

## 電子状態に基づくマテリアルズ・インフォマティクスによる 色純度に優れた発光材料の探索

<sup>1</sup>お茶大・院人間文化創成科学, <sup>2</sup>お茶大・基幹研究院, <sup>3</sup>JST さきがけ  
○寺島千絵子<sup>1</sup>, 森寛敏<sup>2, 3</sup>

### Materials Informatics of compounds for Organic Light Emitting Diode with high-color purity

○Chieko Terashima<sup>1</sup>, Hirotooshi Mori<sup>2</sup>

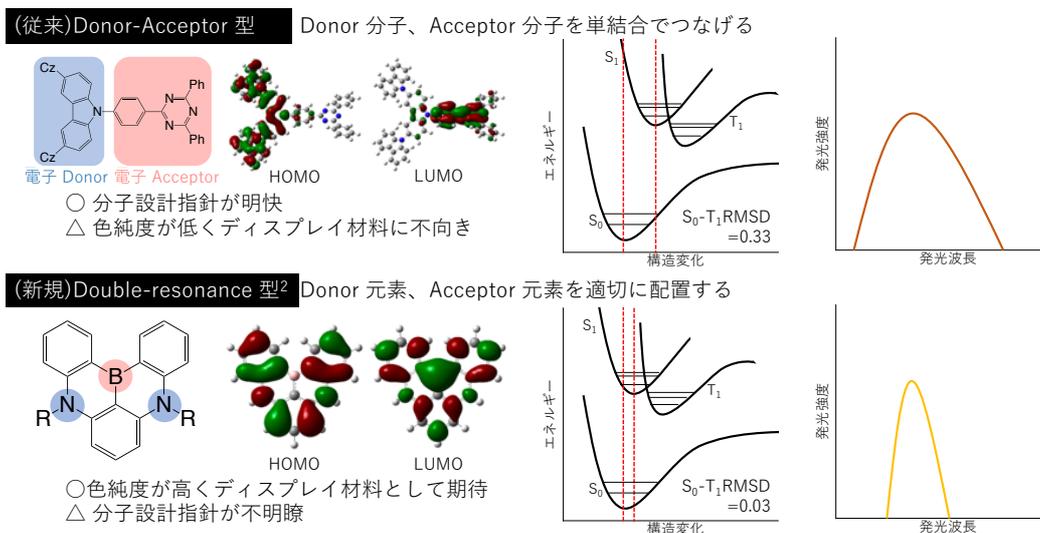
<sup>1</sup> Department of Chemistry & Biochemistry, Ochanomizu University, Tokyo, Japan

<sup>2</sup> Faculty of Core Research, Natural Science Division,  
Ochanomizu University, Tokyo, Japan

<sup>3</sup> Precursory Research for Embryonic Science and Technology programs,  
Japan Science and Technology, Japan

**【Abstract】** Organic light emitting diode (OLED) is known to have advantages to make a display, e.g. thin structure, lightweight, fast response, and high contrast. Adachi *et al.* at Kyushu Univ., Japan, have introduced an idea to utilize thermally activated delayed fluorescence (TADF) for OLED [1]. Since TADF materials do not need any heavy metal, TADF materials have attracted many researchers' interest. However, TADF materials has been considered not to suitable for developing OLED display because of its low-color purity. The object of our study is to search a new class of TADF-OLED materials with high-color purity. Recently, Hatakeyama *et al.* reported a novel design of TADF-OLED with high-color purity using doubly resonance electronic structure [2]. In this poster, we will introduce a strategy for finding doubly resonance TADF-OLED molecules by Materials Informatics.

**【序】**有機 EL デバイスの発光特性の改良において、発光層における内部量子効率を向上することは重要課題である。発光層に用いる材料分子として、電気励起により生成される励起子のうち、75% を占める T<sub>1</sub> 励起子を、重元素を用いずに発光エネルギーとして取り出せる熱活性遅延蛍光 (Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF)



**Fig. 1.** Donor-Acceptor and double resonance type TADF materials and their properties.

を起こす分子が注目されている。TADF を起こすには  $S_1$ - $T_1$  エネルギー差を縮めるため、HOMO/LUMO を分離する分子設計が必須である。これまで多く報告されてきた TADF 分子は、電子 Donor 分子と電子 Acceptor 分子を単結合でつなぐ設計指針 (Donor-Acceptor 型) で見出されてきた。この分子設計では、電子励起に伴う構造変化が大きくなることが知られている。構造変化が大きいと発光波長が幅広となり、色純度の低い発光となる。そのため、Donor-Acceptor 型の TADF 分子ではディスプレイ材料に不向きとされている。その背景下、2016 年に畠山らは Donor 元素、Acceptor 元素となるホウ素 (B)、窒素 (N) 元素を適切に置換した Double-resonance 型環状化合物 DABNA が、色純度の高い TADF 型発光を起こすことを報告した [2]。本研究ではこの報告を参考に、色純度の高い TADF 型発光を起こす分子のスクリーニングを行った。今回は、簡単な 2 環骨格を持つ分子の発光特性の検討、及びより多環な分子のスクリーニングに向けた機械学習について報告する。

**【方法】** 図 2 に一例を示したような、5, 6, 7 員環を組み合わせた 4 種類の代表的な 2 環骨格から発生させた分子群 29277 個、および 4 種類の代表的な 3 環骨格から発生させた分子群 2122762 個について検討した。まず、B3LYP, CAM-B3LYP/6-31G(d) レベルの量子化学計算で  $C_s$  対称性の縛りをかけ、 $S_0$  状態の構造最適化を行った。この時、虚数振動の見られなかった、つまりは平面構造が安定であった分子を  $\pi$  共役系分子とみなし、同レベルでの  $T_1$  状態の構造最適化、および得られた  $T_1$  安定構造における TD-B3LYP, TD-CAM-B3LYP/6-31G(d) レベルでの  $S_1$  状態の一点エネルギー計算を行った。続いて、その分子が平面構造であるか否かを予測する識別器を作成した。識別器の作成には決定木、support vector machine (SVM) の二種の手法を採用した。特徴量には元素の分布関数を用いた。



Fig. 2. Example of candidate structures

**【結果・考察】** 先行研究で報告された DABNA 分子は  $\pi$  共役系である平面構造の分子であった。また、平面構造を保つ環骨格を持つ分子は電子励起に伴う構造変化が小さく、色純度の高い発光が期待できることを確認している。そこで、ここでは分子が平面構造かの検討の結果について報告

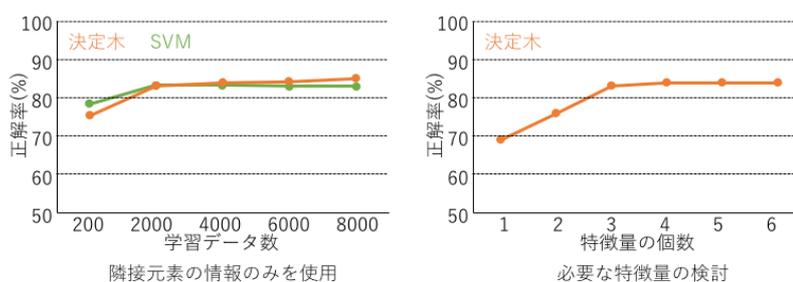


Fig. 3. Dependency of accuracy to the number of data learned (left) and descriptor (right)

する。元素分布の内、隣接元素の情報の特徴量として用いた識別器、また、特徴量の必要範囲を検証した。その結果、用いていた 6 つの特徴量のうち、重要なものから NN, BB, CB 結合に関する 3 つの特徴量のみで十分正解率が収束していることが分かった。発表では、TADF 発光に関わる  $S_1$ - $T_1$  エネルギー差の予測についても報告する。

### 【参考文献】

[1] H. Uoyama et al. *Nature* 492, 2012, 234-240. [2] T. Hatakeyama et al. *Adv. Mater.* 28, 2016, 2777-2781.

### 【謝辞】

本研究は、TSUBAME 若手・女性利用者支援制度の支援を受けて推進いたしました。ここに感謝いたします。