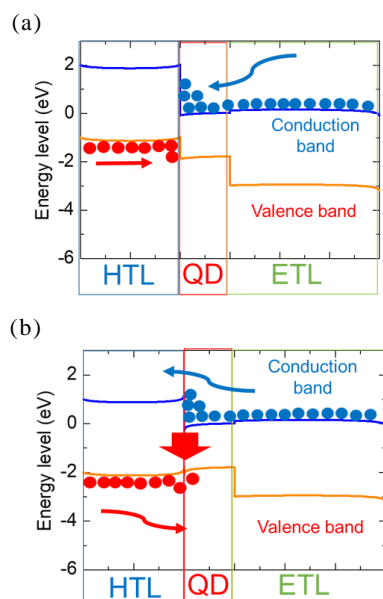


図 4 デバイスシミュレーションにより算出したエネルギーダイアグラム (a) 1.0 V (b) 2.0 V。

様々な HTL を用いた QLED の電流効率と正

孔注入障壁の関係 [6] を図 5 に示す。図 5 より、正孔注入障壁の低減が電流効率の向上に必ずしも寄与しないことがわかった。

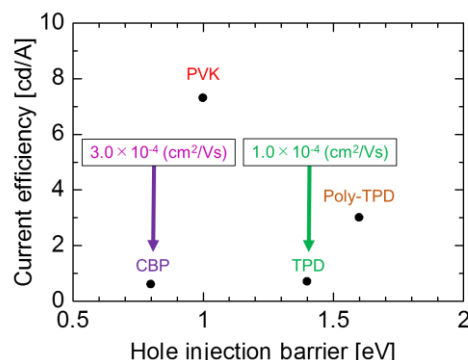


図 5 様々な HTL を用いた QLED の電流効率と正孔注入障壁の相関。poly-TPD は poly(4-butyl-phenyl-diphenyl-amine)、CBP は 4,4'-bis(carbazole-9-yl)-biphenyl、TPD は N,N'-diphenyl-N,N'-bis-(3-methylphenyl)-1,1'-diphenyl-4,4'-diamine である。図中の移動度の値は、電子移動度の値である。PVK、poly-TPD の電子移動度は極めて低く、報告例はない。

図 5 の結果を精査することにより、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、本報告での機械学習では考慮していない)。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調べたところ、HTL の電子移動度を小さくすると電流効率が向上することがわかった。このことは、本報告での機械学習では考慮していなかった HTL の電子移動度も QLED の効率支配因子の一つであることを示せた。

以上より、典型的な構造の QLED の電流効率には、QD 層への正孔注入障壁、HTL の電子移動度が寄与していることがわかった。当日は、QD 層への電子注入 (電荷バランス) も効率支配因子であることを議論する予定である。

文 献

- [1] Y. Shirasaki *et al.*, Nat. Photonics **7**, 13-23 (2013).
- [2] T. Tsuzuki, The Journal of the Institute of Image Information and Television Engineers **68**, 9, 745-747 (2014).
- [3] W. K. Bae *et al.*, Adv. Mater. **21**, 1690-1694 (2009).
- [4] K. H. Lee *et al.*, ACS Nano **8**, 4893-4901 (2014).
- [5] H. Peng *et al.*, Nanoscale **8**, 17765-17773 (2016).
- [6] M. D. Ho *et al.*, ACS Appl. Mater. Interfaces **5**, 12369-12374 (2013).