(12) 按照专利合作条约所公布的国际申请

(19) 世界知识产权组织
国 际 局

(43) 国际公布日
2024 年 1 月 25 日 (25.01.2024)

WIPO | PCT

(10) 国际公布号
WO 2024/016249 A1

(51) 国际专利分类号:
H01L 51/50 (2006.01)

(21) 国际申请号: PCT/CN2022/106974

(22) 国际申请日: 2022 年 7 月 21 日 (21.07.2022)

(25) 申请语言: 中文

(26) 公布语言: 中文

(71) 申请人: 北京大学深圳研究生院(**PEKING UNIVERSITY SHENZHEN GRADUATE SCHOOL**) [CN/CN]; 中国广东省深圳市南山区西丽街道深圳大学城北京大学深圳研究生院G栋, Guangdong 518055 (CN)。

(72) 发明人:孟鸿(**MENG, Hong**); 中国广东省深圳市南山区西丽街道深圳大学城北京大学深圳研究生院G栋, Guangdong 518055 (CN)。 吴李杰(**WU, Lijie**); 中国广东省深圳市南山区西丽街道深圳大学城北京大学深圳研究生院G栋, Guangdong 518055 (CN)。 商一凡(**SHANG, Yifan**); 中国广东省深圳市南山区西丽街道深圳大学城北京大学深圳研究生院G栋, Guangdong 518055 (CN)。 贺耀武(**HE, Yaowu**); 中国广东省深圳市南山区西丽街道深圳大学城北京大学深圳研究生院G栋, Guangdong 518055 (CN)。 邝常春(**KUANG, Changchun**); 中国广东省深圳市南山区西丽街道深圳大学城北京大学深圳研究生院G栋, Guangdong 518055 (CN)。 张鑫康(**ZHANG, Xinkang**); 中国广东省深圳市南山区西丽街道深圳大学城北京大学深圳研究生院G栋, Guangdong 518055 (CN)。 马滢(**MA, Ying**); 中国广东省深圳市南山区西丽街道深圳大学城北京大学深圳研究生院G栋, Guangdong 518055 (CN)。 严浩(**YAN, Hao**); 中国广东省深圳市南山区西丽街道深圳大学城北京大学深圳研究生院G栋, Guangdong 518055 (CN)。 孟智敏(**MENG, Zhimin**); 中国广东省深圳市南山区西丽街道深圳大学城北京大学深圳研究生院G栋, Guangdong 518055 (CN)。 尹勇明(**YIN, Yongming**); 中国广东

(54) **Title:** ORGANIC HOST MATERIAL AND LIGHT-EMITTING DEVICE

(54) 发明名称: 一种有机主体材料和发光器件

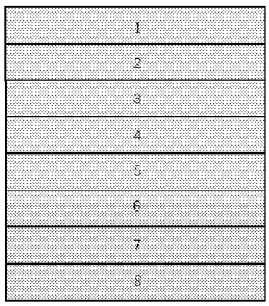
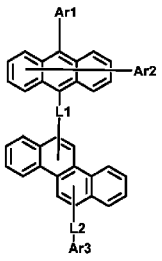


图1



aa

(57) **Abstract:** The present invention belongs to the field of organic light-emitting new materials, and particularly relates to an organic host material and a light-emitting device. A structural formula aa of the organic host material is as follows: the structure of this type of host material comprises anthracene, chrysene, other aromatic groups and the like. The host material mainly has the following advantages: the material synthesis is relatively simple and the preparation cost is low, which facilitate large-scale production; HOMOandΛYMO energy level structures of the material are proper, which facilitates injection of carriers; with anthracene and chrysene as the core, the material has high mobility, which facilitates transmission of the carriers in a light-emitting layer; and the material has a relatively high triplet state energy level, which helps to limit exciton energy into a light-emitting guest molecule.

(57) 摘要: 本发明属于有机发光新材料领域，具体涉及一种有机主体材料和发光器件。其结构式aa如下：这类主体材料结构含蒽和菫两个单元，同时含有其它芳香基等，主要具有以下优势：材料合成较为简单，制备成本低，有利于大规模生产；材料的HOMO与ΛYMO能级结构合适，有利于载流子的注入；材料以蒽和菫为核心，迁移率高，有利于载流子在发光层中传输；材料具有较高的三线态能级，有利于将激子能量限制在发光的客体分子中。

WO 2024/016249 A1

[见续页]

省深圳市南山区西丽街道深圳大学城北京大学深圳研究生院G栋, Guangdong 518055 (CN)。

(74) 代理人: 深圳市顺天达专利商标代理有限公司 (**SHENZHEN STANDARD PATENT & TRADEMARK AGENT LTD.**); 中国广东省深圳市福田区深南大道7008号阳光高尔夫大厦810-815室, Guangdong 518040 (CN)。

(81) 指定国(除另有指明，要求每一种可提供的国家保护): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW。

(84) 指定国(除另有指明，要求每一种可提供的地区保护): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 欧亚 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 欧洲 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG)。

本国际公布:
— 包括国际检索报告(条约第21条(3))。

一种有机主体材料和发光器件

技术领域

本发明涉及有机发光新材料与合成化学领域，具体涉及一种有机主体材料和发光器件。

背景技术

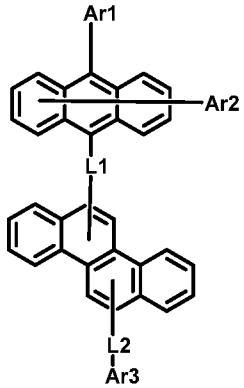
有机发光二极管（Organic Light-emitting Diodes，OLEDs）作为新一代显示技术，以其具有自发光，柔性，对比度高，省电等诸多优势，逐渐成为当下显示技术中的重要组成部分，并且受到了学术界和工业界的广泛关注。OLEDs 器件中，发光层作为关键结构，往往由客体材料和主体材料相互混合组成。其中，主体材料起到将客体材料分散的作用，防止客体分子浓度过高导致荧光猝灭。此外，主体材料还承担着载流子的传输和激子能量的传递作用。开发合适的主体材料对于 OLEDs 器件性能的提升具有重要作用。

现有的主体材料大部分采用蒽类衍生物，然而该类主体材料有一定的局限性，例如带宽不够大，三线态能级不够高，尤其是应用到深蓝光器件中，不能起到较好的能量转移作用，对器件的性能造成一定的不良影响。

发明内容

本发明针对目前主体材料不能较好将能量转移到客体材料的问题，提供一种带宽较大，高三线态能级，在器件中性能表现优异的双核类主体材料。

为了解决上述问题，本发明提供一种有机主体材料其结构式如下：



其中，Ar1 为芳香基团；L1 和 L2 彼此相同或者不同，彼此各自独立为直接键、取代或未取代的亚芳基；Ar2 为氘、氢或者芳香基团；Ar3 为氢或者芳香基团。

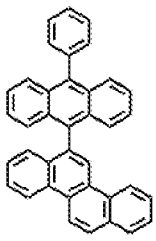
在本发明的一个实施例中，Ar1 用于调整分子堆积时的取向程度，选自如下中的一种：苯环、萘环、联苯。

在本发明的一个实施例中，Ar2 用于调整分子堆积时的取向程度和分子共轭长度，Ar2 为芳香基团时，为苯环或者萘环。

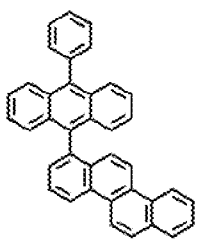
在本发明的一个实施例中，Ar3 用于增强材料的荧光强度，Ar3 为芳香基团时，选自苯环或者苯并呋喃。

在本发明的一个实施例中，L1 和/或 L2 用于调整分子的荧光强度与取向度，其为取代或未取代的亚芳基时，选自如下中的一种：苯环，菲或者苯并呋喃。

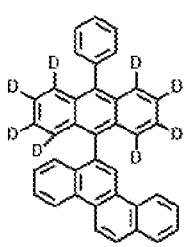
在本发明的一个实施例中，具体的，有机主体材料为以下任一种化合物：



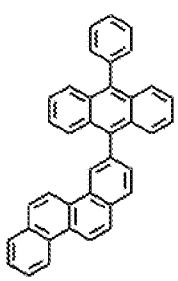
分子式 1



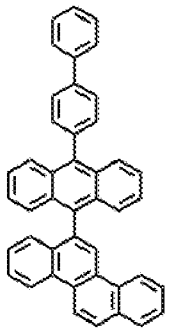
分子式 2



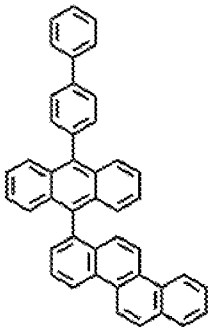
分子式 3



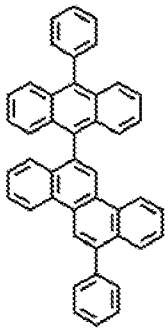
分子式 4



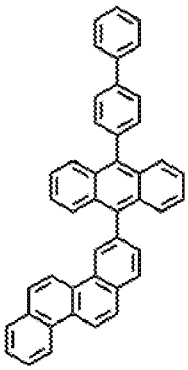
分子式 5



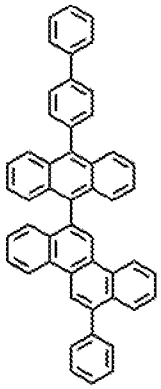
分子式 6



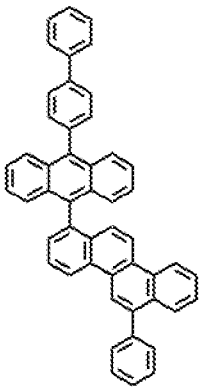
分子式 7



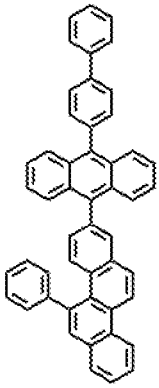
分子式 8



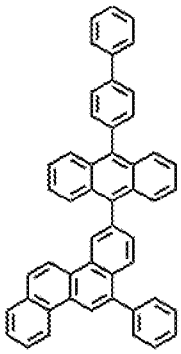
分子式 9



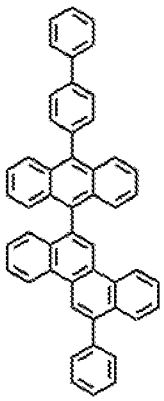
分子式 10



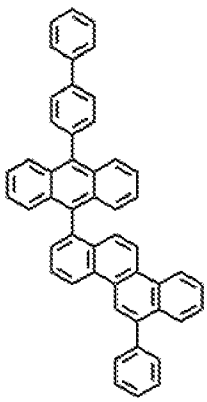
分子式 11



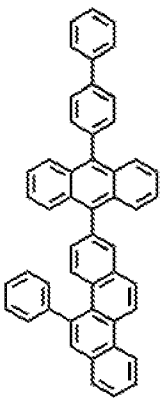
分子式 12



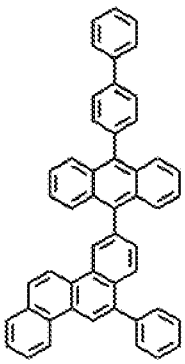
分子式 13



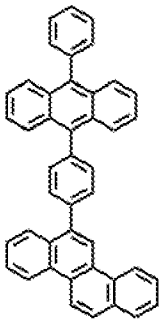
分子式 14



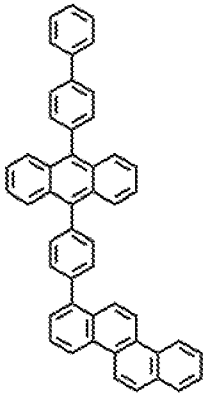
分子式 15



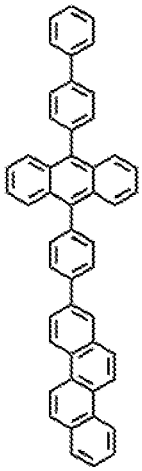
分子式 16



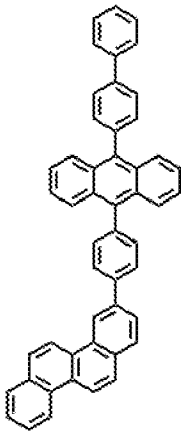
分子式 17



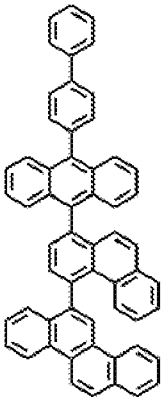
分子式 18



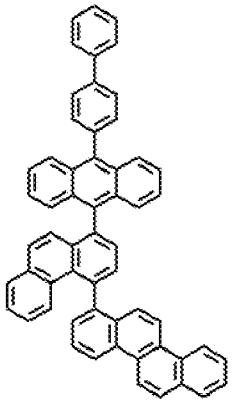
分子式 19



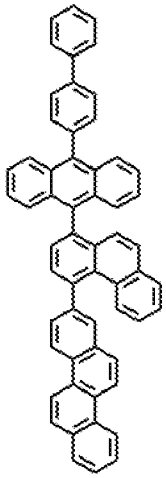
分子式 20



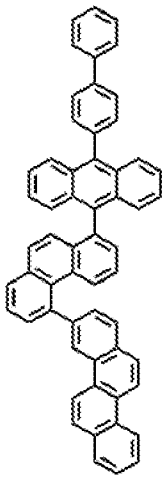
分子式 21



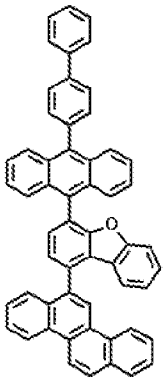
分子式 22



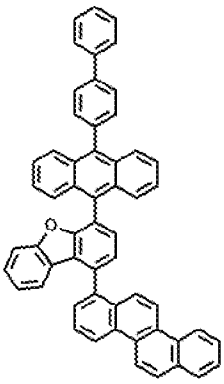
分子式 23



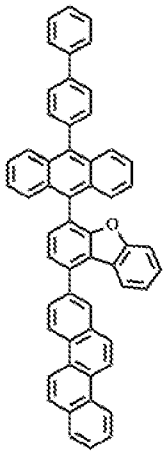
分子式 24



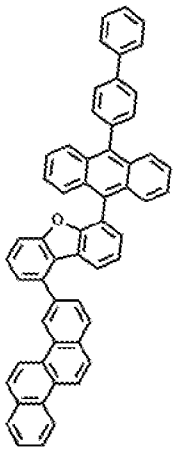
分子式 25



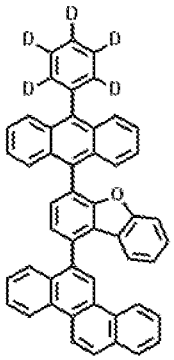
分子式 26



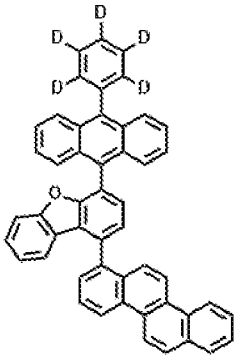
分子式 27



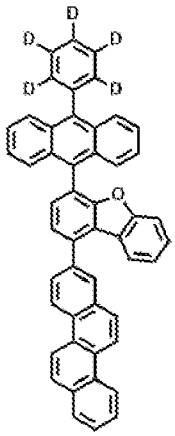
分子式 28



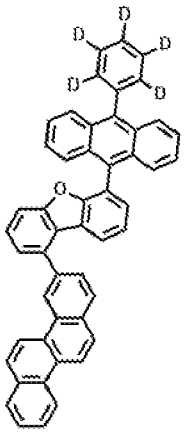
分子式 29



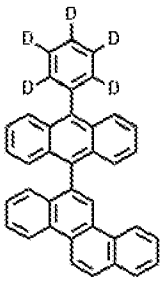
分子式 30



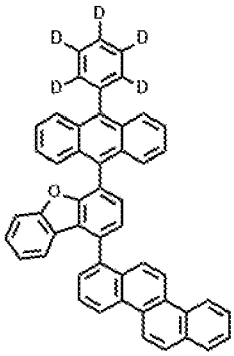
分子式 31



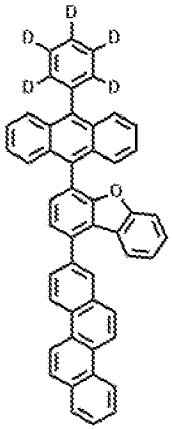
分子式 32



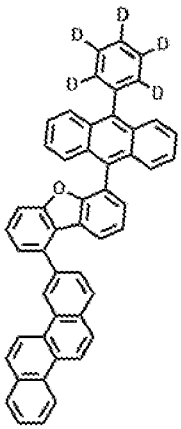
分子式 33



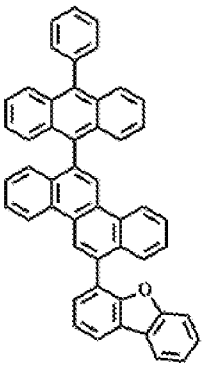
分子式 34



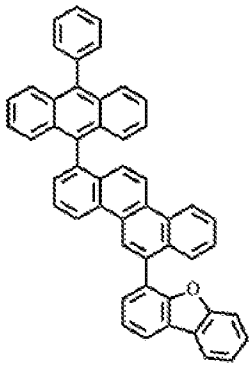
分子式 35



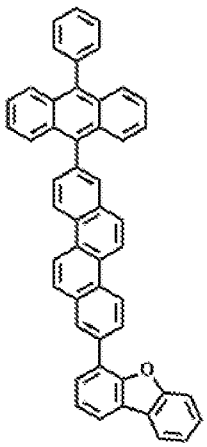
分子式 36



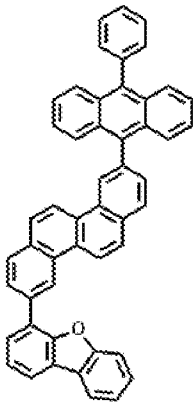
分子式 37



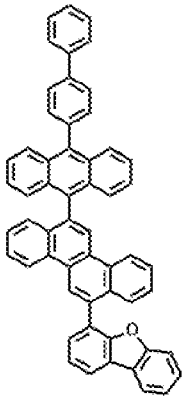
分子式 38



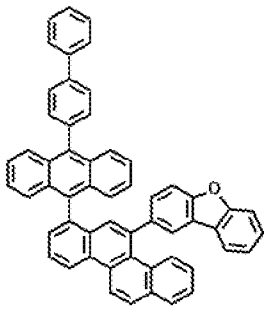
分子式 39



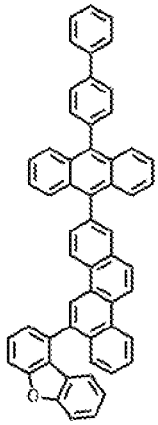
分子式 40



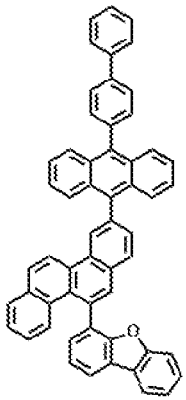
分子式 41



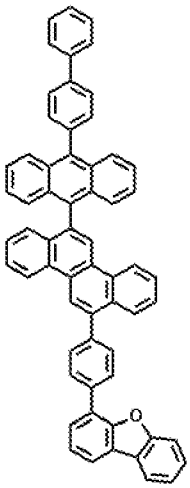
分子式 42



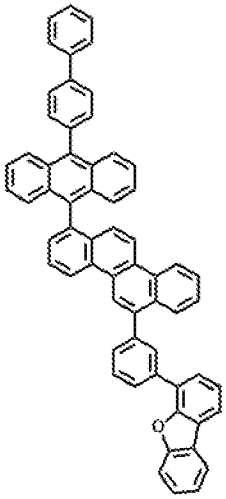
分子式 43



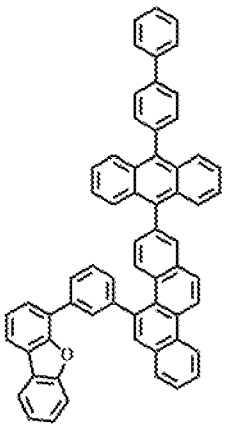
分子式 44



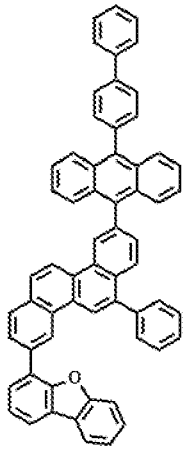
分子式 45



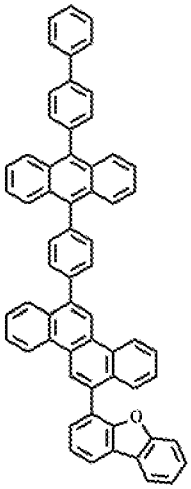
分子式 46



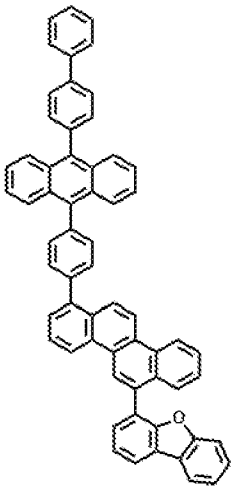
分子式 47



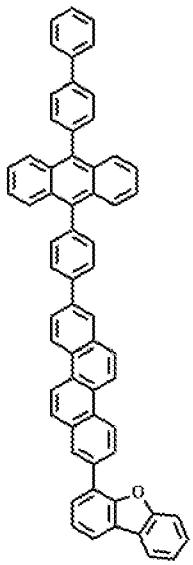
分子式 48



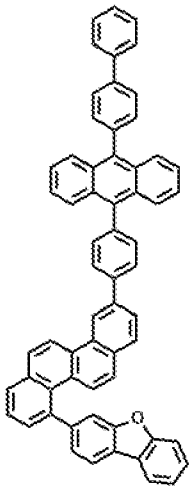
分子式 49



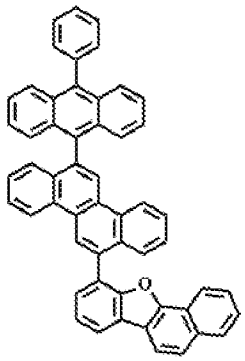
分子式 50



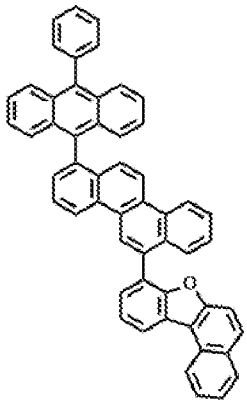
分子式 51



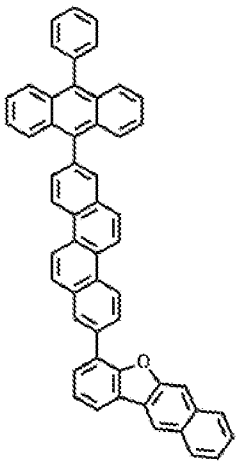
分子式 52



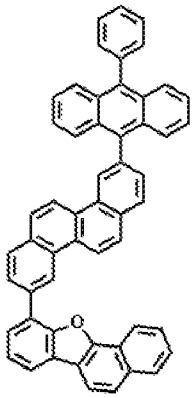
分子式 53



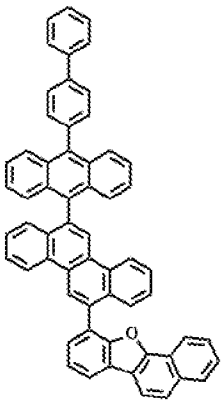
分子式 54



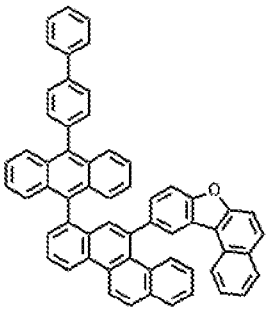
分子式 55



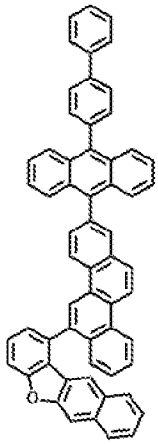
分子式 56



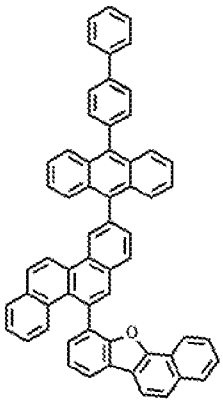
分子式 57



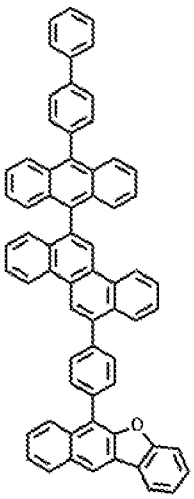
分子式 58



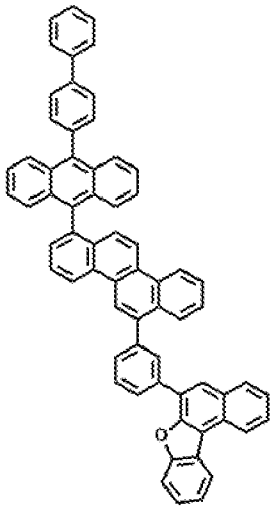
分子式 59



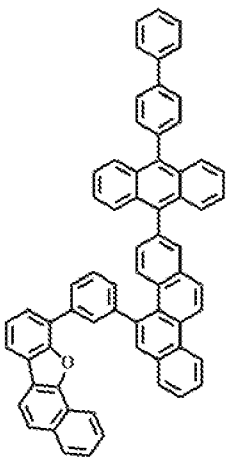
分子式 60



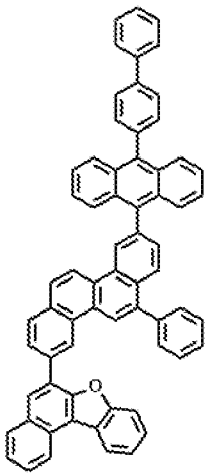
分子式 61



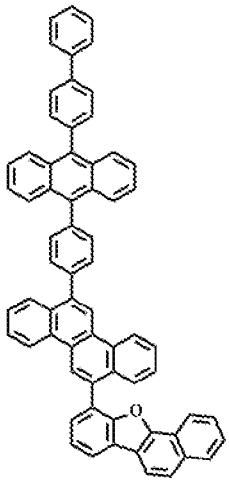
分子式 62



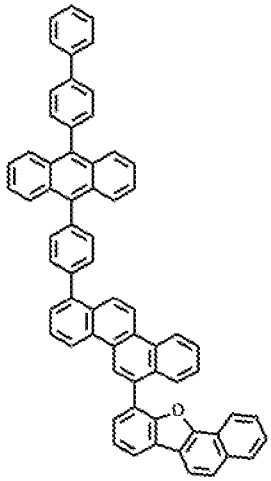
分子式 63



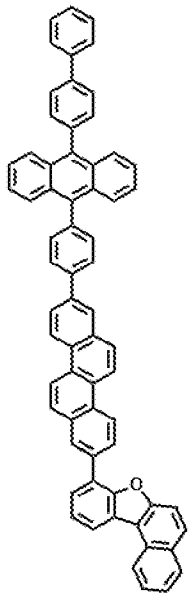
分子式 64



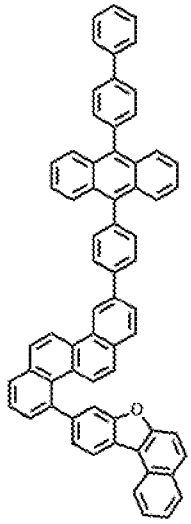
分子式 65



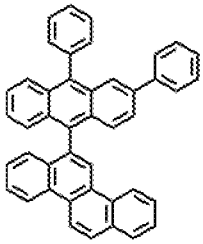
分子式 66



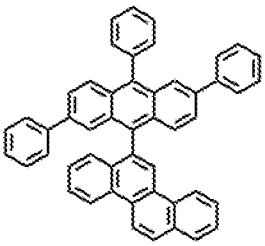
分子式 67



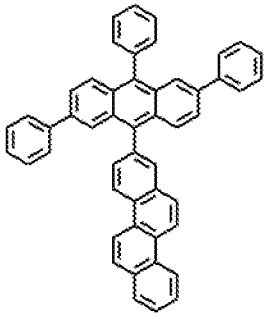
分子式 68



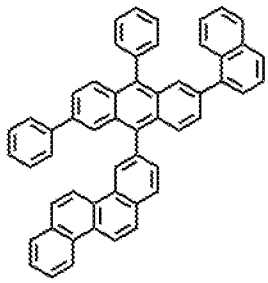
分子式 69



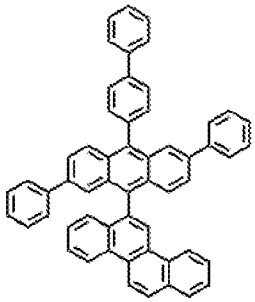
分子式 70



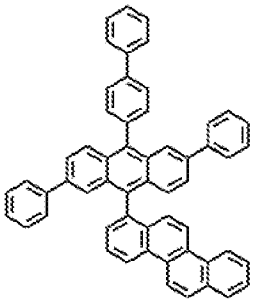
分子式 71



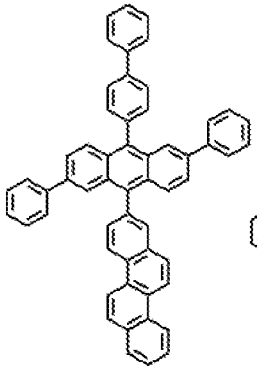
分子式 72



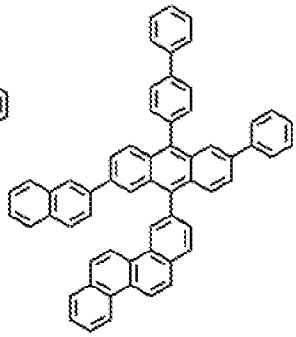
分子式 73



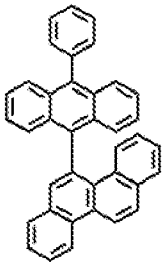
分子式 74



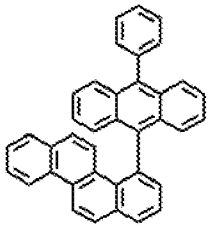
分子式 75



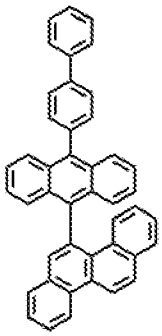
分子式 76



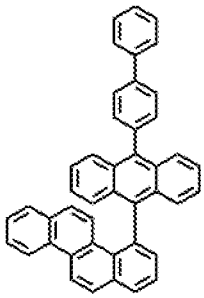
分子式 77



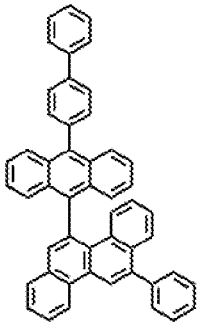
分子式 78



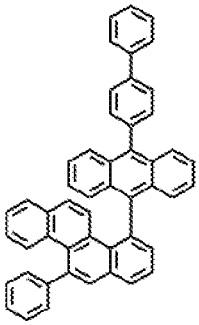
分子式 79



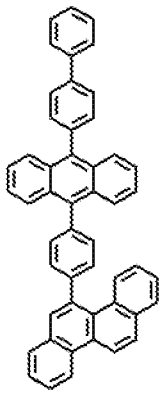
分子式 80



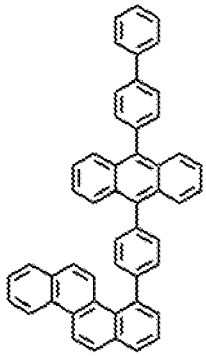
分子式 81



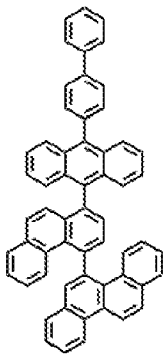
分子式 82



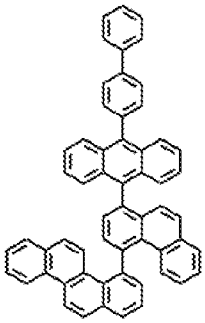
分子式 83



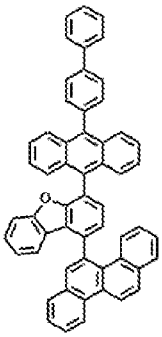
分子式 84



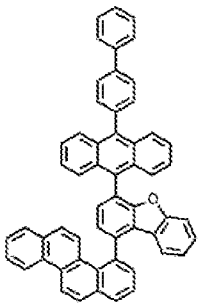
分子式 85



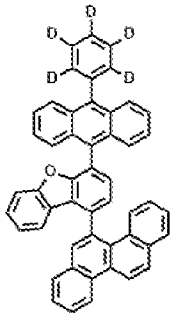
分子式 86



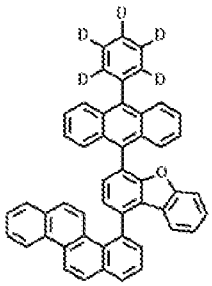
分子式 87



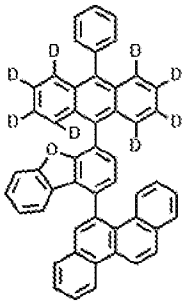
分子式 88



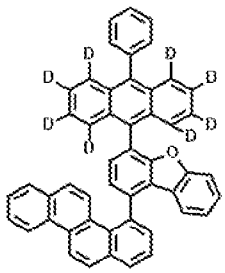
分子式 89



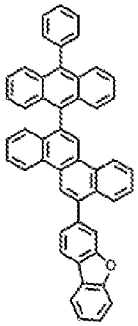
分子式 90



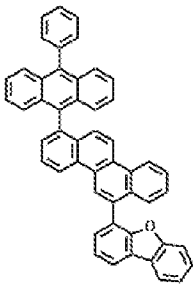
分子式 91



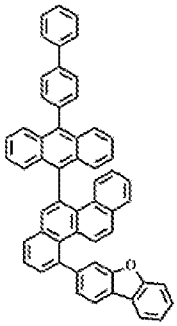
分子式 92



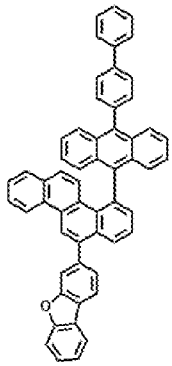
分子式 93



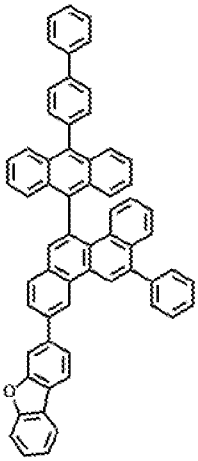
分子式 94



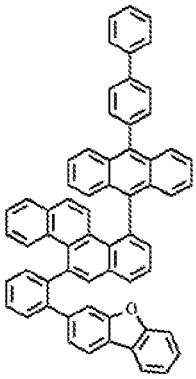
分子式 95



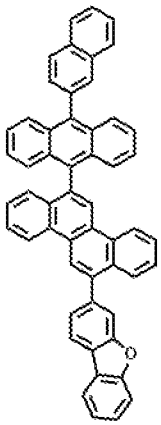
分子式 96



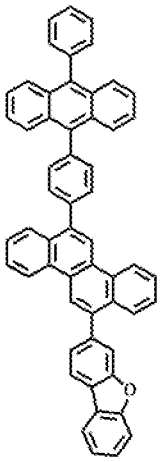
分子式 97



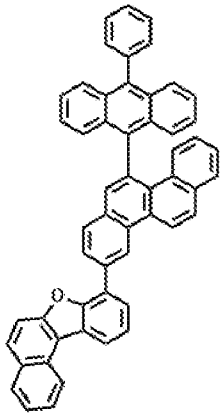
分子式 98



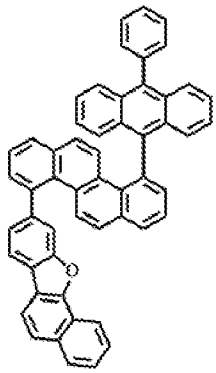
分子式 99



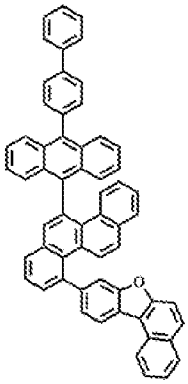
分子式 100



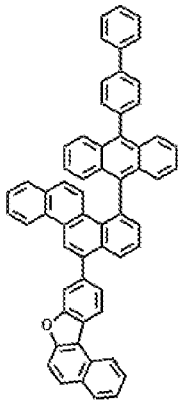
分子式 101



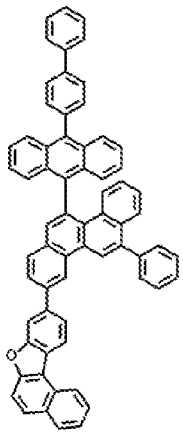
分子式 102



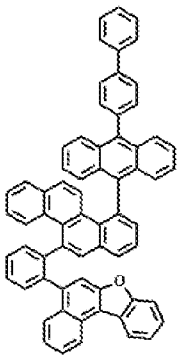
分子式 103



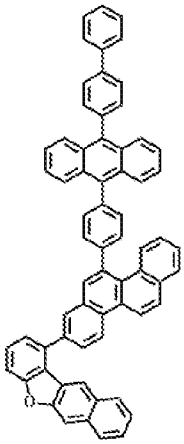
分子式 104



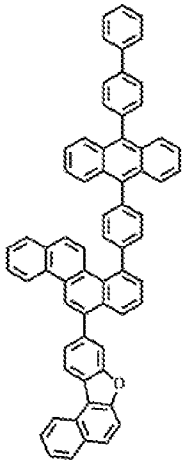
分子式 105



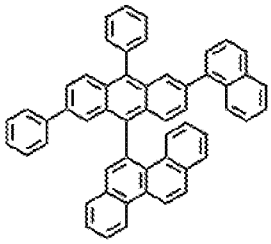
分子式 106



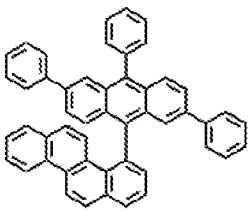
分子式 107



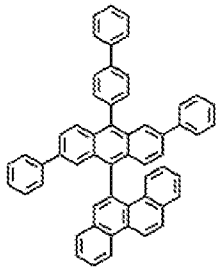
分子式 108



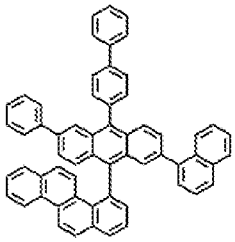
分子式 109



分子式 110



分子式 111



分子式 112

由软件Σπαρταν 20计算结果可知，材料的能级结构合适，可以作为一种主体材料。

在本发明的一个实施例中，其结构式中的氢原子可以部分或者全部为氘原子。

另一方面，本发明还提供一种有机发光器件，包括阴极、发光层、阳极，所述发光层由主体材料和客体材料共掺杂形成，所述主体材料为前述任意一项有机主体材料。

在本发明的一个实施例中，所述有机发光器件从上至下依次层叠设置的金属阴极、电子注入层、电子传输层、发光层、空穴传输层、空穴注入层、阳极以及玻璃基板，器件制备工艺为蒸镀法。

实施本发明，具有如下有益效果：本发明提供了一种由蒽与䓛相连组成的主体材料。这类主体材料结构含蒽和䓛两个单元，同时含有其它芳香基等，主要具有以下优势：材料合成较为简单，制备成本低，有利于大规模生产；材料的HOMO与ΛYMO能级结构合适，有利于载流子的注入；材料以蒽和䓛为核心，迁移率高，有利于载流子在发光层中传输；材料具有较高的三线态能级，有利于将激子能量限制在发光的客体分子中。

附图说明

图1本发明实施例中基于所制备有机电致发光器件结构示意图。

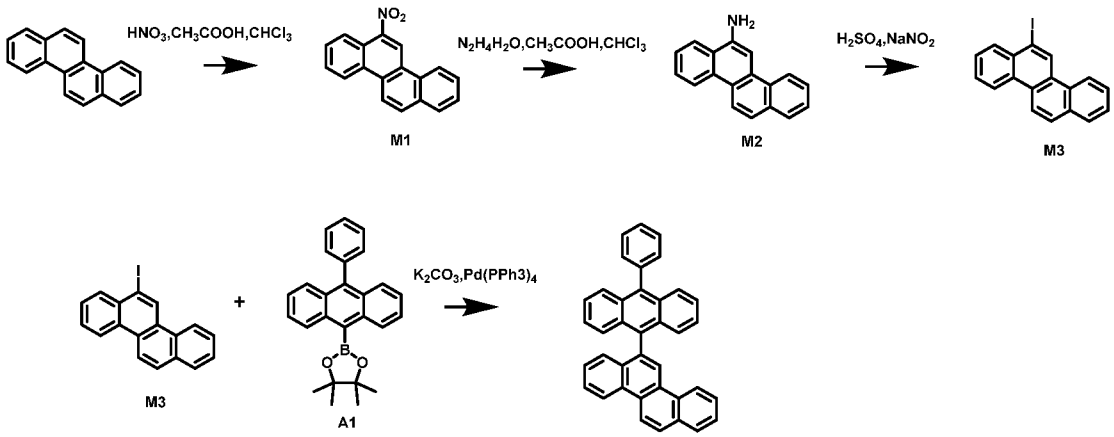
具体实施方式

下面结合附图和具体实施例对本发明的技术方案进行详细的说明，但是所述实施例的说明，仅仅是本发明的一部分实施例，其中大部分并不仅限于此。

本发明实施例中未注明具体实验步骤或条件的，按照本领域内的文献所描述的常规实验步骤或条件即可进行。所用试剂或仪器未注明生产厂商的，均为可通过市购获得的常规产品。

本发明中未提及合成方法的化合物均为通过商业途径获得的原料产品。本发明中所用溶剂和试剂均可从国内化工市场购买，另外，本领域技术人员也可以通过公知方法合成。

实施例 1



分子式 1 的合成步骤如上所示。

在 1000 mL 单口圆底烧瓶中加入萘(10.0 g,43.2 mmol)、氯仿和醋酸的混合溶剂 600 mL(体积比为 5:1),然后再逐滴加入 4.0 mL 发烟硝酸(5.6 g, 86.8 mmol),冷凝管接入尾气吸收装置,反应液在 80℃回流下搅拌 24 h,反应完全后冷却至室温,将其倾倒至 600 mL 的冰水中,加入 NaOH 将反应液 pH 调到中性,用氯仿(100 mL)萃取三次,得到的有机相用无水硫酸钠干燥,过滤,旋蒸得到粗产物 10.2 g，产率为 86%。

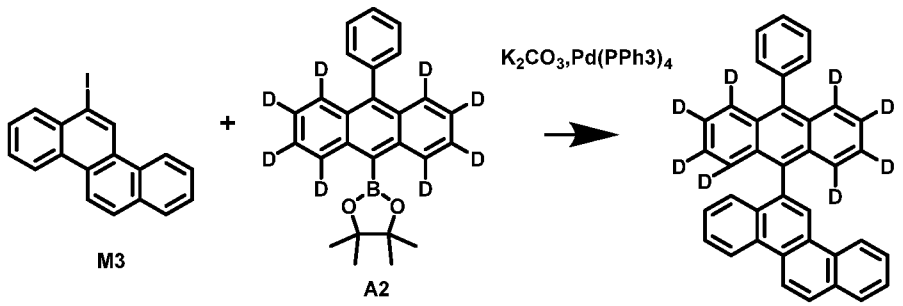
将 M1(10.0 g, 37.2 mmol)加入 500 mL 单口圆底烧瓶,用无水乙醇和 THF 300mL (体积比为 1:1)将其溶解,再加入 10.0%的 Pd/C(1.3 g, 1.2 mmol),然后加入 60.0%的水合肼(6.0 g, 74.7mmol),80℃下搅拌 1 h,除去 Pd/C 后浓缩得到粗产物,粗产物用硅胶柱进一步提纯,得 M2 固体 8.1 g,产率为 88.8%。

将三口烧瓶冰水浴冷却，向烧瓶内加入（2.43 g, 10 mmol）反应物 M2，20 mL 质量浓度为 50%的硫酸溶液，保持低温环境，搅拌成盐，0 度以下缓慢滴加 22 mmol 亚硝酸钠溶于 5 mL 水的溶液，保温 1.5h。加入 1.85 g 的 KI，室温搅拌 1h，过滤，将固体用氢氧化钠溶液溶解后，经层析柱分离，盐酸调节 pH 值到中性，过滤，滤饼风干，得产物 M3 质量 1.8 g，产率为 52%。

分子式 1 的合成 :M3(17.7 g ,50 mmol)、A1(19.0 g ,50 mmol)、$Pd(PPh_3)_4$（0.58 g，0.50 mmol）和碳酸钾（69 g，500 mmol）在氮气气氛下溶解于甲苯/乙醇/水（375/75/75 mL）中。在 100℃搅拌 15 小时后，过滤混合物，三氯甲烷萃取，水相用 100 Ml 二氯甲烷萃取三次，合并有机相，无水硫酸镁干燥，粗产物以硅胶柱层析纯化得到分子式 1 表示的化合物（16.6 g，产率 68%）。

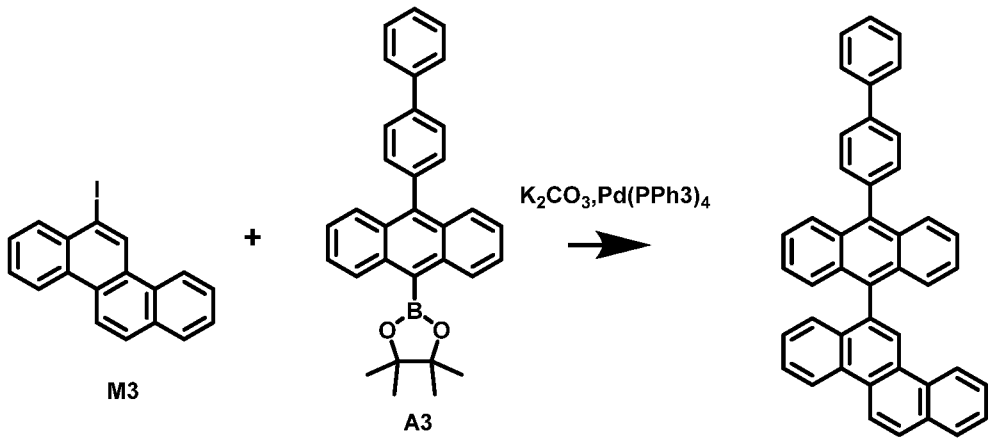
核磁数据 1H NMR (500 MHz, Chloroform-d) δ 9.63 (s, 1H), 8.34 – 8.24 (m, 4H), 8.24 – 8.15 (m, 3H), 7.87 (dt, J = 7.5, 1.5 Hz, 1H), 7.80 (dd, J = 7.6, 1.9 Hz, 1H), 7.67 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 7.64 – 7.55 (m, 4H), 7.58 – 7.46 (m, 3H), 7.49 – 7.41 (m, 6H), 7.39 – 7.32 (m, 1H).

实施例 2



分子式 3 的合成方法如实施例 1 所示 ,但是将反应物 A1 替换为氘代蒽类反应物 A2。产率 72%。核磁数据 1H NMR (500 MHz, Chloroform-d) δ 9.63 (s, 1H), 8.52 (dd, J = 7.4, 1.5 Hz, 1H), 8.25 (dd, J = 7.3, 1.6 Hz, 1H), 8.18 (dd, J = 7.4, 1.7 Hz, 1H), 7.87 (dt, J = 7.4, 1.6 Hz, 1H), 7.78 (dd, J = 7.5, 1.6 Hz, 1H), 7.66 (d, J = 7.4 Hz, 1H), 7.64 – 7.46 (m, 9H), 7.39 – 7.32 (m, 1H).

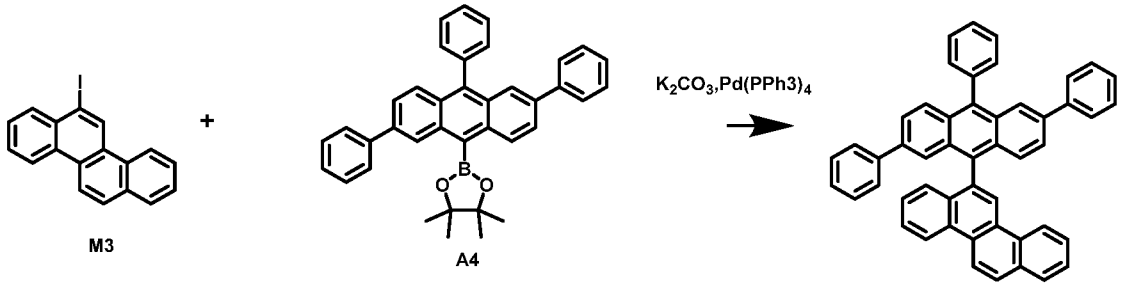
实施例 3



分子式 5 的合成方法如实施例 1 所示 ,但是将反应物 A1 替换为联苯取代的蒽类材料 A3。产率 74%。核磁数据 1H NMR (500 MHz, Chloroform-d) δ 9.63 (s, 1H), 8.38 – 8.32 (m, 1H), 8.28 (ddd, J = 7.6, 5.7, 2.9 Hz, 3H), 8.22 – 8.15 (m,

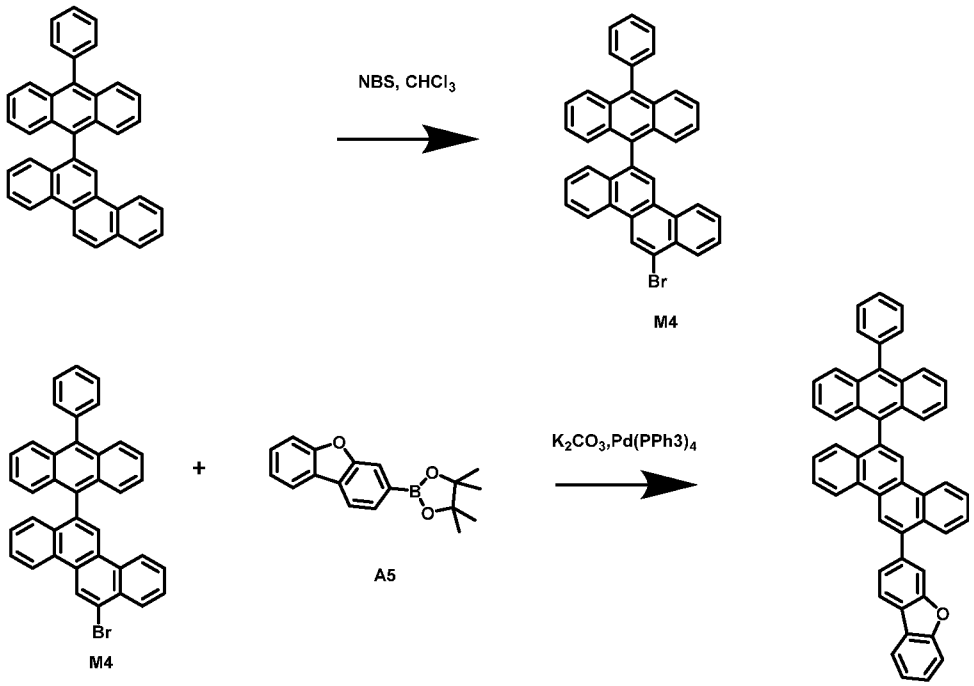
3H), 7.87 (dt, J = 7.2, 1.7 Hz, 1H), 7.81 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 1H), 7.76 – 7.70 (m, 2H), 7.68 (d, J = 7.6 Hz, 1H), 7.61 (s, 1H), 7.63 – 7.57 (m, 3H), 7.60 – 7.53 (m, 3H), 7.56 – 7.49 (m, 2H), 7.48 – 7.40 (m, 6H), 7.40 – 7.33 (m, 1H).

实施例 4



分子式 70 合成方法如实施例 1 所示，但是将反应物 A1 替换为 2，6 位苯环取代的蒽类材料 A4。产率 69%。核磁数据 1H NMR (500 MHz, Chloroform-d) δ 9.64 (s, 1H), 8.94 (dd, J = 15.0, 1.5 Hz, 2H), 8.46 (dd, J = 7.5, 2.9 Hz, 2H), 8.42 (dd, J = 7.4, 1.7 Hz, 1H), 8.30 – 8.24 (m, 1H), 8.16 (dd, J = 6.9, 2.0 Hz, 1H), 7.87 (dt, J = 7.4, 1.6 Hz, 1H), 7.78 (dd, J = 7.5, 1.5 Hz, 1H), 7.67 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 7.62 – 7.50 (m, 12H), 7.53 – 7.40 (m, 4H), 7.43 – 7.33 (m, 6H), 7.35 – 7.28 (m, 1H).

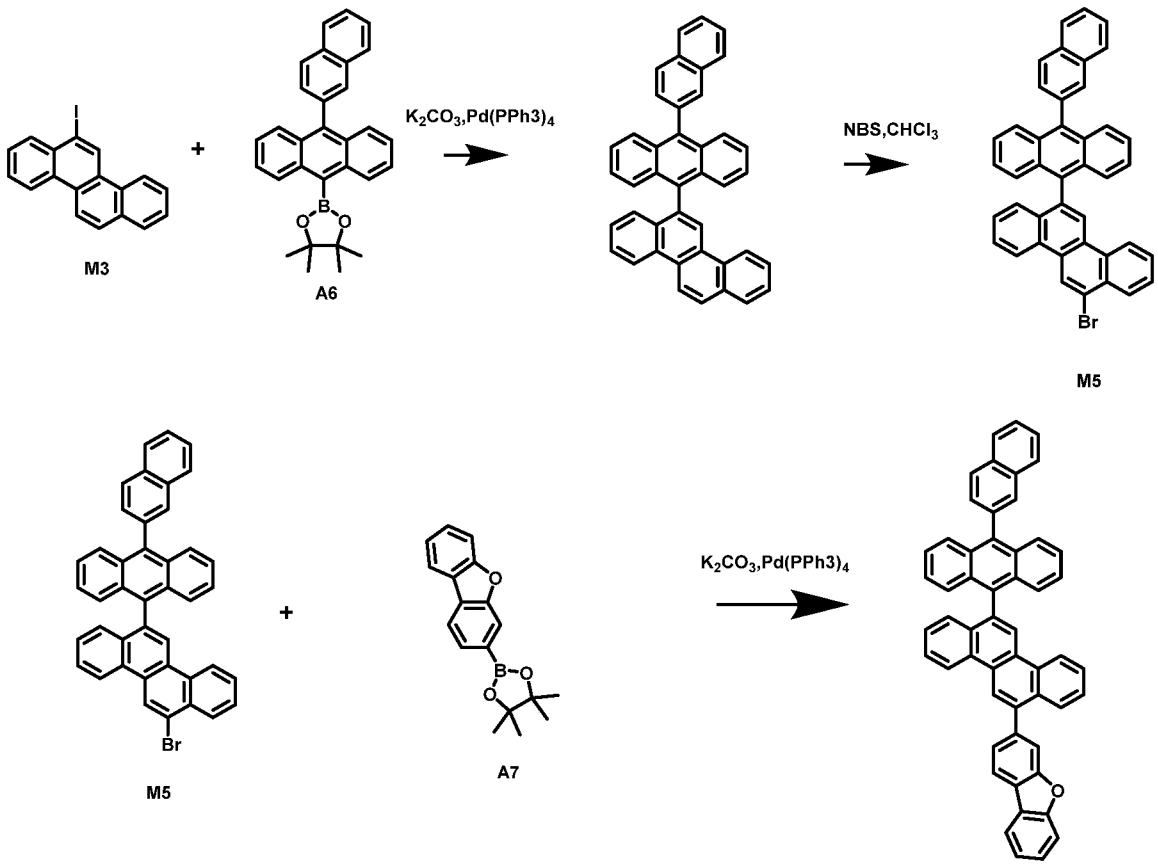
实施例 5



分子式 93 所示材料合成步骤如上述所示 ,取化学式 1 所示的材料(4.84 g, 10 mmol）和 NBS(2.1 g，12 mmol)于氯仿（ 50 mL ）搅拌 20 小时。体系降至室温后，水洗 4 次，再用无水硫酸镁干燥，粗产物用硅胶柱层析法纯化，获得产物 M4 固体 5.13 g，产率 92%。

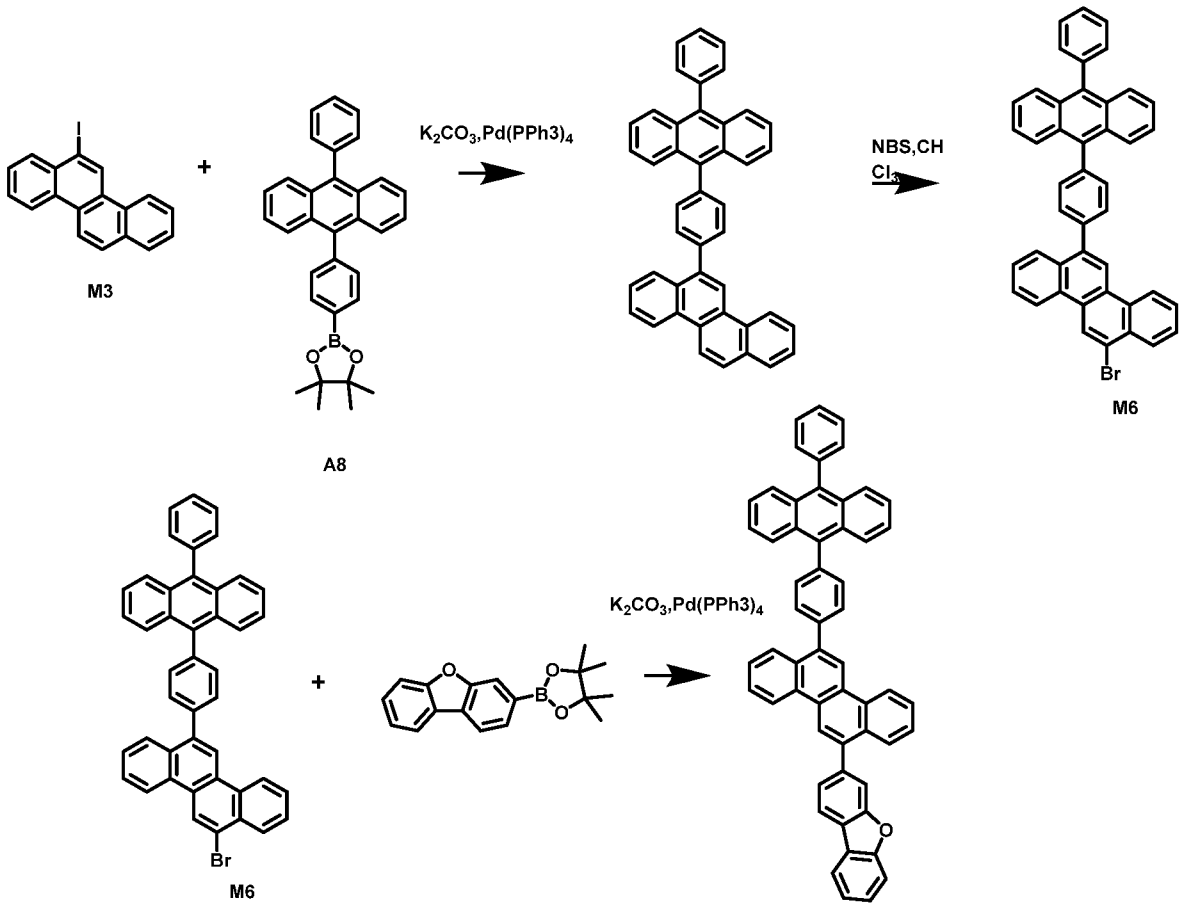
将 M4（ 5.58 g, 10 mmol ）、A5（ 2.94g，10 mmol ）、Pd(PPh3)4（ 0.10 g，0.10 mmol ）和碳酸钾（ 14 g，100 mmol ）在氮气气氛下溶解于甲苯/乙醇/水（ 75/25/25 mL ）中。在 100℃搅拌 15 小时后，过滤混合物，三氯甲烷萃取，水相用 100 mL 二氯甲烷萃取三次，合并有机相，无水硫酸镁干燥，粗产物以硅胶柱层析纯化得到分子式 93 表示的化合物（ 5.03 g，产率 78% ）核磁数据 1H NMR (500 MHz, Chloroform-d) δ 8.33 – 8.26 (m, 1H), 8.22 – 8.18 (m, 1H), 8.21 – 8.12 (m, 1H), 8.00 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 0H), 7.89 – 7.74 (m, 2H), 7.63 – 7.50 (m, 4H), 7.53 – 7.28 (m, 5H).

实施例 6



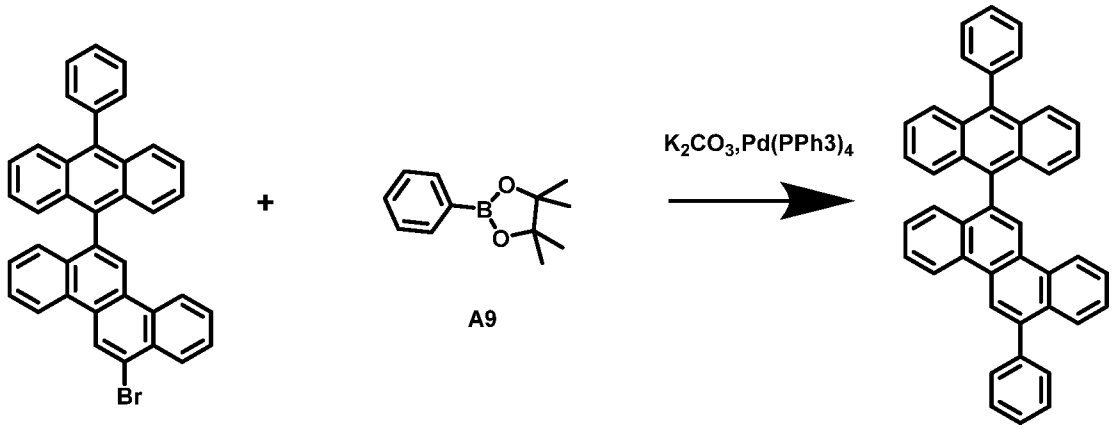
分子式 99 合成方法如实施例 1 和 5 所示。产率 67%。核磁数据 1H NMR (500 MHz, Chloroform-d) δ 8.34 – 8.27 (m, 1H), 8.23 – 8.14 (m, 2H), 8.04 (ddd, J = 26.6, 7.5, 1.5 Hz, 1H), 7.97 – 7.72 (m, 3H), 7.67 (dd, J = 7.5, 1.4 Hz, 0H), 7.63 – 7.41 (m, 6H), 7.44 – 7.34 (m, 1H).

实施例 7



分子式 100 合成方法如实施例 7 所示，其中 A6 替换为 A8。产率 74%。核磁数据 1H NMR (500 MHz, Chloroform-d) δ 9.61 (s, 0H), 8.24 – 8.15 (m, 3H), 7.84 – 7.74 (m, 2H), 7.63 – 7.51 (m, 5H), 7.50 – 7.28 (m, 4H).

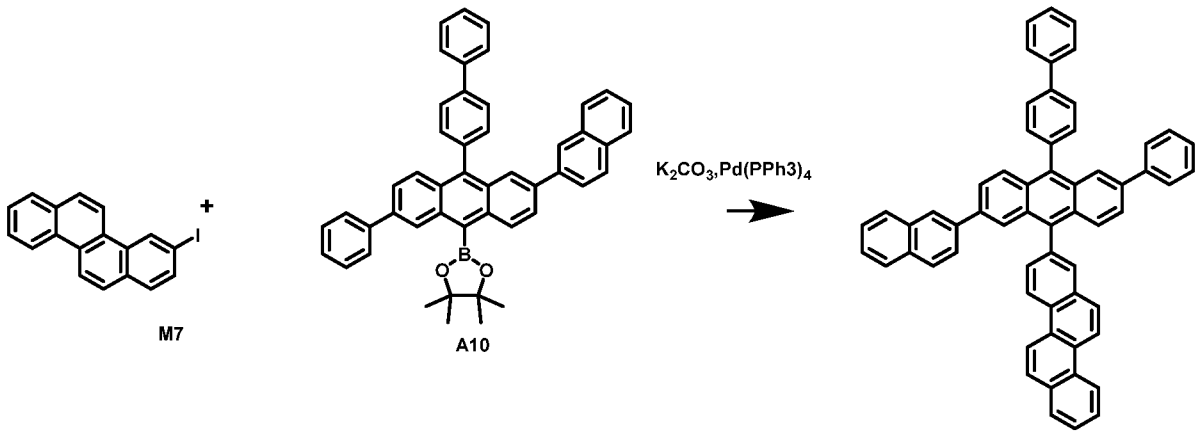
实施例 8



分子式 7 合成方法如实施例 7 所示，其中 A7 替换为 A9，产率 68%。核磁数据 1H NMR (500 MHz, Chloroform-d) δ 8.57 (s, 0H), 8.29 (dd, J = 5.6, 3.4

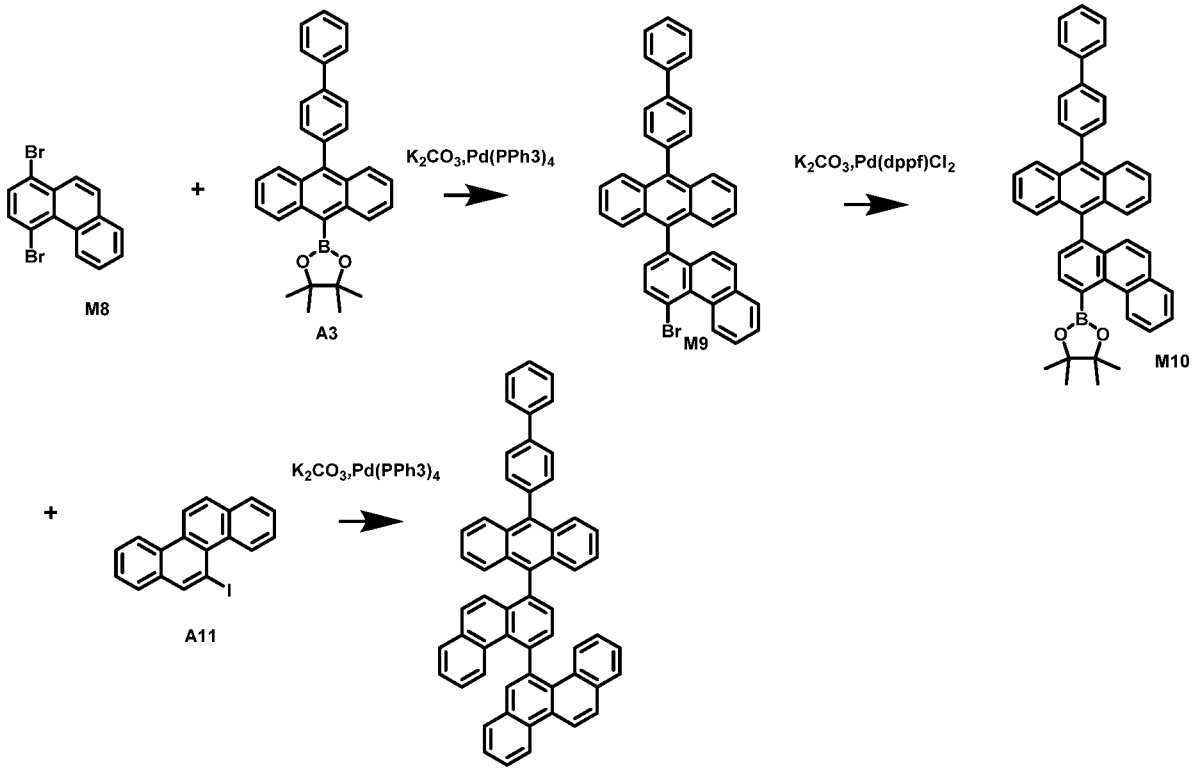
Hz, 1H), 8.24 – 8.16 (m, 2H), 7.85 – 7.76 (m, 1H), 7.61 – 7.40 (m, 8H), 7.40 – 7.31 (m, 1H).

实施例 9



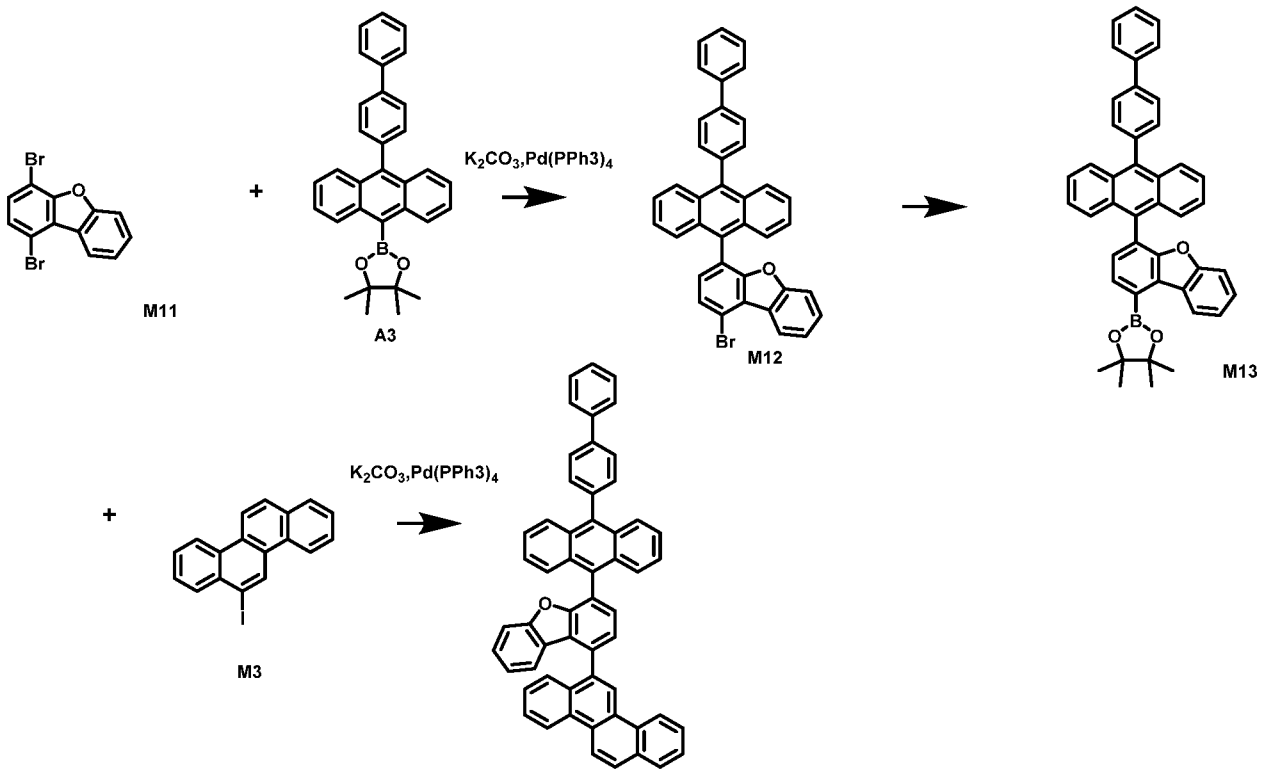
分子式 76 合成方法如实施例 7 所示，其中 M3 替换为 M7，A7 替换为 A10。产率 68%。核磁数据 1H NMR (500 MHz, Chloroform-d) δ 8.93 (dd, J = 15.6, 1.4 Hz, 2H), 8.86 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 8.81 (t, J = 1.5 Hz, 1H), 8.76 (d, J = 7.5 Hz, 1H), 8.45 (dd, J = 17.0, 7.5 Hz, 2H), 8.07 (dt, J = 7.6, 1.7 Hz, 2H), 8.00 – 7.86 (m, 6H), 7.80 – 7.73 (m, 3H), 7.71 (s, 1H), 7.69 – 7.63 (m, 3H), 7.63 (td, J = 3.8, 1.5 Hz, 2H), 7.59 (d, J = 1.4 Hz, 1H), 7.61 – 7.57 (m, 1H), 7.59 – 7.54 (m, 4H), 7.57 – 7.50 (m, 3H), 7.52 – 7.44 (m, 2H), 7.44 – 7.34 (m, 6H), 7.38 – 7.31 (m, 1H).

实施例 10



分子式 85 合成方法如实施例 7 所示，具体合成如图所示，引入了新的原料 M8 和 A11。产率 53%。核磁数据 1H NMR (500 MHz, Chloroform-d) δ 8.73 (dd, J = 7.5, 1.5 Hz, 0H), 8.31 – 8.24 (m, 1H), 8.23 – 8.15 (m, 1H), 8.09 – 8.01 (m, 1H), 7.97 – 7.88 (m, 1H), 7.91 – 7.86 (m, 1H), 7.80 (s, 1H), 7.79 – 7.72 (m, 1H), 7.70 – 7.64 (m, 2H), 7.64 – 7.56 (m, 1H), 7.59 – 7.51 (m, 3H), 7.54 – 7.48 (m, 1H), 7.48 – 7.39 (m, 2H).

实施例 11



分子式 25 合成方法如实施例 7 所示，引入了新的原料 M11。产率 42%。核磁数据 1H NMR (500 MHz, Chloroform-d) δ 8.73 (dd, J = 7.5, 1.7 Hz, 1H), 8.63 (d, J = 1.6 Hz, 1H), 8.29 – 8.22 (m, 2H), 8.22 – 8.16 (m, 2H), 8.05 (ddd, J = 12.2, 7.5, 1.6 Hz, 3H), 7.97 – 7.92 (m, 1H), 7.89 (dtd, J = 6.2, 3.2, 1.5 Hz, 2H), 7.80 – 7.72 (m, 2H), 7.70 – 7.61 (m, 4H), 7.64 – 7.57 (m, 3H), 7.56 (dd, J = 12.8, 1.6 Hz, 1H), 7.56 – 7.48 (m, 5H), 7.48 – 7.39 (m, 5H), 7.35 (td, J = 7.5, 1.5 Hz, 1H).

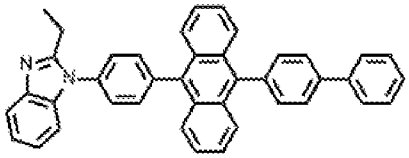
实施例 12

本发明提供了基于蒽衍类主体材料的有机发光器件，如图 1 所示，从上至下依次层叠设置的金属阴极 1、电子注入层 2、电子传输层 3、发光层 4、空穴传输层 5、空穴注入层 6、阳极 7 以及玻璃基板 8，器件制备工艺为蒸镀法。

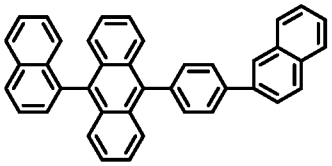
其中金属阴极选用铝，蒸镀速率为 0.1-0.3 nm/s,厚度为 100 nm；

电子注入层选用氟化锂，蒸镀速率为 0.05-0.1 nm/s 厚度为 1 nm;

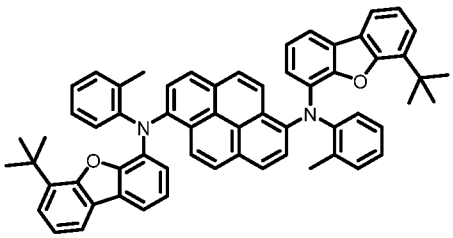
电子传输层选用具有如下结构的化合物 LET003，蒸镀速率为 0.05-0.1 nm/s, 厚度为 40 nm；



发光层由主体材料和客体材料共掺杂形成，其中主体材料选用本发明提供的主体材料和目前商业化的主体材料 LBH001 作为对比，客体材料选用具有如下结构的 LBD001，主体材料与客体材料掺杂的质量比为 90：10，蒸镀速率为 0.003-0.2 nm/s,厚度为 40 nm；

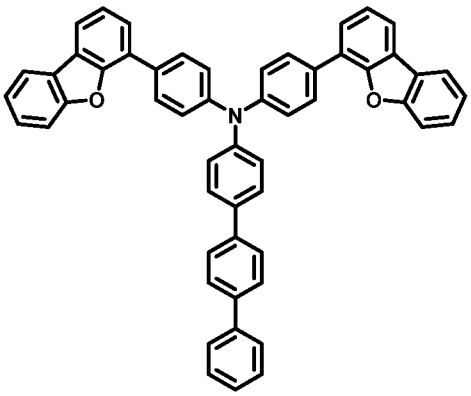


LBH001

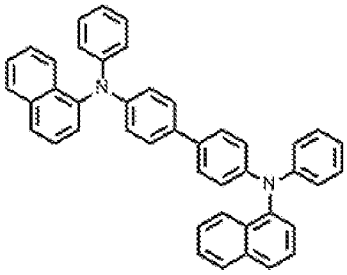


LBD001

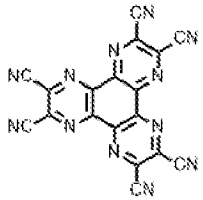
电子阻挡层选用具有如下结构的化合物 LEB001，蒸镀速率为 0.05-0.1 nm/s,厚度为 10 nm；



空穴传输层选用具有如下结构的化合物 NPB，蒸镀速率为 0.05-0.1 nm/s, 厚度为 100 nm;



空穴注入层选用具有如下结构的化合物 HATCN，蒸镀速率为 0.05-0.1 nm/s,厚度为 10 nm；



阳极 7 选用氧化铟锡。

表 1.器件性能表

器件编号	主体材料	启亮电压（V）	最大电流效率(cd/A)	色度坐标	寿命 T97（h）
D1	LBH001	4.3	7.5	0.14，0.10	70
D2	化学式 1	4.0	8.2	0.14，0.10	80
D3	化学式 3	3.7	7.6	0.14，0.09	93
D4	化学式 7	4.1	7.9	0.14，0.10	75
D5	化学式 10	4.0	7.6	0.14，0.10	75
D6	化学式 13	4.2	7.6	0.14，0.10	78
D7	化学式 22	4.0	8.0	0.15，0.10	96
D8	化学式 24	3.8	7.8	0.14，0.10	86
D9	化学式 33	4.1	7.9	0.14，0.10	84
D10	化学式 40	4.1	7.6	0.14，0.10	81

由表 1 可知，本发明提供的主体材料，与商业化材料 LBH001 相比，制备的器件具有较低的启亮电压，较高的电流效率和较长的寿命。

实施例 13

本发明通过 DFT 计算模拟的方法，通过 Spartan 20 软件，泛函为 B3LYP, 基组为 6-31G(d,p)。将本发明中的主体材料与目前商业化的材料进行对比。

表 2.计算模拟的性能数值

材料	HOMO（eV）	LUMO（eV）	能带宽度（eV）	三线态能级（eV）
LBHOO1	-5.12	-1.64	3.48	1.73
分子式 1	-5.13	-1.64	3.49	1.74
分子式 2	-5.13	-1.64	3.49	1.74
分子式 17	-5.13	-1.63	3.50	1.74
分子式 20	-5.13	-1.63	3.50	1.75
分子式 25	-5.12	-1.63	3.49	1.74
分子式 27	-5.10	-1.61	3.49	1.75
分子式 30	-5.13	-1.64	3.49	1.75
分子式 35	-5.13	-1.63	3.50	1.75
分子式 37	-5.10	-1.59	3.51	1.75

由计算数据可知，本发明提供的主体材料与商业材料 LBH001 相比，具有接近的 HOMO 和 LUMO 能级，能带宽度和三线态能级略高，说明其可以更好地用在有机发光器件中，达到更好的显示效果。

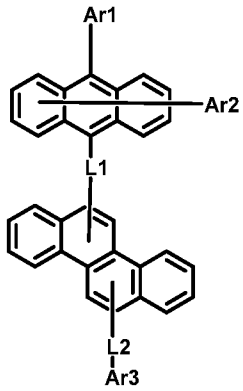
综上所述，本发明提供的主体材料应用到有机发光器件中可以有效的提高器件的性能，包括效率和工作寿命。

以上实施例进一步说明本发明的内容，但不应理解为对本发明的限制。

在不背离本发明精神和实质的情况下，对本发明方法、步骤或条件所作的修改和替换，均属于本发明的范围。若未特别指明，实施例中所用的技术手段为本领域技术人员所熟知的常规手段。

权 利 要 求 书

1、一种有机主体材料，其特征在于，其结构式如下：



其中，Ar1 为芳香基团；L1 和 L2 彼此相同或者不同，彼此各自独立为直接键、取代或未取代的亚芳基；Ar2 为氘、氢或者芳香基团；Ar3 为氢或者芳香基团。

2、根据权利要求1所述的有机主体材料，其特征在于，Ar1 用于调整分子堆积时的取向程度，选自如下中的一种：苯环、萘环、联苯。

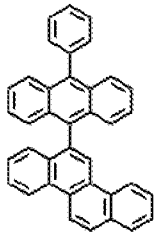
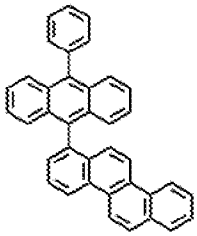
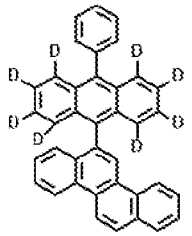
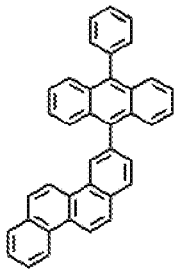
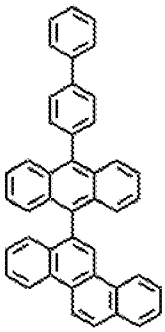
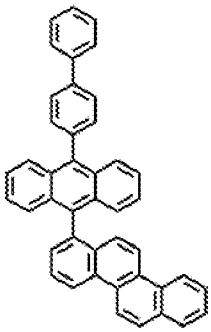
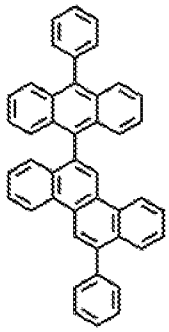
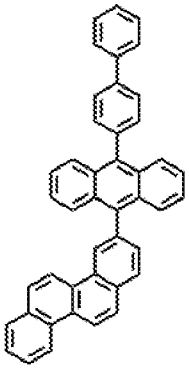
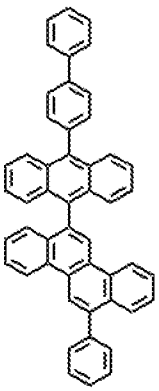
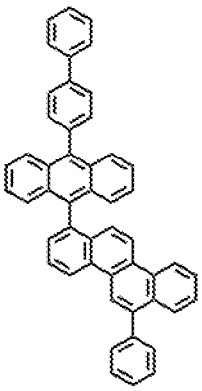
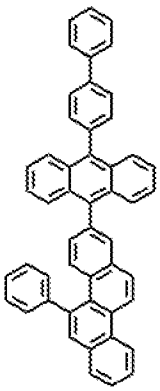
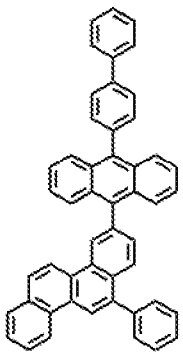
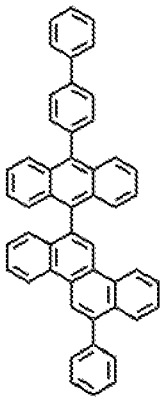
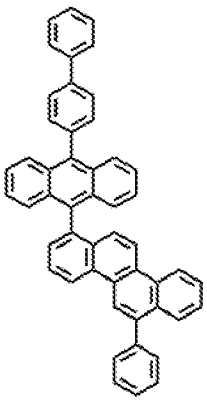
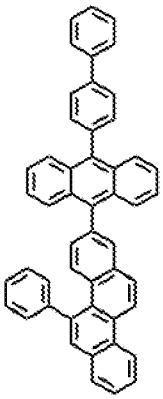
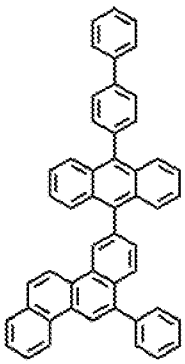
3、根据权利要求1所述的有机主体材料，其特征在于，Ar2 用于调整分子堆积时的取向程度和分子共轭长度，Ar2 为芳香基团时，为苯环或者萘环。

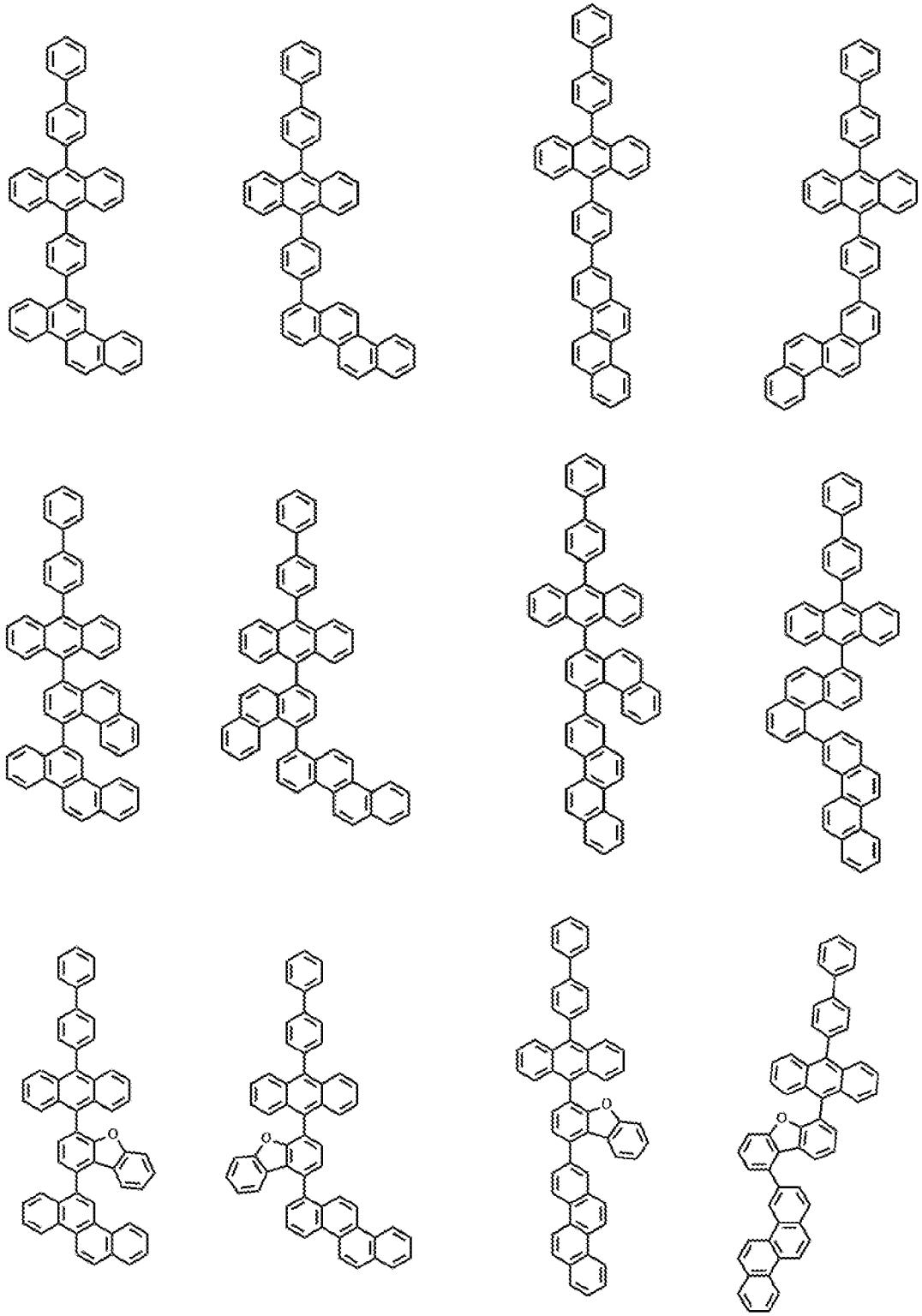
4、根据权利要求1所述的有机主体材料，其特征在于，Ar3 用于增强材料的荧光强度，Ar3 为芳香基团时，选自苯环或者苯并呋喃。

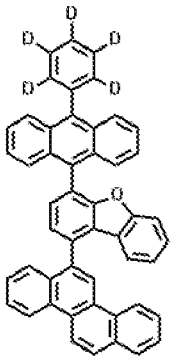
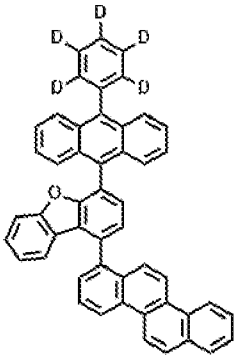
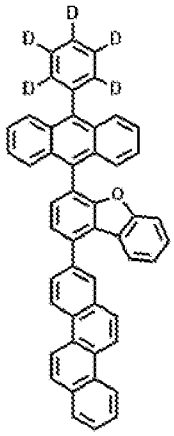
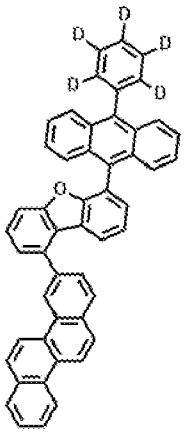
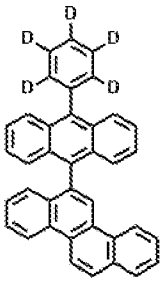
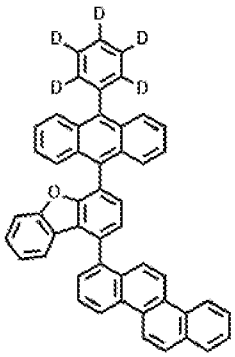
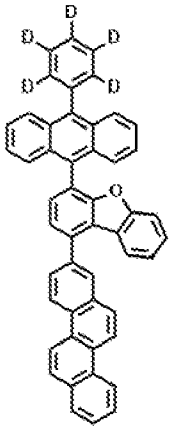
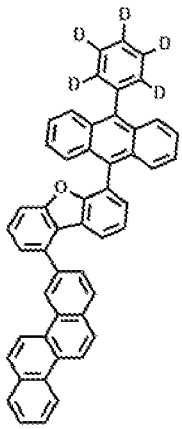
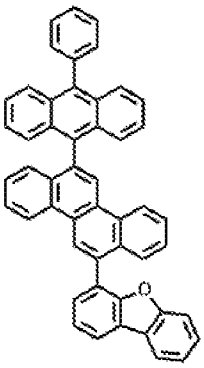
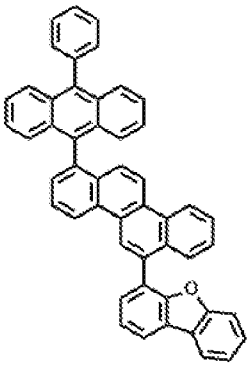
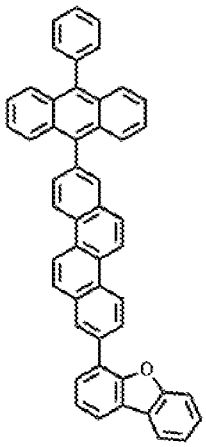
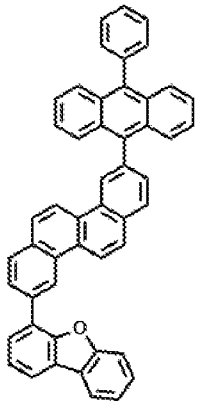
5、根据权利要求1所述的有机主体材料，其特征在于，L1 和/或 L2 用于调整分子的荧光强度与取向度，其为取代或未取代的亚芳基时，选自如下中的一种：苯环，菲或者苯并呋喃。

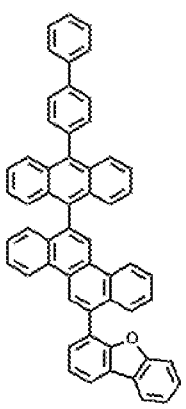
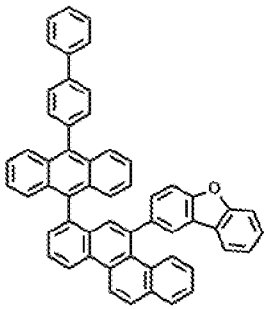
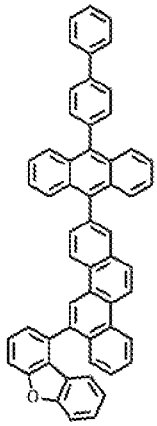
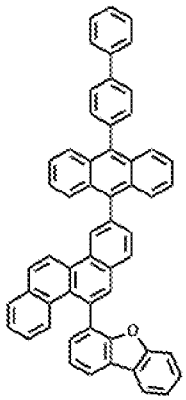
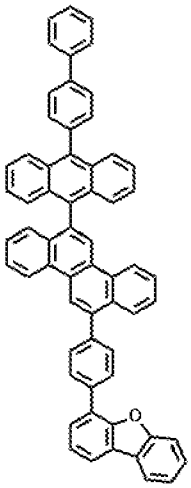
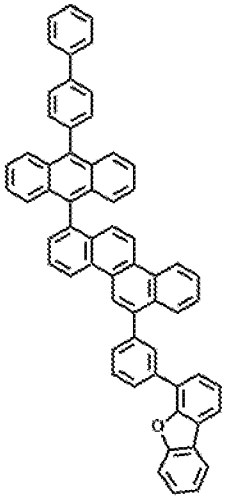
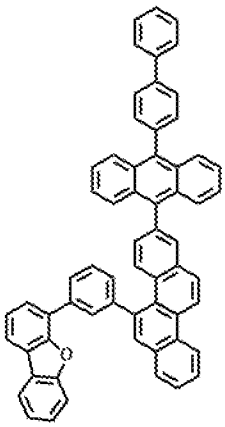
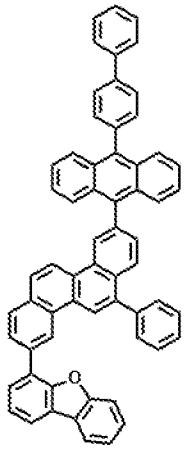
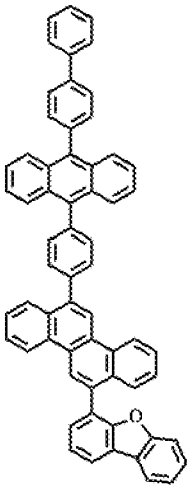
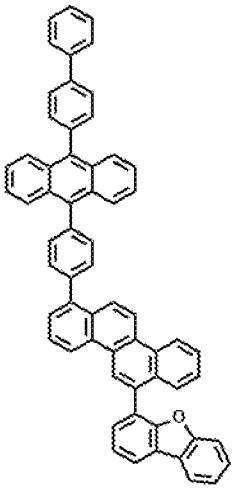
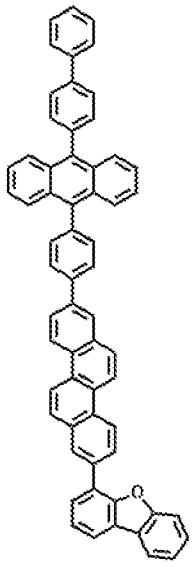
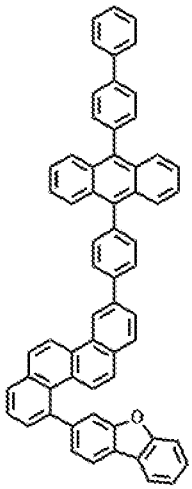
6、根据权利要求1所述的有机主体材料，其特征在于，其结构式中的氢原子可以部分或者全部为氘原子。

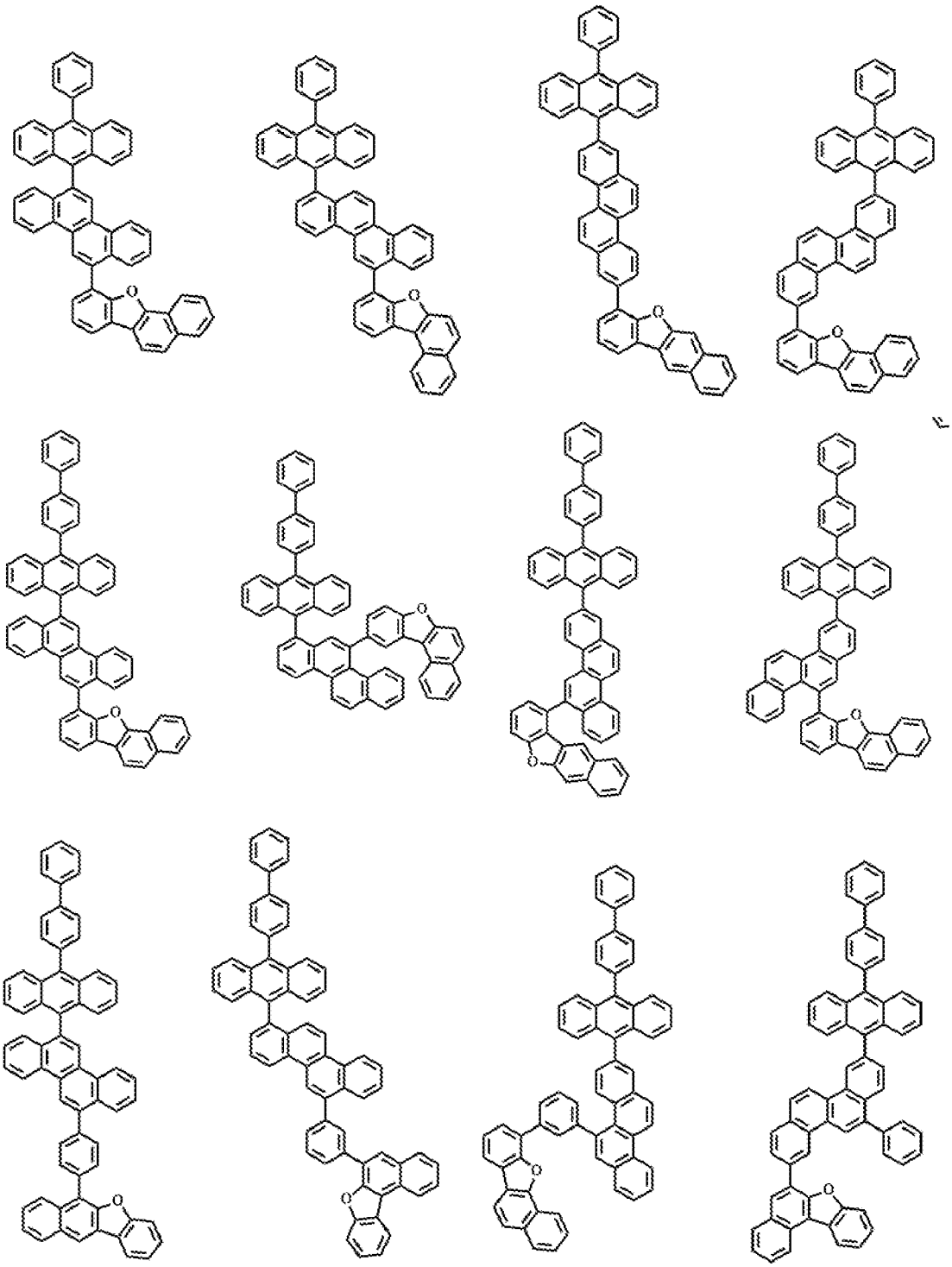
7、根据权利要求1所述的有机主体材料，其特征在于，为以下任一种化合物：

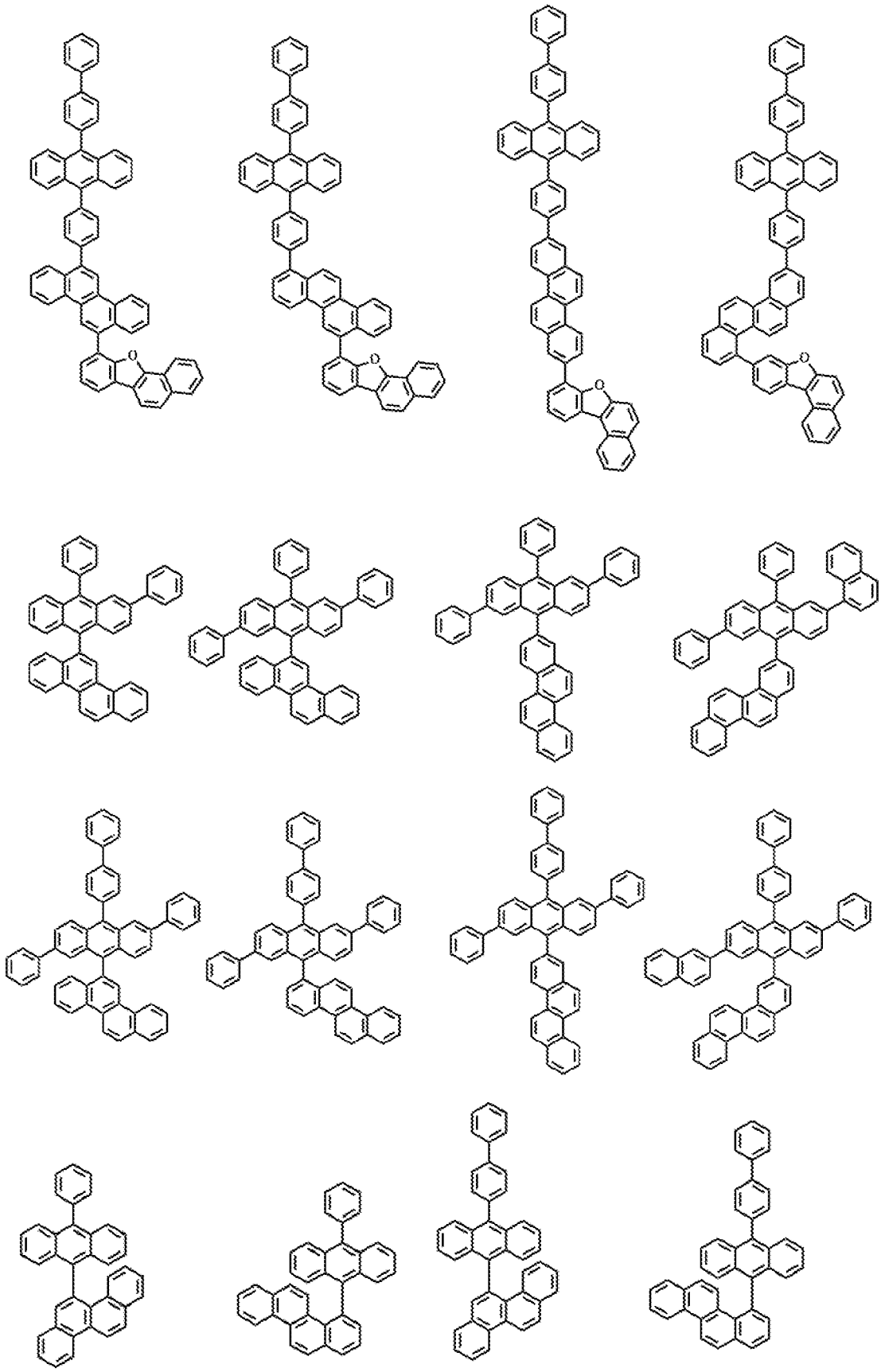

















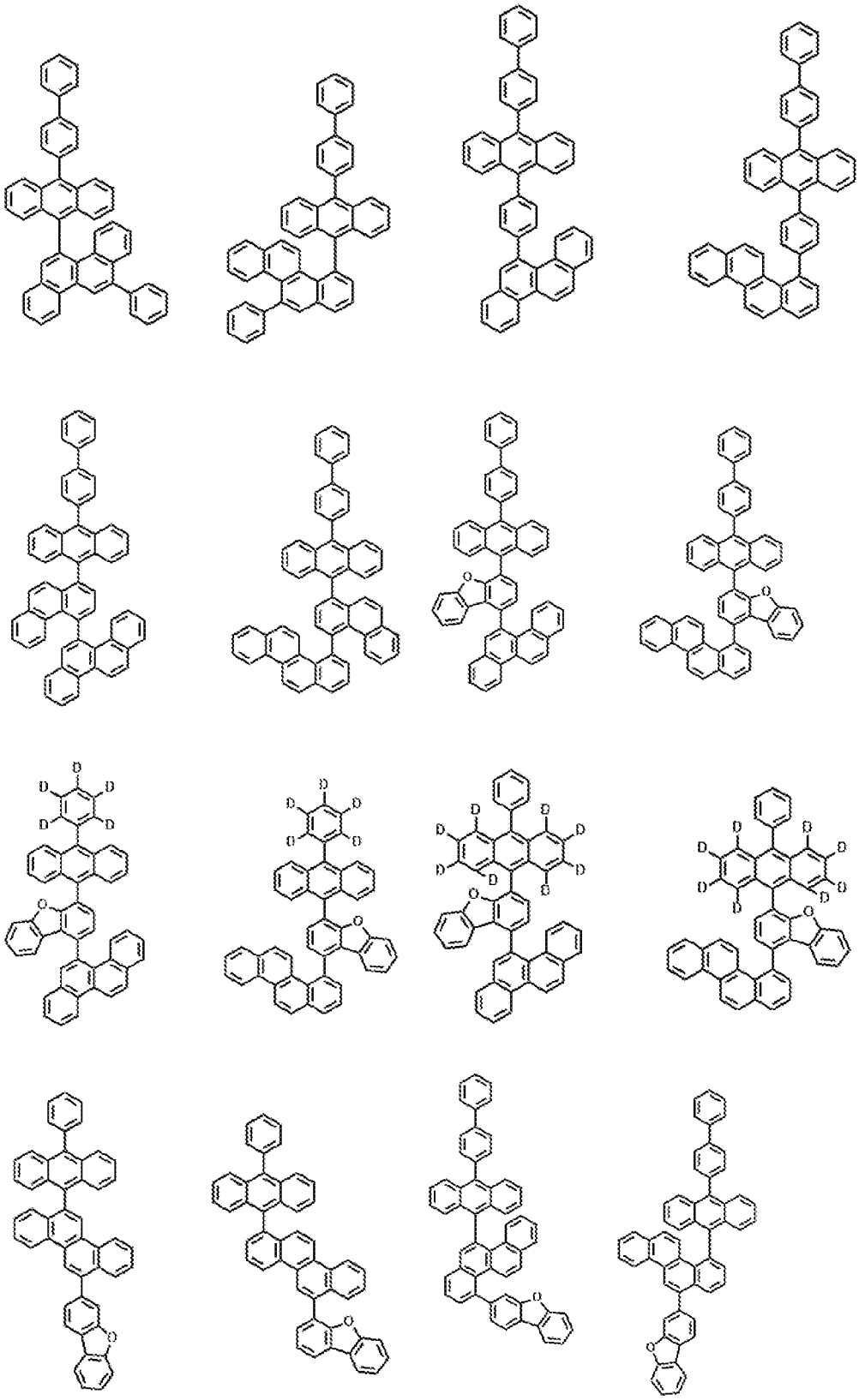


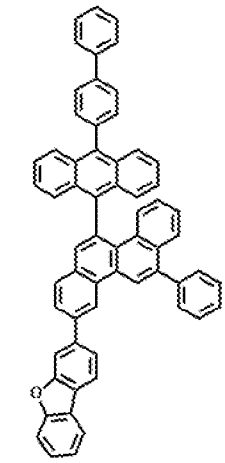
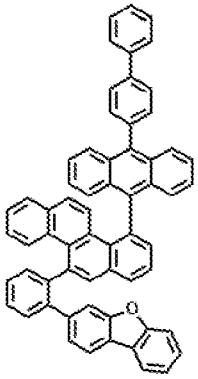
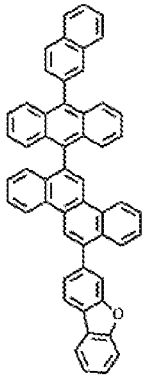
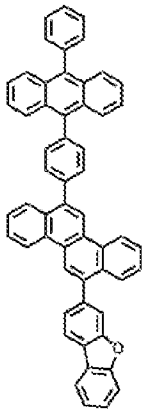
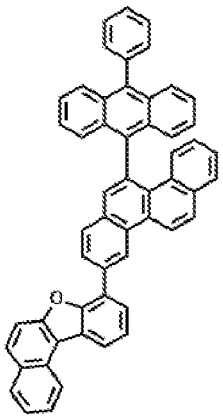
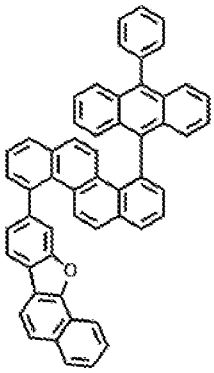
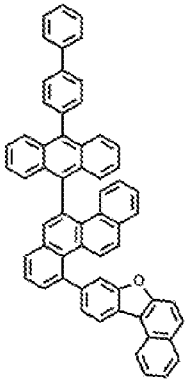
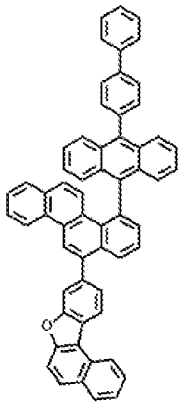
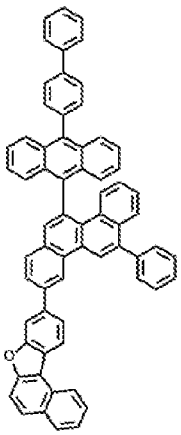
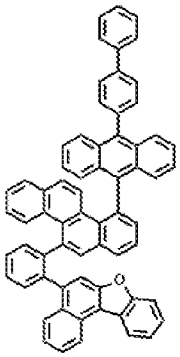
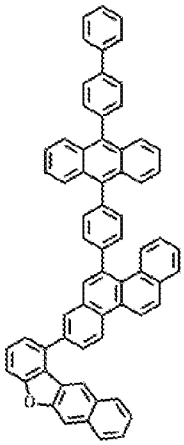
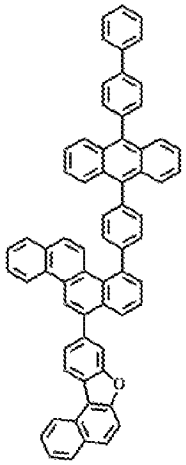
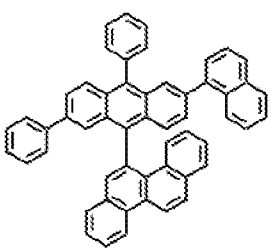
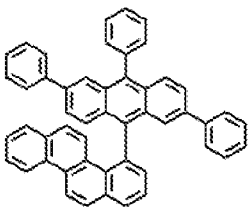
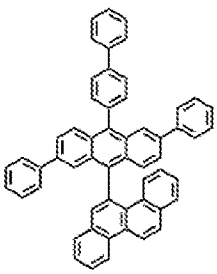
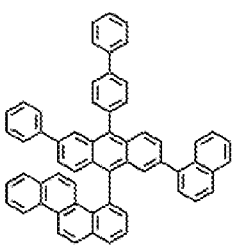



















8、一种有机发光器件，包括阴极、发光层、阳极，所述发光层由主体材料和客体材料共掺杂形成，其特征在于，所述主体材料为权利要求1–7中任意一项中的有机主体材料。

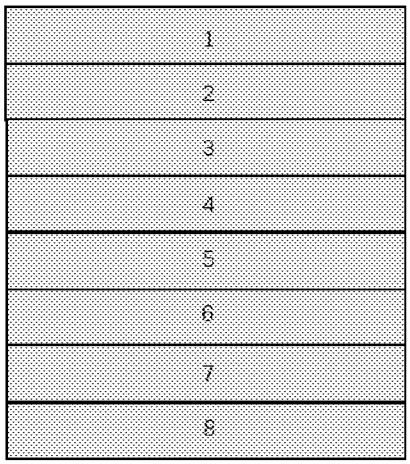


图1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/CN2022/106974

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

H01L 51/50(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

H01L

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CNTXT, VEN, CNABS, STN, IEEE, CNKI: 有机主体材料, OLED, 发光, 芳香基, 亚芳基, emit+

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	CN 113004262 A (BEIJING YUNJI TECHNOLOGY CO., LTD.) 22 June 2021 (2021-06-22) description, paragraphs 6-36	1-8
A	CN 111548353 A (YANTAI XIANHUA CHEM-TECH CO., LTD.) 18 August 2020 (2020-08-18) entire document	1-8
A	CN 110526857 A (BEIJING ETERNAL MATERIAL TECHNOLOGY CO., LTD. et al.) 03 December 2019 (2019-12-03) entire document	1-8
A	WO 2018173598 A1 (NIPPON STEEL & SUMIKIN CHEMICAL CO., LTD.) 27 September 2018 (2018-09-27) entire document	1-8

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☑ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
17 December 2022	**04 January 2023**

Name and mailing address of the ISA/CN	Authorized officer
China National Intellectual Property Administration (ISA/CN) **No. 6, Xitucheng Road, Jimenqiao, Haidian District, Beijing 100088, China**	
Facsimile No. **(86-10)62019451**	Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/CN2022/106974

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
CN 113004262 A	22 June 2021	None	
CN 111548353 A	18 August 2020	None	
CN 110526857 A	03 December 2019	None	
WO 2018173598 A1	27 September 2018	TW 201843155 A	16 December 2018
		JP WO2018173598 A1	23 January 2020

国际检索报告

国际申请号
PCT/CN2022/106974

A. 主题的分类

H01L 51/50(2006.01)i

按照国际专利分类(IPC)或者同时按照国家分类和IPC两种分类

B. 检索领域

检索的最低限度文献(标明分类系统和分类号)

H01L

包含在检索领域中的除最低限度文献以外的检索文献

在国际检索时查阅的电子数据库(数据库的名称，和使用的检索词（如使用））

CNTXT,VEN,CNABS,STN,IEEE,CNKI:有机主体材料,OLED,发光，芳香基，亚芳基，emit+

C. 相关文件

类 型*	引用文件，必要时，指明相关段落	相关的权利要求
A	CN 113004262 A (北京云基科技有限公司) 2021年6月22日 (2021-06-22) 说明书第6-36段	1-8
A	CN 111548353 A (烟台显华化工科技有限公司) 2020年8月18日 (2020-08-18) 全文	1-8
A	CN 110526857 A (北京鼎材科技有限公司 等) 2019年12月3日 (2019-12-03) 全文	1-8
A	WO 2018173598 A1 (NIPPON STEEL & SUMIKIN CHEM CO., LTD.) 2018年9月27日 (2018-09-27) 全文	1-8

☐ 其余文件在C栏的续页中列出。

☑ 见同族专利附件。

* 引用文件的具体类型：

“A” 认为不特别相关的表示了现有技术一般状态的文件

“E” 在国际申请日的当天或之后公布的在先申请或专利

“L” 可能对优先权要求构成怀疑的文件，或为确定另一篇引用文件的公布日而引用的或者因其他特殊理由而引用的文件（如具体说明的）

“O” 涉及口头公开、使用、展览或其他方式公开的文件

“P” 公布日先于国际申请日但迟于所要求的优先权日的文件

“T” 在申请日或优先权日之后公布，与申请不相抵触，但为了理解发明之理论或原理的在后文件

“X” 特别相关的文件，单独考虑该文件，认定要求保护的发明不是新颖的或不具有创造性

“Y” 特别相关的文件，当该文件与另一篇或者多篇该类文件结合并且这种结合对于本领域技术人员为显而易见时，要求保护的发明不具有创造性

“&” 同族专利的文件

国际检索实际完成的日期	国际检索报告邮寄日期
2022年12月17日	2023年1月4日
ISA/CN的名称和邮寄地址 中国国家知识产权局(ISA/CN) 中国北京市海淀区蓟门桥西土城路6号 100088 传真号 (86-10)62019451	受权官员 陆然 电话号码 86-(10)-53961226

国际检索报告
关于同族专利的信息

国际申请号
PCT/CN2022/106974

检索报告引用的专利文件			公布日 (年/月/日)	同族专利			公布日 (年/月/日)
CN	113004262	A	2021年6月22日	无			
CN	111548353	A	2020年8月18日	无			
CN	110526857	A	2019年12月3日	无			
WO	2018173598	A1	2018年9月27日	TW	201843155	A	2018年12月16日
				JP	WO2018173598	A1	2020年1月23日