

(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
2020 年 6 月 18 日 (18.06.2020)



(10) 国际公布号
WO 2020/119503 A1

(51) 国际专利分类号:
H01L 51/50 (2006.01) *C07D 495/14* (2006.01)
C07D 487/14 (2006.01) *C07D 487/16* (2006.01)

(21) 国际申请号: PCT/CN2019/122427

(22) 国际申请日: 2019 年 12 月 2 日 (02.12.2019)

(25) 申请语言: 中文

(26) 公布语言: 中文

(30) 优先权:
201811503240.8 2018 年 12 月 10 日 (10.12.2018) CN

(71) 申请人: 广州华睿光电材料有限公司(GUANGZHOU CHINARAY OPTOELECTRONIC MATERIALS LTD.) [CN/CN]; 中国广东省广州市高新技术产业开发区科学城科丰路 31 号华南新材料创新园 G8 栋 602 号, Guangdong 510663 (CN)。武汉华星光电半导体显示技术有限公司(WUHAN CHINA STAR OPTOELECTRONICS SEMICONDUCTOR DISPLAY TECHNOLOGY CO., LTD.) [CN/CN]; 中国湖北省武汉市东湖新技术开发区高新大道 666 号光谷生物创新园 C5 栋 305 室, Hubei 430000 (CN)。

(72) 发明人: 潘君友(PAN, Junyou); 中国广东省广州市高新技术产业开发区科学城科丰路 31 号华

南新材料创新园 G8 栋 602 号, Guangdong 510663 (CN)。李涛(LI, Tao); 中国广东省广州市高新技术产业开发区科学城科丰路 31 号华南新材料创新园 G8 栋 602 号, Guangdong 510663 (CN)。杨曦(YANG, Xi); 中国广东省广州市高新技术产业开发区科学城科丰路 31 号华南新材料创新园 G8 栋 602 号, Guangdong 510663 (CN)。龙志飞(LONG, Zhifei); 中国广东省广州市高新技术产业开发区科学城科丰路 31 号华南新材料创新园 G8 栋 602 号, Guangdong 510663 (CN)。李先杰(LI, Xianjie); 中国广东省广州市高新技术产业开发区科学城科丰路 31 号华南新材料创新园 G8 栋 602 号, Guangdong 510663 (CN)。王煦(WANG, Xu); 中国广东省广州市高新技术产业开发区科学城科丰路 31 号华南新材料创新园 G8 栋 602 号, Guangdong 510663 (CN)。张月(ZHANG, Yue); 中国广东省广州市高新技术产业开发区科学城科丰路 31 号华南新材料创新园 G8 栋 602 号, Guangdong 510663 (CN)。李们在(LI, Menzai); 中国广东省广州市高新技术产业开发区科学城科丰路 31 号华南新材料创新园 G8 栋 602 号, Guangdong 510663 (CN)。

(74) 代理人: 广州华进联合专利商标代理有限公司(ADVANCE CHINA IP LAW OFFICE); 中国广东省广州市天河区珠江东路 6 号 4501 房

(54) Title: ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICE COMPRISING LIGHT EXTRACTION LAYER, HETEROATOM POLYAROMATIC RING COMPOUND, AND COMPOSITION

(54) 发明名称: 包含光取出层的有机电致发光器件、杂原子多芳环化合物及组合物

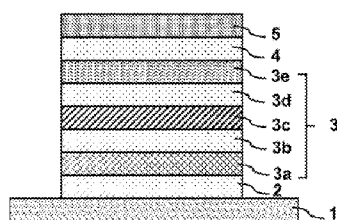


图 1

(57) Abstract: The present invention relates to an organic electroluminescent device, comprising two electrodes, one or more organic functional layers provided between the two electrodes, and a light extraction layer provided on the side of an electrode surface away from the organic functional layer. A heteroatom polyaromatic ring compound used as a material of the light extraction layer possesses a suitable energy level, has a high extinction coefficient in the ultraviolet region, and has a high refractive index in the visible region, so that said compound can be used as the material of the light extraction layer in the device. The heteroatom polyaromatic ring compound of the present invention can reduce the damage of external high energy light to the internal material of the organic electroluminescent display device, improve light extraction, and improve the light emission efficiency of the device.

(57) 摘要: 本发明涉及一种有机电致发光器件, 包含两个电极, 设置在所述两个电极之间的一个或多个有机功能层和设置于一电极表面且远离有机功能层一侧的光取出层。作为光取出层材料的杂原子多芳环化合物拥有合适的能级, 在紫外区域具有较高的消光系数, 在可见光区域拥有较高的折射率, 可以作为器件中的光取出层。本发明的杂原子多芳环化合物能降低外部高能量光对有机电致发光显示设备内部材料的损害, 并提升光取出, 提高器件的发光效率。



WO 2020/119503 A1

(部位: 自编01-03和08-12单元) (仅限办公用途), Guangdong 510623 (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, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, 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, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, 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, 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)。

根据细则4.17的声明:

- 关于申请人有权要求在先申请的优先权(细则4.17(iii))

本国际公布:

- 包括国际检索报告(条约第21条(3))。

包含光取出层的有机电致发光器件、杂原子多芳环化合物及组合物

技术领域

本发明涉及有机电致发光技术领域，特别涉及一类有较高折射率的有机化合物作为光取出层材料的有机电致发光器件，还涉及一种杂原子多芳环化合物及其在有机电致发光领域的应用。

背景技术

有机电致发光显示设备是一类自发光型的显示装置，通过载流子在各个功能层间的转移、复合产生激子，依靠高量子效率的有机化合物或金属配合物发光。其具有自发光、高亮度、高效率、高对比度、高响应性等特点。

近年来，有机电致发光二极管（OLED）的发光效率有了很大的提升，但是其内部量子效率已经接近理论极限。因此提高光取出效率成为进一步提高器件稳定性和电流效率的有效手段（如发射层金属配合物的堆积、各功能层间折射率的匹配等）。在2001年，Hung等人在金属阴极的表面覆盖了一层约50 nm的有机、无机化合物，通过控制厚度及折射率以提高器件的表现性能。在2003年，Riel等人已尝试将具有高折射率（ $n=2.6$ ）的无机化合物ZnSe蒸镀于阴极上，利用功能层之间折射率的差异提高光取出效率，但受限于无机材料蒸发温度高、蒸发速率慢等原因，这类化合物并未在有机电致发光器件中得到更多应用。

因此，新一类的提高有机电致发光器件光取出效率的材料需要被进一步开发。

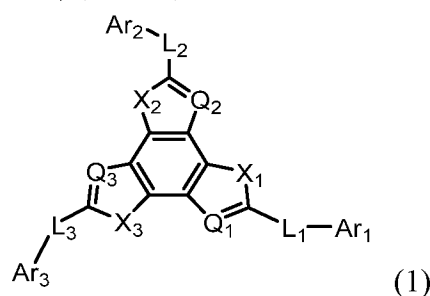
发明内容

鉴于上述现有技术的不足，本发明的一个主要目的在于提供一种具有较高折射率的有机化合物作为光取出层的有机电致发光器件，用以提高器件光取出效率。

此类化合物需满足以下几类条件：在紫外波段（ $<400\text{ nm}$ ）消光系数高，避免有害光对器件材料的不利影响；在可见光范围（ $>430\text{ nm}$ ）消光系数接近于0，对可见光有较高的透射率，降低对设备出光效率的影响；在可见光范围内具有较高折射率并且差异较小，具有提高出光和优化器件结构等特点；有较高的玻璃化温度，提升化合物的热稳定性。

本发明的技术方案如下：

本发明涉及一种有机电致发光器件，该有机电致发光器件包含两个电极，设置在所述两个电极之间的一个或多个有机功能层和设置于一电极表面且远离有机功能层一侧的光取出层，所述光取出层材料包含如通式（1）所示的化合物：



其中：

X_1 、 X_2 、 X_3 每次出现时，分别独立选自 NR_1 、O、S、Se；

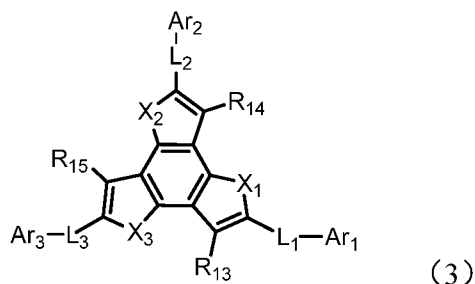
Q₁、Q₂、Q₃ 每次出现时, 分别独立选自 N、CR₂;

Ar₁、Ar₂、Ar₃ 每次出现时, 分别独立选自: 氢、氰基、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团或杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 3 至 25 的非芳香族环系、或者取代或未取代的芳胺基团;

5 L₁、L₂、L₃ 每次出现时, 分别独立选自: 单键、烯基、炔基、酰基、酰胺基、羰基、砷基、取代或未取代的碳原子数为 1 至 60 的烷基、取代或未取代的碳原子数为 1 至 60 的烷氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团或杂芳香基团;

10 R₁、R₂ 每次出现时, 分别独立选自: 氢, D, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷基, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷氧基, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链硫代烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的硫代烷氧基, 甲硅烷基, 具有 1 至 20 个 C 原子的酮基, 具有 2 至 20 个 C 原子的烷氧基羰基, 具有 7 至 20 个 C 原子的芳氧基羰基, 氰基 (-CN), 氨基甲酰基 (-C(=O)NH₂), 卤甲酰基, 甲酰基 (-C(=O)-H), 异氰基, 异氰酸酯, 硫氰酸酯, 异硫氰酸酯, 羟基, 硝基, CF₃, Cl, Br, F, 可交联的基团, 具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的芳香基团或杂芳香基团, 具有 5 至 60 个环原子的芳氧基或杂芳氧基基团, 或这些基团的组合。

15 本发明进一步涉及一种杂原子多芳环化合物, 选自如通式 (3) 所述的结构:



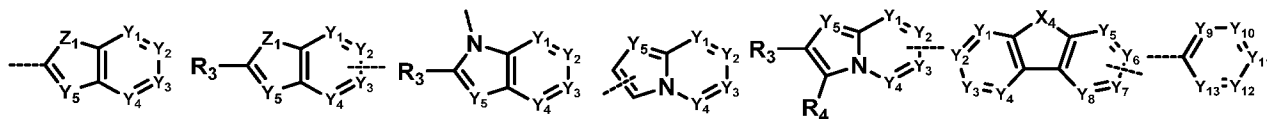
其中:

X₁、X₂、X₃ 每次出现时, 分别独立选自 NR₁、O、S、Se;

20 Ar₂、Ar₃ 每次出现时, 分别独立选自: 氢、氰基、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团或杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 3 至 25 的非芳香族环系、或者取代或未取代的芳胺基团;

25 L₁、L₂、L₃ 每次出现时, 分别独立选自: 单键、烯基、炔基、酰基、酰胺基、羰基、砷基、取代或未取代的碳原子数为 1 至 60 的烷基、取代或未取代的碳原子数为 1 至 60 的烷氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的杂芳香基团;

Ar₁ 选自以下基团的一种或者其组合:



其中:

30 X₄ 每次出现时, 分别独立选自 NR₅、CR₅R₆、O、S、Se;

Y₁~Y₁₃ 每次出现时, 分别独立选自 N 或 CR₇, Y₉~Y₁₃ 中至少有一个为 N;

Z₁ 每次出现时, 分别独立选自 NR₈、O、S;

35 R₁~R₈、R₁₃~R₁₅ 每次出现时, 分别独立选自: 氢, D, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷基, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷氧基, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链硫代烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个 C 原子的酮基、具有 2 至 20 个 C 原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个 C 原子的芳氧基羰基、氰基、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯、硫氰酸酯、异硫氰酸酯、羟基、硝基、CF₃、Cl、Br、F、

可交联的基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的杂芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的芳氧基、具有 5 至 60 个环原子的杂芳氧基基团、或这些基团的组合。

本发明还涉及一种组合物，包含有至少一种如上所述的杂原子多芳环化合物，及至少一种有机溶剂。

本发明还涉及一种光取出层材料，其特征在于，包含如上所述的杂原子多芳环化合物。
有益效果：

按照本发明的杂原子多芳环化合物作为有机电致发光器件的光取出层材料，有较高的玻璃化温度，化合物的热稳定性较高。本发明的杂原子多芳环化合物在紫外波段消光系数高，在可见光范围消光系数较小，并具备较高的折射率。当作为电子器件的光取出层时，本发明的杂原子多芳环化合物能避免有害光对器件内部材料的不利影响，并提高可见光出光效率。

附图说明

图 1 是一器件实施例的示意图。图 1 是按照本发明的一个实施例的发光器件结构图，图中 1 是基板，2 是阳极，3a 是空穴注入层 (HIL)，3b 是空穴传输层 (HTL)，3c 是发光层，3d 是电子传输层 (ETL)，3e 是电子注入层 (EIL)，4 是阴极，5 是光取出层；

图 2 是合成实施例 C7 在二氯甲烷溶液中的紫外可见吸收光谱；

图 3 是合成实施例 C8 在二氯甲烷溶液中的紫外可见吸收光谱。

具体实施方式

本发明提供一种包含杂原子多芳环化合物作为光取出层的材料的有机电致发光器件。本发明还涉及一种杂原子多芳环化合物。为使本发明的目的、技术方案及效果更加清楚、明确，以下对本发明进一步详细说明。应当理解，此处所描述的具体实施例仅用以解释本发明，并不用于限定本发明。

在本发明中，“取代”表示被取代基中的氢原子被取代基所取代。

在本发明中，“环原子数”表示原子键合成环状而得到的结构化合物（例如，单环化合物、稠环化合物、交联化合物、碳环化合物、杂环化合物）的构成该环自身的原子之中的原子数。该环被取代基所取代时，取代基所包含的原子不包括在成环原子内。关于以下所述的“环原子数”，在没有特别说明的条件下也是同样的。例如，苯环的环原子数为 6，萘环的环原子数为 10，噻吩基的环原子数为 5。

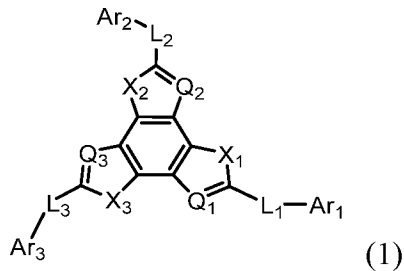
在本发明中，“相邻基团”是指这些基团键合至同一碳原子或键合至相邻的碳原子上。这些定义相应的适用于“相邻取代基”。

芳香基团指至少包含一个芳环的烃基。杂芳香基团指包含至少一个杂原子的芳香烃基。进一步地，杂原子选自 Si、N、P、O、S 和/或 Ge，更进一步地，选自 Si、N、P、O 和/或 S。稠环芳香基团指芳香基团的环可以具有两个或多个环，其中两个碳原子被两个相邻的环共用，即稠环。稠杂环芳香基团指包含至少一个杂原子的稠环芳香烃基。对于本发明的目的，芳香基团或杂芳香基团不仅包括芳香环的体系，而且包含非芳香族的环系。因此，比如吡啶、噻吩、吡咯、吡唑、三唑、咪唑、噁唑、噁二唑、噻唑、四唑、吡嗪、哒嗪、嘧啶、三嗪、卡宾等体系，出于本发明的目的，同样认为是芳香基团或杂环芳香基团。对于本发明的目的，稠环芳香族或稠杂环芳香族环系不仅包括芳香基团或杂芳香基团的体系，而且，其中多个芳香基团或杂环芳香基团也可以被短的非芳族单元间断（<10%的非 H 原子，进一步为小于 5%的非 H 原子，比如 C、N 或 O 原子）。因此，比如 9, 9'-螺二芴，9, 9'-二芳基芴，三芳胺，二芳基醚等体系，出于本发明的目的，同样认为是稠环芳香族环系。

在本发明中，“光取出层”是指位于有机电致发光器件的电极表面与朝向有机功能层的表面

相反的层。

本发明提供一种有机电致发光器件，其包含：两个电极、设置在所述两个电极之间的一个或多个有机功能层和设置于一电极表面且远离有机功能层一侧的光取出层，所述光取出层的材料包含如通式(1)所示的化合物：



其中： X_1 、 X_2 、 X_3 每次出现时，分别独立选自 NR_1 、O、S、Se；进一步地， X_1 、 X_2 、 X_3 每次出现时，分别独立选自 O、S；在一实施例中， X_1 、 X_2 、 X_3 选自相同的基团，进一步地， X_1 、 X_2 、 X_3 同时选自 O 或同时选自 S。

Q_1 、 Q_2 、 Q_3 每次出现时，分别独立选自 N、 CR_2 ；进一步地， Q_1 、 Q_2 、 Q_3 每次出现时，分别独立选 CR_2 ；

Ar_1 、 Ar_2 、 Ar_3 每次出现时，分别独立选自：氢、氰基、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团或杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 3 至 25 的非芳香族环系、或者取代或未取代的芳胺基团；

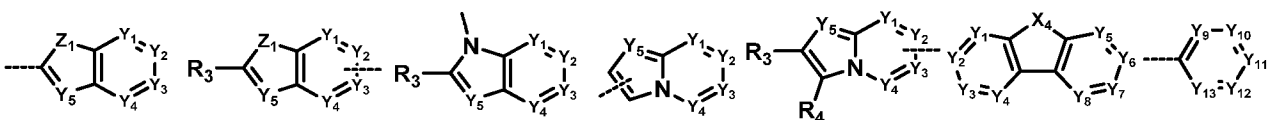
L_1 、 L_2 、 L_3 每次出现时，分别独立选自：单键、烯基、炔基、酰基、酰胺基、羰基、砜基、取代或未取代的碳原子数为 1 至 60 的烷基、取代或未取代的碳原子数为 1 至 60 的烷氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团、或取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的杂芳香基团；

R_1 、 R_2 每次出现时，分别独立选自：氢，D，具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷基、具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷氧基、具有 1 至 20 个 C 原子的直链硫代烷氧基，具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷基，具有 3 至 20 个 C 原子的烷氧基或具有 3 至 20 个 C 原子的硫代烷氧基，甲硅烷基，具有 1 至 20 个 C 原子的酮基，具有 2 至 20 个 C 原子的烷氧基羰基，具有 7 至 20 个 C 原子的芳氧基羰基，氰基 (-CN)，氨基甲酰基 (-C(=O)NH₂)，卤甲酰基，甲酰基 (-C(=O)-H)，异氰基，异氰酸酯，硫氰酸酯，异硫氰酸酯，羟基，硝基，CF₃，Cl，Br，F，可交联的基团，具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的芳香基团，具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的杂芳香基团，具有 5 至 60 个环原子的芳氧基，具有 5 至 60 个环原子的杂芳氧基基团，或这些基团的组合。

有机电致发光器件是指在施加一定电压时会发光的器件，一般包含两个电极，及发光层，一些有机电致发光器件中会进一步包含光取出层。本发明的有机电致发光器件可选自有机发光二极管(OLED)、有机发光电池(OLEEC)、有机场效应管(OFET)、有机发光场效应管。

在一个实施例中，本发明的有机电致发光器件是有机发光二极管(OLED)，包含阳极、阴极、发光层和光取出层。在一个实施例中，本发明的有机电致发光器件，其中光取出层位于阴极的表面。

在一个实施例中，按照本发明所述的有机电致发光器件，通式(1)中 Ar_1 可选自以下基团的一种或者其组合：

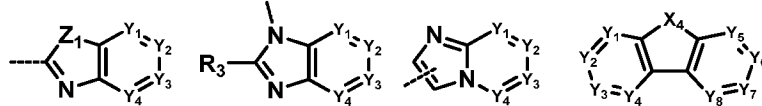


其中： X_4 每次出现时，分别独立选自 NR_5 、 CR_5R_6 、O、S、Se； Y_1 ~ Y_{13} 每次出现时，分别独立选自 N 或 CR_7 ， Y_9 ~ Y_{13} 中至少有一个为 N； Z_1 每次出现时，分别独立选自 NR_8 、O、S；

R_3 ~ R_8 每次出现时，分别独立选自：氢，D，具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷基，具有 1

至 20 个 C 原子的直链烷氧基, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链硫代烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个 C 原子的酮基、具有 2 至 20 个 C 原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个 C 原子的芳氧基羰基、氰基、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯、硫氰酸酯、异硫氰酸酯、羟基、硝基、CF₃、Cl、Br、F、可交联的基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的杂芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的芳氧基、具有 5 至 60 个环原子的杂芳氧基基团、或这些基团的组合。

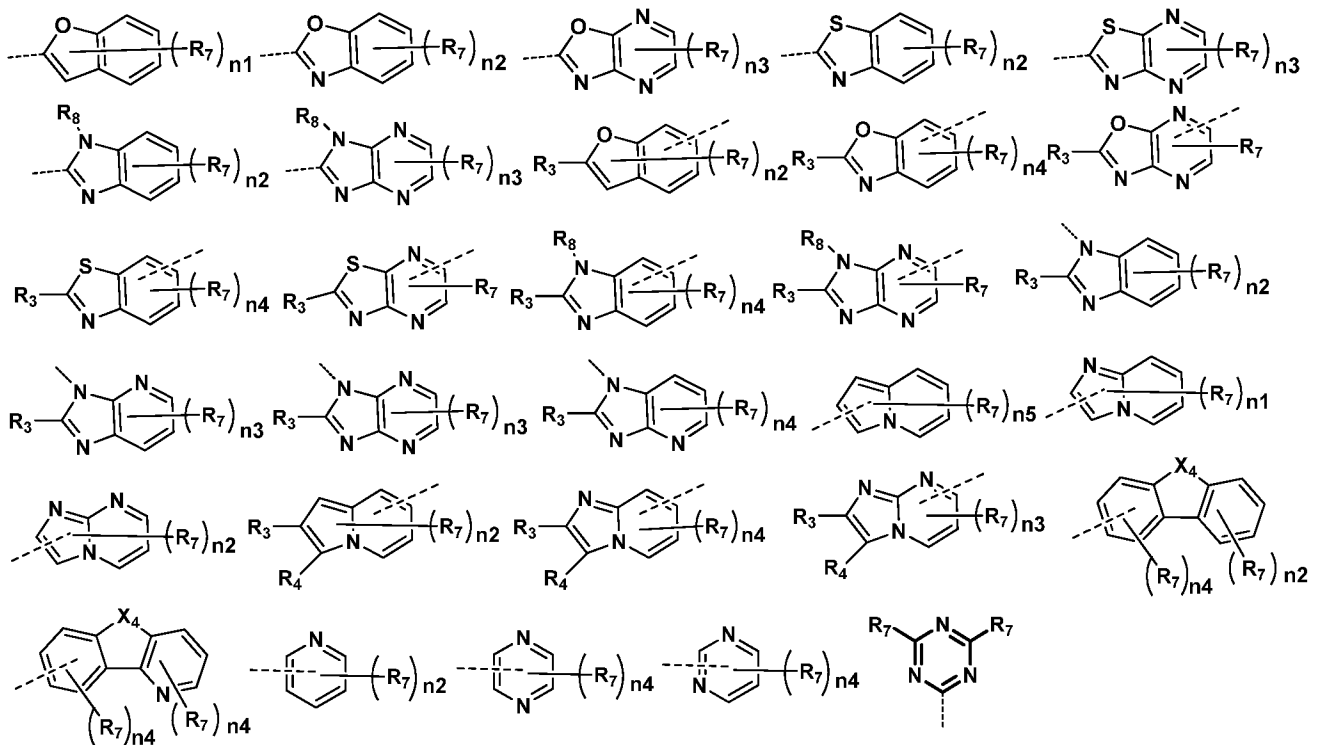
在一个实施例中, 通式 (1) 中 Ar₁ 可选自以下基团的一种或者其组合:



在一个实施例中, Y₁~Y₅ 至少一个选自 N; 优选地, Y₅ 选自 N; 在一个实施例中, Y₁~Y₅ 至少两个选自 N; 优选地, Y₁ 和 Y₅ 选自 N; 在一个实施例中, Y₁~Y₅ 至少三个选自 N; 优选地, Y₁、Y₄ 和 Y₅ 选自 N。

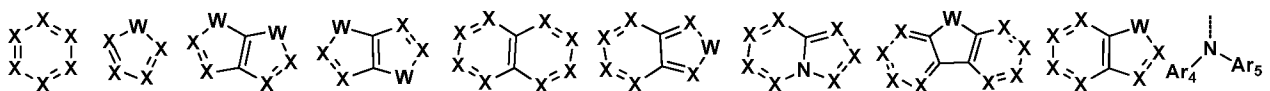
在一个实施例中, Y₉~Y₁₃ 中至少有两个为 N; 在一个实施例中, Y₉~Y₁₃ 均为 N。

进一步地, 通式 (1) 中 Ar₁ 可选自以下基团的一种或者其组合:



其中: n₁ 表示 0~5 的整数; n₂ 表示 0~4 的整数; n₃ 表示 0~2 的整数; n₄ 表示 0~3 的整数; n₅ 表示 0~6 的整数; R₃~R₅ 及 R₇、R₈ 含义同上。

在一个实施例中, 按照本发明所述的有机电致发光器件, Ar₂、Ar₃ 可选自以下基团的一种或者其组合:



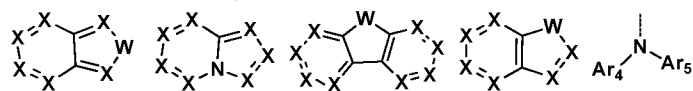
其中: X 是 CR₉ 或 N; W 选自 CR₉R₁₀、NR₉、C(=O)、O、S、Se;

R₉~R₁₀ 每次出现时, 分别独立选自: 氢, D, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷基, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷氧基, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链硫代烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个 C 原子的酮基、具有 2 至 20 个

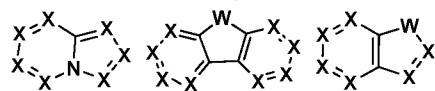
C 原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个 C 原子的芳氧基羰基、氰基、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯、硫氰酸酯、异硫氰酸酯、羟基、硝基、CF₃、Cl、Br、F、可交联的基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的杂芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的芳氧基、具有 5 至 60 个环原子的杂芳氧基基团、或这些基团的组合。

Ar₄、Ar₅ 选自：取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团杂芳香基团、或者具有取代或未取代的环原子数为 3 至 25 的非芳香族环系。

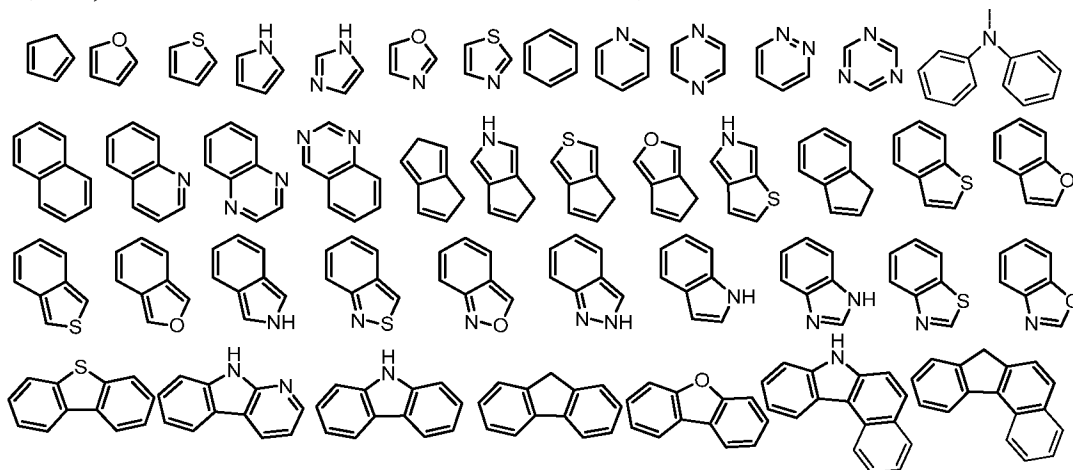
在一个实施例中，Ar₂、Ar₃ 可选自以下基团的一种或者其组合：



在一个实施例中，Ar₂、Ar₃ 均选自以下基团的一种或者其组合：

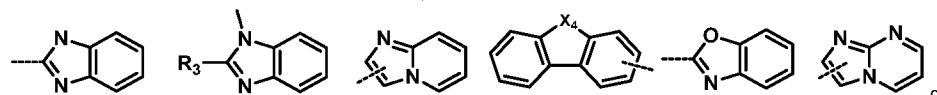


进一步地，Ar₂、Ar₃ 可选自以下基团的一种或者其组合：

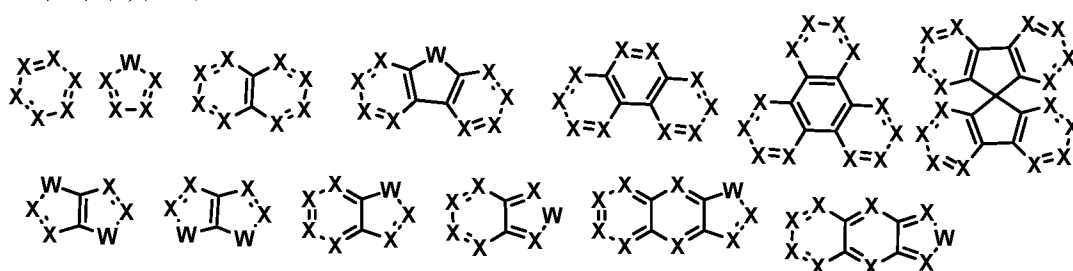


其中：环上的 H 原子可以进一步被取代。

在某些优选的实施例中，Ar₂ 和 Ar₃ 选自相同的结构；在某些优选的实施例中，Ar₂ 和 Ar₁ 选自相同的结构；在某些更优选的实施例中，Ar₂ 和 Ar₃ 选自与 Ar₁ 相同的结构。优选地，Ar₂、Ar₃ 与 Ar₁ 同时选自如下基团：



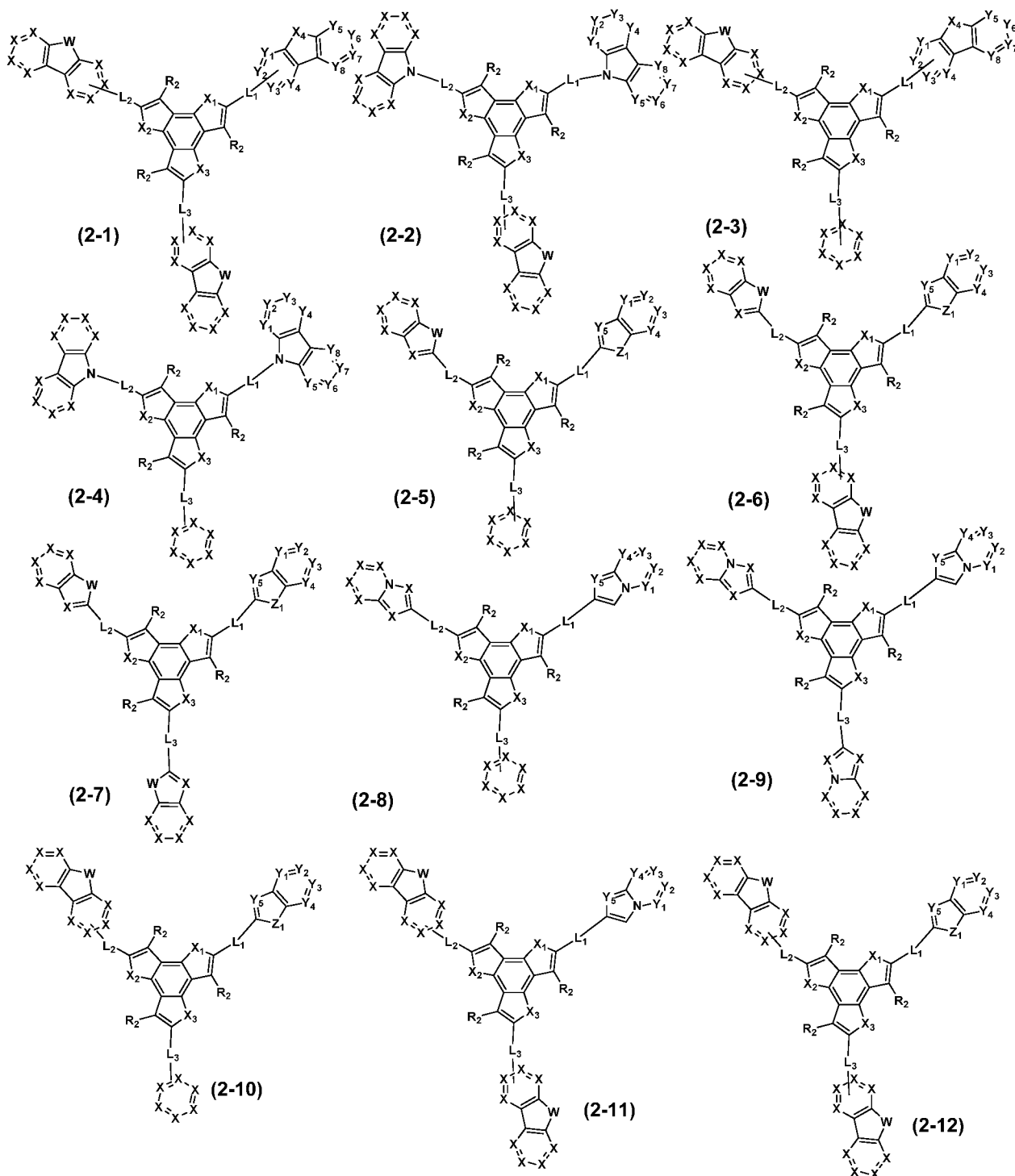
在一个实施例中，按照本发明所述的有机电致发光器件，L₁、L₂、L₃ 选自单键或者以下基团的一种或者其组合：



其中：X、W 含义如上所述。

进一步地，L₁、L₂、L₃ 选自单键或者取代或

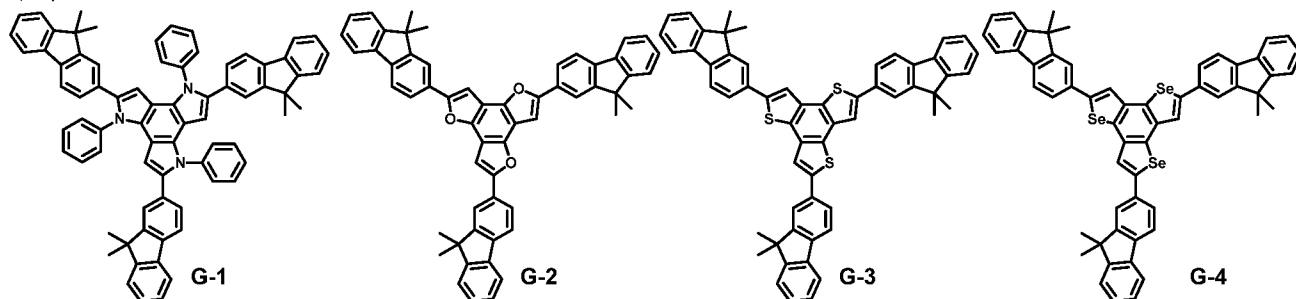
在一个实施例中，所述光取出层的材料选自通式 (2-1) ~ (2-15) 的任意一种化合物：

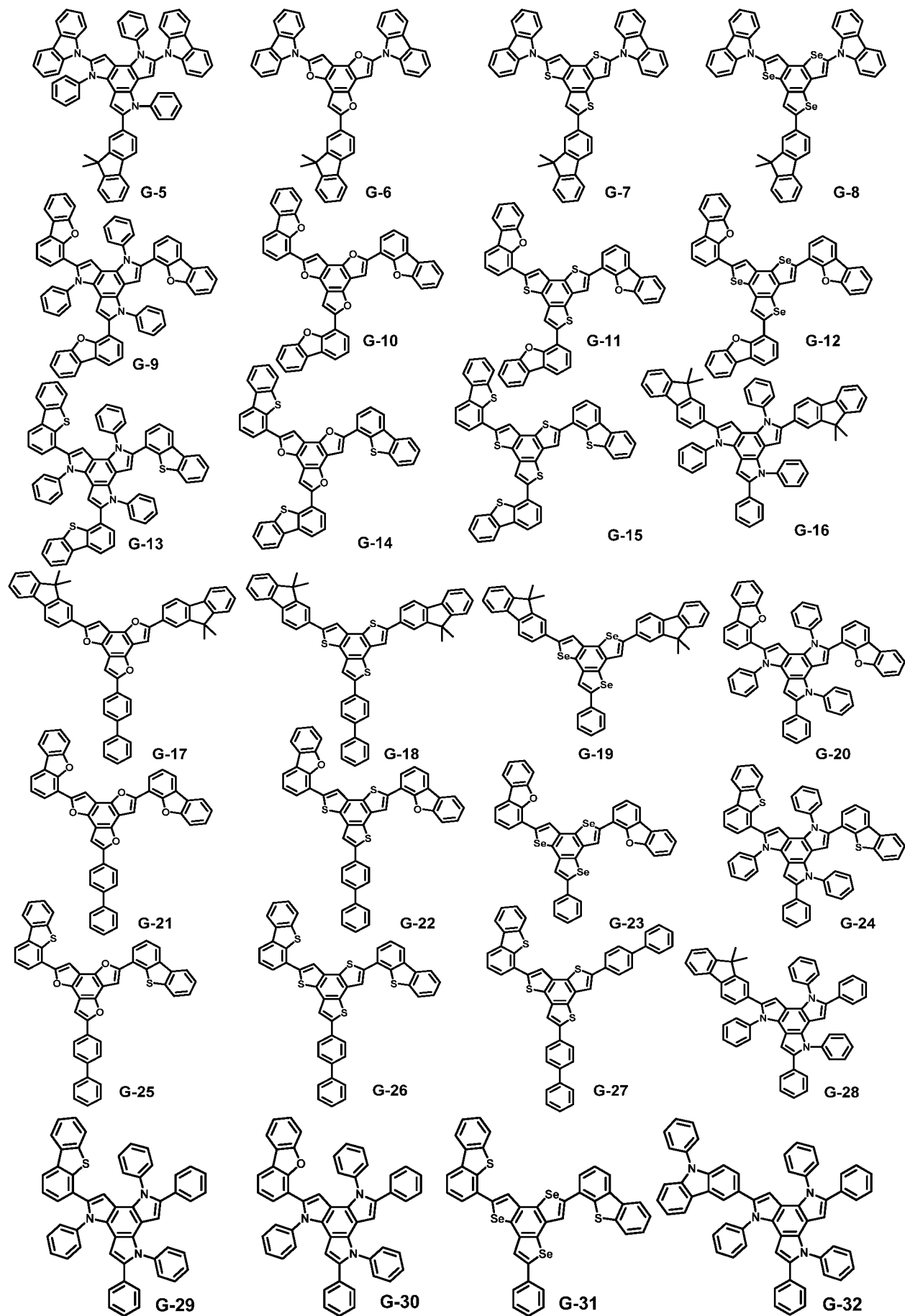


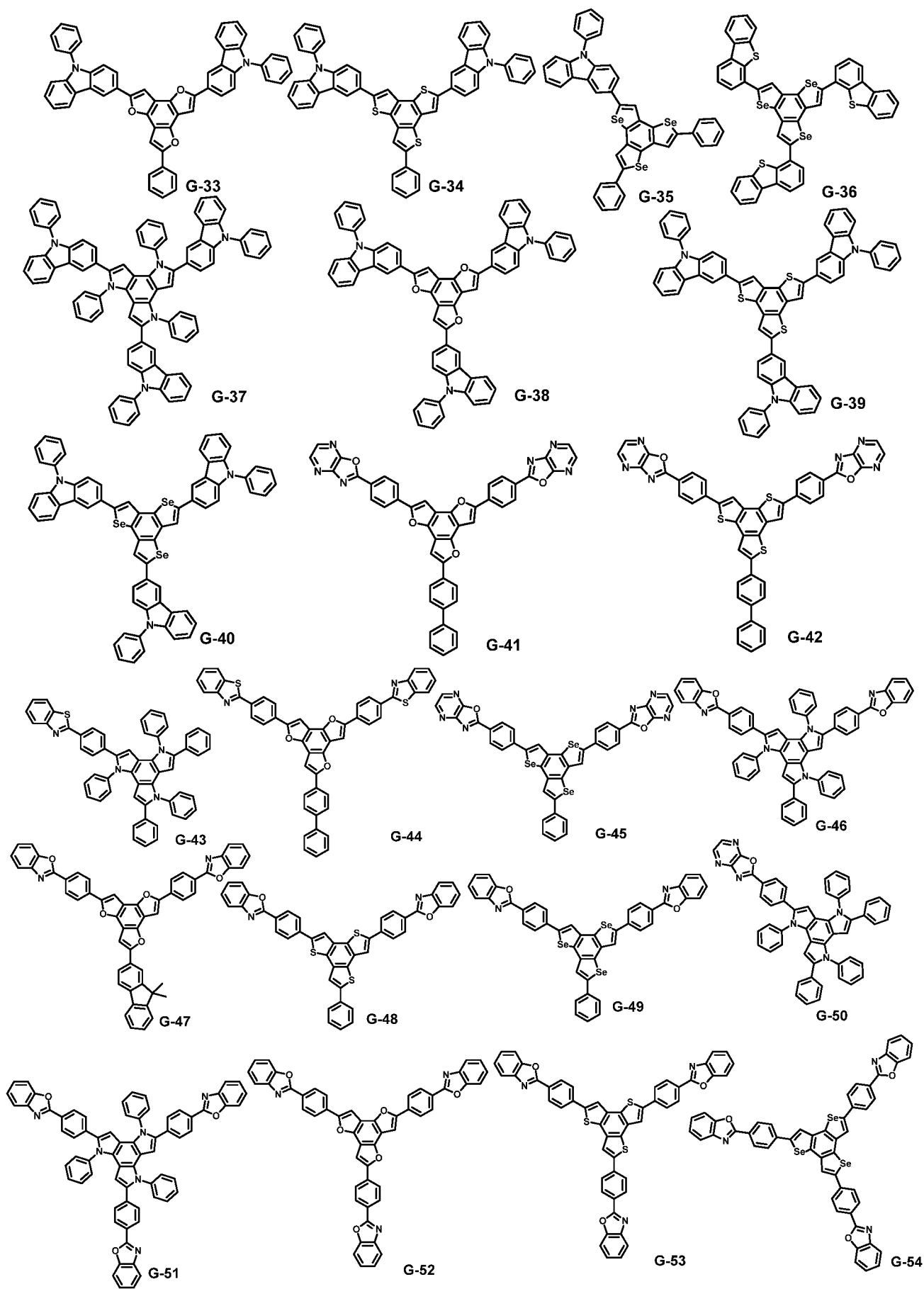
其中：L₁~L₃、X₁~X₃、R₂、Y₁~Y₁₃、Z₁、X₄、X、W、Ar₄~Ar₅含义如上所述。

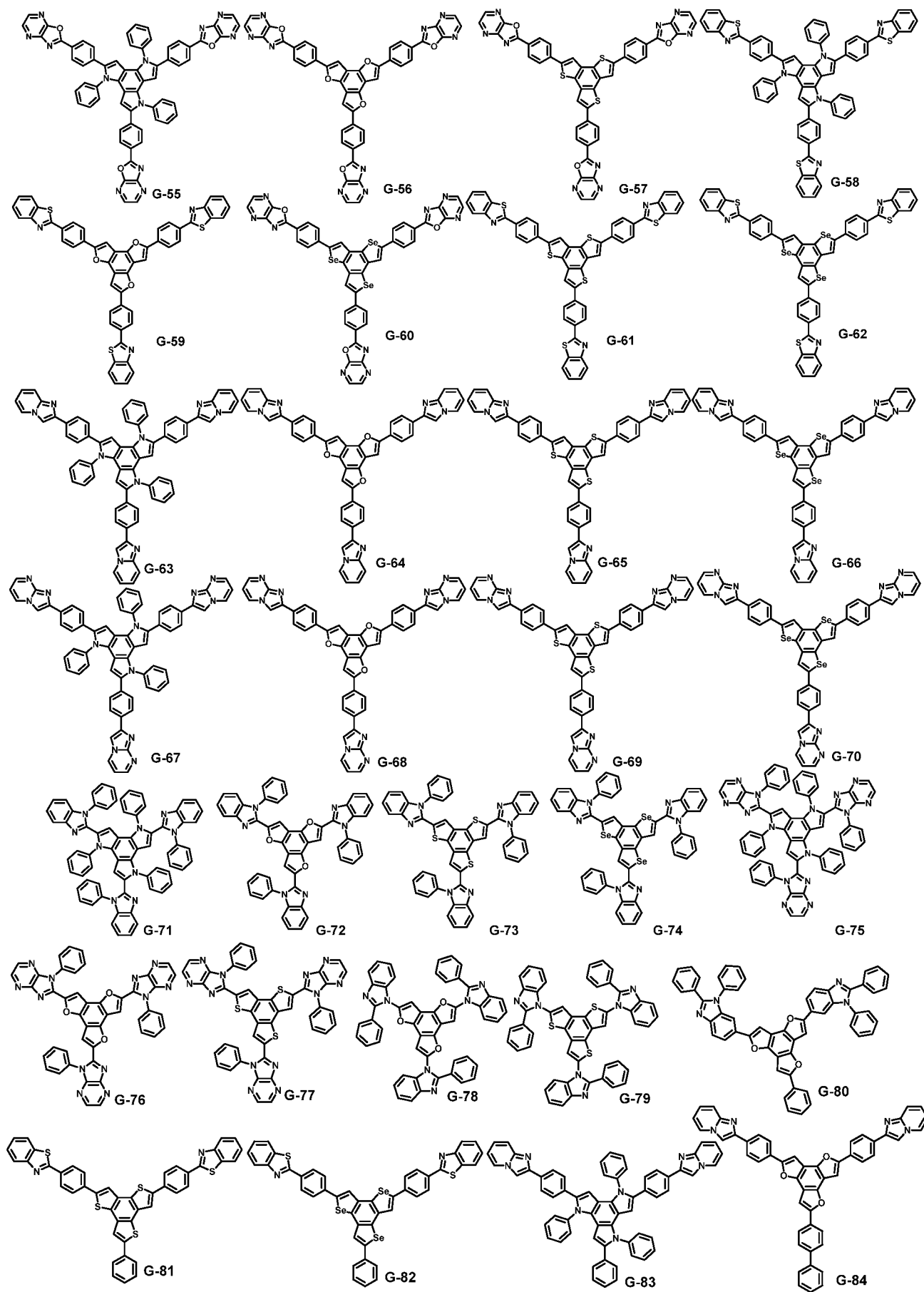
具体地，按照本发明所述的有机电致发光器件，其中光取出层的材料选自如下结构但不

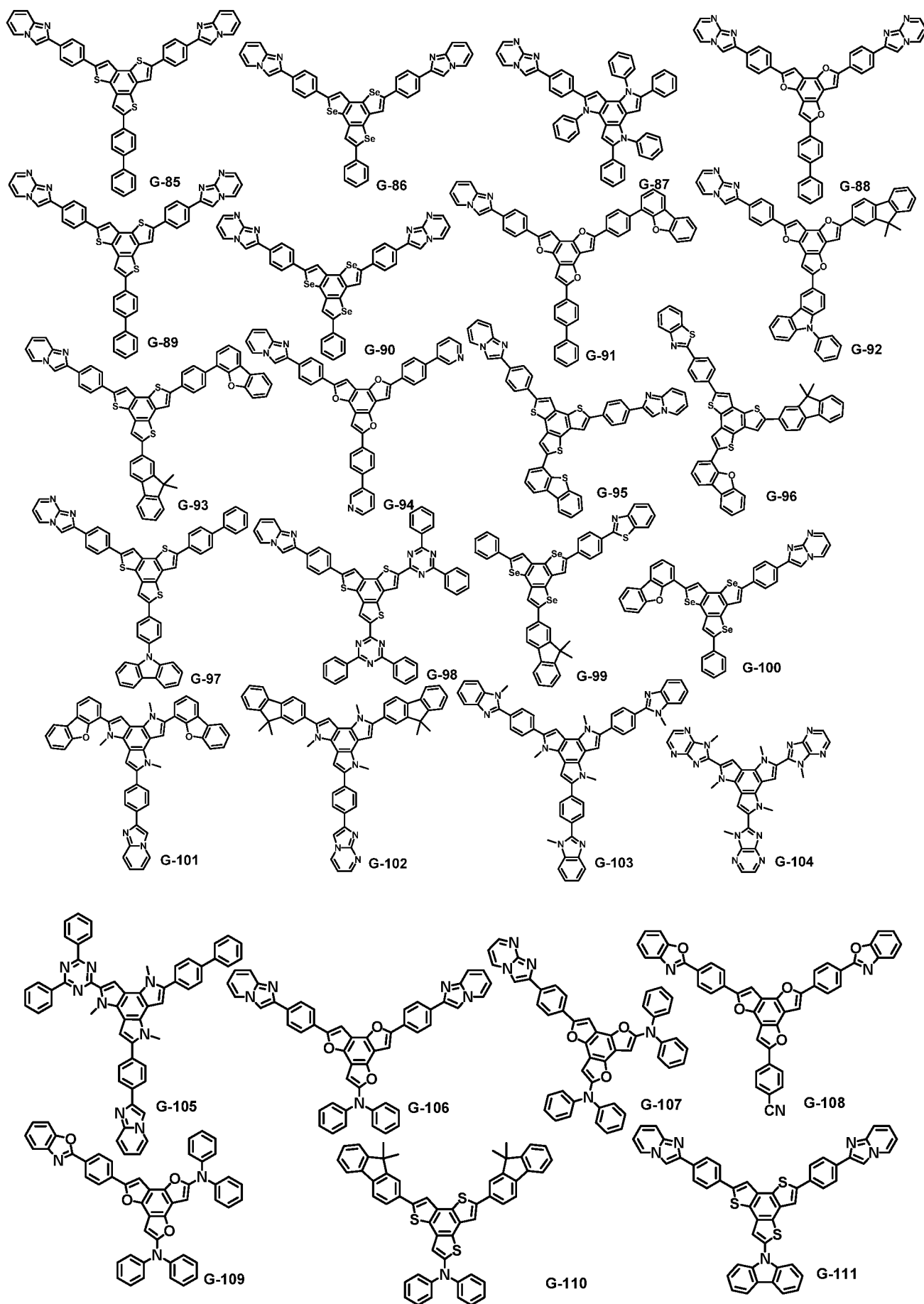
限于：

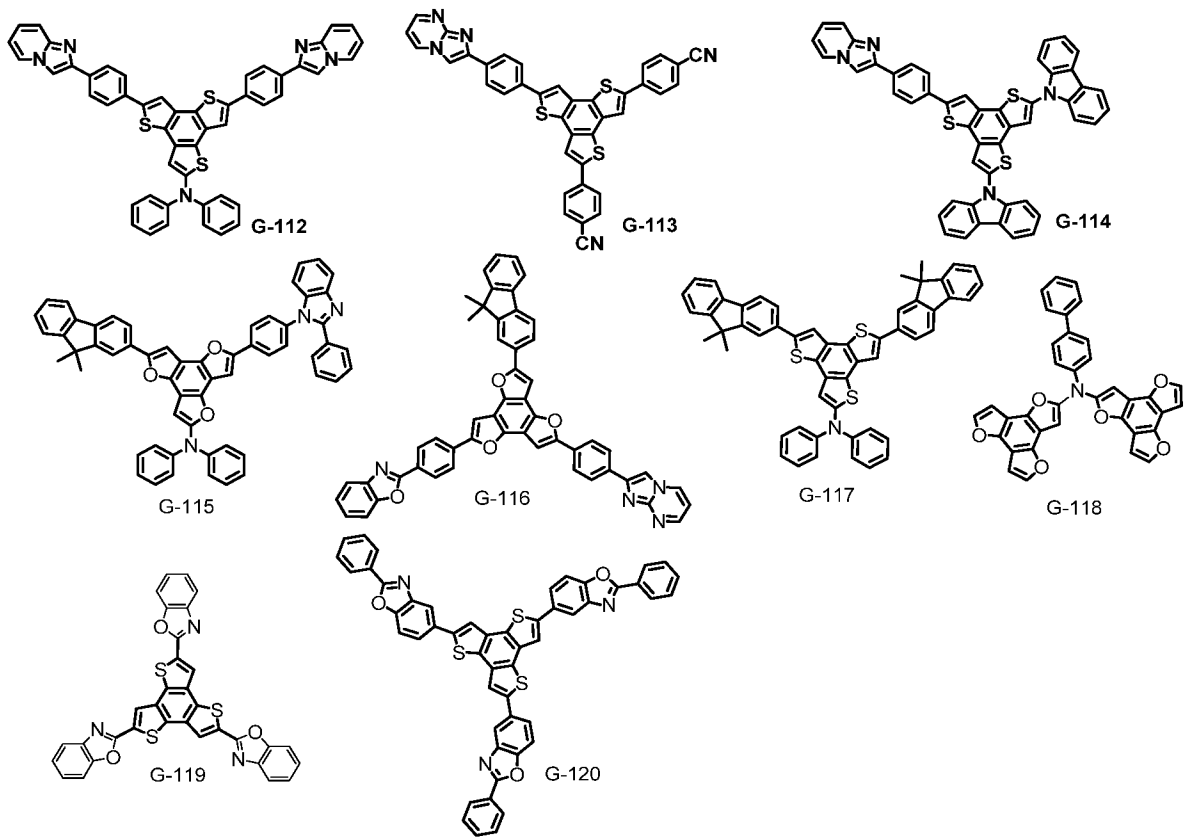












其中：以上结构中的 H 可以进一步被任意取代。

按照本发明所述的有机电致发光器件，光取出层的材料需要较高的玻璃化温度，以提升光取出层的材料的热稳定性。在某些实施例中，其玻璃化温度 $T_g \geq 100^\circ\text{C}$ ，在一个实施例中， $T_g \geq 120^\circ\text{C}$ ，在又一个实施例中， $T_g \geq 140^\circ\text{C}$ ，在再一个实施例中， $T_g \geq 160^\circ\text{C}$ ，在另一个实施例中， $T_g \geq 180^\circ\text{C}$ 。

在某些实施例中，按照本发明所述的有机电致发光器件，光取出层的材料在波长 630 nm 处折射率大于 1.7；进一步地，光取出层的材料在波长 630 nm 处折射率大于 1.78；更进一步地，光取出层的材料在波长 630 nm 处折射率大于 1.83。

在另一些实施例中，按照本发明所述的有机电致发光器件，光取出层的材料单线态能量(S1)大于或等于 2.7 eV；进一步地，光取出层的材料单线态能量(S1)大于或等于 2.8 eV；更进一步地，光取出层的材料单线态能量(S1)大于或等于 2.85 eV。

在另一些实施例中，按照本发明所述的有机电致发光器件，光取出层的材料单线态能量(S1)小于或等于 3.1 eV；进一步地，光取出层的材料单线态能量(S1)小于或等于 3.0 eV。

按照本发明所述的有机电致发光器件，光取出层的材料需要较小的消光系数，在波长为 430 nm 时的消光系数小于 0.1；进一步地，在波长为 430 nm 时的消光系数小于 0.003；更进一步地，在波长为 430 nm 时的消光系数小于 0.001。对可见光有较高的透射率，降低对设备出光效率的影响。

在某些实施例中，按照本发明的有机电致发光器件，其光取出层在 $\leq 400\text{nm}$ 的波长范围有较大的消光系数；进一步地，在波长为 350nm 时的消光系数 ≥ 0.3 ；更进一步地，在波长为 350nm 时的消光系数 ≥ 0.5 ；再进一步地，在波长为 350nm 时的消光系数 ≥ 0.7 ，特别地，在波长为 350nm 时的消光系数 ≥ 1.0 。

在某些实施例中，按照本发明的有机电致发光器件是有机发光二极管，其中光取出层位于阴极表面上。

在一个实施例中，按照本发明所述的有机电致发光器件，其中包括一个或者更多个有机功能层，所述的有机功能层选自电子注入层、电子传输层、空穴注入层、空穴传输层和发光层的一个或多个层，其中至少包含一个发光层。

在某些实施例中,按照本发明所述的有机电致发光器件,其中所述发光层中的发光材料选自单重态发光体、三重态发光体或者 TADF 材料。

在某些实施例中,按照本发明所述的有机电致发光器件,其中所述有机功能层选自空穴传输层、发光层和电子传输层。

下面对单重态发光体、三重态发光体及 TADF 材料作一些较详细描述(但不限于此)。

1. 单重态发光体

单重态发光体往往有较长的共轭 π 电子系统。迄今,已有许多例子,例如在 WO2001021729A1 中公开的苯乙烯胺及其衍生物,在 WO2008/006449 中公开的茚并芴及其衍生物及在 US7233019 中公开的芴的三芳胺衍生物。

在一个实施例中,单重态发光体可选自一元苯乙烯胺、二元苯乙烯胺、三元苯乙烯胺、四元苯乙烯胺、苯乙烯膦、苯乙烯醚和芳胺。

一元苯乙烯胺是指一种化合物,它包含一个无取代或取代的苯乙烯基组和至少一个胺,特别是芳香胺。二元苯乙烯胺是指一种化合物,它包含二个无取代或取代的苯乙烯基组和至少一个胺,特别是芳香胺。三元苯乙烯胺是指一种化合物,它包含三个无取代或取代的苯乙烯基组和至少一个胺,特别是芳香胺。四元苯乙烯胺是指一种化合物,它包含四个无取代或取代的苯乙烯基组和至少一个胺,特别是芳香胺。在一个实施例中,苯乙烯是二苯乙烯,其可能会进一步被取代。相应的膦类和醚类的定义与胺类相似。芳基胺或芳香胺是指一种化合物,包含三个直接联接氮的无取代或取代的芳香环或杂环系统。这些芳香族或杂环的环系统中至少有一个为稠环系统,特别是有至少 14 个芳香环原子。其中例子有芳香葱胺、芳香葱二胺、芳香芘胺、芳香芘二胺、芳香屈胺和芳香屈二胺。芳香葱胺是指一种化合物,其中一个二元芳基胺基团直接联到葱上,特别是在 9 的位置上。一个芳香葱二胺是指一种化合物,其中二个二元芳基胺基团直接联到葱上,特别是在 9,10 的位置上。芳香芘胺、芳香芘二胺、芳香屈胺和芳香屈二胺的定义类似,特别地,其中二元芳基胺基团联到芘的 1 或 1,6 位置上。

基于乙烯胺及芳胺的单重态发光体的例子,可在下述专利文件中找到: WO 2006/000388, 和 US 2008/0113101 A1 特此上述列出的专利文件中的全部内容并入本文作为参考。

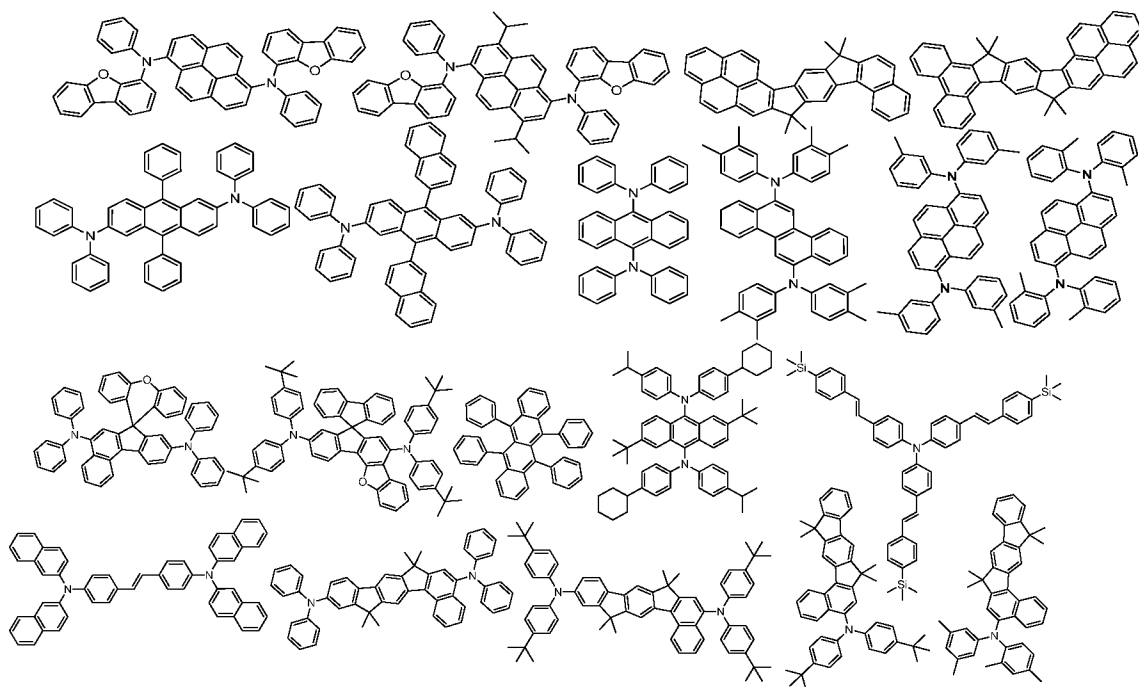
基于均二苯乙烯及其衍生物的单重态发光体的例子有 US 5121029。

进一步的单重态发光体可选于茚并芴-胺和茚并芴-二胺,如 WO 2006/122630 所公开的,苯并茚并芴-胺和苯并茚并芴-二胺,如 WO 2008/006449 所公开的,二苯并茚并芴-胺和二苯并茚并芴-二胺,如 WO2007/140847 所公开的。

进一步的单重态发光体可选于基于芴的稠环体系,如 US2015333277A1、US2016204355A1 所公开的。

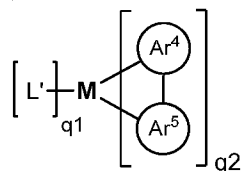
更进一步的单重态发光体可选于芴的衍生物,如 US2013175509A1 所公开的结构;芴的三芳胺衍生物,如 CN102232068B 所公开的含有二苯并呋喃单元的芴的三芳胺衍生物;其它具有特定结构的芴的三芳胺衍生物,如 CN105085334A 所公开的。其他可用作单重态发光体的材料有多环芳烃化合物,特别是如下化合物的衍生物:葱如 9,10-二(2-萘并葱),萘,四苯,氧杂葱,菲,芘(如 2,5,8,11-四-*t*-丁基芘),茚并芘,苯撑如(4,4'-双(9-乙基-3-吡啶乙烯基)-1,1'-联苯),二茚并芘,十环烯,六苯并苯,芴,螺二芴,芳基芘,亚芳香基乙烯,环戊二烯如四苯基环戊二烯,红荧烯,香豆素,若丹明,喹吖啶酮,吡喃如 4(二氰基亚甲基)-6-(4-对二甲氨基苯乙烯基-2-甲基)-4H-吡喃 (DCM),噻喃,双(吡喃基)亚胺硼化合物,双(吡喃基)亚甲基化合物,carbostyryl 化合物,噻吩酮,苯并恶唑,苯并噻唑,苯并咪唑及吡咯并吡咯二酮。一些单重态发光体的材料可在下述专利文件中找到: US 20070252517 A1, US 2007/0252517 A1。特此将上述列出的专利文件中的全部内容并入本文作为参考。

下面的表中列出一些合适的单重态发光体的例子:



2.三重态发光体

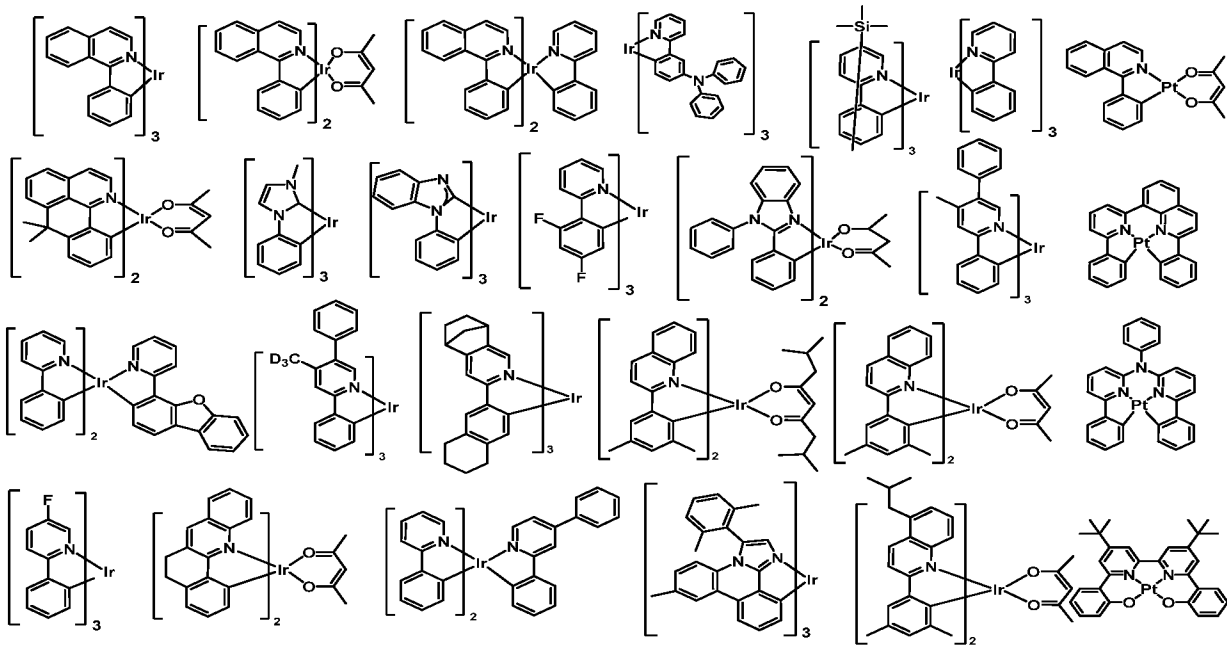
三重态发光体也称磷光发光体。在一个实施例中，三重态发光体是具有通式 $M(L)_n$ 的金属络合物，其中 M 是一金属原子， L 每次出现时可以是相同或不同，是一有机配体，它通过一个或多个位置键接或配位连接到金属原子 M 上， n 是 1 至 6 之间的整数。进一步地，三重态发光体包含有螯合配体，即配体，通过至少两个结合点与金属配位，更进一步考虑的是三重态发光体包含有两个或三个相同或不同的双齿或多齿配体。螯合配体有利于提高金属络合物的稳定性。在一个实施例中，可用作三重态发光体的金属络合物有如下形式：



金属原子 M 选自：过渡金属元素、铜系元素、或钇系元素。进一步地，金属原子 M 选自 Ir, Pt, Pd, Au, Rh, Ru, Os, Re, Cu, Ag, Ni, Co, W 或 Eu。更进一步地，金属原子 M 选自 Ir, Au, Pt, W 或 Os。

Ar^4 , Ar^5 每次出现时可以是相同或不同，是一个环状基团，其中 Ar^4 至少包含有一个施主原子，即有一孤对电子的原子，如氮，通过施主原子，环状基团与金属配位连接；其中 Ar^5 至少包含有一个碳原子，通过碳原子，环状基团与金属连接； Ar^4 和 Ar^5 由共价键联接在一起，可各自携带一个或多个取代基团，它们也可再通过取代基团联接在一起； L' 每次出现时可以是相同或不同，是一个双齿螯合的辅助配体，特别是单阴离子双齿螯合配体； $q1$ 可以是 0、1、2 或 3，进一步地， $q1$ 是 2 或 3； $q2$ 可以是 0、1、2 或 3，进一步地， $q2$ 是 1 或 0。有机配体的例子可选自苯基吡啶衍生物或 7,8-苯并喹啉衍生物。所有这些有机配体都可能被取代，例如被烷基链或含氟或硅取代。在一个实施例中，辅助配体可选自乙酸丙酮或苦味酸。

一些三重态发光体的材料及其应用的例子可在下述专利文件和文献中找到：WO2005033244, WO2005019373, US20050258742, WO2014007565, Baldo et al. *Nature* (2000), 750。特此将上述列出的专利文件和文献中的全部内容并入本文作为参考。在下面的表中列出一些合适的三重态发光体的例子：

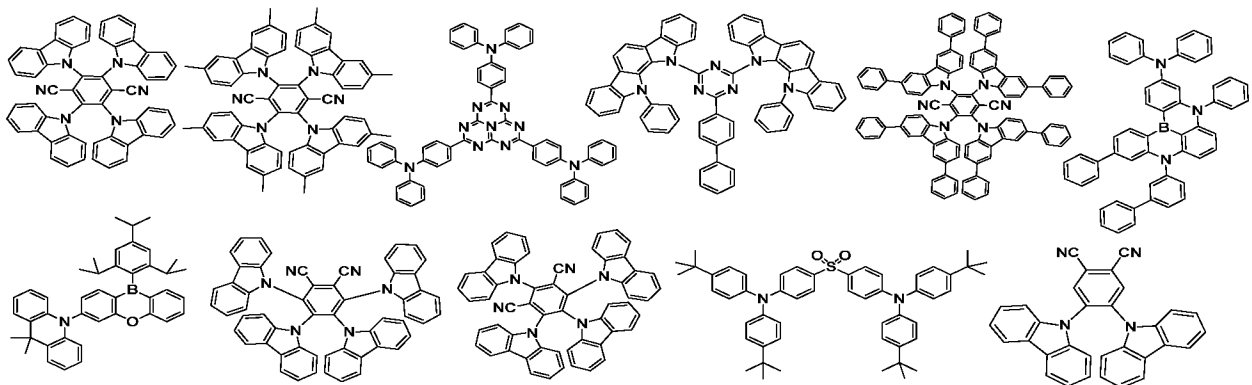


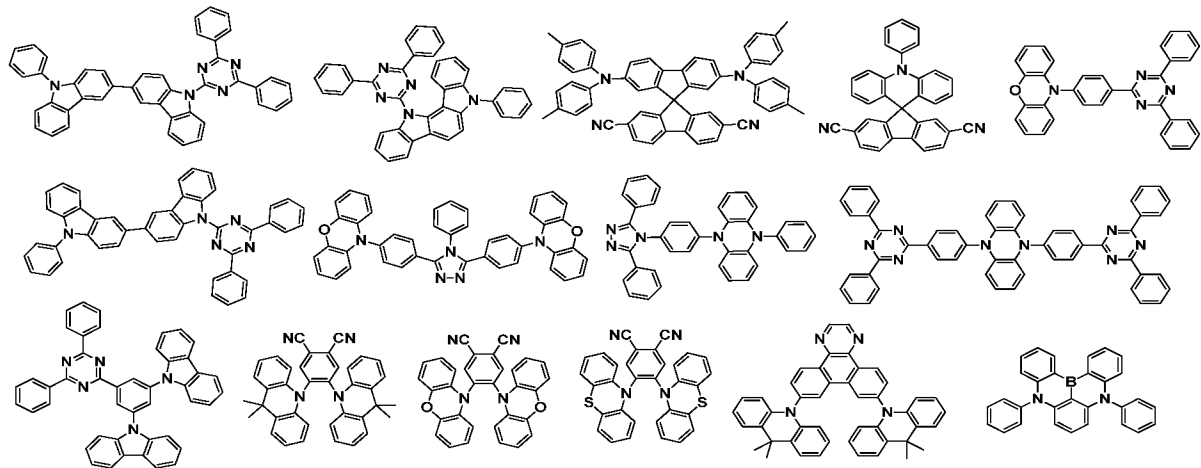
3. 热激活延迟荧光发光材料 (TADF)

传统有机荧光材料只能利用电激发形成的 25% 单线态激子发光，器件的内量子效率较低（最高为 25%）。尽管磷光材料由于重原子中心强的自旋-轨道耦合增强了系间穿越，可以有效利用电激发形成的单线态激子和三线态激子发光，使器件的内量子效率达到 100%。但磷光材料昂贵，材料稳定性差，器件效率滚降严重等问题限制了其在 OLED 中的应用。热激活延迟荧光发光材料是继有机荧光材料和有机磷光材料之后发展的第三代有机发光材料。该类材料一般具有小的单线态-三线态能级差 (ΔE_{st})，三线态激子可以通过反系间穿越转变成单线态激子发光。这可以充分利用电激发下形成的单线态激子和三线态激子。器件内量子效率可达到 100%。同时材料结构可控，性质稳定，价格便宜无需要贵金属，在 OLED 领域的应用前景广阔。

TADF 材料需要具有较小的单线态-三线态能级差，进一步是 $\Delta E_{st} < 0.3 \text{ eV}$ ，更进一步是 $\Delta E_{st} < 0.2 \text{ eV}$ ，再进一步是 $\Delta E_{st} < 0.1 \text{ eV}$ 。在一个实施例中，TADF 材料有比较小的 ΔE_{st} ，在另一个实施例中，TADF 有较好的荧光量子效率。一些 TADF 发光的材料可在下述专利文件中找到：CN103483332 (A)，TW201309696 (A)，US20120217869 (A1)，WO2013133359 (A1)，Adachi, et.al. Adv. Mater., 21, 2009, 4802, Adachi, et.al. Appl. Phys. Lett., 98, 2011, 083302, Adachi, et.al. Appl. Phys. Lett., 101, 2012, 093306，特此将上述列出的专利或文章文件中的全部内容并入本文作为参考。

在下面的表中列出一些合适的 TADF 发光材料的例子：





按照本发明所述的有机电致发光器件可选于，但不限于：有机发光二极管（OLED），有机发光电池，有机发光场效应管，有机激光器等，特别是为 OLED。

下面对有机电致发光器件的器件结构阴极、阳极和光取出层做一描述，但不限于此。

5 阳极可包含导电金属或金属氧化物，或导电聚合物。阳极可以容易地注入空穴到空穴注入层（HIL）或空穴传输层（HTL）或发光层中。在一个实施例中，阳极的功函数和发光层中的发光体或作为 HIL 或 HTL 或电子阻挡层（EBL）的 p 型半导体材料的 HOMO 能级或价带能级的差的绝对值小于 0.5 eV，进一步地，该绝对值小于 0.3 eV，更进一步地，该绝对值小于 0.2 eV。阳极材料的例子包含但不限于：Al、Cu、Au、Ag、Mg、Fe、Co、Ni、Mn、Pd、Pt、
10 ITO、铝掺杂氧化锌（AZO）等。其他合适的阳极材料是已知的，本领域普通技术人员可容易地选择使用。阳极材料可以使用任何合适的技术沉积，如一合适的物理气相沉积法，包含射频磁控溅射，真空热蒸发，电子束（e-beam）等。在某些实施例中，阳极是图案结构化的。图案化的 ITO 导电基板可在市场上买到，并且可以用来制备根据本发明的有机电致发光器件。

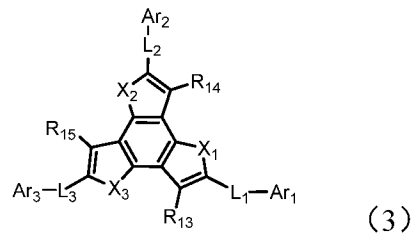
15 阴极可包含导电金属或金属氧化物。阴极可以容易地注入电子到 EIL 或 ETL 或直接到发光层中。在一个实施例中，阴极的功函数和发光层中发光体或作为电子注入层（EIL）或电子传输层（ETL）或空穴阻挡层（HBL）的 n 型半导体材料的 LUMO 能级或导带能级的差的绝对值小于 0.5 eV，进一步地，该绝对值小于 0.3 eV，更进一步地，该绝对值小于 0.2 eV。原则上，所有可用作 OLED 的阴极的材料都可能作为本发明器件的阴极材料。阴极材料的例子包含但不限于：Al、Au、Ag、Ca、Ba、Mg、LiF/Al、MgAg 合金、BaF₂/Al、Cu、Fe、Co、
20 Ni、Mn、Pd、Pt、ITO 等。阴极材料可以使用任何合适的技术沉积，如合适的物理气相沉积法，包含射频磁控溅射，真空热蒸发，电子束（e-beam）等。

光取出层需要有合适能级结构，在波长小于 400 nm 的区域有较强的吸收，波长大于 400 nm 的可见光则吸收弱或接近零，避免器件内部材料在后续过程中受到高能光线照射而造成损伤。同时，光取出层拥有较高的折射率，能够对可见光的发射进行有益导出，提高有机电子
25 发光器件的发光效率。光取出层与相邻电极之间的界面的反射率大时，光干涉的影响大，因此进一步地，构成光取出层的材料的折射率大于相邻的电极的折射率，折射率在 630 nm 处为 1.50 以上即可，更进一步地，折射率在 630 nm 处为 1.70 以上，再进一步地，折射率在 630 nm 处为 1.80 以上。

30 在一些实施例中，按照本发明的有机电致发光器件，一般光取出层有机化合物厚度为 10 nm 至 200 nm；进一步地，光取出层有机化合物厚度为 20 nm 至 150 nm；更进一步地，光取出层有机化合物厚度为 30 nm 至 100 nm；特别地，光取出层有机化合物厚度为 40 nm 至 90 nm。

本发明还涉及按照本发明的电致发光器件在各种电子设备中的应用，包含，但不限于，显示设备、照明设备、光源、传感器等等。

本发明进一步涉及一种杂原子多芳环化合物，具有通式（3）所示的结构式：



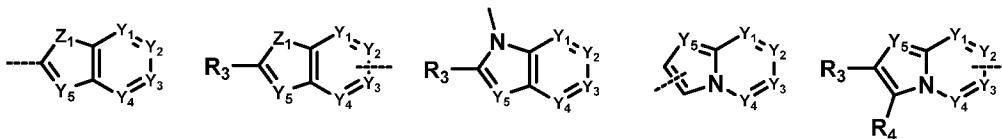
其中：

X₁、X₂、X₃ 每次出现时，分别独立选自 NR₁、O、S、Se；

Ar₂、Ar₃ 每次出现时，分别独立选自：氢、氰基、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团或杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 3 至 25 的非芳香族环系、或者取代或未取代的芳胺基团；

L₁、L₂、L₃ 每次出现时，分别独立选自：单键、烯基、炔基、酰基、酰胺基、羰基、砜基、取代或未取代的碳原子数为 1 至 60 的烷基、取代或未取代的碳原子数为 1 至 60 的烷氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的杂芳香基团；

Ar₁ 选自以下基团的一种或者其组合：



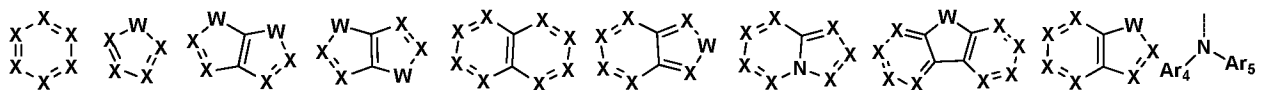
其中：

Y₁~Y₅ 每次出现时，分别独立选自 N 或 CR₇；

Z₁ 每次出现时，分别独立选自 NR₈、O、S；

R₁、R₇~R₈、R₃~R₄、R₁₃~R₁₅ 每次出现时，分别独立选自：氢，D，具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷基，具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷氧基，具有 1 至 20 个 C 原子的直链硫代烷氧基，具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷基，具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷氧基，具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个 C 原子的酮基、具有 2 至 20 个 C 原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个 C 原子的芳氧基羰基、氰基、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯、硫氰酸酯、异硫氰酸酯、羟基、硝基、CF₃、Cl、Br、F、可交联的基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的杂芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的芳氧基、具有 5 至 60 个环原子的杂芳氧基基团、或这些基团的组合。

进一步地，Ar₂、Ar₃ 可选自以下基团的一种或者其组合：



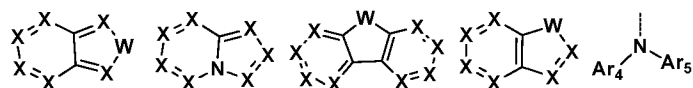
其中：

X 是 CR₉ 或 N；W 选自 CR₉R₁₀、NR₉、C(=O)、O、S、Se；

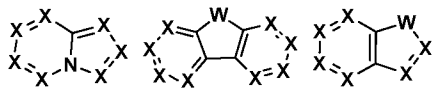
R₉~R₁₀ 每次出现时，分别独立选自：氢，D，具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷基，具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷氧基，具有 1 至 20 个 C 原子的直链硫代烷氧基，具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷基，具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷氧基，具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个 C 原子的酮基、具有 2 至 20 个 C 原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个 C 原子的芳氧基羰基、氰基、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯、硫氰酸酯、异硫氰酸酯、羟基、硝基、CF₃、Cl、Br、F、可交联的基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的杂芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的芳氧基、具有 5 至 60 个环原子的杂芳氧基基团、或这些基团的组合。

Ar₄、Ar₅选自：取代或未取代的环原子数为5至60的芳香基团、取代或未取代的环原子数为5至60的芳香基团杂芳香基团、或者具有取代或未取代的环原子数为3至25的非芳香族环系。

在一个实施例中，Ar₂、Ar₃可选自以下基团的一种或者其组合：

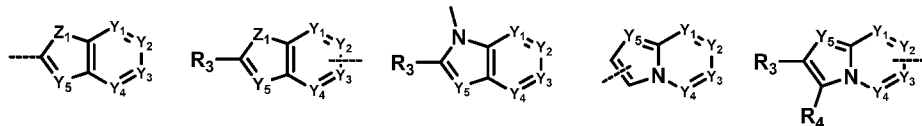


在一个实施例中，Ar₂、Ar₃均选自以下基团的一种或者其组合：

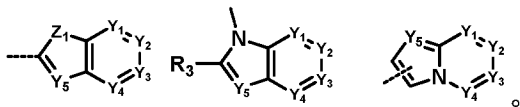


在某些优选的实施例中，Ar₂和Ar₃选自相同的结构；

在某些优选的实施例中，Ar₂和Ar₃可选自如下结构：

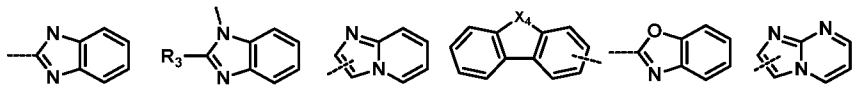


在某些优选的实施例中，Ar₂和Ar₃至少一个选自如下结构；优选地，Ar₂和Ar₃均选自如下结构：

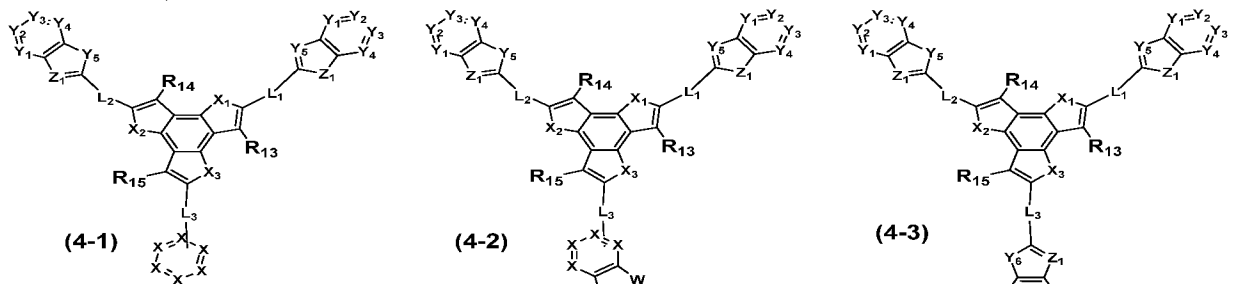


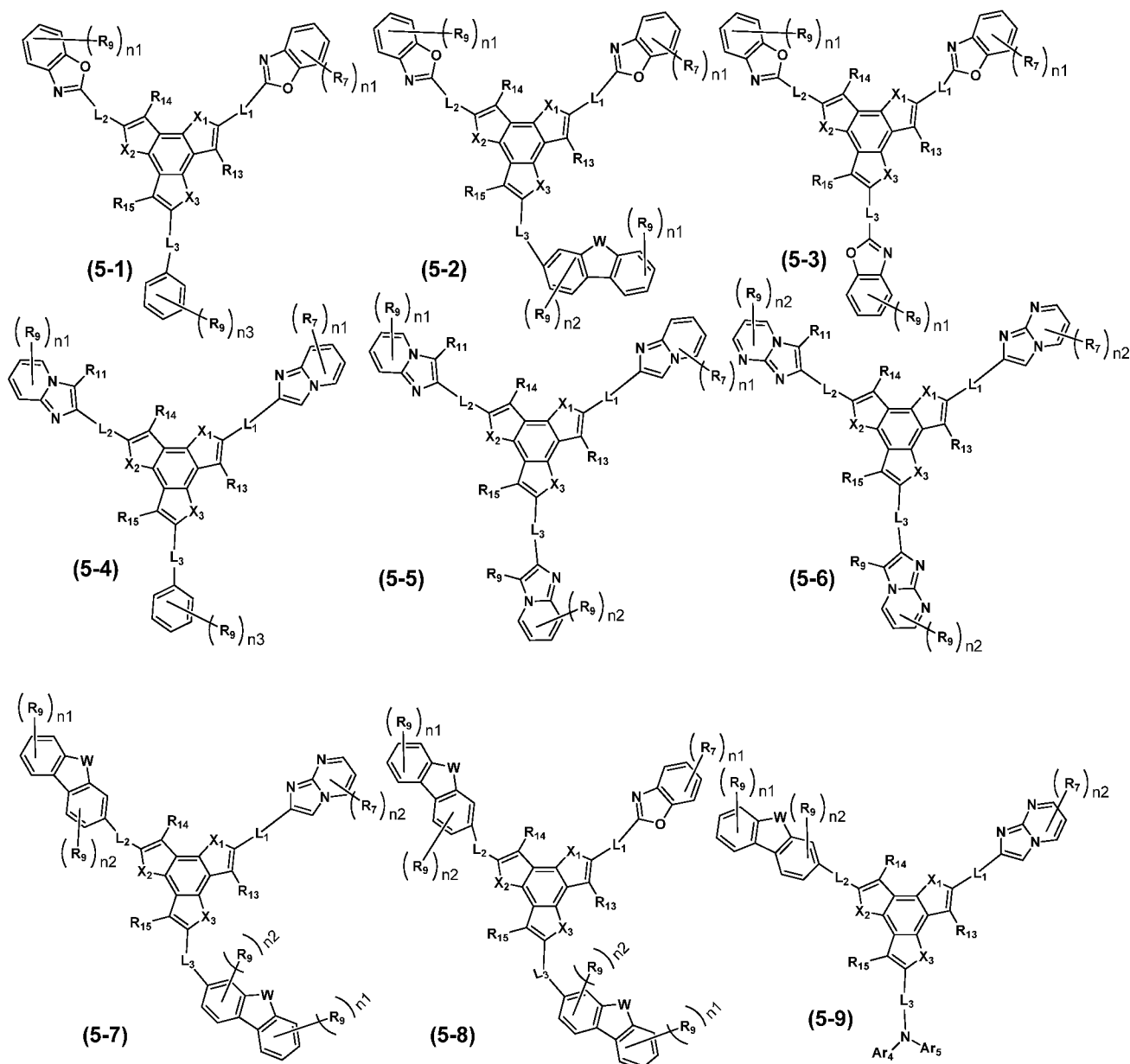
在某些更优选的实施例中，Ar₂和Ar₃选自与Ar₁相同的结构。优选地，Ar₂、Ar₃与Ar₁

同时选自如下基团：



进一步地，通式(3)所述的结构可选自通式(4-1)~(4-9)的任意一种化合物：





其中： $X_1 \sim X_3$ 、 $L_1 \sim L_3$ 、 $R_1 \sim R_5$ 、 $Ar_4 \sim Ar_5$ 含义同上所述； R_7 、 R_9 含义同上； n_1 选自0~4的整数； n_2 选自0~3的整数； n_3 选自0~5的整数。

在一实施例中， n_1 ， n_2 ， n_3 均选自0。

在一个实施例中， X_1 、 X_2 、 X_3 每次出现时，分别独立选自O、S；在一实施例中， X_1 、 X_2 、 X_3 选自相同的基团，进一步地， X_1 、 X_2 、 X_3 同时选自O或同时选自S。

在一个实施例中，按照本发明所述的化合物， $L_1 \sim L_3$ 均选自单键或苯基。

具体地，按照本发明所述的化合物，选自如上所述的结构式(G-41) - (G-120)任意一种，但不限于此。

按照本发明所述的杂原子多芳环化合物，不仅可以运用于有机电致发光器件光取出层，也可以用于其它有机功能层，例如：电子注入层、电子传输层、空穴注入层、空穴传输层和发光层。

本发明的一个目的是为蒸镀型 OLED 提供材料解决方案。

在某些实施例中，本发明的杂原子多芳环化合物的分子量 ≤ 1200 g/mol，进一步地，本发明的杂原子多芳环化合物的分子量 ≤ 1100 g/mol，更进一步地，本发明的杂原子多芳环化合物的分子量 ≤ 1000 g/mol，再进一步地，本发明的杂原子多芳环化合物的分子量 ≤ 950 g/mol，特别地，本发明的杂原子多芳环化合物的分子量 ≤ 900 g/mol。

本发明的另一个目的是为印刷 OLED 提供材料解决方案。

在某些实施例中,本发明的杂原子多芳环化合物的分子量 ≥ 800 g/mol,进一步地,本发明的杂原子多芳环化合物的分子量 ≥ 900 g/mol,更进一步地,本发明的杂原子多芳环化合物的分子量 ≥ 1000 g/mol,再进一步地,本发明的杂原子多芳环化合物的分子量 ≥ 1100 g/mol,特别地,本发明的杂原子多芳环化合物的分子量 ≥ 1200 g/mol。

在另一些实施例中,本发明的杂原子多芳环化合物在 25°C 时,在甲苯中的溶解度 ≥ 2 mg/ml,进一步地,在甲苯中的溶解度 ≥ 3 mg/ml,更进一步地,在甲苯中的溶解度 ≥ 4 mg/ml,特别地,在甲苯中的溶解度 ≥ 5 mg/ml。

本发明还涉及一种组合物,包含至少一种如上所述的化合物,及至少一种有机溶剂;所述的至少一种的有机溶剂选自:芳族、杂芳族、酯、芳族酮、芳族醚、脂肪族酮、脂肪族醚、脂环族、烯烃类化合物、硼酸酯、磷酸酯类化合物,或两种及两种以上溶剂的混合物。

本发明还进一步涉及包含至少一种如上所述的化合物的有机电子器件。按照本发明所述的有机电子器件可选于,但不限于,有机发光二极管 (OLED)、有机光伏电池、有机发光电池、有机场效应管、有机发光场效应管、有机激光器、有机自旋电子器件、有机传感器及有机等离子体发射二极管等,特别的为 OLED。

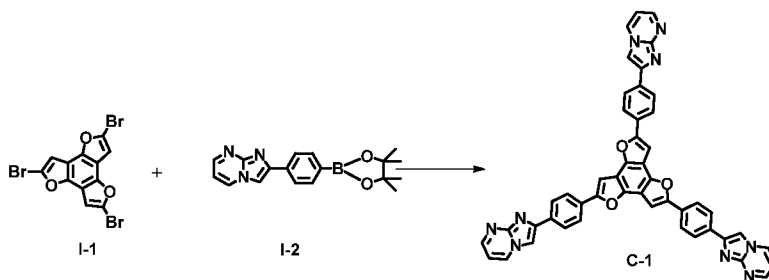
下面将结合实施例对本发明进行说明,但本发明并不局限于下述实施例,应当理解,所附权利要求概括了本发明的范围。在本发明构思的引导下,本领域的技术人员应意识到,对本发明的各实施例所进行的一定的改变,都将被本发明的权利要求书的精神和范围所覆盖。

具体实施例

以下将用具体实施例对本发明进行阐述,但本发明并不局限于下列实施例。应当理解,所附权利要求概括了本发明的范围。在本发明构思的引导下本领域的技术人员应意识到,对本发明的各实施例所进行的一定的改变,都将被本发明的权利要求书的范围所覆盖。

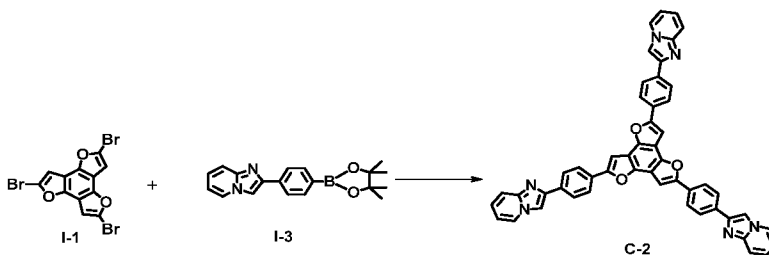
合成实施例的结构如下:

化合物 C-1 合成:



称取 I-1 (2 g, 4.64 mmol), I-2 (4.8 g, 15 mmol), 碳酸钾 (4.14 g, 30 mmol), 四(三苯基膦)钯 (268 mg, 0.23 mmol) 加入 250 mL 的双口烧瓶,加入甲苯及甲醇的混合溶剂 150 mL, 置换氮气三次, 升温至 90°C, 搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水, 乙酸乙酯萃取, 有机相用盐水洗涤, 硫酸钠干燥, 减压蒸馏除去有机溶剂, 硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.62 g, 产率 45%。

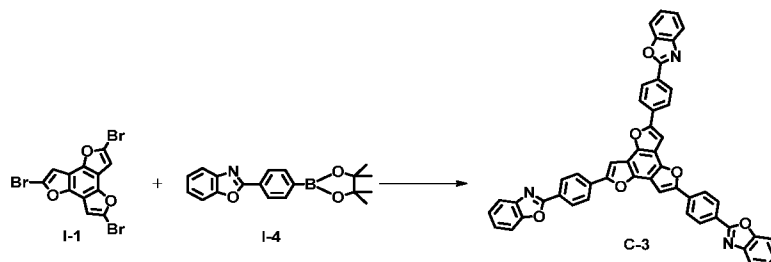
化合物 C-2 合成:



称取 I-1 (1.26 g, 2.92 mmol), I-3 (3.84 g, 12 mmol), 碳酸钾 (3.73 g, 27 mmol), 四(三苯基膦)钯 (173 mg, 0.15 mmol) 加入 100 mL 的双口烧瓶,加入甲苯及甲醇的混合溶剂 60 mL,

抽通充置换氮气三次，升温至 90℃，搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水，乙酸乙酯萃取，有机相用盐水洗涤，硫酸钠干燥，减压蒸馏除去有机溶剂，硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.4 g，产率 62%。

化合物 **C-3** 合成：

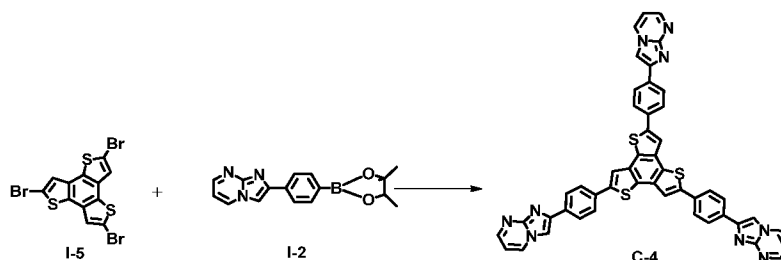


5

称取 I-1 (1.27 g, 2.94 mmol), I-4 (3.85 g, 12 mmol), 碳酸钾 (3.73 g, 27 mmol), 四(三苯基膦)钯 (173 mg, 0.15 mmol) 加入 100 mL 的双口烧瓶，加入甲苯及甲醇的混合溶剂 60 mL，置换氮气三次，升温至 90℃，搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水，乙酸乙酯萃取，有机相用盐水洗涤，硫酸钠干燥，减压蒸馏除去有机溶剂，硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.6 g，产率 70%。

10

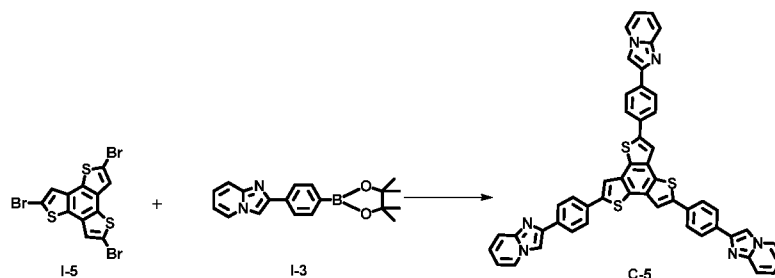
化合物 **C-4** 合成：



15

称取 I-5 (1.15 g, 2.4 mmol), I-2 (3.08 g, 9.6 mmol), 碳酸钾 (3.04 g, 22 mmol), 四(三苯基膦)钯 (138 mg, 0.12 mmol) 加入 250 mL 的双口烧瓶，加入甲苯及甲醇的混合溶剂 150 mL，置换氮气三次，升温至 90℃，搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水，乙酸乙酯萃取，有机相用盐水洗涤，硫酸钠干燥，减压蒸馏除去有机溶剂，硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.27 g，产率 64%。

化合物 **C-5** 合成：

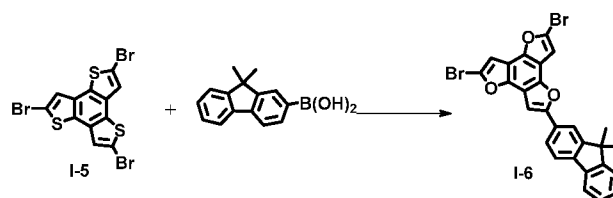


20

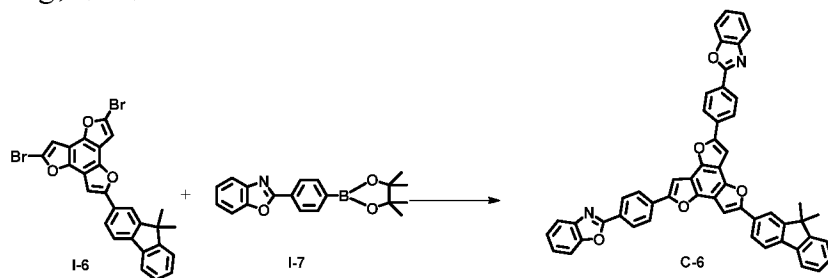
称取 I-5 (1.43 g, 2.97 mmol), I-3 (3.84 g, 12 mmol), 碳酸钾 (3.73 g, 27 mmol), 四(三苯基膦)钯 (273 mg, 0.15 mmol) 加入 100 mL 的双口烧瓶，加入甲苯及甲醇的混合溶剂 60 mL，置换氮气三次，升温至 90℃，搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水，乙酸乙酯萃取，有机相用盐水洗涤，硫酸钠干燥，减压蒸馏除去有机溶剂，硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.1 g，产率 45%。

25

化合物 **C-6** 合成：

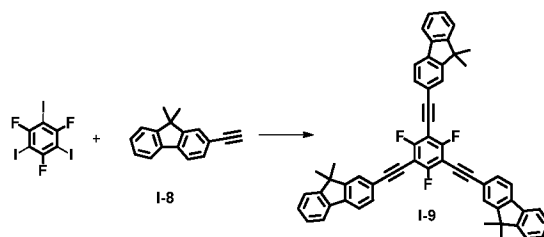


称取 I-5 (2 g, 4.2 mmol), 9, 9-二甲基芴-2-硼酸 (0.95 g, 4.2 mmol), 碳酸钾 (2 g, 15 mmol), 四(三苯基膦)钯 (145 mg, 0.13 mmol) 加入 250 mL 的双口烧瓶, 加入甲苯及甲醇的混合溶剂 100 mL, 置换氮气三次, 升温至 90°C, 搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水, 乙酸乙酯萃取, 有机相用盐水洗涤, 硫酸钠干燥, 减压蒸馏除去有机溶剂, 硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.46 g, 产率 64%。

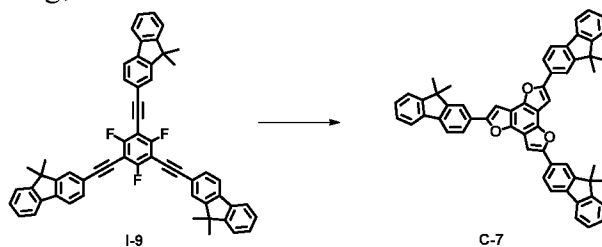


称取 I-6 (1.4 g, 2.56 mmol), I-7 (1.8 g, 5.6 mmol), 碳酸钾 (1.8 g, 13 mmol), 四(三苯基膦)钯 (92 mg, 0.08 mmol) 加入 250 mL 的双口烧瓶, 加入甲苯及甲醇的混合溶剂 100 mL, 置换氮气三次, 升温至 90°C, 搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水, 乙酸乙酯萃取, 有机相用盐水洗涤, 硫酸钠干燥, 减压蒸馏除去有机溶剂, 硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.43 g, 产率 72%。

化合物 C-7 合成:

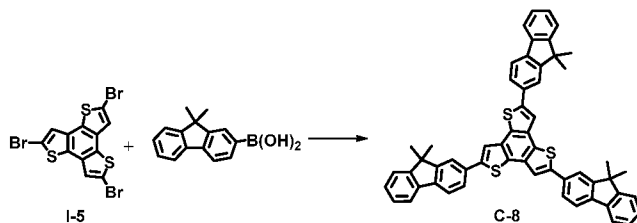


称取 1, 3, 5-三氟-2, 4, 6-三碘苯 (3 g, 3.92 mmol), I-8 (2.72 g, 12.5 mmol), 二(三苯基膦)氯化钯 (0.21 g, 0.3 mmol), 碘化亚铜 (57 mg, 0.3 mmol) 加入 250 mL 的双口烧瓶, 加入四氢呋喃 80 mL 及三乙胺 20 mL, 置换氮气三次, 升温至 45°C, 搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水, 分出有机相, 乙酸乙酯萃取, 合并有机相, 减压蒸馏除去有机溶剂, 硅胶拌样柱层析得到目标产物 2 g, 产率 45%。



称取 I-9 (2 g, 2.55 mmol), 氢氧化铯 (3.75 g, 25 mmol), 加入 100 mL 的双口烧瓶, 加入 N, N-二甲基乙酰胺约 60 mL, 置换氮气三次, 升温至回流, 搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水, 乙酸乙酯萃取, 有机相用盐水洗涤, 硫酸钠干燥, 减压蒸馏除去有机溶剂, 硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.2 g, 产率 60%。

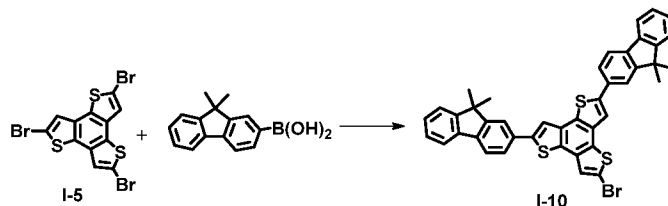
化合物 C-8 合成:



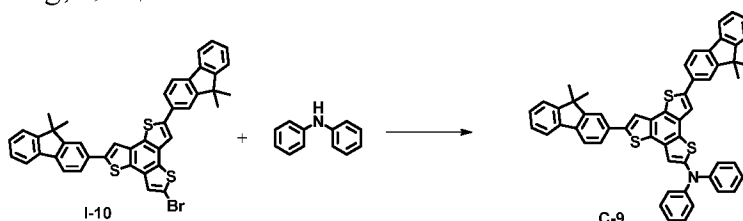
称取 I-5 (1.85 g, 3.86 mmol), 9, 9-二甲基芴-2-硼酸 (3.69 g, 15.5 mmol), 碳酸钾 (4.97

g, 36 mmol), 四(三苯基膦)钯(219 mg, 0.19 mmol)加入 100 mL 的双口烧瓶, 加入甲苯及甲醇的混合溶剂 60 mL, 置换氮气三次, 升温至 90℃, 搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水, 乙酸乙酯萃取, 有机相用盐水洗涤, 硫酸钠干燥, 减压蒸馏除去有机溶剂, 硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.3 g, 产率 41%。

5 化合物 C-9 合成:

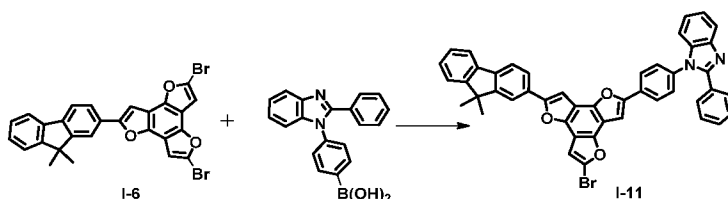


称取 I-5 (2.03 g, 4.24 mmol), 9, 9-二甲基芴-2-硼酸 (4.05 g, 17 mmol), 碳酸钾 (4.97 g, 36 mmol), 四(三苯基膦)钯 (243 mg, 0.21 mmol) 加入 100 mL 的双口烧瓶, 加入甲苯及甲醇的混合溶剂 60 mL, 置换氮气三次, 升温至 90℃, 搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水, 乙酸乙酯萃取, 有机相用盐水洗涤, 硫酸钠干燥, 减压蒸馏除去有机溶剂, 硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.5 g, 产率 50%。

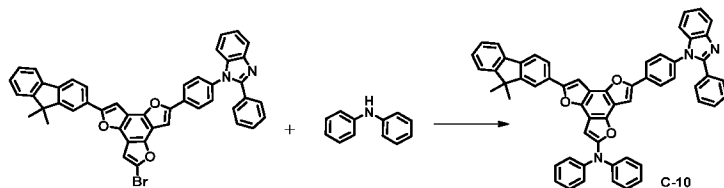


称取 I-10 (1.5 g, 2.1 mmol), 二苯胺 (0.42 g, 2.5 mmol), 三(二亚苄基丙酮)二钯 (55 mg, 0.06 mmol), 叔丁醇钠 (0.24 g, 2.5 mmol), 加入 250 mL 的双口烧瓶, 加入甲苯 70 mL, 置换氮气三次, 升温至 100℃, 搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水, 分出有机相, 乙酸乙酯萃取, 合并有机相, 减压蒸馏除去有机溶剂, 硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.38 g, 产率 82%。

化合物 C-10 合成:

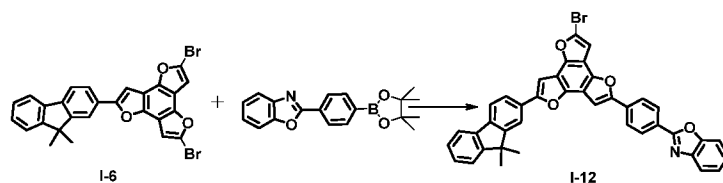


称取 I-6 (2.03 g, 5.43 mmol), 硼酸 (5.02 g, 16 mmol), 碳酸钾 (4.14 g, 30 mmol), 四(三苯基膦)钯 (312 mg, 0.27 mmol) 加入 100 mL 的双口烧瓶, 加入甲苯及甲醇的混合溶剂 70 mL, 置换氮气三次, 升温至 90℃, 搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水, 乙酸乙酯萃取, 有机相用盐水洗涤, 硫酸钠干燥, 减压蒸馏除去有机溶剂, 硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.8 g, 产率 45%。

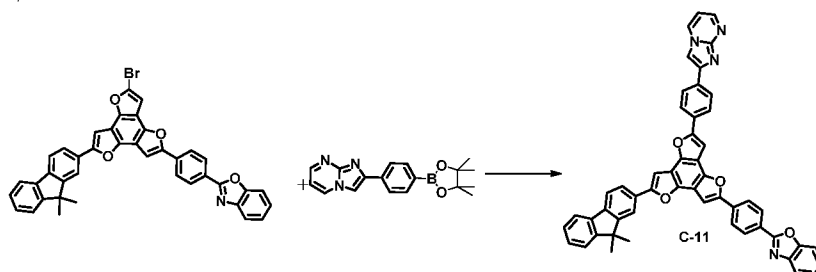


称取 I-11 (1.58 g, 2.14 mmol), 二苯胺 (0.42 g, 2.5 mmol), 三(二亚苄基丙酮)二钯 (55 mg, 0.06 mmol), 叔丁醇钠 (0.24 g, 2.5 mmol), 加入 100 mL 的双口烧瓶, 加入甲苯 60 mL, 置换氮气三次, 升温至 100℃, 搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水, 分出有机相, 乙酸乙酯萃取, 合并有机相, 减压蒸馏除去有机溶剂, 硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.2 g, 产率 68%。

化合物 C-11 合成:

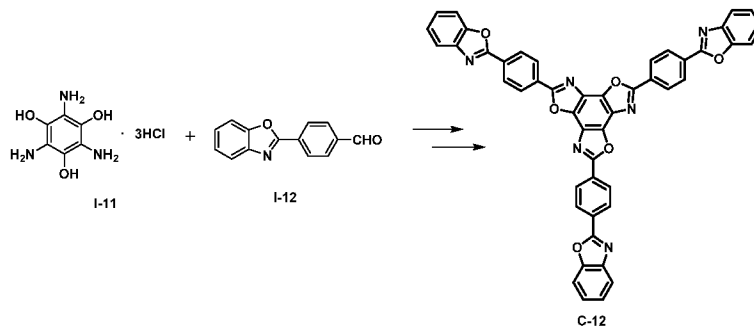


称取 I-6 (2.03 g, 5.78 mmol), 硼酸酯 (5.46 g, 17 mmol), 碳酸钾 (4.97 g, 36 mmol), 四 (三苯基膦) 钯 (334 mg, 0.29 mmol) 加入 100 mL 的双口烧瓶, 加入甲苯及甲醇的混合溶剂 60 mL, 置换氮气三次, 升温至 90°C, 搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水, 乙酸乙酯萃取, 有机相用盐水洗涤, 硫酸钠干燥, 减压蒸馏除去有机溶剂, 硅胶拌样柱层析得到目标产物 2.1 g, 产率 55%。



称取 I-12 (1.71 g, 2.58 mmol), 硼酸酯 (0.96 g, 3 mmol), 碳酸钾 (1.24 g, 9 mmol), 四 (三苯基膦) 钯 (150 mg, 0.13 mmol) 加入 100 mL 的双口烧瓶, 加入甲苯及甲醇的混合溶剂 40 mL, 置换氮气三次, 升温至 90°C, 搅拌过夜。待反应液冷却至室温后加水, 乙酸乙酯萃取, 有机相用盐水洗涤, 硫酸钠干燥, 减压蒸馏除去有机溶剂, 硅胶拌样柱层析得到目标产物 1.4g, 产率 70%。

化合物 C-12 合成:



将中间体 I-11 (4 g, 14.3 mmol) 置于充满氮气的反应容器中, 加入乙醇及吡啶 (50 mmol), 后加入中间体 2 (1.5 g, 50 mmol), 升温回流, 待反应完全后, 热过滤得到黄色固体。固体用乙醇洗涤, 减压下干燥并不进行进一步处理投入到干燥的二氯甲烷中, 加入 DDQ (11.35 g, 50 mmol), 并在室温下搅拌, 反应完全后, 体系用水洗涤, 浓缩溶剂后用二氯甲烷重结晶得到化合物 4.24 g, 总产率 38%。

有机化合物的能量结构

有机材料的能级可通过量子计算得到, 比如利用 TD-DFT (含时密度泛函理论) 通过 Gaussian09W (Gaussian Inc.), 具体的模拟方法可参见 WO2011141110。首先用半经验方法 “Ground State/DFT/ Default Spin/B3LYP/6-31G(d)” (Charge 0/Spin Singlet) 来优化分子几何结构, 然后有机分子的能量结构由 TD-DFT (含时密度泛函理论) 方法算得 “TD-SCF/DFT/ Default Spin/B3PW91” 与基组 “6-31G (d)” (Charge 0/Spin Singlet)。

通过真空蒸镀方式将化合物蒸镀于单晶硅上形成 50 nm 的薄膜, 单晶硅置于椭圆偏振仪 (ES-01) 样品台, 入射角 70°, 测试为大气环境, 化合物的消光系数 (k) 与折射率 (n) 测试结果由椭圆偏振仪得出。

其中, CBP 为 4,4'-二(9-咔唑)联苯

结果如表 1 所示：

表 1

化合物	S1 (eV)	消光系@430 nm	折射率@630 nm
C-1	2.87	0.05	1.82
C-2	2.83	0.02	1.80
C-3	3.03	0.01	1.81
C-4	2.89	0.02	1.80
C-5	2.83	0.03	1.79
C-6	3.08	0.01	1.80
C-7	3.17	0	1.77
C-8	3.13	0	1.76
C-9	2.94	0.03	1.78
C-10	3.07	0.01	1.79
C-11	2.87	0.04	1.80
C-12	3.01	0	1.82
CBP	3.44	0	1.74

从表 1 可以看出，上述化合物 C-1~C-12 均具有较大的折射率（大于 1.7），较高的折射率能保证更好的光提取效果；上述化合物的单线态能量较高，使得吸收可以集中在紫外波段；图 2 为化合物 C-7 在二氯甲烷溶液中浓度 10 mg/L 时的紫外可见吸收光谱，图 3 是化合物 C-8 在二氯甲烷溶液中浓度 10 mg/L 时的紫外可见吸收光谱，可以看出上述化合物紫外波段具有较高的吸收，在可见光波段吸收弱，能够抵抗外部高能量光对器件内部的损害。

OLED 器件的制备及表征

下面通过具体实施例来详细说明采用上述的 OLED 器件的制备过程，OLED 器件的结构为：ITO/Ag/ITO (阳极)/HATCN/SFNFB/m-CP: Ir (p-ppy)₃/NaTzF₂/LiF/Mg:Ag/光取出层，制备步骤如下：

清洗 ITO 导电玻璃阳极层，后用去离子水、丙酮、异丙醇超声清洗 15 分钟，然后在等离子体清洗器中处理 5 分钟以提高电极功函。在 ITO 阳极层上，通过真空蒸镀方式蒸镀空穴注入层材料 HATCN，厚度为 5 nm，蒸镀速率 1 Å/s。在空穴注入层上，通过真空蒸镀方式蒸镀空穴传输材料 SFNFB，厚度为 80 nm。在空穴传输层之上蒸镀发光层，m-CP 作为主体材料，Ir (p-ppy)₃ 作为掺杂材料，Ir (p-ppy)₃ 和 m-CP 的质量比为 1:9，厚度为 30 nm。在发光层之上，通过真空蒸镀方式蒸镀电子传输材料 NaTzF₂，厚度为 30 nm。在电子传输层之上，真空蒸镀电子注入层 LiF，厚度为 1 nm，该层为电子注入层 7。在电子注入层之上，真空蒸镀阴极 Mg:Ag 层，Mg:Ag 掺杂比例为 9:1，厚度 15 nm。在阴极层之上，通过真空蒸镀方式蒸镀光取出层化合物 **C-1**，厚度为 60 nm。

有机电致发光器件实施例 2：有机电致发光器件的光取出层化合物变为 **C-3**。

有机电致发光器件实施例 3：有机电致发光器件的光取出层化合物变为 **C-6**。

有机电致发光器件实施例 4：有机电致发光器件的光取出层化合物变为 **C-7**。

有机电致发光器件实施例 5：有机电致发光器件的光取出层化合物变为 **C-9**。

有机电致发光器件实施例 6：有机电致发光器件的光取出层化合物变为 **C-10**。

有机电致发光器件实施例 7：有机电致发光器件的光取出层化合物变为 **C-12**。

有机电致发光器件比较例 1：有机电致发光器件的光取出层化合物变为 CBP。

有机电致发光器件中所涉及的化合物结构如下：

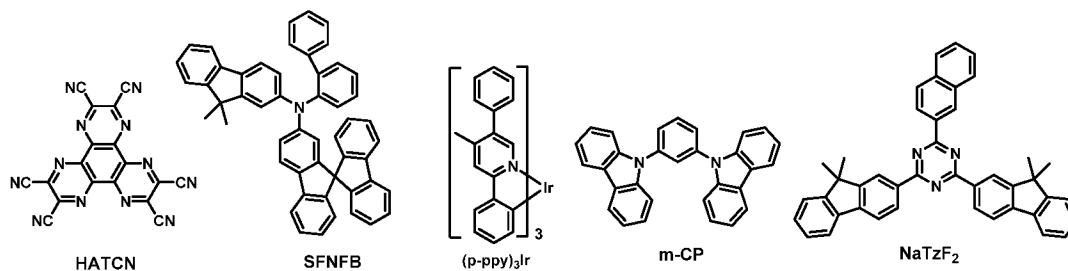


表 2

编号	光取出层化合物	发光效率 (cd/A)
1	C-1	110
2	C-3	118
3	C-6	113
4	C-7	102
5	C-9	102
6	C-10	104
7	C-12	112
8	CBP	87

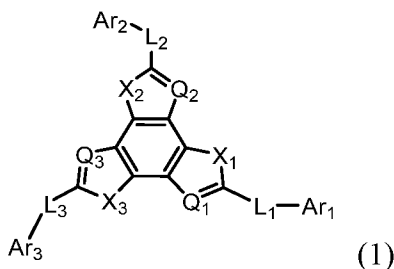
表 2 中发光效率是电流密度为 10 mA/cm² 时所得数据。从表 2 可以看出相比对比例，本发明的化合物作为光取出层可以有效地提高有机电致发光器件的发光效率。

5

以上所述实施例仅表达了本发明的几种实施方式，其描述较为具体和详细，但并不能因此而理解为对发明专利范围的限制。应当指出的是，对于本领域的普通技术人员来说，在不脱离本发明构思的前提下，还可以做出若干变形和改进，这些都属于本发明的保护范围。因此，本发明专利的保护范围应以所附权利要求为准。

权利要求书

1. 一种有机电致发光器件, 包含两个电极, 设置在所述两个电极之间的一个或多个有机功能层和设置于一电极表面且远离有机功能层一侧的光取出层, 其特征在于: 所述光取出层材料包含如通式 (1) 所示的化合物:



其中:

X₁、X₂、X₃ 每次出现时, 分别独立选自 NR₁、O、S、Se;

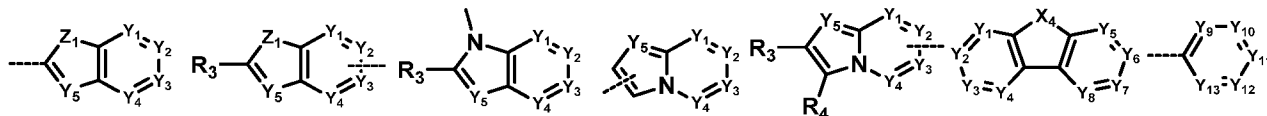
Q₁、Q₂、Q₃ 每次出现时, 分别独立选自 N、CR₂;

Ar₁、Ar₂、Ar₃ 每次出现时, 分别独立选自: 氢、氟基、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团或杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 3 至 25 的非芳香族环系、或者取代或未取代的芳胺基团;

L₁、L₂、L₃ 每次出现时, 分别独立选自: 单键、烯基、炔基、酰基、酰胺基、羧基、砷基、取代或未取代的碳原子数为 1 至 60 的烷基、取代或未取代的碳原子数为 1 至 60 的烷氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的杂芳香基团;

R₁、R₂ 每次出现时, 分别独立选自: 氢, D, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷基, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷氧基, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链硫代烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个 C 原子的酮基、具有 2 至 20 个 C 原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个 C 原子的芳氧基羰基、氟基、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氟基、异氰酸酯、硫氰酸酯、异硫氰酸酯、羟基、硝基、CF₃、Cl、Br、F、可交联的基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的杂芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的芳氧基、具有 5 至 60 个环原子的杂芳氧基基团、或这些基团的组合。

2. 根据权利要求 1 所述的有机电致发光器件, 其特征在于: Ar₁ 选自以下基团的一种或者其组合:



其中:

X₄ 每次出现时, 分别独立选自 NR₅、CR₅R₆、O、S、Se;

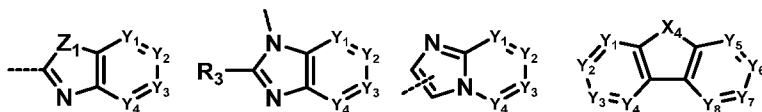
Y₁~Y₁₃ 每次出现时, 分别独立选自 N 或 CR₇, Y₉~Y₁₃ 中至少有一个为 N;

Z₁ 每次出现时, 分别独立选自 NR₈、O、S;

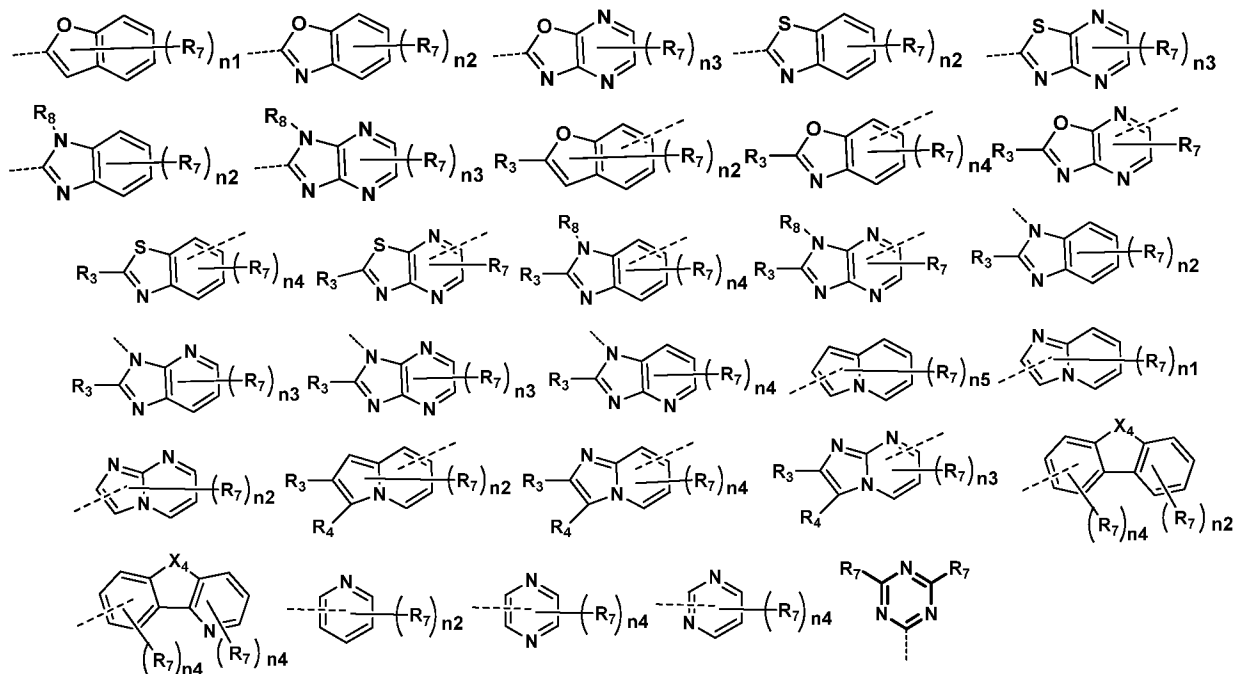
R₃~R₈ 每次出现时, 分别独立选自: 氢, D, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷基, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷氧基, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链硫代烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个 C 原子的酮基、具有 2 至 20 个 C 原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个 C 原子的芳氧基羰基、氟基、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氟基、异氰酸酯、硫氰酸酯、异硫氰酸酯、羟基、硝基、CF₃、Cl、Br、F、可交

5

10

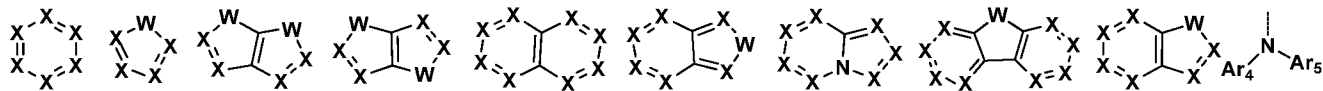


15



20

25

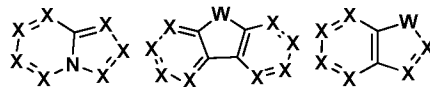


X 是 CR_9 或 N :

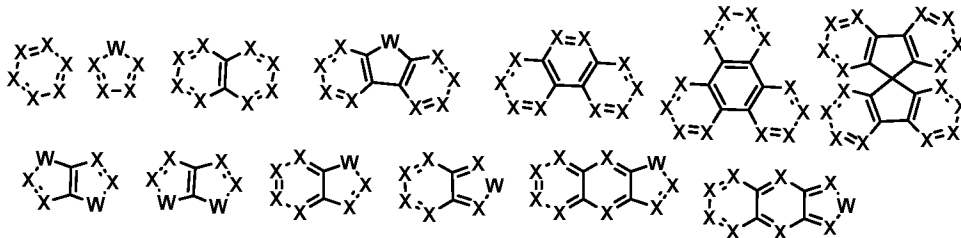
Ar₄、Ar₅选自：取代或未取代的环原子数为5至60的芳香基团、取代或未取代的环原子

数为 5 至 60 的芳香基团杂芳香基团、或者具有取代或未取代的环原子数为 3 至 25 的非芳香族环系。

6. 根据权利要求 5 所述的有机电致发光器件, 其特征在于: Ar_2 、 Ar_3 可选自以下基团的一种或者其组合:



7. 根据权利要求 1-6 任一项所述的有机电致发光器件, 其特征在于: L_1 、 L_2 、 L_3 独立选自单键或者以下基团的一种或者其组合:



其中:

X 是 CR_9 或 N ;

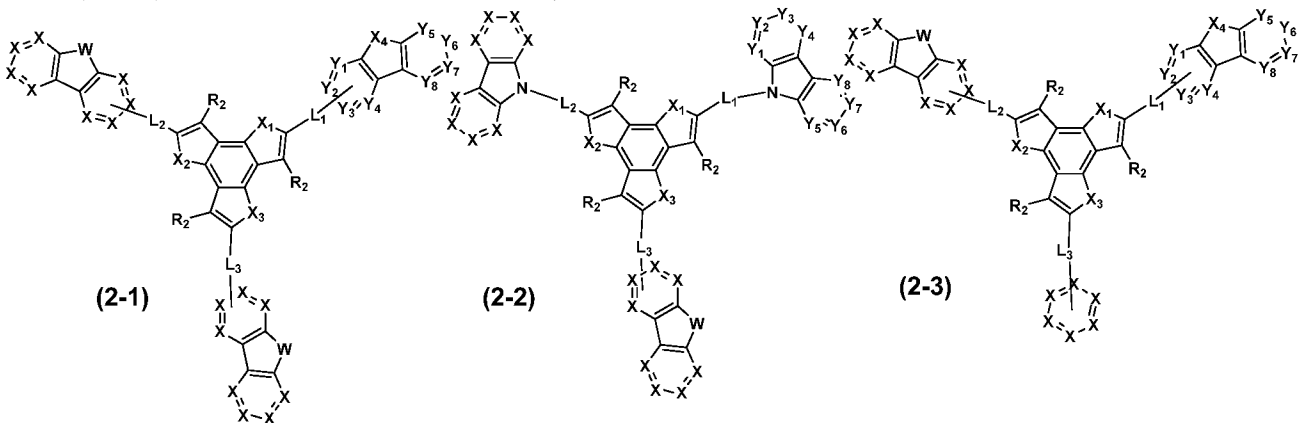
W 选自 CR_9R_{10} 、 NR_9 、 $C(=O)$ 、 O 、 S 、 Se ;

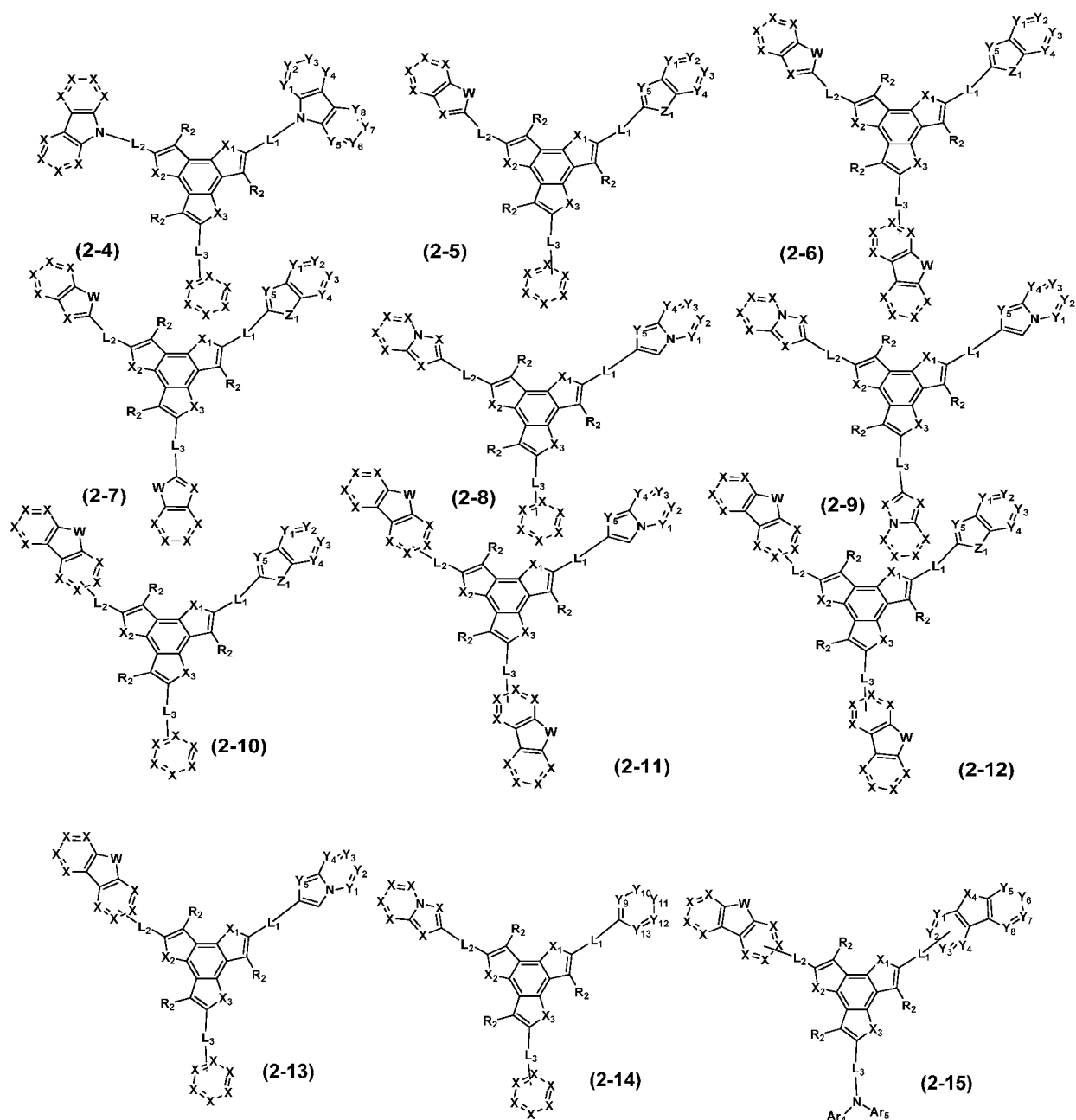
$R_9 \sim R_{10}$ 每次出现时, 分别独立选自: 氢, D , 具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷基, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷氧基, 具有 1 至 20 个 C 原子的直链硫代烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷氧基, 具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个 C 原子的酮基、具有 2 至 20 个 C 原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个 C 原子的芳氧基羰基、氰基、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯、硫氰酸酯、异硫氰酸酯、羟基、硝基、 CF_3 、 Cl 、 Br 、 F 、可交联的基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的杂芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的芳氧基、具有 5 至 60 个环原子的杂芳氧基基团、或这些基团的组合。

8. 根据权利要求 7 所述的有机电致发光器件, 其特征在于: L_1 、 L_2 、 L_3 独立选自单键或者

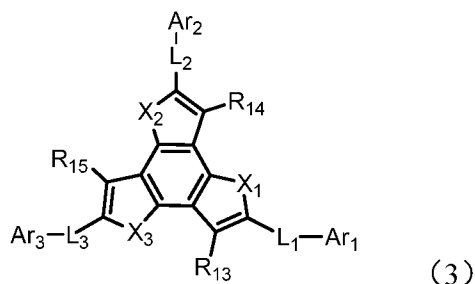


9. 根据权利要求 1-8 任一项所述的有机电致发光器件, 其特征在于: 所述光取出层的材料选自通式 (2-1) ~ (2-15) 的任意一种化合物:





10. 根据权利要求 1-9 任一项所述的有机电致发光器件, 其特征在于: 所述光取出层的材料在
5 波长 630 nm 处折射率大于 1.7。
11. 根据权利要求 1-10 任一项所述的有机电致发光器件, 其特征在于, 所述光取出层的材料
单线态能量 (S1) 大于 2.7 eV。
12. 根据权利要求 1-11 任一项所述的有机电致发光器件, 其特征在于, 所述光取出层的材料
在波长为 430 nm 时的消光系数小于 0.1。
- 10 13. 根据权利要求 1-12 任一项所述的有机电致发光器件, 其特征在于, 所述有机电致发光器
件是有机发光二极管, 其中, 所述光取出层位于所述有机发光二极管的阴极表面上。
14. 一种杂原子多芳环化合物, 选自如通式 (3) 所述的结构:



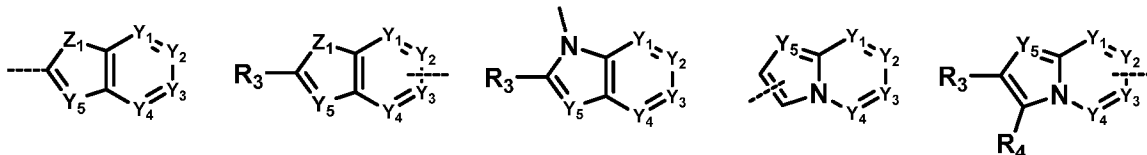
其中：

X₁、X₂、X₃ 每次出现时，分别独立选自 NR₁、O、S、Se；

Ar₂、Ar₃ 每次出现时，分别独立选自：氢、氰基、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团或杂芳香基团、取代或未取代的环原子数为 3 至 25 的非芳香族环系、或者取代或未取代的芳胺基团；

L₁、L₂、L₃ 每次出现时，分别独立选自：单键、烯基、炔基、酰基、酰胺基、羰基、砜基、取代或未取代的碳原子数为 1 至 60 的烷基、取代或未取代的碳原子数为 1 至 60 的烷氧基、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的杂芳香基团；

Ar₁ 选自以下基团的一种或者其组合：



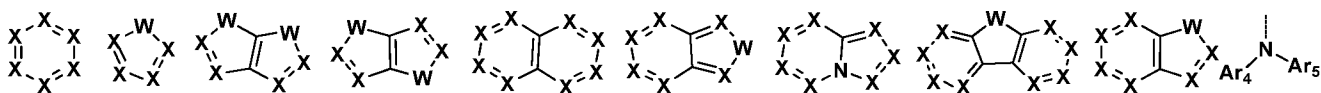
其中：

Y₁~Y₅ 每次出现时，分别独立选自 N 或 CR₇；

Z₁ 每次出现时，分别独立选自 NR₈、O、S；

R₁、R₇~R₈、R₃~R₄、R₁₃~R₁₅ 每次出现时，分别独立选自：氢，D，具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷基，具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷氧基，具有 1 至 20 个 C 原子的直链硫代烷氧基，具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷基，具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷氧基，具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个 C 原子的酮基、具有 2 至 20 个 C 原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个 C 原子的芳氧基羰基、氰基、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯、硫氰酸酯、异硫氰酸酯、羟基、硝基、CF₃、Cl、Br、F、可交联的基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的杂芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的芳氧基、具有 5 至 60 个环原子的杂芳氧基基团、或这些基团的组合。

15. 根据权利要求 14 所述的杂原子多芳环化合物，其特征在于：Ar₂、Ar₃ 选自以下基团的一种或者其组合：



其中：

X 是 CR₉ 或 N；

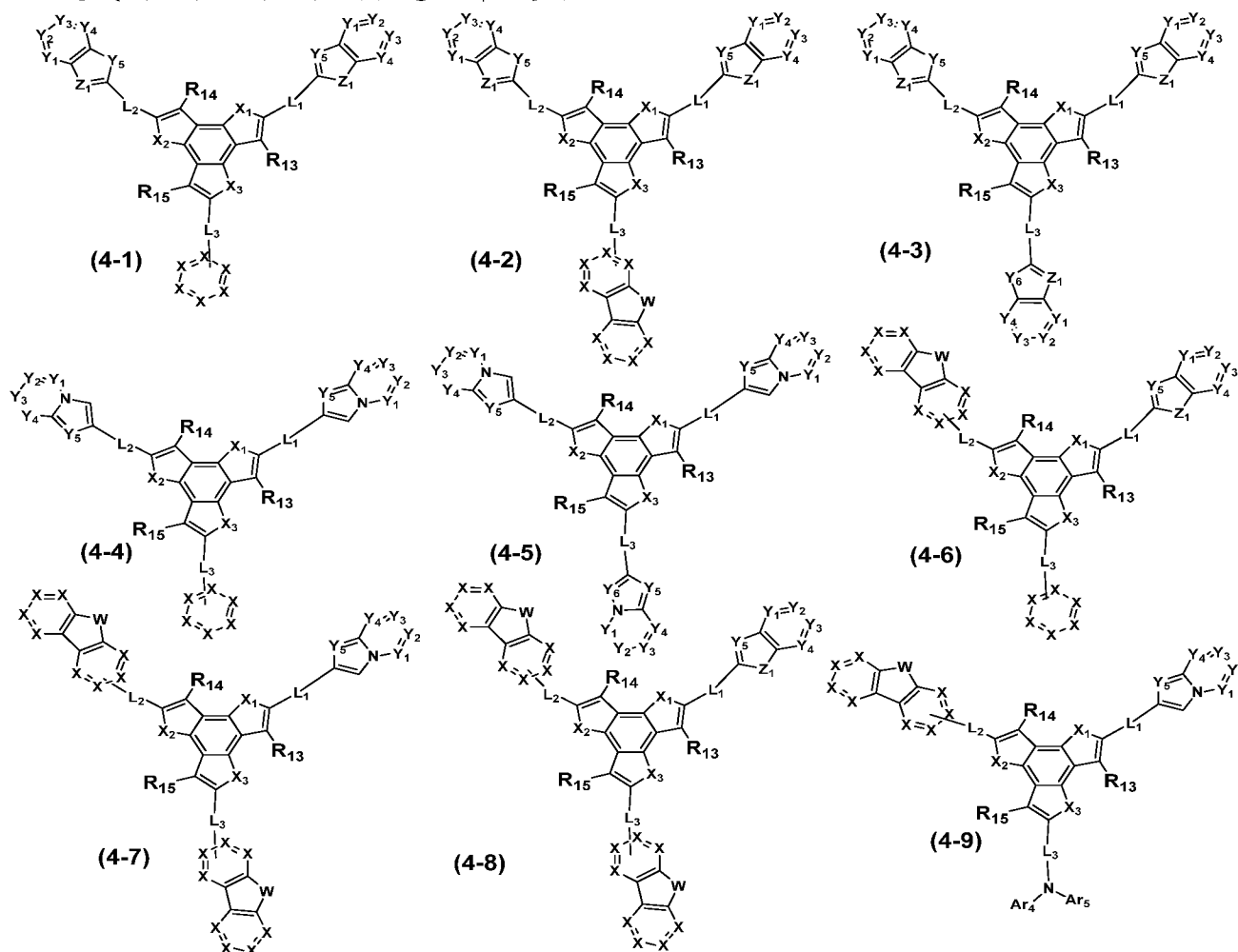
W 选自 CR₉R₁₀、NR₉、C(=O)、O、S、Se；

R₉~R₁₀ 每次出现时，分别独立选自：氢，D，具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷基，具有 1 至 20 个 C 原子的直链烷氧基，具有 1 至 20 个 C 原子的直链硫代烷氧基，具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷基，具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的烷氧基，具有 3 至 20 个 C 原子的支链或环状的硫代烷氧基、甲硅烷基、具有 1 至 20 个 C 原子的酮基、具有 2 至 20 个 C 原子的烷氧基羰基、具有 7 至 20 个 C 原子的芳氧基羰基、氰基、氨基甲酰基、卤甲酰基、甲酰基、异氰基、异氰酸酯、硫氰酸酯、异硫氰酸酯、羟基、硝基、CF₃、Cl、Br、F、可交

联的基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的取代或未取代的杂芳香基团、具有 5 至 60 个环原子的芳氧基、具有 5 至 60 个环原子的杂芳氧基基团、或这些基团的组合。

Ar₄、Ar₅ 选自：取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团、取代或未取代的环原子数为 5 至 60 的芳香基团杂芳香基团、或者具有取代或未取代的环原子数为 3 至 25 的非芳香族环系。

16. 根据权利要求 15 所述的杂原子多芳环化合物，其特征在于：通式 (3) 所述的结构可选自通式 (4-1) ~ (4-9) 的任意一种化合物：



10

17. 根据如权利要求 14~16 任一项所述的杂原子多芳环化合物，其特征在于：L₁~L₃ 均选自单键或苯基。

18. 一种组合物，其特征在于，包含有至少一种如权利要求 14-17 任一项所述的杂原子多芳环化合物，及至少一种有机溶剂。

15 19. 一种光取出层材料，其特征在于，包含权利要求 14-17 中任一项所述的杂原子多芳环化合物。

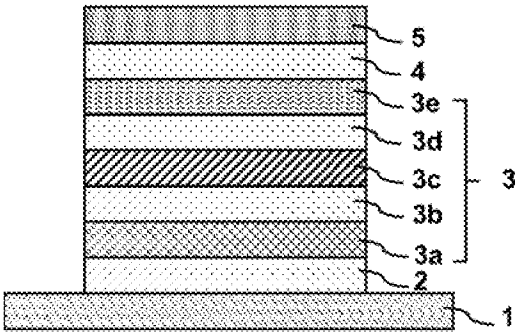


图 1

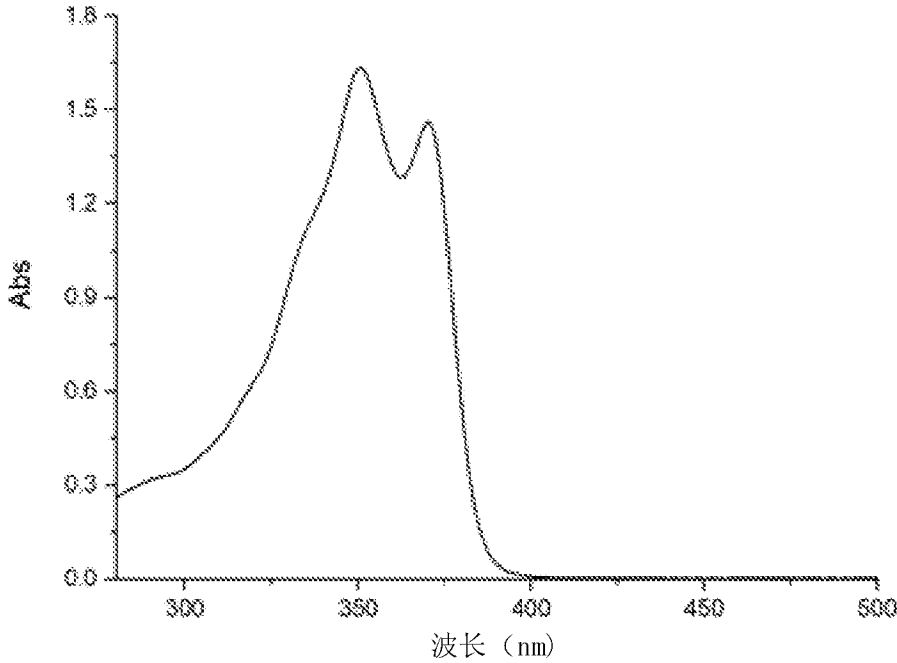


图 2

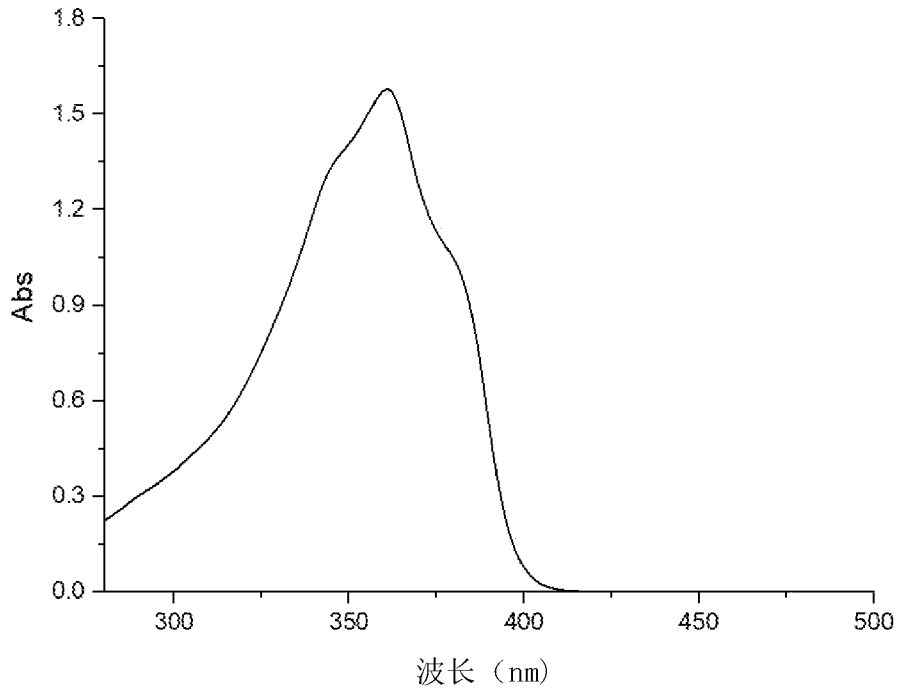


图 3

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/CN2019/122427

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

H01L 51/50(2006.01)i; C07D 487/14(2006.01)i; C07D 495/14(2006.01)i; C07D 487/16(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, C07D

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)

CNKI, CNABS, DWPI, SIPOABS, STN (CAplus, Registry): 多芳环, 有机电致发光, 结构式, OLED, poly, aryl

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	CN 108794494 A (NANJING UNIVERSITY OF POSTS AND TELECOMMUNICATIONS) 13 November 2018 (2018-11-13) claims 1-10	1-19
A	CN 108912139 A (NANJING UNIVERSITY OF POSTS AND TELECOMMUNICATIONS) 30 November 2018 (2018-11-30) entire document	1-19
A	CN 108948026 A (NANJING UNIVERSITY OF POSTS AND TELECOMMUNICATIONS) 07 December 2018 (2018-12-07) entire document	1-19



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

07 January 2020

Date of mailing of the international search report

21 February 2020

Name and mailing address of the ISA/CN

China National Intellectual Property Administration
No. 6, Xitucheng Road, Jimenqiao Haidian District, Beijing
100088
China

Facsimile No. (86-10)62019451

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/CN2019/122427

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
CN	108794494	A	13 November 2018	None	
CN	108912139	A	30 November 2018	None	
CN	108948026	A	07 December 2018	None	

国际检索报告

国际申请号

PCT/CN2019/122427

A. 主题的分类

H01L 51/50(2006.01)i; C07D 487/14(2006.01)i; C07D 495/14(2006.01)i; C07D 487/16(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, C07D

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))

CNKI, CNABS, DWPI, SIP0ABS, STN(CAplus, Registry):多芳环, 有机电致发光, 结构式, OLED, poly, aryl

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
X	CN 108794494 A (南京邮电大学) 2018年 11月 13日 (2018 - 11 - 13) 权利要求1-10	1-19
A	CN 108912139 A (南京邮电大学) 2018年 11月 30日 (2018 - 11 - 30) 全文	1-19
A	CN 108948026 A (南京邮电大学) 2018年 12月 7日 (2018 - 12 - 07) 全文	1-19

☐ 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

2020年 1月 7日

国际检索报告邮寄日期

2020年 2月 21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

授权官员

狄延鑫

电话号码 (86-10)62084360

国际检索报告
关于同族专利的信息

国际申请号

PCT/CN2019/122427

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	108794494	A	2018年 11月 13日	无	
CN	108912139	A	2018年 11月 30日	无	
CN	108948026	A	2018年 12月 7日	无	