

文章编号: 1000-7032(2026)02-0299-08

## 利用联苯扭曲骨架实现电子解耦的蓝光双极主体材料

刘腾霄<sup>1\*</sup>, 朱联旺<sup>2</sup>

(1. 长江工程职业技术学院, 湖北 武汉 430212;  
2. 长江水利委员会陆水试验枢纽管理局, 湖北 赤壁 437300)

**摘要:** 针对蓝光磷光器件中主体材料难以兼顾高三线态能级与平衡载流子传输的共性难题, 本研究提出“空间位阻电子解耦”新策略。通过联苯 2,2'-位点构建具有多重扭曲构象的 D-A 型主体材料(2-(二苯胺)-2'-(对甲苯磺酰基)-联苯/2-(4,4'-二甲基二苯胺)-2'-(对甲苯磺酰基)-联苯), 成功实现了 2.66 eV 以上的高三线态能级与双极传输特性的协同。理论计算与实验表征表明, 空间位阻有效抑制了给受体间的电子耦合, 维持了局域激发态主导的高能级结构。器件验证了该策略在激子限域与载流子平衡方面的优势, 同时揭示了分子构象动力学不稳定性对效率的限制。本研究揭示了在利用空间位阻策略设计蓝光主体材料时, 分子构象的动力学稳定性是制约器件效率的关键, 这为后续通过增强刚性结构来突破性能瓶颈提供了明确的设计思路。

**关键词:** 联苯骨架; 主体材料; 空间位阻

中图分类号: O482.31

文献标识码: A

DOI: 10.37188/CJL.20250241

CSTR: 32170.14.CJL.20250241

## Blue Bipolar Host Materials Achieved Through Electronic Decoupling via A Twisted Biphenyl Skeleton

LIU Tengxiao<sup>1\*</sup>, ZHU Lianwang<sup>2</sup>

(1. Changjiang Institute of Technology, Wuhan 430212, China;  
2. Lushui Trial Multipurpose Project Administration of Changjiang Water Resources Commission, Chibi 437300, China)

\* Corresponding Author, E-mail: 20221028@cjit.edu.cn

**Abstract:** Addressing the persistent challenge in blue phosphorescent devices of balancing high triplet energy levels with balanced charge carrier transport in host materials, this study proposes a novel “spatial hindrance-induced electronic decoupling” strategy. By constructing D-A-type host materials (*N,N*-diphenyl-2'-tosyl-[1,1'-biphenyl]-2-amine/*N,N*-di-*p*-tolyl-2'-tosyl-[1,1'-biphenyl]-2-amine) with multiple twisted conformations *via* the 2,2'-position of a biphenyl skeleton, a synergistic combination of a high triplet energy level (2.66 eV) and bipolar charge transport properties was successfully achieved. Theoretical calculations and experimental characterizations confirm that spatial hindrance effectively suppresses electronic coupling between the donor and acceptor units, maintaining a high-energy structure dominated by localized excited states. Device performance validated the advantages of this strategy in exciton confinement and charge carrier balance, while also revealing limitations in efficiency due to molecular conformational dynamic instability. This study identifies the dynamic conformational stability of molecules as a critical constraint on device efficiency in steric-hindrance-based blue host materials, thus providing a clear design principle for performance breakthrough through enhanced structural rigidity.

**Keywords:** biphenyl skeleton; host material; steric hindrance

收稿日期: 2025-11-14; 修订日期: 2025-11-24

基金项目: 浙江省自然科学基金(LQ19E030015)

Supported by Natural Science Foundation of Zhejiang Provincial (LQ19E030015)

## 1 引 言

随着客体材料发光机理研究的不断深入,有机电致发光器件尤其蓝光器件近年来取得了极大的进展<sup>[1-5]</sup>。然而,蓝光器件主体材料的选择仍然面临能否同时满足高三线态能级( $E_T > 2.7$  eV)、平衡的双极载流子传输以及卓越的热/形态稳定性等多重严苛指标<sup>[6]</sup>。相较于已趋成熟的绿光与红光体系<sup>[7]</sup>,天蓝光至深蓝光磷光有机电致发光二极管(PhOLEDs)在效率与稳定性方面仍存在明显差距。

理想的蓝光主体材料需同时满足两个相互制约的核心要求:其一,必须具备高于磷光客体的三线态能级( $E_T > 2.7$  eV),以实现有效的激子限域;其二,需要具备平衡的电子与空穴传输能力,确保激子在发光层内均匀高效地形成。然而,二者之间存在的固有矛盾在于:实现高三线态能级需通过限制分子共轭程度来拓宽能隙,这会不可避免地削弱载流子的传输能力;反之,构建扩展共轭体系以促进电荷传输,又会导致能隙收窄与三线态能级降低。这一“能级-传输”矛盾在传统的单极传输材料及多数给体-受体型双极材料体系中均难以协调,成为制约蓝光器件性能提升的主要问题。

为解决这一关键矛盾,研究者们已发展了多种分子设计策略。例如, Park 团队合成的多共振热激活延迟荧光(MR-TADF)主体材料,实现了 36.2% 的最大外量子效率<sup>[8]</sup>。蔡万清团队研究的两种新型蒽-二苯并咪唑为骨架的主体材料,实现了高色纯度的深蓝光发射,并且器件在  $1000 \text{ cd} \cdot \text{m}^{-2}$  初始亮度下的寿命( $LT_{50}$ )提升至  $249 \text{ h}$ <sup>[9]</sup>。李艳青团队设计的单组分空间双极性主体矩阵,实现了窄带蓝光 OLED 42.3% 的最大外量子效率<sup>[10]</sup>;黄宏团队设计并合成了基于苯并咪唑与咪唑的双极性磷光主体化合物,实现了器件效率提升与启亮电压降低<sup>[11]</sup>;周亮团队借助溶液法采用 TcTa 和 Cz-Si 混合主体,实现了器件在  $1000 \text{ cd} \cdot \text{m}^{-2}$  的实际亮度下,电流效率和外量子效率仍高达  $33.43 \text{ cd} \cdot \text{A}^{-1}$  和 16.7%<sup>[12]</sup>。这些优秀的工作虽各具特色,但也反映出在单一分子体系中完美协调高  $E_T$  与平衡双极传输的普遍困境。

本研究提出并实践了一种基于空间位阻调控的电子解耦的分子设计策略。该策略的核心在于选用具有固有轴对称性和 2,2'-位点高扭曲构象

的联苯分子作为刚性骨架(图 1)。理论计算与前期研究均表明,在联苯的 2,2'-位进行功能化修饰,能够诱导两个苯环间产生显著的二面角(通常  $> 65^\circ$ ),从而有效打断苯环间的  $\pi$  电子共轭,这是获得宽带隙与高三线态能级的结构基础。

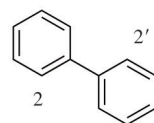


图 1 联苯分子骨架

Fig.1 Biphenyl molecular skeleton

在该骨架上,我们分别将电子给体单元(二苯胺及其二甲基衍生物)与电子受体单元(对甲苯磺酰基)精确键合于联苯的 2,2'-两位点。这一设计旨在利用联苯骨架所固有的空间位阻,在给体与受体之间引入可控的、大幅度的分子扭曲。这种扭曲构象从空间上物理性地阻隔了给体与受体前沿轨道的有效重叠,从而显著削弱了其间的分子内电荷转移效应。其直接结果是,抑制了通常存在于 D-A 型分子中的低能级电荷转移态的形成,使得分子的三线态能级主要由各单元自身的局部激发态决定,因此成功地将材料的  $E_T$  维持在 2.66 eV 以上的高水平,满足天蓝光发射的需求。

与此同时,该“电子解耦”策略并非完全隔绝功能单元,而是通过联苯骨架实现了一种“功能集成但电子适度分离”的状态。在该构型中, HOMO 轨道主要定域于电子给体及相邻联苯片段,而 LUMO 轨道则主要分布于电子受体及另一联苯片段。这种既通过化学键连接保证结构统一,又通过空间位阻实现轨道部分分离的前线轨道分布,使得目标分子能够同时继承给体单元优异的空穴传输能力与受体单元固有的电子传输能力,最终实现了电子与空穴传输的平衡,即双极传输特性。

综上所述,本工作通过联苯 2,2'-位点桥联 D-A 单元的精确分子工程,巧妙地利用空间位阻实现了关键的电子解耦,为协同统一蓝光主体材料所需的高三线态与双极传输性能提供了一个行之有效的解决方案。

## 2 实 验

### 2.1 合成与表征

两个化合物的结构如图 2 所示,合成及结构表征如下。

2-(4,4'-二甲基二苯胺)-2'-(对甲苯磺酰基)-

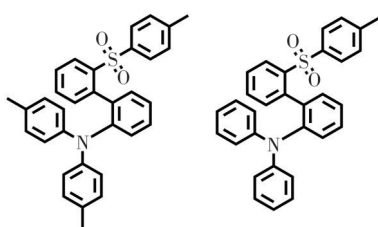


图2 联苯为骨架的SOBPmDPA和SOBPDPA

Fig.2 Molecular structures of SOBPmDPA and SOBPDPA

联苯(SOBPmDPA)的合成:将2-(4,4'-二甲基二苯胺)-2'-溴-联苯(450 mg, 0.9 mmol)、4-甲基苯磺酰(240 mg, 2 mmol)、碘化亚铜(143 mg, 0.75 mmol)、碳酸钠(424 mg, 4 mmol)和20 mL *N,N*-二甲基酰胺(DMF)加入100 mL圆底烧瓶中,在氩气氛围下于180 °C下反应48 h。反应结束后,经二氯甲烷萃取后,合并有机相,无水硫酸钠干燥,过滤,浓缩。再加入氯仿40 mL溶解,冰浴条件下,加入间氯过氧苯甲酸(*m*CPBA)(1.8 g, 10 mmol),室温搅拌24 h后使用亚硫酸氢钠溶液将反应猝灭。混合物使用二氯甲烷萃取,硅胶柱层析分离(石油醚:乙酸乙酯=4:1, *v/v*),最终得到白色固体产物268 mg(产率:59%)。<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ [10<sup>-6</sup>]: 7.82 (d, *J*=4.8 Hz, 1 H), 7.32 (s, 2 H), 7.25 (t, *J*=7.2 Hz, 1 H), 7.04~7.01 (m, 4 H), 6.88 (d, *J*=7.5 Hz, 5 H), 6.76 (t, *J*=8.7 Hz, 5 H), 6.51 (d, *J*=7.2 Hz, 2 H) 2.31 (s, 3 H), 2.22 (s, 6 H)。<sup>13</sup>C NMR (75 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ [10<sup>-6</sup>]: 145.13, 143.32, 139.54, 138.35, 137.91, 135.26, 134.18, 130.84, 129.75, 128.41, 121.95, 120.86, 20.81。MS (EI) *m/z*: 504.16。Found: 504.26。Anal. Calcd for C<sub>33</sub>H<sub>29</sub>NO<sub>2</sub>S(%)。Found: C, 78.70; H, 5.80; N, 2.78。Found: C, 78.65; H, 5.58; N, 2.73。

2-(二苯胺)-2'-(对甲苯磺酰基)-联苯(SOBPDPA)的合成:该化合物的合成步骤与SOBPmDPA相同,将反应物之一替换为2-(二苯胺)-2'-溴-联苯,最终得到白色固体520 mg(产率:49%)。<sup>1</sup>H NMR (300 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ [10<sup>-6</sup>]: 7.85 (d, *J*=7.8 Hz, 1 H), 7.39 (s, 2H), 7.39~7.21 (m, 5 H), 7.15~7.01 (m, 6 H), 6.89 (d, *J*=7.5 Hz, 6 H), 6.81 (d, *J*=5.1 Hz, 1 H), 6.55 (d, *J*=4.5 Hz, 2 H) 2.36 (s, 3 H)。<sup>13</sup>C NMR (75 MHz, CDCl<sub>3</sub>) δ [10<sup>-6</sup>]: 143.15, 142.81, 140.13, 137.65, 137.18, 136.32, 135.88, 131.56, 128.25, 127.68, 122.15, 120.93, 20.82。Anal. Calcd for C<sub>31</sub>H<sub>25</sub>NO<sub>2</sub>S(%)。Found: C, 78.29; H, 5.30; N, 2.95。Found: C, 78.35; H, 5.26; N, 2.89。MS

(EI) *m/z*: 475.25。Found: 475.16。

## 2.2 测试与表征

在氩气气氛中,分别将甲苯、四氢呋喃、乙醚溶液在含有钠钾合金的回流装置中进行脱氧脱水处理,并且使用蒸馏的方法进行纯化。去离子水通过通入氩气鼓泡0.5 h,除去其中的氧气。合成实验中所使用的试剂以及药品如无特别说明,均为药品公司出售,纯度为化学或者分析纯,并未经过进一步纯化而直接用于化学反应或者性质测试。

核磁共振谱图(<sup>1</sup>H NMR, <sup>13</sup>C NMR)测试使用的仪器为Bruker Advanced II (400 MHz)型核磁共振仪,在室温下,使用CDCl<sub>3</sub>为溶剂,内标为四甲基硅(TMS)。质谱(MS)使用的是VJ-ZAB-3F-Mass型质谱仪。元素分析(EA)测试使用的仪器为Perkin-Elmer 204B型元素分析仪,对样品中C、H、N元素进行测定。

热分解温度(*T<sub>d</sub>*)使用热重分析法(TGA),玻璃化转变温度(*T<sub>g</sub>*)使用时差扫描量热法(DSC),所用仪器均为NETZSCH DSC 200 PC示差扫描量热仪。测试条件:TGA:氮气保护下进行升温,升温速率为15 °C·min<sup>-1</sup>,测试范围为25~450 °C; DSC:氮气保护下升温,进行二次升温,升温速率为15 °C·min<sup>-1</sup>,测试范围为25~350 °C。

紫外-可见吸收光谱:岛津公司UV-2700型紫外-可见光谱仪。荧光、低温磷光发射光谱:日立公司F-4600型发射光谱测量仪。量子产率在Quantaaurus-QY系统操作下的滨松量子产率仪上进行测试,仪器型号为C11347-11。

循环伏安曲线(CV):CHI600A电化学工作站(上海华辰仪器公司)。测量使用电化学软件进行操作,所用体系为三电极体系:铂丝工作电极(GC),银/氯化银(Ag/AgCl)参比电极,铂柱对电极,内标物为二茂铁,电解质为四丁基六氟磷酸铵(0.1 mol·L<sup>-1</sup>)。

## 2.3 样品表征

机电致发光器件的制备采用氧化铟锡(ITO)作为阳极,衬底为玻璃,电阻为10 Ω/□。在器件准备阶段,首先将ITO玻璃进行四次严格清洗,所用清洗溶剂依次分别为:丙酮、专用ITO洗液、清水和去离子水。洗涤结束后,将ITO放于氧气等离子体环境中处理两分钟。将处理好的ITO玻璃转入真空蒸镀室内,抽真空至10<sup>-4</sup> Pa。将空

穴注入层  $\text{MoO}_3$ 、空穴传输层 NPB、电子阻挡层 TC-TA、发光层和电子传输层 Bphen 依次进行蒸镀,最后,在  $1.3 \times 10^{-4}$  Pa ( $10^{-6}$  Torr) 的真空下将电子注入层 LiF 和阴极 Al 蒸镀到基板上。所有器件均进行封装,在大气环境下进行测试。器件的电流-电压-亮度 ( $J$ - $V$ - $L$ ) 曲线由吉时利 2400 Sourcemeter, 吉时利 2000 Currentmeter 和硅光二极管(已校正)进行记录,电致发射光谱利用 JY SPEX CCD3000 型荧光光谱仪进行测量。

### 3 结果与讨论

#### 3.1 产物合成与结构表征

如图 3 所示,化合物分子 SOBPmDPA 和 SOB-

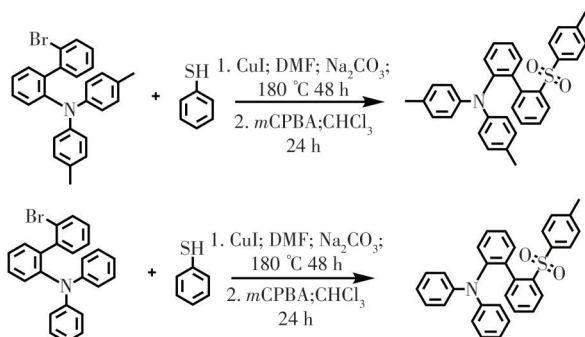


图 3 目标分子 SOBPmDPA 和 SOBPDPA 的合成路线

Fig.3 Synthetic routines of compounds SOBPmDPA and SOBPDPA

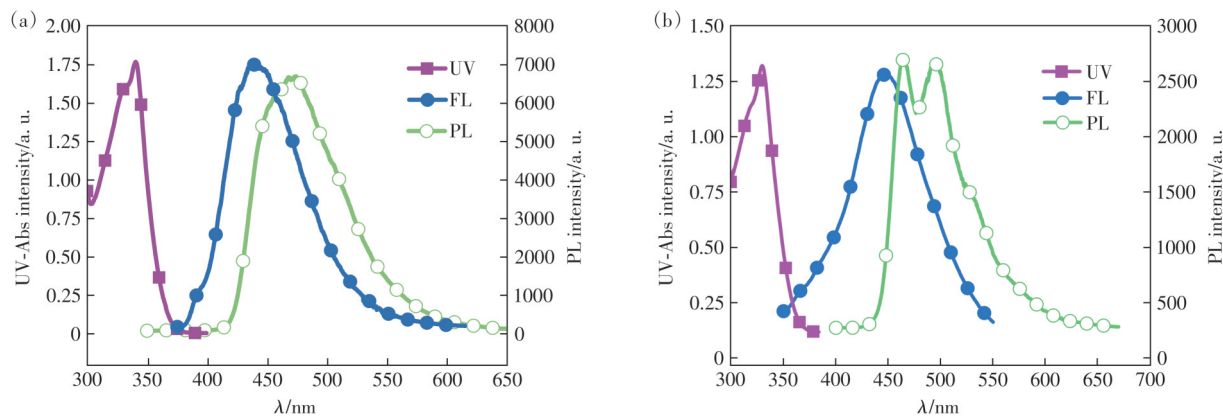


图 4 SOBPmDPA (a) 和 SOBPDPA (b) 在  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  溶液中的吸收、发射光谱以及它们在 2-MeTHF 溶液中, 77 K 时的磷光发射光谱

Fig.4 UV-Vis absorption spectra, fluorescent emission in  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  solution, and phosphorescent spectra in 2-methyltetrahydrofuran at 77 K of SOBPmDPA (a) and SOBPDPA (b), respectively

#### 3.3 热力学性质

如图 5 所示,两个化合物的热分解温度  $T_d$  分别为  $415^\circ\text{C}$  (SOBPmDPA)、 $408^\circ\text{C}$  (SOBPDPA), 高热分解温度能保证材料在蒸镀过程中的稳定性。化合物的玻璃化温度 ( $T_g$ ) 分别为  $165^\circ\text{C}$ 、 $154^\circ\text{C}$ 。由于 SOBPmDPA 相比于 SOBPDPA 在结构上增加了

PDPA 的合成采用已报道的 2-(4,4'-二甲基二苯胺)-2'-溴-联苯和 2-(二苯胺)-2'-溴-联苯作为原料,分别与 4-甲基苯硫酚进行乌尔曼偶联反应,再将二芳基硫醚氧化从而得到化合物。化合物经过了氢谱、碳谱、质谱以及元素分析鉴定,与所给结构式相同。

#### 3.2 光物理性质

图 4 所示为目标化合物 SOBPmDPA 和 SOBPDPA 在甲苯溶液中测量的荧光发射光谱和紫外可见吸收光谱,以及在 2-MeTHF 溶剂中, 77 K 温度下测试的低温磷光发射光谱。两者具有高度相似的吸收光谱特征,证明了它们具有共享的 D-A 基本分子框架。值得注意的是,SOBPmDPA 的吸收边带 ( $\sim 390$  nm) 相较于 SOBPDPA ( $\sim 380$  nm) 略有红移,这可归因于其给体单元上甲基的推电子效应,略微增强了分子内的给电子能力。在低温磷光光谱方面,SOBPDPA 与 SOBPmDPA 的第一个磷光发射峰分别位于  $459$  nm 和  $466$  nm, 据此计算得出其三线态能级分别为  $2.70$  eV 与  $2.66$  eV。如此高的  $E_T$  值直接证实了基于联苯 2,2'-位点的“空间位阻解耦”策略的成功——显著的空间扭曲有效抑制了给体与受体间低能电荷转移态的形成,从而使三线态能级由各片段自身的局部激发态主导。

两个甲基,因此其热分解温度和玻璃化转变温度均要高于后者。

#### 3.4 电化学性质

根据 Leeuw 的经验计算公式,电离势能  $\text{IP} = -\left[4.8 \text{ eV} + \left(E_{1/2(\text{reversible})} - E_{1/2(\text{Fc}/\text{Fc}^+)}\right)\right]$ , 电子亲和能  $\text{EA} =$

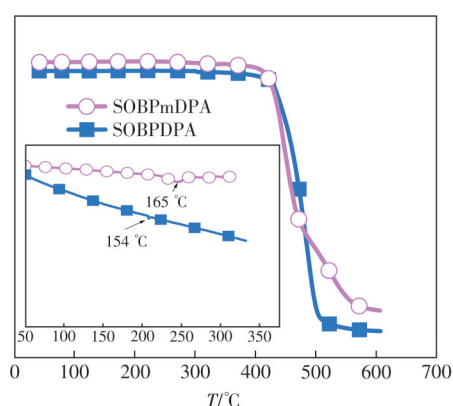


图5 SOBPmDPA 和 SOBPDPA 的热重分析和差示扫描量热法曲线(插图)

Fig.5 Thermogravimetric analysis and differential scanning calorimetry curves of compounds SOBPmDPA and SOBPDPA (inner panel)

HOMO + 能级差 (Energy gap), 其中  $E_{1/2(\text{reversible})}$  和  $E_{1/2(\text{Fc}/\text{Fc}^+)}$  分别是在测试条件下化合物的半波电位和同等条件下作为参照物的二茂铁的半波电位。

如图 6 所示, SOBPmDPA 和 SOBPDPA 的 HOMO 值通过公式计算分别为  $-5.24 \text{ eV}$  和  $-5.22 \text{ eV}$ , 同时根据紫外吸收光谱计算的能隙以及 HOMO 能级计算出两者的 LUMO 能级分别为  $-2.06 \text{ eV}$  和  $-1.99 \text{ eV}$ 。两个分子的 HOMO 与 LUMO 能级均展

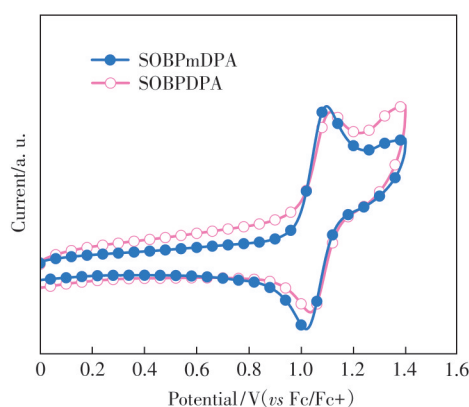


图6 SOBPmDPA 和 SOBPDPA 的循环伏安法图

Fig.6 Oxidation potential test curves of compounds SOBPmDPA and SOBPDPA

现出相似分布格局, 这是 D-A 结构经空间位阻解耦后呈现的典型特征。联苯骨架在其中的作用并非简单的桥梁, 而是通过其扭曲构象, 确保给体与受体各自的能级特性得以独立保留并高效发挥功能, 而非融合成一个窄能隙的强 CT 态体系。

### 3.5 理论计算结果

利用 Gaussian 09 程序, 采用 B3LYP/6-31+G(d) 对化合物的电子能级结构进行优化计算。如图 7 所示, 联苯骨架自身具有大于  $65^\circ$  的二面角。更为关键的是, 给体单元与联苯骨架之间, 以及联苯骨架与受体单元之间, 均存在高达  $50^\circ \sim 60^\circ$  的显著扭曲角。这说明本研究中采用的 2,2'-位点桥联策略成功构建了多重扭曲的分子构象。两个分子的 HOMO 轨道几乎完全定域于电子给体及其相邻的联苯片段上, 而 LUMO 轨道则集中分布于电子受体及与之相连的联苯区域。这进一步解释了材料为何能同时兼具高位阻诱导的宽带隙 (高  $E_T$ ) 与固有的双极传输倾向: 大幅扭曲的构象有效限制了给体与受体间的电子云离域, 从而维持了宽能隙; 而部分重叠的轨道分布则通过联苯骨架确保了必要的电子耦合, 为载流子的跳跃传输提供了通道。光物理测试及理论计算结果见表 1。

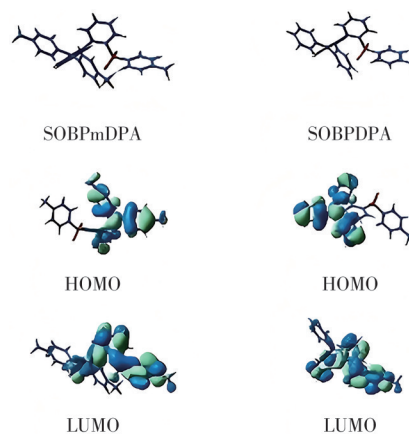


图7 化合物 SOBPmDPA 和 SOBPDPA 的分子结构、前线轨道分布

Fig.7 Molecular structures and front orbital distribution of compounds SOBPmDPA and SOBPDPA

表 1 荧光化合物的热力学、光物理以及电化学数据

Tab. 1 Thermodynamic, photophysical and electrochemical data of host materials

Compound <sup>a</sup>	$T_g/^\circ\text{C}$	$T_d/^\circ\text{C}$	$\lambda_{\text{abs,max}}^b/\text{nm}$	$\lambda_{\text{em,max}}^b/\text{nm}$	HOMO/LUMO <sup>c</sup> /eV	$E_g^d/\text{eV}$	$E_T^e/\text{eV}$
a	165	415	390	452	-5.24/-2.07	3.17	2.66
b	154	408	380	443	-5.22/-1.96	3.26	2.70

注:<sup>a</sup>材料分子 SOBPmDPA 和 SOBPDPA;<sup>b</sup>在甲苯溶液中测量的材料的紫外吸收峰和荧光发射峰;<sup>c</sup>HOMO 值经氧化还原曲线的起始峰估算, LUMO 值根据 HOMO 和光学带隙计算得出;<sup>d</sup>根据紫外吸收光谱计算结果;<sup>e</sup>三线态能级在 77 K 的 2-甲基四氢呋喃溶液中测量。

### 3.6 有机电致发光器件性质表征

如图 8 所示,两个双极主体材料 SOBPmDPA 和 SOBPDPA 的三线态能级 (2.66 eV, 2.70 eV), 均高于天蓝光铱配合物 FIrpic (2.65 eV), 所以当它们作为天蓝光磷光器件的主体材料时,能够很好地胜任能量传输转移功能。分别将两个化合物采用蒸镀的方法制备天蓝光磷光器件。器件结构如下:ITO/MoO<sub>3</sub>/TAPC(60 nm)/Host: FIrpic (10%,

15 nm)/TmPyPB(30 nm)/LiF/Al。其中,三氧化钼 (MoO<sub>3</sub>) 为空穴注入材料,氟化锂 (LiF) 为电子注入材料, TAPC 为空穴传输层, TmPyPB 为电子传输和空穴阻挡材料, 器件阳极氧化铟锡 (ITO), 阴极为铝 (Al)。发光层 (EML) 由磷光客体 FIrpic 掺杂于主体 SOBPDPA (器件 A) 和 SOBPmDPA (器件 B), 磷光客体的掺杂浓度为 10%。器件关键参数总结于表 2 中。

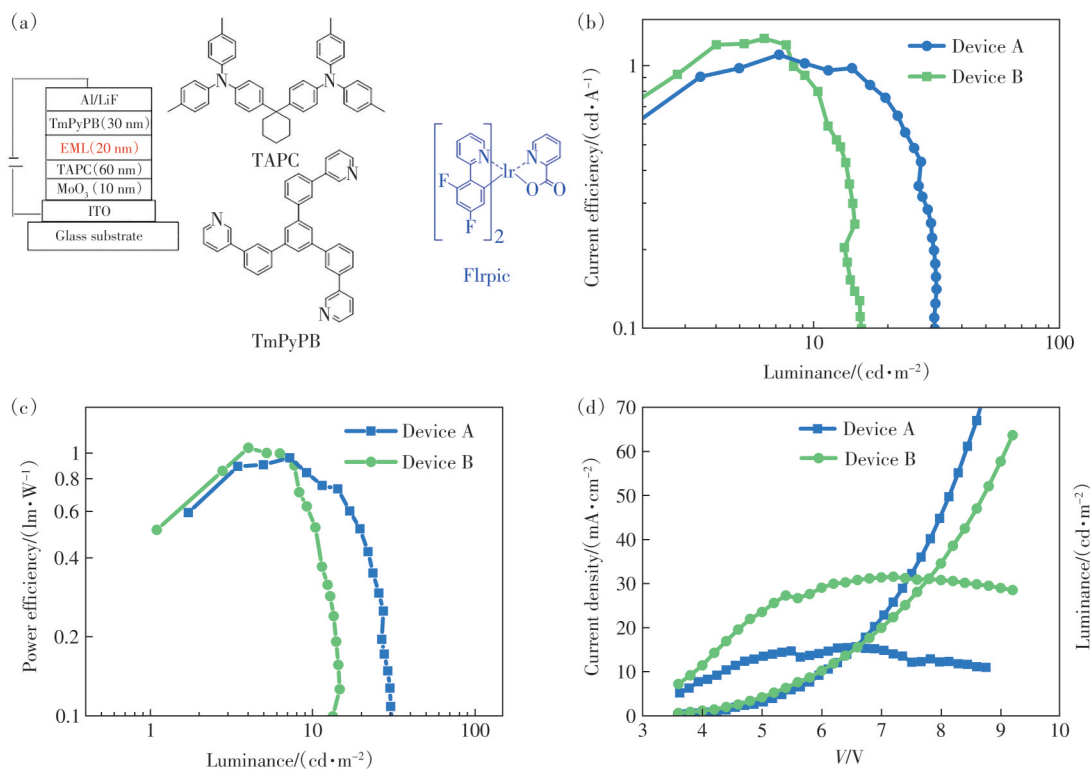


图 8 (a) 器件结构图和所用相关材料的结构分子式; (b) 器件 A 和 B 的电流效率曲线; (c) 器件 A 和 B 的功率效率曲线; (d) 器件 A 和 B 的  $J-V-L$  曲线

Fig.8 The configuration and energy levels(a), current efficiencies(CE)(b), power efficiencies(PE)(c), and  $L-V$  (d) curves of devices A and B

表 2 器件 A 和 B 表征性能的总结

Tab.2 Summary of characterization performance of devices A and B

Device	$L_{\max}^a /$ ( $\text{cd}\cdot\text{m}^{-2}$ )	$\eta_{\text{c,max}}^b /$ ( $\text{cd}\cdot\text{A}^{-1}$ )	$\eta_{\text{p,max}}^c /$ ( $\text{lm}\cdot\text{W}^{-1}$ )	$V_{\text{on}}^d / \text{V}$
A	28	1.45	1.18	3.2
B	35	1.68	1.49	3

注:<sup>a</sup>最大亮度;<sup>b</sup>电流效率最大值;<sup>c</sup>功率效率最大值;<sup>d</sup>启亮电压。

两个器件均成功实现了源于 FIrpic 的天蓝光发射,且启亮电压较低 (~3.0~3.2 V),这证实了本文所述策略的核心优势得以实现:得益于空间位阻解耦所诱导的高三线态能级 (2.66~2.70 eV), 主体材料能有效限域客体三线态激子;同时,其独

特的双极前线轨道分布确保了电子与空穴的注入与传输较为平衡,从而在发光层内形成宽广的激子复合区。以 SOBPmDPA 为主体的器件 B 在最大亮度、电流效率与功率效率上均优于器件 A。这一性能差异印证了分子结构设计的细微调控对器件性能的影响。SOBPmDPA 中引入的两个甲基不仅进一步增大了分子间距,减轻浓度猝灭效应,还可能通过其给电子效应略微优化了载流子传输平衡。

然而,两个器件的效率在当前高水平蓝光磷光器件中仍处于低位。深入探究其内在机理,我们认为,效率受限的主因可能并非能级不匹配或载流子失衡,而更可能源于为实现“空间位阻解

耦”而付出的动力学稳定性代价。理论计算所揭示的“多重扭曲”构象,使得连接给体-联苯-受体的多个单键持续处于高扭转应力状态。在器件通电工作,尤其是高电流密度下,这些高能单键可能成为构象翻转或化学断裂的弱点,动态产生分子尺度缺陷,成为有效的激子猝灭中心,从而导致效率快速滚降。

## 4 结 论

本文设计并合成了两种基于联苯2,2'-位点桥联D-A单元的蓝光双极主体材料SOBPDPA与SOBPMdPA。通过设计合成基于联苯2,2'-位点的D-A型主体材料,验证了“空间位阻调控的电子解耦”策略在平衡高三线态能级(>2.66 eV)与双极传输特性方面的有效性,其多重扭曲构象成功抑

制了低能电荷转移态的形成。尽管器件实现了有效的激子限域与平衡载流子注入,但效率受限主要源于大扭曲角引入的分子构象动力学不稳定性,其在电激励下易形成猝灭中心。

因此,本研究不仅为协调蓝光主体材料中的关键性能参数提供了一种新颖且有效的分子设计范式,更通过对其性能瓶颈的深入剖析,揭示了在追求电子结构解耦的同时保障分子构象刚性的重要性。未来研究将通过引入刚性桥联或螺环等策略“锁定”优势构象,在延续本策略核心优势的基础上,进一步提升器件的综合性能。

本文专家审稿意见及作者回复内容的下载地址:  
<http://cjl.lightpublishing.cn/thesisDetails#10.37188/CJL.20250241>

## 参 考 文 献:

- [ 1 ] DU M X, CHEN Y, MAI M Q, *et al.* Understanding and modulating the horizontal orientations and short-range charge transfer excited states for high-performance narrowband emitters [J]. *FlexMat*, 2024, 1(1): 46-53.
- [ 2 ] JIAO X T, WANG Y Q, ZHU R Z, *et al.* High-color-quality phosphorescent white organic light-emitting diodes utilizing broad-spectrum yellow emitters [J]. *FlexMat*, 2025, 2(3): 442-451.
- [ 3 ] LI H, CHEN C, YE Z J, *et al.* Purely organic room temperature phosphorescent materials toward organic light-emitting diodes [J]. *FlexMat*, 2024, 1(2): 173-192.
- [ 4 ] LUO X F, WANG J Y, WANG C, *et al.* 3D interlocking triggers intramolecular interactions to achieve an efficient deep-blue multiple resonance thermal activation delayed fluorescence material [J]. *FlexMat*, 2025, 2(3): 303-311.
- [ 5 ] 赵祥华, 王莉敏, 王竞园, 等. 一种苯磺酰基/螺-9,9'-氧杂蒽芴双极性分子的简易合成法: 分子结构与光电性质 [J]. *发光学报*, 2019, 40(4): 476-483.  
ZHAO X H, WANG L M, WANG J Y, *et al.* A facile method to synthesis of phenylsulfonyl/spiro[fluorene-9,9'-xanthene] bipolar molecule: molecular structure, optical and electrochemical properties [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2019, 40(4): 476-483. (in English)
- [ 6 ] NI F, HUANG Y P, QIU L Z, *et al.* Synthetic progress of organic thermally activated delayed fluorescence emitters via C-H activation and functionalization [J]. *Chem. Soc. Rev.*, 2024, 53(11): 5904-5955.
- [ 7 ] 黄宏, 张友明, 华涛, 等. 基于四取代咪唑衍生物的双极主体材料及溶液加工绿色磷光OLED [J]. *发光学报*, 2025, 46(11): 1971-1979.  
HUANG H, ZHANG Y M, HUA T, *et al.* Novel bipolar hosts for solution-processable green phosphorescent OLEDs based on tetrasubstituted carbazole derivatives [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2025, 46(11): 1971-1979. (in English)
- [ 8 ] PARK D, KANG S, RYOO C H, *et al.* High-performance blue OLED using multiresonance thermally activated delayed fluorescence host materials containing silicon atoms [J]. *Nat. Commun.*, 2023, 14(1): 5589.
- [ 9 ] CAI W Q, LI W S, SONG X G, *et al.* Host engineering of deep-blue-fluorescent organic light-emitting diodes with high operational stability and narrowband emission [J]. *Adv. Sci.*, 2024, 11(43): 2407278.
- [ 10 ] LIU J Y, BAI J Y, ZHANG Z, *et al.* Highly efficient and stable binary-doped narrowband blue OLEDs enabled by a single-component host matrix with a spatial bipolarity configuration [J]. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2026, 65(1): e21715.
- [ 11 ] 黄宏, 熊章奇, 邓德朋, 等. 含9-苯基咪唑与苯并咪唑单元的双极主体材料设计、合成及其光电性能 [J]. *发光学报*, 2025, 46(12): 2293-2301.  
HUANG H, XIONG Z Q, DENG D P, *et al.* Design, synthesis and optoelectronic properties of bipolar host materials

based on 9-phenylcarbazole and benzimidazole [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2025, 46(12): 2293-2301. (in English)

- [12] 王哲, 武瑞霞, 冯洋, 等. 基于混合主体结构的溶液法制备的高效蓝色磷光 OLED [J]. *发光学报*, 2022, 43(5): 763-772.

WANG Z, WU R X, FENG Y, *et al.* High-efficiency blue phosphorescent OLEDs based on mixed-host structure by solution-processed method [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2022, 43(5): 763-772. (in English)



刘腾霄(1990-),男,河北保定人,博士,副教授,2017年于武汉大学获得博士学位,主要从事有机电致发光材料的研究。

E-mail: 20221028@cjit.edu.cn