



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 119192248 A

(43) 申请公布日 2024. 12. 27

(21) 申请号 202411236530.6

H10K 50/12 (2023.01)

(22) 申请日 2021.09.02

H10K 85/30 (2023.01)

(66) 本国优先权数据

202011291606.7 2020.11.18 CN

(62) 分案原申请数据

202111011390.9 2021.09.02

(71) 申请人 北京夏禾科技有限公司

地址 102308 北京市门头沟区谭园路1号院
3号楼6层601室

(72) 发明人 桑明 王珍 李宏博 蔡维

刘艳华 汤斌 张玄 邝志远
夏传军

(51) Int. Cl.

C07F 15/00 (2006.01)

C09K 11/06 (2006.01)

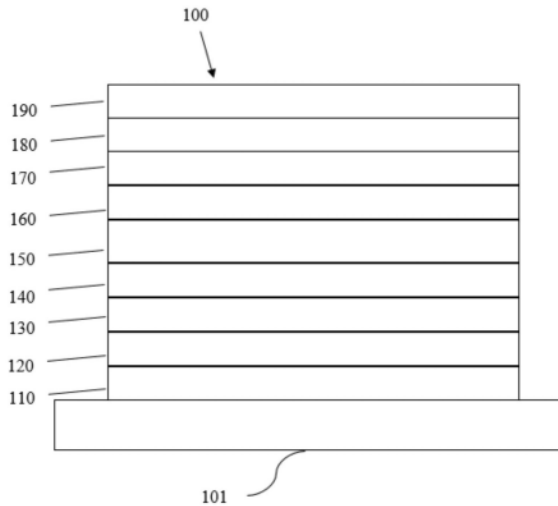
权利要求书56页 说明书27页 附图1页

(54) 发明名称

有机电致发光材料及其器件

(57) 摘要

公开了有机电致发光材料及其器件。该有机电致发光材料是包含式1A结构的L_a配体和式1B结构的L_b配体的金属配合物,这些金属配合物可以在升华时得到更高的升华收率,具有更低的蒸镀温度。应用于电致发光器件中能够能提供更好的器件性能,例如器件寿命的提升,更窄的半峰宽。还公开了一种包含该金属配合物的电致发光器件及包含该金属配合物的化合物组合物。



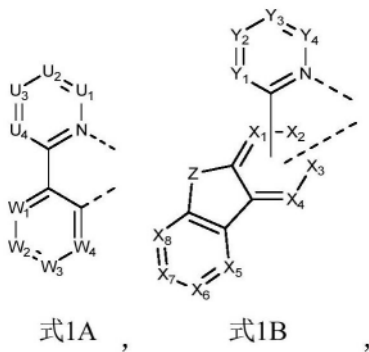
1. 一种金属配合物,其具有 $M(L_a)_m(L_b)_n(L_c)_q$ 的通式,
其中,

L_a 、 L_b 和 L_c 分别是与金属M配位的第一、第二和第三配体,并且 L_c 和所述 L_a 或 L_b 是相同或是不同的;其中, L_a 、 L_b 和 L_c 能任选地连接形成多齿配体;

金属M选自相对原子质量大于40的金属;优选地,金属M每次出现时相同或不同地选自由Cu,Ag,Au,Ru,Rh,Pd,Os,Ir和Pt组成的组;更优选地,M每次出现时相同或不同地选自Pt或Ir;

m是1或2,n是1或2,q是0或1,m+n+q等于M的氧化态;当m为2时,两个 L_a 是相同或不同的;当n为2时,两个 L_b 是相同或不同的;

L_a 每次出现相同或不同地具有由式1A表示的结构; L_b 每次出现相同或不同地具有由式1B表示的结构;



其中,

Z选自O,S,Se,NR,CRR和SiRR组成的组;当同时存在两个R时,两个R是相同或不同的;

X_1 - X_8 每次出现相同或不同地选自C或 CR_x ;

Y_1 - Y_4 每次出现相同或不同地选自 CR_y 或N;

U_1 - U_4 每次出现相同或不同地选自 CR_u 或N;

W_1 - W_4 每次出现相同或不同地选自 CR_w 或N;

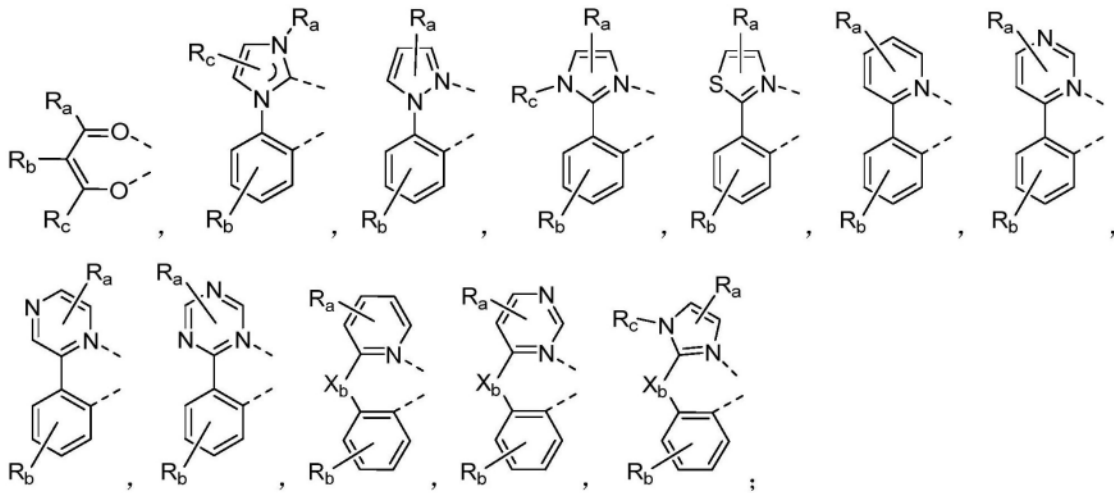
R_x, R_y, R_u, R_w 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组:氢,氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基,取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基,取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基,取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基,取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基,取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基,氰基,异氰基,羟基,巯基,及其组合;

U_1 - U_4 中至少有一个或多个选自 CR_u 且所述 R_u 是取代或未取代的1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,或其组合,且所有所述 R_u 的碳原子数的总和至少是4;

R_x 中至少有一个是氰基;

相邻的取代基 R_x, R_y, R_u, R_w 能任选地连接形成环;

其中, L_c 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组中的任一种所示的结构:



其中,

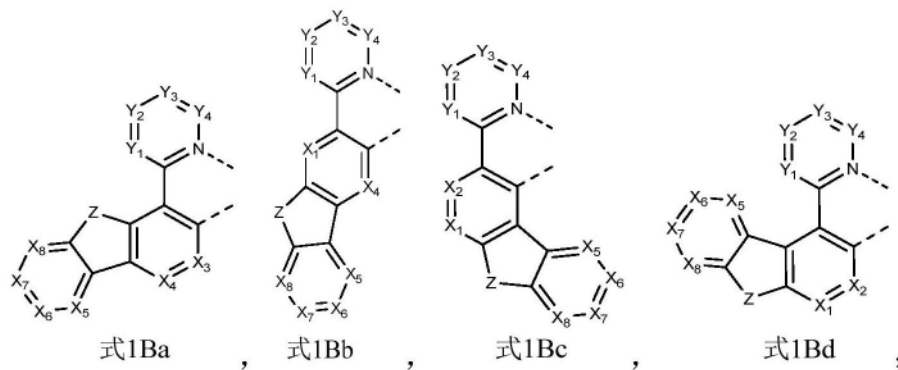
R_a, R_b 和 R_c 每次出现时相同或不同地表示单取代, 多取代, 或无取代;

X_b 每次出现时相同或不同地选自由以下组成的组: O, S, Se, NR_{N1} , $CR_{C1}R_{C2}$;

$R_a, R_b, R_c, R_{N1}, R_{C1}$ 和 R_{C2} 每次出现时相同或不同地选自由以下组成的组: 氢, 氘, 卤素, 取代或未取代的具有 1-20 个碳原子的烷基, 取代或未取代的具有 3-20 个环碳原子的环烷基, 取代或未取代的具有 1-20 个碳原子的杂烷基, 取代或未取代的具有 3-20 个环原子的杂环基, 取代或未取代的具有 7-30 个碳原子的芳烷基, 取代或未取代的具有 1-20 个碳原子的烷氧基, 取代或未取代的具有 6-30 个碳原子的芳氧基, 取代或未取代的具有 2-20 个碳原子的烯基, 取代或未取代的具有 6-30 个碳原子的芳基, 取代或未取代的具有 3-30 个碳原子的杂芳基, 取代或未取代的具有 3-20 个碳原子的烷硅基, 取代或未取代的具有 6-20 个碳原子的芳基硅烷基, 取代或未取代的具有 0-20 个碳原子的氨基, 氰基, 异氰基, 羟基, 巯基, 及其组合;

相邻的取代基 $R_a, R_b, R_c, R_{N1}, R_{C1}$ 和 R_{C2} 能任选地连接形成环。

2. 如权利要求 1 所述的金属配合物, 其中, L_b 具有由式 1Ba-1Bd 表示的结构:



其中,

Z 选自由 O, S, Se, NR, CRR 和 SiRR 组成的组; 当同时存在两个 R 时, 两个 R 是相同或不同的;

X_1-X_8 每次出现相同或不同地选自 CR_x ;

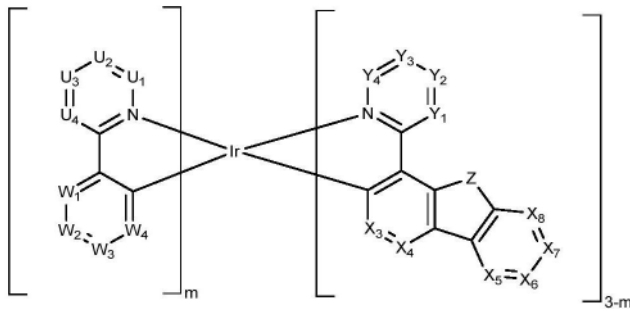
Y_1-Y_4 每次出现相同或不同地选自 CR_y 或 N;

R, R_x, R_y 每次出现时相同或不同地选自由以下组成的组: 氢, 氘, 卤素, 取代或未取代的具有 1-20 个碳原子的烷基, 取代或未取代的具有 3-20 个环碳原子的环烷基, 取代或未取代

的具有1-20个碳原子的杂烷基,取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基,取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基,取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基,取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基,取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基,氰基,异氰基,羟基,巯基,及其组合;

相邻的取代基 R_x, R_y, R_z 能任选地连接形成环。

3. 如权利要求1所述的金属配合物,其中,金属配合物具有由式2表示的结构:



式2

其中,

m 选自1或2;当 $m=1$ 时,两个 L_u 是相同或不同的;当 $m=2$ 时,两个 L_a 是相同或不同的;

Z 选自O, S, Se, NR, CRR和SiRR组成的组;当同时存在两个R时,两个R是相同或不同的;

X_3-X_8 每次出现相同或不同地选自 CR_x ;

Y_1-Y_4 每次出现相同或不同地选自 CR_y 或N;

U_1-U_4 每次出现相同或不同地选自 CR_u 或N;

W_1-W_4 每次出现相同或不同地选自 CR_w 或N;

R_x, R_y, R_z, R_u, R_w 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组:氢,氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基,取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基,取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基,取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基,取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基,取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基,氰基,异氰基,羟基,巯基,及其组合;

U_1-U_4 中至少有一个或多个选自 CR_u 且所述 R_u 是取代或未取代的1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,或其组合;且所有所述 R_u 碳原子数的总和至少是4;

R_x 中至少有一个是氰基;

相邻的取代基 R_x, R_y, R_z, R_u 能任选地连接形成环。

4. 如权利要求1-3任一项所述的金属配合物,其中, Z 选自O和S;

优选地, Z 是O。

5. 如权利要求1-4任一项所述的金属配合物,其中,所述 R_x 中一个是氰基,另外至少还有

一个 R_x 选自由以下组成的组: 氘, 卤素, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基, 取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基, 取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基, 取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基, 取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基, 取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基, 取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基, 取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基, 取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基, 取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基, 取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基, 氰基, 异氰基, 羧基, 巯基, 及其组合;

优选地, R_x 中一个是氰基, 另外至少还有一个 R_x 选自由以下组成的组: 氘, 卤素, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基, 取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基, 取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基, 取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基, 取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基, 取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基, 取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基, 氰基, 羧基, 巯基, 及其组合;

更优选地, R_x 中一个是氰基, 另外至少还有一个 R_x 选自由以下组成的组: 氘, 卤素, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基, 取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基, 取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基, 取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基, 及其组合。

6. 如权利要求1-5任一项所述的金属配合物, 其中, R_x 中一个是氰基, 另外至少还有一个 R_x 是选自由以下组成的组: 取代或未取代的具有6-15个碳原子的芳基, 取代或未取代的具有3-15个碳原子的杂芳基, 及其组合。

7. 如权利要求1-5任一项所述的金属配合物, 其中, R_x 中一个是氰基, 另外至少还有一个 R_x 是选自由以下组成的组: 氟, 氘, 甲基, 氘代甲基, 氘代异丙基, 环己基, 氘代环己基, 苯基, 氘代苯基, 甲基苯基, 氘代甲基苯基。

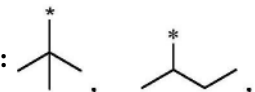
8. 如权利要求1-7任一项所述的金属配合物, 其中, X_5-X_8 的 CR_x 中, 至少一个 R_x 是氰基;

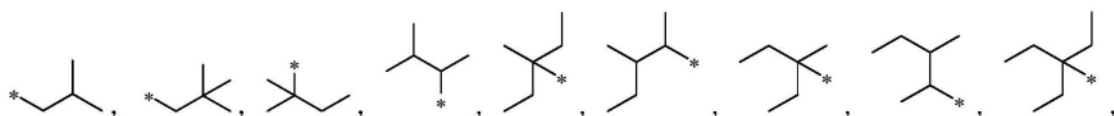
优选地, X_7 是 CR_x , 且所述 R_x 是氰基; 或者 X_8 是 CR_x , 且所述 R_x 是氰基。

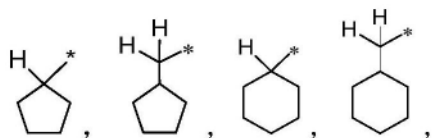
9. 如权利要求1-8任一项所述的金属配合物, 其中, U_1-U_4 每次出现相同或不同地是 CR_u , R_u 中至少有一个选自取代或未取代的1-20个碳原子的烷基, 取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基, 或其组合, 且所有所述 R_u 碳原子数总和至少是4。

10. 如权利要求1-8任一项所述的金属配合物, 其中, U_1-U_4 每次出现相同或不同地选自N或 CR_u , 且至少有一个是 CR_u , 且 R_u 选自取代或未取代的1-20个碳原子的烷基, 取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基, 或其组合, 且所有所述 R_u 碳原子数的总和至少是4。

11. 如权利要求1-10任一项所述的金属配合物, 其中, R_u 中至少一个选自取代或未取代的具有4-20个碳原子的烷基, 取代或未取代的具有4-20个碳原子的环烷基, 或其组合;

优选地, R_u 中至少一个选自自由取代或未取代的下述取代基组成的组: 





及其组合;任选地,上述基团中的氢被部分或完全氘代;

其中“*”表示所述取代基与碳的连接位置。

12. 如权利要求1-11任一项所述的金属配合物,其中, U_2 或 U_3 是 CR_u ,且所述 R_u 选自取代或未取代的具有4-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有4-20个碳原子的环烷基,或其组合;

优选地, R_u 选自取代或未取代的具有4-6个碳原子的烷基,取代或未取代的具有4-6个碳原子的环烷基,或其组合。

13. 如权利要求1-11任一项所述的金属配合物,其中, U_2 和 U_3 是 CR_u ,且所述 R_u 每次出现相同或不同地选自取代或未取代的1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,或其组合,且其中至少一个 R_u 取代基的碳原子数大于或等于4。

14. 如权利要求13所述的金属配合物,其中, U_1 和 U_4 是 CR_u , R_u 选自氢,氘,甲基和氘代甲基。

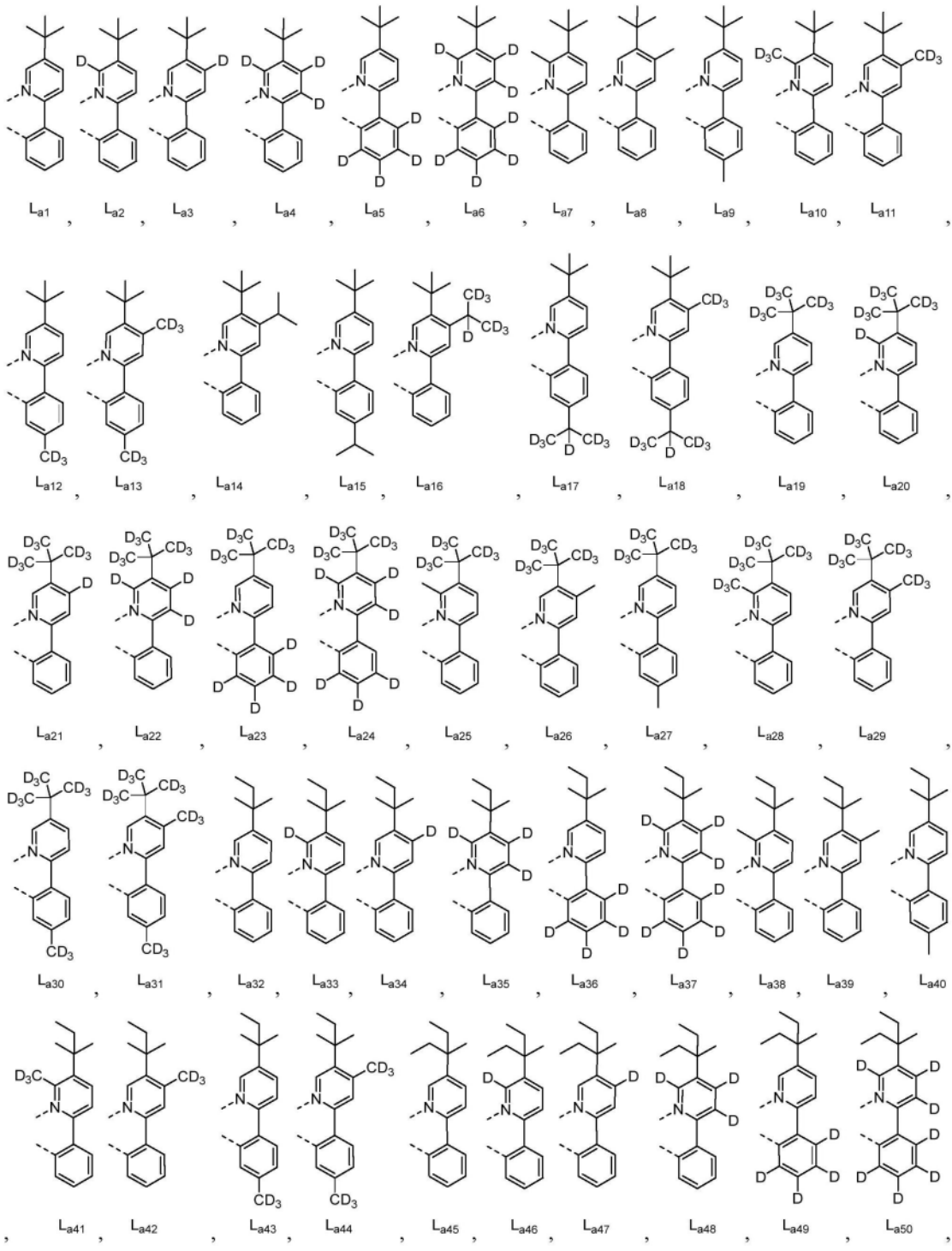
15. 如权利要求1-14任一项所述的金属配合物,其中, W_1-W_4 每次出现相同或不同地是 CR_w , Y_1-Y_4 每次出现相同或不同地是 CR_y , R_w 和 R_y 每次出现相同或不同地选自由以下组成的组:氢,氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,及其组合;

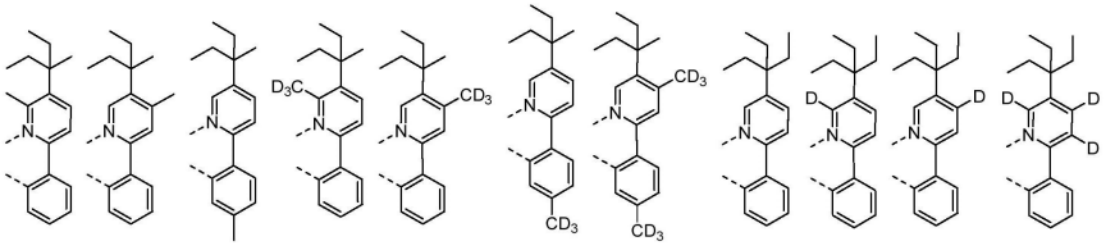
优选地, R_w 和 R_y 每次出现时相同或不同地选自由以下组成的组:氢,氘,取代或未取代的具有1-10个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-10个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有6-10个碳原子的芳基,及其组合;

更优选地, R_w 和 R_y 每次出现时相同或不同地选自由以下组成的组:氢,氘,取代或未取代的具有1-10个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-10个环碳原子的环烷基,及其组合。

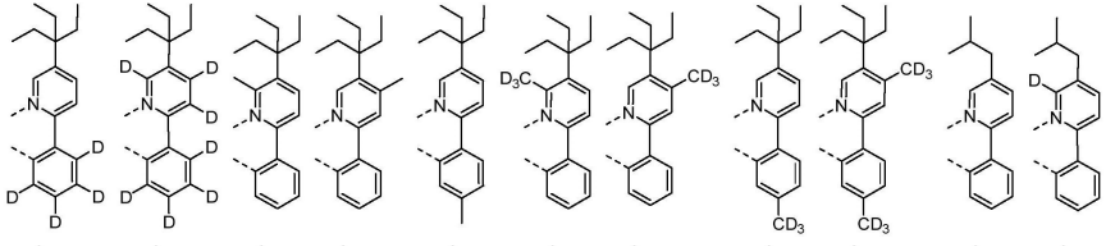
16. 如权利要求1-14任一项所述的金属配合物,其中, W_1-W_4 每次出现相同或不同地是 CR_w ,至少一个 R_w 是选自由以下组成的组:氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,及其组合;和/或 Y_1-Y_4 每次出现相同或不同地是 CR_y ,至少一个 R_y 是选自由以下组成的组:氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,及其组合。

17. 如权利要求1所述的金属配合物,其中, L_a 每次出现时相同或不同地选自由以下组成的组:

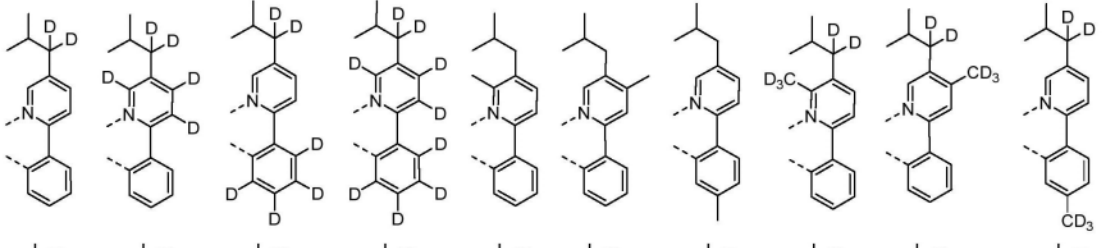




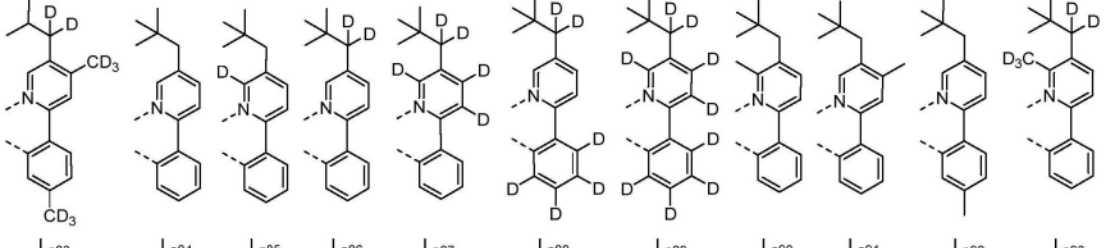
La51, La52, La53, La54, La55, La56, La57, La58, La59, La60, La61,



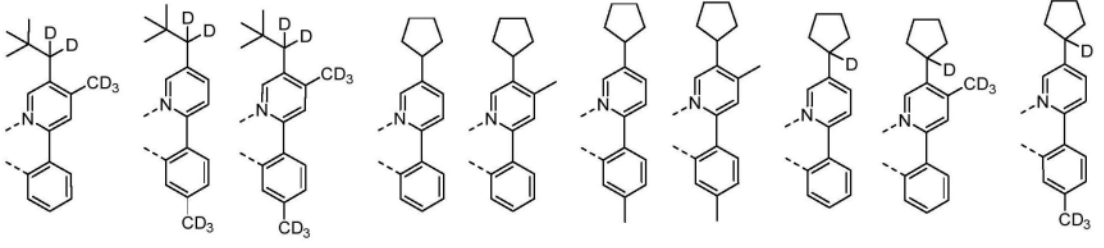
La62, La63, La64, La65, La66, La67, La68, La69, La70, La71, La72,



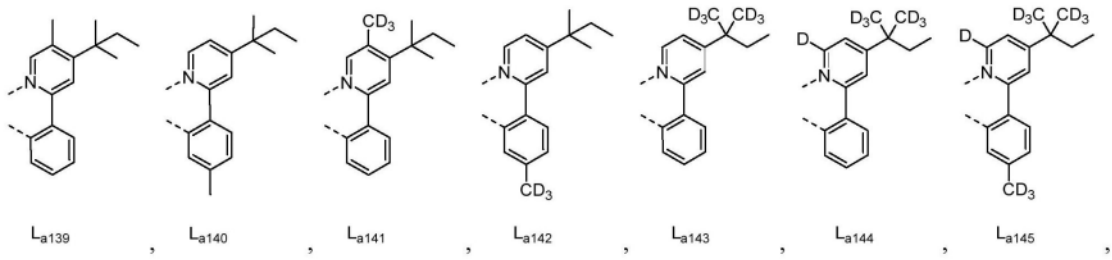
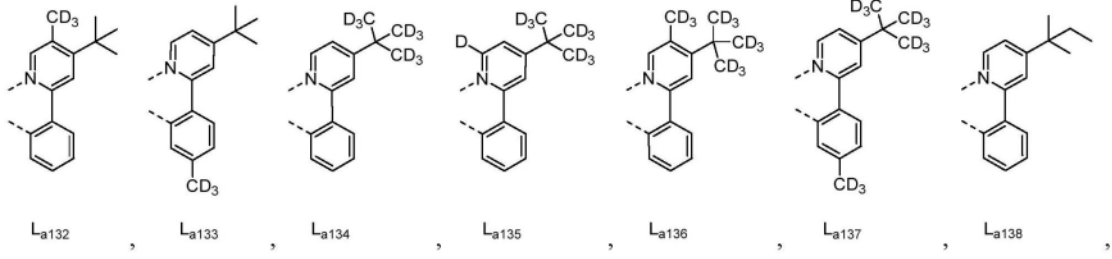
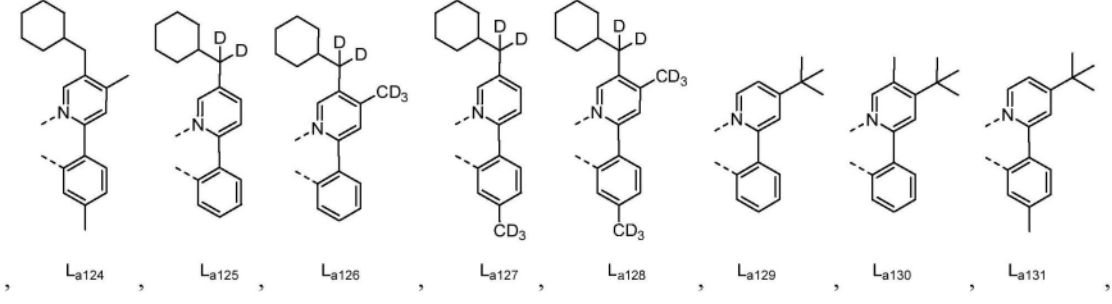
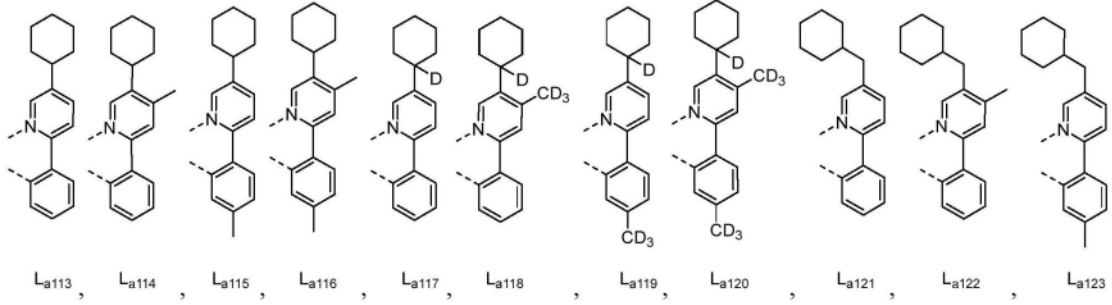
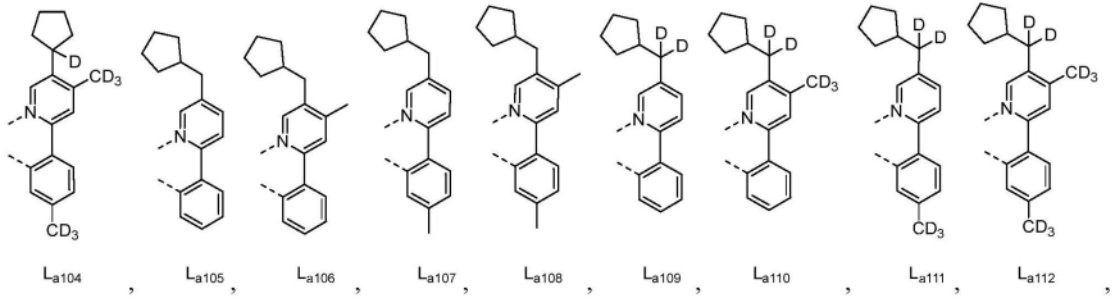
La73, La74, La75, La76, La77, La78, La79, La80, La81, La82,

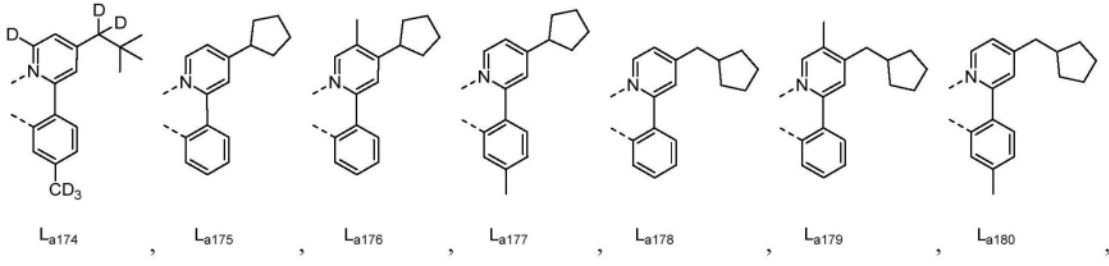
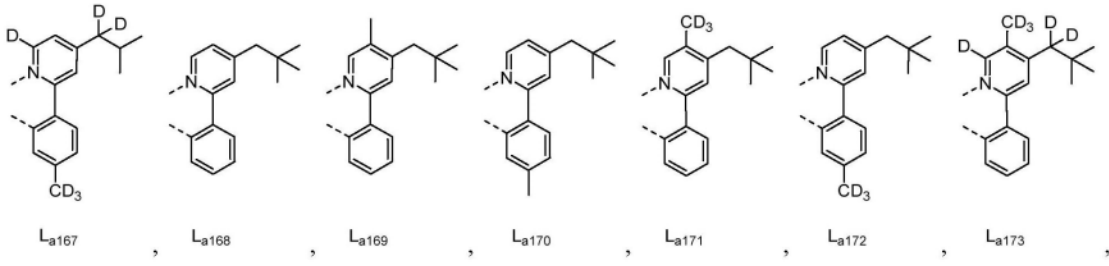
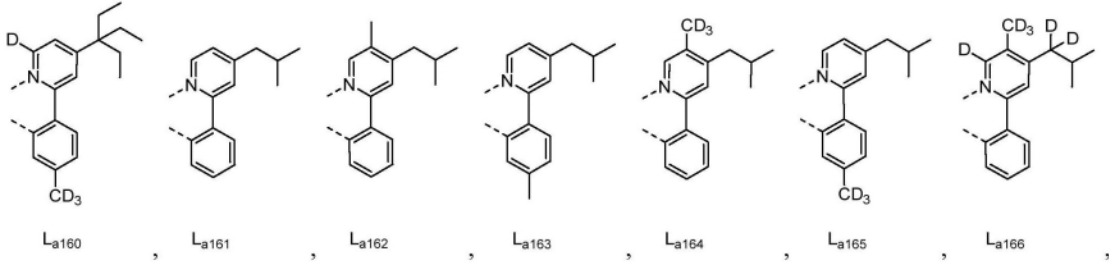
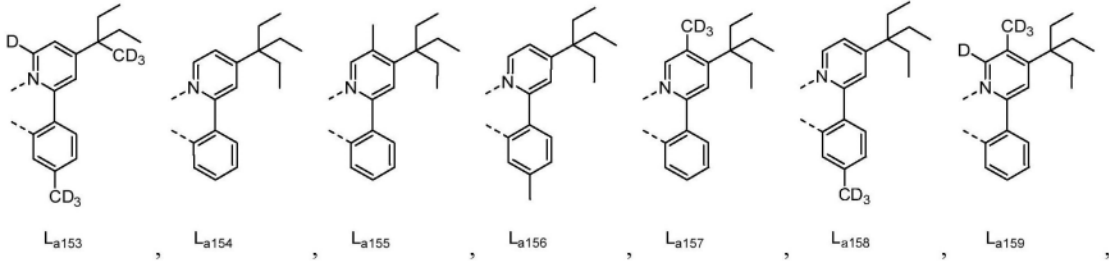
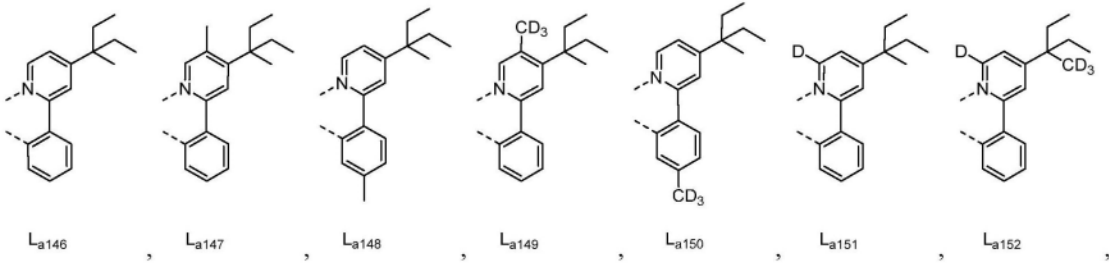


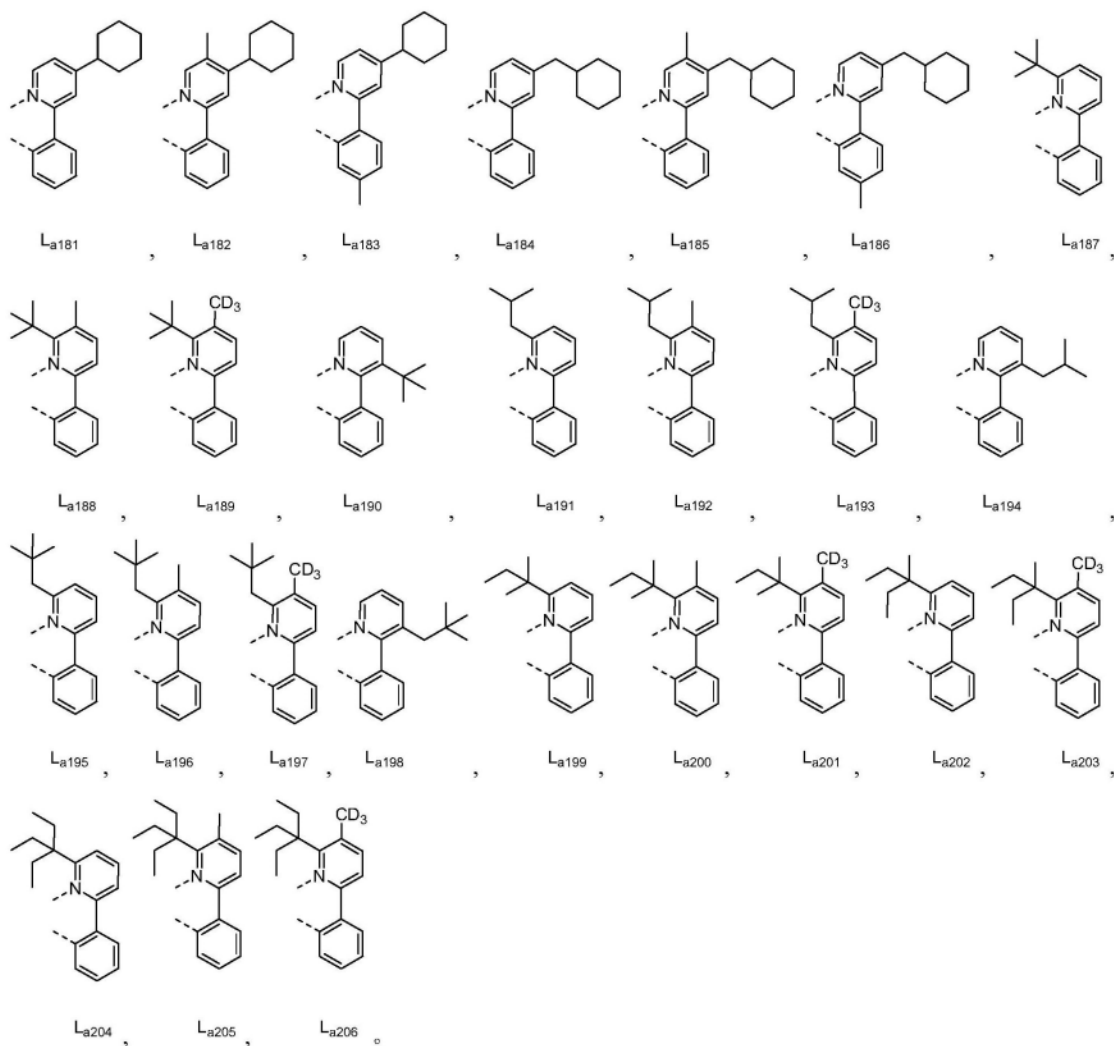
La83, La84, La85, La86, La87, La88, La89, La90, La91, La92, La93,



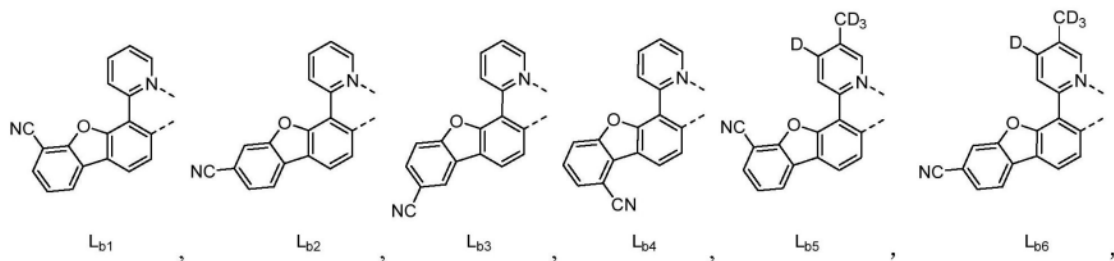
La94, La95, La96, La97, La98, La99, La100, La101, La102, La103,

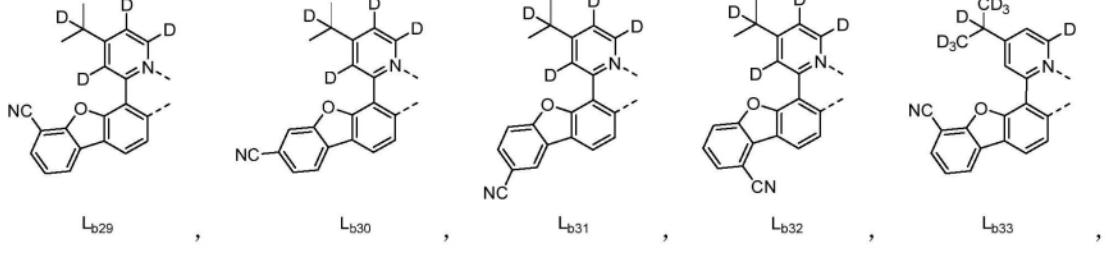
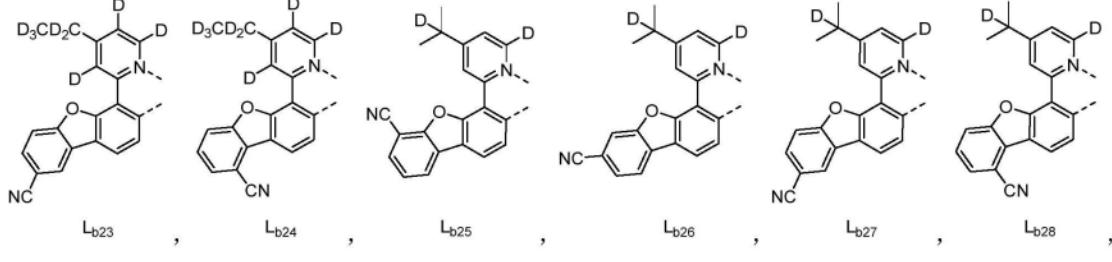
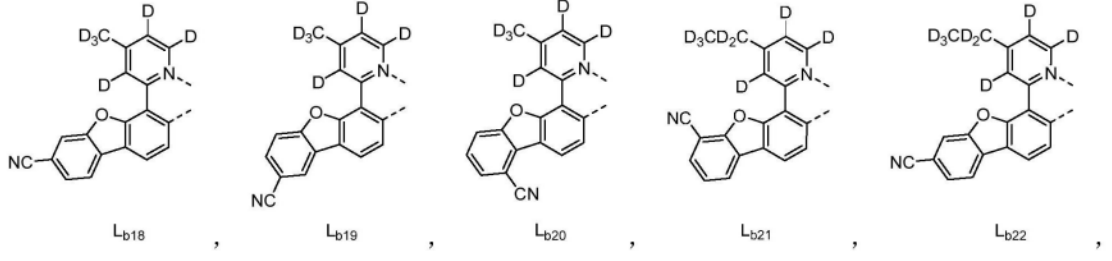
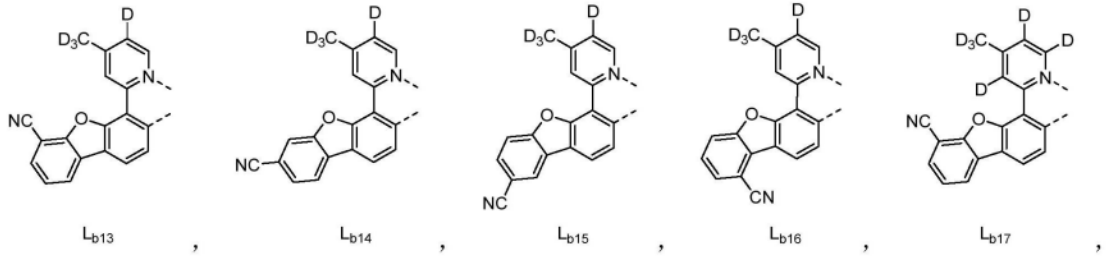
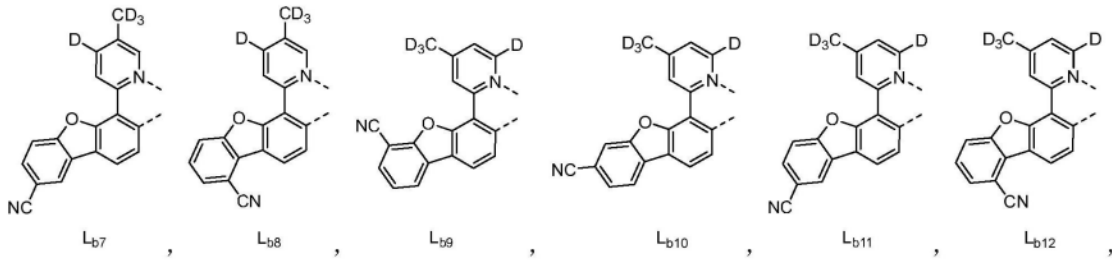


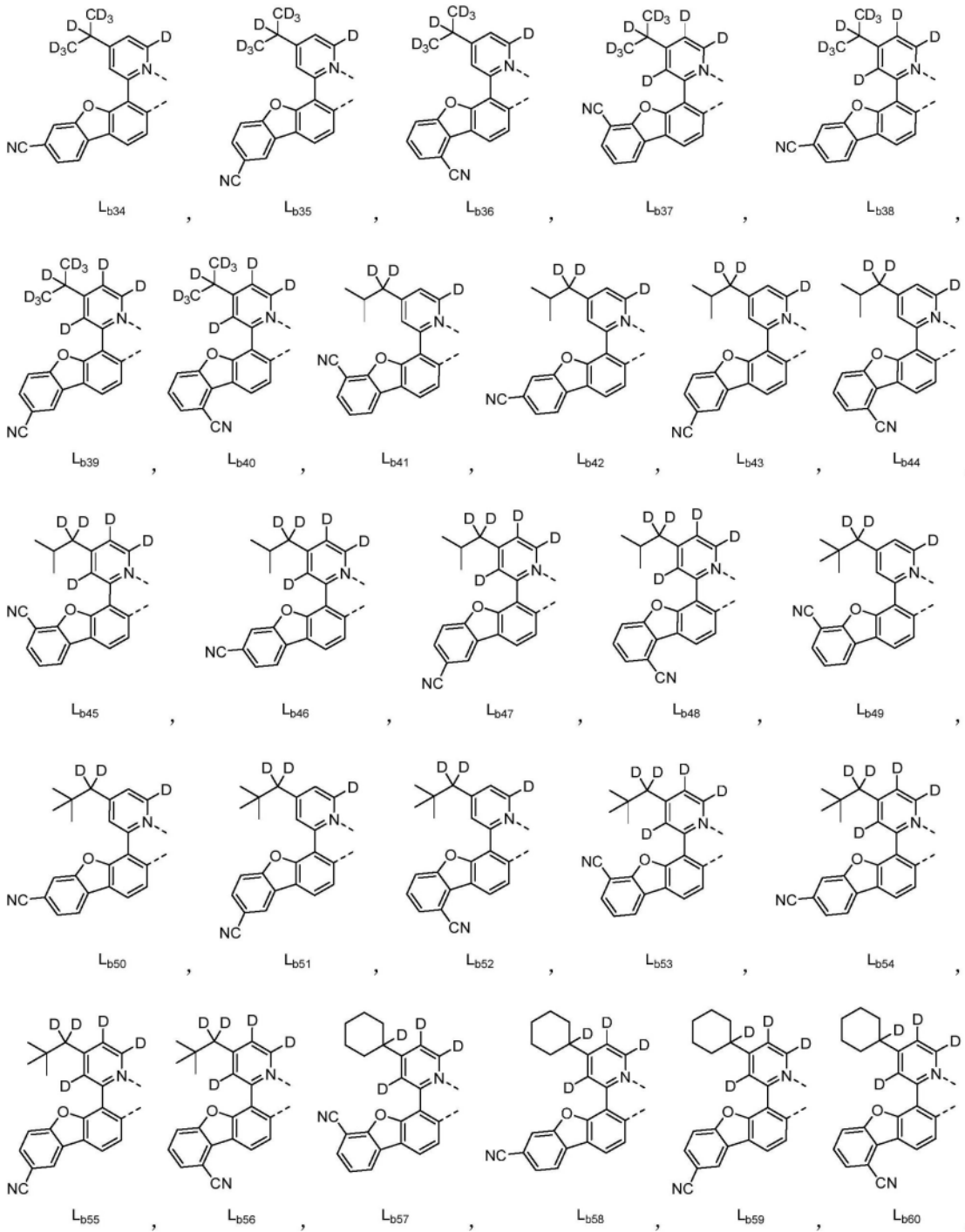


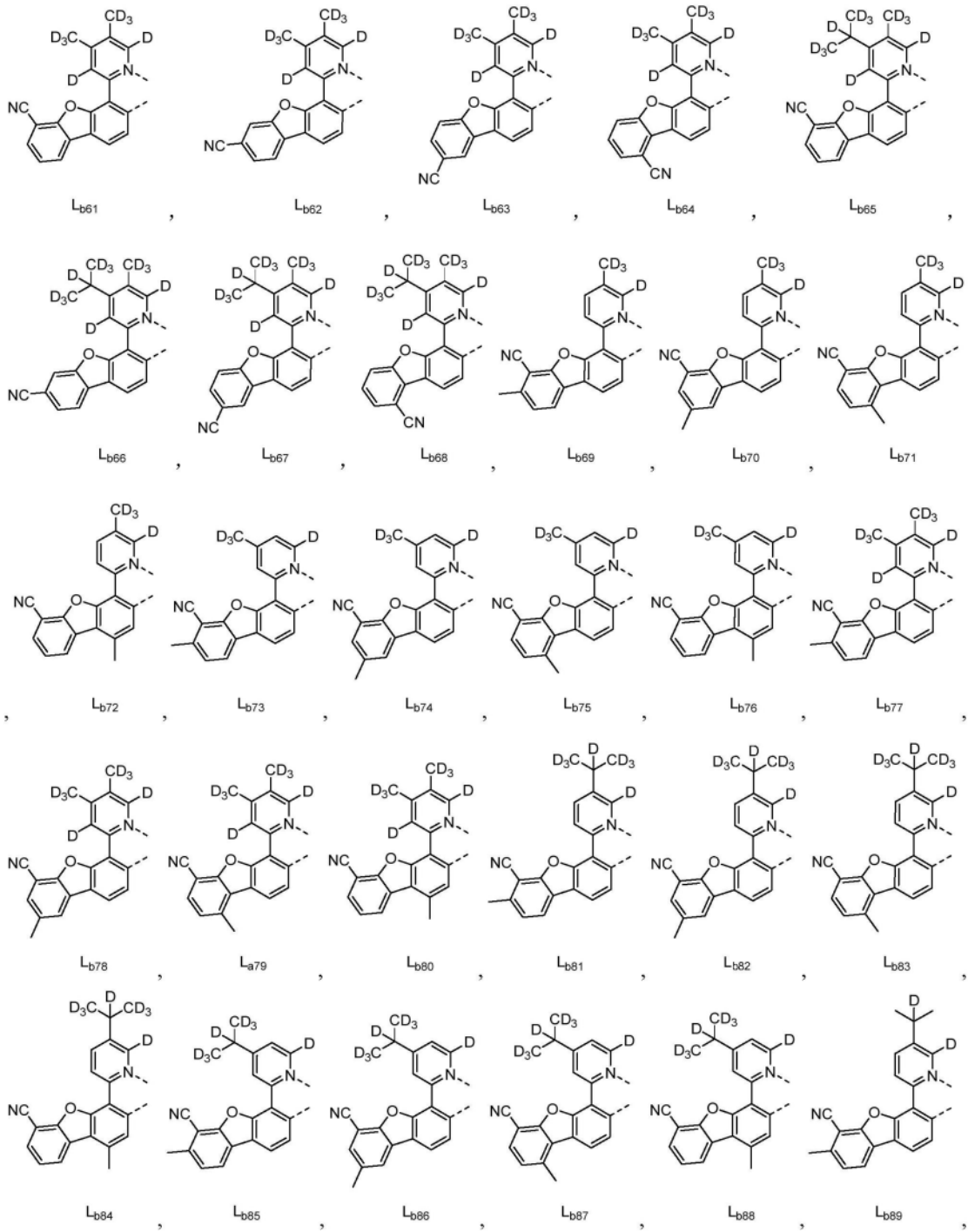


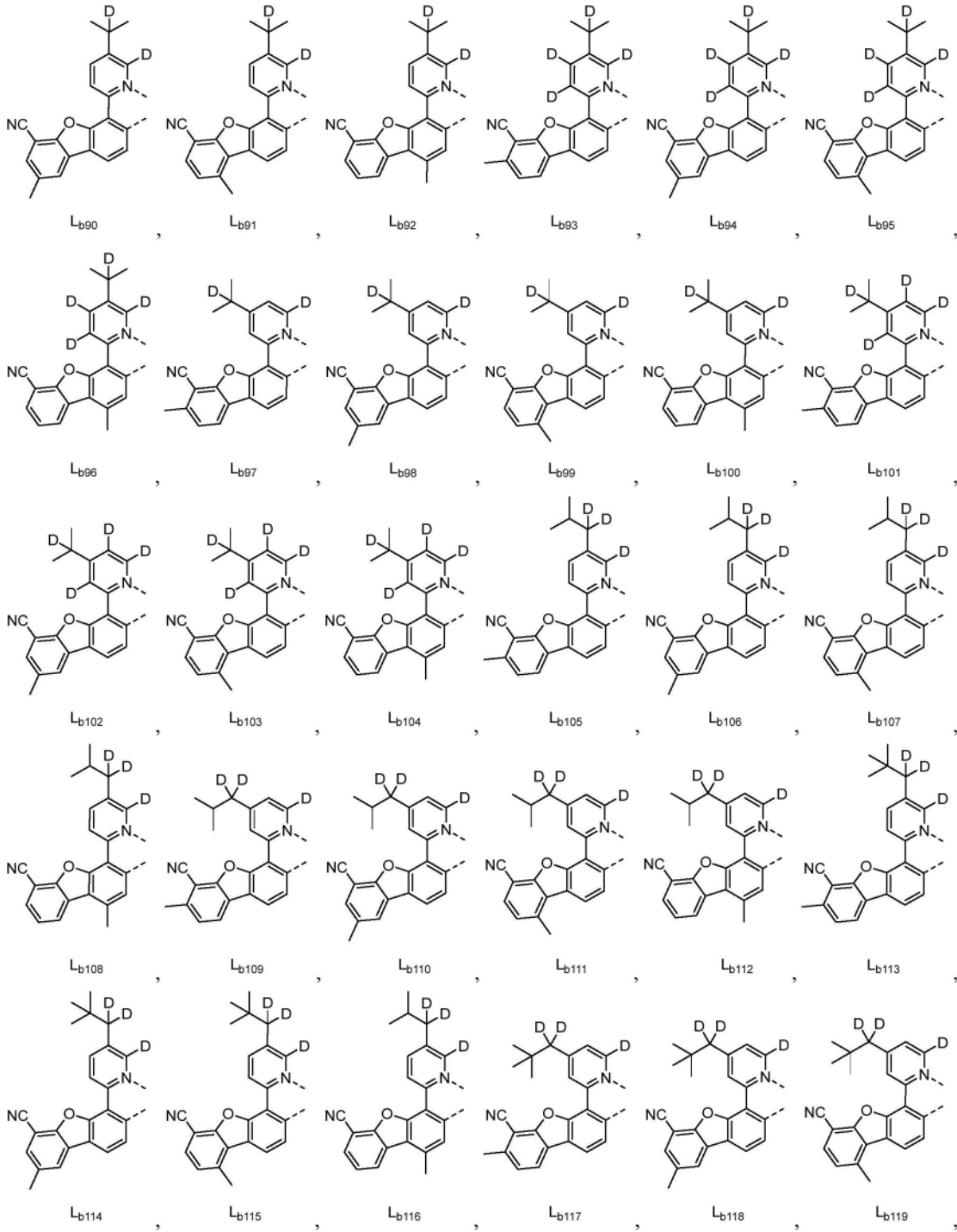
18. 如权利要求1所述的金属配合物,其中, L_b 每次出现时相同或不同地选自由以下组成的组:

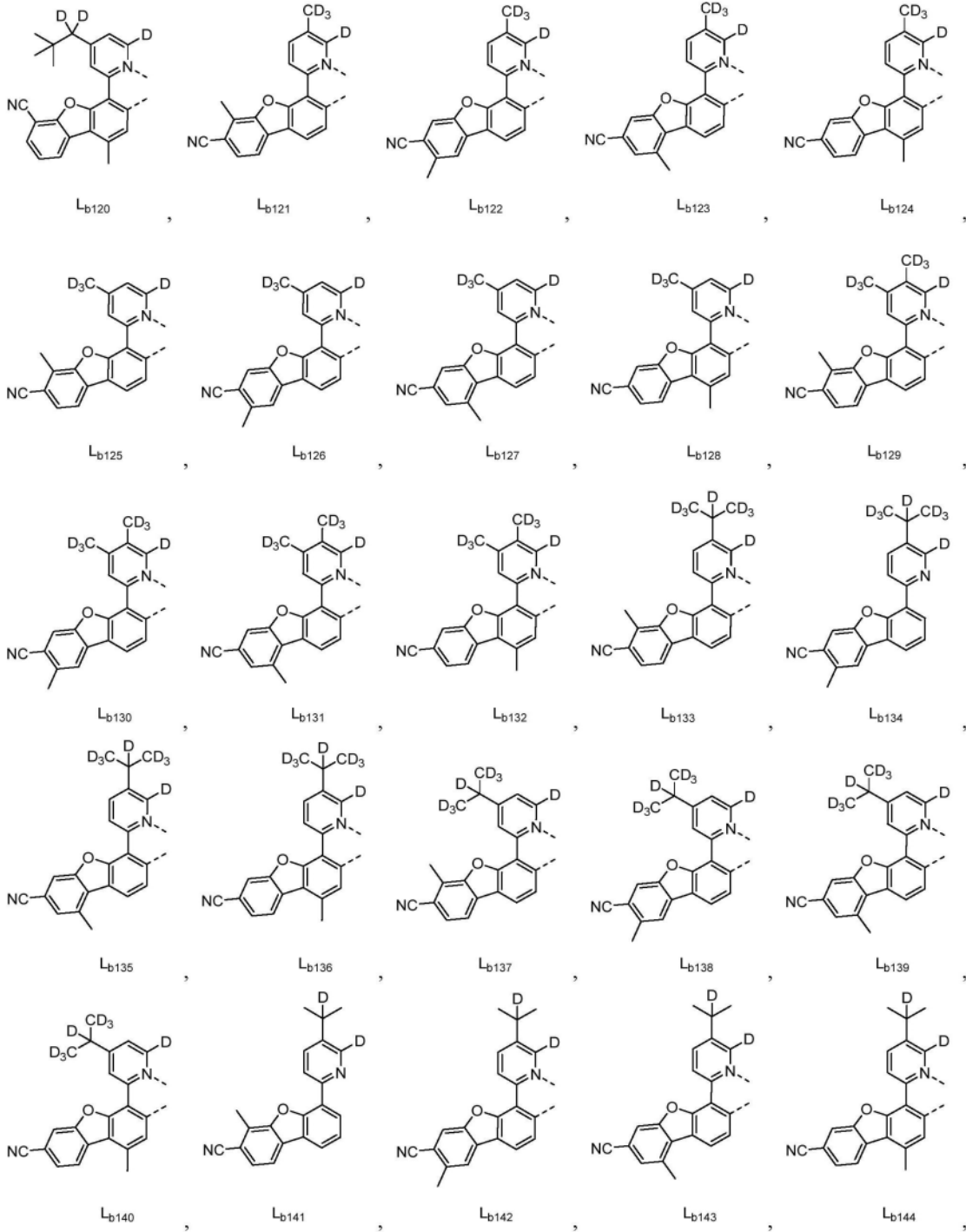


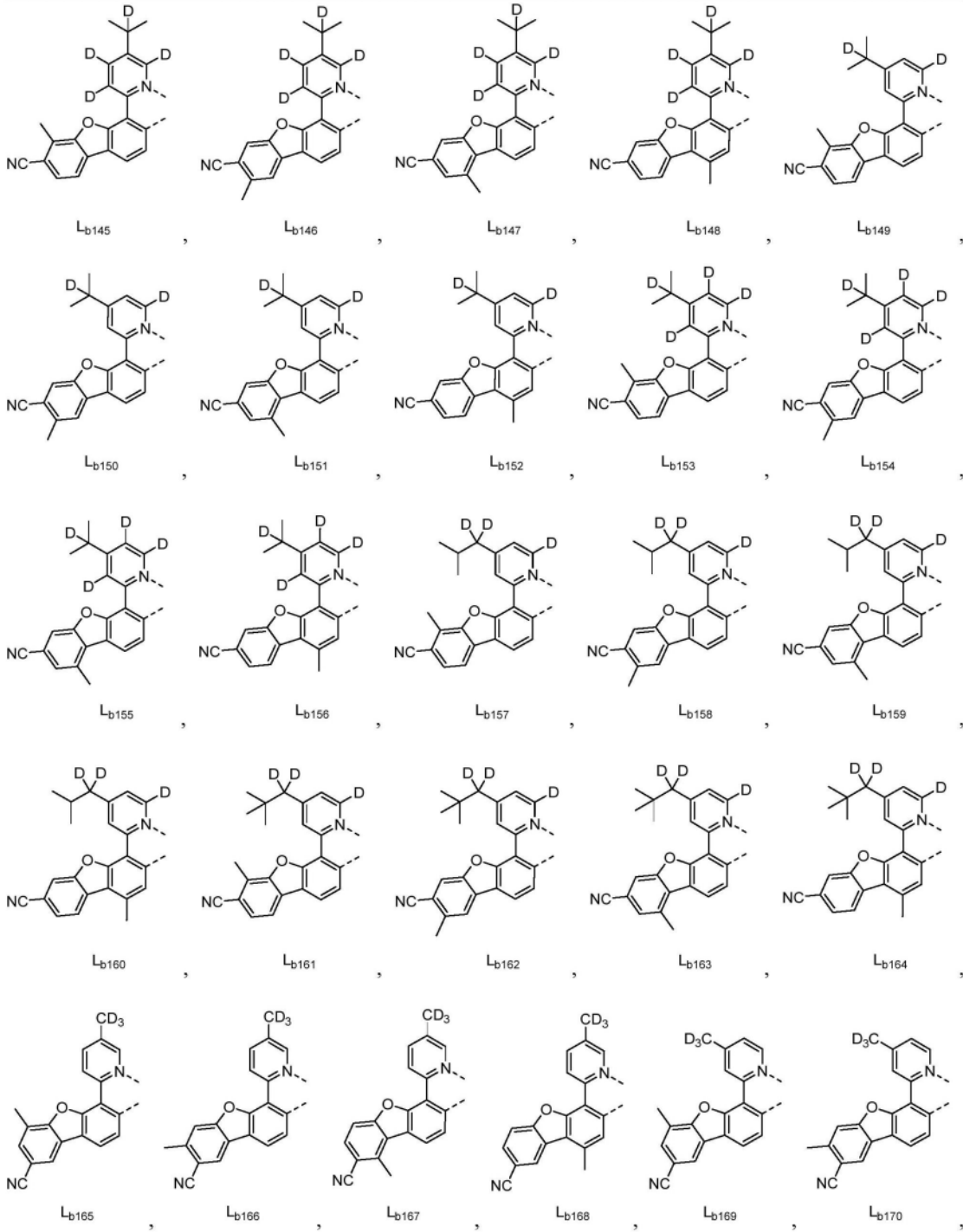


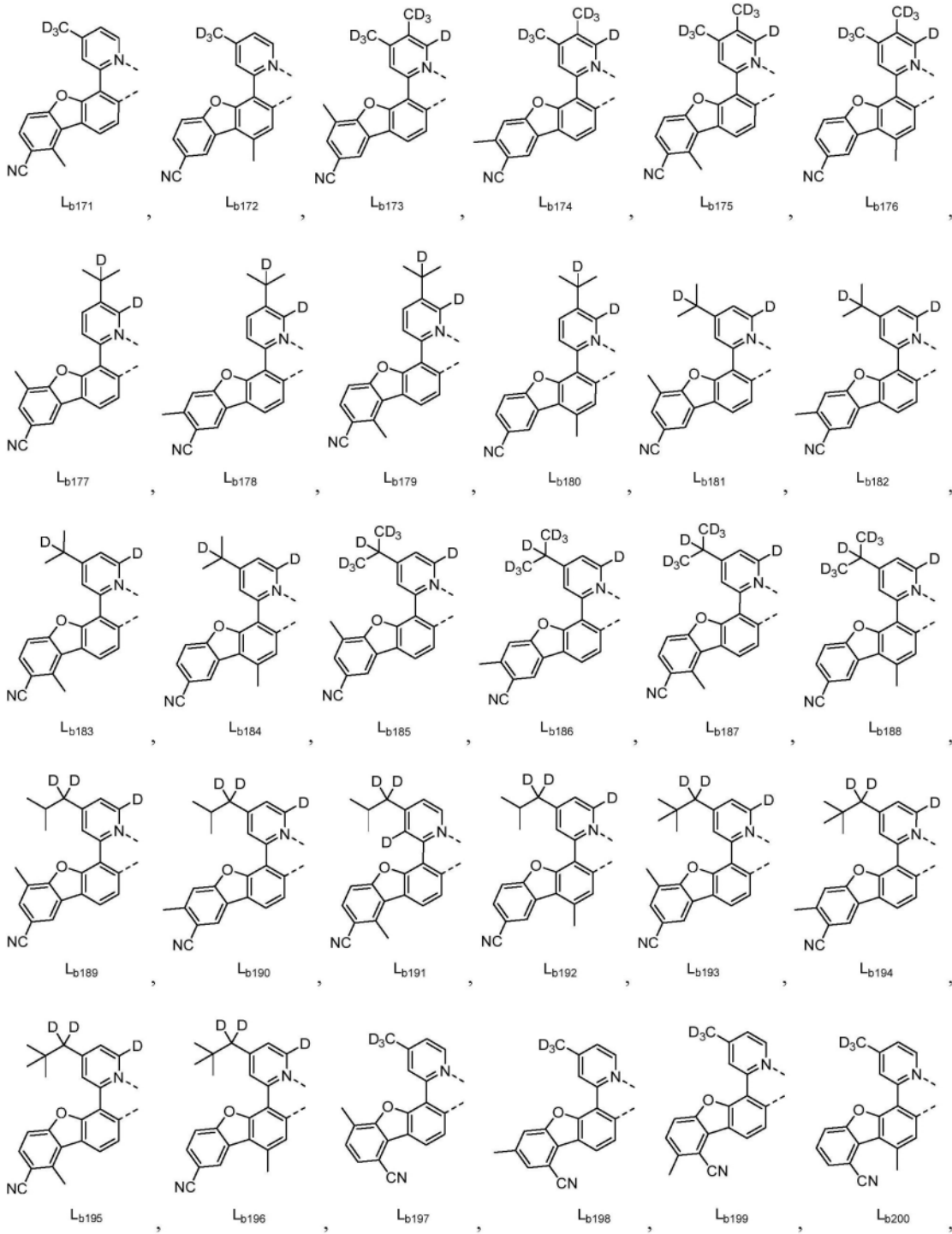


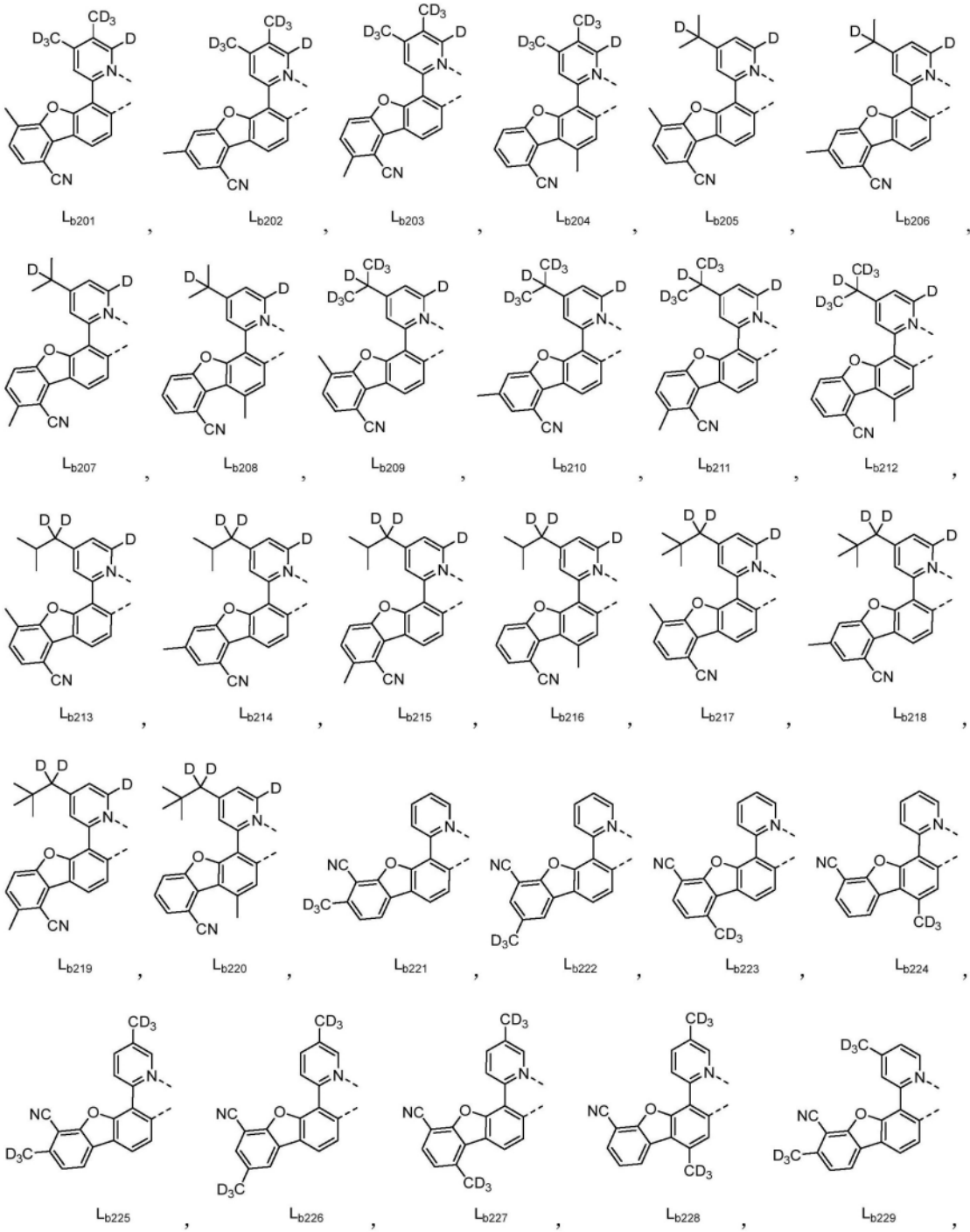


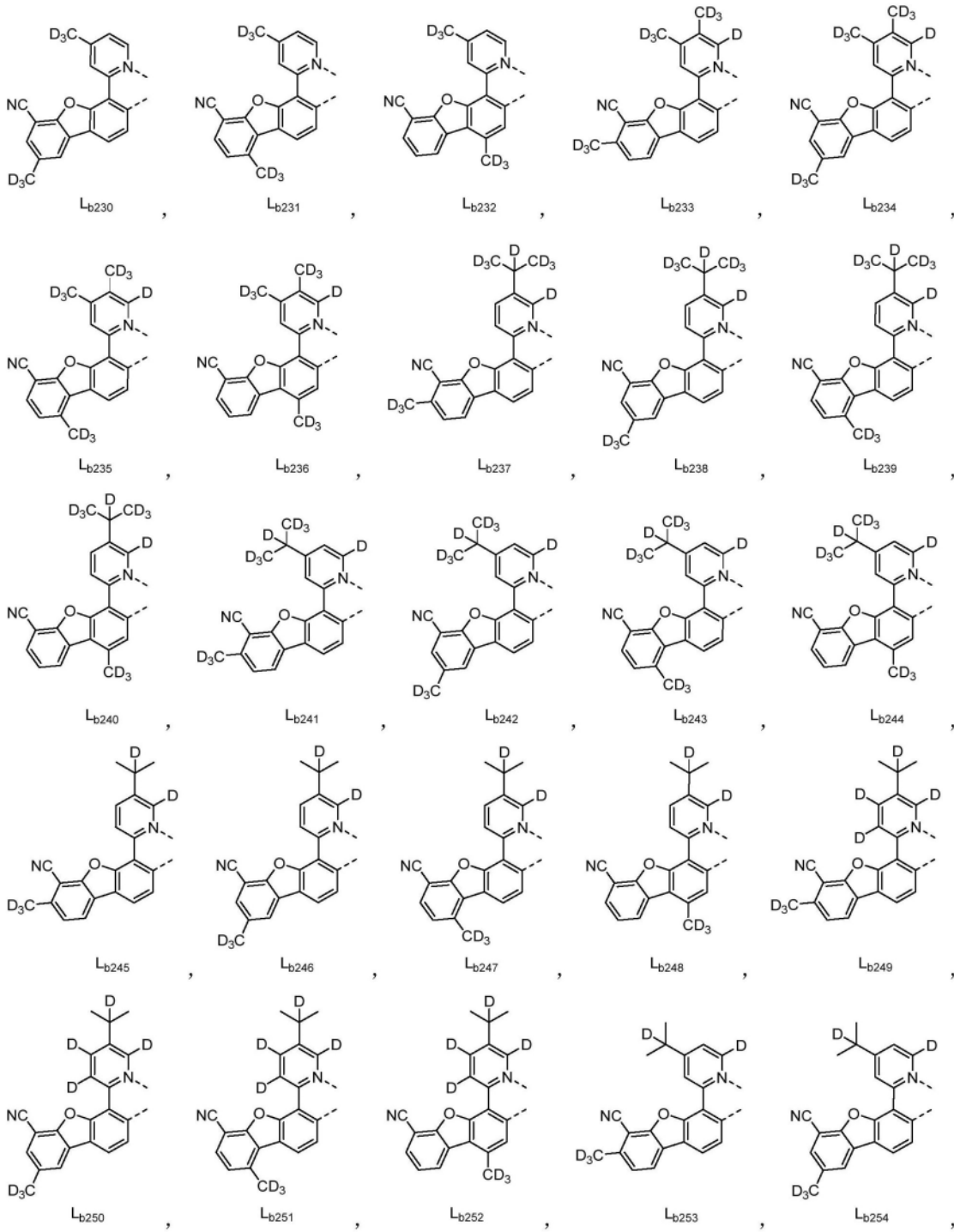


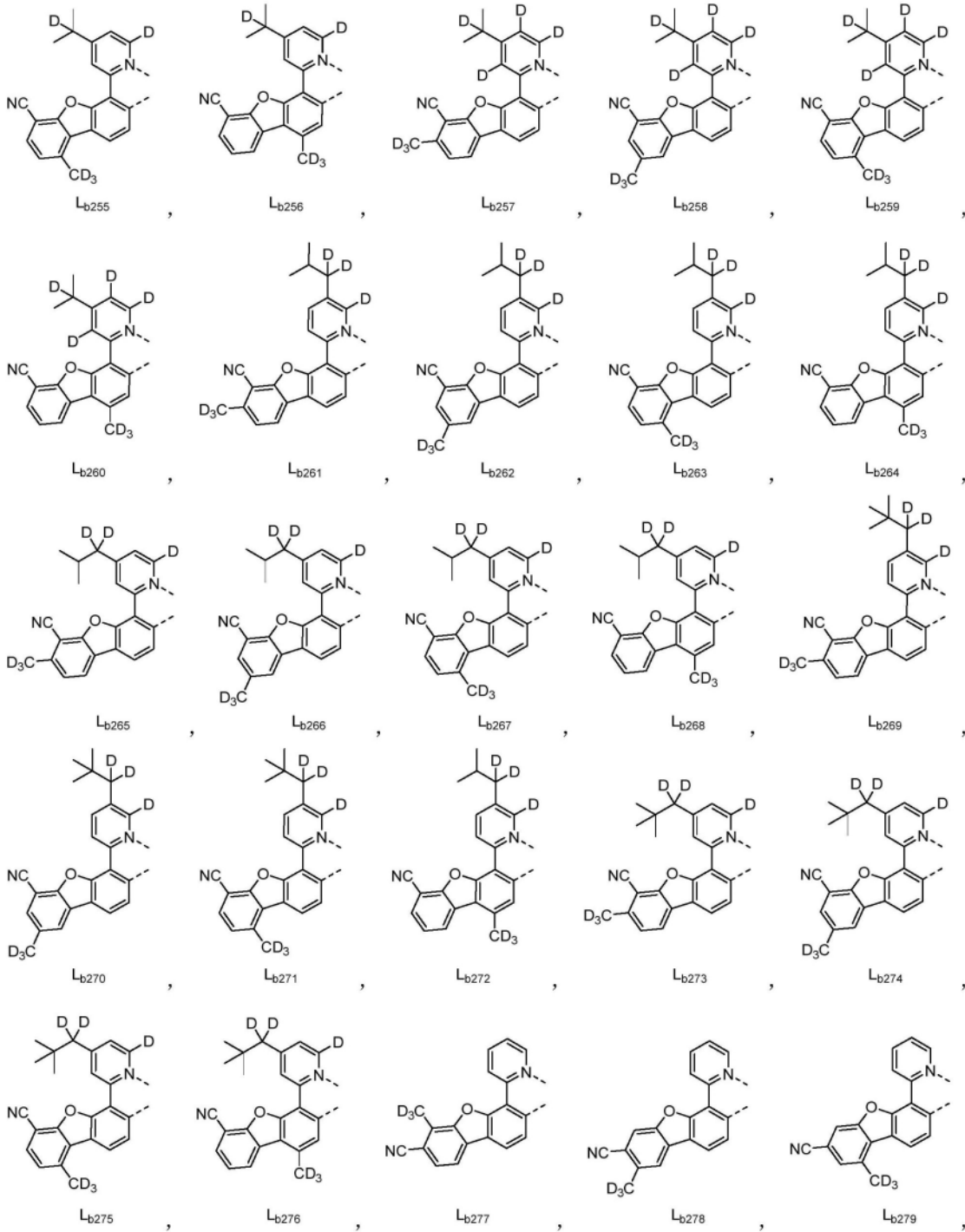


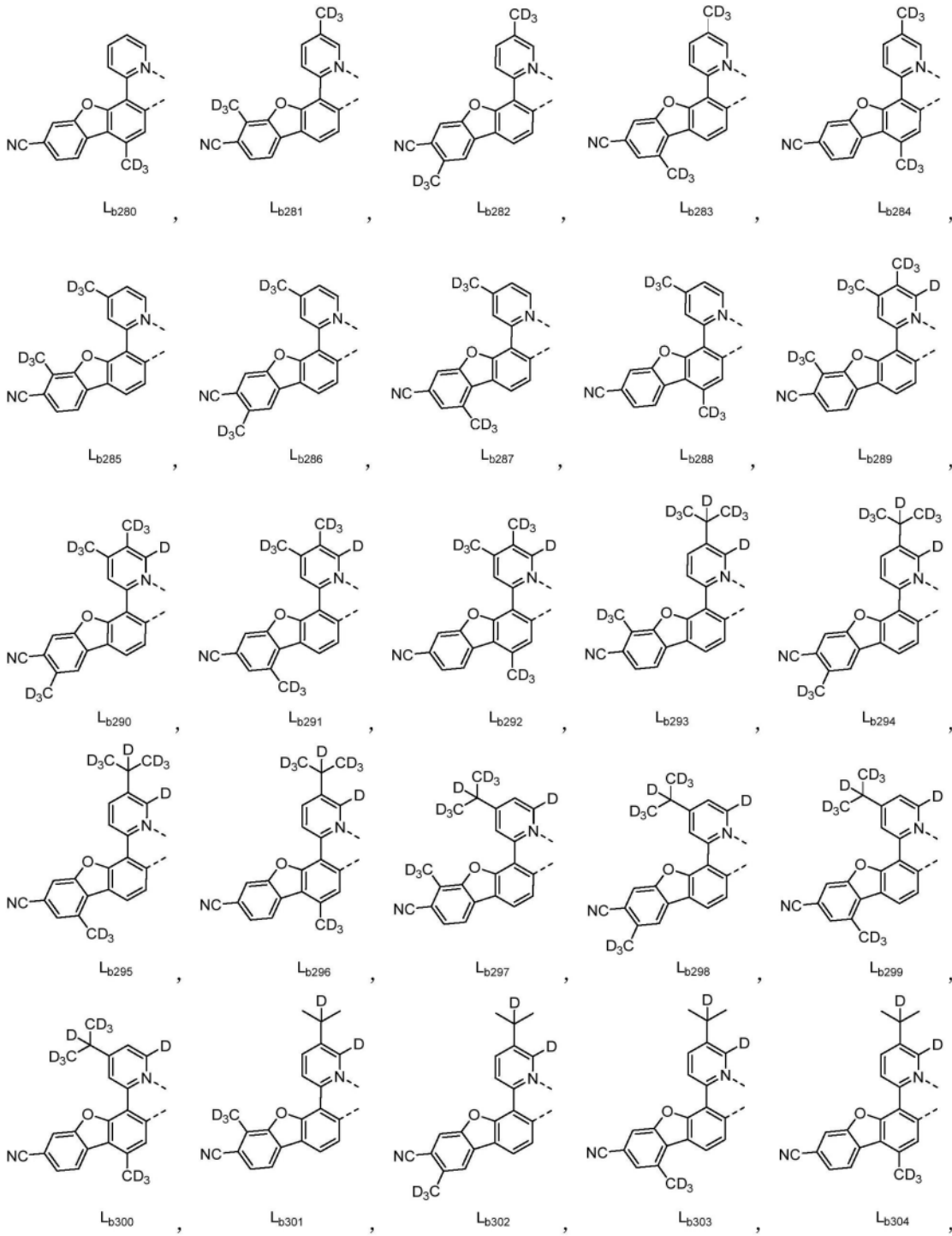


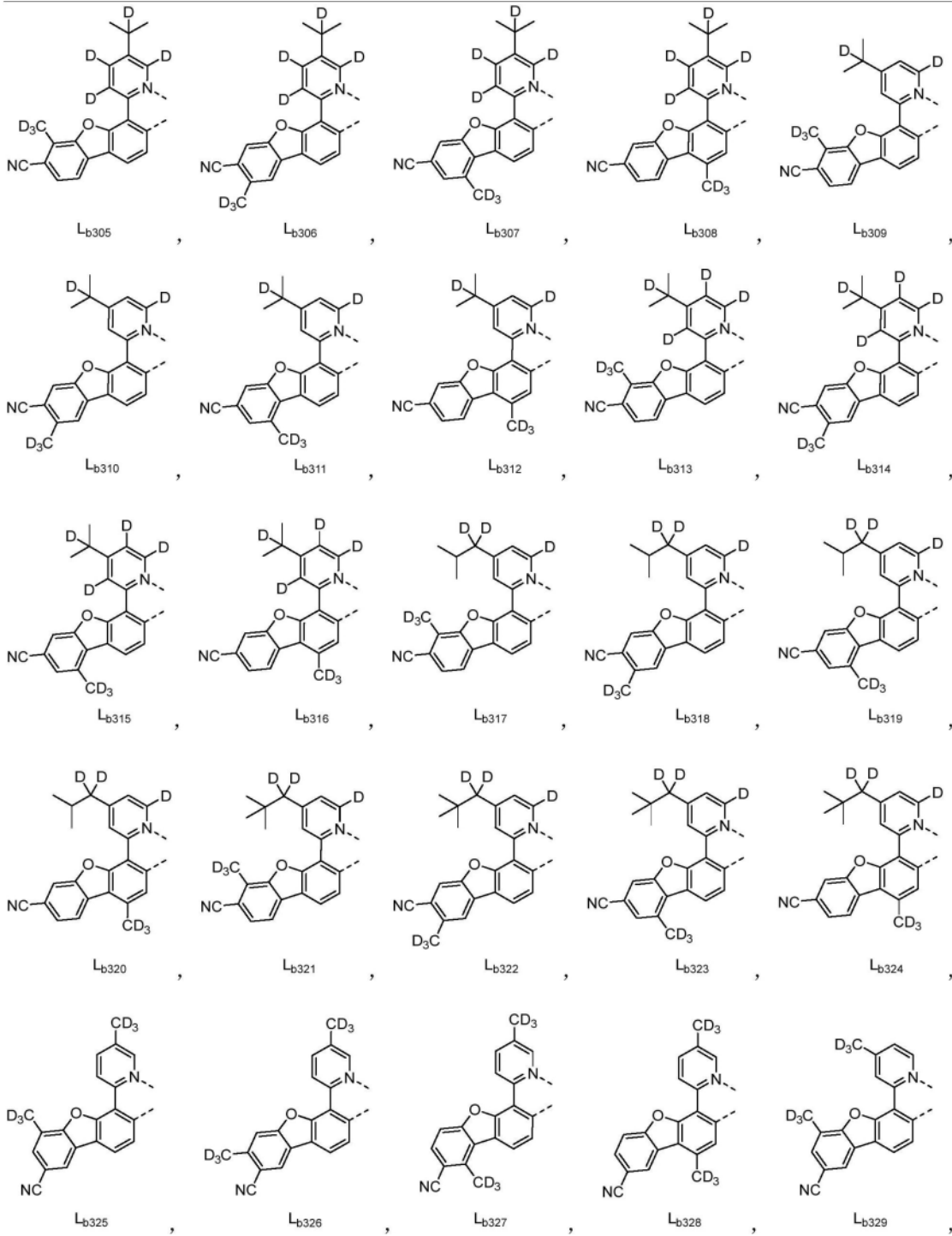


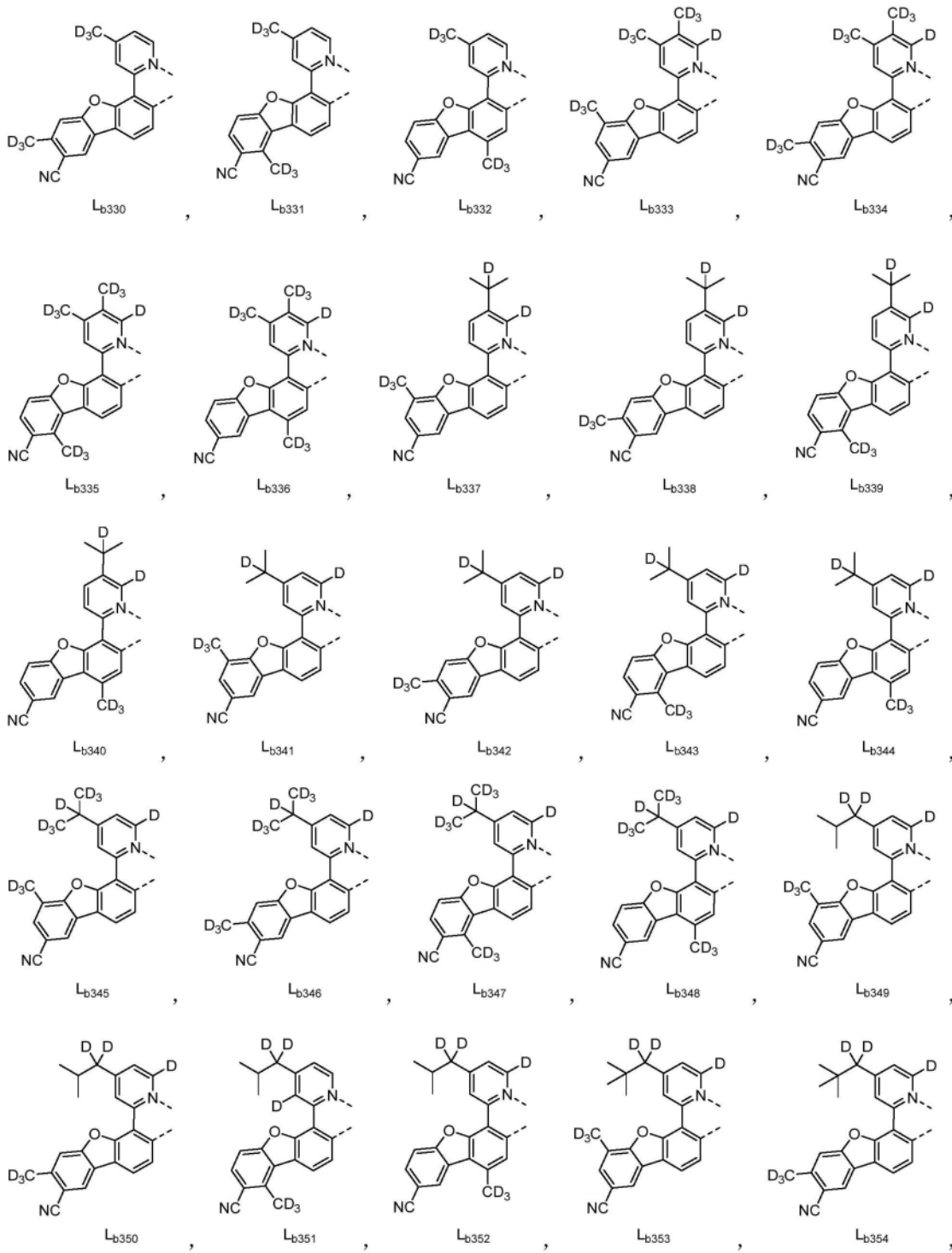


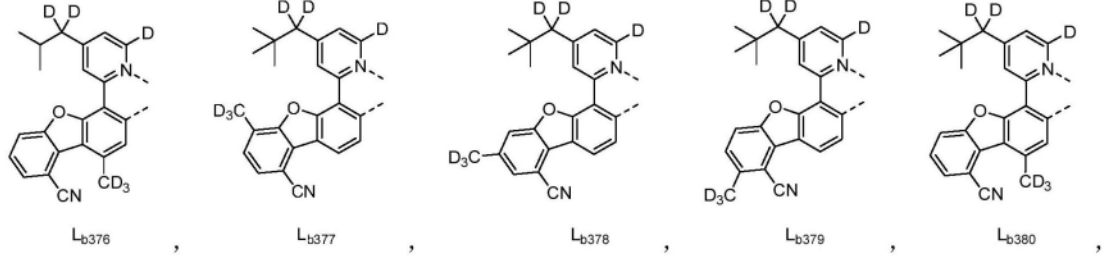
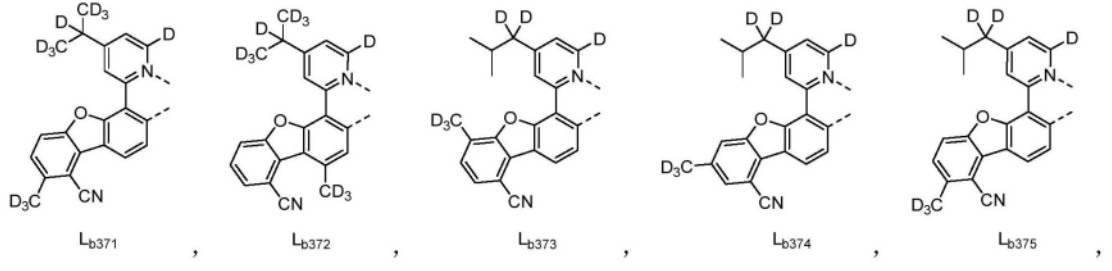
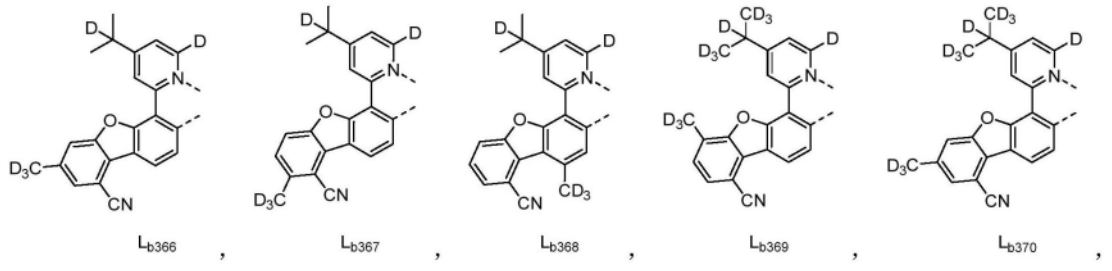
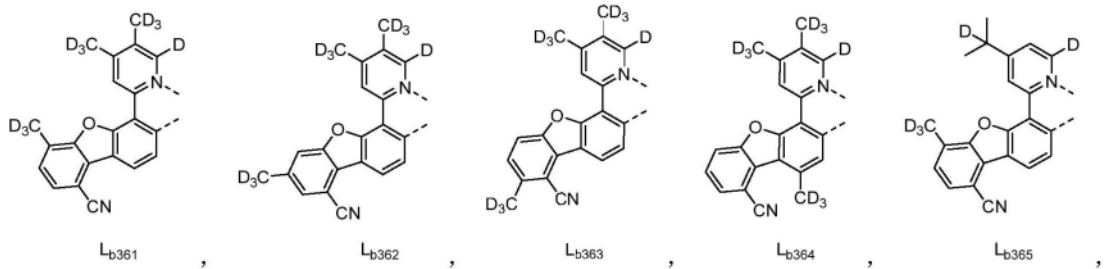
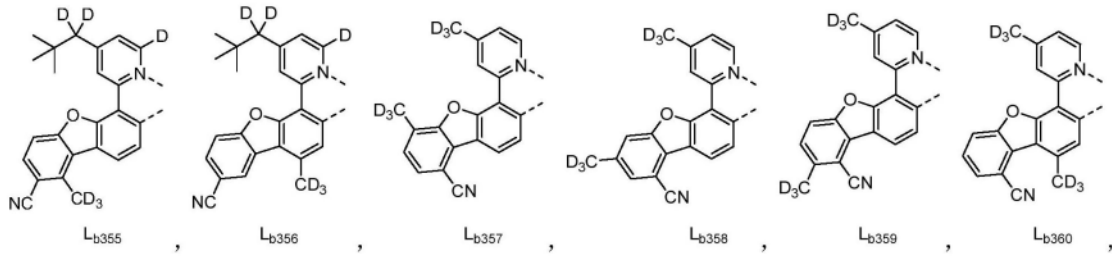


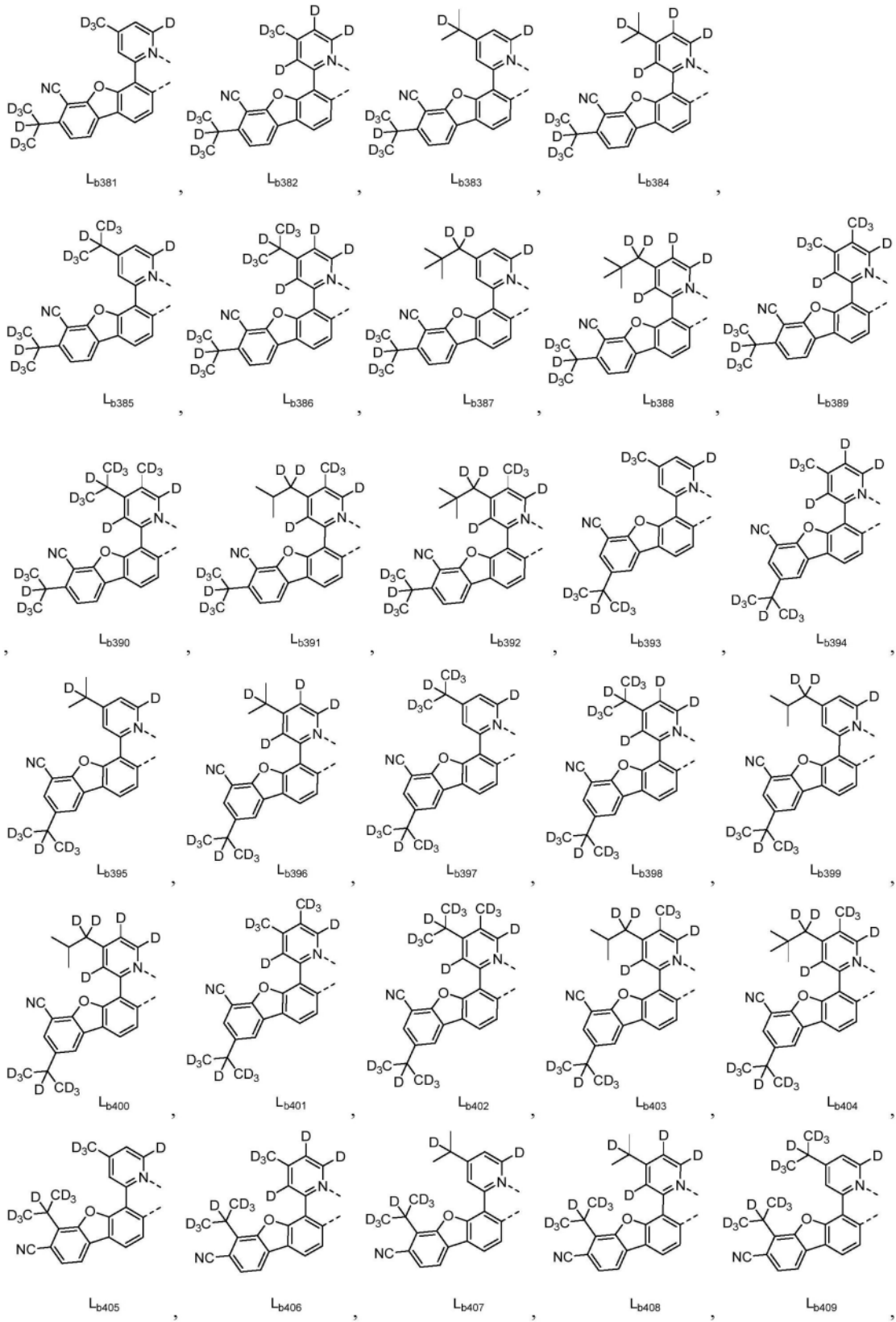


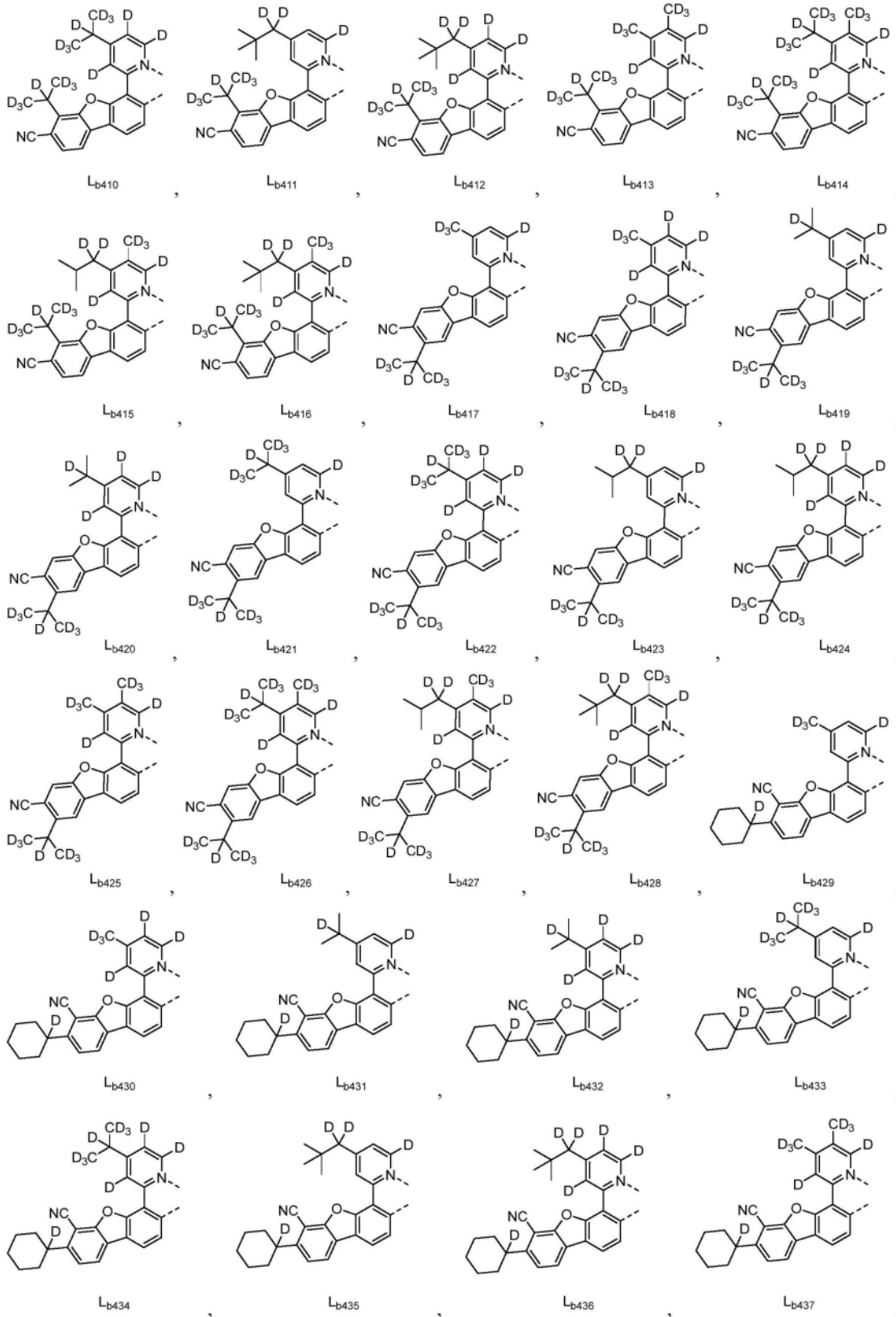


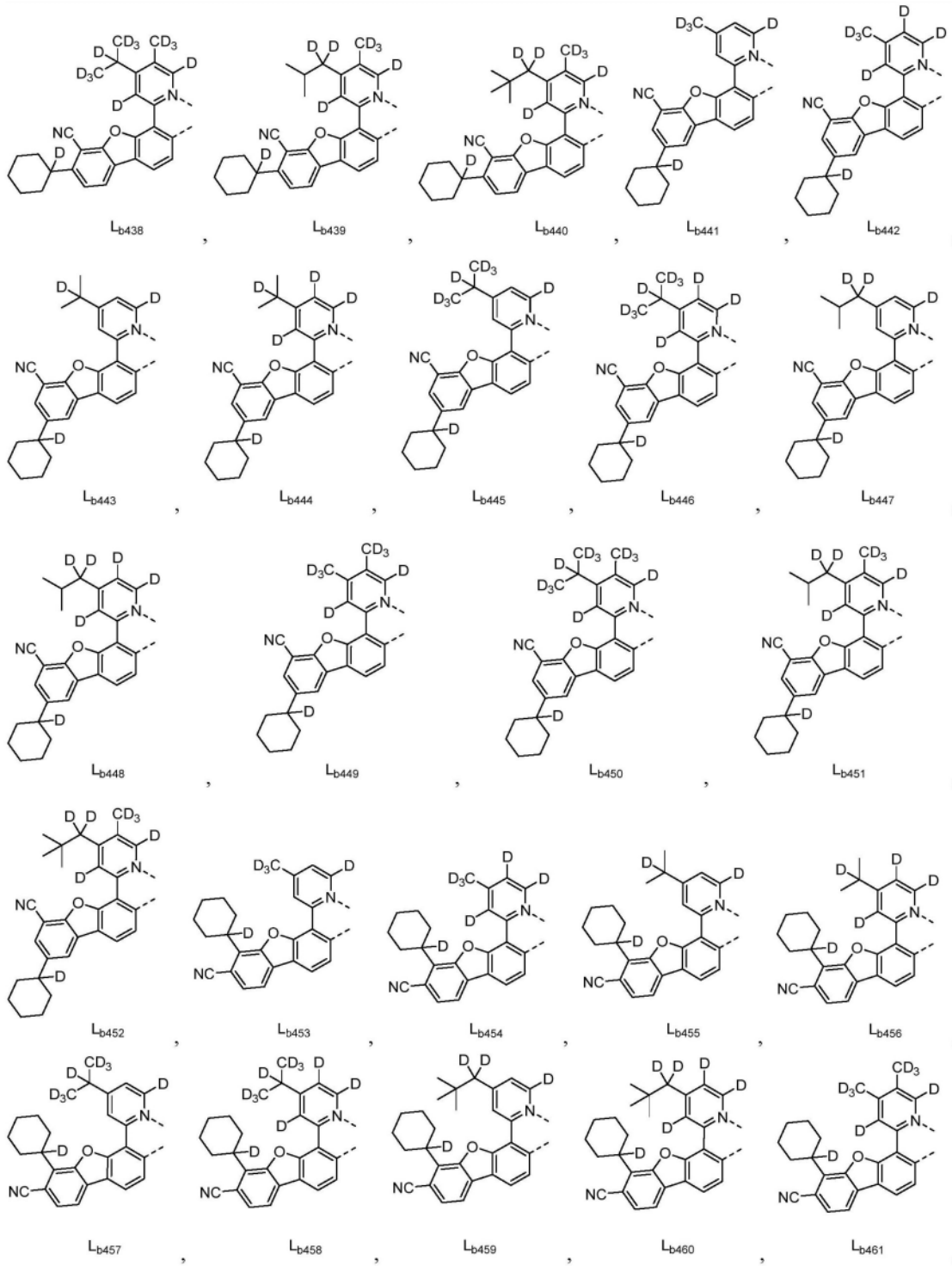


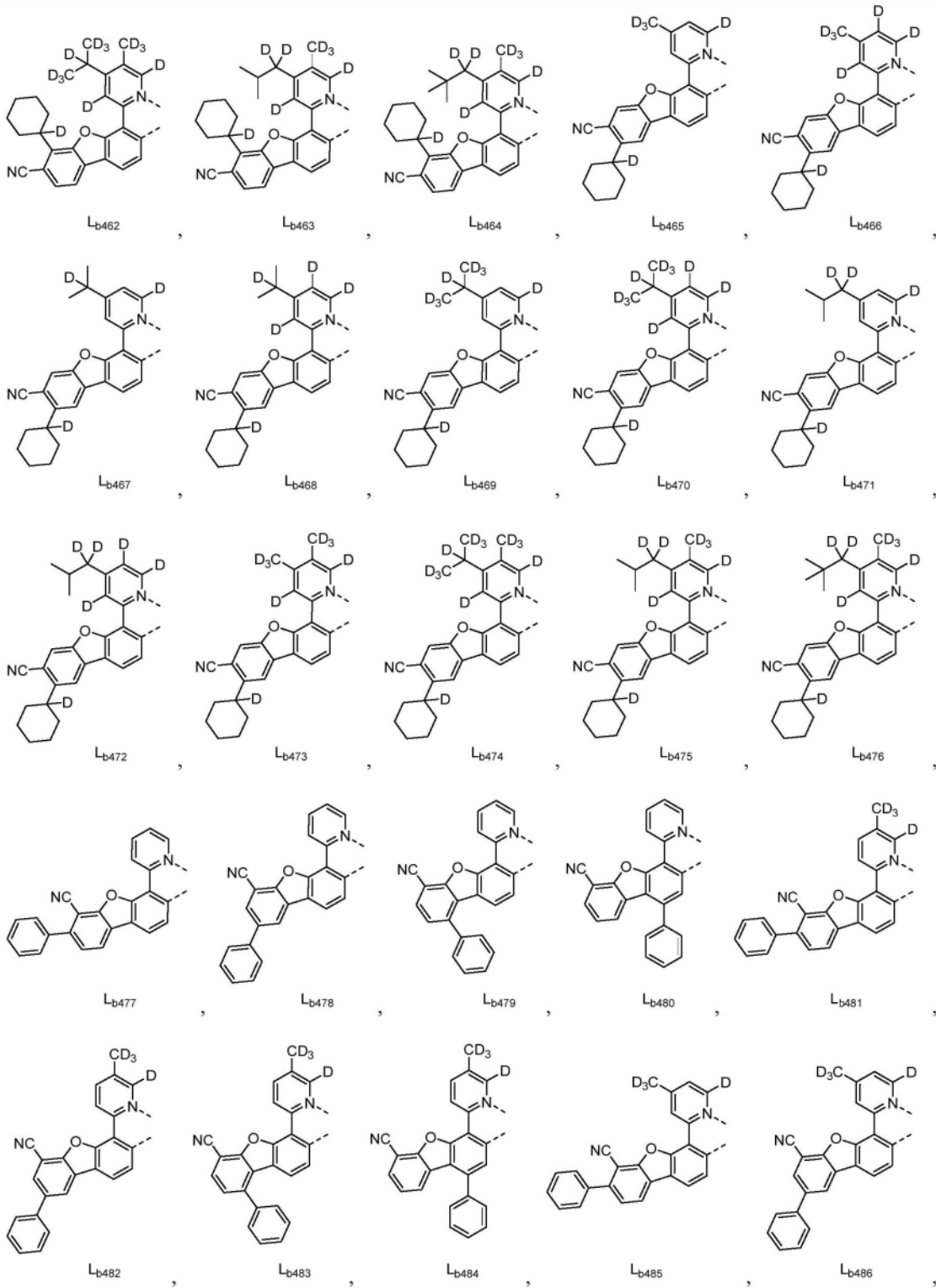


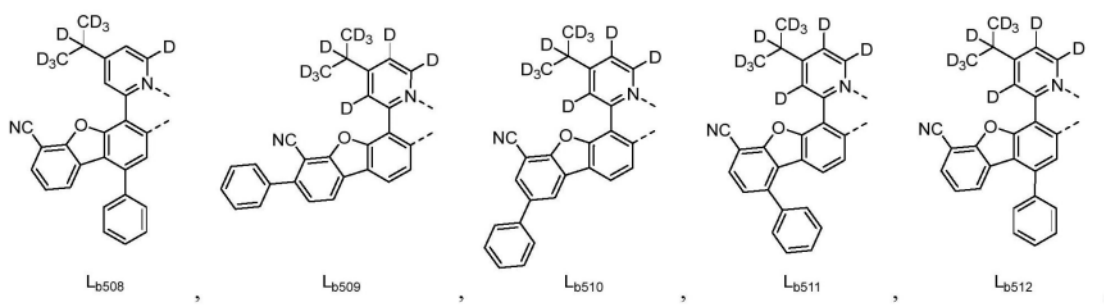
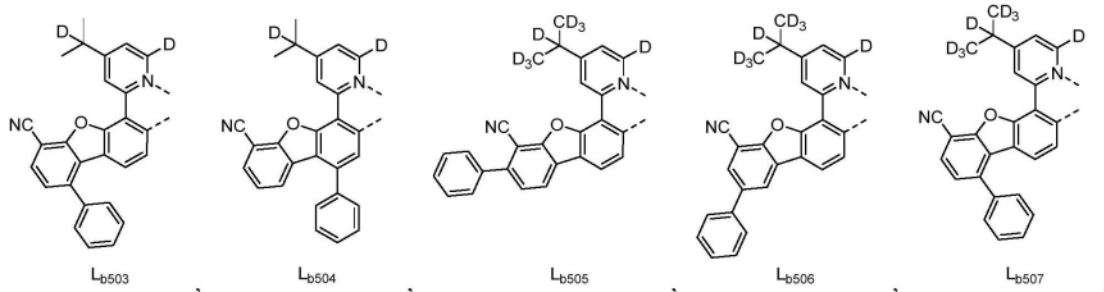
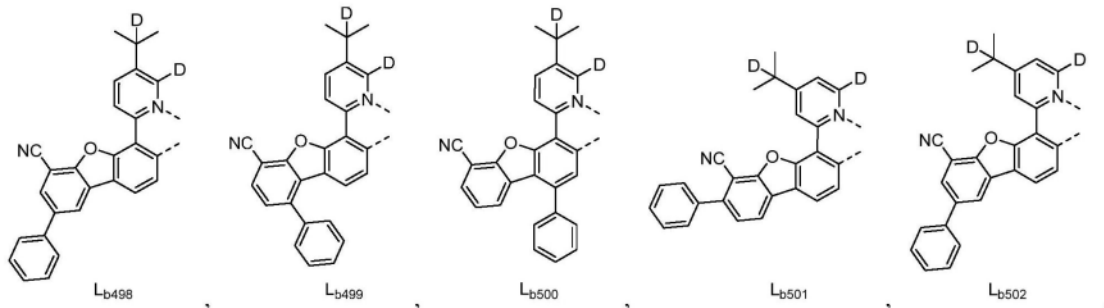
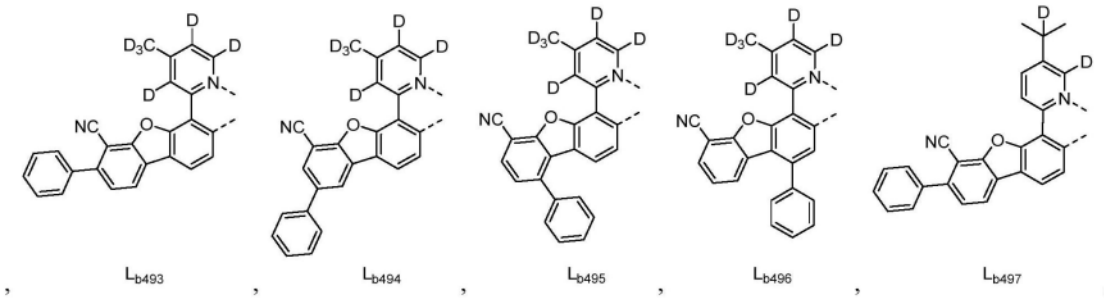
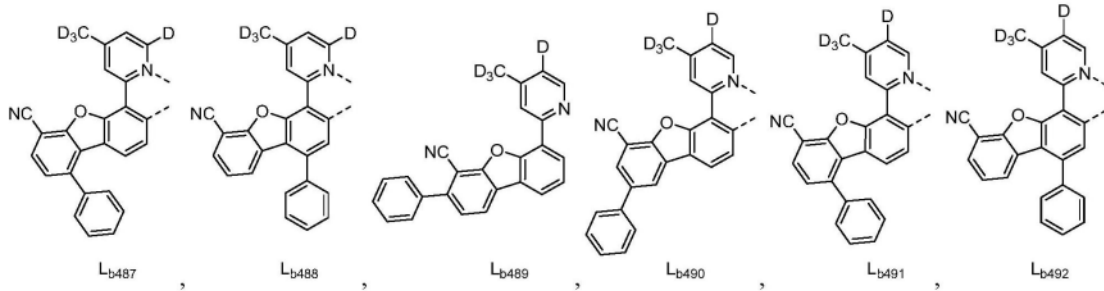


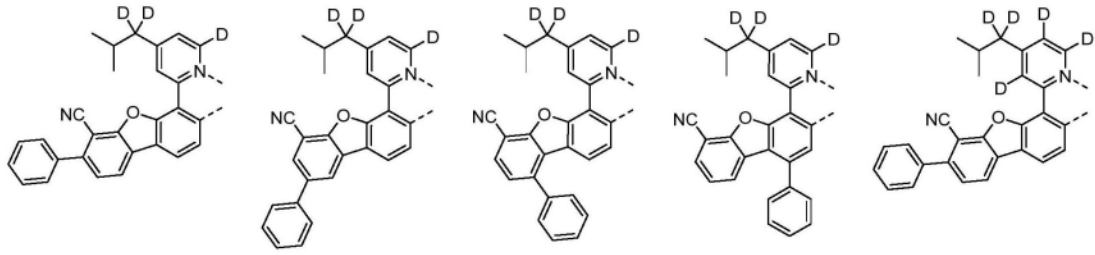












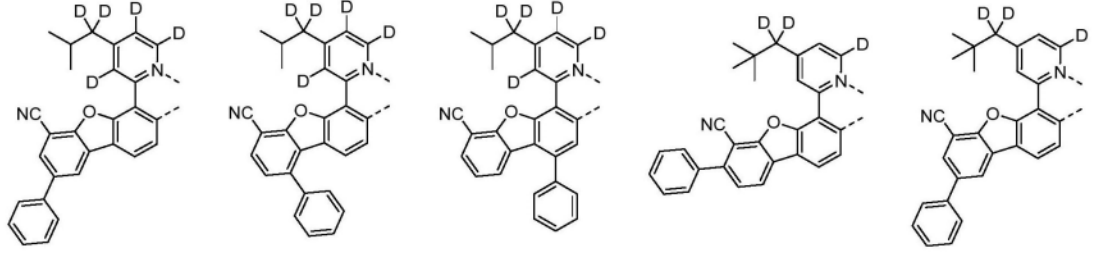
L_b513

L_b514

L_b515

L_b516

L_b517



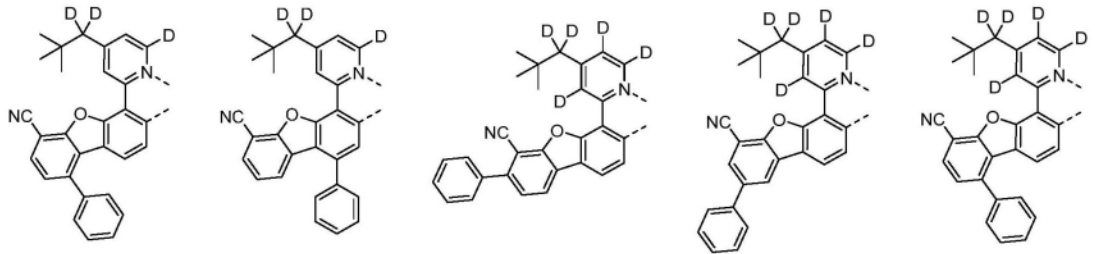
L_b518

L_b519

L_b520

L_b521

L_b522



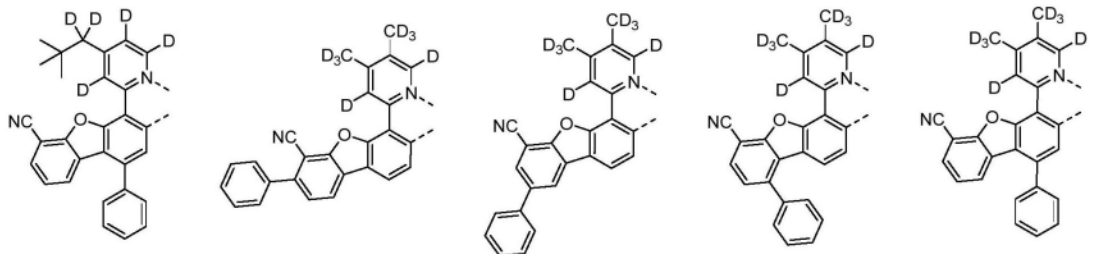
L_b523

L_b524

L_b525

L_b526

L_b527



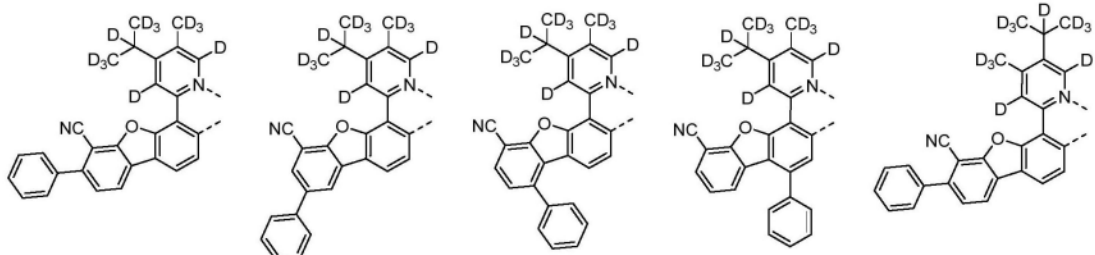
L_b528

L_b529

L_b530

L_b531

L_b532



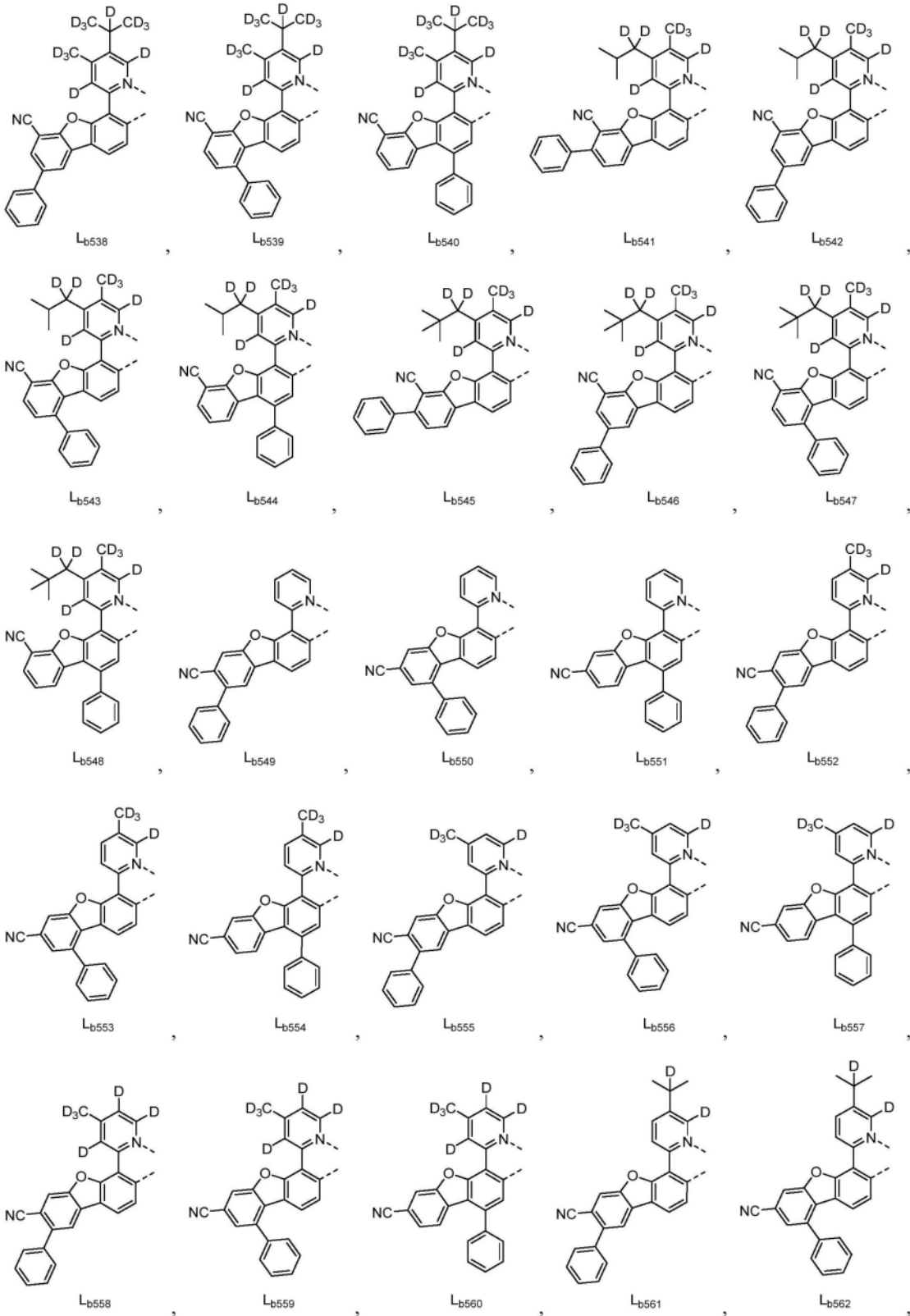
L_b533

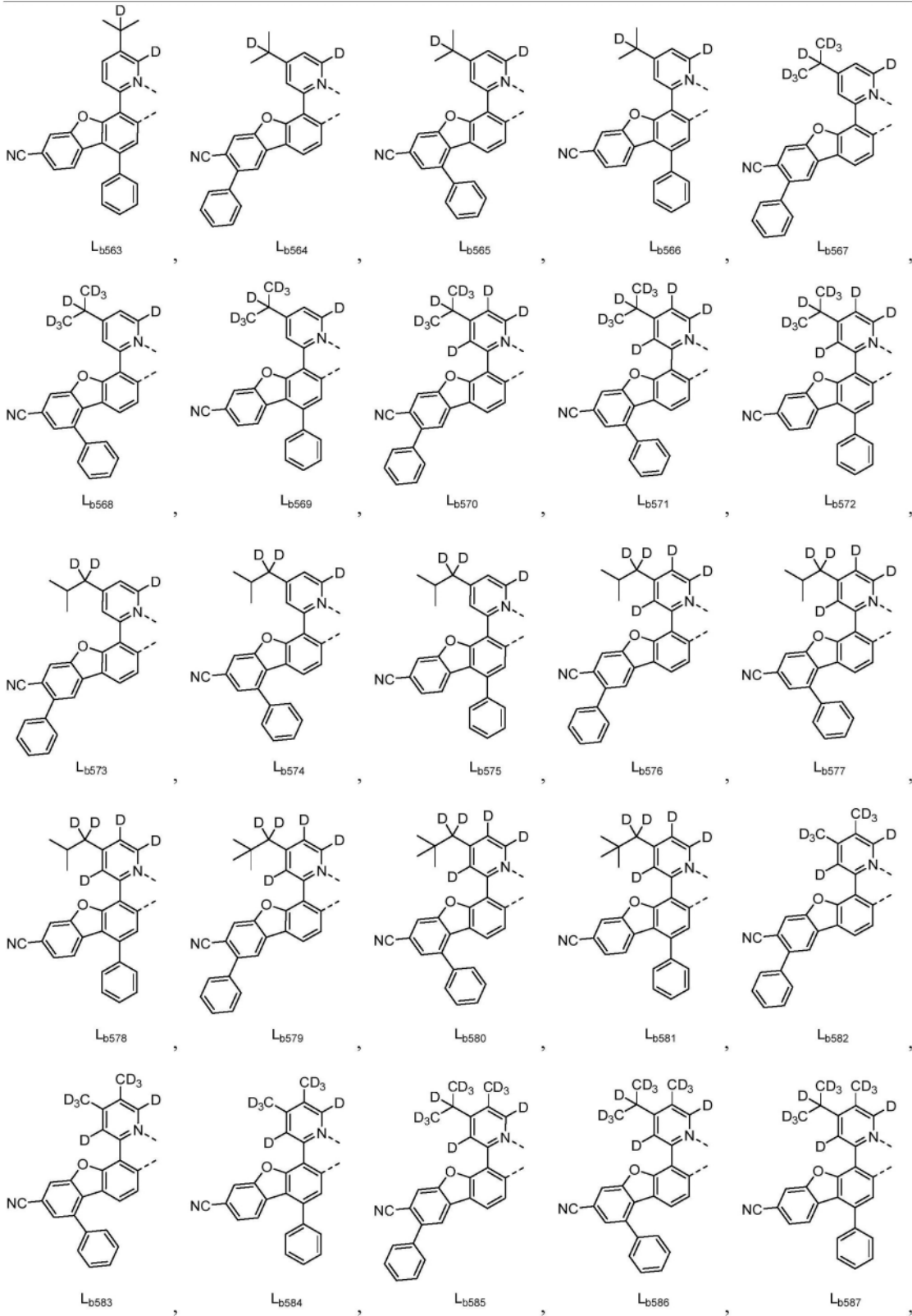
L_b534

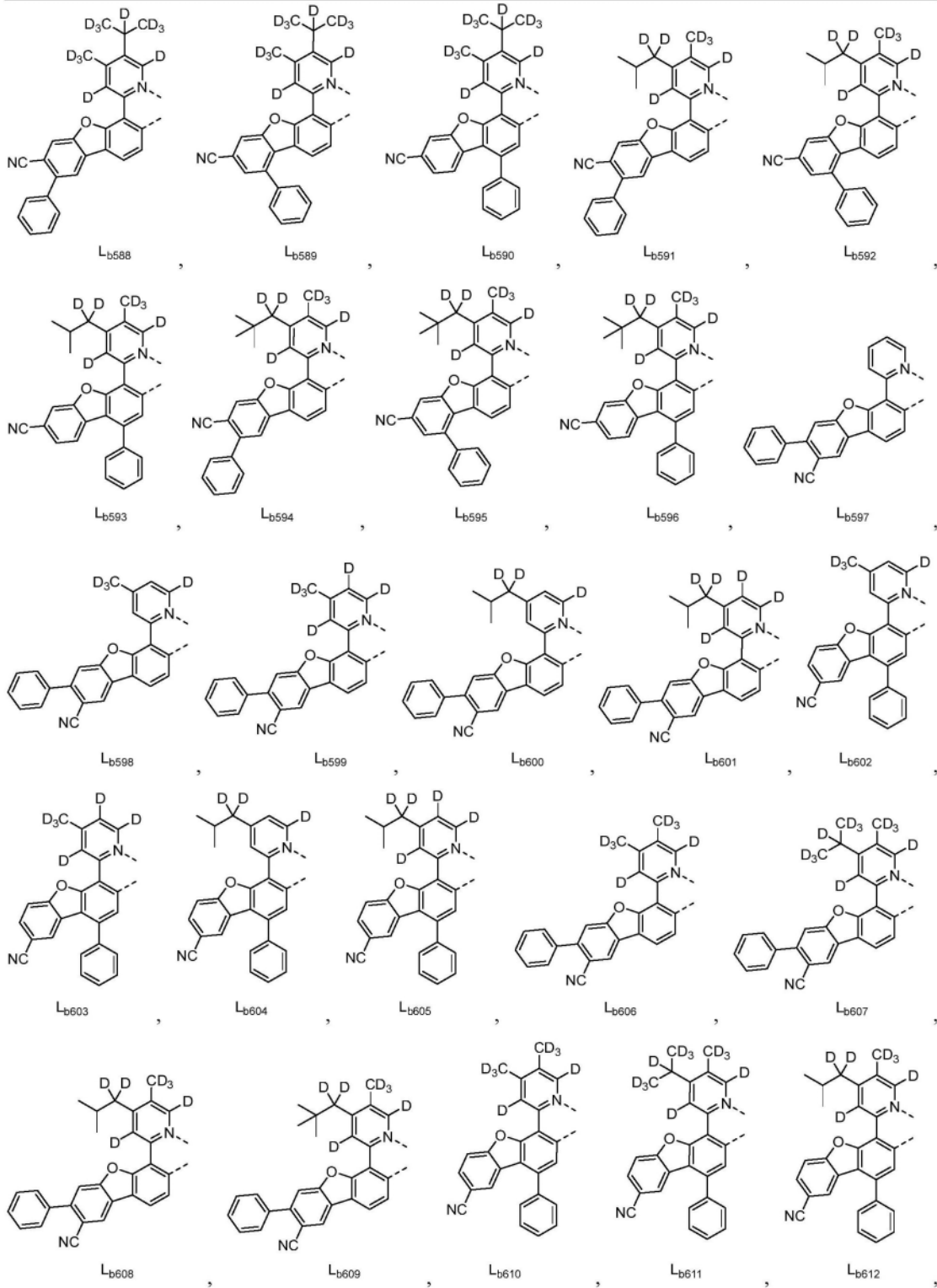
L_b535

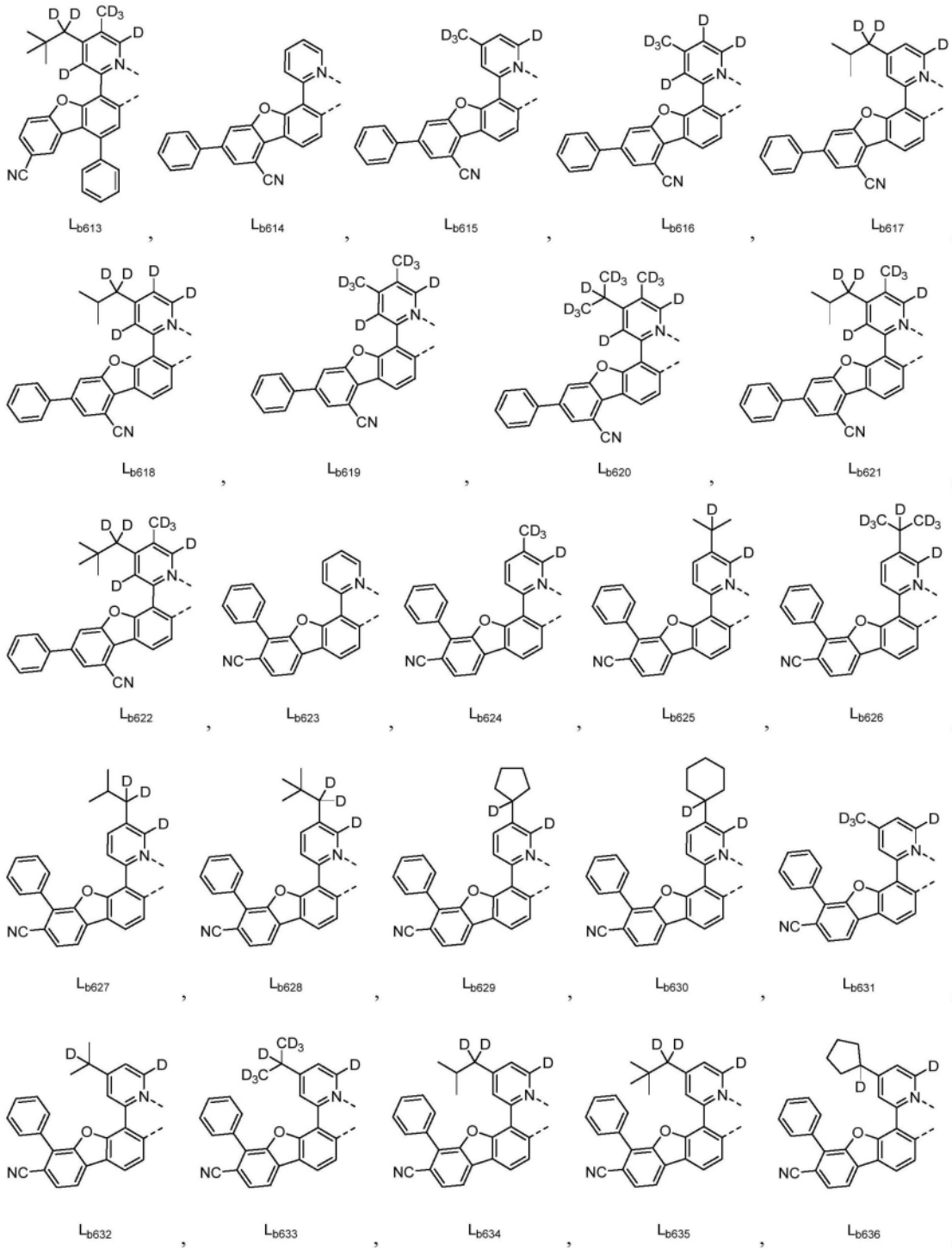
L_b536

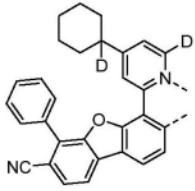
L_b537



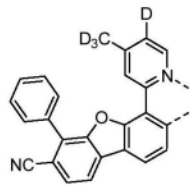




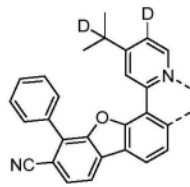




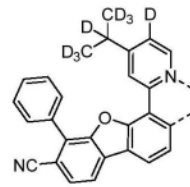
L_{b637}



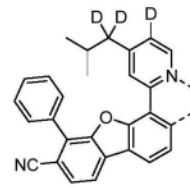
L_{b638}



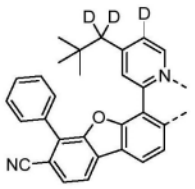
L_{b639}



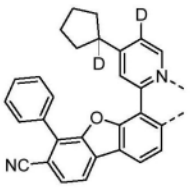
L_{b640}



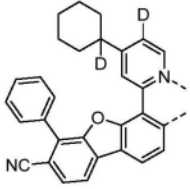
L_{b641}



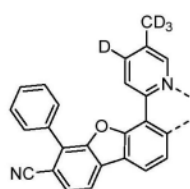
L_{b642}



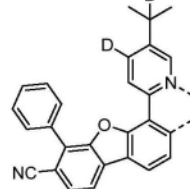
L_{b643}



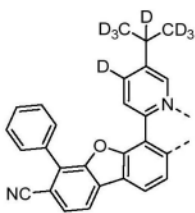
L_{b644}



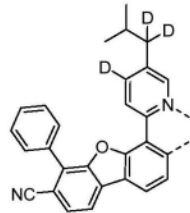
L_{b645}



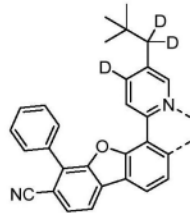
L_{b646}



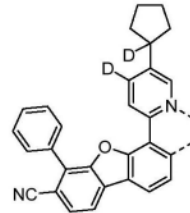
L_{b647}



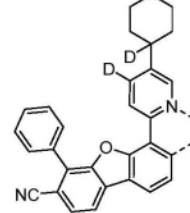
L_{b648}



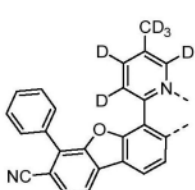
L_{b649}



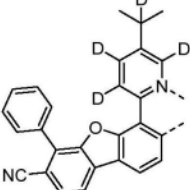
L_{b650}



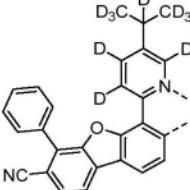
L_{b651}



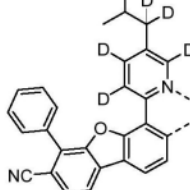
L_{b652}



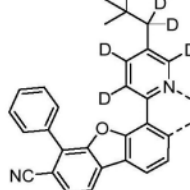
L_{b653}



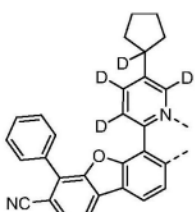
L_{b654}



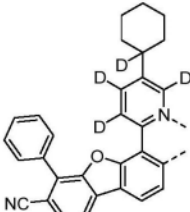
L_{b655}



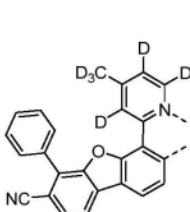
L_{b656}



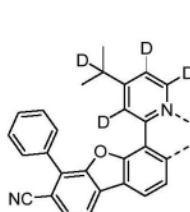
L_{b657}



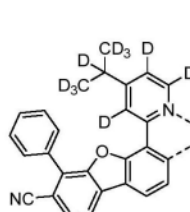
L_{b658}



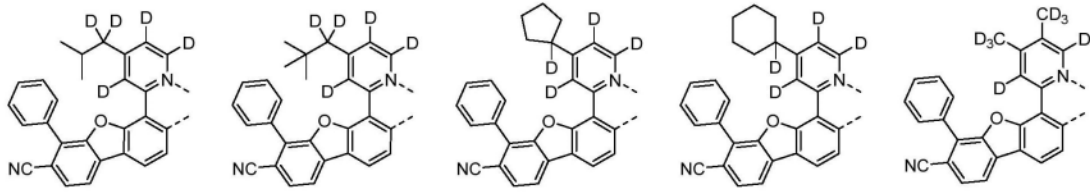
L_{b659}



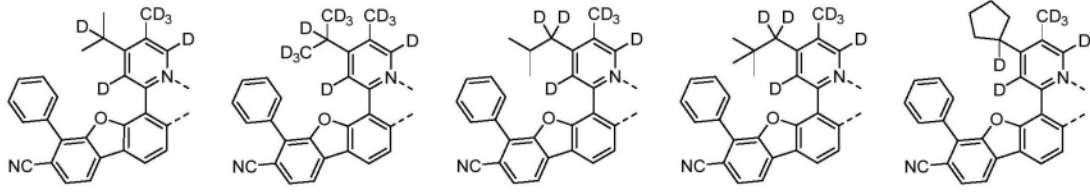
L_{b660}



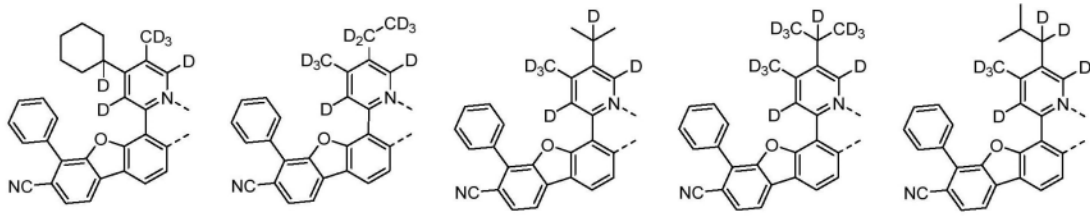
L_{b661}



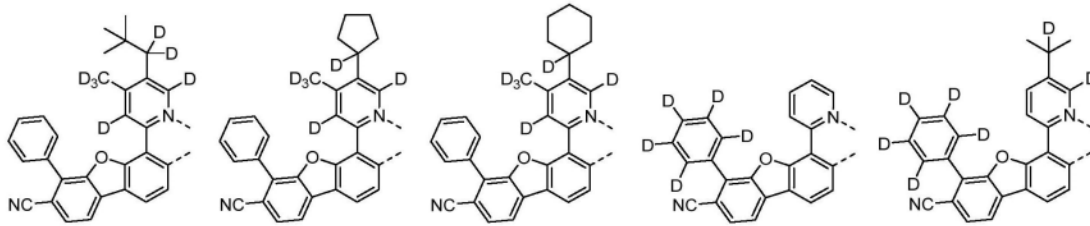
L_{b662} , L_{b663} , L_{b664} , L_{b665} , L_{b666} ,



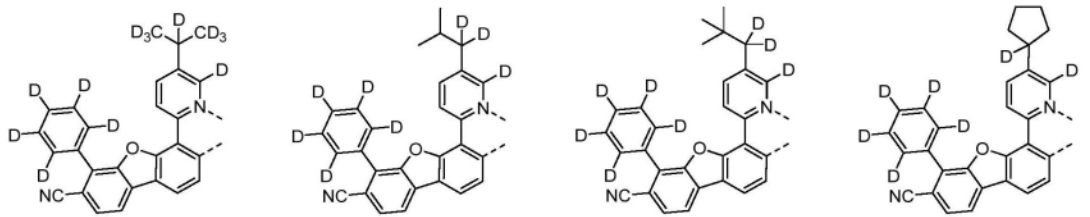
L_{b667} , L_{b668} , L_{b669} , L_{b670} , L_{b671} ,



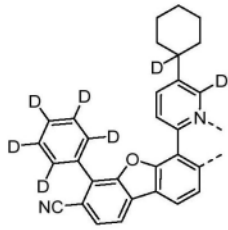
L_{b672} , L_{b673} , L_{b674} , L_{b675} , L_{b676} ,



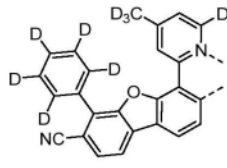
L_{b677} , L_{b678} , L_{b679} , L_{b680} , L_{b681} ,



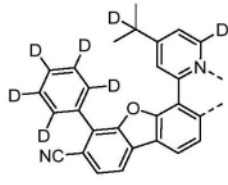
L_{b682} , L_{b683} , L_{b684} , L_{b685} ,



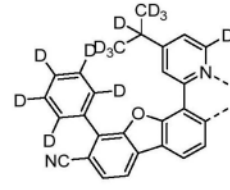
L_{b686}



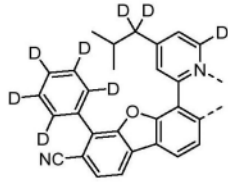
L_{b687}



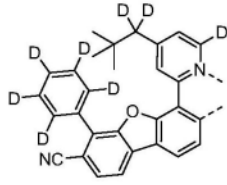
L_{b688}



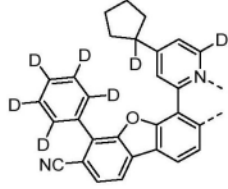
L_{b689}



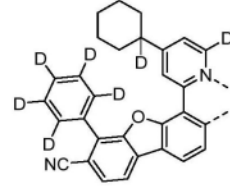
L_{b690}



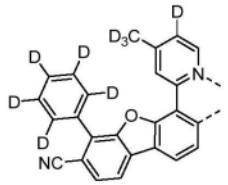
L_{b691}



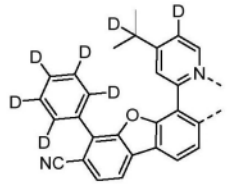
L_{b692}



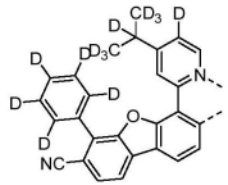
L_{b693}



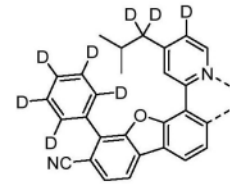
L_{b694}



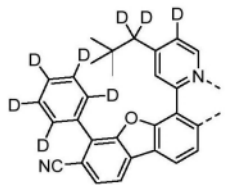
L_{b695}



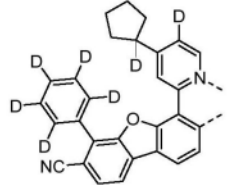
L_{b696}



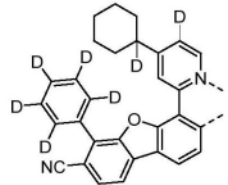
L_{b697}



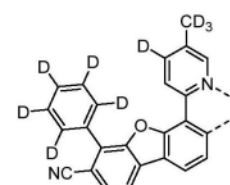
L_{b698}



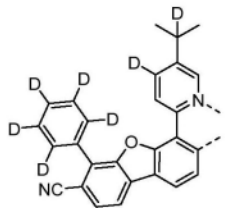
L_{b699}



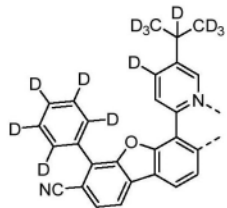
L_{b700}



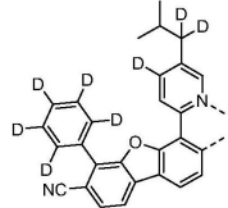
L_{b701}



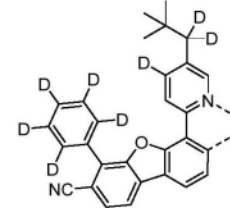
L_{b702}



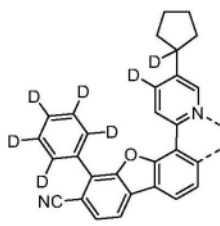
L_{b703}



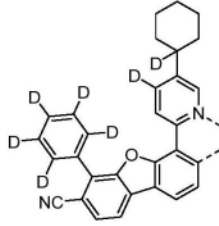
L_{b704}



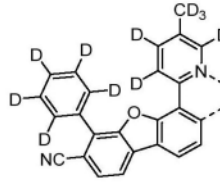
L_{b705}



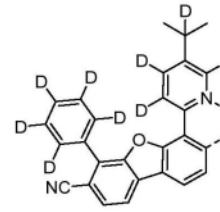
L_{b706}



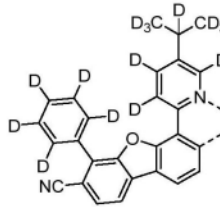
L_{b707}



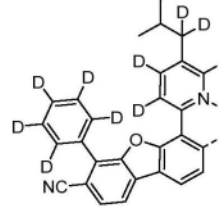
L_{b708}



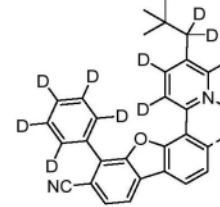
L_{b709}



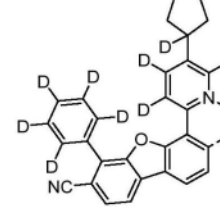
L_{b710}



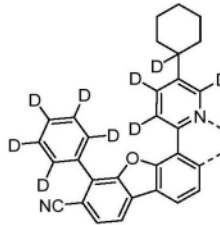
L_{b711}



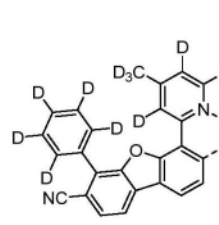
L_{b712}



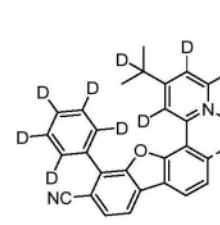
L_{b713}



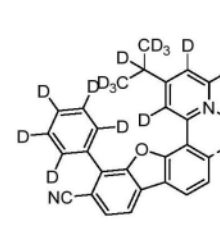
L_{b714}



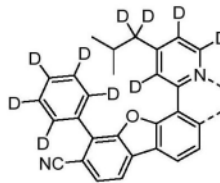
L_{b715}



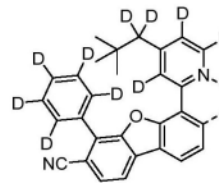
L_{b716}



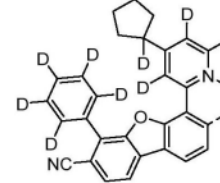
L_{b717}



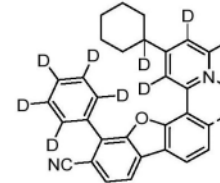
L_{b718}



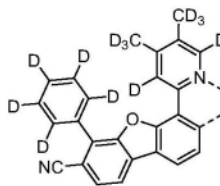
L_{b719}



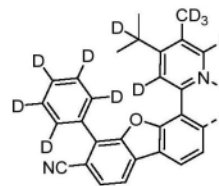
L_{b720}



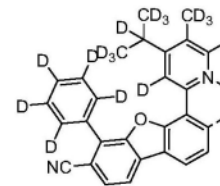
L_{b721}



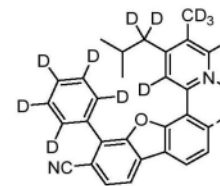
L_{b722}



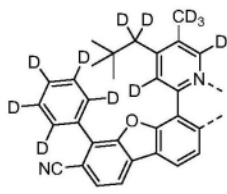
L_{b723}



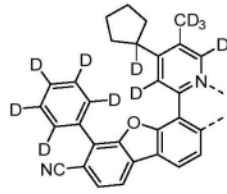
L_{b724}



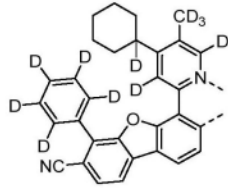
L_{b725}



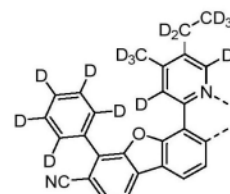
L_{b726}



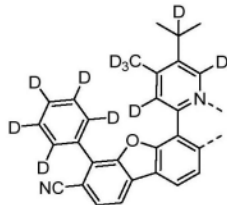
L_{b727}



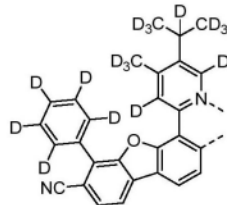
L_{b728}



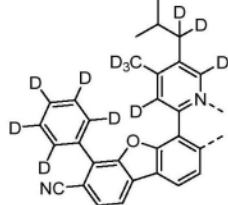
L_{b729}



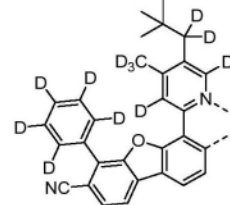
L_{b730}



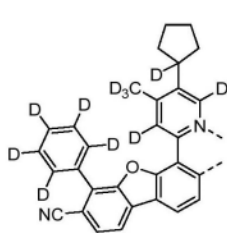
L_{b731}



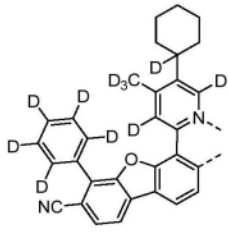
L_{b732}



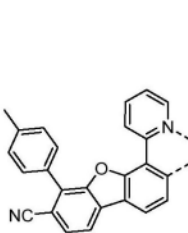
L_{b733}



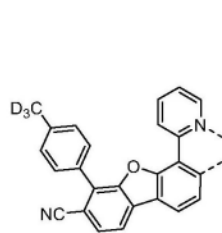
L_{b734}



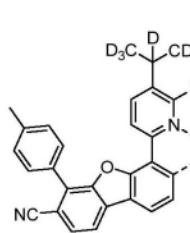
L_{b735}



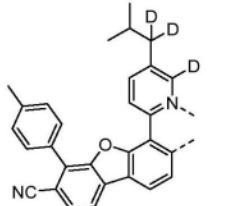
L_{b736}



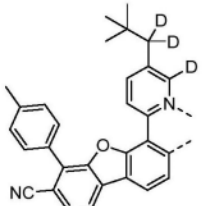
L_{b737}



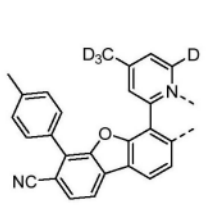
L_{b738}



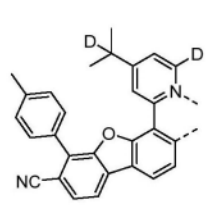
L_{b739}



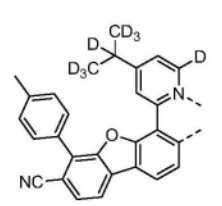
L_{b740}



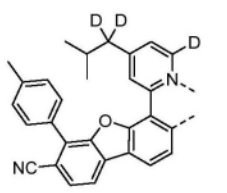
L_{b741}



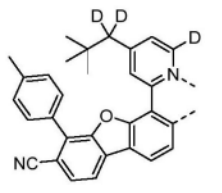
L_{b742}



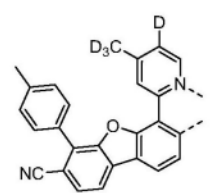
L_{b743}



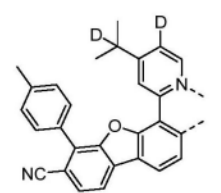
L_{b744}



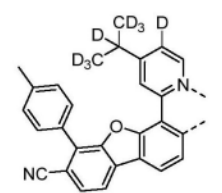
L_{b745}



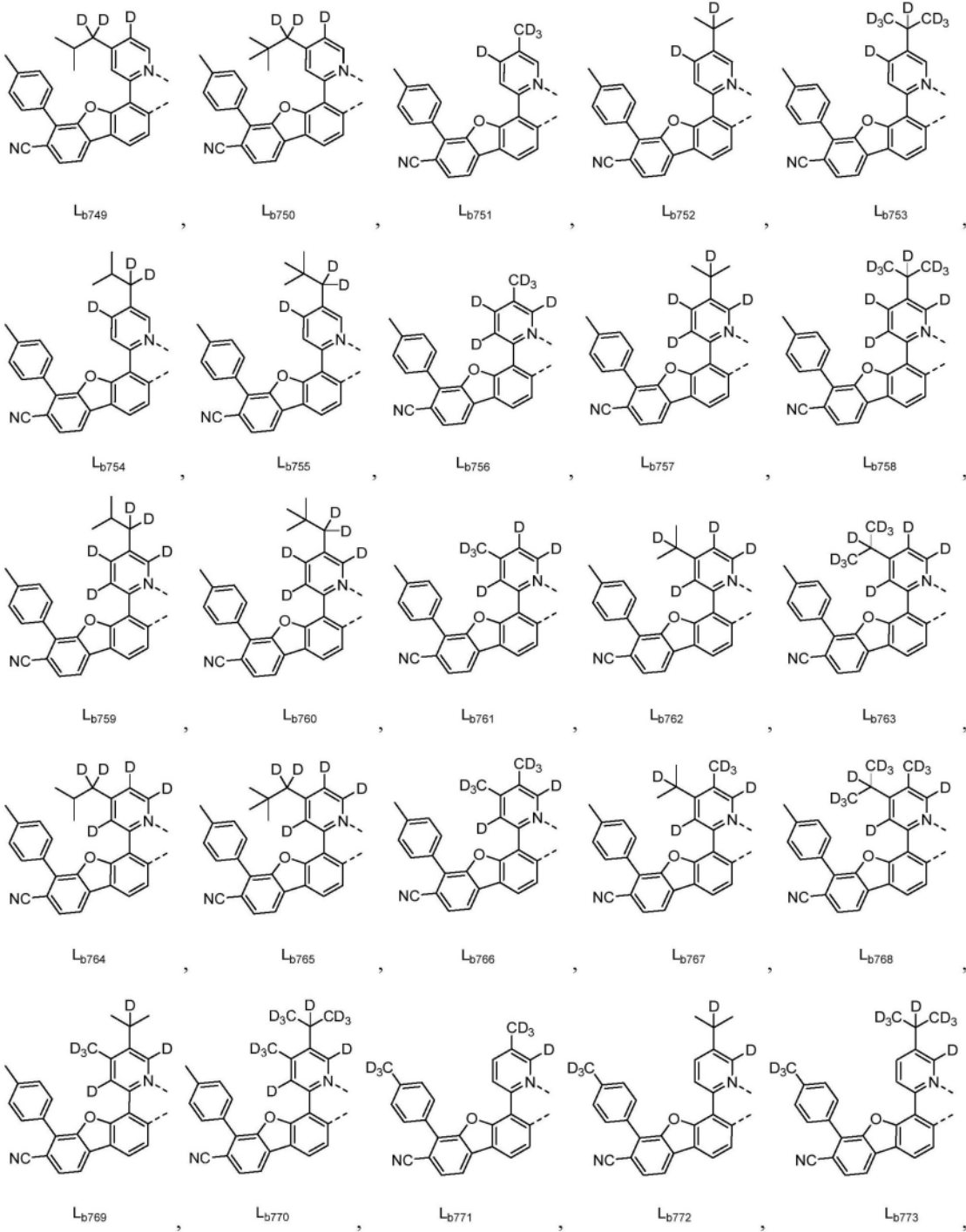
L_{b746}

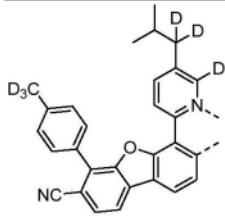


L_{b747}

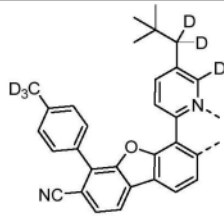


L_{b748}

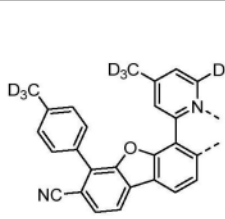




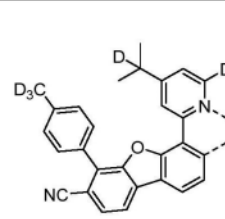
L_{b774}



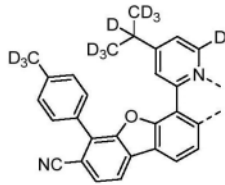
L_{b775}



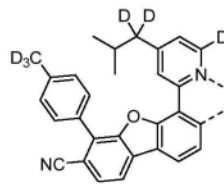
L_{b776}



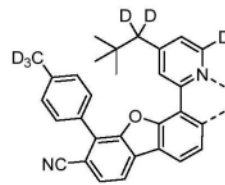
L_{b777}



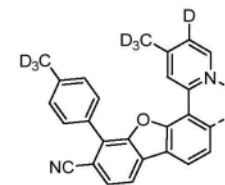
L_{b778}



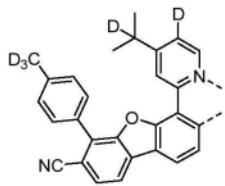
L_{b779}



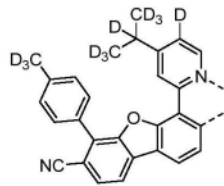
L_{b780}



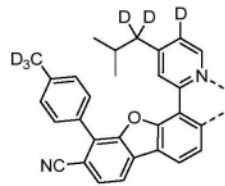
L_{b781}



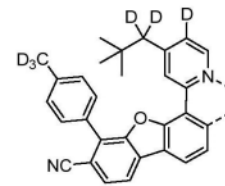
L_{b782}



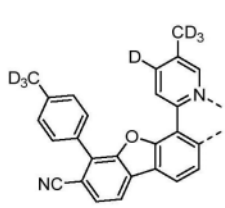
L_{b783}



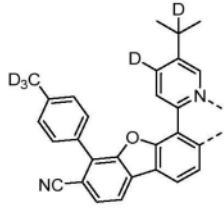
L_{b784}



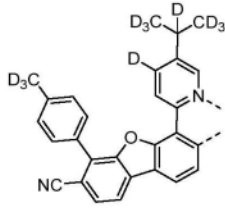
L_{b785}



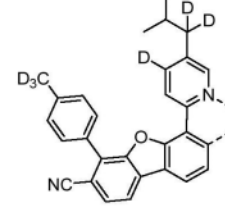
L_{b786}



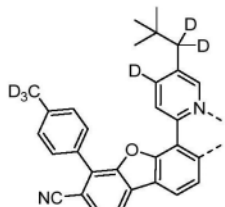
L_{b787}



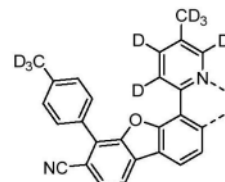
L_{b788}



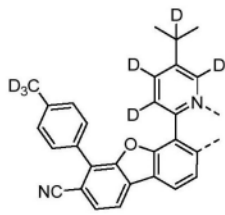
L_{b789}



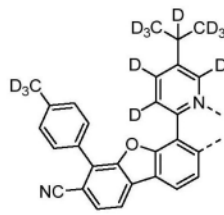
L_{b790}



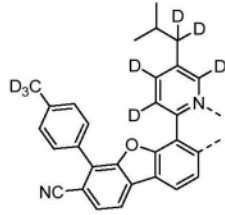
L_{b791}



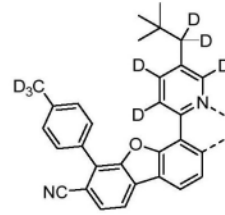
Lb792



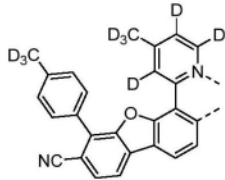
Lb793



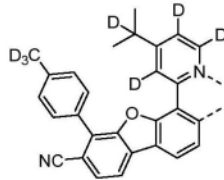
Lb794



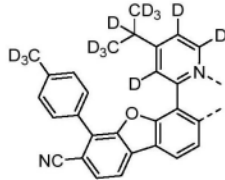
Lb795



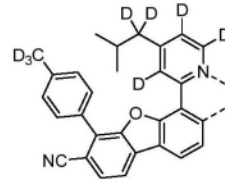
Lb796



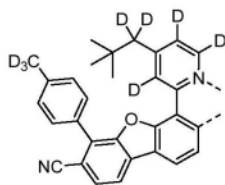
Lb797



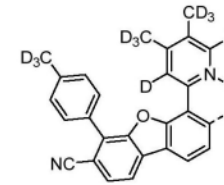
Lb798



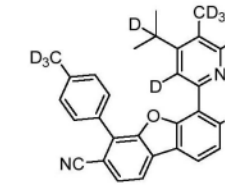
Lb799



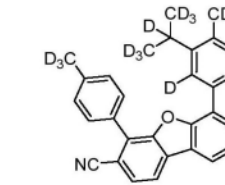
Lb800



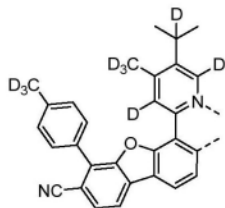
Lb801



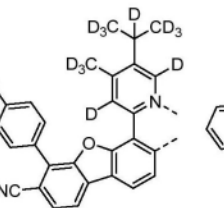
Lb802



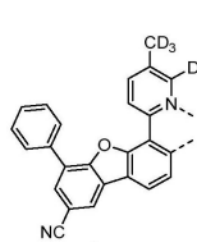
Lb803



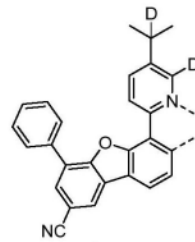
Lb804



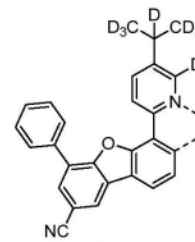
Lb805



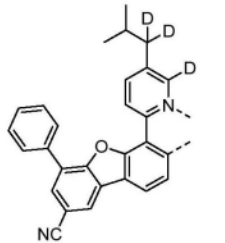
Lb806



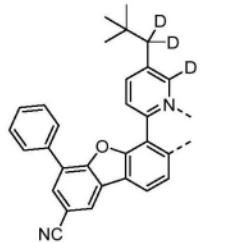
Lb807



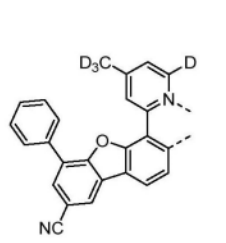
Lb808



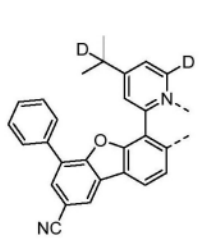
Lb809



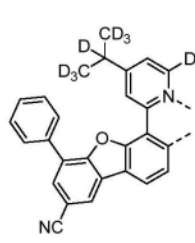
Lb810



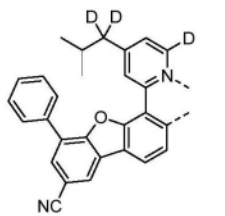
Lb811



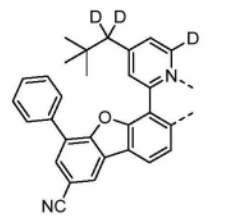
Lb812



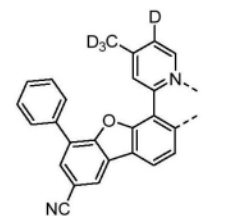
Lb813



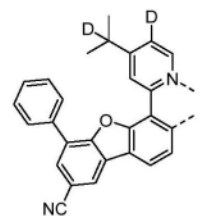
Lb814



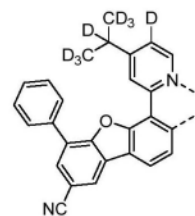
Lb815



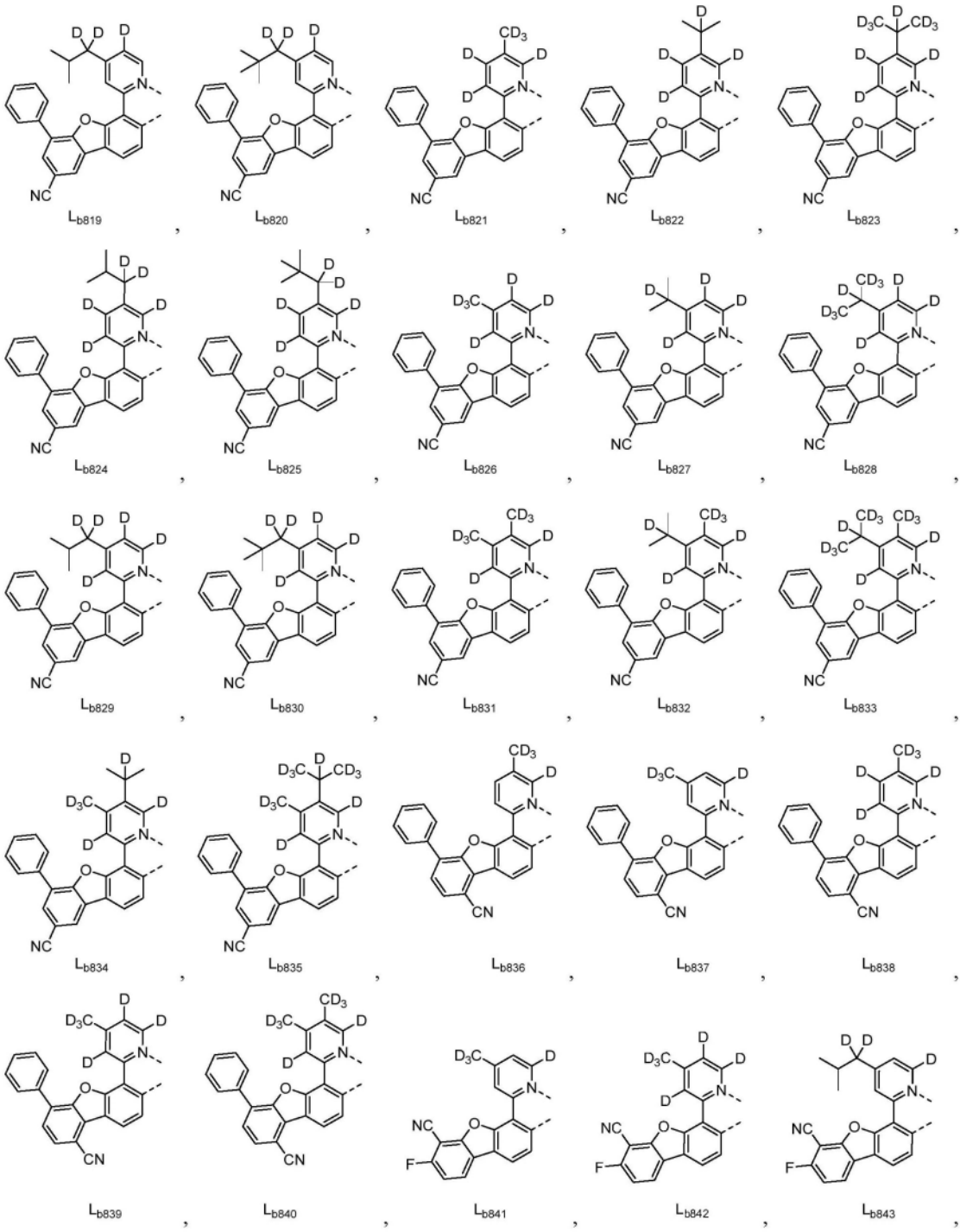
Lb816

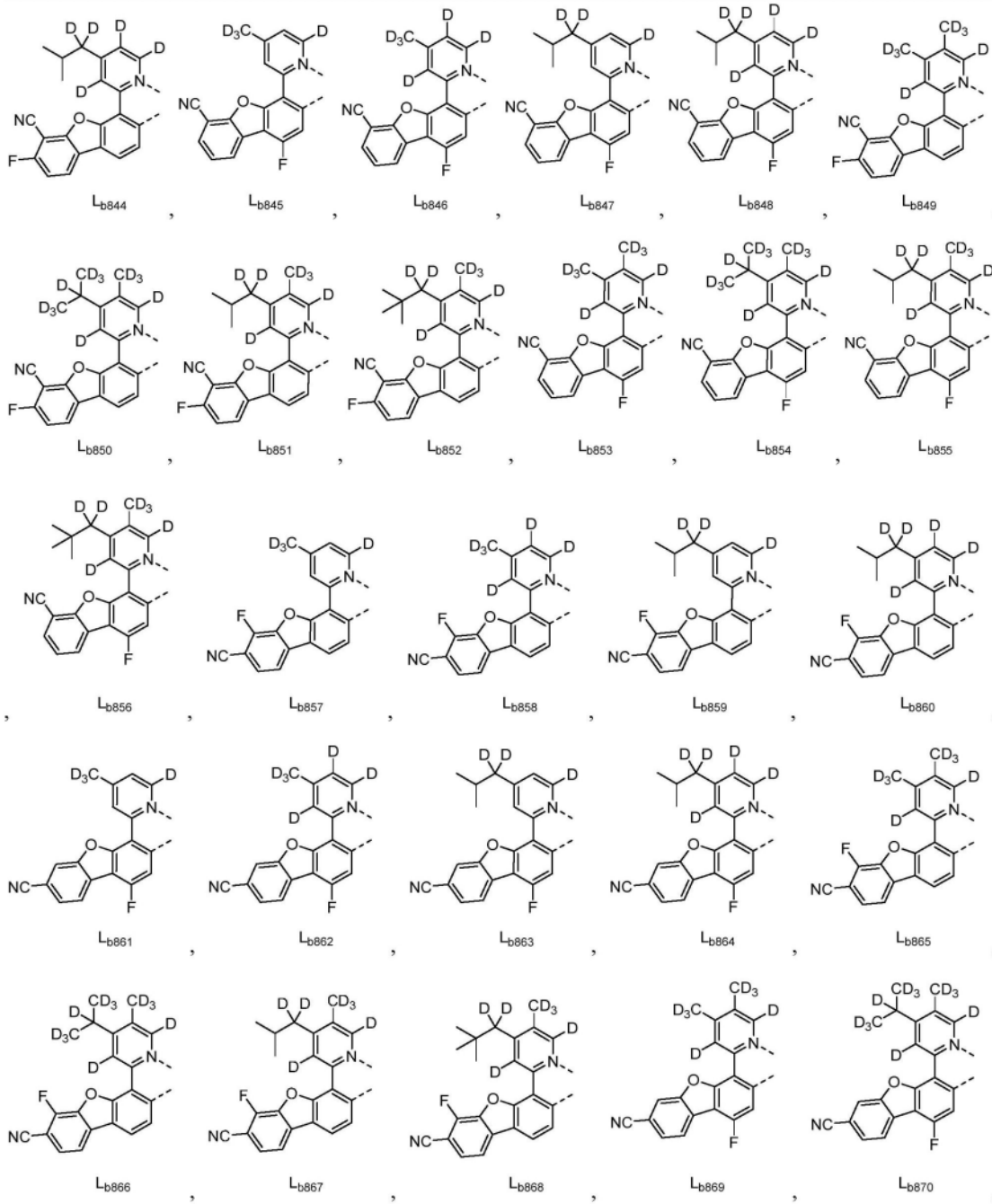


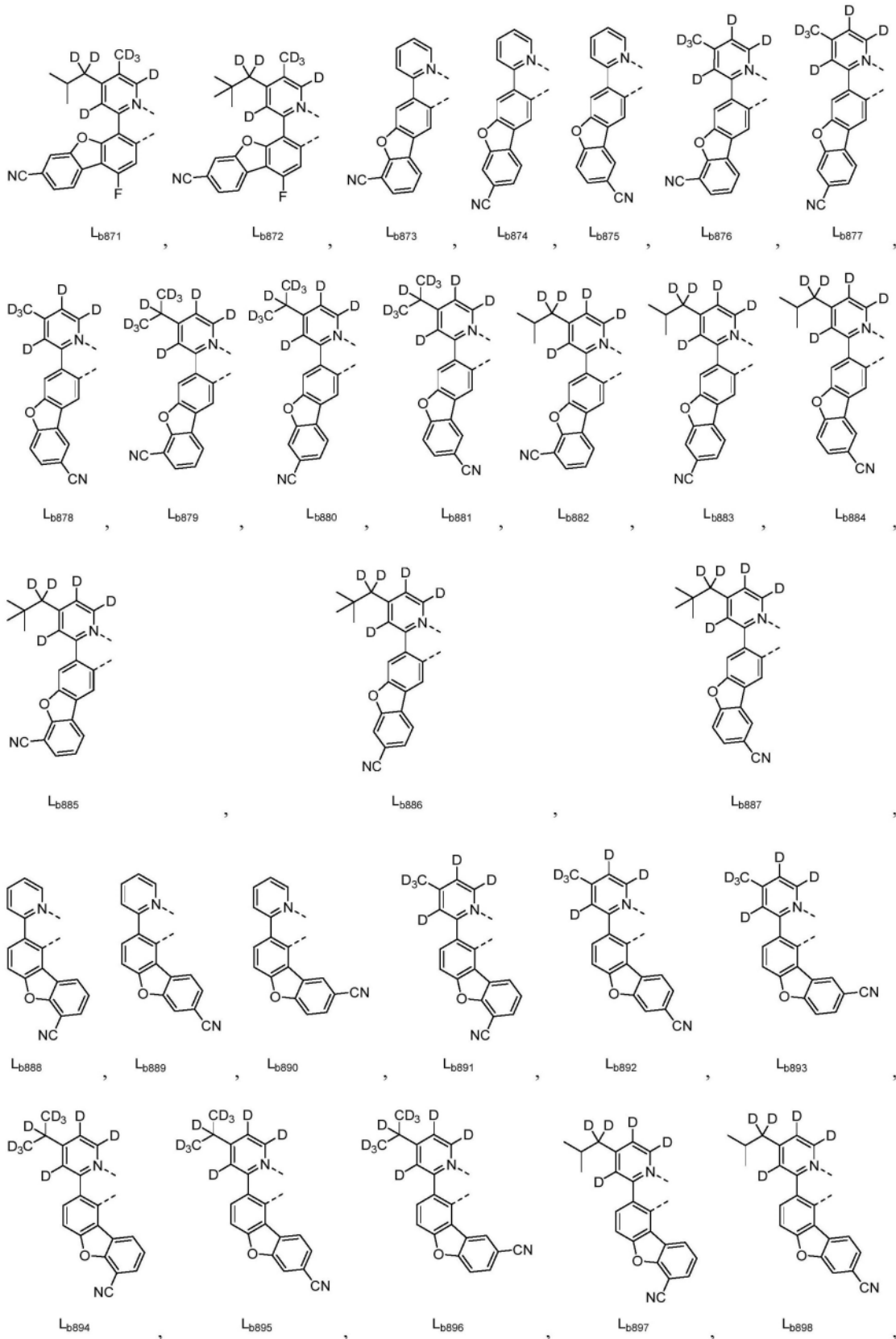
Lb817

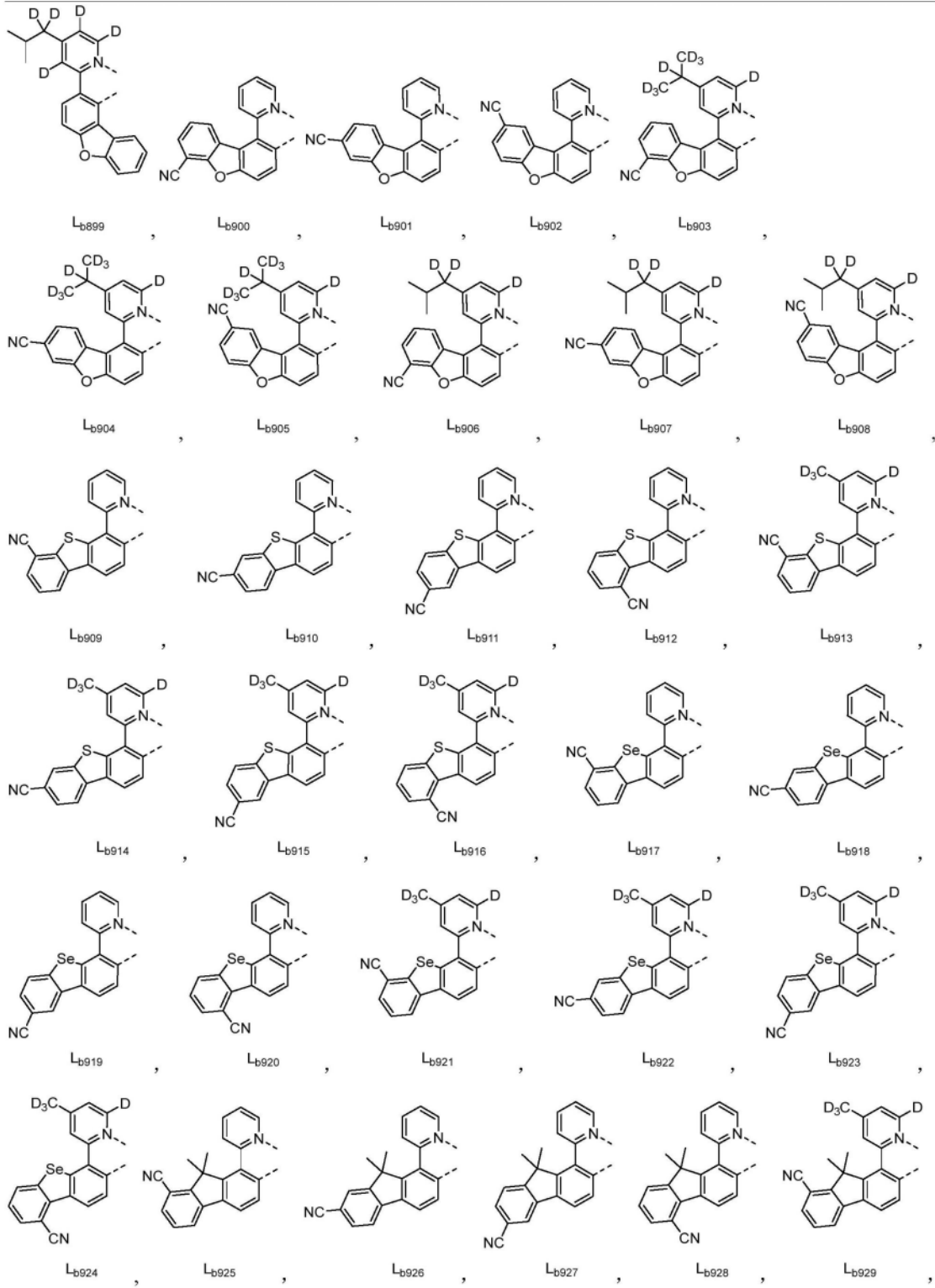


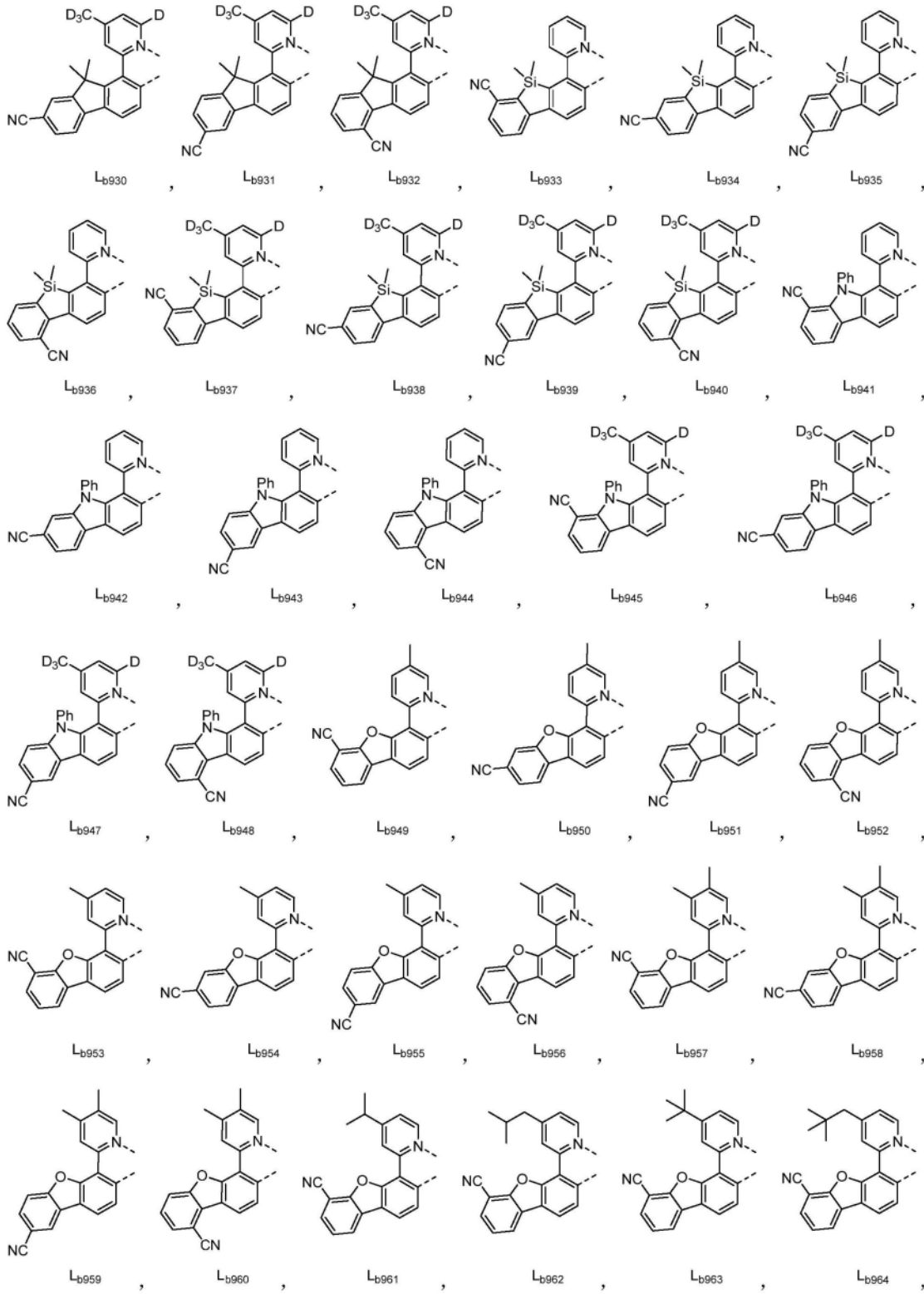
Lb818

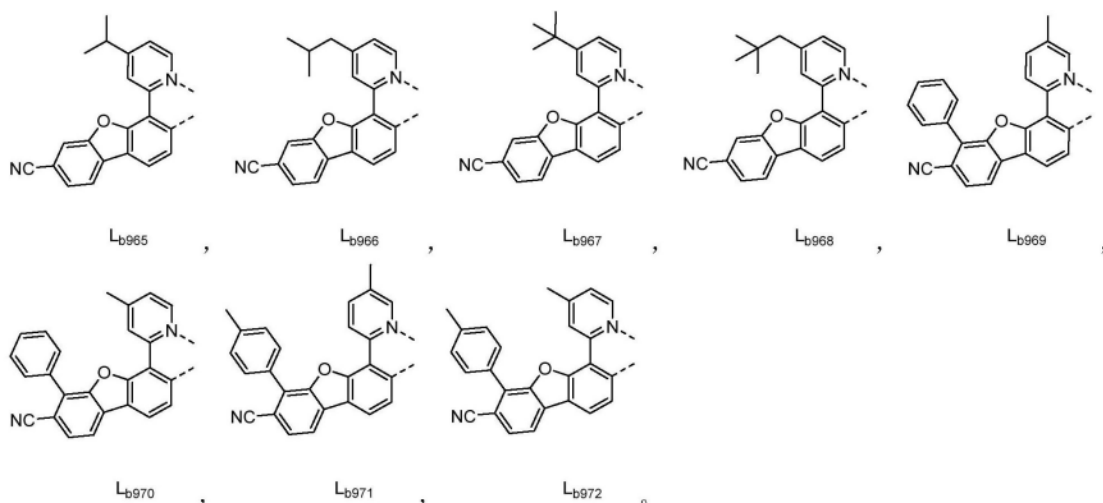












19. 如权利要求1或3所述的金属配合物,其中,金属配合物具有 $Ir(L_a)_2L_b$ 的结构,两个 L_a 相同; L_a 选自 L_{a1} - L_{a206} 组成的组, L_b 选自 L_{b1} - L_{b972} 组成的组;

优选地,金属配合物选自由金属配合物1至金属配合物448组成的组,其中金属配合物1至金属配合物448具有 $Ir(L_a)_2L_b$ 的结构,两个 L_a 相同, L_a 和 L_b 分别对应于下表中表示的结构:

金属配合物	L_a	L_b	金属配合物	L_a	L_b
1	L_{a1}	L_{b1}	2	L_{a1}	L_{b2}
3	L_{a1}	L_{b3}	4	L_{a1}	L_{b4}
5	L_{a1}	L_{b221}	6	L_{a1}	L_{b227}
7	L_{a1}	L_{b477}	8	L_{a1}	L_{b481}
9	L_{a1}	L_{b485}	10	L_{a1}	L_{b497}
11	L_{a1}	L_{b501}	12	L_{a1}	L_{b597}
13	L_{a1}	L_{b623}	14	L_{a1}	L_{b624}
15	L_{a1}	L_{b625}	16	L_{a1}	L_{b632}
17	L_{a1}	L_{b680}	18	L_{a1}	L_{b687}
19	L_{a1}	L_{b688}	20	L_{a1}	L_{b689}
21	L_{a1}	L_{b691}	22	L_{a1}	L_{b736}
23	L_{a1}	L_{b737}	24	L_{a1}	L_{b743}
25	L_{a1}	L_{b745}	26	L_{a1}	L_{b750}
27	L_{a1}	L_{b753}	28	L_{a1}	L_{b763}
29	L_{a1}	L_{b764}	30	L_{a1}	L_{b766}
31	L_{a4}	L_{b1}	32	L_{a4}	L_{b2}
33	L_{a4}	L_{b3}	34	L_{a4}	L_{b4}
35	L_{a4}	L_{b221}	36	L_{a4}	L_{b227}
37	L_{a4}	L_{b477}	38	L_{a4}	L_{b481}
39	L_{a4}	L_{b485}	40	L_{a4}	L_{b497}

41	L _{a4}	L _{b501}	42	L _{a4}	L _{b597}
43	L _{a4}	L _{b623}	44	L _{a4}	L _{b624}
45	L _{a4}	L _{b625}	46	L _{a4}	L _{b632}
47	L _{a4}	L _{b680}	48	L _{a4}	L _{b687}
49	L _{a4}	L _{b688}	50	L _{a4}	L _{b689}
51	L _{a4}	L _{b691}	52	L _{a4}	L _{b736}
53	L _{a4}	L _{b737}	54	L _{a4}	L _{b743}
55	L _{a4}	L _{b745}	56	L _{a4}	L _{b750}
57	L _{a4}	L _{b753}	58	L _{a4}	L _{b763}
59	L _{a4}	L _{b764}	60	L _{a4}	L _{b766}
61	L _{a5}	L _{b1}	62	L _{a5}	L _{b2}
63	L _{a5}	L _{b3}	64	L _{a5}	L _{b4}
65	L _{a5}	L _{b221}	66	L _{a5}	L _{b227}
67	L _{a5}	L _{b477}	68	L _{a5}	L _{b481}
69	L _{a5}	L _{b485}	70	L _{a5}	L _{b497}
71	L _{a5}	L _{b501}	72	L _{a5}	L _{b597}
73	L _{a5}	L _{b623}	74	L _{a5}	L _{b624}
75	L _{a5}	L _{b625}	76	L _{a5}	L _{b632}
77	L _{a5}	L _{b680}	78	L _{a5}	L _{b687}
79	L _{a5}	L _{b688}	80	L _{a5}	L _{b689}
81	L _{a5}	L _{b691}	82	L _{a5}	L _{b736}
83	L _{a5}	L _{b737}	84	L _{a5}	L _{b743}
85	L _{a5}	L _{b745}	86	L _{a5}	L _{b750}
87	L _{a5}	L _{b753}	88	L _{a5}	L _{b763}
89	L _{a5}	L _{b764}	90	L _{a5}	L _{b766}
91	L _{a19}	L _{b1}	92	L _{a19}	L _{b2}
93	L _{a19}	L _{b3}	94	L _{a19}	L _{b4}
95	L _{a19}	L _{b221}	96	L _{a19}	L _{b227}
97	L _{a19}	L _{b477}	98	L _{a19}	L _{b481}
99	L _{a19}	L _{b485}	100	L _{a19}	L _{b497}
101	L _{a19}	L _{b501}	102	L _{a19}	L _{b597}
103	L _{a19}	L _{b623}	104	L _{a19}	L _{b624}
105	L _{a19}	L _{b625}	106	L _{a19}	L _{b632}
107	L _{a19}	L _{b680}	108	L _{a19}	L _{b687}
109	L _{a19}	L _{b688}	110	L _{a19}	L _{b689}
111	L _{a19}	L _{b691}	112	L _{a19}	L _{b736}
113	L _{a19}	L _{b737}	114	L _{a19}	L _{b743}

115	L _{a19}	L _{b745}	116	L _{a19}	L _{b750}
117	L _{a19}	L _{b753}	118	L _{a19}	L _{b763}
119	L _{a19}	L _{b764}	120	L _{a19}	L _{b766}
121	L _{a22}	L _{b1}	122	L _{a22}	L _{b2}
123	L _{a22}	L _{b3}	124	L _{a22}	L _{b4}
125	L _{a22}	L _{b221}	126	L _{a22}	L _{b227}
127	L _{a22}	L _{b477}	128	L _{a22}	L _{b481}
129	L _{a22}	L _{b485}	130	L _{a22}	L _{b497}
131	L _{a22}	L _{b501}	132	L _{a22}	L _{b597}
133	L _{a22}	L _{b623}	134	L _{a22}	L _{b624}
135	L _{a22}	L _{b625}	136	L _{a22}	L _{b632}
137	L _{a22}	L _{b680}	138	L _{a22}	L _{b687}
139	L _{a22}	L _{b688}	140	L _{a22}	L _{b689}
141	L _{a22}	L _{b691}	142	L _{a22}	L _{b736}
143	L _{a22}	L _{b737}	144	L _{a22}	L _{b743}
145	L _{a22}	L _{b745}	146	L _{a22}	L _{b750}
147	L _{a22}	L _{b753}	148	L _{a22}	L _{b763}
149	L _{a22}	L _{b764}	150	L _{a22}	L _{b766}
151	L _{a32}	L _{b1}	152	L _{a32}	L _{b2}
153	L _{a32}	L _{b3}	154	L _{a32}	L _{b4}
155	L _{a32}	L _{b221}	156	L _{a32}	L _{b227}
157	L _{a32}	L _{b477}	158	L _{a32}	L _{b481}
159	L _{a32}	L _{b485}	160	L _{a32}	L _{b497}
161	L _{a32}	L _{b501}	162	L _{a32}	L _{b597}
163	L _{a32}	L _{b623}	164	L _{a32}	L _{b624}
165	L _{a32}	L _{b625}	166	L _{a32}	L _{b632}
167	L _{a32}	L _{b680}	168	L _{a32}	L _{b687}
169	L _{a32}	L _{b688}	170	L _{a32}	L _{b689}
171	L _{a32}	L _{b691}	172	L _{a32}	L _{b736}
173	L _{a32}	L _{b737}	174	L _{a32}	L _{b743}
175	L _{a32}	L _{b745}	176	L _{a32}	L _{b750}
177	L _{a32}	L _{b753}	178	L _{a32}	L _{b763}
179	L _{a32}	L _{b764}	180	L _{a32}	L _{b766}
181	L _{a71}	L _{b1}	182	L _{a71}	L _{b2}
183	L _{a71}	L _{b3}	184	L _{a71}	L _{b4}
185	L _{a71}	L _{b221}	186	L _{a71}	L _{b227}
187	L _{a71}	L _{b477}	188	L _{a71}	L _{b481}

189	L _a 71	L _b 485	190	L _a 71	L _b 497
191	L _a 71	L _b 501	192	L _a 71	L _b 597
193	L _a 71	L _b 623	194	L _a 71	L _b 624
195	L _a 71	L _b 625	196	L _a 71	L _b 632
197	L _a 71	L _b 680	198	L _a 71	L _b 687
199	L _a 71	L _b 688	200	L _a 71	L _b 689
201	L _a 71	L _b 691	202	L _a 71	L _b 736
203	L _a 71	L _b 737	204	L _a 71	L _b 743
205	L _a 71	L _b 745	206	L _a 71	L _b 750
207	L _a 71	L _b 753	208	L _a 71	L _b 763
209	L _a 71	L _b 764	210	L _a 71	L _b 766
211	L _a 84	L _b 1	212	L _a 84	L _b 2
213	L _a 84	L _b 3	214	L _a 84	L _b 4
215	L _a 84	L _b 221	216	L _a 84	L _b 227
217	L _a 84	L _b 477	218	L _a 84	L _b 481
219	L _a 84	L _b 485	220	L _a 84	L _b 497
221	L _a 84	L _b 501	222	L _a 84	L _b 597
223	L _a 84	L _b 623	224	L _a 84	L _b 624
225	L _a 84	L _b 625	226	L _a 84	L _b 632
227	L _a 84	L _b 680	228	L _a 84	L _b 687
229	L _a 84	L _b 688	230	L _a 84	L _b 689
231	L _a 84	L _b 691	232	L _a 84	L _b 736
233	L _a 84	L _b 737	234	L _a 84	L _b 743
235	L _a 84	L _b 745	236	L _a 84	L _b 750
237	L _a 84	L _b 753	238	L _a 84	L _b 763
239	L _a 84	L _b 764	240	L _a 84	L _b 766
241	L _a 87	L _b 1	242	L _a 87	L _b 2
243	L _a 87	L _b 3	244	L _a 87	L _b 4
245	L _a 87	L _b 221	246	L _a 87	L _b 227
247	L _a 87	L _b 477	248	L _a 87	L _b 481
249	L _a 87	L _b 485	250	L _a 87	L _b 497
251	L _a 87	L _b 501	252	L _a 87	L _b 597
253	L _a 87	L _b 623	254	L _a 87	L _b 624
255	L _a 87	L _b 625	256	L _a 87	L _b 632
257	L _a 87	L _b 680	258	L _a 87	L _b 687
259	L _a 87	L _b 688	260	L _a 87	L _b 689
261	L _a 87	L _b 691	262	L _a 87	L _b 736

263	L _a 87	L _b 737	264	L _a 87	L _b 743
265	L _a 87	L _b 745	266	L _a 87	L _b 750
267	L _a 87	L _b 753	268	L _a 87	L _b 763
269	L _a 87	L _b 764	270	L _a 87	L _b 766
271	L _a 129	L _b 1	272	L _a 129	L _b 2
273	L _a 129	L _b 3	274	L _a 129	L _b 4
275	L _a 129	L _b 221	276	L _a 129	L _b 227
277	L _a 129	L _b 477	278	L _a 129	L _b 481
279	L _a 129	L _b 485	280	L _a 129	L _b 497
281	L _a 129	L _b 501	282	L _a 129	L _b 597
283	L _a 129	L _b 623	284	L _a 129	L _b 624
285	L _a 129	L _b 625	286	L _a 129	L _b 632
287	L _a 129	L _b 680	288	L _a 129	L _b 687
289	L _a 129	L _b 688	290	L _a 129	L _b 689
291	L _a 129	L _b 691	292	L _a 129	L _b 736
293	L _a 129	L _b 737	294	L _a 129	L _b 743
295	L _a 129	L _b 745	296	L _a 129	L _b 750
297	L _a 129	L _b 753	298	L _a 129	L _b 763
299	L _a 129	L _b 764	300	L _a 129	L _b 766
301	L _a 134	L _b 1	302	L _a 134	L _b 2
303	L _a 134	L _b 3	304	L _a 134	L _b 4
305	L _a 134	L _b 221	306	L _a 134	L _b 227
307	L _a 134	L _b 477	308	L _a 134	L _b 481
309	L _a 134	L _b 485	310	L _a 134	L _b 497
311	L _a 134	L _b 501	312	L _a 134	L _b 597
313	L _a 134	L _b 623	314	L _a 134	L _b 624
315	L _a 134	L _b 625	316	L _a 134	L _b 632
317	L _a 134	L _b 680	318	L _a 134	L _b 687
319	L _a 134	L _b 688	320	L _a 134	L _b 689
321	L _a 134	L _b 691	322	L _a 134	L _b 736
323	L _a 134	L _b 737	324	L _a 134	L _b 743
325	L _a 134	L _b 745	326	L _a 134	L _b 750
327	L _a 134	L _b 753	328	L _a 134	L _b 763
329	L _a 134	L _b 764	330	L _a 134	L _b 766
331	L _a 135	L _b 1	332	L _a 135	L _b 2
333	L _a 135	L _b 3	334	L _a 135	L _b 4
335	L _a 135	L _b 221	336	L _a 135	L _b 227

337	L _{a135}	L _{b477}	338	L _{a135}	L _{b481}
339	L _{a135}	L _{b485}	340	L _{a135}	L _{b497}
341	L _{a135}	L _{b501}	342	L _{a135}	L _{b597}
343	L _{a135}	L _{b623}	344	L _{a135}	L _{b624}
345	L _{a135}	L _{b625}	346	L _{a135}	L _{b632}
347	L _{a135}	L _{b680}	348	L _{a135}	L _{b687}
349	L _{a135}	L _{b688}	350	L _{a135}	L _{b689}
351	L _{a135}	L _{b691}	352	L _{a135}	L _{b736}
353	L _{a135}	L _{b737}	354	L _{a135}	L _{b743}
355	L _{a135}	L _{b745}	356	L _{a135}	L _{b750}
357	L _{a135}	L _{b753}	358	L _{a135}	L _{b763}
359	L _{a135}	L _{b764}	360	L _{a135}	L _{b766}
361	L _{a138}	L _{b1}	362	L _{a138}	L _{b2}
363	L _{a138}	L _{b3}	364	L _{a138}	L _{b4}
365	L _{a138}	L _{b221}	366	L _{a138}	L _{b227}
367	L _{a138}	L _{b477}	368	L _{a138}	L _{b481}
369	L _{a138}	L _{b485}	370	L _{a138}	L _{b497}
371	L _{a138}	L _{b501}	372	L _{a138}	L _{b597}
373	L _{a138}	L _{b623}	374	L _{a138}	L _{b624}
375	L _{a138}	L _{b625}	376	L _{a138}	L _{b632}
377	L _{a138}	L _{b680}	378	L _{a138}	L _{b687}
379	L _{a138}	L _{b688}	380	L _{a138}	L _{b689}
381	L _{a138}	L _{b691}	382	L _{a138}	L _{b736}
383	L _{a138}	L _{b737}	384	L _{a138}	L _{b743}
385	L _{a138}	L _{b745}	386	L _{a138}	L _{b750}
387	L _{a138}	L _{b753}	388	L _{a138}	L _{b763}
389	L _{a138}	L _{b764}	390	L _{a138}	L _{b766}
391	L _{a161}	L _{b1}	392	L _{a161}	L _{b2}
393	L _{a161}	L _{b3}	394	L _{a161}	L _{b4}
395	L _{a161}	L _{b221}	396	L _{a161}	L _{b227}
397	L _{a161}	L _{b477}	398	L _{a161}	L _{b481}
399	L _{a161}	L _{b485}	400	L _{a161}	L _{b497}
401	L _{a161}	L _{b501}	402	L _{a161}	L _{b597}
403	L _{a161}	L _{b623}	404	L _{a161}	L _{b624}
405	L _{a161}	L _{b625}	406	L _{a161}	L _{b632}
407	L _{a161}	L _{b680}	408	L _{a161}	L _{b687}
409	L _{a161}	L _{b688}	410	L _{a161}	L _{b689}

411	L _{a161}	L _{b691}	412	L _{a161}	L _{b736}
413	L _{a161}	L _{b737}	414	L _{a161}	L _{b743}
415	L _{a161}	L _{b745}	416	L _{a161}	L _{b750}
417	L _{a161}	L _{b753}	418	L _{a161}	L _{b763}
419	L _{a161}	L _{b764}	420	L _{a161}	L _{b766}
421	L _{a168}	L _{b1}	422	L _{a168}	L _{b2}
423	L _{a168}	L _{b3}	424	L _{a168}	L _{b4}
425	L _{a168}	L _{b221}	426	L _{a168}	L _{b227}
427	L _{a168}	L _{b477}	428	L _{a168}	L _{b481}
429	L _{a168}	L _{b485}	430	L _{a168}	L _{b497}
431	L _{a168}	L _{b501}	432	L _{a168}	L _{b597}
433	L _{a168}	L _{b623}	434	L _{a168}	L _{b624}
435	L _{a168}	L _{b625}	436	L _{a168}	L _{b632}
437	L _{a168}	L _{b680}	438	L _{a168}	L _{b687}
439	L _{a168}	L _{b688}	440	L _{a168}	L _{b689}
441	L _{a168}	L _{b691}	442	L _{a168}	L _{b736}
443	L _{a168}	L _{b737}	444	L _{a168}	L _{b743}
445	L _{a168}	L _{b745}	446	L _{a168}	L _{b750}
447	L _{a168}	L _{b753}	448	L _{a168}	L _{b763}

20. 一种电致发光器件,其包括:

阳极,

阴极,

以及设置在阳极和阴极之间的有机层,所述有机层中至少有一层包含权利要求1-19任一项所述的金属配合物。

21. 如权利要求20所述的电致发光器件,其中,包含所述金属配合物的所述有机层是发光层。

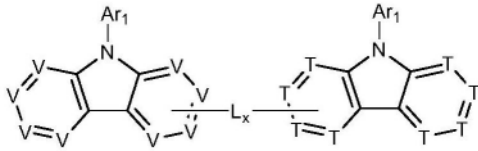
22. 如权利要求21所述的电致发光器件,其中,发光层发射绿光。

23. 如权利要求21所述的电致发光器件,其中,发光层中进一步包含至少一种第一主体化合物;

优选地,发光层进一步包含至少两种主体化合物;

更优选地,所述主体化合物中的至少一种包含至少一种选自由以下组成的组的化学基团:苯,吡啶,嘧啶,三嗪,咪唑,氮杂咪唑,吡啶咪唑,二苯并噻吩,氮杂二苯并噻吩,二苯并呋喃,氮杂二苯并呋喃,二苯并硒吩,三亚苯,氮杂三亚苯,芴,硅芴,萘,喹啉,异喹啉,喹啉,喹喔啉,菲,氮杂菲,及其组合。

24. 如权利要求23所述的电致发光器件,其中,第一主体化合物具有由式3表示的结构:



式3

其中,

L_x 每次出现相同或不同地选自单键, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的亚烷基, 取代或未取代的具有3-20个碳原子的亚环烷基, 取代或未取代的具有6-20个碳原子的亚芳基, 取代或未取代的具有3-20个碳原子的亚杂芳基, 或其组合;

V 每次出现时相同或不同地选自C, CR_V 或N, 且 V 中至少一个为C, 且与 L_x 连接;

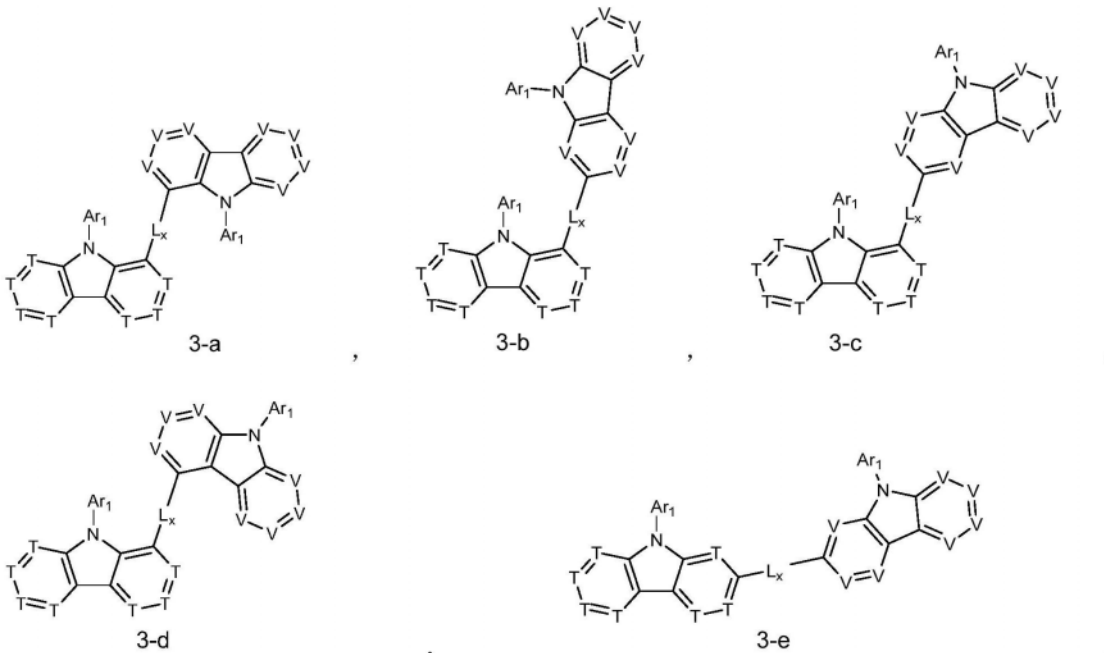
T 每次出现时相同或不同地选自C, CR_T 或N, 且 T 中至少一个为C, 并与 L_x 连接;

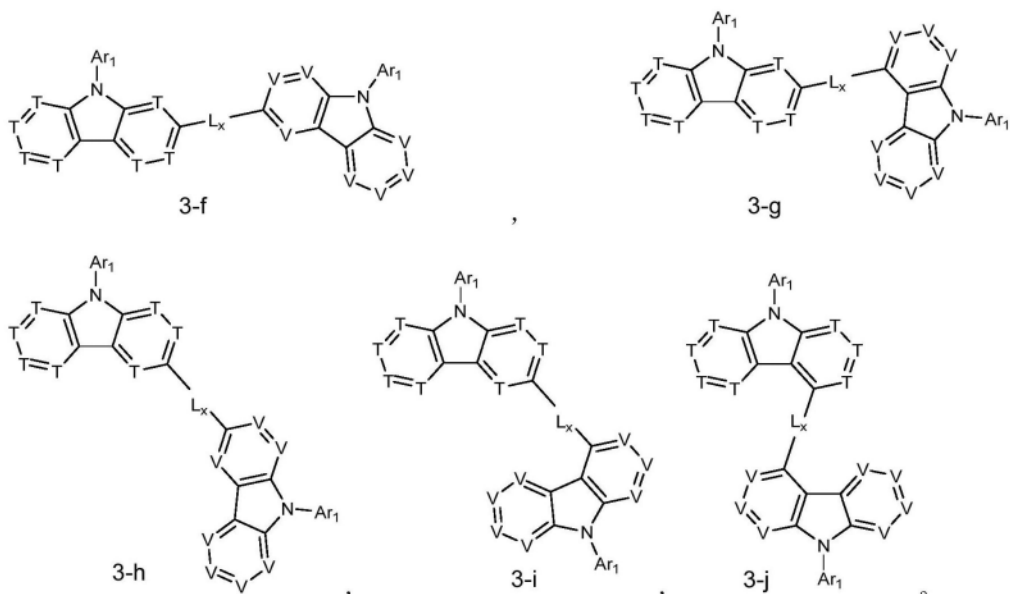
R_V 和 R_T 每次出现时相同或不同地选自以下组成的组: 氢, 氘, 卤素, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基, 取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基, 取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基, 取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基, 取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基, 取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基, 取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基, 取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基, 取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基, 取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基, 取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基, 酰基, 羰基, 羧酸基, 酯基, 氰基, 异氰基, 羟基, 巯基, 亚磺酰基, 磺酰基, 膦基, 及其组合;

Ar_1 每次出现时相同或不同地选自取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基, 取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基, 或其组合;

相邻的取代基 R_V 和 R_T 能任选地连接形成环;

优选地, 其中所述第二主体化合物具有由式3-a至式3-j之一表示的结构:





25. 如权利要求23所述的电致发光器件,其中,金属配合物掺杂在所述第一主体化合物和第二主体化合物中,金属配合物重量占发光层总重量的1%~30%;

优选地,金属配合物重量占发光层总重量的3%-13%。

26. 一种化合物组合,其包含权利要求1-19任一项所述的金属配合物。

有机电致发光材料及其器件

[0001] 本专利申请是优先权日为2020年11月18日、发明名称为“有机电致发光材料及其器件”的中国发明专利申请第202111011390.9号的分案申请。本申请要求2020年11月18日提交的中国发明专利申请第202011291606.7号的优先权,所述中国发明专利申请的全部内容通过引用的方式并入本文中。

技术领域

[0002] 本发明涉及用于有机电子器件的化合物,例如有机发光器件。更特别地,涉及一种包含式1A结构的 L_a 配体和式1B结构的 L_b 配体的金属配合物,以及包含该金属配合物的有机电致发光器件和化合物组合。

背景技术

[0003] 有机电子器件包括但是不限于下列种类:有机发光二极管(OLEDs),有机场效应晶体管(O-FETs),有机发光晶体管(OLETs),有机光伏器件(OPVs),染料-敏化太阳能电池(DSSCs),有机光学检测器,有机光感受器,有机场效应器件(OFQDs),发光电化学电池(LECs),有机激光二极管和有机电浆发光器件。

[0004] 1987年,伊斯曼柯达的Tang和Van Slyke报道了一种双层有机电致发光器件,其包括芳基胺空穴传输层和三-8-羟基喹啉-铝层作为电子传输层和发光层(Applied Physics Letters,1987,51(12):913-915)。一旦加偏压于器件,绿光从器件中发射出来。这个发明为现代有机发光二极管(OLEDs)的发展奠定了基础。最先进的OLEDs可以包括多层,例如电荷注入和传输层,电荷和激子阻挡层,以及阴极和阳极之间的一个或多个发光层。由于OLEDs是一种自发光固态器件,它为显示和照明应用提供了巨大的潜力。此外,有机材料的固有特性,例如它们的柔韧性,可以使它们非常适合于特殊应用,例如在柔性基底制作上。

[0005] OLED可以根据其发光机制分为三种不同类型。Tang和van Slyke发明的OLED是荧光OLED。它只使用单重态发光。在器件中产生的三重态通过非辐射衰减通道浪费了。因此,荧光OLED的内部量子效率(IQE)仅为25%。这个限制阻碍了OLED的商业化。1997年,Forrest和Thompson报告了磷光OLED,其使用来自含络合物的重金属的三重态发光作为发光体。因此,能够收获单重态和三重态,实现100%的IQE。由于它的高效率,磷光OLED的发现和直接为有源矩阵OLED(AMOLED)的商业化作出了贡献。最近,Adachi通过有机化合物的热激活延迟荧光(TADF)实现了高效率。这些发光体具有小的单重态-三重态间隙,使得激子从三重态返回到单重态的成为可能。在TADF器件中,三重态激子能够通过反向系统间穿越产生单重态激子,导致高IQE。

[0006] OLEDs也可以根据所用材料的形式分类为小分子和聚合物OLED。小分子是指不是聚合物的任何有机或有机金属材料。只要具有精确的结构,小分子的分子量可以很大。具有明确结构的树枝状聚合物被认为是小分子。聚合物OLED包括共轭聚合物和具有侧基发光基团的非共轭聚合物。如果在制造过程中发生后聚合,小分子OLED能够变成聚合物OLED。

[0007] 已有各种OLED制造方法。小分子OLED通常通过真空热蒸发来制造。聚合物OLED通

过溶液法制造,例如旋涂,喷墨印刷和喷嘴印刷。如果材料可以溶解或分散在溶剂中,小分子OLED也可以通过溶液法制造。

[0008] OLED的发光颜色可以通过发光材料结构设计来实现。OLED可以包括一个发光层或多个发光层以实现期望的光谱。绿色,黄色和红色OLED,磷光材料已成功实现商业化。蓝色磷光器件仍然具有蓝色不饱和,器件寿命短和工作电压高等问题。商业全彩OLED显示器通常采用混合策略,使用蓝色荧光和磷光黄色,或红色和绿色。目前,磷光OLED的效率在高亮度情况下快速降低仍然是一个问题。此外,期望具有更饱和的发光光谱,更高的效率和更长的器件寿命。

[0009] 氰基取代不经常被引入到磷光金属配合物中,如铱配合物中。US20140252333A1公开了一系列氰基-苯基取代的铱配合物,结果没有明确表示氰基带来的效果。另外因为氰基是非常拉电子的取代基,它亦被用作为蓝移磷光金属配合物的发射光谱,如US20040121184A1。本申请的申请人之前的申请US20200251666A1中公开了具有氰基取代配体的金属络合物,其应用于有机电致发光器件中可以提升器件性能和颜色饱和度,虽然已经达到业界的较高水平,但仍有提升的空间。

[0010] 烷基取代常被引入到磷光金属配合物中,如铱配合物中,以产生红色发光颜色。US2014231755A1中发现在2-苯基吡啶中5-位氘代甲基可以提高器件的寿命。

发明内容

[0011] 本发明旨在提供一系列包含式1A结构的 L_a 配体和式1B结构的 L_b 配体的金属配合物来解决至少部分上述问题。所述金属配合物可用作电致发光器件中的发光材料。这些新型化合物可以在升华时得到更高的升华收率,具有更低的蒸镀温度。应用于电致发光器件中能够能提供更好的器件性能,例如器件寿命的提升,更窄的半峰宽。

[0012] 根据本发明的一个实施例,公开了一种金属配合物,其具有 $M(L_a)_m(L_b)_n(L_c)_q$ 的通式,

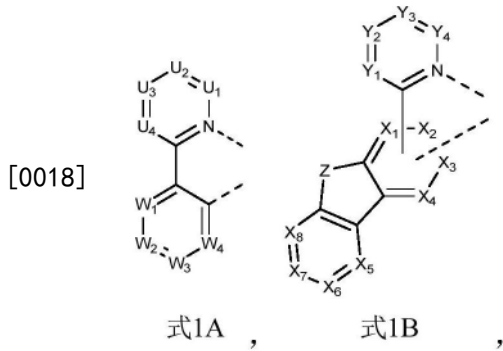
[0013] 其中,

[0014] L_a 、 L_b 和 L_c 分别是与金属M配位的第一、第二和第三配体,并且 L_c 和所述 L_a 或 L_b 是相同或是不同的;其中, L_a 、 L_b 和 L_c 能任选地连接形成多齿配体;

[0015] 金属M选自相对原子质量大于40的金属;优选地,金属M每次出现时相同或不同地选自由Cu,Ag,Au,Ru,Rh,Pd,Os,Ir和Pt组成的组;更优选地,M每次出现时相同或不同地选自Pt或Ir;

[0016] m是1或2,n是1或2,q是0或1,m+n+q等于M的氧化态;当m为2时,两个 L_a 是相同或不同的;当n为2时,两个 L_b 是相同或不同的;

[0017] L_a 每次出现相同或不同地具有由式1A表示的结构; L_b 每次出现相同或不同地具有由式1B表示的结构;



[0019] 其中,

[0020] Z选自O,S,Se,NR,CRR和SiRR组成的组;当同时存在两个R时,两个R是相同或不同的;

[0021] X_1-X_8 每次出现相同或不同地选自C或 CR_x ;

[0022] Y_1-Y_4 每次出现相同或不同地选自 CR_y 或N;

[0023] U_1-U_4 每次出现相同或不同地选自 CR_u 或N;

[0024] W_1-W_4 每次出现相同或不同地选自 CR_w 或N;

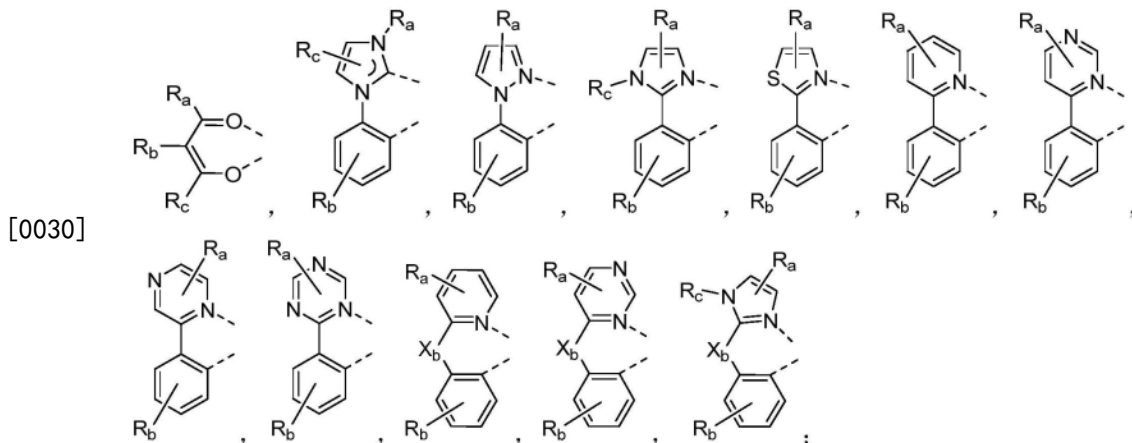
[0025] R, R_x, R_y, R_u, R_w 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组:氢,氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基,取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基,取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基,取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基,取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基,取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基,酰基,羰基,羧酸基,酯基,氰基,异氰基,羟基,巯基,亚磺酰基,磺酰基,膦基,及其组合;

[0026] U_1-U_4 中至少有一个或多个选自 CR_u 且所述 R_u 是取代或未取代的1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,或其组合,且所有所述 R_u 的碳原子数的总和至少是4;

[0027] R_x 中至少有一个是氰基;

[0028] 相邻的取代基 R, R_x, R_y, R_u, R_w 能任选地连接形成环;

[0029] 其中, L_c 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组中的任一种所示的结构:



[0031] 其中,

[0032] R_a, R_b 和 R_c 每次出现时相同或不同地表示单取代, 多取代, 或无取代;

[0033] X_b 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组: O, S, Se, NR_{N1} , $CR_{C1}R_{C2}$;

[0034] $R_a, R_b, R_c, R_{N1}, R_{C1}$ 和 R_{C2} 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组: 氢, 氘, 卤素, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基, 取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基, 取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基, 取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基, 取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基, 取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基, 取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基, 取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基, 取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基, 取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基, 取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基, 酰基, 羰基, 羧酸基, 酯基, 氰基, 异氰基, 羟基, 巯基, 亚磺酰基, 磺酰基, 膦基, 及其组合;

[0035] 相邻的取代基 $R_a, R_b, R_c, R_{N1}, R_{C1}$ 和 R_{C2} 能任选地连接形成环。

[0036] 根据本发明的另一实施例, 还公开了一种电致发光器件, 其包括:

[0037] 阳极,

[0038] 阴极,

[0039] 以及设置在阳极和阴极之间的有机层, 所述有机层至少有一层包含上述实施例所述的金属配合物。

[0040] 根据本发明的另一实施例, 还公开了一种化合物组合, 其包含上述实施例所述的金属配合物。

[0041] 本发明公开的一系列包含式1A结构的 L_a 配体和式1B结构的 L_b 配体的金属配合物, 通过在 L_a 配体中引入特定取代基和在 L_b 配体中引入氰基, 这些新型化合物可以在升华时得到更高的升华收率, 具有更低的蒸镀温度。这些金属配合物可用作电致发光器件中的发光材料。应用于电致发光器件中能够能提供更好的器件性能, 例如器件寿命的提升, 更窄的半峰宽。

附图说明

[0042] 图1是可以含有本文所公开的金属配合物和化合物组合的有机发光装置示意图。

[0043] 图2是可以含有本文所公开的金属配合物和化合物组合的另一有机发光装置示意图。

具体实施方式

[0044] OLED可以在各种基板上制造, 例如玻璃, 塑料和金属。图1示意性、非限制性的展示了有机发光装置100。图不一定按比例绘制, 图中一些层结构也是可以根据需要省略的。装置100可以包括基板101、阳极110、空穴注入层120、空穴传输层130、电子阻挡层140、发光层150、空穴阻挡层160、电子传输层170、电子注入层180和阴极190。装置100可以通过依序沉积所描述的层来制造。各层的性质和功能以及示例性材料在美国专利US7,279,704B2第6-10栏有更详细的描述, 上述专利的全部内容通过引用并入本文。

[0045] 这些层中的每一个有更多实例。举例来说, 以全文引用的方式并入的美国专利第

5,844,363号中公开柔性并且透明的衬底-阳极组合。经p掺杂的空穴输送层的实例是以50:1的摩尔比率掺杂有F₄-TCNQ的m-MTDATA,如以全文引用的方式并入的美国专利申请公开案第2003/0230980号中所公开。以全文引用的方式并入的颁予汤普森(Thompson)等人的美国专利第6,303,238号中公开主体材料的实例。经n掺杂的电子输送层的实例是以1:1的摩尔比率掺杂有Li的BPhen,如以全文引用的方式并入的美国专利申请公开案第2003/0230980号中所公开。以全文引用的方式并入的美国专利第5,703,436号和第5,707,745号公开了阴极的实例,其包括具有例如Mg:Ag等金属薄层与上覆的透明、导电、经溅镀沉积的ITO层的复合阴极。以全文引用的方式并入的美国专利第6,097,147号和美国专利申请公开案第2003/0230980号中更详细地描述阻挡层的原理和使用。以全文引用的方式并入的美国专利申请公开案第2004/0174116号中提供注入层的实例。可以在以全文引用的方式并入的美国专利申请公开案第2004/0174116号中找到保护层的描述。

[0046] 经由非限制性的实施例提供上述分层结构。OLED的功能可以通过组合以上描述的各种层来实现,或者可以完全省略一些层。它还可以包括未明确描述的其它层。在每个层内,可以使用单一材料或多种材料的混合物来实现最佳性能。任何功能层可以包括几个子层。例如,发光层可以具有两层不同的发光材料以实现期望的发光光谱。

[0047] 在一个实施例中,OLED可以描述为具有设在阴极和阳极之间的“有机层”。该有机层可以包括一层或多层。

[0048] OLED也需要封装层,如图2示意性、非限制性的展示了有机发光装置200,其与图1不同的是,阴极190之上还可以包括封装层102,以防止来自环境的有害物质,例如水分和氧气。能够提供封装功能的任何材料都可以用作封装层,例如玻璃或者有机-无机混合层。封装层应直接或间接放置在OLED器件的外部。多层薄膜封装在美国专利US7,968,146B2中进行了描述,其全部内容通过引用并入本文。

[0049] 根据本发明的实施例制造的器件可以并入具有该器件的一个或多个电子部件模块(或单元)的各种消费产品中。这些消费产品的一些例子包括平板显示器,监视器,医疗监视器,电视机,广告牌,用于室内或室外照明和/或发信号的灯,平视显示器,完全或部分透明的显示器,柔性显示器,智能电话,平板计算机,平板手机,可穿戴设备,智能手表,膝上型计算机,数码相机,便携式摄像机,取景器,微型显示器,3-D显示器,车辆显示器和车尾灯。

[0050] 本文描述的材料和结构也可以用于前文列出的其它有机电子器件中。

[0051] 如本文所用,“顶部”意指离衬底最远,而“底部”意指离衬底最近。在将第一层描述为“设置”在第二层“上”的情况下,第一层被设置为距衬底较远。除非规定第一层“与”第二层“接触”,否则第一与第二层之间可以存在其它层。举例来说,即使阴极和阳极之间存在各种有机层,仍可以将阴极描述为“设置在”阳极“上”。

[0052] 如本文所用,“溶液可处理”意指能够以溶液或悬浮液的形式在液体介质中溶解、分散或输送和/或从液体介质沉积。

[0053] 当据信配位体直接促成发射材料的光敏性质时,配位体可以称为“光敏性的”。当据信配位体并不促成发射材料的光敏性质时,配位体可以称为“辅助性的”,但辅助性的配位体可以改变光敏性的配位体的性质。

[0054] 据相信,荧光OLED的内部量子效率(IQE)可以通过延迟荧光超过25%自旋统计限制。延迟荧光一般可以分成两种类型,即P型延迟荧光和E型延迟荧光。P型延迟荧光由三重

态-三重态消灭(TTA)产生。

[0055] 另一方面,E型延迟荧光不依赖于两个三重态的碰撞,而是依赖于三重态与单重激发态之间的转换。能够产生E型延迟荧光的化合物需要具有极小单-三重态间隙以便能态之间的转化。热能可以激活由三重态回到单重态的转变跃迁。这种类型的延迟荧光也称为热激活延迟荧光(TADF)。TADF的显著特征在于,延迟分量随温度升高而增加。如果逆向系间窜越(RISC)速率足够快速从而最小化由三重态的非辐射衰减,那么回填充单重激发态的分率可能达到75%。总单重态分率可以是100%,远超过电致产生的激子的自旋统计的25%。

[0056] E型延迟荧光特征可以见于激发复合物系统或单一化合物中。不受理论束缚,相信E型延迟荧光需要发光材料具有小单-三重态能隙(ΔE_{S-T})。有机含非金属的供体-受体发光材料可能能够实现这点。这些材料的发射通常表征为供体-受体电荷转移(CT)型发射。这些供体-受体型化合物中HOMO与LUMO的空间分离通常产生小 ΔE_{S-T} 。这些状态可以包括CT状态。通常,供体-受体发光材料通过将电子供体部分(例如氨基或吡啶衍生物)与电子受体部分(例如含N的六元芳香族环)连接而构建。

[0057] 关于取代基术语的定义

[0058] 卤素或卤化物-如本文所用,包括氟,氯,溴和碘。

[0059] 烷基-如本文所用,包含直链和支链烷基。烷基可以是具有1至20个碳原子的烷基,优选具有1至12个碳原子的烷基,更优选具有1至6个碳原子的烷基。烷基的实例包括甲基,乙基,丙基,异丙基,正丁基,仲丁基,异丁基,叔丁基,正戊基,正己基,正庚基,正辛基,正壬基,正癸基,正十一烷基,正十二烷基,正十三烷基,正十四烷基,正十五烷基,正十六烷基,正十七烷基,正十八烷基,新戊基,1-甲基戊基,2-甲基戊基,1-戊基己基,1-丁基戊基,1-庚基辛基,3-甲基戊基。另外,烷基可以任选被取代。在上述中,优选甲基,乙基,丙基,异丙基,正丁基,仲丁基,异丁基,叔丁基,正戊基,新戊基和正己基。另外,烷基可以任选被取代。

[0060] 环烷基-如本文所用包含环状烷基。环烷基可以是具有3至20个环碳原子的环烷基,优选具有4至10个碳原子的环烷基。环烷基的实例包括环丁基,环戊基,环己基,4-甲基环己基,4,4-二甲基环己基,1-金刚烷基,2-金刚烷基,1-降冰片基,2-降冰片基等。在上述中,优选环戊基,环己基,4-甲基环己基,4,4-二甲基环己基。另外,环烷基可以任选被取代。

[0061] 杂烷基-如本文所用,杂烷基包含烷基链中的一个或多个碳被选自由氮原子,氧原子,硫原子,硒原子,磷原子,硅原子,锗原子和硼原子组成的组的杂原子取代而形成。杂烷基可以是具有1至20个碳原子的杂烷基,优选具有1至10个碳原子的杂烷基,更优选具有1至6个碳原子的杂烷基。杂烷基的实例包括甲氧基甲基,乙氧基甲基,乙氧基乙基,甲基硫基甲基,乙基硫基甲基,乙基硫基乙基,甲氧甲氧甲基,乙氧甲氧甲基,乙氧乙氧乙基,羟基甲基,羟基乙基,羟基丙基,巯基甲基,巯基乙基,巯基丙基,氨基甲基,氨基乙基,氨基丙基,二甲基氨基甲基,三甲基硅基,二甲基乙基硅基,二甲基异丙基硅基,叔丁基二甲基硅基,三乙基硅基,三异丙基硅基,三甲基硅基甲基,三甲基硅基乙基,三甲基硅基异丙基。另外,杂烷基可以任选被取代。

[0062] 烯基-如本文所用,涵盖直链、支链以及环状烯基基团。链烯基可以是包含2至20个碳原子的烯基,优选具有2至10个碳原子的烯基。烯基的例子包括乙烯基,丙烯基,1-丁烯基,2-丁烯基,3-丁烯基,1,3-丁二烯基,1-甲基乙烯基,苯乙烯基,2,2-二苯基乙烯基,1,2-二苯基乙烯基,1-甲基烯丙基,1,1-二甲基烯丙基,2-甲基烯丙基,1-苯基烯丙基,2-苯基烯

丙基,3-苯基烯丙基,3,3-二苯基烯丙基,1,2-二甲基烯丙基,1-苯基-1-丁烯基,3-苯基-1-丁烯基,环戊烯基,环戊二烯基,环己烯基,环庚烯基,环庚三烯基,环辛烯基,环辛四烯基和降冰片烯基。另外,烯基可以是任选取代的。

[0063] 炔基-如本文所用,涵盖直链炔基。炔基可以是包含2至20个碳原子的炔基,优选具有2至10个碳原子的炔基。炔基的实例包括乙炔基,丙炔基,炔丙基,1-丁炔基,2-丁炔基,3-丁炔基,1-戊炔基,2-戊炔基,3,3-二甲基-1-丁炔基,3-乙基-3-甲基-1-戊炔基,3,3-二异丙基1-戊炔基,苯乙炔基,苯丙炔基等。在上述中,优选乙炔基,丙炔基,炔丙基,1-丁炔基,2-丁炔基,3-丁炔基,1-戊炔基,苯乙炔基。另外,炔基可以是任选取代的。

[0064] 芳基或芳族基-如本文所用,考虑非稠合和稠合体系。芳基可以是具有6至30个碳原子的芳基,优选6至20个碳原子的芳基,更优选具有6至12个碳原子的芳基。芳基的例子包括苯基,联苯,三联苯,三亚苯,四亚苯,萘,蒽,菲,芴,芘,蒹,茈和萘,优选苯基,联苯,三联苯,三亚苯,芴和萘。另外,芳基可以任选被取代。非稠合芳基的例子包括苯基,联苯-2-基,联苯-3-基,联苯-4-基,对三联苯-4-基,对三联苯-3-基,对三联苯-2-基,间三联苯-4-基,间三联苯-3-基,间三联苯-2-基,邻甲苯基,间甲苯基,对甲苯基,对-(2-苯基丙基)苯基,4'-甲基联二苯基,4"-叔丁基-对三联苯-4-基,邻-枯基,间-枯基,对-枯基,2,3-二甲苯基,3,4-二甲苯基,2,5-二甲苯基,均三甲苯基和间四联苯基。另外,芳基可以任选被取代。

[0065] 杂环基或杂环-如本文所用,考虑非芳族环状基团。非芳族杂环基包含具有3-20个环原子的饱和杂环基团以及具有3-20个环原子的不饱和非芳族杂环基团,其中至少有一个环原子选自氮原子,氧原子,硫原子,硒原子,硅原子,磷原子,锗原子和硼原子组成的组,优选的非芳族杂环基是具有3至7个环原子的那些,其包括至少一个杂原子如氮,氧,硅或硫。非芳族杂环基的实例包括环氧乙烷基,氧杂环丁烷基,四氢呋喃基,四氢吡喃基,二氧五环基,二氧六环基,吡丙啶基,二氢吡咯基,四氢吡咯基,哌啶基,恶唑烷基,吗啉基,哌嗪基,氧杂环庚三烯基,硫杂环庚三烯基,氮杂环庚三烯基和四氢噻咯基。另外,杂环基可以任选被取代。

[0066] 杂芳基-如本文所用,可以包含1至5个杂原子的非稠合和稠合杂芳族基团,其中至少有一个杂原子选自氮原子,氧原子,硫原子,硒原子,硅原子,磷原子,锗原子和硼原子组成的组。异芳基也指杂芳基。杂芳基可以是具有3至30个碳原子的杂芳基,优选具有3至20个碳原子的杂芳基,更优选具有3至12个碳原子的杂芳基。合适的杂芳基包括二苯并噻吩,二苯并呋喃,二苯并硒吩,呋喃,噻吩,苯并呋喃,苯并噻吩,苯并硒吩,咪唑,吡啶,吡啶,吡咯并吡啶,吡啶,咪唑,三唑,恶唑,噻唑,恶二唑,恶三唑,二恶唑,噻二唑,吡啶,哒嗪,嘧啶,吡嗪,三嗪,恶嗪,恶噻嗪,恶二嗪,吡啶,苯并咪唑,吡啶,茛并噻,苯并恶唑,苯并异恶唑,苯并噻唑,喹啉,异喹啉,噌啉,喹啉,喹啉,喹啉,萘啶,酞嗪,蝶啶,咕吨,吡啶,吩嗪,吩嗪,苯并呋喃并吡啶,呋喃并二吡啶,苯并噻吩并吡啶,噻吩并二吡啶,苯并硒吩并吡啶,硒苯并二吡啶,优选二苯并噻吩,二苯并呋喃,二苯并硒吩,咪唑,吡啶并咪唑,咪唑,吡啶,三嗪,苯并咪唑,1,2-氮杂硼烷,1,3-氮杂硼烷,1,4-氮杂硼烷,硼唑和其氮杂类似物。另外,杂芳基可以任选被取代。

[0067] 烷氧基-如本文所用,由-0-烷基、-0-环烷基、-0-杂烷基或-0-杂环基表示。烷基、环烷基、杂烷基和杂环基的例子和优选例子与上述相同。烷氧基可以是具有1至20个碳原子的烷氧基,优选具有1至6个碳原子的烷氧基。烷氧基的例子包括甲氧基,乙氧基,丙氧基,丁

氧基,戊氧基,己氧基,环丙基氧基,环丁基氧基,环戊基氧基、环己基氧基、四氢呋喃基氧基、四氢吡喃基氧基、甲氧丙基氧基、乙氧乙基氧基、甲氧甲基氧基和乙氧甲基氧基。另外,烷氧基可以任选被取代。

[0068] 芳氧基-如本文所用,由-O-芳基或-O-杂芳基表示。芳基和杂芳基例子和优选例子与上述相同。芳氧基可以是具有6至30个碳原子的芳氧基,优选具有6-20个碳原子的芳氧基。芳氧基的例子包括苯氧基和联苯氧基。另外,芳氧基可以任选被取代。

[0069] 芳烷基-如本文所用,涵盖芳基取代的烷基。芳烷基可以是具有7至30个碳原子的芳烷基,优选具有7至20个碳原子的芳烷基,更优选具有7至13个碳原子的芳烷基。芳烷基的例子包括苄基,1-苯基乙基,2-苯基乙基,1-苯基异丙基,2-苯基异丙基,苯基叔丁基, α -萘基甲基,1- α -萘基-乙基,2- α -萘基乙基,1- α -萘基异丙基,2- α -萘基异丙基, β -萘基甲基,1- β -萘基-乙基,2- β -萘基-乙基,1- β -萘基异丙基,2- β -萘基异丙基,对甲基苄基,间甲基苄基,邻甲基苄基,对氯苄基,间氯苄基,邻氯苄基,对溴苄基,间溴苄基,邻溴苄基,对碘苄基,间碘苄基,邻碘苄基,对羟基苄基,间羟基苄基,邻羟基苄基,对氨基苄基,间氨基苄基,邻氨基苄基,对硝基苄基,间硝基苄基,邻硝基苄基,对氰基苄基,间氰基苄基,邻氰基苄基,1-羟基-2-苯基异丙基和1-氯-2-苯基异丙基。在上述中,优选苄基,对氰基苄基,间氰基苄基,邻氰基苄基,1-苯基乙基,2-苯基乙基,1-苯基异丙基和2-苯基异丙基。另外,芳烷基可以任选被取代。

[0070] 烷硅基-如本文所用,涵盖烷基取代的硅基。烷硅基可以是具有3-20个碳原子的烷硅基,优选具有3至10个碳原子的烷硅基。烷硅基的例子包括三甲基硅基,三乙基硅基,甲基二乙基硅基,乙基二甲基硅基,三丙基硅基,三丁基硅基,三异丙基硅基,甲基二异丙基硅基,二甲基异丙基硅基,三叔丁基硅基,三异丁基硅基,二甲基叔丁基硅基,甲基二叔丁基硅基。另外,烷硅基可以任选被取代。

[0071] 芳基硅烷基-如本文所用,涵盖至少一个芳基取代的硅基。芳基硅烷基可以是具有6-30个碳原子的芳基硅烷基,优选具有8至20个碳原子的芳基硅烷基。芳基硅烷基的例子包括三苯基硅基,苯基二联苯基硅基,二苯基联苯基硅基,苯基二乙基硅基,二苯基乙基硅基,苯基二甲基硅基,二苯基甲基硅基,苯基二异丙基硅基,二苯基异丙基硅基,二苯基丁基硅基,二苯基异丁基硅基,二苯基叔丁基硅基,三叔丁基硅基,二甲基叔丁基硅基,甲基二叔丁基硅基。另外,芳基硅烷基可以任选被取代。

[0072] 氮杂二苯并呋喃,氮杂二苯并噻吩等中的术语“氮杂”是指相应芳族片段中的一个或多个C-H基团被氮原子代替。例如,氮杂三亚苯包括二苯并[f,h]喹啉,二苯并[f,h]喹啉和在环系中具有两个或更多个氮的其它类似物。本领域普通技术人员可以容易地想到上述的氮杂衍生物的其它氮类似物,并且所有这些类似物被确定为包括在本文所述的术语中。

[0073] 在本公开中,除另有定义,当使用由以下组成的组中的任意一个术语时:取代的烷基,取代的环烷基,取代的杂烷基,取代的杂环基,取代的芳烷基,取代的烷氧基,取代的芳氧基,取代的烯基,取代的炔基,取代的芳基,取代的杂芳基,取代的烷硅基,取代的芳基硅烷基,取代的氨基,取代的酰基,取代的羰基,取代的羧酸基,取代的酯基,取代的亚磺酰基,取代的磺酰基,取代的膦基,是指烷基,环烷基,杂烷基,芳烷基,烷氧基,芳氧基,烯基,芳基,杂芳基,烷硅基,芳基硅烷基,氨基,酰基,羰基,羧酸基,酯基,亚磺酰基,磺酰基和膦基中的任意一个基团可以被一个或多个选自氧,卤素,未取代的具有1-20个碳原子的烷基,未

取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基,未取代的具有3-20个环原子的杂环基,未取代的具有7-30个碳原子数的芳烷基,未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基,未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基,未取代的具有2-20个碳原子的烯基,未取代的具有2-20个碳原子的炔基,未取代的具有6-30个碳原子的芳基,未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基,未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基,未取代的具有0-20个碳原子的氨基,酰基,羰基,羧酸基,酯基,氰基,异氰基,羟基,巯基,亚磺酰基,磺酰基,膦基及其组合所取代。

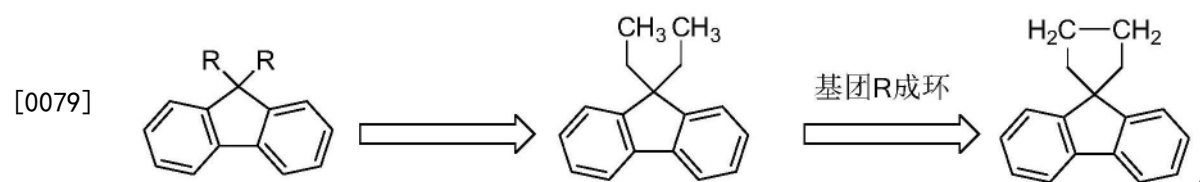
[0074] 应当理解,当将分子片段描述为取代基或以其他方式连接到另一部分时,可根据它是否是片段(例如苯基,亚苯基,萘基,二苯并呋喃基)或根据它是否是整个分子(如苯,萘,二苯并呋喃)来书写它的名称。如本文所用,指定取代基或连接片段的这些不同方式被认为是等同的。

[0075] 在本公开中提到的化合物中,氢原子可以被氘部分或完全替代。其他原子如碳和氮也可以被它们的其他稳定的同位素代替。由于其增强器件的效率和稳定性,化合物中其它稳定同位素的替代可能是优选的。

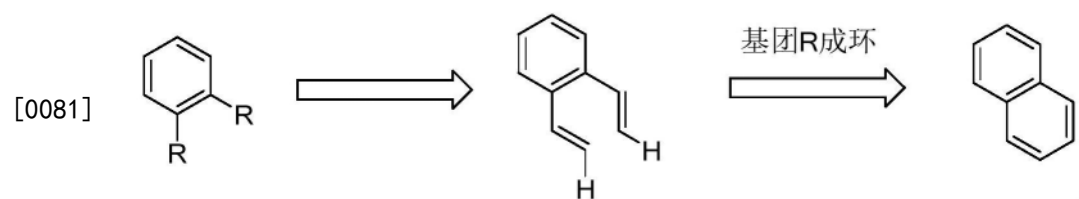
[0076] 在本公开中提到的化合物中,多重取代指包含二重取代在内,直到高达最多的可用取代的范围。当本公开中提到的化合物中某个取代基表示多取代(包括二取代、三取代、四取代等)时,即表示该取代基可以在其连接结构上的多个可用的取代位置上存在,在多个可用的取代位置上均存在的该取代基可以是相同的结构,也可以是不同的结构。

[0077] 在本公开中提到的化合物中,除非明确限定,例如相邻的取代基能任选地连接形成环,否则所述化合物中相邻的取代基不能连接形成环。在本公开中提到的化合物中,相邻的取代基能任选地连接形成环,既包含相邻的取代基可以连接形成环的情形,也包含相邻的取代基不连接形成环的情形。相邻的取代基能任选地连接形成环时,所形成的环可以是单环或多环,以及脂环、杂脂环、芳环或杂芳环。在这种表述中,相邻的取代基可以是指键合在同一个原子上的取代基、与彼此直接键合的碳原子键合的取代基、或与进一步远离的碳原子键合的取代基。优选的,相邻的取代基是指键合在同一个碳原子上的取代基以及与彼此直接键合的碳原子键合的取代基。

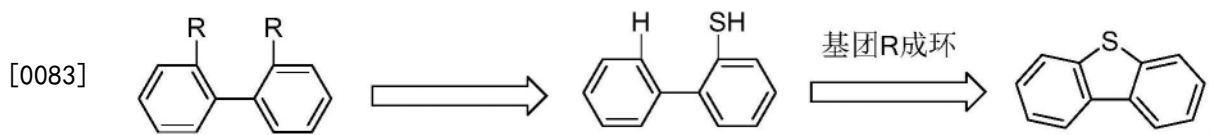
[0078] 相邻的取代基能任选地连接形成环的表述也旨在被认为是指键合在同一个碳原子上的两个取代基通过化学键彼此连接形成环,这可以由下式示例:



[0080] 相邻的取代基能任选地连接形成环的表述也旨在被认为是指与彼此直接键合的碳原子键合的两个取代基通过化学键彼此连接形成环,这可以由下式示例:



[0082] 此外,相邻的取代基能任选地连接形成环的表述也旨在被认为是指,在与彼此直接键合的碳原子键合的两个取代基之一表示氢的情况下,第二取代基键合在氢原子键合至的位置处,从而成环。这由下式示例:



[0084] 根据本发明的一个实施例,公开了一种金属配合物,其具有 $M(L_a)_m(L_b)_n(L_c)_q$ 的通式,

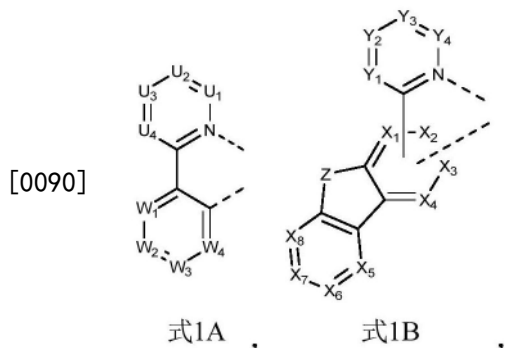
[0085] 其中,

[0086] L_a 、 L_b 和 L_c 分别是与金属M配位的第一、第二和第三配体,并且 L_c 和所述 L_a 或 L_b 是相同或是不同的;其中, L_a 、 L_b 和 L_c 能任选地连接形成多齿配体;例如, L_a 、 L_b 和 L_c 中的任意两个可以连接形成四齿配体;又例如, L_a 、 L_b 和 L_c 可以相互连接形成六齿配体;或又例如, L_a 、 L_b 、 L_c 均不连接从而不形成多齿配体;

[0087] 金属M选自相对原子质量大于40的金属;优选地,金属M每次出现时相同或不同地选自自由Cu,Ag,Au,Ru,Rh,Pd,Os,Ir和Pt组成的组;更优选地,M每次出现时相同或不同地选自Pt或Ir;

[0088] m 是1或2, n 是1或2, q 是0或1, $m+n+q$ 等于M的氧化态;当 m 为2时,两个 L_a 是相同或不同的;当 n 为2时,两个 L_b 是相同或不同的;

[0089] L_a 每次出现相同或不同地具有由式1A表示的结构; L_b 每次出现相同或不同地具有由式1B表示的结构;



[0091] 其中,

[0092] Z选自自由O,S,Se,NR,CRR和SiRR组成的组;当同时存在两个R时,两个R是相同或不同的;

[0093] X_1 - X_8 每次出现相同或不同地选自C或 CR_x ;

[0094] Y_1 - Y_4 每次出现相同或不同地选自 CR_y 或N;

[0095] U_1 - U_4 每次出现相同或不同地选自 CR_u 或N;

[0096] W_1 - W_4 每次出现相同或不同地选自 CR_w 或N;

[0097] R, R_x , R_y , R_u , R_w 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组:氢,氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基,取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基,取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧

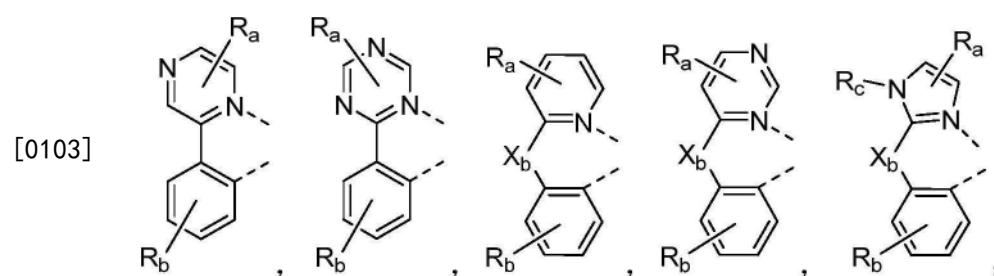
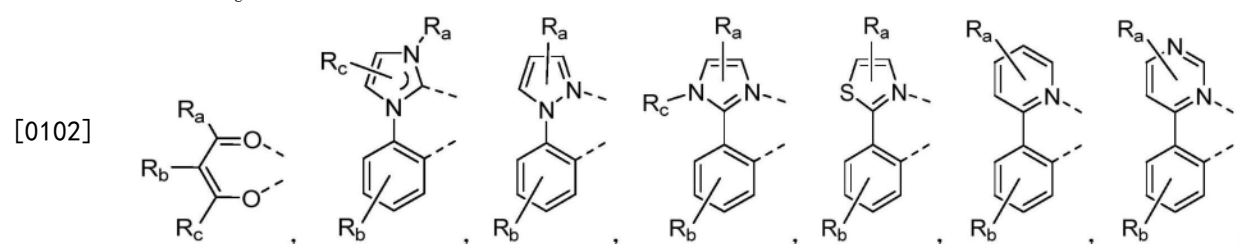
基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基,取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基,取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基,取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基,酰基,羰基,羧酸基,酯基,氰基,异氰基,羟基,巯基,亚磺酰基,磺酰基,膦基,及其组合;

[0098] U_1-U_4 中至少有一个或多个选自 CR_u 且所述 R_u 是取代或未取代的1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,或其组合,且所有所述 R_u 的碳原子数的总和至少是4;

[0099] R_x 中至少有一个是氰基;

[0100] 相邻的取代基 R_x, R_y, R_u, R_w 能任选地连接形成环;

[0101] 其中, L_c 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组中的任一种所示的结构:



[0104] 其中,

[0105] R_a, R_b 和 R_c 每次出现时相同或不同地表示单取代,多取代,或无取代;

[0106] X_b 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组:O, S, Se, $NR_{N1}, CR_{C1}R_{C2}$;

[0107] $R_a, R_b, R_c, R_{N1}, R_{C1}$ 和 R_{C2} 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组:氢,氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基,取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基,取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基,取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基,取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基,取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基,酰基,羰基,羧酸基,酯基,氰基,异氰基,羟基,巯基,亚磺酰基,磺酰基,膦基,及其组合;

[0108] 相邻的取代基 $R_a, R_b, R_c, R_{N1}, R_{C1}$ 和 R_{C2} 能任选地连接形成环。

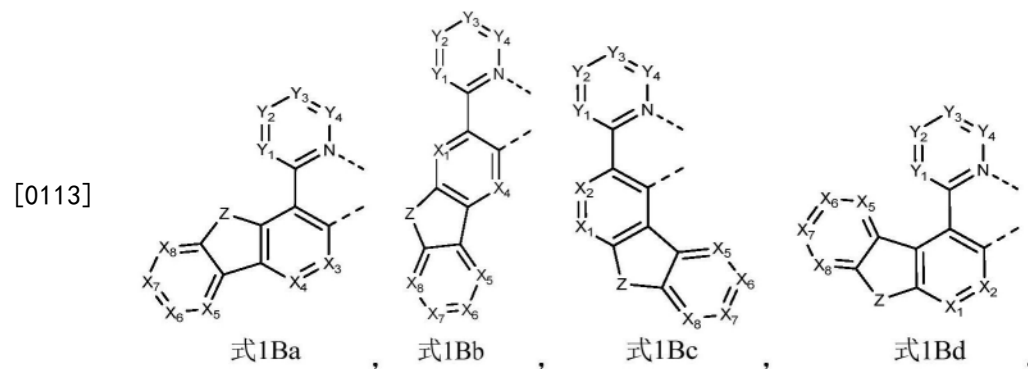
[0109] 在本文中,“所有所述 R_u 的碳原子数的总和至少是4”是指满足以下条件“ U_1-U_4 中有一个或多个选自 CR_u ,且所述 R_u 是取代或未取代的1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,或其组合”的所有 R_u 的碳原子数总数大于等于4。当 U_1-U_4 中有一个满足上述条件时,则该取代基的碳原子大于或等于4;当 U_1-U_4 中有两个满足上述条件

时,则这两个的取代基的碳原子数的总和大于或等于4;当 U_1-U_4 中有三个满足上述条件时,则这三个的取代基的碳原子数的总和大于或等于4;当 U_1-U_4 中有四个满足上述条件时,则这四个的取代基的碳原子数的总和大于或等于4。例如当 U_2 选自 CR_u 且满足上述条件,则 U_2 的取代基 R_u 的碳原子数大于或等于4;当 U_3 选自 CR_u 且满足上述条件,则 U_3 的取代基 R_u 的碳原子数大于或等于4;其他情况以此类推。

[0110] 在该实施例中,“相邻的取代基 R, R_x, R_y, R_u, R_w 能任选地连接形成环”,旨在表示其中相邻的取代基组,例如,两个取代基 R 之间,两个取代基 R_x 之间,两个取代基 R_y 之间,两个取代基 R_u 之间,两个取代基 R_w 之间,两个取代基 R_w 和 R_u 之间,两个取代基 R_y 和 R_x 之间,这些取代基组中任一个或多个可以连接形成环。显而易见的,这些取代基之间也可以都不连接形成环。

[0111] 在本文中,“相邻的取代基 $R_a, R_b, R_c, R_{N1}, R_{C1}$ 和 R_{C2} 能任选地连接形成环”,旨在表示其中相邻的取代基组,例如,两个取代基 R_a 之间,两个取代基 R_b 之间,两个取代基 R_c 之间,取代基 R_a 和 R_b 之间,取代基 R_a 和 R_c 之间,取代基 R_b 和 R_c 之间,取代基 R_a 和 R_{N1} 之间,取代基 R_b 和 R_{N1} 之间,取代基 R_a 和 R_{C1} 之间,取代基 R_a 和 R_{C2} 之间,取代基 R_b 和 R_{C1} 之间,取代基 R_b 和 R_{C2} 之间,以及 R_{C1} 和 R_{C2} 之间,这些取代基组中任一个或多个可以连接形成环。显而易见的,这些取代基之间也可以都不连接形成环。

[0112] 根据本发明的一个实施例,其中, L_b 具有由式1Ba-1Bd表示的结构:



[0114] Z 选自自由 $O, S, Se, NR, CRRR$ 和 $SiRR$ 组成的组;当同时存在两个 R 时,两个 R 是相同或不同的;

[0115] 在式1Ba中, X_3-X_8 每次出现相同或不同地选自 CR_x ;

[0116] 在式1Bb中, X_1 和 X_4-X_8 每次出现相同或不同地选自 CR_x ;

[0117] 在式1Bc和式1Bd中, X_1-X_2 和 X_5-X_8 每次出现相同或不同地选自 CR_x ;

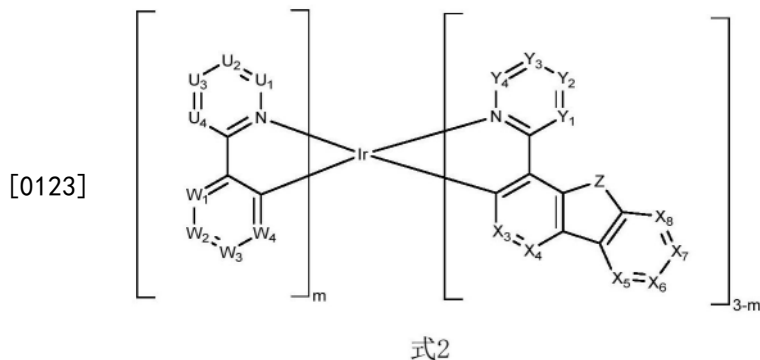
[0118] Y_1-Y_4 每次出现相同或不同地选自 CR_y 或 N ;

[0119] R, R_x, R_y ,每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组:氢,氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基,取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基,取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基,取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基,取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基,取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基,酰基,羰基,羧酸基,酯基,氰基,异氰基,羟基,巯基,亚磺酰基,磺酰基,膦基,及其组合;

[0120] 相邻的取代基 R, R_x, R_y 能任选地连接形成环。

[0121] 在该实施例中，“相邻的取代基 R, R_x, R_y 能任选地连接形成环”，旨在表示其中相邻的取代基组，例如，两个取代基 R 之间，两个取代基 R_x 之间，两个取代基 R_y 之间，两个取代基 R_y 和 R_x 之间，这些取代基组中任一个或多个可以连接形成环。显而易见的，这些取代基之间也可以都不连接形成环。

[0122] 根据本发明的一个实施例，其中，所述的金属配合物具有由式2表示的结构：



[0124] 其中，

[0125] m 选自1或2；当 $m=1$ 时，两个 L_b 是相同或不同的；当 $m=2$ 时，两个 L_a 是相同或不同的；

[0126] Z 选自由 O, S, Se, NR, CRR 和 $SiRR$ 组成的组；当同时存在两个 R 时，两个 R 是相同或不同的；

[0127] X_3-X_8 每次出现相同或不同地选自 CR_x ；

[0128] Y_1-Y_4 每次出现相同或不同地选自 CR_y 或 N ；

[0129] U_1-U_4 每次出现相同或不同地选自 CR_u 或 N ；

[0130] W_1-W_4 每次出现相同或不同地选自 CR_w 或 N ；

[0131] R, R_x, R_y, R_u, R_w 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组：氢，氘，卤素，取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基，取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基，取代或未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基，取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基，取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基，取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基，取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基，取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基，取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基，取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基，取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基，取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基，取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基，酰基，羰基，羧酸基，酯基，氰基，异氰基，羟基，巯基，亚磺酰基，磺酰基，膦基，及其组合；

[0132] 取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基， R_u 是取代或未取代的1-20个碳原子的烷基，取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基，或其组合，且所有所述 R_u 碳原子数的总和至少是4；

[0133] R_x 中至少有一个是氰基；

[0134] 相邻的取代基 R, R_x, R_y, R_u 能任选地连接形成环。

[0135] 在该实施例中，“相邻的取代基 R, R_x, R_y, R_u 能任选地连接形成环”，旨在表示其中相邻的取代基组，例如，两个取代基 R 之间，两个取代基 R_x 之间，两个取代基 R_y 之间，两个取代基 R_u 之间，两个取代基 R_y 和 R_x 之间，这些取代基组中任一个或多个可以连接形成环。显而易见

的,这些取代基之间也可以都不连接形成环。

[0136] 根据本发明的一个实施例,其中,Z选自O和S。

[0137] 根据本发明的一个实施例,其中,Z是O。

[0138] 根据本发明的一个实施例,其中,所述 R_x 中一个是氰基,另外至少还有一个 R_x 选自以下组成的组:氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基,取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基,取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基,取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基,取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基,取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基,酰基,羰基,羧酸基,酯基,氰基,异氰基,羟基,巯基,亚磺酰基,磺酰基,膦基,及其组合。

[0139] 根据本发明的一个实施例,其中,所述 R_x 中一个是氰基,另外至少还有一个 R_x 选自以下组成的组:氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基,取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基,取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基,氰基,羟基,巯基,及其组合。

[0140] 根据本发明的一个实施例,其中,所述 R_x 中一个是氰基,另外至少还有一个 R_x 选自以下组成的组:氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,及其组合。

[0141] 根据本发明的一个实施例,其中,所述 R_x 中一个是氰基,另外至少还有一个 R_x 选自以下组成的组:取代或未取代的具有6-15个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-15个碳原子的杂芳基,及其组合。

[0142] 根据本发明的一个实施例,其中,所述 R_x 中一个是氰基,另外至少还有一个 R_x 选自取代或未取代的具有6-12个碳原子的芳基。

[0143] 根据本发明的一个实施例,其中,所述 R_x 中一个是氰基,另外至少还有一个 R_x 选自以下组成的组:氟,氘,甲基,氘代甲基,氘代异丙基,环己基,氘代环己基,苯基,氘代苯基,甲基苯基,氘代甲基苯基。

[0144] 根据本发明的一个实施例,其中, X_5 - X_8 的 CR_x 中,至少有一个是 CR_x ,且所述 R_x 是氰基。

[0145] 根据本发明的一个实施例, X_7 - X_8 的 CR_x 中至少有一个是 CR_x ,且所述 R_x 是氰基;

[0146] 根据本发明的一个实施例, X_7 是 CR_x ,且所述 R_x 是氰基。

[0147] 根据本发明的一个实施例, X_8 是 CR_x ,且所述 R_x 是氰基。

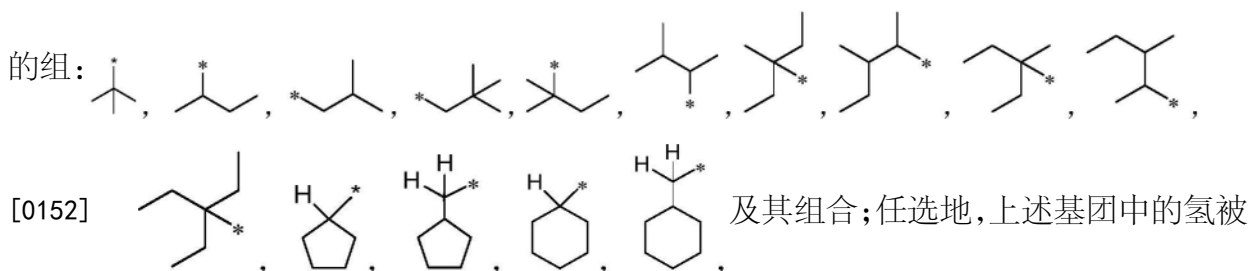
[0148] 根据本发明的一个实施例,其中, U_1 - U_4 每次出现相同或不同地是 CR_u , R_u 中至少有一个选自取代或未取代的1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,或其组合,且所有所述 R_u 碳原子数的总和至少是4。

[0149] 根据本发明的一个实施例,其中, U_1 - U_4 每次出现相同或不同地选自N或 CR_u ,且至少有一个是 CR_u ,且至少有一个是 CR_u , R_u 是取代或未取代的1-20个碳原子的烷基,取代或未取

代的具有3-20个环碳原子的环烷基,或其组合,且所述 R_u 碳原子数总和至少是4。

[0150] 根据本发明的一个实施例,其中, R_u 中至少一个选自取代或未取代的具有4-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有4-20个碳原子的环烷基,或其组合。

[0151] 根据本发明的一个实施例, R_u 中至少一个选自自由取代或未取代的下述取代基组成



部分或完全氘代;

[0153] 其中“*”表示所述取代基与碳的连接位置。

[0154] 根据本发明的一个实施例,其中, R_u 中至少一个选自取代或未取代的具有4-6个碳原子的烷基,取代或未取代的具有4-6个碳原子的环烷基,或其组合。

[0155] 根据本发明的一个实施例,其中, U_2 或 U_3 是 CR_u ,且所述 R_u 选自取代或未取代的具有4-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有4-20个碳原子的环烷基,或其组合。

[0156] 根据本发明的一个实施例,其中, U_2 或 U_3 是 CR_u , R_u 每次出现可以相同或不同,所述 R_u 选自取代或未取代的具有4-6个碳原子的烷基,取代或未取代的具有4-6个碳原子的环烷基,或其组合。

[0157] 根据本发明的一个实施例,其中, U_2 和 U_3 是 CR_u ,且所述 R_u 每次出现相同或不同地选自取代或未取代的1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,或其组合,且其中至少一个 R_u 取代基的碳原子数大于或等于4。

[0158] 根据本发明的一个实施例,其中, U_1 和 U_4 是 CR_u , R_u 选自氢,氘,甲基和氘代甲基。

[0159] 根据本发明的一个实施例,其中, W_1 - W_4 每次出现相同或不同地是 CR_w , Y_1 - Y_4 每次出现相同或不同地是 CR_y , R_w 和 R_y 每次出现相同或不同地选自自由以下组成的组:氢,氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,及其组合。

[0160] 根据本发明的一个实施例, R_w 和 R_y 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组:氢,氘,取代或未取代的具有1-10个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-10个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有6-10个碳原子的芳基,及其组合。

[0161] 根据本发明的一个实施例, R_w 和 R_y 每次出现时相同或不同地选自自由以下组成的组:氢,氘,取代或未取代的具有1-10个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-10个环碳原子的环烷基,及其组合。

[0162] 根据本发明的一个实施例,其中, W_1 - W_4 每次出现相同或不同地是 CR_w ,至少一个 R_w 是选自自由以下组成的组:氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,及其组合;和/或 Y_1 - Y_4 每次出现相同或不同地是 CR_y ,至少一个 R_y 是选自自由以下组成的组:氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取

代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,及其组合。

[0163] 根据本发明的一个实施例,其中,R是取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基。

[0164] 根据本发明的一个实施例,其中,R选自甲基或氘代甲基。

[0165] 根据本发明的一个实施例,其中, L_a 每次出现时相同或不同地选自由 L_{a1} - L_{a206} 组成的组,其中 L_{a1} - L_{a206} 的具体结构见权利要求17所示。

[0166] 根据本发明的一个实施例,其中, L_b 每次出现时相同或不同地选自由 L_{b1} - L_{b972} 组成的组,其中 L_{b1} - L_{b972} 的具体结构见权利要求18所示。

[0167] 根据本发明的一个实施例,其中,金属配合物具有 $Ir(L_a)_2L_b$ 的结构,两个 L_a 相同; L_a 选自 L_{a1} - L_{a206} 组成的组,其中 L_{a1} - L_{a206} 的具体结构见权利要求17所示; L_b 选自 L_{b1} - L_{b972} 组成的组,其中 L_{b1} - L_{b972} 的具体结构见权利要求18所示。

[0168] 根据本发明的一个实施例,其中,金属配合物选自由金属配合物1至金属配合物448组成的组,其中金属配合物1至金属配合物448的具体结构见权利要求19所示。

[0169] 根据本发明的一个实施例,还公开了一种电致发光器件,其包括:阳极,阴极,以及设置在阳极和阴极之间的有机层,所述有机层至少有一层包含前述任一实施例所述的金属配合物。

[0170] 根据本发明的一个实施例,其中,所述电致发光器件中包含所述金属配合物的所述有机层是发光层。

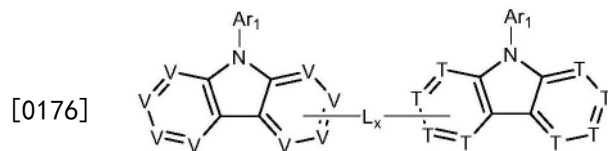
[0171] 根据本发明的一个实施例,其中,所述电致发光器件中发光层发射绿光。

[0172] 根据本发明的一个实施例,其中,所述电致发光器件的发光层中进一步包含至少一种第一主体化合物。

[0173] 根据本发明的一个实施例,其中,所述电致发光器件的发光层中进一步包含至少一种第一主体化合物和至少一种第二主体化合物。

[0174] 根据本发明的一个实施例,其中,所述电致发光器件中主体化合物中的至少一种包含至少一种选自由以下组成的组的化学基团:苯,吡啶,噻啶,三嗪,咪唑,氮杂咪唑,吡啶咪唑,二苯并噻吩,氮杂二苯并噻吩,二苯并呋喃,氮杂二苯并呋喃,二苯并硒吩,三亚苯,氮杂三亚苯,芴,硅芴,萘,喹啉,异喹啉,喹啉,喹啉啉,菲,氮杂菲,及其组合。

[0175] 根据本发明的一个实施例,其中,第一主体化合物具有由式3表示的结构:



式3

[0177] 其中,

[0178] L_x 每次出现相同或不同地选自单键,取代或未取代的具有1-20个碳原子的亚烷基,取代或未取代的具有3-20个碳原子的亚环烷基,取代或未取代的具有6-20个碳原子的亚芳基,取代或未取代的具有3-20个碳原子的亚杂芳基,或其组合;

[0179] V每次出现时相同或不同地选自C, CR_v 或N,且V中至少一个为C,且与 L_x 连接;

[0180] T每次出现时相同或不同地选自C,CR_t或N,且T中至少一个为C,并与L_x连接;

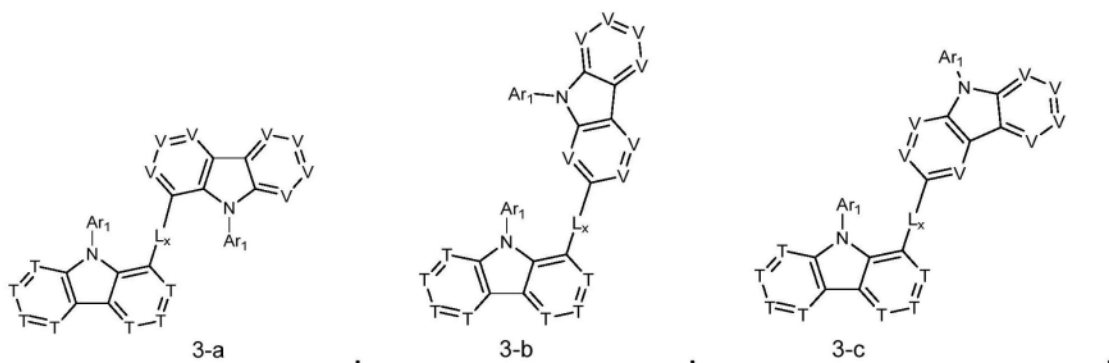
[0181] R_v和R_t每次出现时相同或不同地选自以下组成的组:氢,氘,卤素,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基,取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基,取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基,取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基,取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基,取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基,取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基,取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基,取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基,酰基,羰基,羧酸基,酯基,氰基,异氰基,羟基,巯基,亚磺酰基,磺酰基,膦基,及其组合;

[0182] Ar₁每次出现时相同或不同地选自取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基,取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基,或其组合;

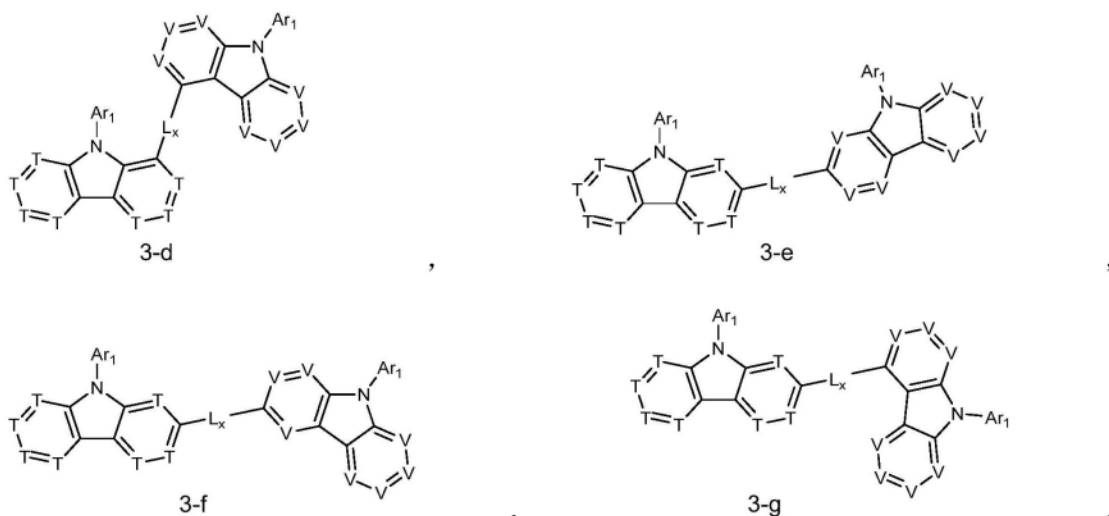
[0183] 相邻的取代基R_v和R_t能任选地连接形成环。

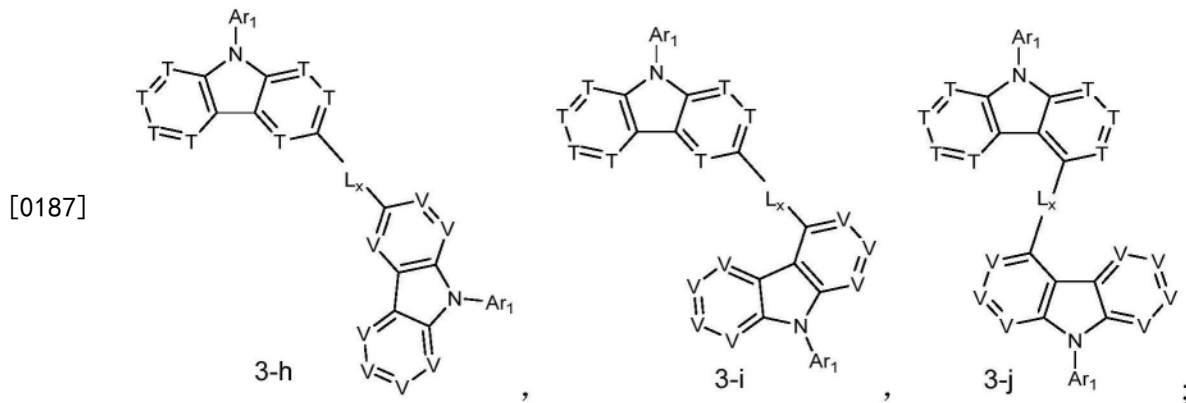
[0184] 在该实施例,“相邻的取代基R_v和R_t能任选地连接形成环”,旨在表示其中相邻的取代基组,例如,两个取代基R_v之间,两个取代基R_t之间,两个取代基R_v和R_t之间,这些取代基组中任一个或多个可以连接形成环。显而易见的,这些取代基之间也可以都不连接形成环。

[0185] 根据本发明的一个实施例,其中,第二主体化合物具有由式3-a至式3-j之一表示的结构:



[0186]





[0188] 其中,

[0189] L_x 每次出现相同或不同地选自单键, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的亚烷基, 取代或未取代的具有3-20个碳原子的亚环烷基, 取代或未取代的具有6-20个碳原子的亚芳基, 取代或未取代的具有3-20个碳原子的亚杂芳基, 或其组合;

[0190] V每次出现时相同或不同地选自 CR_V 或N, 且V中至少一个为C, 且与 L_x 连接;

[0191] T每次出现时相同或不同地选自 CR_T 或N, 且T中至少一个为C, 并与 L_x 连接;

[0192] R_V 和 R_T 每次出现时相同或不同地选自以下组成的组: 氢, 氘, 卤素, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷基, 取代或未取代的具有3-20个环碳原子的环烷基, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的杂烷基, 取代或未取代的具有3-20个环原子的杂环基, 取代或未取代的具有7-30个碳原子的芳烷基, 取代或未取代的具有1-20个碳原子的烷氧基, 取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳氧基, 取代或未取代的具有2-20个碳原子的烯基, 取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基, 取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基, 取代或未取代的具有3-20个碳原子的烷硅基, 取代或未取代的具有6-20个碳原子的芳基硅烷基, 取代或未取代的具有0-20个碳原子的氨基, 酰基, 羰基, 羧酸基, 酯基, 氰基, 异氰基, 羟基, 巯基, 亚磺酰基, 磺酰基, 膦基, 及其组合;

[0193] Ar_1 每次出现时相同或不同地选自取代或未取代的具有6-30个碳原子的芳基, 取代或未取代的具有3-30个碳原子的杂芳基, 或其组合;

[0194] 相邻的取代基 R_V 和 R_T 能任选地连接形成环。

[0195] 根据本发明的一个实施例, 其中, 所述电致发光器件中金属配合物掺杂在所述第一主体化合物和第二主体化合物中, 金属配合物重量占发光层总重量的1%~30%。

[0196] 根据本发明的一个实施例, 其中, 所述电致发光器件中金属配合物掺杂在所述第一主体化合物和第二主体化合物中, 金属配合物重量占发光层总重量的3%-13%。

[0197] 根据本发明的另一实施例, 还公开了一种化合物组合, 其包含一种金属配合物, 所述金属配合物的具体结构为前述任一实施例所示。

[0198] 与其他材料组合

[0199] 本发明描述的用于有机发光器件中的特定层的材料可以与器件中存在的各种其它材料组合使用。这些材料的组合在美国专利申请US2016/0359122A1中第0132-0161段有详细描述, 其全部内容通过引用并入本文。其中描述或提及的材料是可以与本文所公开的化合物组合使用的材料的非限制性实例, 并且本领域技术人员可以容易地查阅文献以鉴别可以组合使用的其它材料。

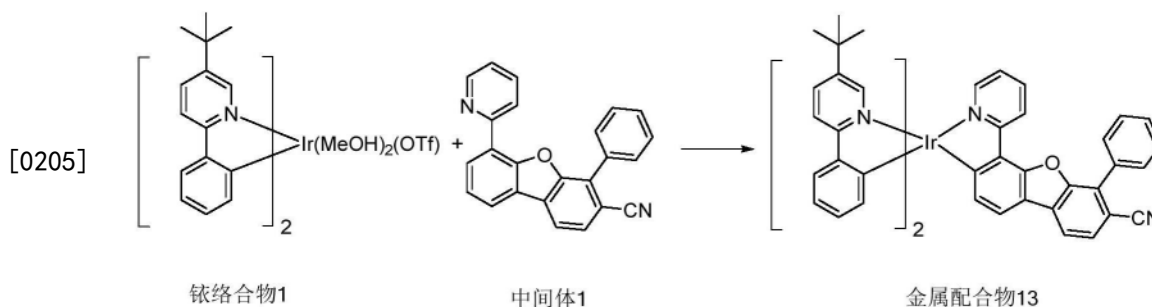
[0200] 本文描述为可用于有机发光器件中的具体层的材料可以与存在于所述器件中的多种其它材料组合使用。举例来说,本文所公开的发光掺杂剂可以与多种主体、输送层、阻挡层、注入层、电极和其它可能存在的层结合使用。这些材料的组合在美国专利申请US2015/0349273A1中的第0080-0101段有详细描述,其全部内容通过引用并入本文。其中描述或提及的材料是可以与本文所公开的化合物组合使用的材料的非限制性实例,并且本领域技术人员可以容易地查阅文献以鉴别可以组合使用的其它材料。

[0201] 在材料合成的实施例中,除非另外说明,否则所有反应都在氮气保护下进行。所有反应溶剂都无水并且按从商业来源原样使用。合成产物使用本领域常规的一种或多种设备(包括但不限于Bruker的核磁共振仪,Shimadzu的液相色谱仪、液相色谱-质谱联用仪、气相色谱-质谱联用仪、差示扫描量热仪,上海棱光技术的荧光分光光度计,武汉科思特的电化学工作站,安徽贝意克的升华仪等),以本领域技术人员熟知的方法进行了结构确认和特性测试。在器件的实施例中,器件的特性也是使用本领域常规的设备(包括但不限于Angstrom Engineering生产的蒸镀机,苏州弗士达生产的光学测试系统、寿命测试系统,北京量拓生产的椭偏仪等),以本领域技术人员熟知的方法进行测试。由于本领域技术人员均知晓上述设备使用、测试方法等相关内容,能够确定地、不受影响地获得样品的固有数据,因此上述相关内容在本篇专利中不再展开赘述。

[0202] 材料合成实施例:

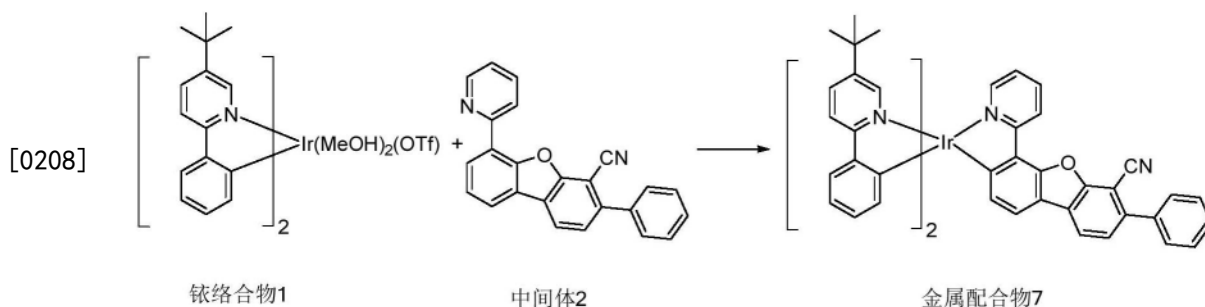
[0203] 本发明化合物的制备方法不做限制,典型但非限制地以下述化合物为示例,其合成路线和制备方法如下:

[0204] 合成实施例1:金属配合物13的合成



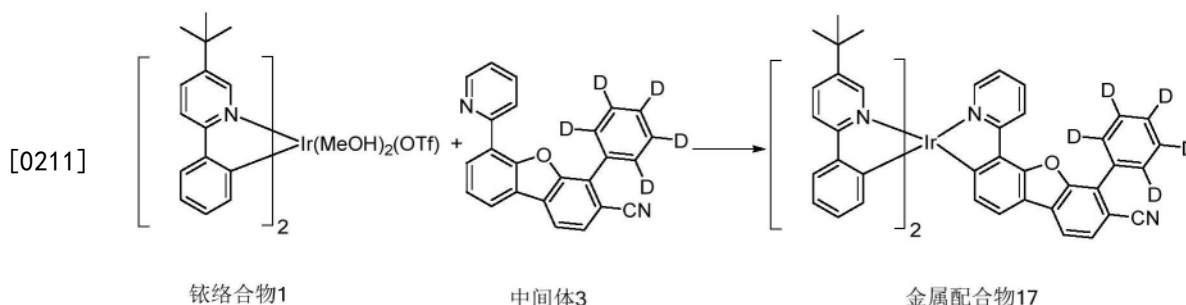
[0206] 干燥250mL圆底烧瓶中依次加入中间体1 (1.6g, 4.6mmol), 络合物1 (3.18g, 3.8mmol), 2-乙氧基乙醇 (30mL) 和DMF (30mL), N_2 保护下, 90℃加热反应144h。待反应冷却后, 硅藻土过滤。甲醇, 正己烷分别洗涤2次, 硅藻土上方黄色固体用二氯甲烷溶解, 收集有机相, 减压浓缩, 用柱色谱法纯化, 得到黄色固体金属配合物13 (0.82g, 22.3%产率)。该产物确定为目标产物, 分子量为958.3。

[0207] 合成实施例2:金属配合物7的合成



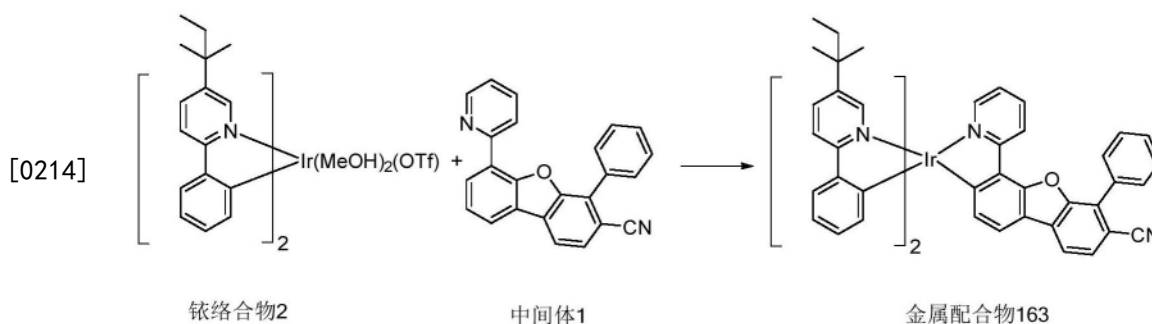
[0209] 干燥250mL圆底烧瓶中依次加入中间体2 (1.0g, 2.9mmol), 铱络合物1 (2.2g, 2.6mmol), 2-乙氧基乙醇 (40mL) 和DMF (40mL), N_2 保护下, 100℃加热反应120h。待反应冷却后, 硅藻土过滤。甲醇, 正己烷分别洗涤2次, 硅藻土上方黄色固体用二氯甲烷溶解, 收集有机相, 减压浓缩, 用柱色谱法纯化, 得到黄色固体金属配合物7 (0.45g, 18.1%产率)。该产物确定为目标产物, 分子量为958.3。

[0210] 合成实施例3: 金属配合物17的合成



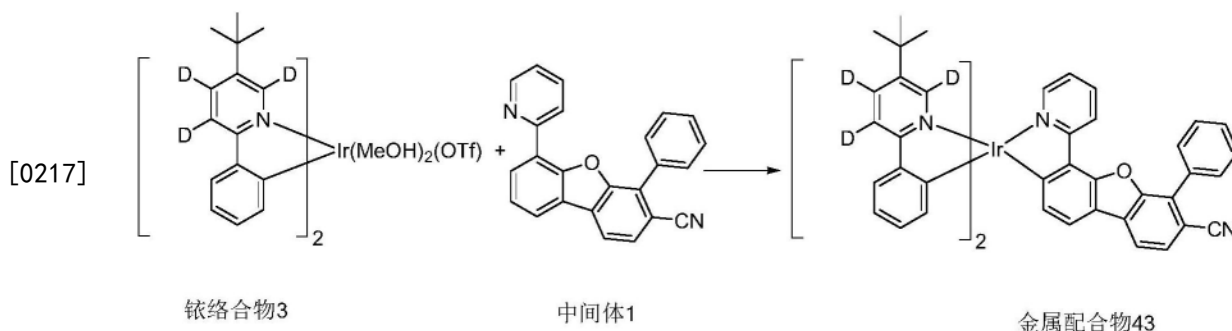
[0212] 干燥250mL圆底烧瓶中依次加入中间体2 (1.2g, 4.5mmol), 铱络合物1 (2.5g, 3.0mmol), 2-乙氧基乙醇 (30mL) 和DMF (30mL), N_2 保护下, 90℃加热反应144h。待反应冷却后, 硅藻土过滤。甲醇, 正己烷分别洗涤2次, 硅藻土上方黄色固体用二氯甲烷溶解, 收集有机相, 减压浓缩, 用柱色谱法纯化, 得到黄色固体金属配合物17 (0.73g, 25.3%产率)。该产物确定为目标产物, 分子量为963.3。

[0213] 合成实施例4: 金属配合物163的合成



[0215] 干燥250mL圆底烧瓶中依次加入中间体1 (1.3g, 3.7mmol), 铱络合物2 (2.2g, 2.6mmol), 2-乙氧基乙醇 (30mL) 和DMF (30mL), N_2 保护下, 90℃加热反应144h。待反应冷却后, 硅藻土过滤。甲醇, 正己烷分别洗涤2次, 硅藻土上方黄色固体用二氯甲烷溶解, 收集有机相, 减压浓缩, 用柱色谱法纯化, 得到黄色固体金属配合物163 (0.78g, 30.4%产率)。该产物确定为目标产物, 分子量为986.3。

[0216] 合成实施例5: 金属配合物43的合成



[0218] 干燥250mL圆底烧瓶中依次加入中间体1 (1.5g, 4.9mmol), 络合物3 (3.0g, 3.6mmol), 2-乙氧基乙醇 (30mL) 和DMF (30mL), N_2 保护下, 95°C加热反应144h。待反应冷却后, 硅藻土过滤。甲醇, 正己烷分别洗涤2次, 硅藻土上方黄色固体用二氯甲烷溶解, 收集有机相, 减压浓缩, 用柱色谱法纯化, 得到黄色固体金属配合物43 (1.23g, 35.4%产率)。该产物结构确定为目标产物, 分子量为964.4。

[0219] 本领域技术人员应该知晓, 上述制备方法只是一个示例性的例子, 本领域技术人员能够通过对其改进从而获得本发明的其他化合物结构。

[0220] 器件实施例1

[0221] 首先, 清洗玻璃基板, 其具有80nm厚的铟锡氧化物 (ITO) 阳极, 然后用氧等离子体和UV臭氧处理。处理后, 将基板在手套箱中烘干以除去水分。然后将基板安装在基板支架上并装入真空中。下面指定的有机层, 在真空度约为 10^{-8} 托的情况下以0.2-2埃/秒的速率通过热真空蒸镀依次在ITO阳极上进行蒸镀。化合物HI中用作空穴注入层 (HIL)。化合物HT用作空穴传输层 (HTL)。化合物H1用作电子阻挡层 (EBL)。然后本发明金属配合物13掺杂在化合物H1和化合物H2中共沉积用作发光层 (EML)。在EML上, 化合物H2作为空穴阻挡层 (HBL)。在HBL上, 化合物ET和8-羟基喹啉-锂 (Liq) 共沉积作为电子传输层 (ETL)。最后, 蒸镀1nm厚度的8-羟基喹啉-锂 (Liq) 作为电子注入层, 并且蒸镀120nm的铝作为阴极。然后将该器件转移回手套箱, 并用玻璃盖和吸湿剂封装以完成该器件。

[0222] 器件实施例3

[0223] 器件实施例3的实施方式与器件实施例1相同, 除了在发光层 (EML) 中用化合物金属配合物17代替本发明金属配合物13。

[0224] 器件比较例1

[0225] 器件比较例1的实施方式与器件实施例1相同, 除了在发光层 (EML) 中用化合物GD1代替本发明金属配合物13。

[0226] 器件比较例2

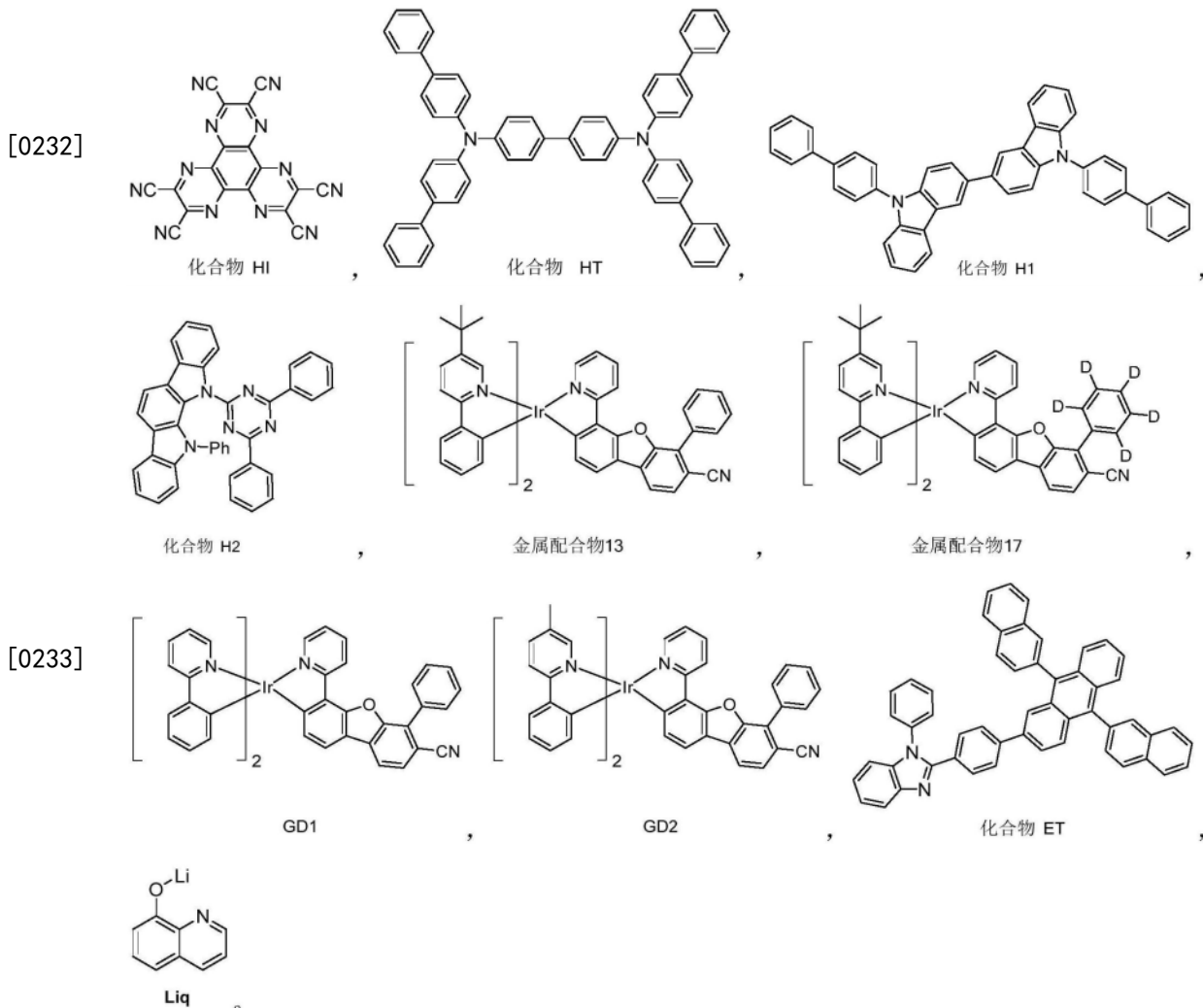
[0227] 器件比较例2的实施方式与器件实施例1相同, 除了在发光层 (EML) 中用化合物GD2代替本发明金属配合物13。

[0228] 详细的器件层结构和厚度如下表所示。其中所用材料不止一种的层, 是不同化合物以其记载的重量比例掺杂得到的。

[0229] 表1实施例1和比较例1-2的器件结构

器件 ID	HIL	HTL	EBL	EML	HBL	ETL
实施例 1	化合物 HI (100 Å)	化合物 HT (350 Å)	化合物 H1 (50 Å)	化合物 H1: 化合物 H2: 金属配合物 13 (46:46:8) (400 Å)	化合物 H2 (50 Å)	化合物 ET : Liq (40:60) (350 Å)
实施例 3	化合物 HI (100 Å)	化合物 HT (350 Å)	化合物 H1 (50 Å)	化合物 H1: 化合物 H2: 金属配合物 17 (46:46:8) (400 Å)	化合物 H2 (50 Å)	化合物 ET : Liq (40:60) (350 Å)
比较例 1	化合物 HI (100 Å)	化合物 HT (350 Å)	化合物 H1 (50 Å)	化合物 H1: 化合物 H2: 化合物 GD1 (46:46:8) (400 Å)	化合物 H2 (50 Å)	化合物 ET : Liq (40:60) (350 Å)
比较例 2	化合物 HI (100 Å)	化合物 HT (350 Å)	化合物 H1 (50 Å)	化合物 H1: 化合物 H2: 化合物 GD2 (46:46:8) (400 Å)	化合物 H2 (50 Å)	化合物 ET : Liq (40:60) (350 Å)

[0231] 器件中使用的材料结构如下所示:



[0234] 测量了器件的IVL特性。在1000cd/m²下测量了器件的CIE数据,最大发射波长λ_{max},半高全宽(FWHM)。材料的蒸镀温度(Sub T)是在真空度约为10⁻⁸托的情况下以0.2埃/秒的速率通过热真空蒸镀金属配合物时测试得到的温度。寿命(LT97)数据是在80mA/cm²恒定电流下进行测试。这些数据被记录并展示在表2中。

[0235] 表2实施例1和实施例3和比较例1-2的器件数据

器件 ID	Sub T (°C)	CIE (x, y)	λ_{\max} (nm)	FWHM (nm)	LT 97 (h)
实施例 1	258	(0.349, 0.630)	533	37.6	17.20
实施例 3	252	(0.345, 0.633)	532	36.3	21.40
比较例 1	291	(0.335, 0.638)	528	40.9	11.35
比较例 2	287	(0.346, 0.631)	531	40.6	14.90

[0237] 从表2的数据可以看出:实施例1的半峰宽比器件比较例1窄了3.3nm,较比较例2窄了3.0nm。同时,器件实施例1的蒸镀温度较比较例1低了近33°C,较比较例2低了近29°C。更低的蒸镀温度有利于发明配合物在蒸镀过程中保持稳定,同时蒸镀温度低有利于材料的产业化应用,可以降低能耗。此外,实施例1的寿命相比于比较例1,增幅高达51.5%;相比于比较例2,器件实施例1的寿命也增加了15.4%。同样地,实施例3将金属络合物17应用于器件中,实施例3相比于比较例1和比较例2,半峰宽分别窄了4.6nm和4.3nm,蒸镀温度分别降低了近40°C和37°C,同时器件寿命分别提升了88.5%和43.6%,即具有更窄的半峰宽、更低的蒸镀温度、以及大幅度提升的优异器件寿命,器件的综合性能有大幅度提升。

[0238] 实施例1中用到的金属配合物13与比较例1和比较例2中用到的金属配合物GD1和金属配合物GD2具有相同的配体 L_b ,只是 L_a 配体上取代基的有差别,在实施例中采用具有特定取代的 L_a 配体相比与没有取代或只有甲基取代的对比例,具有更窄的半峰宽,更低的蒸镀温度,以及更优异的器件寿命。实施例3用到的金属配合物17进一步在 L_b 配体上具有氬取代,进一步提升了器件的各项性能,最终实现器件综合性能的提升。

[0239] 器件实施例2

[0240] 器件实施例2的实施方式与器件实施例1相同,除了在发光层(EML)中用金属配合物7代替本发明金属配合物13。

[0241] 器件比较例3

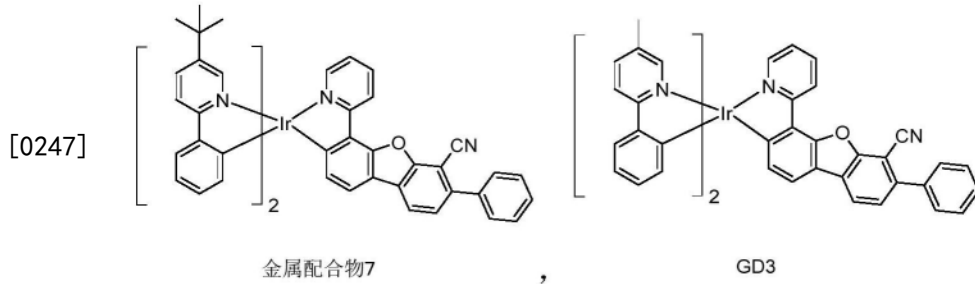
[0242] 器件比较例3的实施方式与器件实施例1相同,除了在发光层(EML)中用化合物GD3代替本发明金属配合物13。

[0243] 详细的器件层结构和厚度如下表所示。其中所用材料不止一种的层,是不同化合物以其记载的重量比例掺杂得到的。

[0244] 表3实施例2和比较例3的器件结构

器件 ID	HIL	HTL	EBL	EML	HBL	ETL
实施例 2	化合物 HI (100 Å)	化合物 HT (350 Å)	化合物 H1 (50 Å)	化合物 H1: 化合物 H2: 金属配合物 7 (46:46:8) (400 Å)	化合物 H2 (50 Å)	化合物 ET: Liq (40:60) (350 Å)
比较例 3	化合物 HI (100 Å)	化合物 HT (350 Å)	化合物 H1 (50 Å)	化合物 H1: 化合物 H2: 化合物 GD3 (46:46:8) (400 Å)	化合物 H2 (50 Å)	化合物 ET: Liq (40:60) (350 Å)

[0246] 器件中新使用的材料结构如下所示:



[0248] 测量了器件的IVL特性。在 1000 cd/m^2 下测量了器件的CIE数据,最大发射波长 λ_{max} ,半高全宽(FWHM)。材料的蒸镀温度(Sub T)是在真空度约为 10^{-8} 托的情况下以 0.2 埃/秒 的速率通过热真空蒸镀金属配合物时测试得到的温度。寿命(LT97)数据是在 80 mA/cm^2 恒定电流下进行测试。这些数据被记录并展示在表4中。

[0249] 表4实施例2和比较例3的器件数据

[0250]

器件 ID	Sub T ($^{\circ}\text{C}$)	CIE (x, y)	λ_{max} (nm)	FWHM (nm)	LT 97 (h)
实施例 2	270	(0.354, 0.626)	534	43.7	17.70
比较例 3	296	(0.352, 0.627)	534	46.0	15.20

[0251] 从表4的数据可以看出:器件实施例2的半峰宽比器件比较例3窄了 2.3 nm ,蒸镀温度较比较例3低了近 26°C 。此外,实施例2的寿命相比于比较例3增加了 16.4% 。实施例2中用到的金属配合物7与比较例3中用到的金属配合物GD3具有相同的配体 L_b ,只是 L_a 配体上取代基的有差别,实施例2较比较例3具有更窄的半峰宽,更低的蒸镀温度,以及更优异的器件寿命,再次证明了本发明的优异效果。

[0252] 升华数据

[0253] 使用安徽贝意克设备有限公司生产的型号为BOF-A1-3-60升华仪升华了本发明金属配合物和比较化合物。将本发明的金属配合物13、金属配合物17、金属配合物7和参比配合物GD1、GD2和GD3分别放置在升华仪的升华管中,使用分子泵将升华管真空度降至 $9.9 \times 10^{-4} \text{ pa}$ 以下,加热至 $300^{\circ}\text{C} \sim 370^{\circ}\text{C}$,稳定升华得到金属配合物。这些材料升华收率的数据记录并展示在表5中。其中,升华收率是升华后质量与升华前质量的比值。

[0254] 表5升华数据

[0255]

化合物编号	升华收率(%)
金属配合物13	85.3
金属配合物17	88.8
金属配合物7	71.1
化合物GD1	32.5
化合物GD2	58.9
化合物GD3	48.8

[0256] 从表5的数据可以看出:本发明的在 L_a 配体上具有特定取代的金属配合物13和金属配合物17表现出优良的升华性能,其升华收率分别达到了 85.3% 和 88.8% ,相比参比化合物GD1的升华收率(32.8%)分别有了近 1.6 和 1.7 倍的提高。同样的,相比参比化合物GD2的升华收率(58.9%)分别增加了 44.8% 和 50.7% 。此外,金属配合物7的升华收率达到

71.1%，相比参比化合物GD3的升华收率(48.8%)增加了45.6%。结果表明，本发明所公开在L_a配体结构中引入特定的(环)烷基取代的金属配合物相比与没有该特定取代的金属络合物，具有高的升华收率，升华收率的大幅度提升是不可预期的，且升华收率的提升对于金属配合物实现工业量产具有重大意义。

[0257] 器件实施例4

[0258] 器件实施例4的实施方式与器件实施例1相同，除了在发光层(EML)中用化合物H3代替化合物H2，且发光层中比例为化合物H1:化合物H3:金属配合物13=63:31:6。

[0259] 器件比较例4

[0260] 器件比较例4的实施方式与器件实施例4相同，除了在发光层(EML)中用化合物GD2代替本发明金属配合物13。

[0261] 器件比较例5

[0262] 器件比较例5的实施方式与器件实施例4相同，除了在发光层(EML)中用化合物GD4代替本发明金属配合物13。

[0263] 器件比较例6

[0264] 器件比较例6的实施方式与器件实施例4相同，除了在发光层(EML)中用化合物GD5代替本发明金属配合物13。

[0265] 器件比较例7

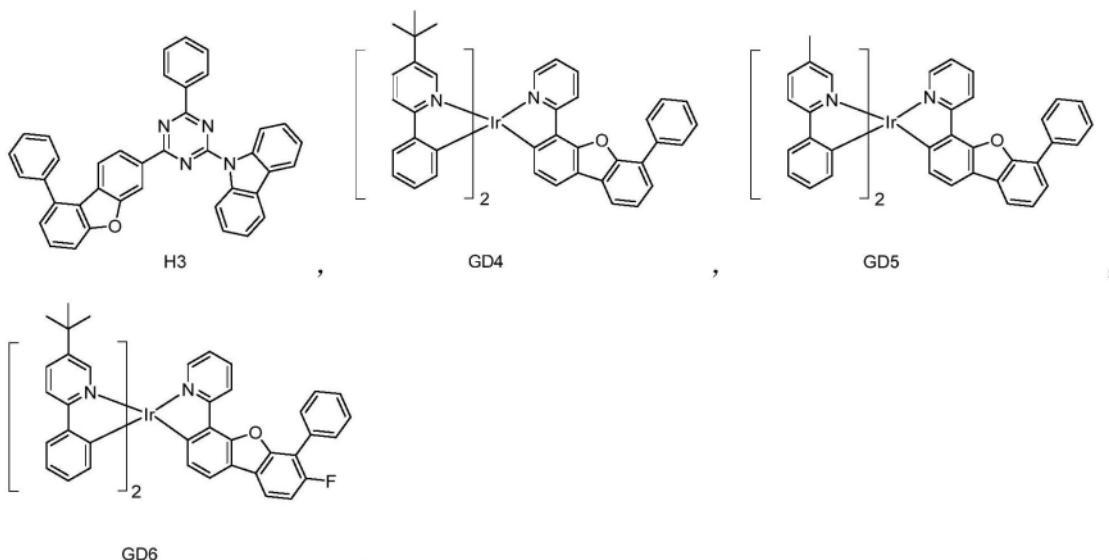
[0266] 器件比较例7的实施方式与器件实施例4相同，除了在发光层(EML)中用化合物GD6代替本发明金属配合物13。

[0267] 详细的器件层结构和厚度如下表6所示。其中所用材料不止一种的层，是不同化合物以其记载的重量比例掺杂得到的。

[0268] 表6实施例4和比较例4-7的器件结构

器件 ID	HIL	HTL	EBL	EML	HBL	ETL
实施例 4	化合物 HI (100 Å)	化合物 HT (350 Å)	化合物 H1 (50 Å)	化合物 H1: 化合物 H3: 金属配合物 13(63:31:6) (400 Å)	化合物 H2 (50 Å)	化合物 ET: Liq (40:60) (350 Å)
[0269] 比较例 4	化合物 HI (100 Å)	化合物 HT (350 Å)	化合物 H1 (50 Å)	化合物 H1: 化合物 H3: GD2(63:31:6) (400 Å)	化合物 H2 (50 Å)	化合物 ET: Liq (40:60) (350 Å)
比较例 5	化合物 HI (100 Å)	化合物 HT (350 Å)	化合物 H1 (50 Å)	化合物 H1: 化合物 H3: GD4(63:31:6) (400 Å)	化合物 H2 (50 Å)	化合物 ET: Liq (40:60) (350 Å)
比较例 6	化合物 HI (100 Å)	化合物 HT (350 Å)	化合物 H1 (50 Å)	化合物 H1: 化合物 H3: GD5(63:31:6) (400 Å)	化合物 H2 (50 Å)	化合物 ET: Liq (40:60) (350 Å)
[0270] 比较例 7	化合物 HI (100 Å)	化合物 HT (350 Å)	化合物 H1 (50 Å)	化合物 H1: 化合物 H3: GD6(63:31:6) (400 Å)	化合物 H2 (50 Å)	化合物 ET: Liq (40:60) (350 Å)

[0271] 器件中新使用的材料结构如下所示：



[0273] 测量了器件的IVL特性。在1000cd/m²下测量了器件的CIE数据,最大发射波长 λ_{\max} ,半高全宽(FWHM)。寿命(LT95)为初始发光亮度为10000cd/m²衰减至初始时的95%所需要的时间。这些数据被记录并展示在表7中。

[0274] 表7实施例4和比较例4-7的器件数据

器件 ID	CIE (x, y)	λ_{\max} (nm)	FWHM (nm)	LT95 (h)
实施例 4	(0.346, 0.632)	531	37.5	1159
比较例 4	(0.342, 0.634)	529	37.9	829
比较例 5	(0.353, 0.623)	531	58.9	1001
比较例 6	(0.352, 0.623)	528	60.3	910
比较例 7	(0.355, 0.621)	531	59.5	940

[0276] 从表7的数据可以看出:在10000cd/m²下,实施例4的寿命达到了1159h,相对于比较例4至比较7均有大幅度提升,相对于L_a配体上没有特定取代基的比较例4提高了39.8%,相对于L_b配体上没有氰基取代的比较例5和比较例7,分别提高了近15.8%和23.3%,相对于L_a和L_b均没有特定取代基的比较例6提高了27.4%。此外,实施例4的半峰宽仅仅只有37.5nm,远低于比较例5和比较例7的59nm左右,这在绿色磷光器件里是非常难得的。

[0277] 当L_b配体没有氰基取代基时,L_a配体上有特定取代的比较例5相对于L_a配体上没有特定取代的比较例6器件寿命仅仅提高了10%;而当L_b配体上具有氰基取代基时,L_a配体上有特定取代的实施例4相对于L_a配体上没有特定取代的比较例4器件寿命提高了39.8%。同样地,在具有相同L_a的情况下,L_b配体具有氰基取代的实施例4相比于L_b配体没有氰基取代的比较例5器件寿命提升了15.8%,而L_b配体上具有氟取代的比较例7相比于比较例5器件寿命反而略有降低。以上结果均表明本发明的包含具有特定取代的L_a配体和具有氰基取代的L_b配体的金属络合物可以取得优异的器件的性能,尤其是大幅度提升器件寿命。

[0278] 综上所述,本发明的包含具有特定取代L_a和L_b配体的金属配合物可用作电致发光器件发光层中的发光材料,当其与不同结构的主体材料组合使用时,均可以取得优异的器件性能。本发明所公开包含特定取代的L_a和L_b配体的金属配合物能够保持相关器件半峰宽处于业内高水平,同时还能够大幅改善器件的寿命。另外,本发明的金属配合物在升华收率

和蒸镀温度方面也有很大改善,在工业应用中拥有巨大优势和广阔的前景。

[0279] 应当理解,这里描述的各种实施例仅作为示例,并无意图限制本发明的范围。因此,如本领域技术人员所显而易见的,所要求保护的本发明可以包括本文所述的具体实施例和优选实施例的变化。本文所述的材料和结构中的许多可以用其它材料和结构来取代,而不脱离本发明的精神。应理解,关于本发明为何起作用的各种理论无意为限制性的。

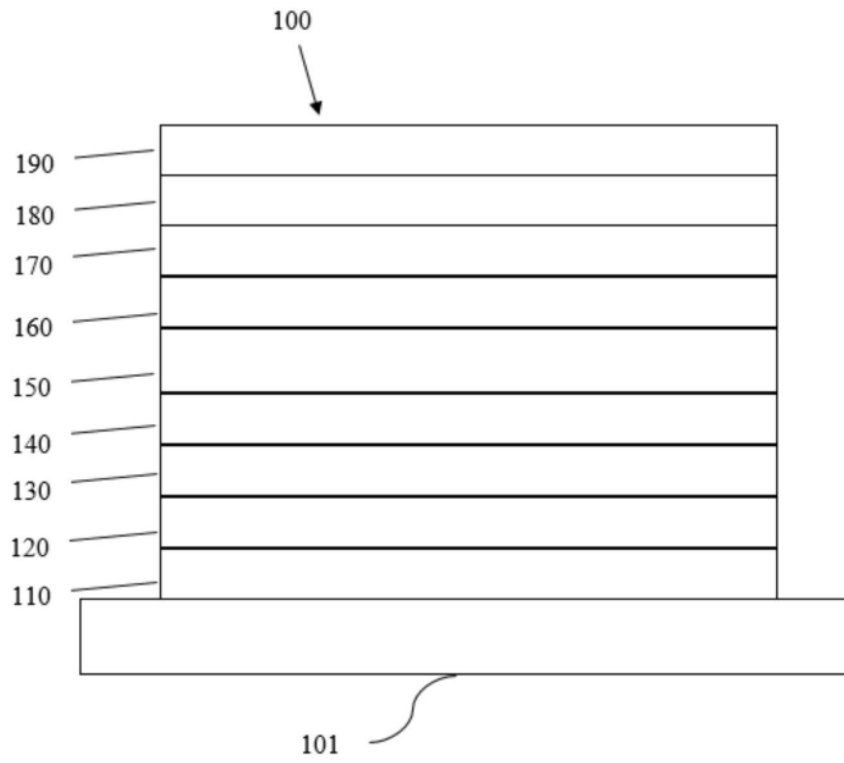


图1

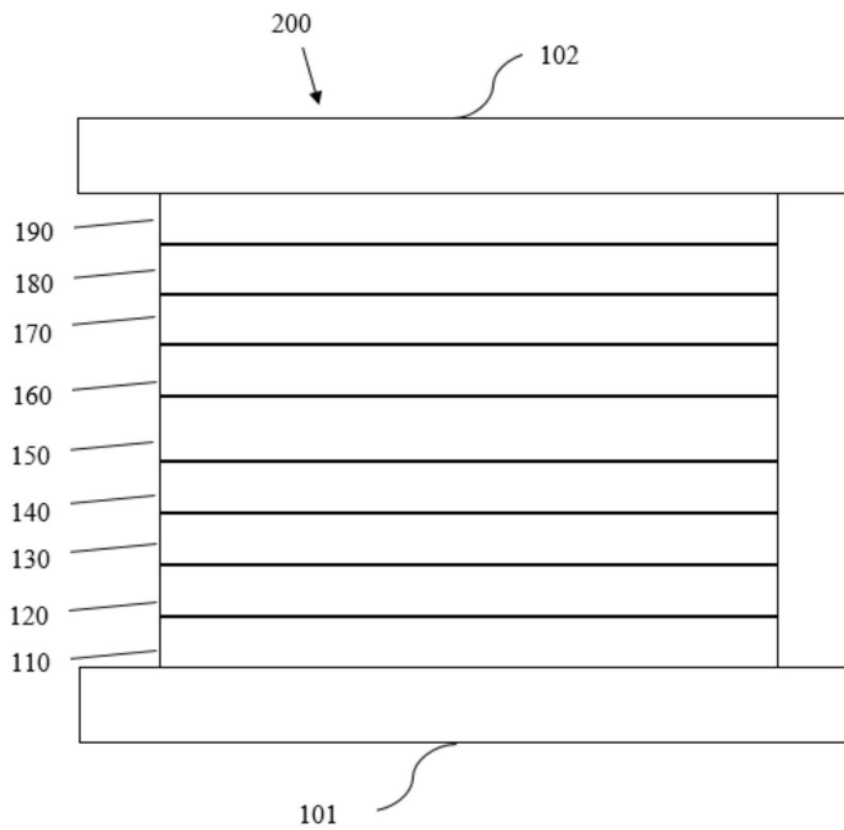


图2