

电子结构注入网络预测发光效率

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/33493.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

电子结构注入网络预测发光效率。导读

2024年诺贝尔化学奖得主提出的革命性方案AlphaFold展示了人工智能模型在学习分子几何结构特征上的卓越性能，为高通量生命科学研究提供了强有力的支持。在有机发光二极管(OLED)领域，随着对高性能发光材料的需求日益增长，在探索新材料时需要更好的方法来评估这些材料的发光性能，尤其是它们的光致发光量子产率(PLQY)等关键属性。目前，大多数用于预测分子性质的深度学习方法主要依赖于几何结构，忽视了决定发光过程的关键电子结构。这种局限性使得在OLED领域实施基于人工智能的大规模材料筛选变得困难。因此，亟需建立更符合材料原理的模型，以支持人工智能的进一步应用。

为了应对这一挑战，来自吉林大学王悦教授团队和季华实验室的毕海研究员团队在Light: Science Applications上共同发布了一项新的研究成果，题为Frontier molecular orbital weighted model based networks for revealing organic delayed fluorescence efficiency。

研究中介绍了一种新的深度学习模型--电子结构注入网络(Electronic Structure Infused Network, ESIN)。ESIN将分子几何结构和电子结构数据相结合，通过引入前线分子轨道(FMOs)理论大幅提升了模型的预测准确性和机理可解释性。特别设计的注意力机制专注于最高占据分子轨道(HOMO)、最低未占据分子轨道(LUMO)及二者紧邻的分子轨道，能有效识别这些电子轨道间的相互作用模式，对于理解和解释材料分子关键特性显示出较强能力。在高通量选候选材料的过程中，ESIN展现了对TADF材料核心属性的准确预测能力。这项技术不仅标志着在建立新型材料分子电子结构模型上的一个重要里程碑，也为推动OLED材料领域的智能革新提供了新的思路。

随着有机发光二极管(OLED)在显示和照明技术中的广泛应用，高效有机热激活延迟荧光(TADF)材料的需求日益增长。TADF材料的性能很大程度上取决于其供体-受体(D-A)结构。D-A结构中的能级差异及电荷转移效率直接影响TADF材料的光致发光量子产率(PLQY)。因此，抓住D-A空间结构信息并深入理解其电子结构，对于筛选和设计高效TADF材料至关重要。

前线分子轨道可解释模型

前线分子轨道能够有效描述OLED材料的电子结构，提供了关于分子内电子分布和能级的关键信息，对于预测和解释材料的光电性能至关重要。为此，ESIN提出了一种基于前线分子轨道理论的供体-受体(D-A)结构采样方法，通过指定D-A结构的位置，确保模型能够处理不同大小的TADF分子。ESIN提取这些分子轨道的几何和电子结构特征，实现对TADF分子的高效表征和发光性能的准确评估。这一方法聚焦于关键信息，减少无关干扰，从而在有限的数据集下训练出能够

快速筛选高效TADF材料的深度学习模型。

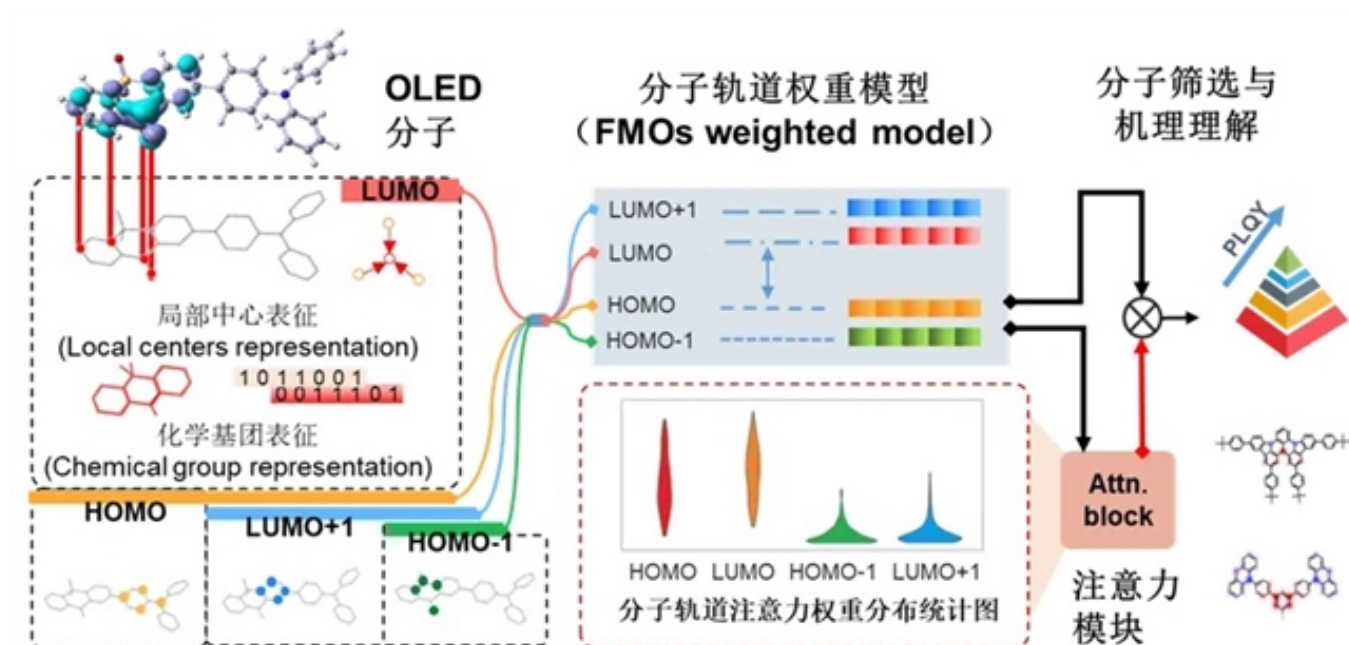


图1：整个网络的示意图，包括FMOs相应子结构的嵌入生成及其化学性质解释

研究团队在TADF数据稀缺的情况下收集了一个真实实验结果数据集。数据来自最近报道的TADF分子（见图2），主要包含TADF材料的掺杂薄膜实验结果。通过使用该数据集进行消融研究，研究发现将电子结构表征纳入模型显著提高了预测准确性，使TADF材料的筛选更加高效。这一发现进一步揭示了在模型中整合几何和电子结构信息的重要性。

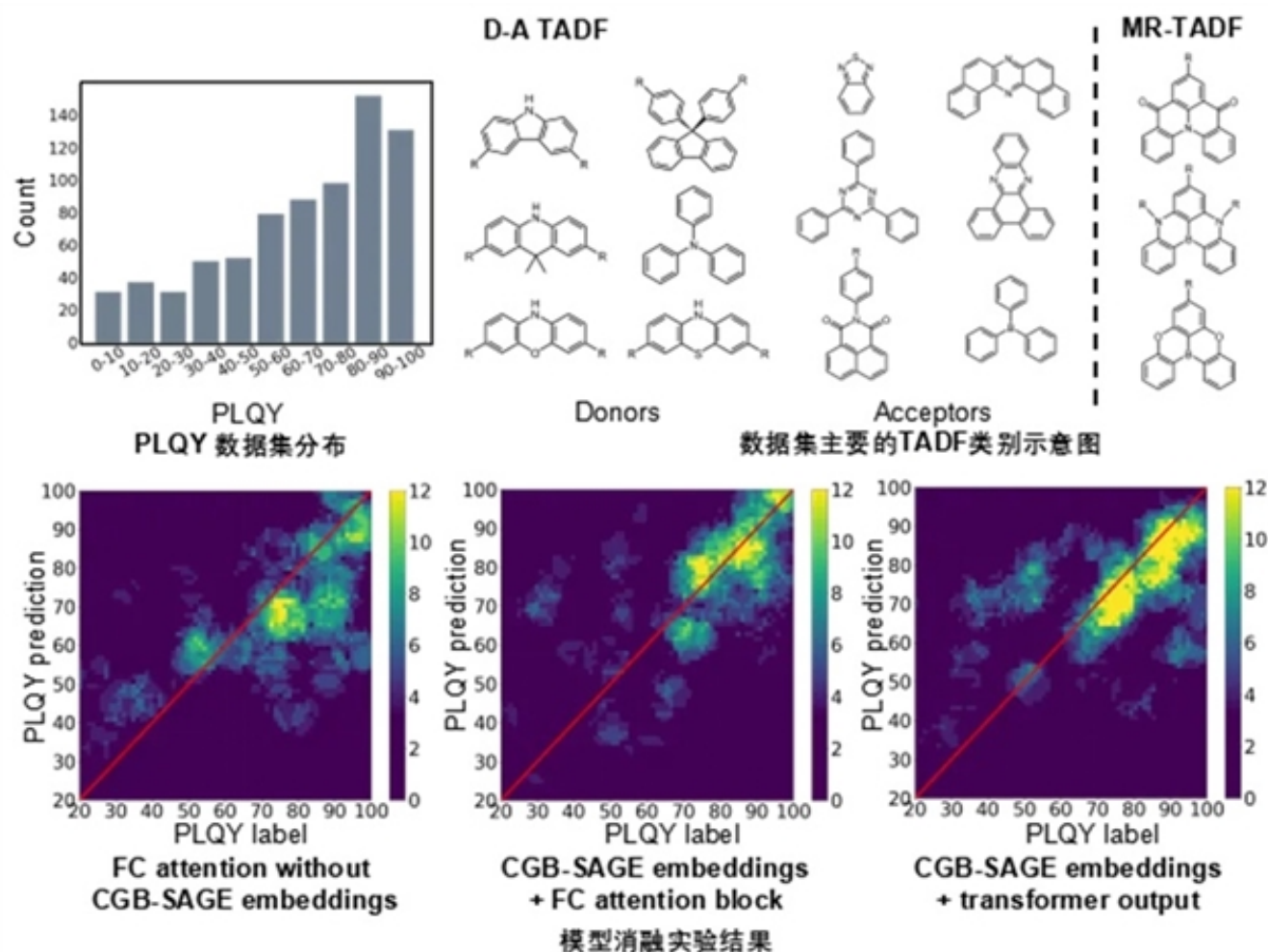


图2：实验数据集和不同ESIN变体的结果

基于分子轨道的注意力权重的分子设计启发

注意力机制在深度学习中被广泛用于提升模型的性能和可解释性。通过动态分配不同的注意力权重（Attention weights），注意力机制能够突出输入数据中的关键部分。ESIN模型引入了注意力机制，重点关注HOMO和LUMO轨道，这些轨道主要决定了TADF材料的PLQY。此外，HOMO、LUMO、HOMO-1和LUMO+1轨道的综合效应影响了发光过程。对于特定的TADF系统，注意力权重的分布表现出明显的规律。基于这些权重分布，可以通过调整与前线分子轨道对应的功能基团来设计目标系统的发光性质。

研究团队通过ESIN模型成功筛选并合成了两种新的喹喔啉基受体分子--DPQ-DPAC和DPQCN-DPAC。模型准确预测了这两种分子的PLQY值，实验结果与预测高度一致，验证了ESIN模型的有效性和可解释性。这一成果不仅证明了ESIN能够准确预测TADF材料的发光性能还为探索高PLQY的TADF分子提供了新的途径。

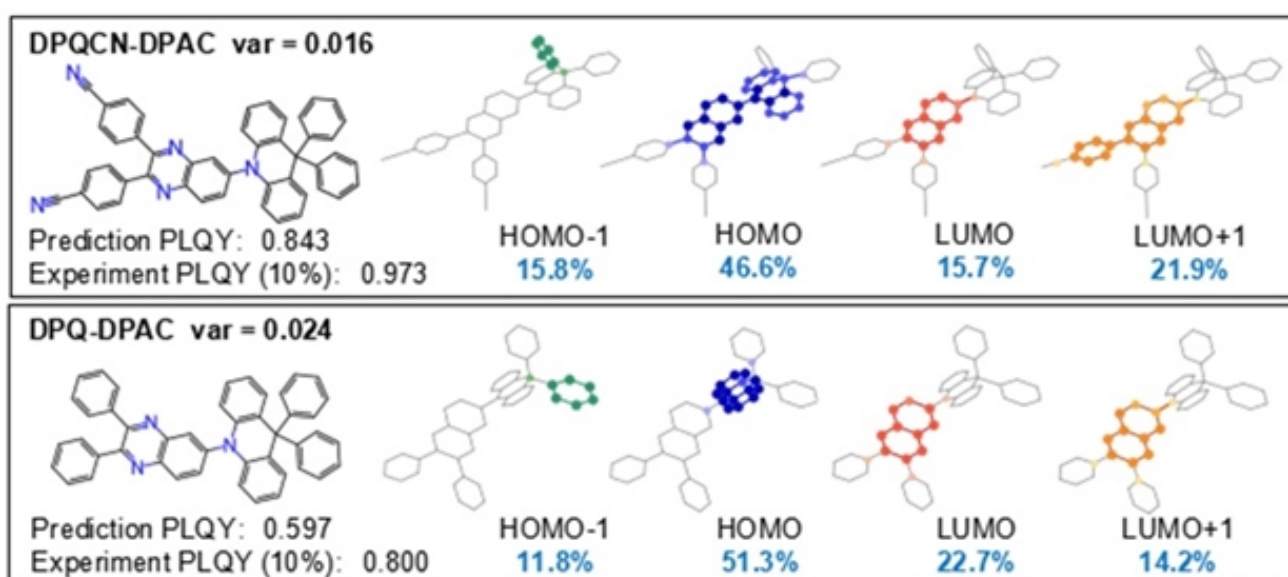
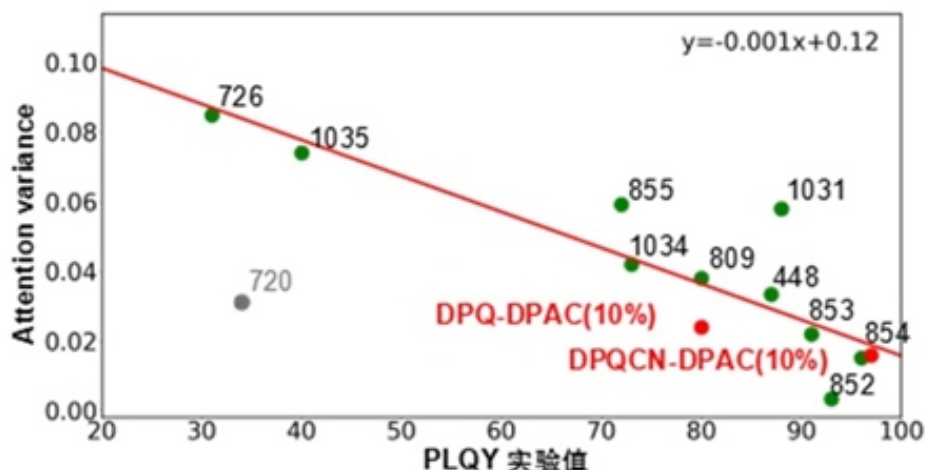
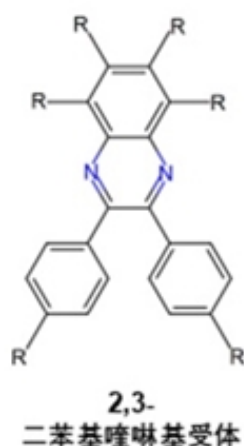


图3：相应轨道注意力权重方差与实验PLQY之间的散点图与合成的DPQ-DPAC和DPQCN-DPAC分子

总结与展望

本文构建的模型ESIN通过创新的D-A结构采样方法和注意力机制，不仅能够高效表征TADF分子的电子结构，显著提高了对TADF材料光致发光量子产率（PLQY）的预测准确性和可解释性，还为优化TADF材料设计提供了新的途径。未来，随着更多数据的积累和技术的进步，ESIN有望成为TADF材料研究和开发的重要工具，推动OLED技术的进一步发展。（来源：中国光学微信公众号）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41377-024-01713-w>

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性；如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“来源”，并自负版权等法律责任；作者如果不希望被转载或者联系转载稿费事宜，请与我们联系。

作者：王悦等 来源：《光：科学与应用》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发