



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 112079871 A

(43) 申请公布日 2020.12.15

(21) 申请号 202010540840.2

C09K 11/06 (2006.01)

(22) 申请日 2020.06.15

H01L 51/54 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

(30) 优先权数据

10-2019-0070074 2019.06.13 KR

10-2020-0050329 2020.04.24 KR

(71) 申请人 三星电子株式会社

地址 韩国京畿道

(72) 发明人 裴惠珍 闵珉植 权殷淑 金相模

李河燮 田顺玉 金钟秀 南成虎

崔玹豪

(74) 专利代理机构 北京市柳沈律师事务所

11105

代理人 王华芹 金拟黎

(51) Int. Cl.

C07F 15/00 (2006.01)

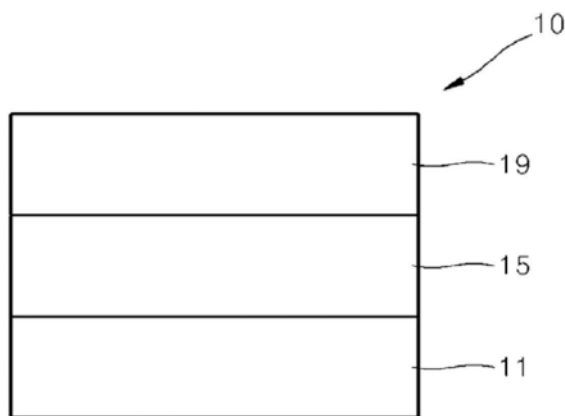
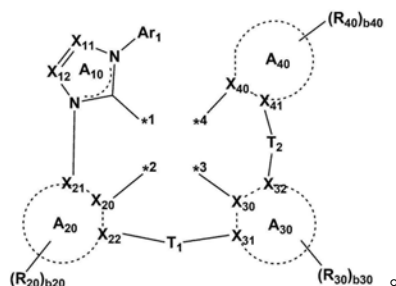
权利要求书22页 说明书73页 附图1页

(54) 发明名称

有机金属化合物、包括其的有机发光器件和包括所述有机金属化合物的诊断组合物

(57) 摘要

提供有机金属化合物、包括其的有机发光器件和包括所述有机金属化合物的诊断组合物，所述有机金属化合物由式1表示，其中式1中的L₁₁为由式1-1表示的配体，并且其它取代基的描述与本申请的详细描述中所描述的不同。〈式1〉M₁(L₁₁)_{n11}(L₁₂)_{n12} 〈式1-1〉



CN 112079871 A

1. 由式1表示的有机金属化合物:

<式1>

$$M_1 (L_{11})_{n_{11}} (L_{12})_{n_{12}}$$

其中, 在式1中,

M_1 为元素周期表的第一行过渡金属、元素周期表的第二行过渡金属、或元素周期表的第三行过渡金属,

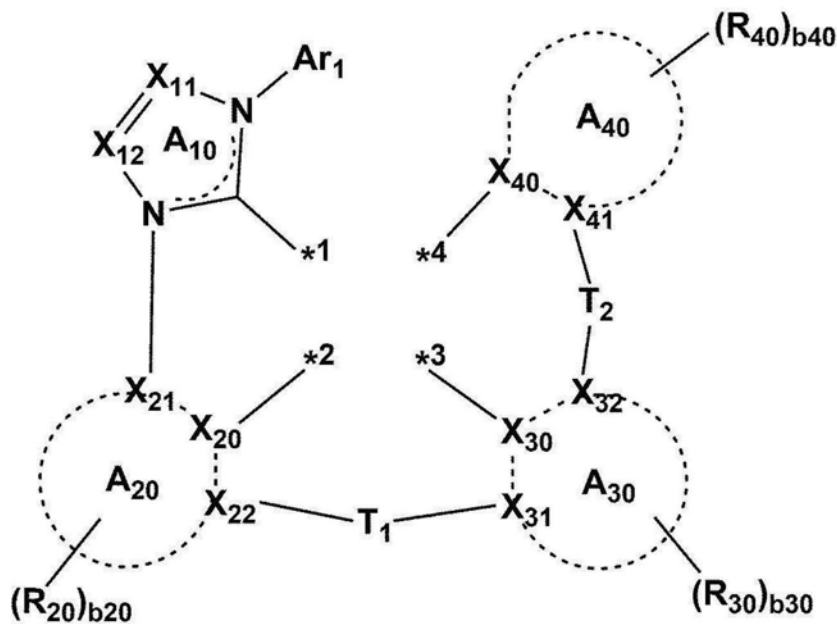
L_{11} 为由式1-1表示的配体,

L_{12} 为单齿配体或二齿配体,

n_{11} 为1, 和

n_{12} 为0、1或2;

<式1-1>



其中, 在式1-1中,

*1至*4各自表示与 M_1 的结合位点;

A_{10} 为含N的杂环基团,

A_{20} 、 A_{30} 和 A_{40} 各自独立地为 C_5 - C_{30} 碳环基团或 C_1 - C_{30} 杂环基团,

T_1 为单键、 $^*N[(L_1)_{a_1}-(R_1)_{b_1}]^*$ 、 $^*B(R_1)^*$ 、 $^*P(R_1)^*$ 、 $^*C(R_1)(R_2)^*$ 、 $^*Si(R_1)(R_2)^*$ 、 $^*Ge(R_1)(R_2)^*$ 、 $^*S^*$ 、 $^*Se^*$ 、 $^*O^*$ 、 $^*C(=O)^*$ 、 $^*S(=O)^*$ 、 $^*S(=O)_2^*$ 、 $^*C(R_1)=C(R_2)^*$ 、 $^*C(=S)^*$ 、或 $^*C\equiv C^*$,

T_2 为单键、 $^*N[(L_2)_{a_2}-(R_3)_{b_3}]^*$ 、 $^*B(R_3)^*$ 、 $^*P(R_3)^*$ 、 $^*C(R_3)(R_4)^*$ 、 $^*Si(R_3)(R_4)^*$ 、 $^*Ge(R_3)(R_4)^*$ 、 $^*S^*$ 、 $^*Se^*$ 、 $^*O^*$ 、 $^*C(=O)^*$ 、 $^*S(=O)^*$ 、 $^*S(=O)_2^*$ 、 $^*C(R_3)=C(R_4)^*$ 、 $^*C(=S)^*$ 、或 $^*C\equiv C^*$,

L_1 和 L_2 各自独立地为单键、取代或未取代的 C_5 - C_{30} 碳环基团、或者取代或未取代的 C_1 - C_{30} 杂环基团,

a_1 为1-3的整数, 并且当 a_1 为2或更大时, 两个或更多个 L_1 彼此相同或不同,

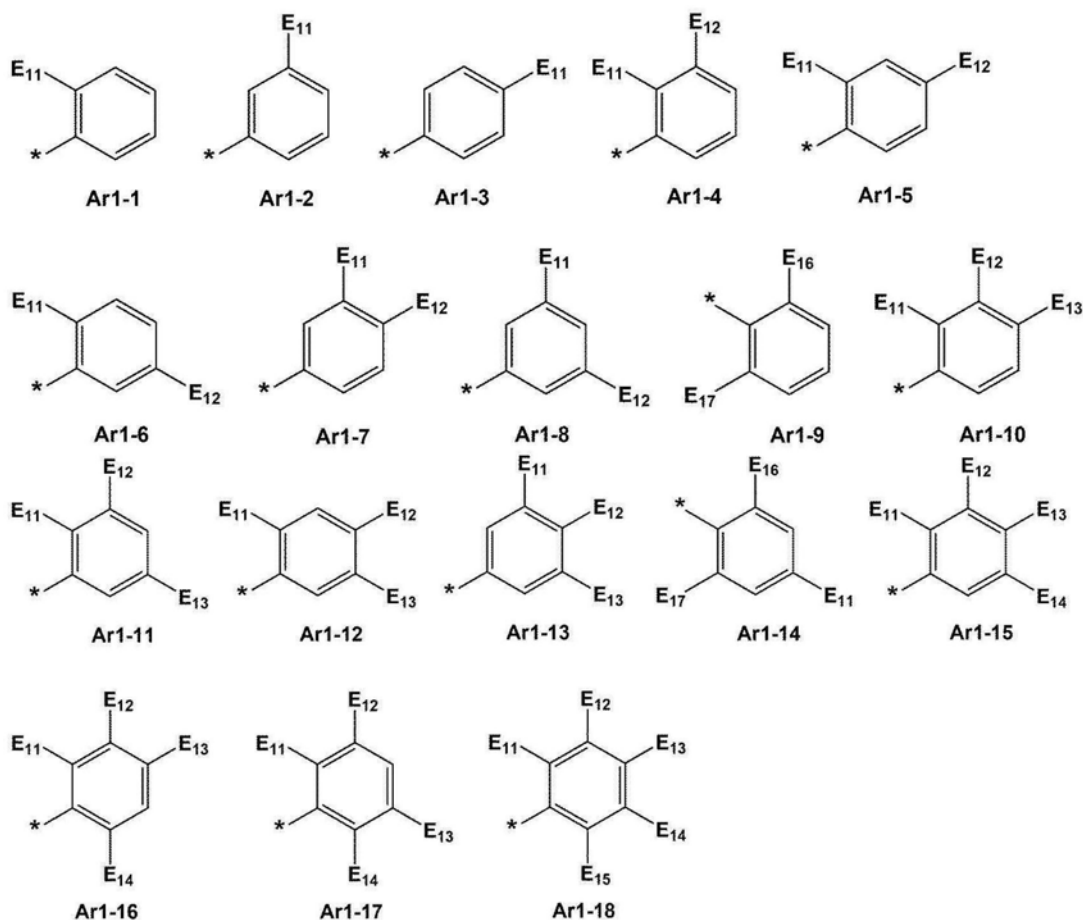
a_2 为1-3的整数, 并且当 a_2 为2或更大时, 两个或更多个 L_2 彼此相同或不同,

X_{11} 为C(R₁₁)或N, X_{12} 为C(R₁₂)或N,

X_{20} 为C或N, X_{30} 为C或N, X_{40} 为C或N,

X_{21} 、 X_{22} 、 X_{31} 、 X_{32} 和 X_{41} 各自独立地为C或N,和

Ar₁为取代或未取代的C₅-C₃₀碳环基团,并且当Ar₁为苯基团时,Ar₁由式Ar1-1至Ar1-18之一表示,



其中,在式Ar1-1至Ar1-18中,

E₁₁-E₁₅各自独立地为取代或未取代的C₁-C₆₀烷基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷硫基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烷基、取代或未取代的C₁-C₁₀杂环烷基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烯基、取代或未取代的C₂-C₁₀杂环烯基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳基、取代或未取代的C₇-C₆₀烷基芳基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳氧基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳硫基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳基、取代或未取代的C₂-C₆₀烷基杂芳基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳硫基、取代或未取代的单价非芳族稠合多环基团、或者取代或未取代的单价非芳族稠合杂多环基团,和

E₁₆和E₁₇各自独立地为取代或未取代的C₆-C₆₀烷基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷硫基、取代的C₃-C₁₀环烷基、未取代的C₇-C₁₀环烷基、取代或未取代的C₁-C₁₀杂环烷基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烯基、取代或未取代的C₂-C₁₀杂环烯基、取代的C₆-C₆₀芳基、未取代的C₇-C₆₀芳基、取代或未取代的C₇-C₆₀烷基芳基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳氧基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳硫基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳基、取代或未取代的C₂-C₆₀烷基杂芳基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳硫基、取代或未取代的单

价非芳族稠合多环基团、或者取代或未取代的单价非芳族稠合杂多环基团，

R_1 - R_4 、 R_{11} 、 R_{12} 、 R_{20} 、 R_{30} 和 R_{40} 各自独立地为氢、氘、-F、-Cl、-Br、-I、-SF₅、羟基、氰基、硝基、脒基、胂基、胺基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、取代或未取代的C₁-C₆₀烷基、取代或未取代的C₂-C₆₀烯基、取代或未取代的C₂-C₆₀炔基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷硫基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烷基、取代或未取代的C₁-C₁₀杂环烷基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烯基、取代或未取代的C₂-C₁₀杂环烯基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳基、取代或未取代的C₇-C₆₀烷基芳基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳氧基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳硫基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳基、取代或未取代的C₂-C₆₀烷基杂芳基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳硫基、取代或未取代的单价非芳族稠合多环基团、取代或未取代的单价非芳族稠合杂多环基团、-N(Q₁)(Q₂)、-Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)、-B(Q₆)(Q₇)、或-P(=O)(Q₈)(Q₉)，

相邻的 R_1 - R_4 、 R_{20} 、 R_{30} 和 R_{40} 的两个或更多个任选地连接在一起以形成取代或未取代的C₅-C₃₀碳环基团或者取代或未取代的C₁-C₃₀杂环基团，

b_1 和 b_3 各自独立地为1-5的整数，

当 b_1 为2或更大时，两个或更多个 R_1 彼此相同或不同，和当 b_3 为2或更大时，两个或更多个 R_3 彼此相同或不同，

b_{20} 、 b_{30} 和 b_{40} 各自独立地为1-10的整数，

当 b_{20} 为2或更大时，两个或更多个 R_{20} 彼此相同或不同，当 b_{30} 为2或更大时，两个或更多个 R_{30} 彼此相同或不同，和当 b_{40} 为2或更大时，两个或更多个 R_{40} 彼此相同或不同，

和'各自表示与相邻原子的结合位点，和

取代的C₅-C₃₀碳环基团、取代的C₁-C₃₀杂环基团、取代的C₁-C₆₀烷基、取代的C₆-C₆₀烷基、取代的C₂-C₆₀烯基、取代的C₂-C₆₀炔基、取代的C₁-C₆₀烷氧基、取代的C₁-C₆₀烷硫基、取代的C₃-C₁₀环烷基、取代的C₁-C₁₀杂环烷基、取代的C₃-C₁₀环烯基、取代的C₂-C₁₀杂环烯基、取代的C₆-C₆₀芳基、取代的C₇-C₆₀烷基芳基、取代的C₆-C₆₀芳氧基、取代的C₆-C₆₀芳硫基、取代的C₁-C₆₀杂芳基、取代的C₂-C₆₀烷基杂芳基、取代的C₁-C₆₀杂芳氧基、取代的C₁-C₆₀杂芳硫基、取代的单价非芳族稠合多环基团、和取代的单价非芳族稠合杂多环基团的至少一个取代基为：

氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、脒基、胂基、胺基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₆₀烷基、C₂-C₆₀烯基、C₂-C₆₀炔基、或C₁-C₆₀烷氧基；

各自被如下的至少一个取代的C₁-C₆₀烷基、C₂-C₆₀烯基、C₂-C₆₀炔基、或C₁-C₆₀烷氧基：氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、脒基、胂基、胺基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、单价非芳族稠合杂多环基团、-N(Q₁₁)(Q₁₂)、-Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅)、-B(Q₁₆)(Q₁₇)、-P(=O)(Q₁₈)(Q₁₉)、或其任意组合；

C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、或单价非芳族稠合杂多环基团；

各自被如下的至少一个取代的C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、或

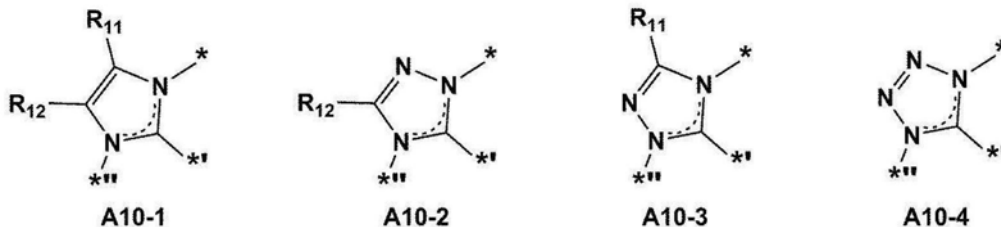
单价非芳族稠合杂多环基团: 氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、脒基、胼基、脞基、脞基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₆₀烷基、C₂-C₆₀烯基、C₂-C₆₀炔基、C₁-C₆₀烷氧基、C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、单价非芳族稠合杂多环基团、-N(Q₂₁)(Q₂₂)、-Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅)、-B(Q₂₆)(Q₂₇)、-P(=O)(Q₂₈)(Q₂₉)、或其任意组合;或

-N(Q₃₁)(Q₃₂)、-Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅)、-B(Q₃₆)(Q₃₇)、或-P(=O)(Q₃₈)(Q₃₉),

其中Q₁-Q₉、Q₁₁-Q₁₉、Q₂₁-Q₂₉和Q₃₁-Q₃₉各自独立地为氢, 氘, -F, -Cl, -Br, -I, 羟基, 氰基, 硝基, 脒基, 胼基, 脞基, 羧酸基团或其盐, 磺酸基团或其盐, 磷酸基团或其盐, C₁-C₆₀烷基, C₂-C₆₀烯基, C₂-C₆₀炔基, C₁-C₆₀烷氧基, C₃-C₁₀环烷基, C₁-C₁₀杂环烷基, C₃-C₁₀环烯基, C₂-C₁₀杂环烯基, C₆-C₆₀芳基, 被至少一个C₁-C₆₀烷基、C₆-C₆₀芳基、或其任意组合取代的C₆-C₆₀芳基, C₆-C₆₀芳氧基, C₆-C₆₀芳硫基, C₁-C₆₀杂芳基, 单价非芳族稠合多环基团, 单价非芳族稠合杂多环基团, 或其任意组合。

2. 如权利要求1所述的有机金属化合物, 其中M₁为Pt、Pd或Au。

3. 如权利要求1所述的有机金属化合物, 其中A₁₀为A10-1至A10-4之一:



其中, 在式A10-1至A10-4中,

R₁₁和R₁₂与关于权利要求1描述的相同, 和

*, *' 和 *'' 各自表示与相邻原子的结合位点。

4. 如权利要求1所述的有机金属化合物, 其中A₂₀、A₃₀和A₄₀各自独立地为:

苯基团、萘基团、蒽基团、菲基团、苯并[9,10]菲基团、芘基团、蒾基团、环戊二烯基团、1,2,3,4-四氢萘基团、咪唑基团、噁吩基团、噁咯基团、茛基团、茛基团、吡啶基团、咪唑基团、苯并咪唑基团、二苯并咪唑基团、苯并噁吩基团、二苯并噁吩基团、苯并噁咯基团、二苯并噁咯基团、氮杂茛基团、氮杂咪唑基团、氮杂二苯并咪唑基团、氮杂二苯并噁吩基团、氮杂二苯并噁咯基团、吡啶基团、噁吩基团、吡啶基团、吡啶基团、三嗪基团、喹啉基团、异喹啉基团、喹啉基团、喹啉基团、菲咯啉基团、吡咯基团、吡啶基团、咪唑基团、三唑基团、四唑基团、噁唑基团、异噁唑基团、噁唑基团、异噁唑基团、噁二唑基团、噁二唑基团、苯并吡啶基团、苯并咪唑基团、吡啶基团、苯并噁唑基团、苯并噁唑基团、苯并噁二唑基团、苯并噁二唑基团、苯并三唑基团、二氮杂茛基团、三氮杂茛基团、5,6,7,8-四氢异喹啉基团、或5,6,7,8-四氢喹啉基团。

5. 如权利要求1所述的有机金属化合物, 其中Ar₁为取代的苯基团、取代或未取代的萘基团、取代或未取代的蒽基团、取代或未取代的菲基团、取代或未取代的苯并[9,10]菲基团、取代或未取代的芘基团、或者取代或未取代的蒾基团, 和

当Ar₁为取代的苯基团时, Ar₁为由式Ar1-1至Ar1-18之一表示的基团。

脒基、胼基、脞基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₂₀烷基、C₁-C₂₀烷氧基、环戊基、环己基、环庚基、环辛基、金刚烷基、降苈烷基、降冰片烯基、环戊烯基、环己烯基、环庚烯基、苯基、萘基、苈基、菲基、蒽基、荧蒽基、苯并[9,10]菲基、芘基、蒽基、吡咯基、噻吩基、呋喃基、咪唑基、吡唑基、噻唑基、异噻唑基、噁唑基、异噁唑基、吡啶基、吡嗪基、嘧啶基、哒嗪基、异吡啶基、吡啶基、吡唑基、噁唑基、异噁唑基、三唑基、四唑基、噁二唑基、三嗪基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、苯并呋喃基、二苯并呋喃基、咪唑并吡啶基、咪唑并嘧啶基、或其任意组合；或

$-N(Q_1)(Q_2)$ 、 $-Si(Q_3)(Q_4)(Q_5)$ 、 $-B(Q_6)(Q_7)$ 、或 $-P(=O)(Q_8)(Q_9)$ ，

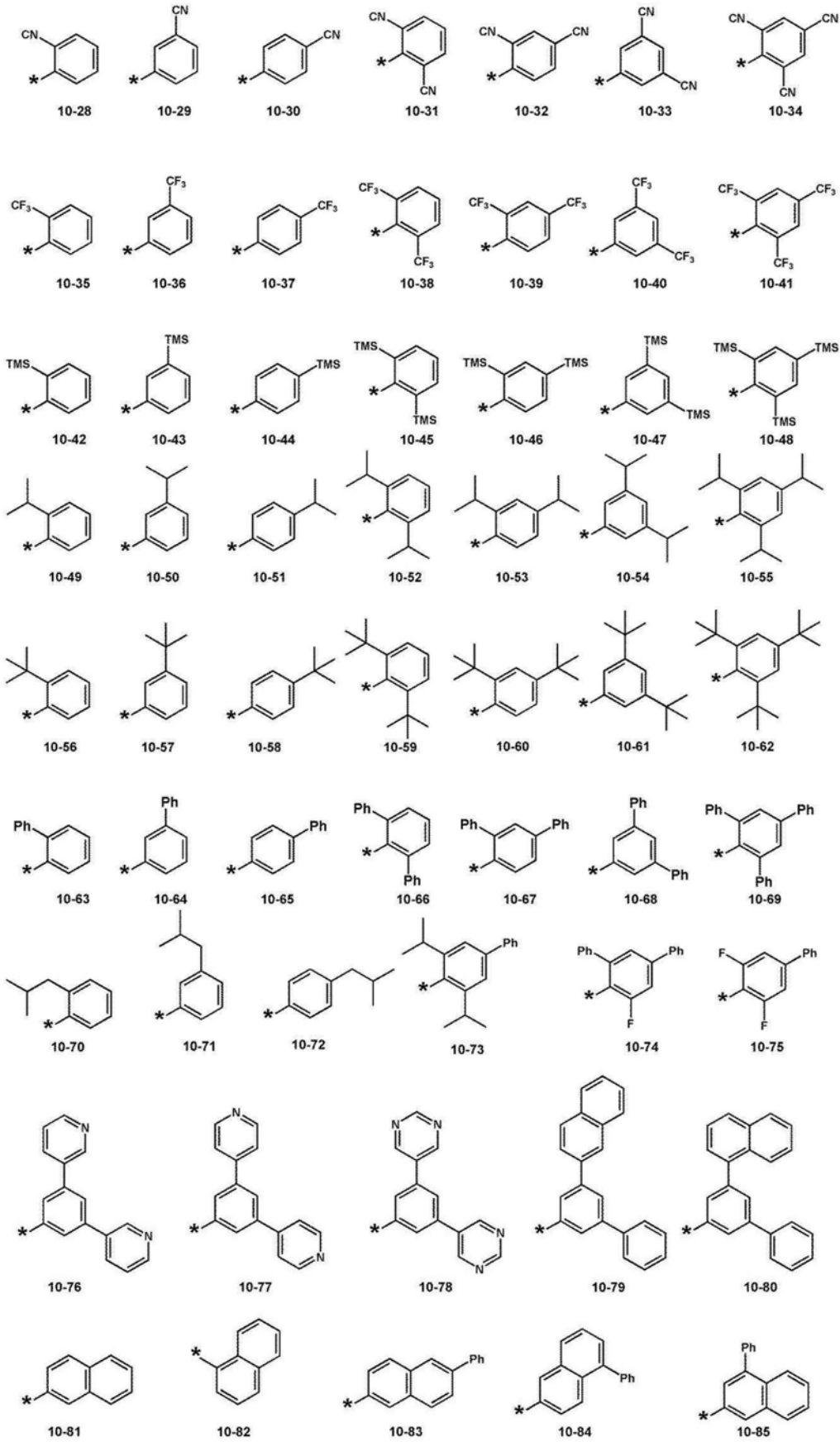
其中Q₁-Q₉各自独立地为：

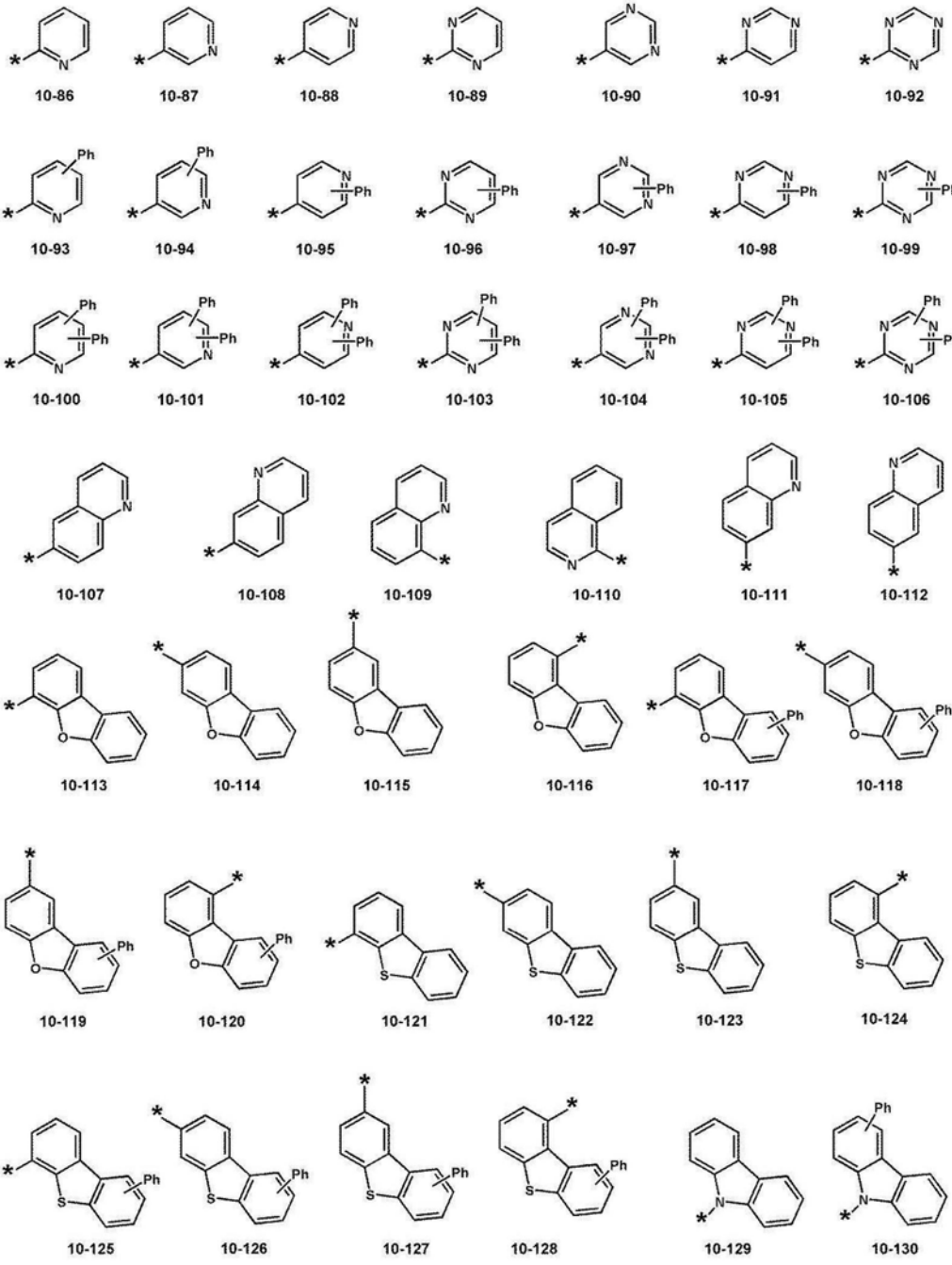
$-CH_3$ 、 $-CD_3$ 、 $-CD_2H$ 、 $-CDH_2$ 、 $-CH_2CH_3$ 、 $-CH_2CD_3$ 、 $-CH_2CD_2H$ 、 $-CH_2CDH_2$ 、 $-CHDC_3$ 、 $-CHDCD_2H$ 、 $-CHDCDH_2$ 、 $-CHDCD_3$ 、 $-CD_2CH_3$ 、 $-CD_2CD_3$ 、 $-CD_2CD_2H$ 、或 $-CD_2CDH_2$ ；

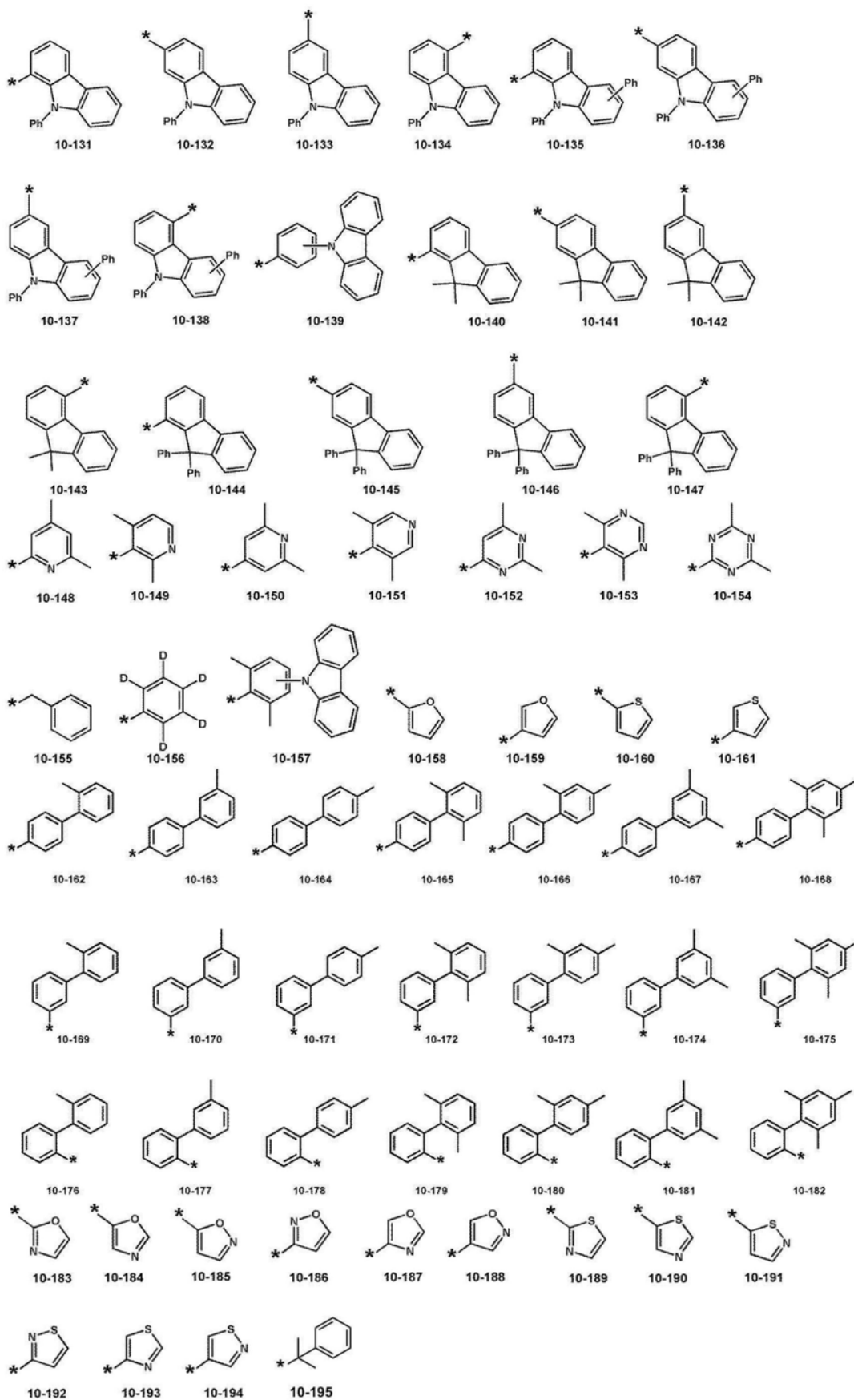
正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、正戊基、异戊基、仲戊基、叔戊基、苯基、或萘基；或

各自被如下取代的正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、正戊基、异戊基、仲戊基、叔戊基、苯基、或萘基：至少一个氘、C₁-C₁₀烷基、苯基、或其任意组合。

11. 如权利要求1所述的有机金属化合物，其中R₁-R₄、R₁₁、R₁₂、R₂₀、R₃₀和R₄₀各自独立地为氢、氘、以及式9-1至9-19和10-1至10-195之一：



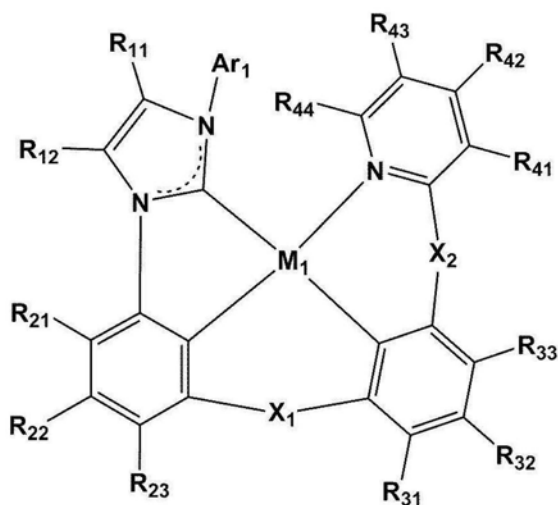




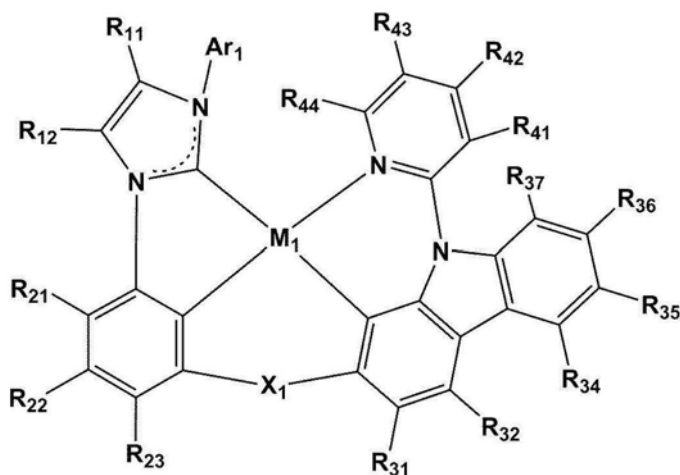
其中,在式9-1至9-19和10-1至10-195中,*表示与相邻原子的结合位点,Ph为苯基,并且TMS为三甲基甲硅烷基。

12. 如权利要求1所述的有机金属化合物,其中由式1表示的有机金属化合物由式2-1或2-2表示:

<式2-1>



<式2-2>



其中,在式2-1和2-2中,

M₁、Ar₁、R₁₁和R₁₂与权利要求1中描述的相同,

X₁为O或S,并且X₂为单键、O或S,

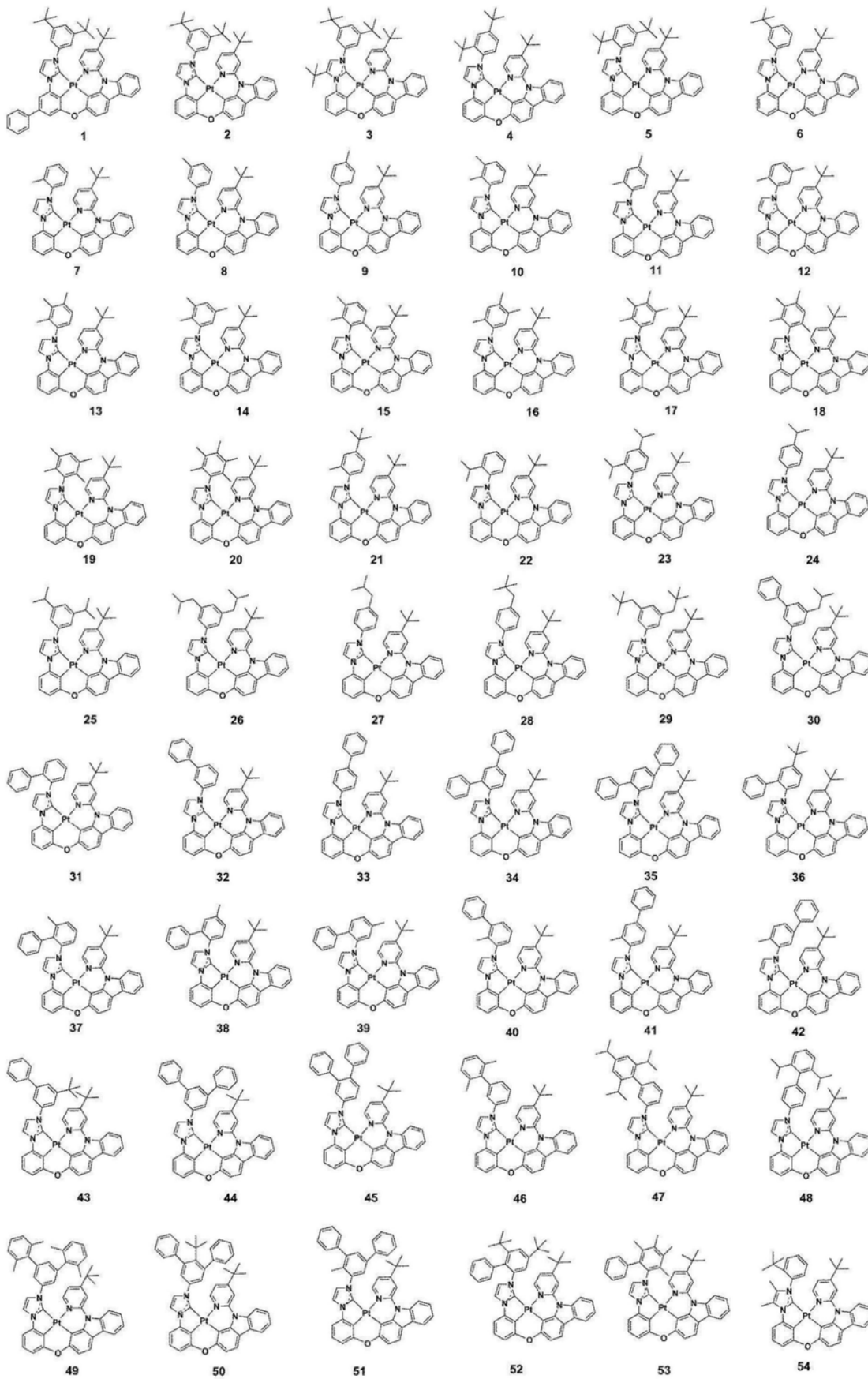
R₂₁-R₂₃各自独立地与在权利要求1中关于R₂₀描述的相同,

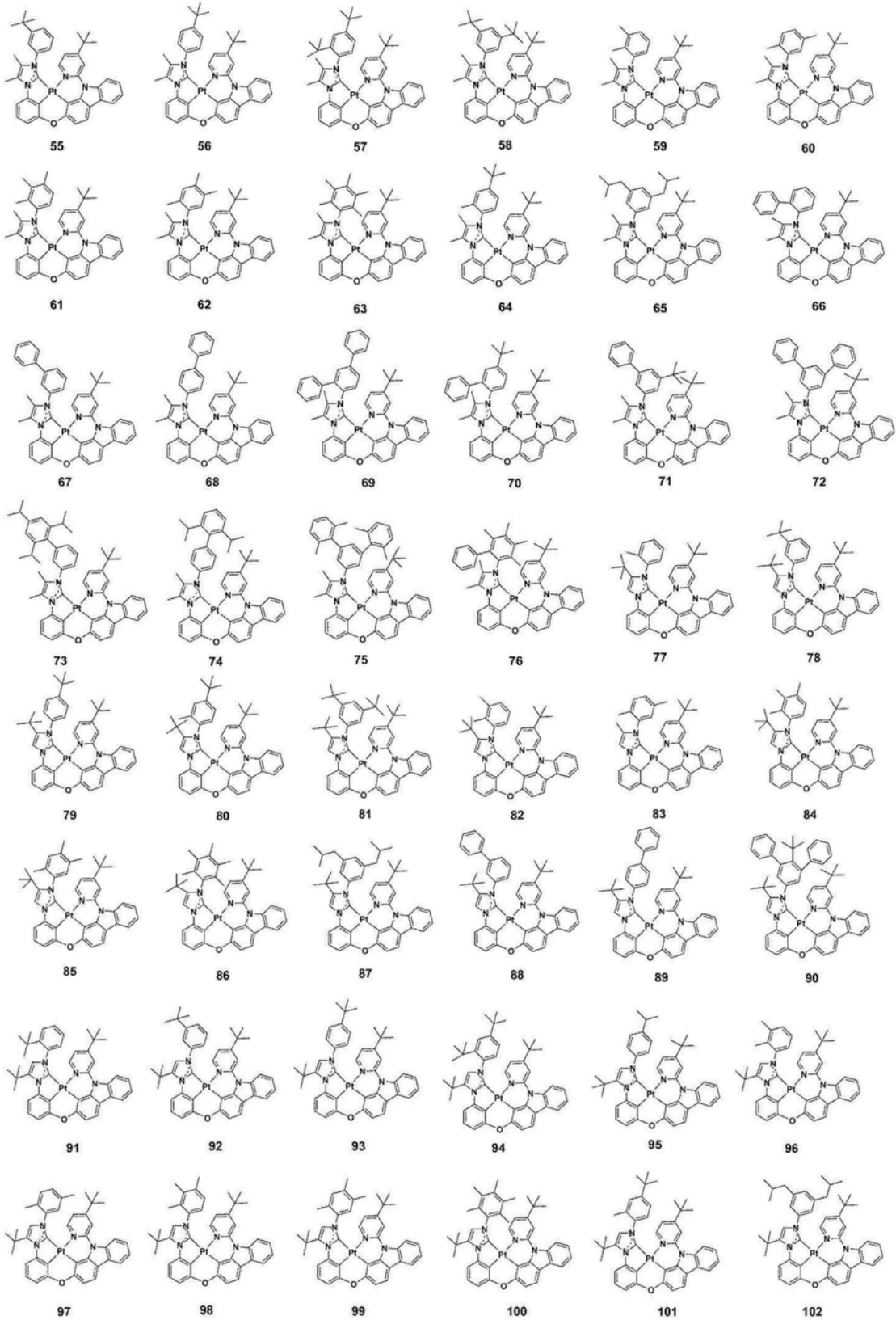
R₃₁-R₃₇各自独立地与在权利要求1中关于R₃₀描述的相同,

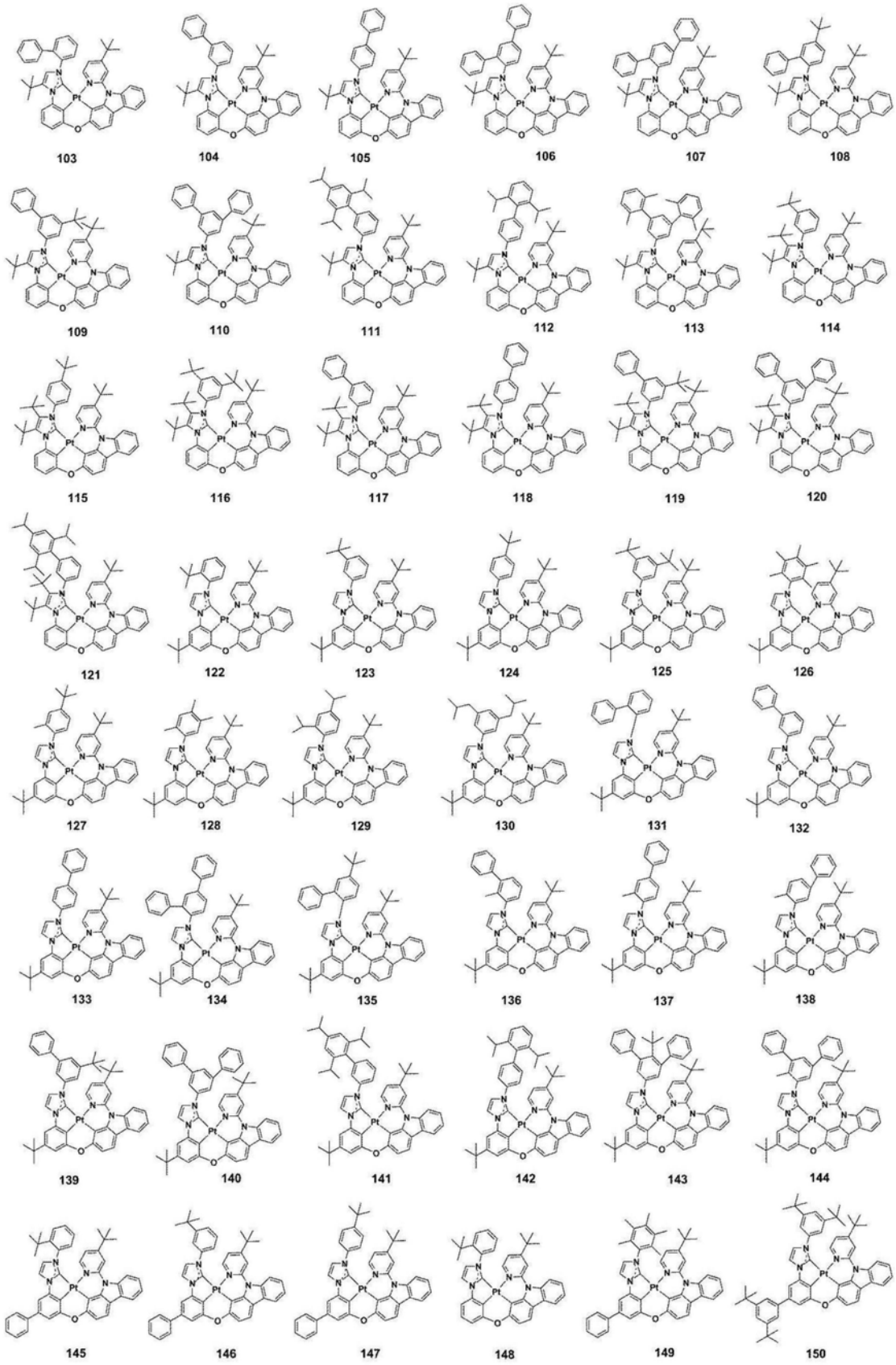
R₄₁-R₄₄各自独立地与在权利要求1关于R₄₀描述的相同,和

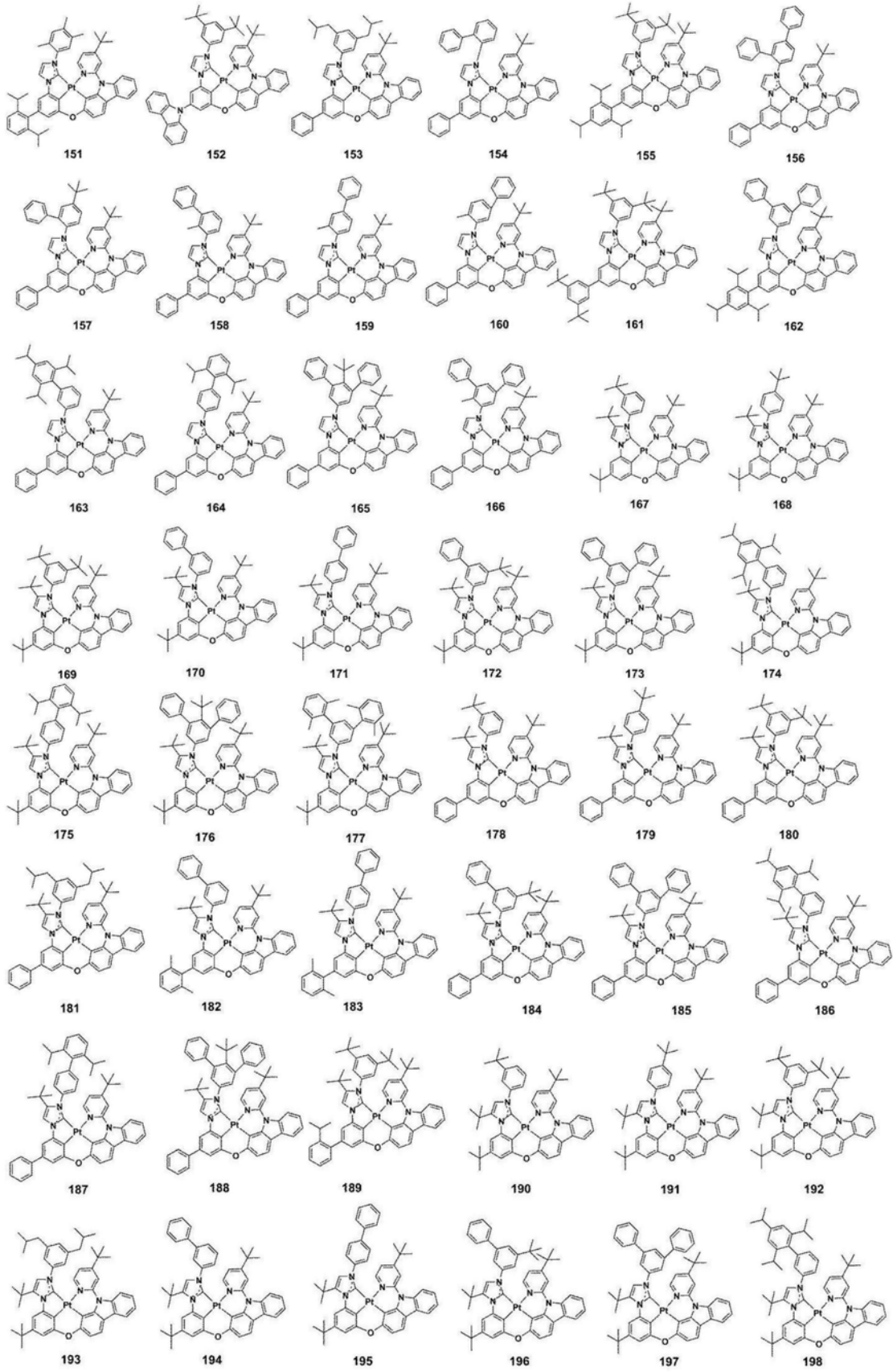
相邻的R₂₁-R₂₃、R₃₁-R₃₇、和R₄₁-R₄₄的两个或更多个任选地连接在一起以形成苯环或萘环。

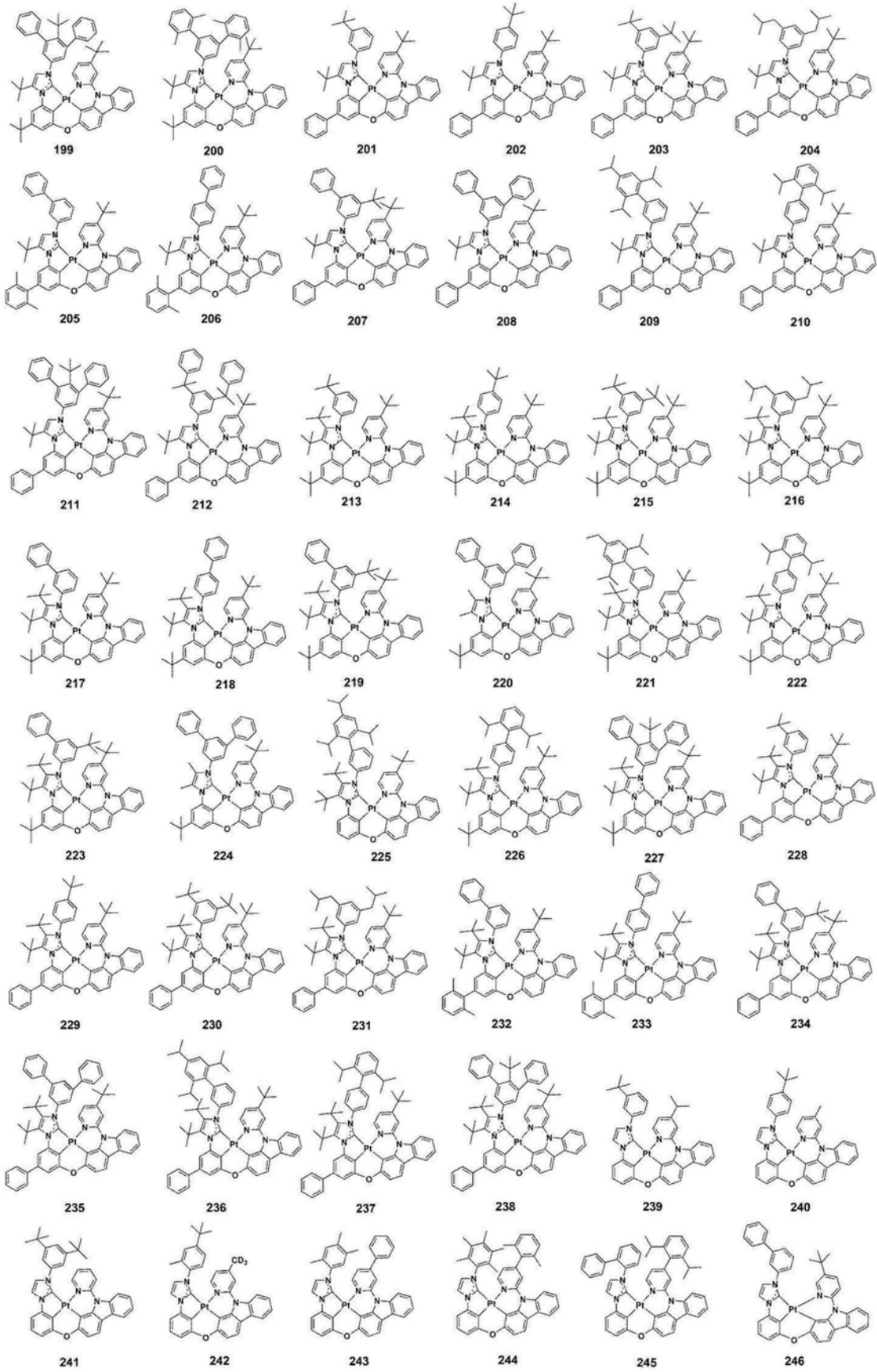
13. 如权利要求1所述的有机金属化合物,其中所述有机金属化合物为化合物1至428之一:

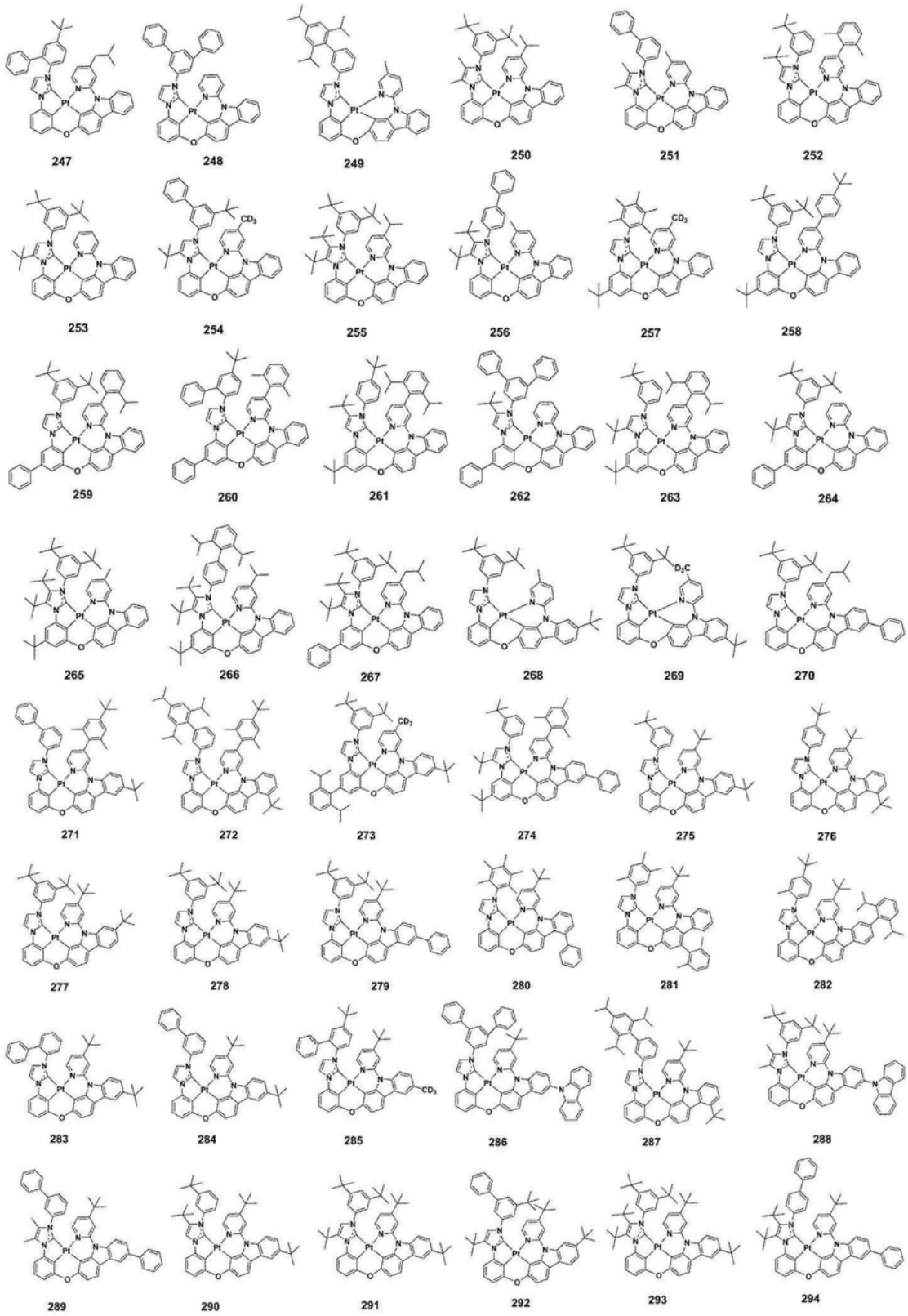


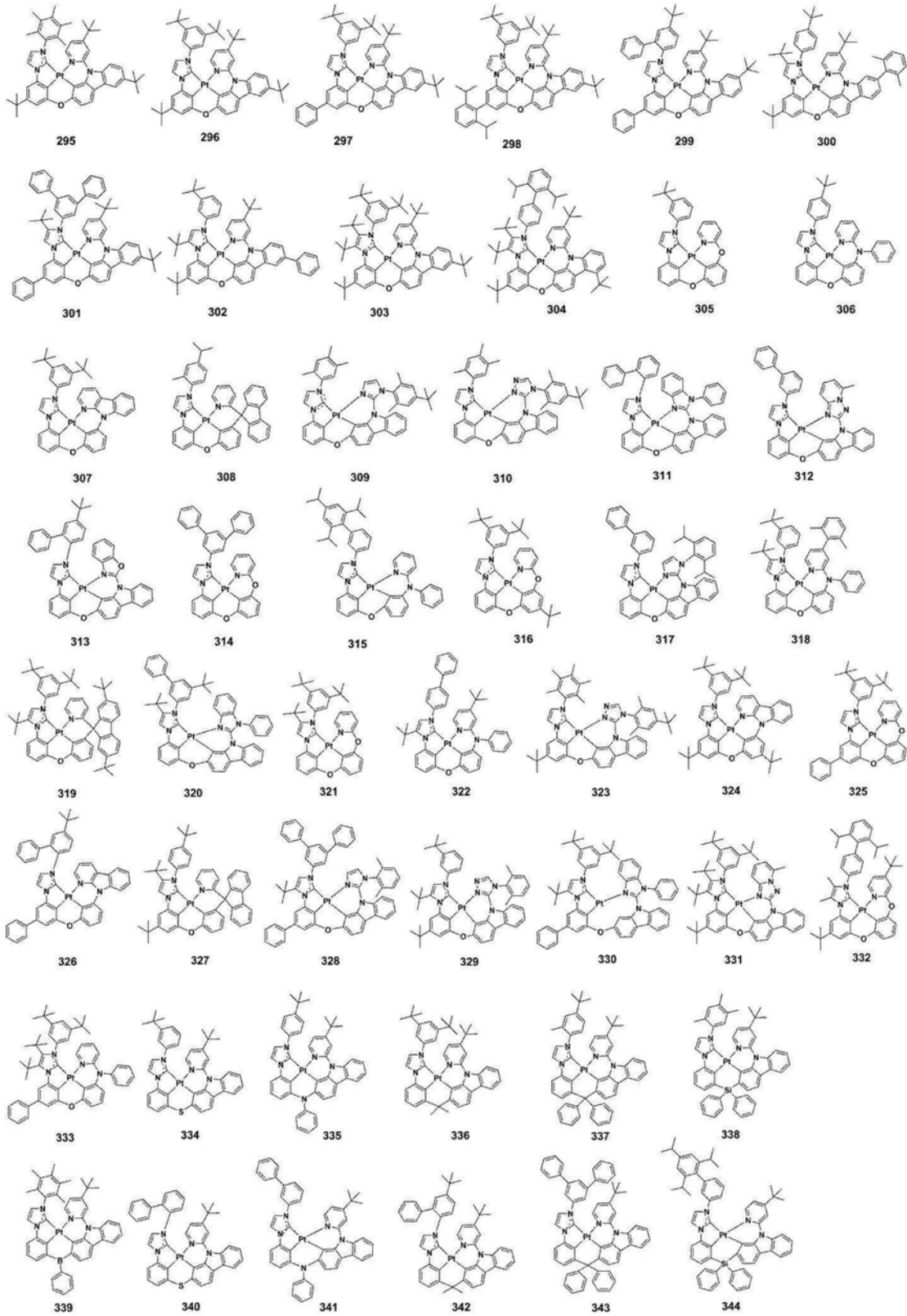


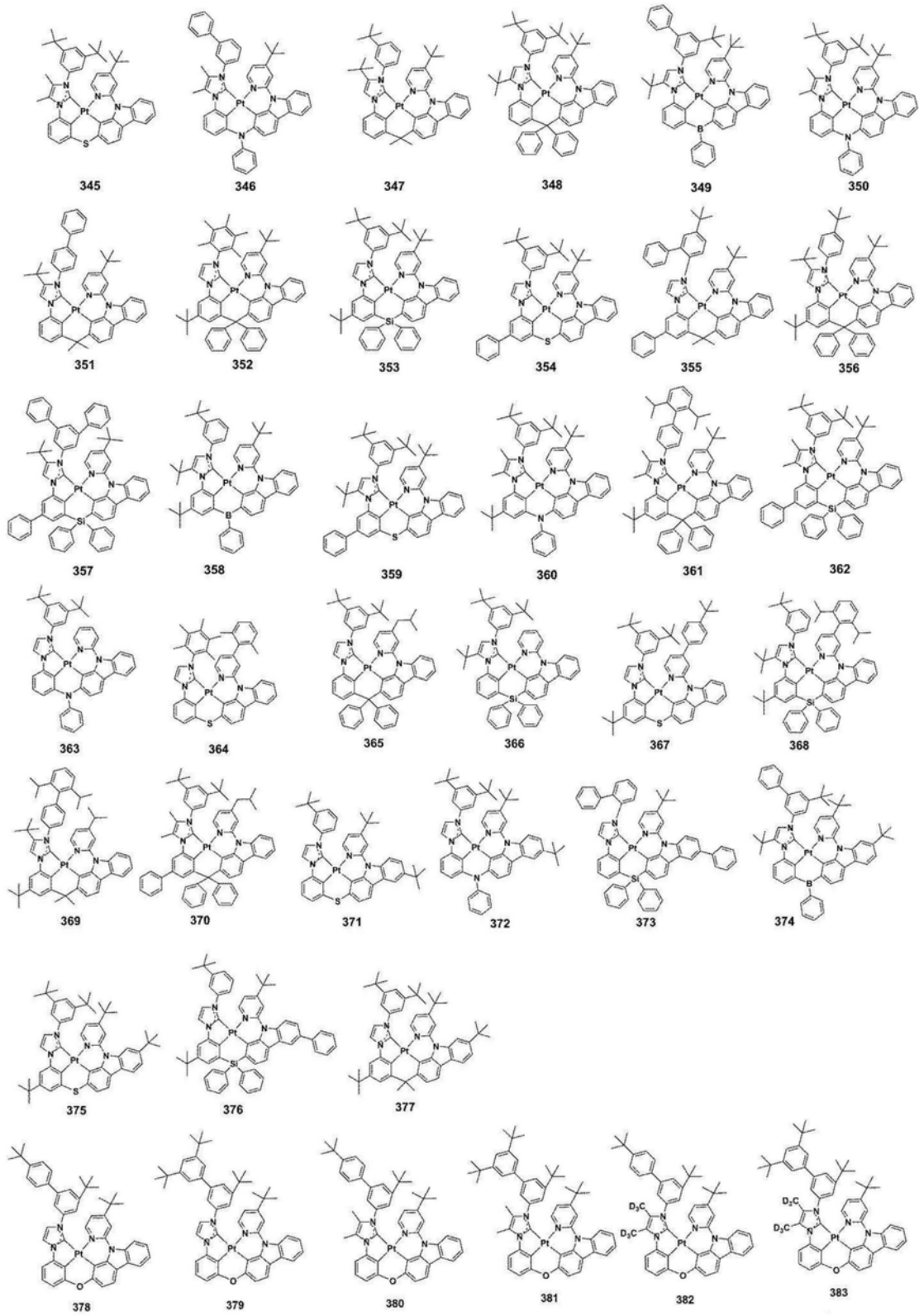


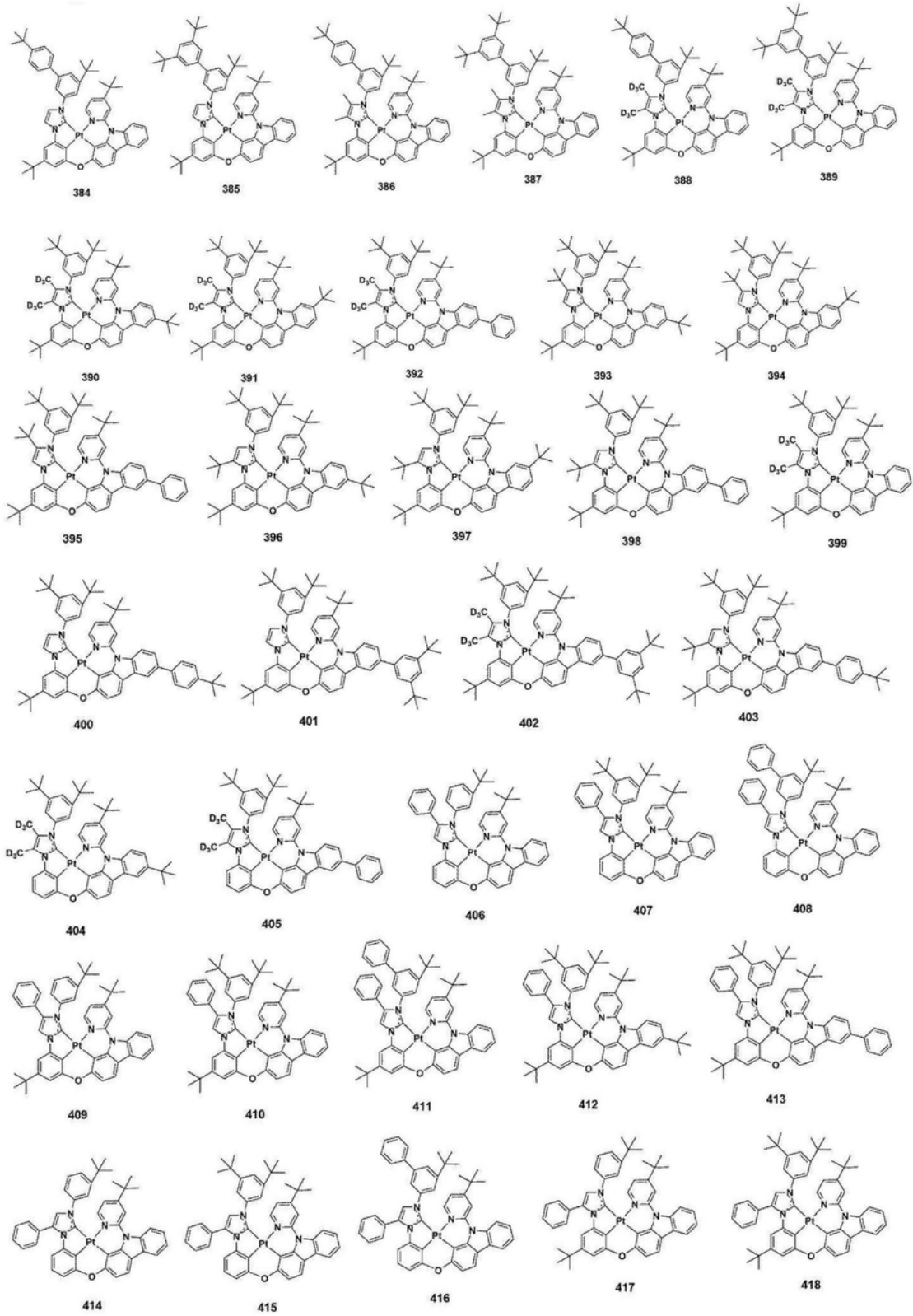


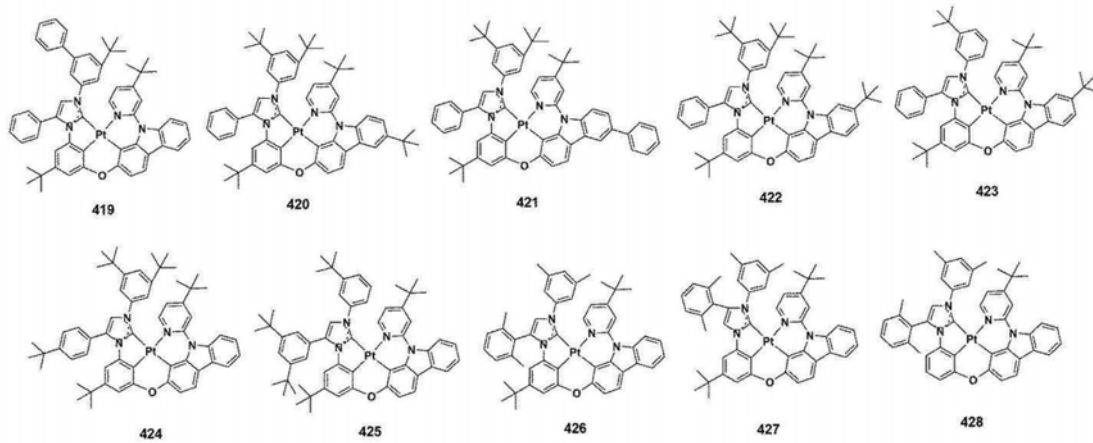












14. 有机发光器件,其包括:

第一电极;

第二电极;以及

位于所述第一电极和所述第二电极之间并且包括发射层的有机层,

其中所述有机层至少一种如权利要求1-13任一项所述的有机金属化合物。

15. 如权利要求14所述的有机发光器件,其中所述第一电极为阳极,

所述第二电极为阴极,

所述有机层进一步包括在所述第一电极和所述发射层之间的空穴传输区域以及在所述发射层和所述第二电极之间的电子传输区域,

所述空穴传输区域包括空穴注入层、空穴传输层、电子阻挡层、或其任意组合,和

所述电子传输区域包括空穴阻挡层、电子传输层、电子注入层、或其任意组合。

16. 如权利要求14所述的有机发光器件,其中所述有机金属化合物包括在所述发射层中。

17. 如权利要求16所述的有机发光器件,其中所述发射层进一步包括主体并且所述主体的量大于所述有机金属化合物的量。

18. 如权利要求16所述的有机发光器件,其中所述发射层进一步包括荧光掺杂剂。

19. 如权利要求16所述的有机发光器件,其中所述发射层发射具有约410nm-约490nm的最大发光波长的蓝色光。

20. 诊断组合物,其包括至少一种如权利要求1-13任一项所述的有机金属化合物。

有机金属化合物、包括其的有机发光器件和包括所述有机金属化合物的诊断组合物

[0001] 对相关申请的交叉引用

[0002] 本申请要求在韩国知识产权局于2019年6月13日提交的韩国专利申请No. 10-2019-0070074和2020年4月24日提交的韩国专利申请No. 10-2020-0050329的优先权和权益,将其内容全部通过引用引入本文中。

技术领域

[0003] 一种或多种实施方式涉及有机金属化合物、包括其的有机发光器件、和包括其的诊断组合物。

背景技术

[0004] 有机发光器件是在视角、响应时间、亮度、驱动电压、和响应速度方面具有改善的特性并且产生全色图像的自发射器件。

[0005] 在实例中,有机发光器件包括阳极、阴极、以及在阳极和阴极之间的有机层,其中有机层包括发射层。空穴传输区域可在阳极和发射层之间,和电子传输区域可在发射层和阴极之间。从阳极提供的空穴可通过空穴传输区域朝着发射层移动,并且从阴极提供的电子可通过电子传输区域朝着发射层移动。空穴和电子在发射层中复合以产生激子。这些激子从激发态跃迁至基态以由此产生光。

[0006] 同时,发光化合物例如磷光化合物可用于监测、感测和检测生物材料例如多种细胞和蛋白质。

发明内容

[0007] 一种或多种实施方式涉及有机金属化合物、包括其的有机发光器件、和包括其的诊断组合物。

[0008] 另外的方面将部分地在随后的描述中阐明,且部分地将由所述描述明晰,或者可通过本公开内容的所提供的实施方式的实践而获悉。

[0009] 根据实施方式的一个方面,提供由式1表示的有机金属化合物。

[0010] <式1>

[0011] $M_1(L_{11})_{n11}(L_{12})_{n12}$

[0012] 在式1中,

[0013] M_1 为元素周期表的第一行过渡金属、元素周期表的第二行过渡金属、或元素周期表的第三行过渡金属,

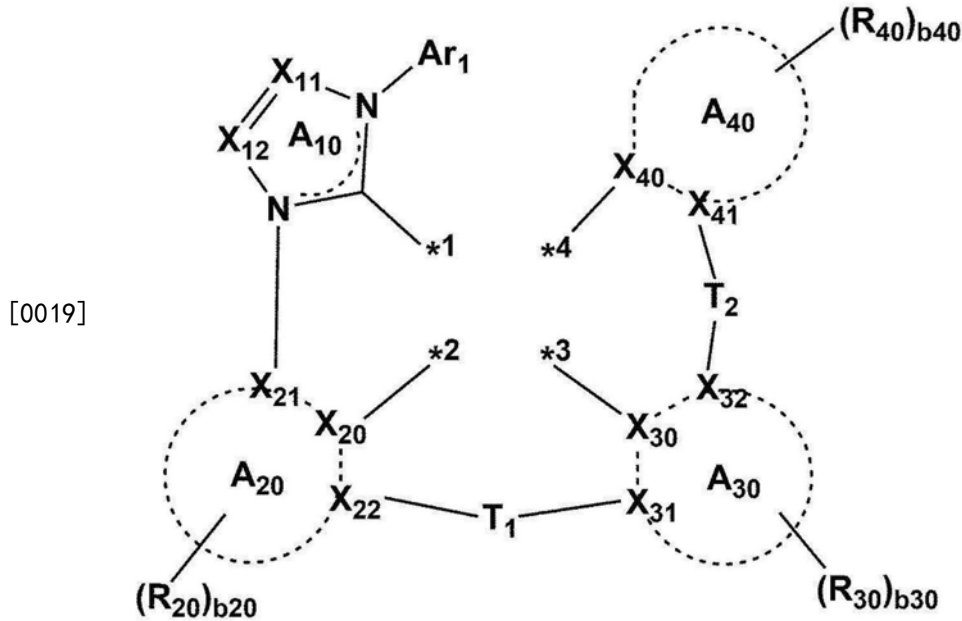
[0014] L_{11} 为由式1-1表示的配体,

[0015] L_{12} 为单齿配体或二齿配体,

[0016] $n11$ 为1,和

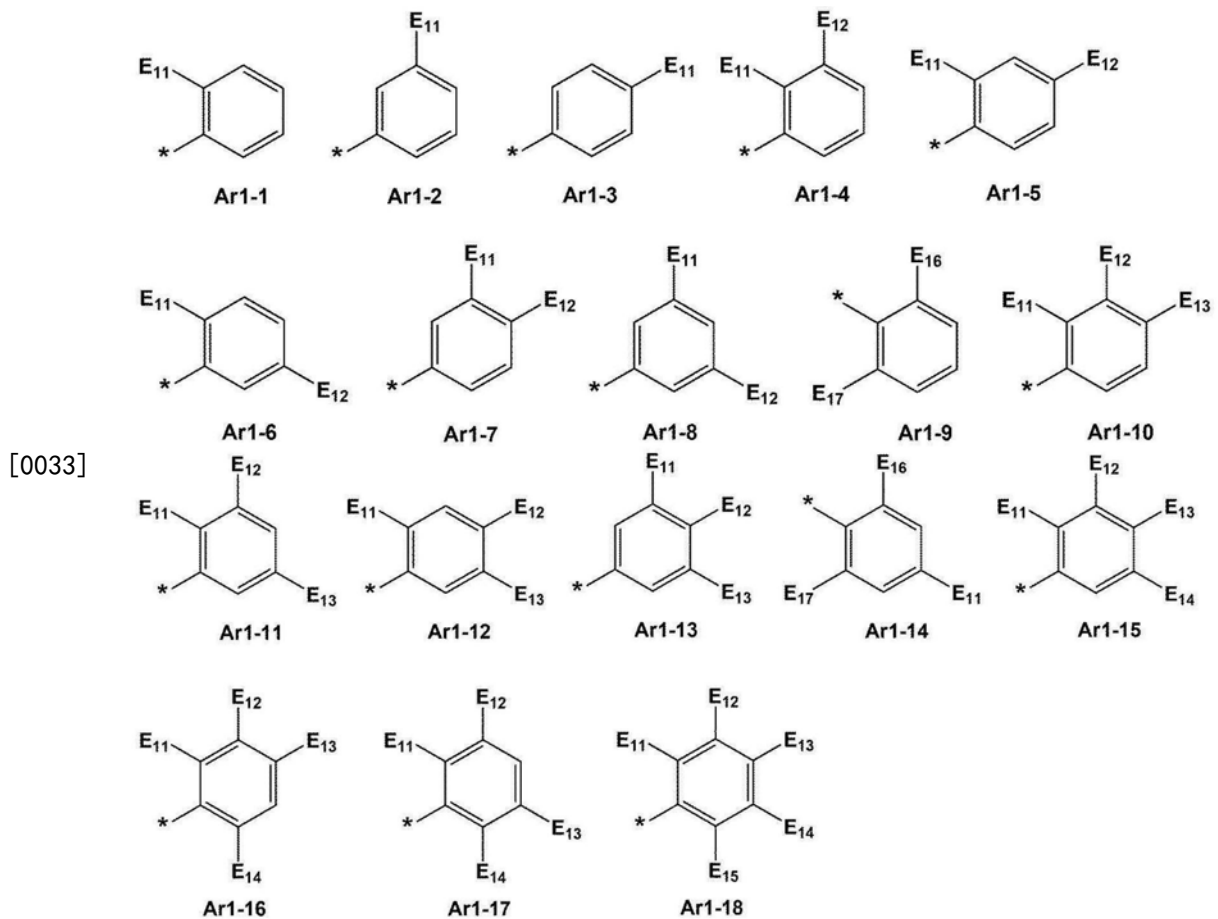
[0017] $n12$ 为0、1或2,

[0018] <式1-1>



[0020] 在式1-1中,

[0021] *1至*4表示与M₁的结合位点,[0022] A₁₀为含N的杂环基团,[0023] A₂₀、A₃₀和A₄₀各自独立地为C₅-C₃₀碳环基团或C₁-C₃₀杂环基团,[0024] T₁为单键、*-N[(L₁)_{a1}-(R₁)_{b1}]-*、*-B(R₁)-*、*-P(R₁)-*、*-C(R₁)(R₂)-*、*-Si(R₁)(R₂)-*、*-Ge(R₁)(R₂)-*、*-S-*、*-Se-*、*-O-*、*-C(=O)-*、*-S(=O)-*、*-S(=O)₂-*、*-C(R₁)=C(R₂)-*、*-C(=S)-*、或*-C≡C-*，[0025] T₂为单键、*-N[(L₂)_{a2}-(R₃)_{b3}]-*、*-B(R₃)-*、*-P(R₃)-*、*-C(R₃)(R₄)-*、*-Si(R₃)(R₄)-*、*-Ge(R₃)(R₄)-*、*-S-*、*-Se-*、*-O-*、*-C(=O)-*、*-S(=O)-*、*-S(=O)₂-*、*-C(R₃)=C(R₄)-*、*-C(=S)-*、或*-C≡C-*，[0026] L₁和L₂各自独立地为单键、取代或未取代的C₅-C₃₀碳环基团、或者取代或未取代的C₁-C₃₀杂环基团，[0027] a₁为1-3的整数，并且当a₁为2或更大时，两个或更多个L₁彼此相同或不同。[0028] a₂为1-3的整数，并且当a₂为2或更大时，两个或更多个L₂彼此相同或不同，[0029] X₁₁为C(R₁₁)或N，X₁₂为C(R₁₂)或N，[0030] X₂₀为C或N，X₃₀为C或N，X₄₀为C或N，[0031] X₂₁、X₂₂、X₃₁、X₃₂和X₄₁各自独立地为C或N，[0032] Ar₁为取代或未取代的C₅-C₃₀碳环基团，并且当Ar₁为苯基团时，Ar₁由式Ar₁-1至Ar₁-18之一表示，



[0034] 在式Ar1-1至Ar1-18中，

[0035] E₁₁-E₁₅各自独立地为取代或未取代的C₁-C₆₀烷基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷硫基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烷基、取代或未取代的C₁-C₁₀杂环烷基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烯基、取代或未取代的C₂-C₁₀杂环烯基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳基、取代或未取代的C₇-C₆₀烷基芳基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳氧基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳硫基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳基、取代或未取代的C₂-C₆₀烷基杂芳基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳硫基、取代或未取代的单价非芳族稠合多环基团、或者取代或未取代的单价非芳族稠合杂多环基团，

[0036] E₁₆和E₁₇各自独立地为取代或未取代的C₆-C₆₀烷基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷硫基、取代的C₃-C₁₀环烷基、未取代的C₇-C₁₀环烷基、取代或未取代的C₁-C₁₀杂环烷基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烯基、取代或未取代的C₂-C₁₀杂环烯基、取代的C₆-C₆₀芳基、未取代的C₇-C₆₀芳基、取代或未取代的C₇-C₆₀烷基芳基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳氧基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳硫基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳基、取代或未取代的C₂-C₆₀烷基杂芳基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳硫基、取代或未取代的单价非芳族稠合多环基团、或者取代或未取代的单价非芳族稠合杂多环基团，

[0037] R₁-R₄、R₁₁、R₁₂、R₂₀、R₃₀和R₄₀各自独立地为氢、氘、-F、-Cl、-Br、-I、-SF₅、羟基、氰基、硝基、脒基、胼基、脞基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、取代或未取代的C₁-C₆₀烷基、取代或未取代的C₂-C₆₀烯基、取代或未取代的C₂-C₆₀炔基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷硫基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烷基、取代或未取代的

C₁-C₁₀杂环烷基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烯基、取代或未取代的C₂-C₁₀杂环烯基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳基、取代或未取代的C₇-C₆₀烷芳基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳氧基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳硫基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳基、取代或未取代的C₂-C₆₀烷基杂芳基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳硫基、取代或未取代的单价非芳族稠合多环基团、取代或未取代的单价非芳族稠合杂多环基团、-N(Q₁)(Q₂)、-Si(Q₃)(Q₄)(Q₅)、-B(Q₆)(Q₇)、或-P(=O)(Q₈)(Q₉),

[0038] 相邻的R₁-R₄、R₂₀、R₃₀和R₄₀的两个或更多个任选地连接在一起以形成取代或未取代的C₅-C₃₀碳环基团或者取代或未取代的C₁-C₃₀杂环基团,

[0039] b₁和b₃各自独立地为1-5的整数,

[0040] 当b₁为2或更大时,两个或更多个R₁彼此相同或不同,和当b₃为2或更大时,两个或更多个R₃彼此相同或不同,

[0041] b₂₀、b₃₀和b₄₀各自独立地为1-10的整数,

[0042] 当b₂₀为2或更大时,两个或更多个R₂₀彼此相同或不同,当b₃₀为2或更大时,两个或更多个R₃₀彼此相同或不同,和当b₄₀为2或更大时,两个或更多个R₄₀彼此相同或不同,

[0043] *和*各自表示与相邻原子的结合位点,和

[0044] 取代的C₅-C₃₀碳环基团、取代的C₁-C₃₀杂环基团、取代的C₁-C₆₀烷基、取代的C₆-C₆₀烷基、取代的C₂-C₆₀烯基、取代的C₂-C₆₀炔基、取代的C₁-C₆₀烷氧基、取代的C₁-C₆₀烷硫基、取代的C₃-C₁₀环烷基、取代的C₁-C₁₀杂环烷基、取代的C₃-C₁₀环烯基、取代的C₂-C₁₀杂环烯基、取代的C₆-C₆₀芳基、取代的C₇-C₆₀烷基芳基、取代的C₆-C₆₀芳氧基、取代的C₆-C₆₀芳硫基、取代的C₁-C₆₀杂芳基、取代的C₂-C₆₀烷基杂芳基、取代的C₁-C₆₀杂芳氧基、取代的C₁-C₆₀杂芳硫基、取代的单价非芳族稠合多环基团、和取代的单价非芳族稠合杂多环基团的至少一个取代基为:

[0045] 氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、脒基、胼基、脞基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₆₀烷基、C₂-C₆₀烯基、C₂-C₆₀炔基、或C₁-C₆₀烷氧基;

[0046] 各自被如下的至少一个取代的C₁-C₆₀烷基、C₂-C₆₀烯基、C₂-C₆₀炔基、或C₁-C₆₀烷氧基:氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、脒基、胼基、脞基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、单价非芳族稠合杂多环基团、-N(Q₁₁)(Q₁₂)、-Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅)、-B(Q₁₆)(Q₁₇)、-P(=O)(Q₁₈)(Q₁₉)、或其任意组合;

[0047] C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、或单价非芳族稠合杂多环基团;

[0048] 各自被如下的至少一个取代的C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、或单价非芳族稠合杂多环基团:氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、脒基、胼基、脞基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₆₀烷基、C₂-C₆₀烯基、C₂-C₆₀炔基、C₁-C₆₀烷氧基、C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、单价非芳族

稠合多环基团、单价非芳族稠合杂多环基团、-N(Q₂₁)(Q₂₂)、-Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅)、-B(Q₂₆)(Q₂₇)、-P(=O)(Q₂₈)(Q₂₉)、或其任意组合；和

[0049] -N(Q₃₁)(Q₃₂)、-Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅)、-B(Q₃₆)(Q₃₇)、或-P(=O)(Q₃₈)(Q₃₉)，

[0050] 其中Q₁-Q₉、Q₁₁-Q₁₉、Q₂₁-Q₂₉和Q₃₁-Q₃₉各自独立地为氢，氘，-F，-Cl，-Br，-I，羟基，氰基，硝基，脒基，胍基，脞基，脧基，羧酸基团或其盐，磺酸基团或其盐，磷酸基团或其盐，C₁-C₆₀烷基，C₂-C₆₀烯基，C₂-C₆₀炔基，C₁-C₆₀烷氧基，C₃-C₁₀环烷基，C₁-C₁₀杂环烷基，C₃-C₁₀环烯基，C₂-C₁₀杂环烯基，C₆-C₆₀芳基，被至少一个C₁-C₆₀烷基、C₆-C₆₀芳基、或其任意组合取代的C₆-C₆₀芳基，C₆-C₆₀芳氧基，C₆-C₆₀芳硫基，C₁-C₆₀杂芳基，单价非芳族稠合多环基团，单价非芳族稠合杂多环基团，或其任意组合。

[0051] 另一方面提供有机发光器件，其包括第一电极；第二电极；以及在所述第一电极和所述第二电极之间的包括发射层的有机层，其中所述有机层包括至少一种由式1表示的有机金属化合物。

[0052] 另一方面提供诊断组合物，其包括至少一种由式1表示的有机金属化合物。

附图说明

[0053] 由结合附图考虑的以下描述，本公开内容的一些实施方式的以上和其它方面、特征、和优点将更明晰，其中图1显示根据示例性实施方式的有机发光器件的示意性横截面图。

具体实施方式

[0054] 现在将对实施方式详细地进行介绍，其实例示于附图中，其中相同的附图标记始终是指相同的元件。在这点上，本实施方式可具有不同的形式并且不应被解释为限于本文中阐明的描述。因此，以下仅通过参照附图描述实施方式，以说明方面。如本文中使用的，术语“和/或”包括相关列举项目的一个或多个的任何和全部组合。表述例如“的至少一个(种)”当在要素列表之前或之后时修饰整个要素列表而不修饰该列表的单独要素。

[0055] 将理解，当一个元件被称作“在”另外的元件“上”时，其可直接在所述另外的元件上或者在其间可存在中间元件。相反，当一个元件被称作“直接在”另外的元件“上”时，不存在中间元件。

[0056] 将理解，尽管术语“第一”、“第二”、“第三”等可在本文中用于描述多种元件、组分、区域、层和/或部分，但这些元件、组分、区域、层和/或部分不应被这些术语限制。这些术语仅用于使一个元件、组分、区域、层或部分区别于另外的元件、组分、区域、层或部分。因此，在不背离本文中的教导的情况下，下面讨论的“第一元件”、“组分”、“区域”、“层”或“部分”可称为第二元件、组分、区域、层或部分。

[0057] 本文中使用的术语仅用于描述具体实施方式的目的且不意图为限制性的。如本文中使用的，“一个(种)(不定冠词)(a, an)”、“所述(该)”和“至少一个(种)”不表示量的限制，且意图覆盖单数和复数两者，除非上下文清楚地另外指明。例如，“(一个)元件”具有与“至少一个元件”相同的含义，除非上下文清楚地另外指明。

[0058] “或”意味着“和/或”。将进一步理解，术语“包括”或“包含”当用在本说明书中时，表明存在所陈述的特征、区域、整体、步骤、操作、元件和/或组分，但不排除存在或增加一种

或多种另外的特征、区域、整体、步骤、操作、元件、组分、和/或其集合。

[0059] 此外,在本文中可使用相对术语例如“下部”或“底部”以及“上部”或“顶部”来描述如图中所示的一个元件与另外的元件的关系。将理解,除图中所示的方位之外,相对术语还意图涵盖器件的不同方位。例如,如果将图之一中的器件翻转,被描述为在另外的元件“下部”侧上的元件则将被定向在所述另外的元件的“上部”侧上。因此,取决于图的具体方位,示例性术语“下部”可涵盖“下部”和“上部”两种方位。类似地,如果将图之一中的器件翻转,被描述为“在”另外的元件“下面”或“之下”的元件则将被定向“在”所述另外的元件“上方”。因此,示例性术语“在……下面”或“在……之下”可涵盖在……上方和在……下面两种方位。

[0060] 如本文中使用的“约”或“大约”包括所陈述的值且意味着在如由本领域普通技术人员考虑到所讨论的测量和与具体量的测量有关的误差(即,测量系统的限制)所确定的对于具体值的可接受的偏差范围内。例如,“约”可意味着相对于所陈述的值在一种或多种标准偏差范围内,或者在±10%或5%范围内。

[0061] 除非另外定义,否则在本文中所使用的所有术语(包括技术和科学术语)的含义与本公开内容所属领域的普通技术人员通常理解的相同。将进一步理解,术语,例如在常用字典中定义的那些,应被解释为其含义与它们在本公开内容和相关领域的背景中的含义一致,并且将不以理想化或过于形式的意义进行解释,除非在本文中清楚地如此定义。

[0062] 在本文中参照作为理想化实施方式的示意图的横截面图描述示例性实施方式。这样,将预料到作为例如制造技术和/或公差的结果的与图的形状的偏差。因此,本文中描述的实施方式不应被解释为限于如本文中所图示的区域的形状,而是将包括由例如制造导致的形状上的偏差。例如,图示或描述为平坦的区域可典型地具有粗糙的和/或非线性的特征。而且,所图示的尖锐的角可为圆化的。因此,图中所示的区域在本质上是示意性的并且它们的形状不意图说明区域的精确形状且不意图限制本权利要求的范围。

[0063] 本公开内容的一个方面提供由下式1表示的有机金属化合物:

[0064] <式1>

[0065] $M_1(L_{11})_{n11}(L_{12})_{n12}$ 。

[0066] 式1中的 M_1 可为元素周期表的第一行过渡金属、元素周期表的第二行过渡金属、或元素周期表的第三行过渡金属。

[0067] 在一种或多种实施方式中,式1中的 M_1 可为铍(Be)、镁(Mg)、铝(Al)、钙(Ca)、钛(Ti)、锰(Mn)、钴(Co)、铜(Cu)、锌(Zn)、镓(Ga)、锗(Ge)、锆(Zr)、钌(Ru)、铑(Rh)、钯(Pd)、银(Ag)、铼(Re)、铂(Pt)、或金(Au)。

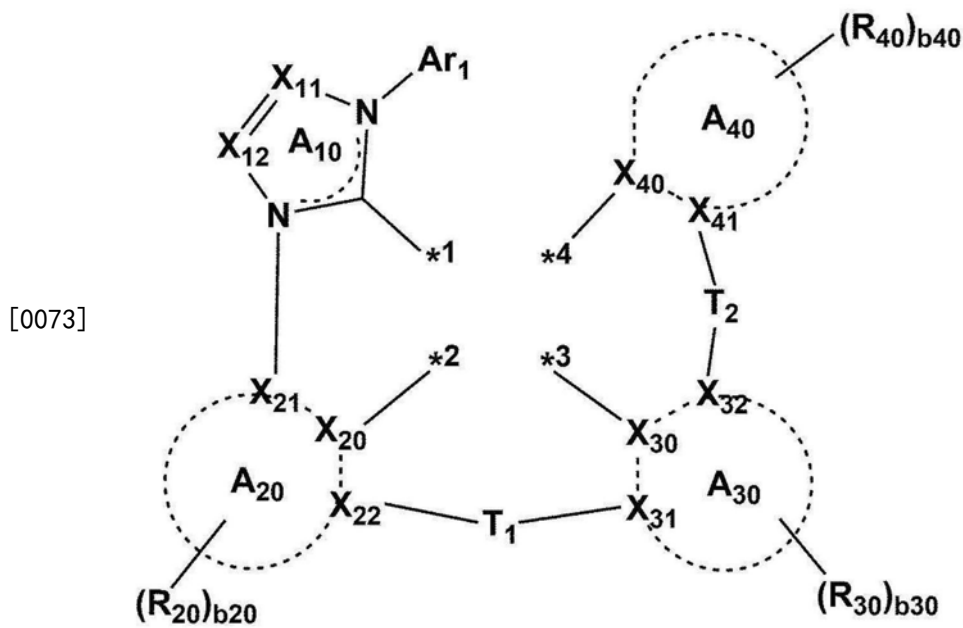
[0068] 在一种或多种实施方式中, M_1 可为Pd、Pt或Au。

[0069] 在一种或多种实施方式中,式1中的 M_1 可为Pt或Pd。

[0070] 在一种或多种实施方式中,式1中的 M_1 可为Pt。

[0071] 式1中的 L_{11} 可为由式1-1表示的配体:

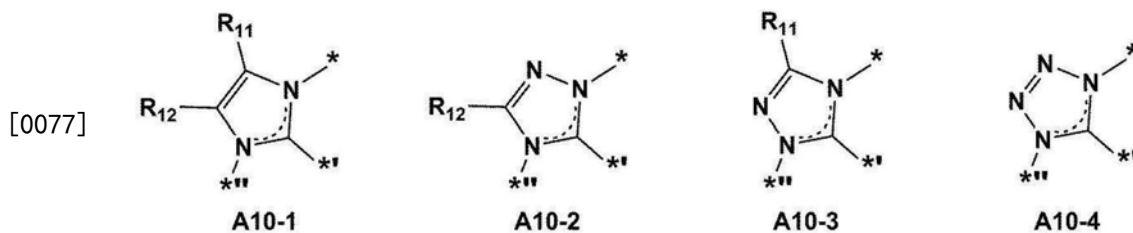
[0072] <式1-1>



[0074] 式1-1中的*1至*4可各自独立地为与M₁的结合位点。

[0075] 式1-1中的A₁₀可为含N的杂环基团。在一种或多种实施方式中,式1-1中的A₁₀可包括含N的5元杂环基团。

[0076] 在一种或多种实施方式中,A₁₀可为式A10-1至A10-4之一:



[0078] 在式A10-1至A10-4中,

[0079] R₁₁和R₁₂与本文中描述的相同,和

[0080] *,*'和*'各自表示与相邻原子的结合位点。

[0081] 式1-1中的A₂₀、A₃₀和A₄₀可各自独立地为C₅-C₃₀碳环基团或C₁-C₃₀杂环基团。

[0082] 在一种或多种实施方式中,A₂₀、A₃₀和A₄₀可各自独立地为苯基团、萘基团、蒽基团、菲基团、苯并[9,10]菲基团、蒽基团、蒽基团、环戊二烯基团、1,2,3,4-四氢萘基团、咪唑基团、噁吩基团、噁咯基团、茛基团、茛基团、吡啶基团、咪唑基团、苯并咪唑基团、二苯并咪唑基团、苯并噁吩基团、二苯并噁吩基团、苯并噁咯基团、二苯并噁咯基团、氮杂茛基团、氮杂咪唑基团、氮杂二苯并咪唑基团、氮杂二苯并噁吩基团、氮杂二苯并噁咯基团、吡啶基团、噁吩基团、噁吩基团、三嗪基团、喹啉基团、异喹啉基团、喹啉基团、喹啉基团、菲咯啉基团、吡咯基团、吡唑基团、咪唑基团、三唑基团、四唑基团、噁唑基团、异噁唑基团、噁唑基团、异噁唑基团、噁二唑基团、噁二唑基团、苯并吡唑基团、苯并咪唑基团、吡唑基团、苯并噁唑基团、苯并噁二唑基团、苯并噁二唑基团、苯并三唑基团、二氮杂茛基团、三氮杂茛基团、5,6,7,8-四氢异喹啉基团、或5,6,7,8-四氢喹啉基团。

[0083] 式1-1中的T₁可为单键、*-N[(L₁)_{a1}-(R₁)_{b1}]-*、*-B(R₁)-*、*-P(R₁)-*、*-C(R₁)(R₂)-*、*-Si(R₁)(R₂)-*、*-Ge(R₁)(R₂)-*、*-S-*、*-Se-*、*-O-*、*-C(=O)-*、*-S

(=O)-*’、*-S(=O)₂-*’、*-C(R₁)=C(R₂)-*’、*-C(=S)-*’、或*-C≡C-*’，和

[0084] T₂可为单键、*-N[(L₂)_{a2}-(R₃)_{b3}]-*’、*-B(R₃)-*’、*-P(R₃)-*’、*-C(R₃)(R₄)-*’、*-Si(R₃)(R₄)-*’、*-Ge(R₃)(R₄)-*’、*-S-*’、*-Se-*’、*-O-*’、*-C(=O)-*’、*-S(=O)-*’、*-S(=O)₂-*’、*-C(R₃)=C(R₄)-*’、*-C(=S)-*’、或*-C≡C-*’。

[0085] 在一种或多种实施方式中，T₁可为单键、*-N[(L₁)_{a1}-(R₁)_{b1}]-*’、*-B(R₁)-*’、*-C(R₁)(R₂)-*’、*-Si(R₁)(R₂)-*’、*-O-*’、或*-S-*’。

[0086] 根据一种或多种实施方式，T₁可为*-N[(L₁)_{a1}-(R₁)_{b1}]-*’、*-B(R₁)-*’、*-C(R₁)(R₂)-*’、*-Si(R₁)(R₂)-*’、*-O-*’、或*-S-*’。

[0087] 在一种或多种实施方式中，T₂可为单键、*-N[(L₂)_{a2}-(R₃)_{b3}]-*’、*-C(R₃)(R₄)-*’、*-Si(R₃)(R₄)-*’、*-O-*’、或*-S-*’。

[0088] 式1-1中的L₁和L₂可各自独立地为单键、取代或未取代的C₅-C₃₀碳环基团、或者取代或未取代的C₁-C₃₀杂环基团，和

[0089] a₁可为1-3的整数，并且当a₁为2或更大时，两个或更多个L₁可彼此相同或不同。

[0090] a₂可为1-3的整数，并且当a₂为2或更大时，两个或更多个L₂可彼此相同或不同。

[0091] 在一种或多种实施方式中，L₁和L₂可各自独立地为：亚苯基、亚并环戊二烯基、亚茛基、亚萘基、亚蒽基、亚庚搭烯基、亚茈基、亚芴基、亚非那烯基、亚菲基、亚蒽基、亚荧蒽基、苯并[9,10]菲基、亚芘基、亚蒽基、亚并四苯基、亚苈基、亚茈基、或亚并五苯基；或

[0092] 各自被如下取代的亚苯基、亚并环戊二烯基、亚茛基、亚萘基、亚蒽基、亚庚搭烯基、亚茈基、亚芴基、亚非那烯基、亚菲基、亚蒽基、亚荧蒽基、苯并[9,10]菲基、亚芘基、亚蒽基、亚并四苯基、亚苈基、亚茈基、或亚并五苯基：至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、羟基、氰基、硝基、氨基、脒基、胂基、胲基、羧基、羧基或其盐、磺基、磺基或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₆₀烷基、C₂-C₆₀烯基、C₂-C₆₀炔基、C₁-C₆₀烷氧基、C₃-C₁₀环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、单价非芳族稠合杂多环基团、或其任意组合。

[0093] 式1-1中的X₁₁可为C(R₁₁)或N。例如，X₁₁可为C(R₁₁)。在一种或多种实施方式中，X₁₁可为N。

[0094] 式1-1中的X₁₂可为C(R₁₂)或N。例如，X₁₂可为C(R₁₂)。在一种或多种实施方式中，X₁₂可为N。

[0095] 在一种或多种实施方式中，X₁₁可为C(R₁₁)，X₁₂可为C(R₁₂)，并且如下文中描述的，R₁₁和R₁₂可任选地连接在一起以形成取代或未取代的C₅-C₃₀碳环基团或者取代或未取代的C₁-C₃₀杂环基团。

[0096] 在一种或多种实施方式中，X₁₁可为C(R₁₁)，X₁₂可为C(R₁₂)，并且R₁₁和R₁₂可任选地连接在一起以形成苯基团、吡啶基团、嘧啶基团、吡嗪基团、或哒嗪基团。

[0097] 式1-1中的X₂₀可为C或N。

[0098] 式1-1中的X₃₀可为C或N。

[0099] 式1-1中的X₄₀可为C或N。

[0100] 式1-1中的X₂₁、X₂₂、X₃₁、X₃₂和X₄₁可各自独立地为C或N。

[0101] 根据一种或多种实施方式，在M₁和A₁₀之间的键、在M₁和A₂₀之间的键、在M₁和A₃₀之间

的键、以及在M₁和A₄₀之间的键可各自独立地为配位键或共价键。

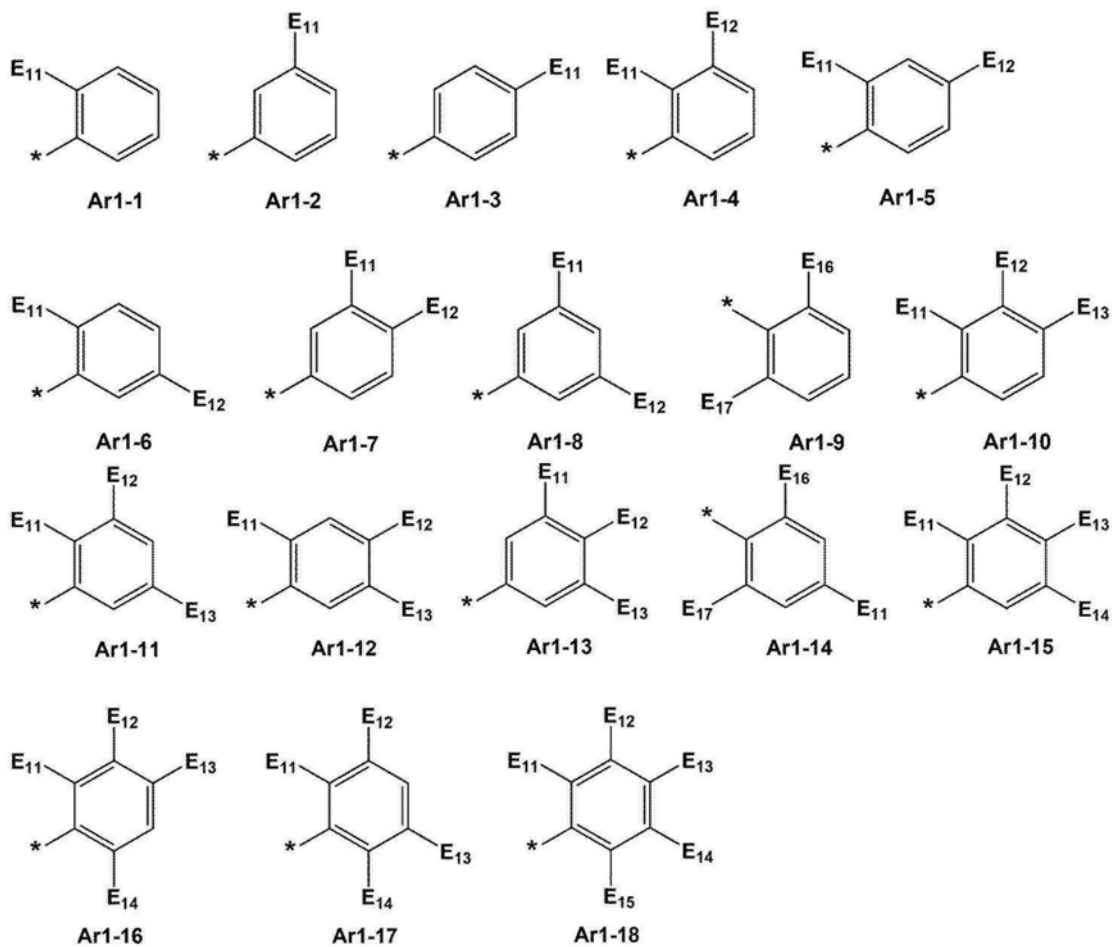
[0102] 根据一种或多种实施方式,在M₁和A₁₀之间的键可为配位键。

[0103] 在式1中,在M₁和A₂₀之间的键、在M₁和A₃₀之间的键、以及在M₁和A₄₀之间的键的两个键可各自为共价键,并且另一个键可为配位键。

[0104] 因此,由式1表示的有机金属化合物可为电中性的。

[0105] 根据一种或多种实施方式,在M₁和A₂₀之间的键可为共价键,在M₁和A₃₀之间的键可为共价键,并且在M₁和A₄₀之间的键可为配位键。

[0106] 式1-1中的Ar₁为取代或未取代的C₅-C₃₀碳环基团,并且当Ar₁为苯基团(例如,取代的苯基团)时,Ar₁可由式Ar1-1至Ar1-18之一表示:



[0107]

[0108] 式Ar1-1至Ar1-18中的E₁₁-E₁₅可各自独立地为取代或未取代的C₁-C₆₀烷基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷硫基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烷基、取代或未取代的C₁-C₁₀杂环烷基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烯基、取代或未取代的C₂-C₁₀杂环烯基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳基、取代或未取代的C₇-C₆₀烷基芳基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳氧基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳硫基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳基、取代或未取代的C₂-C₆₀烷基杂芳基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳硫基、取代或未取代的单价非芳族稠合多环基团、或者取代或未取代的单价非芳族稠合杂多环基团。

[0109] 式Ar1-1至Ar1-18中的E₁₆和E₁₇可各自独立地为取代或未取代的C₆-C₆₀烷基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷硫基、取代的C₃-C₁₀环烷基、未取代的C₇-C₁₀环烷基、取代或未取代的C₁-C₁₀杂环烷基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烯基、取代或未取代的

二苯并噻吩基、二苯并噻咯基、苯并咪唑基、二苯并咪唑基、咪唑并吡啶基、或咪唑并噻啶基；或

[0121] 各自被如下取代的苯基、萘基、苄基、菲基、蒽基、荧蒽基、苯并[9,10]菲基、芘基、蒽基、吡咯基、噻吩基、呋喃基、咪唑基、吡啶基、噻啶基、异噻啶基、噁唑基、异噁唑基、吡啶基、吡嗪基、嘧啶基、哒嗪基、异吡啶基、吡啶基、吡啶基、噁唑基、异噁唑基、三唑基、四唑基、噁二唑基、三嗪基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、苯并咪唑基、二苯并咪唑基、咪唑并吡啶基、或咪唑并噻啶基：至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、氨基、脒基、胍基、脞基、脞基、羧基、羧基或其盐、磺基、磺基或其盐、磷酸基、磷酸基或其盐、C₁-C₁₀烷基、C₁-C₁₀烷氧基、环戊基、环己基、环庚基、环辛基、金刚烷基、降苡烷基、降冰片烯基、环戊烯基、环己烯基、环庚烯基、苯基、萘基、吡啶基、嘧啶基、或其任意组合。

[0122] 在一种或多种实施方式中，E₁₆和E₁₇可各自独立地为：正己基、异己基、仲己基、叔己基、正庚基、异庚基、仲庚基、叔庚基、正辛基、异辛基、仲辛基、叔辛基、正壬基、异壬基、仲壬基、叔壬基、正癸基、异癸基、仲癸基、或叔癸基；

[0123] 各自被如下的至少一个取代的正己基、异己基、仲己基、叔己基、正庚基、异庚基、仲庚基、叔庚基、正辛基、异辛基、仲辛基、叔辛基、正壬基、异壬基、仲壬基、叔壬基、正癸基、异癸基、仲癸基、或叔癸基：氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、氨基、脒基、胍基、脞基、脞基、羧基、羧基或其盐、磺基、磺基或其盐、磷酸基、磷酸基或其盐、C₁-C₁₀烷基、C₁-C₁₀烷氧基、环戊基、环己基、环庚基、环辛基、金刚烷基、降苡烷基、降冰片烯基、环戊烯基、环己烯基、环庚烯基、苯基、萘基、吡啶基、嘧啶基、或其任意组合；或

[0124] 环庚基、环辛基、金刚烷基、降苡烷基、降冰片烯基、环戊烯基、环己烯基、环庚烯基、萘基、苄基、菲基、蒽基、荧蒽基、苯并[9,10]菲基、芘基、蒽基、吡咯基、噻吩基、呋喃基、咪唑基、吡啶基、噻啶基、异噻啶基、噁唑基、异噁唑基、吡啶基、吡嗪基、嘧啶基、哒嗪基、异吡啶基、吡啶基、吡啶基、噁唑基、异噁唑基、三唑基、四唑基、噁二唑基、三嗪基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、苯并咪唑基、二苯并咪唑基、咪唑并吡啶基、或咪唑并噻啶基；或

[0125] 各自被如下取代的苯基、萘基、苄基、菲基、蒽基、荧蒽基、苯并[9,10]菲基、芘基、蒽基、吡咯基、噻吩基、呋喃基、咪唑基、吡啶基、噻啶基、异噻啶基、噁唑基、异噁唑基、吡啶基、吡嗪基、嘧啶基、哒嗪基、异吡啶基、吡啶基、吡啶基、噁唑基、异噁唑基、三唑基、四唑基、噁二唑基、三嗪基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、苯并咪唑基、二苯并咪唑基、咪唑并吡啶基、或咪唑并噻啶基：至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、氨基、脒基、胍基、脞基、脞基、羧基、羧基或其盐、磺基、磺基或其盐、磷酸基、磷酸基或其盐、C₁-C₁₀烷基、C₁-C₁₀烷氧基、环戊基、环己基、环庚基、环辛基、金刚烷基、降苡烷基、降冰片烯基、环戊烯基、环己烯基、环庚烯基、苯基、萘基、吡啶基、嘧啶基、或其任意组合。

[0126] 根据一种或多种实施方式, E₁₁-E₁₅可各自独立地为: 甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、正戊基、异戊基、仲戊基、叔戊基、正己基、异己基、仲己基、或叔己基;

[0127] 各自被如下的至少一个取代的甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、正戊基、异戊基、仲戊基、叔戊基、正己基、异己基、仲己基、或叔己基: 苯基、萘基、吡啶基、嘧啶基、或其任意组合;

[0128] 苯基、萘基、芴基、菲基、蒽基、荧蒽基、苯并[9,10]菲基、芘基、蒽基、吡啶基、或嘧啶基; 或

[0129] 各自被如下的至少一个取代的苯基、萘基、芴基、菲基、蒽基、荧蒽基、苯并[9,10]菲基、芘基、蒽基、吡啶基、或嘧啶基: 甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、正戊基、异戊基、仲戊基、叔戊基、正己基、异己基、仲己基、叔己基、苯基、萘基、吡啶基、嘧啶基、或其任意组合。

[0130] 在一种或多种实施方式中, E₁₆和E₁₇可各自独立地为: 正己基、异己基、仲己基、或叔己基;

[0131] 各自被如下的至少一个取代的正己基、异己基、仲己基、或叔己基: 苯基、萘基、吡啶基、嘧啶基、或其任意组合;

[0132] 萘基、芴基、菲基、蒽基、荧蒽基、苯并[9,10]菲基、芘基、蒽基、吡啶基、或嘧啶基; 或

[0133] 各自被如下的至少一个取代的苯基、萘基、芴基、菲基、蒽基、荧蒽基、苯并[9,10]菲基、芘基、蒽基、吡啶基、或嘧啶基: 甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、正戊基、异戊基、仲戊基、叔戊基、正己基、异己基、仲己基、叔己基、苯基、萘基、吡啶基、嘧啶基、或其任意组合。

[0134] E₁₁-E₁₅可各自独立地为:

[0135] 正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、正戊基、异戊基、仲戊基、叔戊基、正己基、异己基、仲己基、叔己基、苯基、萘基、吡啶基、或嘧啶基;

[0136] 各自被如下的至少一个取代的正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、正戊基、异戊基、仲戊基、叔戊基、正己基、异己基、仲己基、或叔己基: 苯基、萘基、吡啶基、嘧啶基、或其任意组合; 或

[0137] 各自被如下的至少一个取代的苯基、萘基、吡啶基、或嘧啶基: 甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、正戊基、异戊基、仲戊基、叔戊基、正己基、异己基、仲己基、叔己基、苯基、萘基、吡啶基、嘧啶基、或其任意组合。

[0138] 根据一种或多种实施方式, E₁₆和E₁₇可各自独立地为:

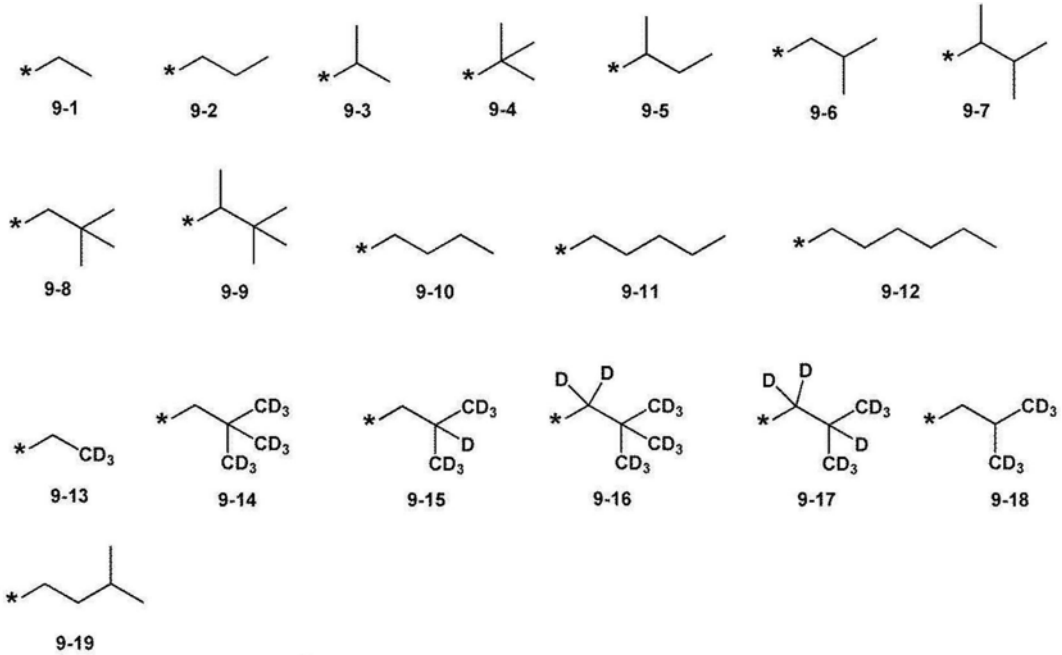
[0139] 正己基、异己基、仲己基、叔己基、萘基、芴基、菲基、蒽基、荧蒽基、苯并[9,10]菲基、芘基、蒽基、吡啶基、或嘧啶基;

[0140] 各自被如下取代的正己基、异己基、仲己基、或叔己基: 至少一个苯基、萘基、吡啶基、嘧啶基、或其任意组合; 或

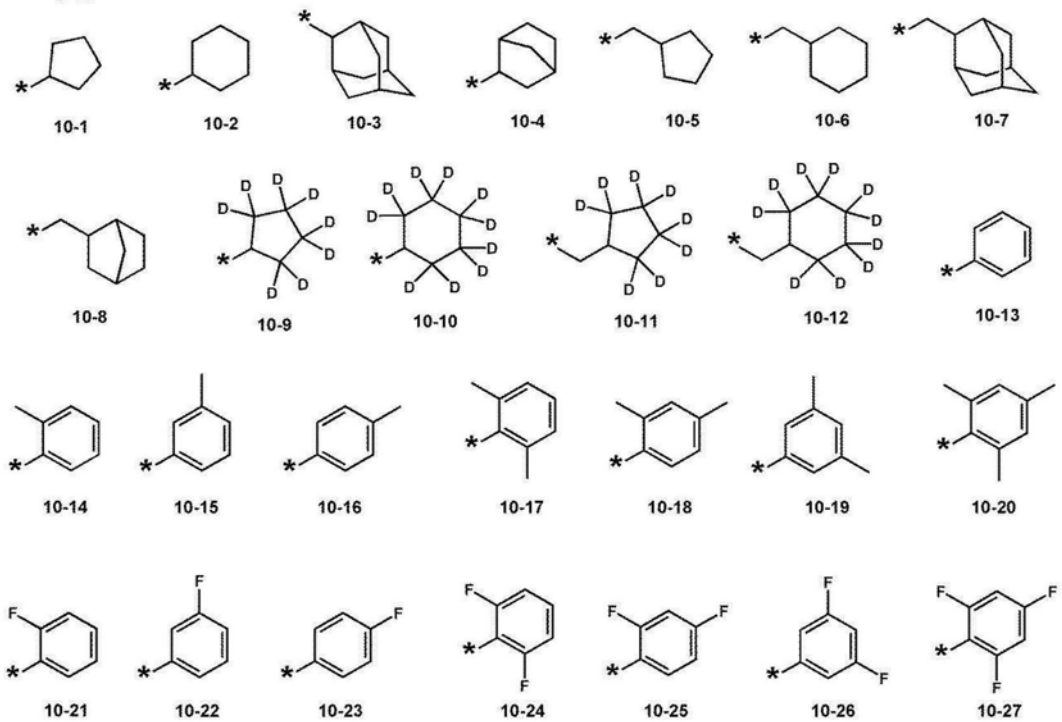
[0141] 各自被如下的至少一个取代的苯基、萘基、吡啶基、或嘧啶基: 甲基、乙基、正丙基、异丙基、正丁基、异丁基、仲丁基、叔丁基、正戊基、异戊基、仲戊基、叔戊基、正己基、异己基、

基、仲戊基、叔戊基、苯基、或萘基：至少一个氘、C₁-C₁₀烷基、苯基、或其任意组合。

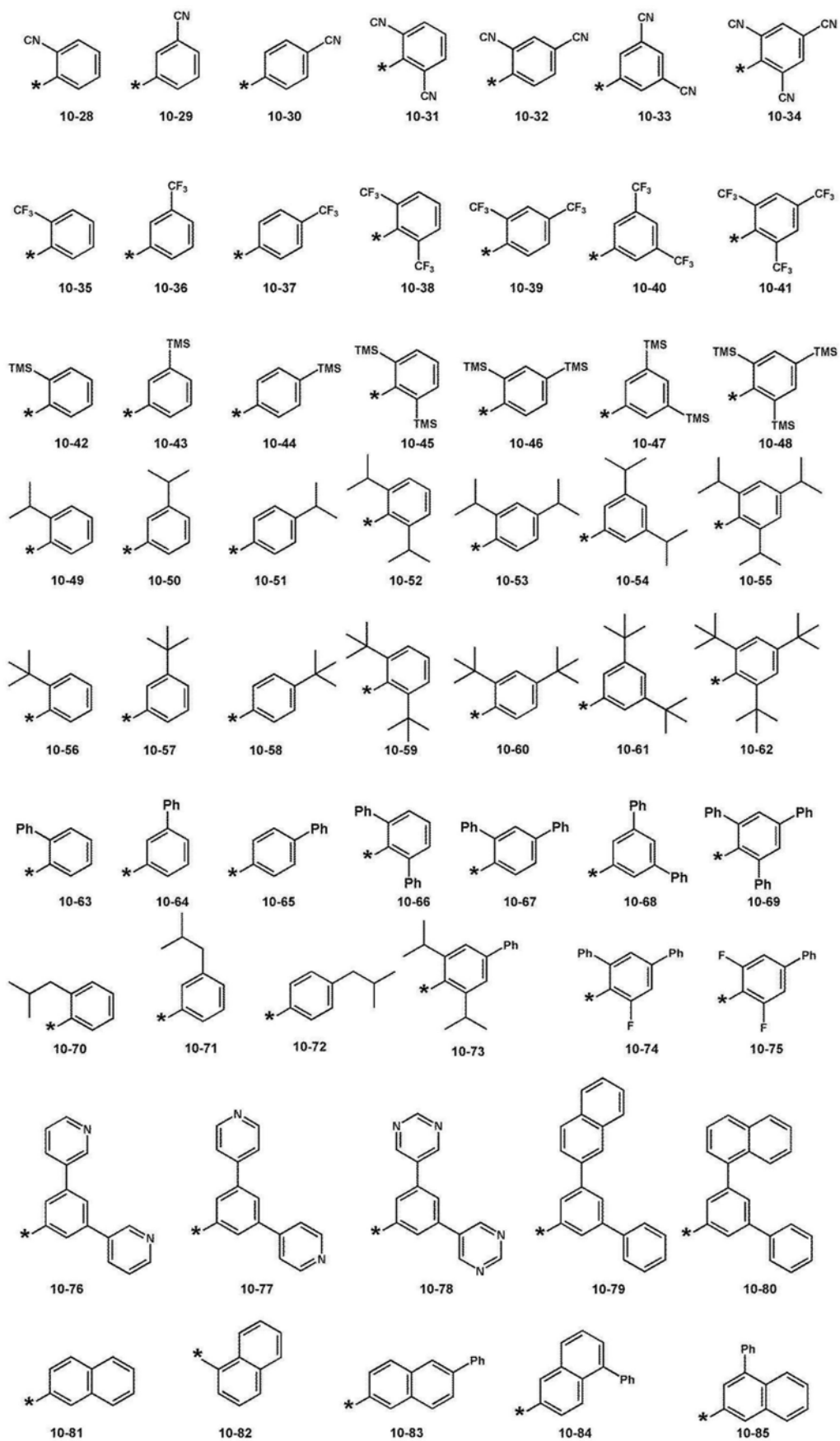
[0175] 在一种或多种实施方式中，R₁-R₄、R₁₁、R₁₂、R₂₀、R₃₀和R₄₀可各自独立地为氢、氘、-F、氰基、硝基、-SF₅、-CH₃、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、由式9-1至9-19之一表示的基团、或由式10-1至10-194之一表示的基团：

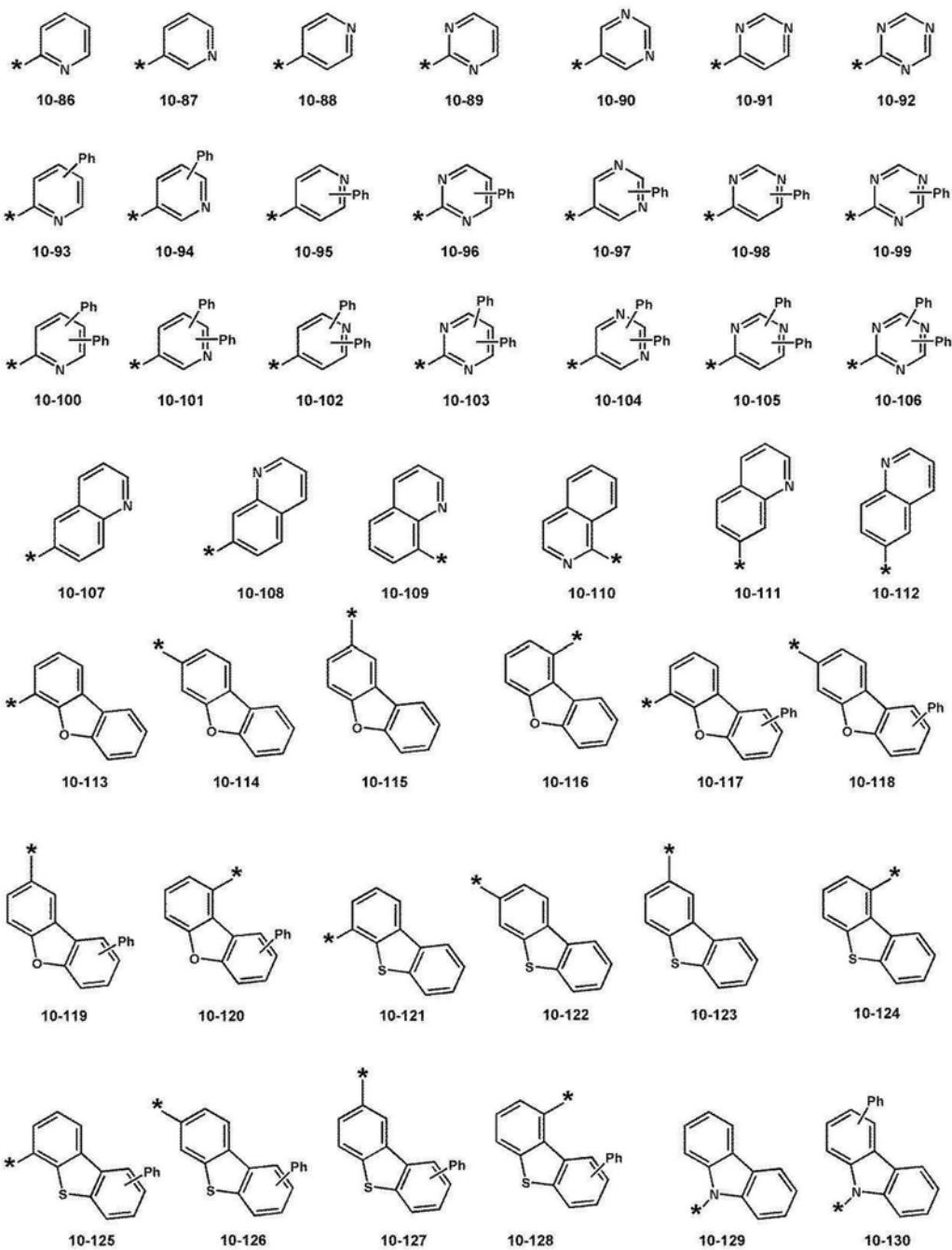


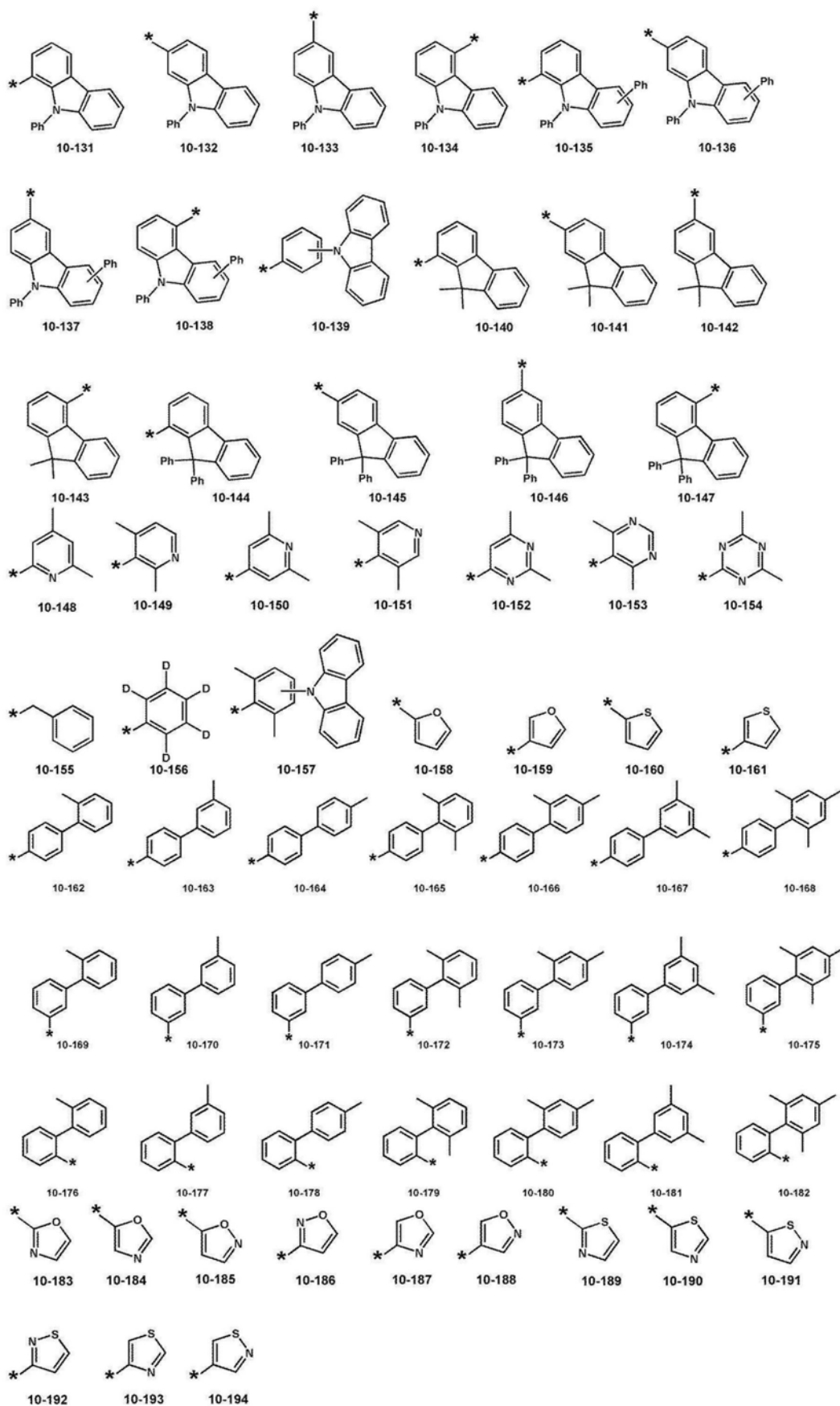
[0176]



[0177]







[0180] 在式9-1至9-19和10-1至10-194中,*表示与相邻原子的结合位点,Ph可为苯基,和TMS可为三甲基甲硅烷基。

[0181] 根据一种或多种实施方式, R_1 - R_4 、 R_{20} 、 R_{30} 和 R_{40} 的相邻的两个或更多个可连接在一起以形成取代或未取代的 C_5 - C_{30} 碳环基团或者取代或未取代的 C_1 - C_{30} 杂环基团。

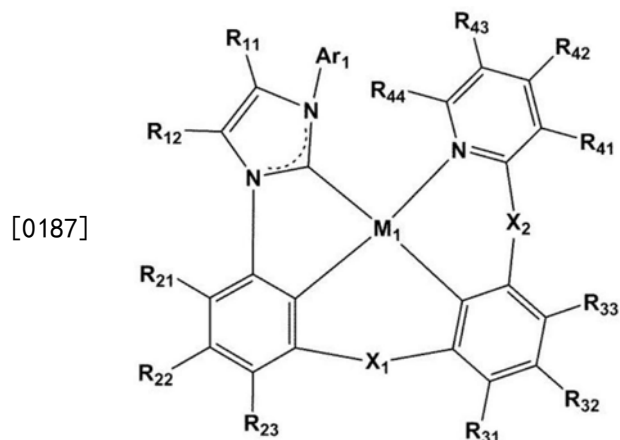
[0182] 在一种或多种实施方式中, 式1中的 R_1 - R_4 、 R_{20} 、 R_{30} 和 R_{40} 的相邻的两个或更多个可任选地连接在一起以形成各自未被取代或者被至少一个 R_{10a} 取代的环戊烷基团、环戊二烯基团、呋喃基团、噻吩基团、吡咯基团、噻咯基团、金刚烷基团、降茛烷基团、降冰片烯基团、环己烷基团、环己烯基团、苯基团、萘基团、茚基团、吡啶基团、苯并呋喃基团、苯并噻吩基团、苯并噻咯基团、茈基团、咪唑基团、二苯并呋喃基团、二苯并噻吩基团、或二苯并噻咯基团。 R_{10a} 与关于 R_1 描述的相同。

[0183] 在一种或多种实施方式中, R_1 - R_4 、 R_{20} 、 R_{30} 和 R_{40} 的相邻的两个或更多个可任选地经由单键、双键或第一连接基团连接在一起以形成未被取代或者被至少一个 R_{10a} 取代的 C_5 - C_{30} 碳环基团或者未被取代或者被至少一个 R_{10a} 取代的 C_1 - C_{30} 杂环基团(例如, 各自未被取代或者被至少一个 R_{10a} 取代的茈基团、咕吨基团、吡啶基团等)。 R_{10a} 与关于 R_1 描述的相同。

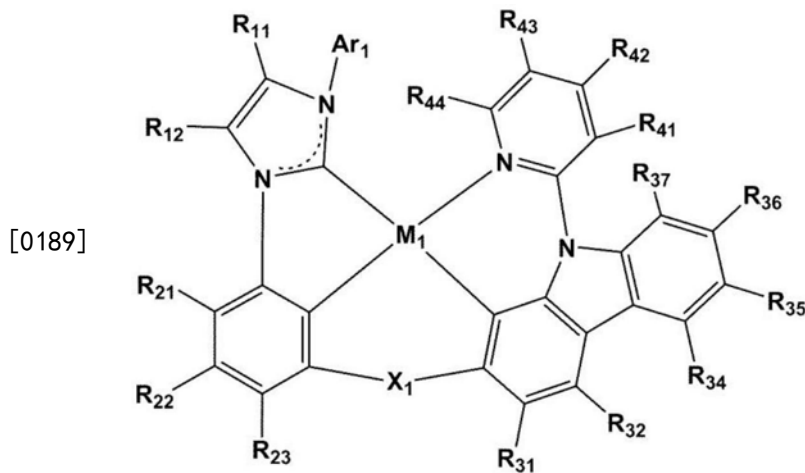
[0184] 所述第一连接基团可为 $*-N(R_5)-*$ 、 $*-B(R_5)-*$ 、 $*-P(R_6)-*$ 、 $*-C(R_5)(R_6)-*$ 、 $*-Si(R_5)(R_6)-*$ 、 $*-Ge(R_5)(R_6)-*$ 、 $*-S-*$ 、 $*-Se-*$ 、 $*-O-*$ 、 $*-C(=O)-*$ 、 $*-S(=O)-*$ 、 $*-S(=O)_2-*$ 、 $*-C(R_5)=*$ 、 $*=C(R_5)-*$ 、 $*-C(R_5)=C(R_6)-*$ 、 $*-C(=S)-*$ 、或 $*-C\equiv C-*$, 并且 R_5 和 R_6 与关于 R_1 描述的相同, 且 $*$ 和 $'$ 各自表示与相邻原子的结合位点。

[0185] 在一种或多种实施方式中, 由式1表示的有机金属化合物可由式2-1或2-2之一表示:

[0186] <式2-1>



[0188] <式2-2>



[0190] 在式2-1和2-2中，

[0191] M_1 、 Ar_1 、 R_{11} 和 R_{12} 与在本说明书中描述的相同，

[0192] X_1 可为O或S，和 X_2 可为单键、O或S，

[0193] R_{21} - R_{23} 可各自独立地与关于 R_{20} 描述的相同，

[0194] R_{31} - R_{37} 可各自独立地与关于 R_{30} 描述的相同，

[0195] R_{41} - R_{44} 可各自独立地与关于 R_{40} 描述的相同，和

[0196] 相邻的 R_{21} - R_{23} 、 R_{31} - R_{37} 、和 R_{41} - R_{44} 的两个或更多个可任选地连接在一起以形成苯环或萘环。

[0197] 取代的 C_5 - C_{30} 碳环基团、取代的 C_1 - C_{30} 杂环基团、取代的 C_1 - C_{60} 烷基、取代的 C_6 - C_{60} 烷基、取代的 C_2 - C_{60} 烯基、取代的 C_2 - C_{60} 炔基、取代的 C_1 - C_{60} 烷氧基、取代的 C_1 - C_{60} 烷硫基、取代的 C_3 - C_{10} 环烷基、取代的 C_1 - C_{10} 杂环烷基、取代的 C_3 - C_{10} 环烯基、取代的 C_2 - C_{10} 杂环烯基、取代的 C_6 - C_{60} 芳基、取代的 C_7 - C_{60} 烷基芳基、取代的 C_6 - C_{60} 芳氧基、取代的 C_6 - C_{60} 芳硫基、取代的 C_1 - C_{60} 杂芳基、取代的 C_2 - C_{60} 烷基杂芳基、取代的 C_1 - C_{60} 杂芳氧基、取代的 C_1 - C_{60} 杂芳硫基、取代的单价非芳族稠合多环基团、和取代的单价非芳族稠合杂多环基团的至少一个取代基为：

[0198] 氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、脒基、胼基、脞基、羧基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、 C_1 - C_{60} 烷基、 C_2 - C_{60} 烯基、 C_2 - C_{60} 炔基、或 C_1 - C_{60} 烷氧基；

[0199] 各自被如下的至少一个取代的 C_1 - C_{60} 烷基、 C_2 - C_{60} 烯基、 C_2 - C_{60} 炔基、或 C_1 - C_{60} 烷氧基：氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、脒基、胼基、脞基、羧基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、 C_3 - C_{10} 环烷基、 C_1 - C_{10} 杂环烷基、 C_3 - C_{10} 环烯基、 C_2 - C_{10} 杂环烯基、 C_6 - C_{60} 芳基、 C_6 - C_{60} 芳氧基、 C_6 - C_{60} 芳硫基、 C_1 - C_{60} 杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、单价非芳族稠合杂多环基团、-N(Q₁₁)(Q₁₂)、-Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅)、-B(Q₁₆)(Q₁₇)、-P(=O)(Q₁₈)(Q₁₉)、或其任意组合；

[0200] C_3 - C_{10} 环烷基、 C_1 - C_{10} 杂环烷基、 C_3 - C_{10} 环烯基、 C_2 - C_{10} 杂环烯基、 C_6 - C_{60} 芳基、 C_6 - C_{60} 芳氧基、 C_6 - C_{60} 芳硫基、 C_1 - C_{60} 杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、或单价非芳族稠合杂多环基团；

[0201] 各自被如下的至少一个取代的 C_3 - C_{10} 环烷基、 C_1 - C_{10} 杂环烷基、 C_3 - C_{10} 环烯基、 C_2 - C_{10} 杂环烯基、 C_6 - C_{60} 芳基、 C_6 - C_{60} 芳氧基、 C_6 - C_{60} 芳硫基、 C_1 - C_{60} 杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、或单价非芳族稠合杂多环基团：氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-

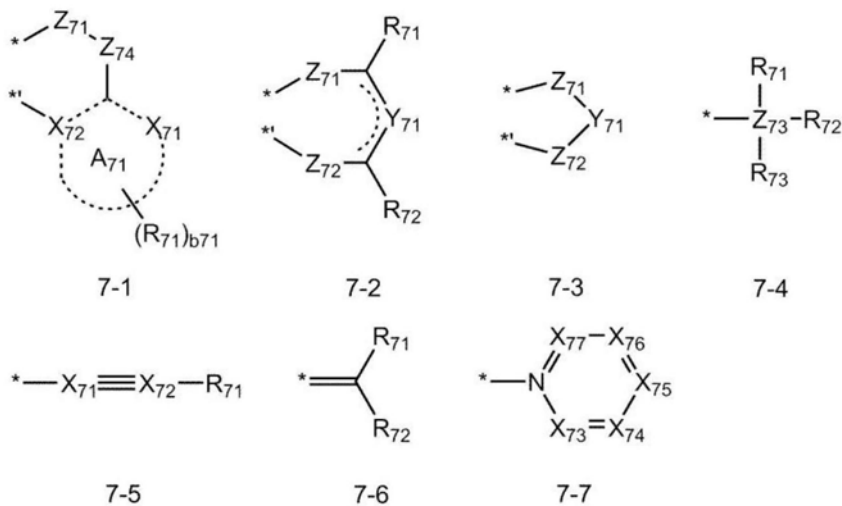
CFH₂、羟基、氰基、硝基、脒基、胼基、脞基、羧基、羧基或其盐、磺基、磺基或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₆₀烷基、C₂-C₆₀烯基、C₂-C₆₀炔基、C₁-C₆₀烷氧基、C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、单价非芳族稠合杂多环基团、-N(Q₂₁)(Q₂₂)、-Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅)、-B(Q₂₆)(Q₂₇)、-P(=O)(Q₂₈)(Q₂₉)、或其任意组合；或

[0202] -N(Q₃₁)(Q₃₂)、-Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅)、-B(Q₃₆)(Q₃₇)、或-P(=O)(Q₃₈)(Q₃₉)，

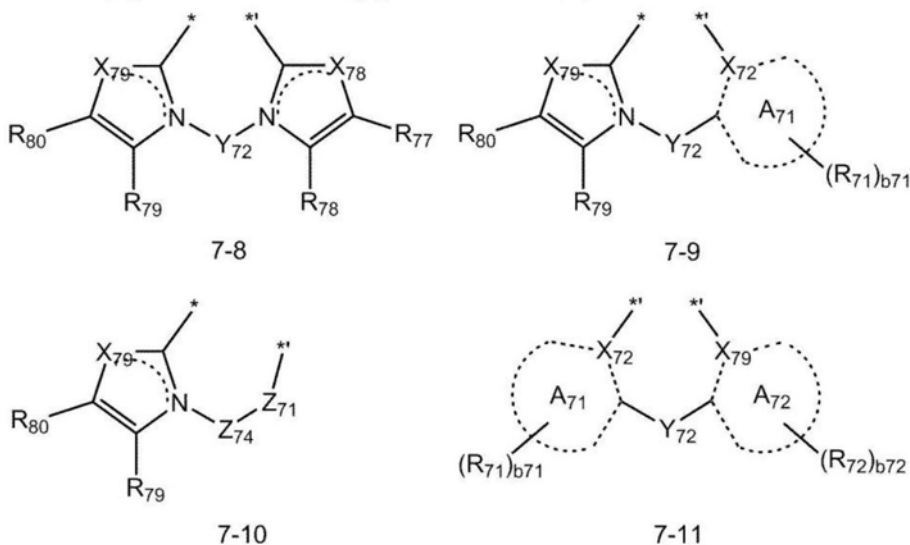
[0203] 其中Q₁-Q₉、Q₁₁-Q₁₉、Q₂₁-Q₂₉和Q₃₁-Q₃₉可各自独立地为氢，氘，-F，-Cl，-Br，-I，羟基，氰基，硝基，脒基，胼基，脞基，羧基、羧基或其盐，磺基、磺基或其盐，磷酸基团或其盐，C₁-C₆₀烷基，C₂-C₆₀烯基，C₂-C₆₀炔基，C₁-C₆₀烷氧基，C₃-C₁₀环烷基，C₁-C₁₀杂环烷基，C₃-C₁₀环烯基，C₂-C₁₀杂环烯基，C₆-C₆₀芳基，被至少一个C₁-C₆₀烷基、C₆-C₆₀芳基、或其任意组合取代的C₆-C₆₀芳基，C₆-C₆₀芳氧基，C₆-C₆₀芳硫基，C₁-C₆₀杂芳基，单价非芳族稠合多环基团，单价非芳族稠合杂多环基团，或其任意组合。

[0204] 式1中的L₁₂可为单齿配体或二齿配体。

[0205] 例如，式1中的L₁₂可为由式7-1至7-11之一表示的配体，但是实施方式不限于此：



[0206]



[0207] 在式7-1至7-11中，

[0208] A₇₁和A₇₂可各自独立地为C₅-C₂₀碳环基团或C₁-C₂₀杂环基团，

[0209] X₇₁和X₇₂可各自独立地为C或N，

[0210] X_{73} 可为N或C(Q₇₃) ; X_{74} 可为N或C(Q₇₄) ; X_{75} 可为N或C(Q₇₅) ; X_{76} 可为N或C(Q₇₆) ; X_{77} 可为N或C(Q₇₇) ,

[0211] X_{78} 可为O、S或N(Q₇₈) ; X_{79} 可为O、S、N(Q₇₉)、或N,

[0212] Y_{71} 和 Y_{72} 可各自独立地为单键、双键、取代或未取代的C₁-C₅亚烷基、取代或未取代的C₂-C₅亚烯基、或者取代或未取代的C₆-C₁₀亚芳基,

[0213] Z_{71} 和 Z_{72} 可各自独立地为N、O、N(R₇₄)、P(R₇₅)(R₇₆)、或As(R₇₅)(R₇₆),

[0214] Z_{73} 可为P或As,

[0215] Z_{74} 可为CO或CH₂,

[0216] R₇₁-R₈₀和Q₇₃-Q₇₉可各自独立地为氢、氘、-F、-Cl、-Br、-I、羟基、氰基、硝基、氨基、脞基、胍基、脲基、脘基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、取代或未取代的C₁-C₆₀烷基、取代或未取代的C₂-C₆₀烯基、取代或未取代的C₂-C₆₀炔基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷氧基、取代或未取代的C₁-C₆₀烷硫基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烷基、取代或未取代的C₁-C₁₀杂环烷基、取代或未取代的C₃-C₁₀环烯基、取代或未取代的C₂-C₁₀杂环烯基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳氧基、取代或未取代的C₆-C₆₀芳硫基、取代或未取代的C₁-C₆₀杂芳基、取代或未取代的单价非芳族稠合多环基团、或者取代或未取代的单价非芳族稠合杂多环基团, R₇₁和R₇₂可任选地连接以形成环, R₇₇和R₇₈可任选地连接以形成环, R₇₈和R₇₉可任选地连接以形成环, 以及R₇₉和R₈₀可任选地连接以形成环,

[0217] b₇₁和b₇₂可各自独立地为1、2或3, 和

[0218] *和*各自表示与相邻原子的结合位点。

[0219] 例如, 式7-1中的A₇₁和A₇₂可各自独立地为苯基团、萘基团、咪唑基团、苯并咪唑基团、吡啶基团、嘧啶基团、三嗪基团、喹啉基团、或异喹啉基团, 但是本公开内容的实施方式不限于此。

[0220] 在一种或多种实施方式中, 式7-1中的 X_{71} 和 X_{72} 可为N, 但是本公开内容的实施方式不限于此。在一种或多种实施方式中, 式7-11中的 X_{72} 和 X_{79} 可为N, 但是本公开内容的实施方式不限于此。

[0221] 在一种或多种实施方式中, 在式7-7中, X_{73} 可为C(Q₇₃) ; X_{74} 可为C(Q₇₄) ; X_{75} 可为C(Q₇₅) ; X_{76} 可为C(Q₇₆) ; 和 X_{77} 可为C(Q₇₇) , 但是本公开内容的实施方式不限于此。

[0222] 在一种或多种实施方式中, 在式7-8中, X_{78} 可为N(Q₇₈) ; 和 X_{79} 可为N(Q₇₉) , 但是本公开内容的实施方式不限于此。

[0223] 在一种或多种实施方式中, 式7-2、7-3和7-8中的 Y_{71} 和 Y_{72} 可各自独立地为取代或未取代的亚甲基、或者取代或未取代的亚苯基, 但是本公开内容的实施方式不限于此。

[0224] 在一种或多种实施方式中, 式7-1和7-2中的 Z_{71} 和 Z_{72} 可各自为O, 但是本公开内容的实施方式不限于此。

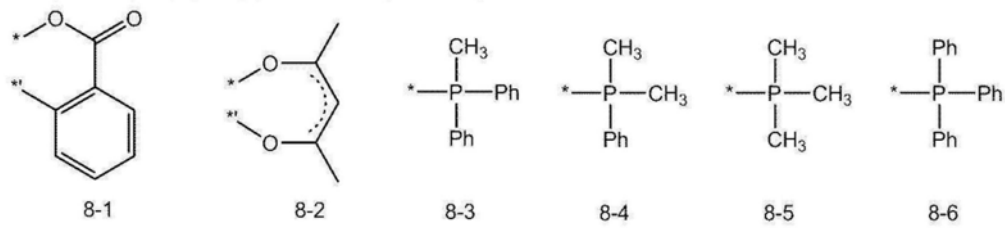
[0225] 在一种或多种实施方式中, 式7-4中的 Z_{73} 可为P, 但是本公开内容的实施方式不限于此。

[0226] 例如, 式7-1至7-11中的R₇₁-R₈₀和Q₇₃-Q₇₉可各自独立地为:

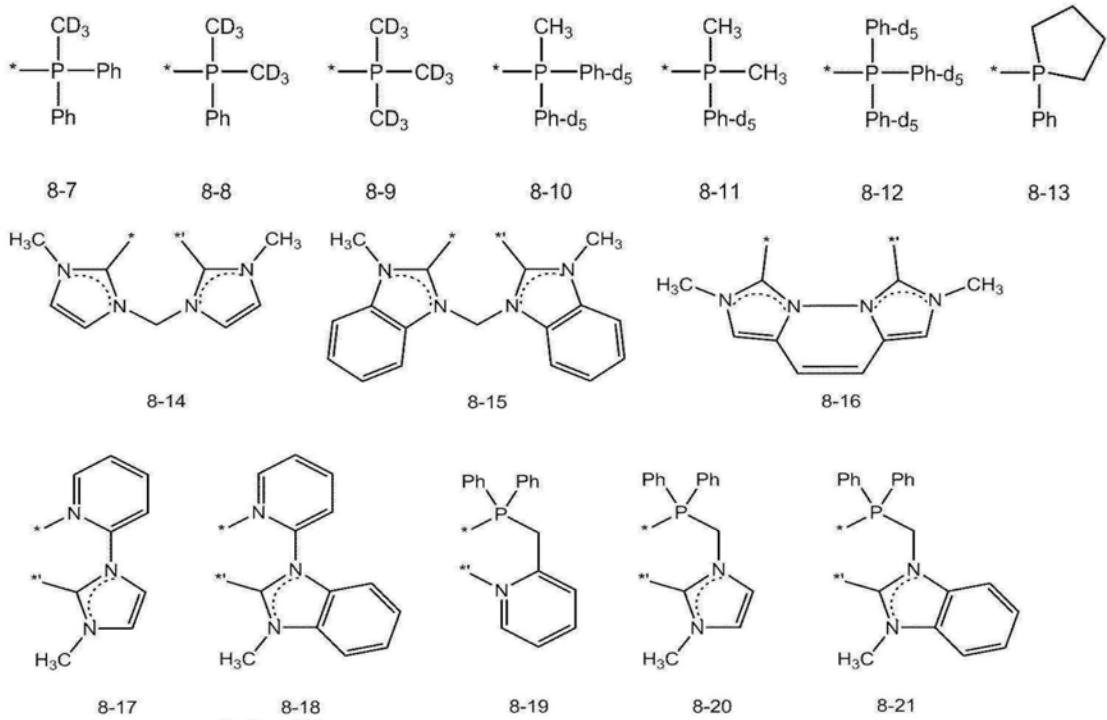
[0227] 氢、氘、-F、-Cl、-Br、-I、羟基、氰基、硝基、氨基、脞基、胍基、脲基、脘基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、-SF₅、C₁-C₂₀烷基、或C₁-C₂₀烷氧基;

[0228] 各自被如下取代的C₁-C₂₀烷基或C₁-C₂₀烷氧基: 至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、-

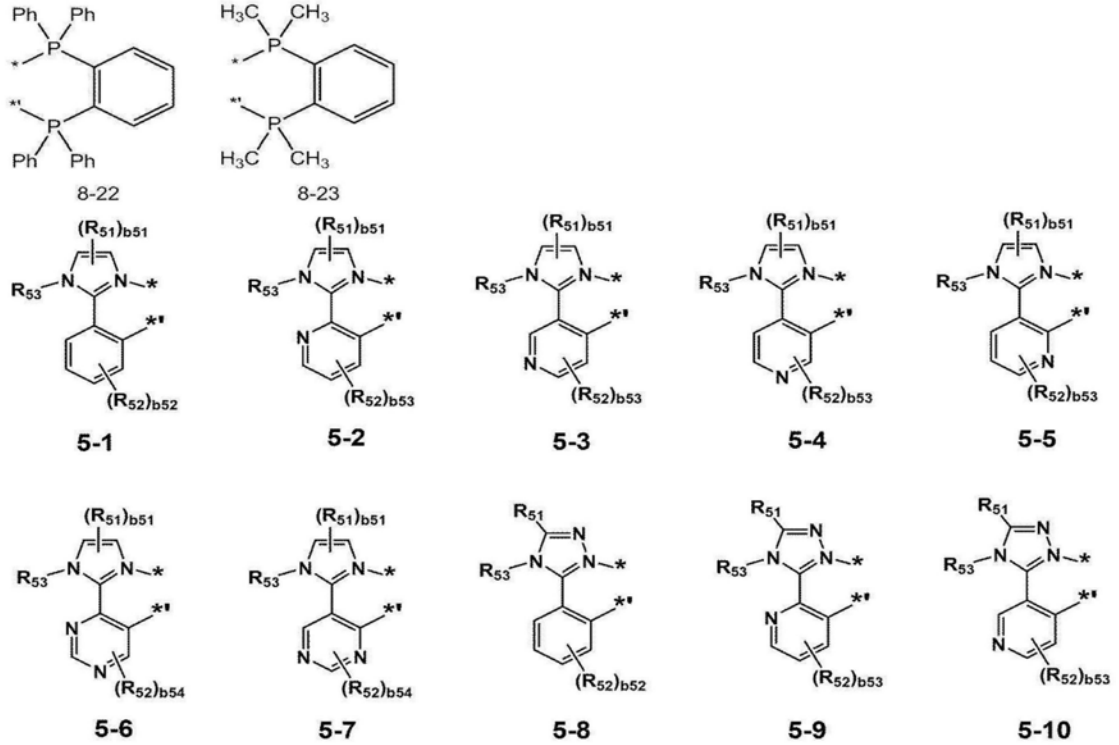
[0235] 式1中的L₁₂可为由式5-1至5-116和8-1至8-23之一表示的配体,但是本公开内容的实施方式不限于此:

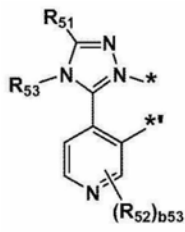


[0236]

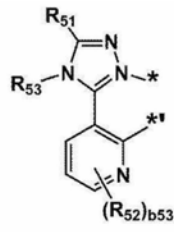


[0237]

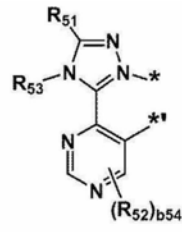




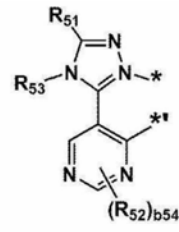
5-11



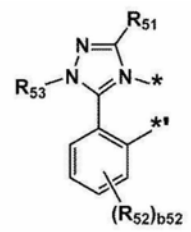
5-12



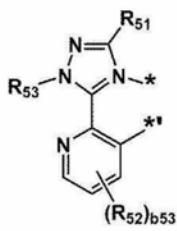
5-13



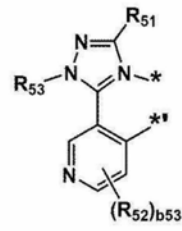
5-14



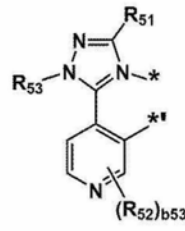
5-15



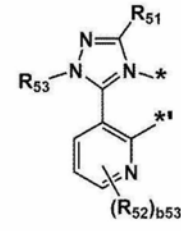
5-16



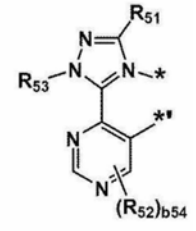
5-17



5-18

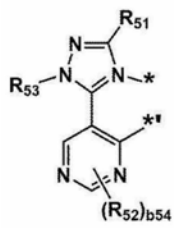


5-19

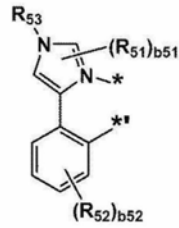


5-20

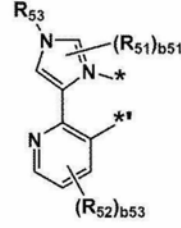
[0238]



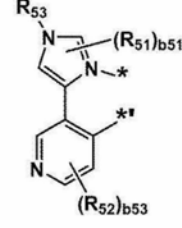
5-21



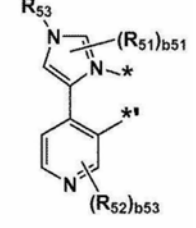
5-22



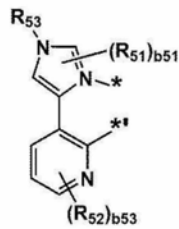
5-23



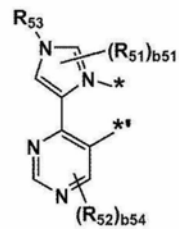
5-24



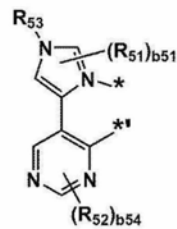
5-25



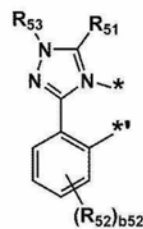
5-26



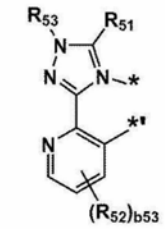
5-27



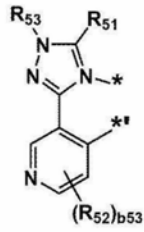
5-28



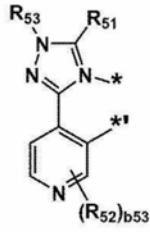
5-29



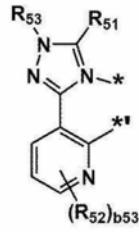
5-30



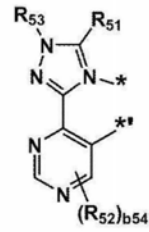
5-31



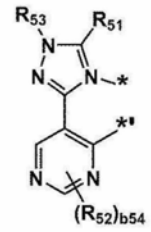
5-32



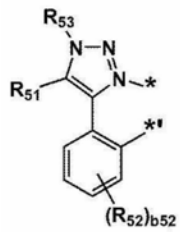
5-33



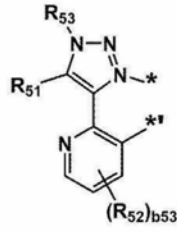
5-34



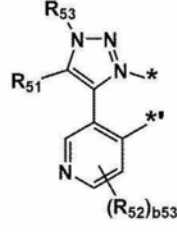
5-35



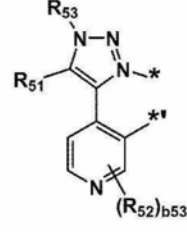
5-36



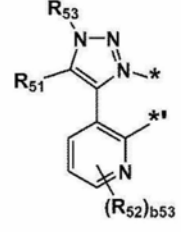
5-37



5-38

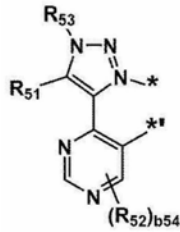


5-39

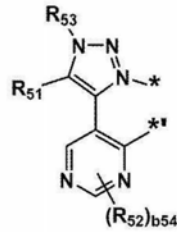


5-40

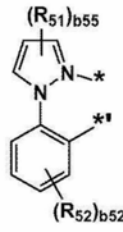
[0239]



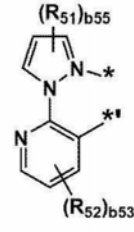
5-41



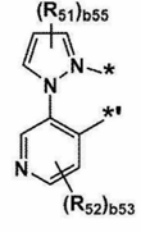
5-42



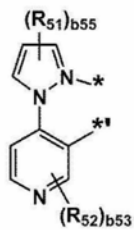
5-43



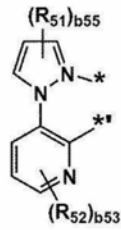
5-44



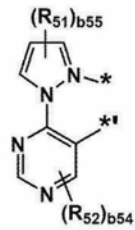
5-45



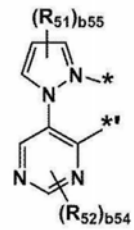
5-46



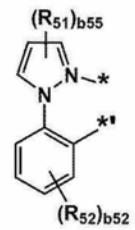
5-47



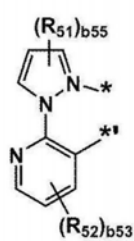
5-48



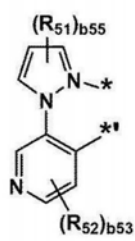
5-49



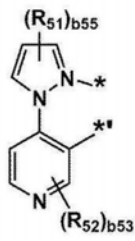
5-50



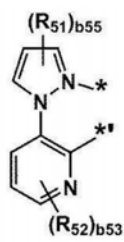
5-51



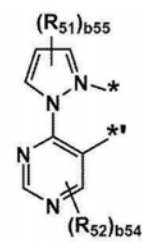
5-52



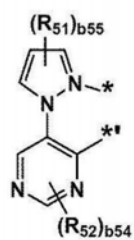
5-53



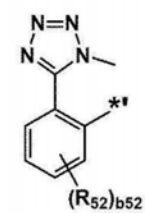
5-54



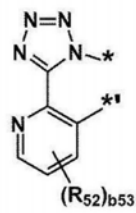
5-55



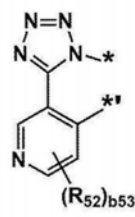
5-56



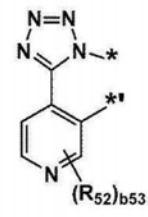
5-57



5-58

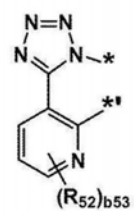


5-59

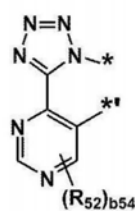


5-60

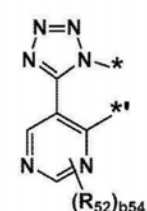
[0240]



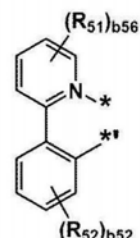
5-61



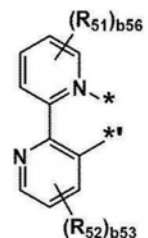
5-62



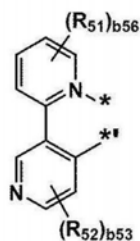
5-63



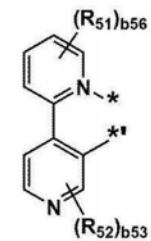
5-64



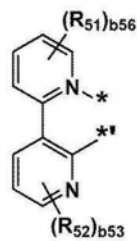
5-65



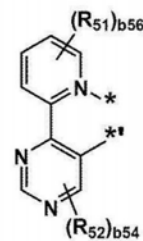
5-66



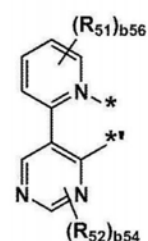
5-67



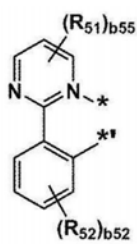
5-68



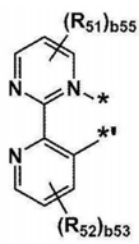
5-69



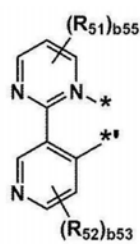
5-70



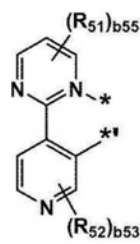
5-71



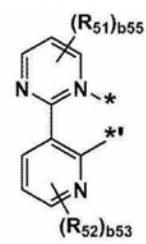
5-72



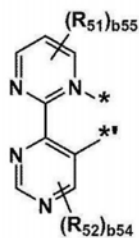
5-73



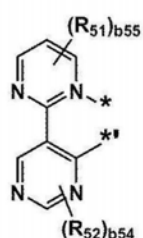
5-74



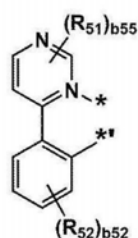
5-75



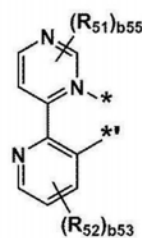
5-76



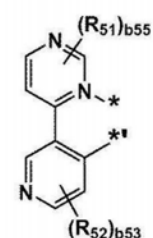
5-77



5-78

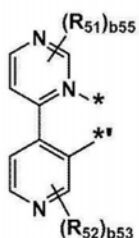


5-79

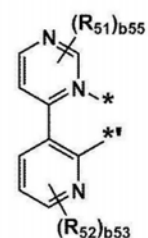


5-80

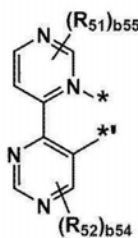
[0241]



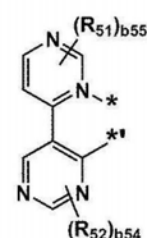
5-81



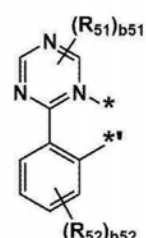
5-82



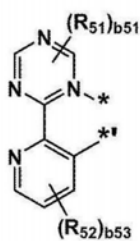
5-83



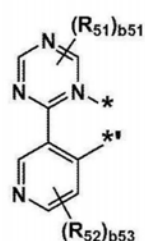
5-84



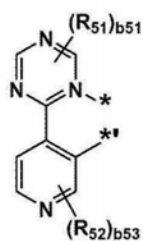
5-85



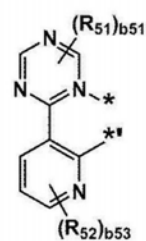
5-86



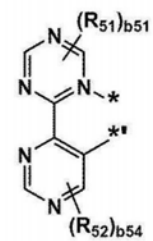
5-87



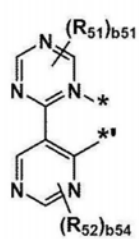
5-88



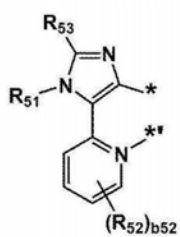
5-89



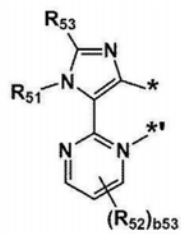
5-90



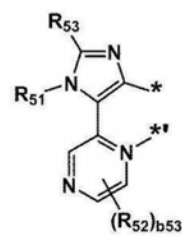
5-91



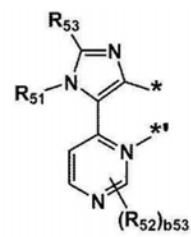
5-92



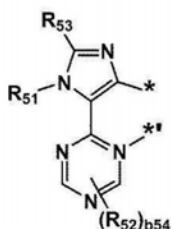
5-93



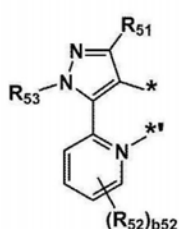
5-94



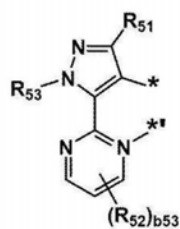
5-95



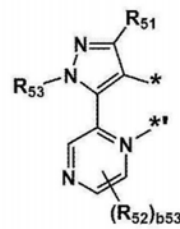
5-96



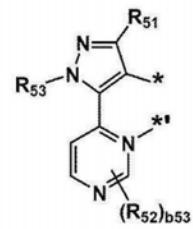
5-97



5-98



5-99

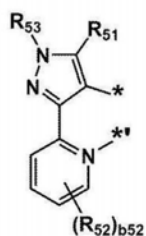


5-100

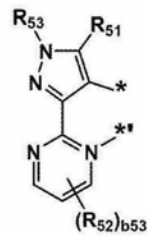
[0242]



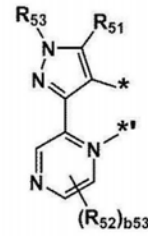
5-101



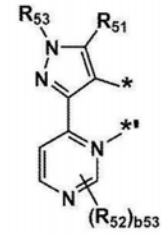
5-102



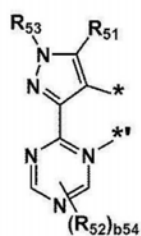
5-103



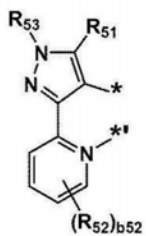
5-104



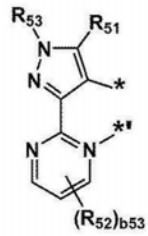
5-105



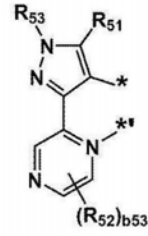
5-106



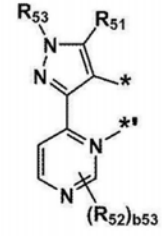
5-107



5-108

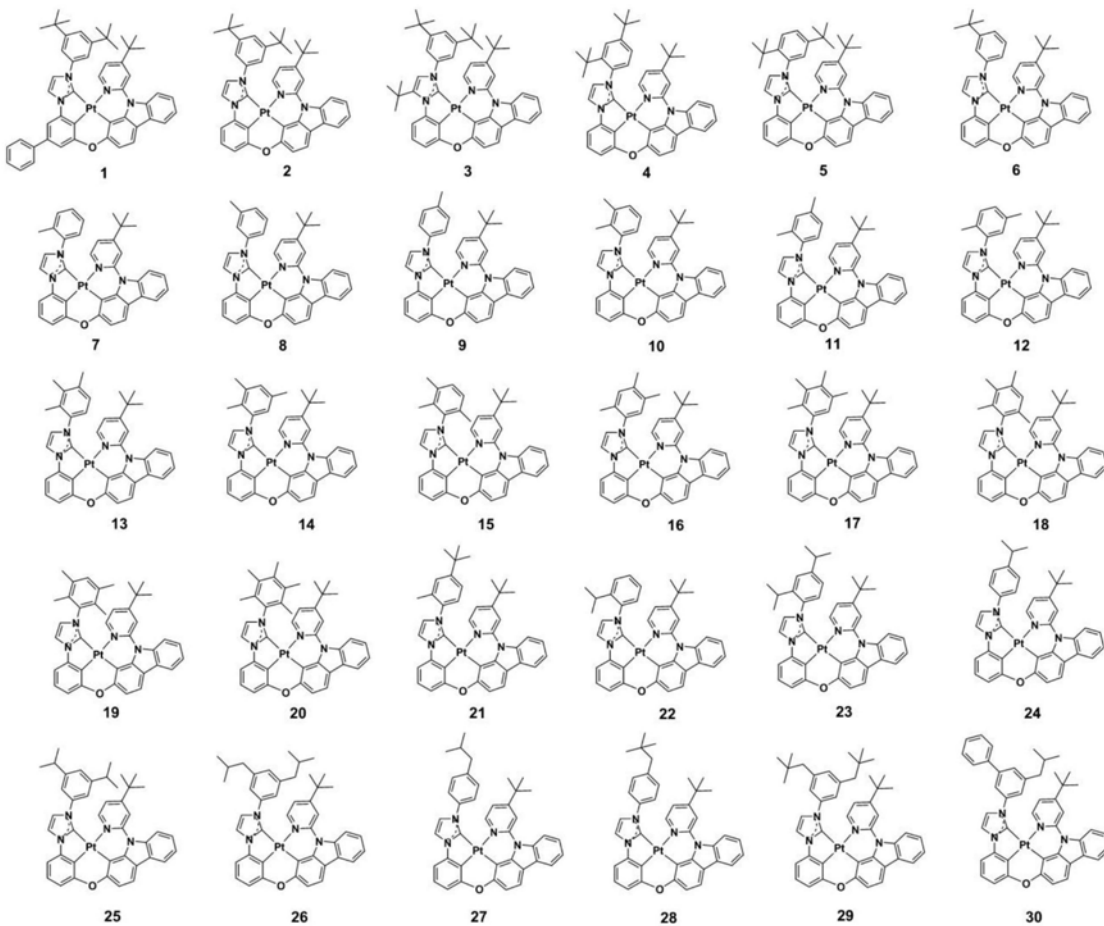


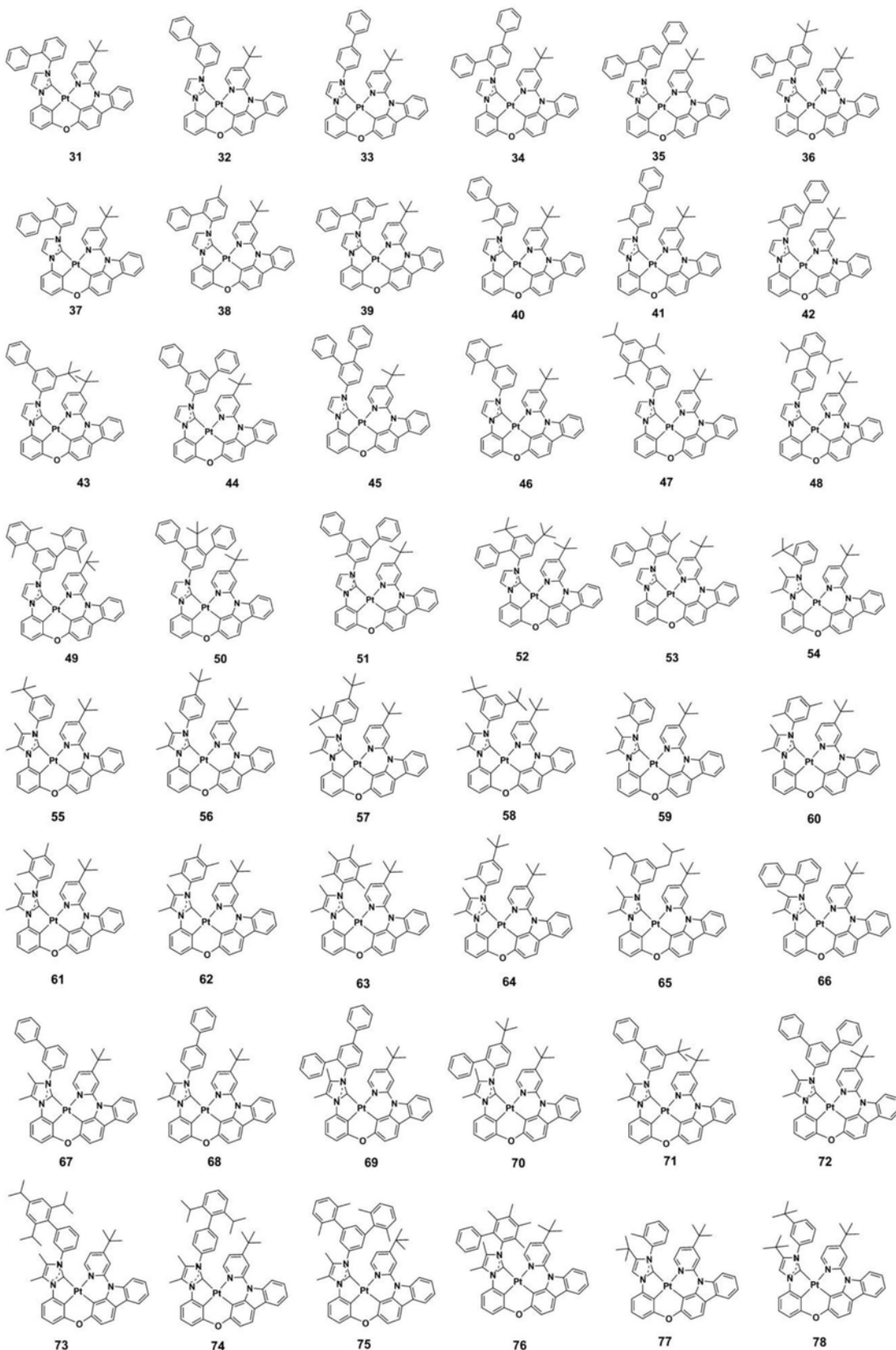
5-109



5-110

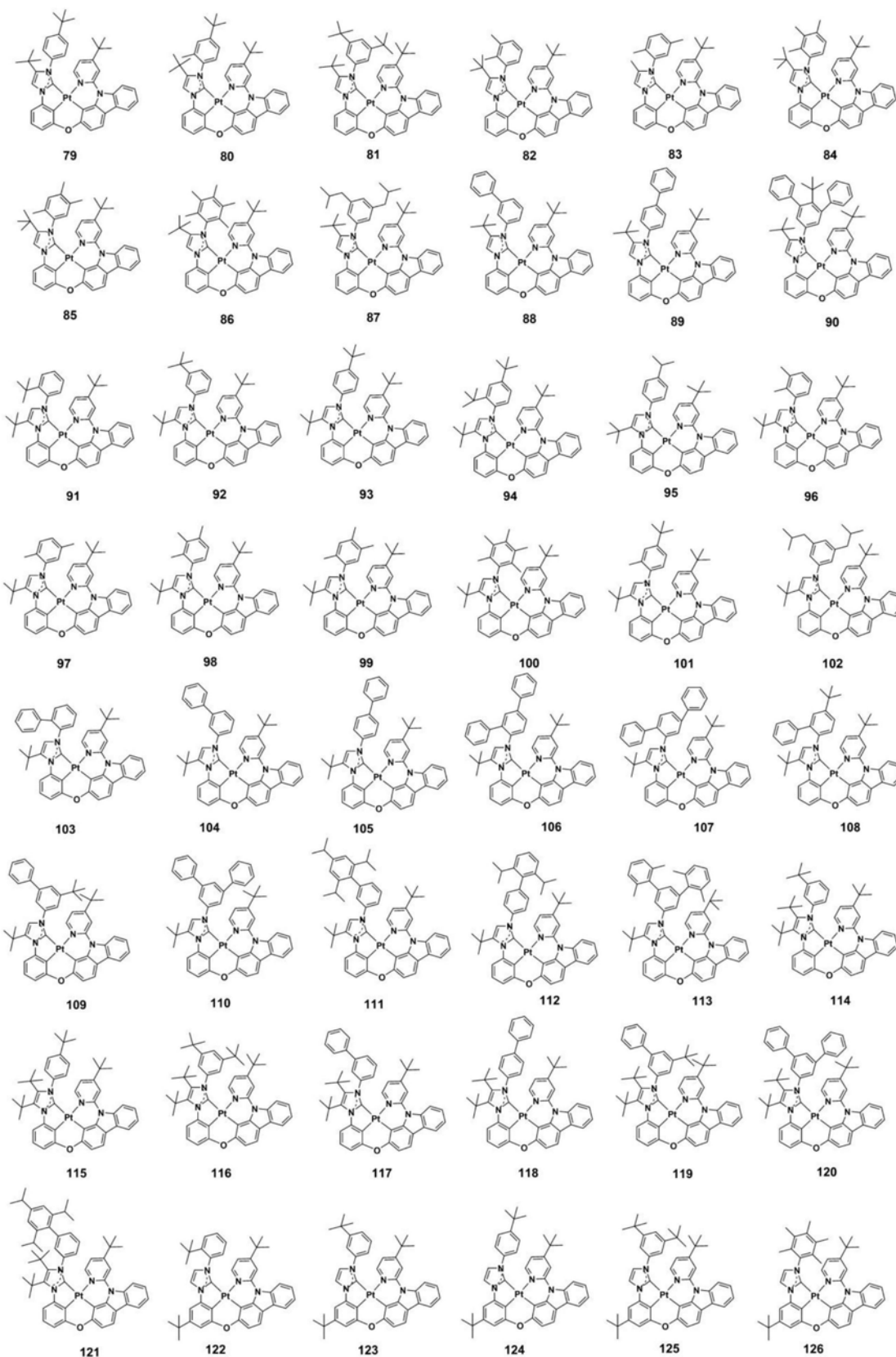
[0262]



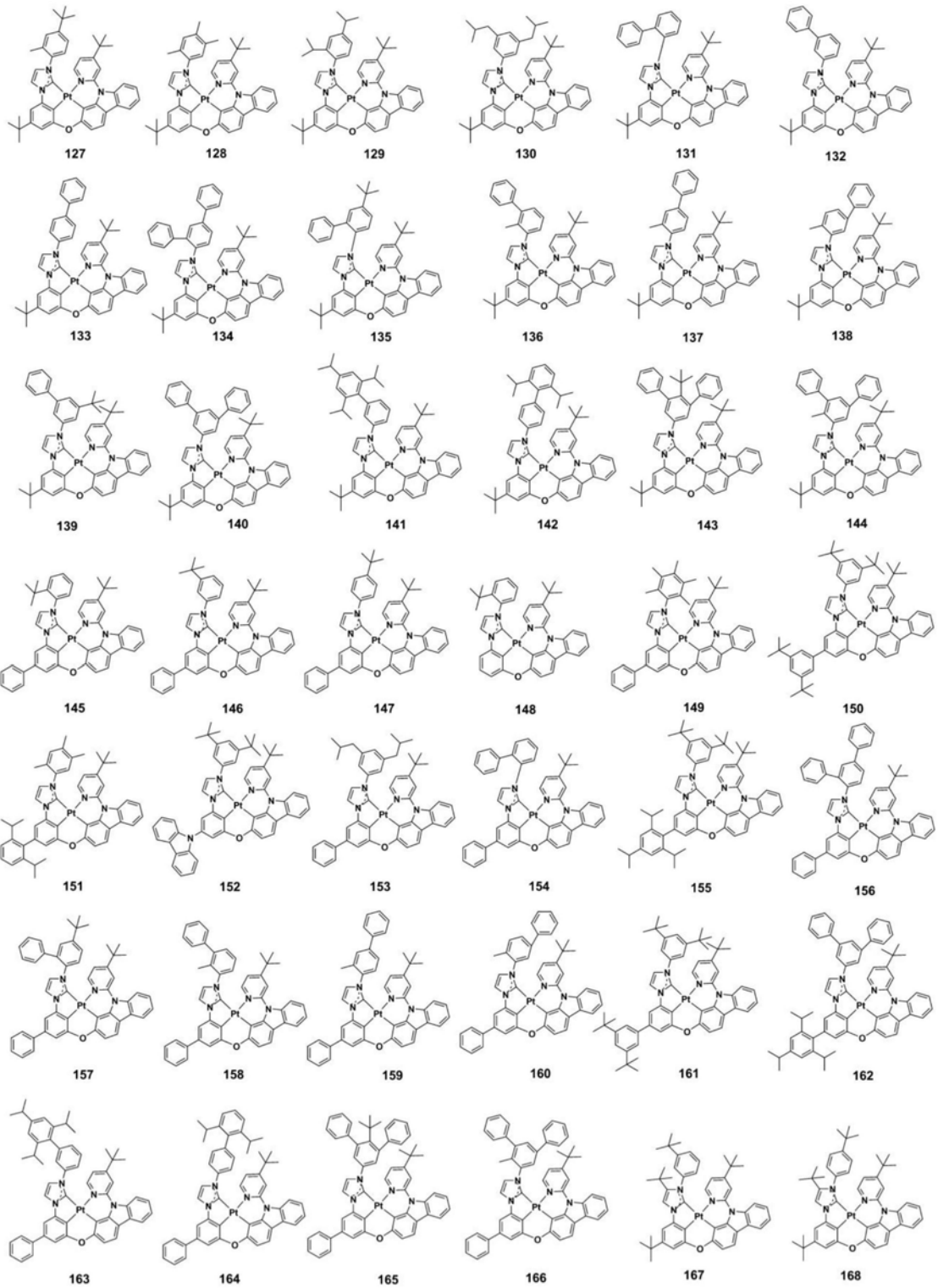


[0263]

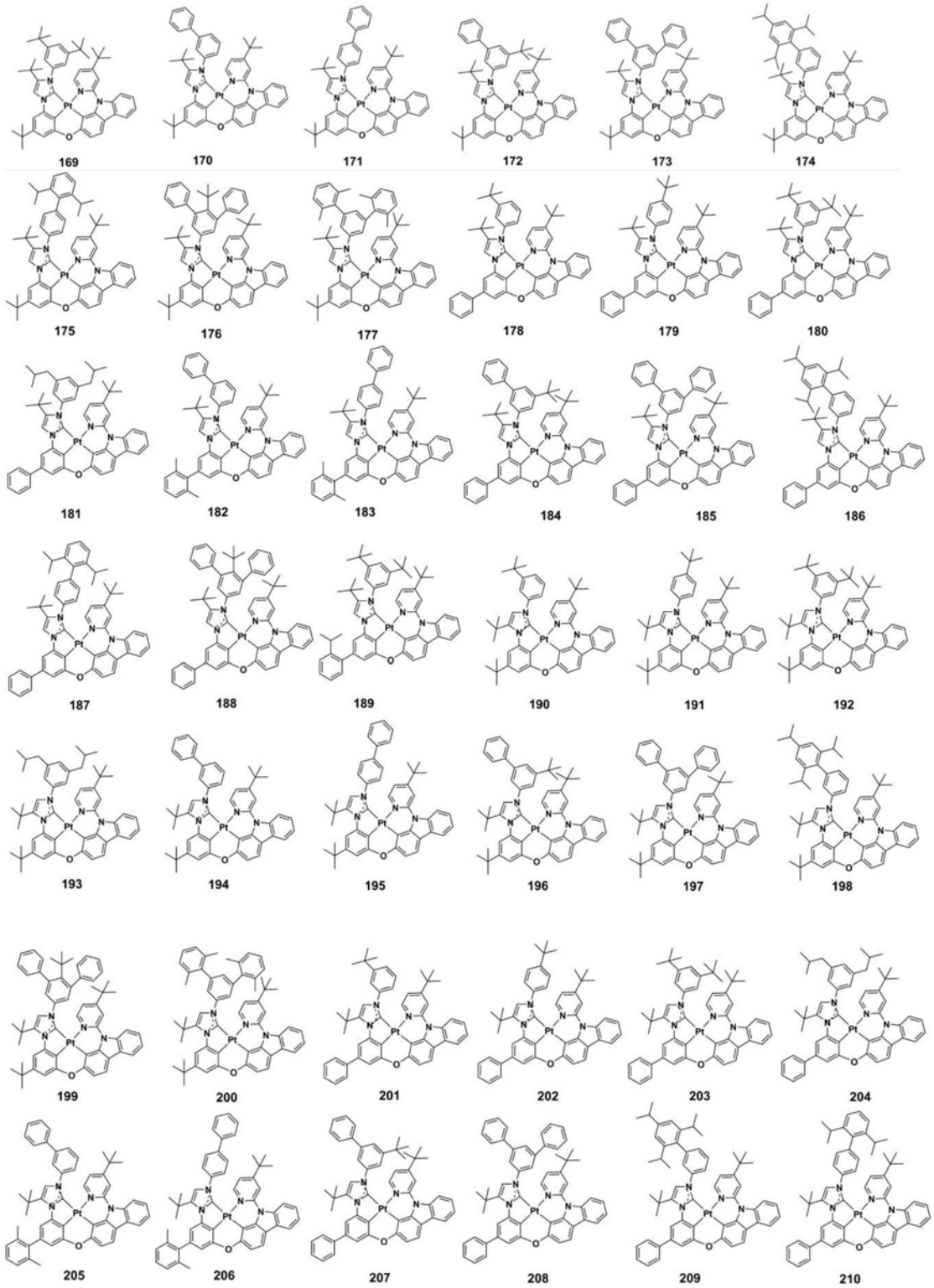
[0264]



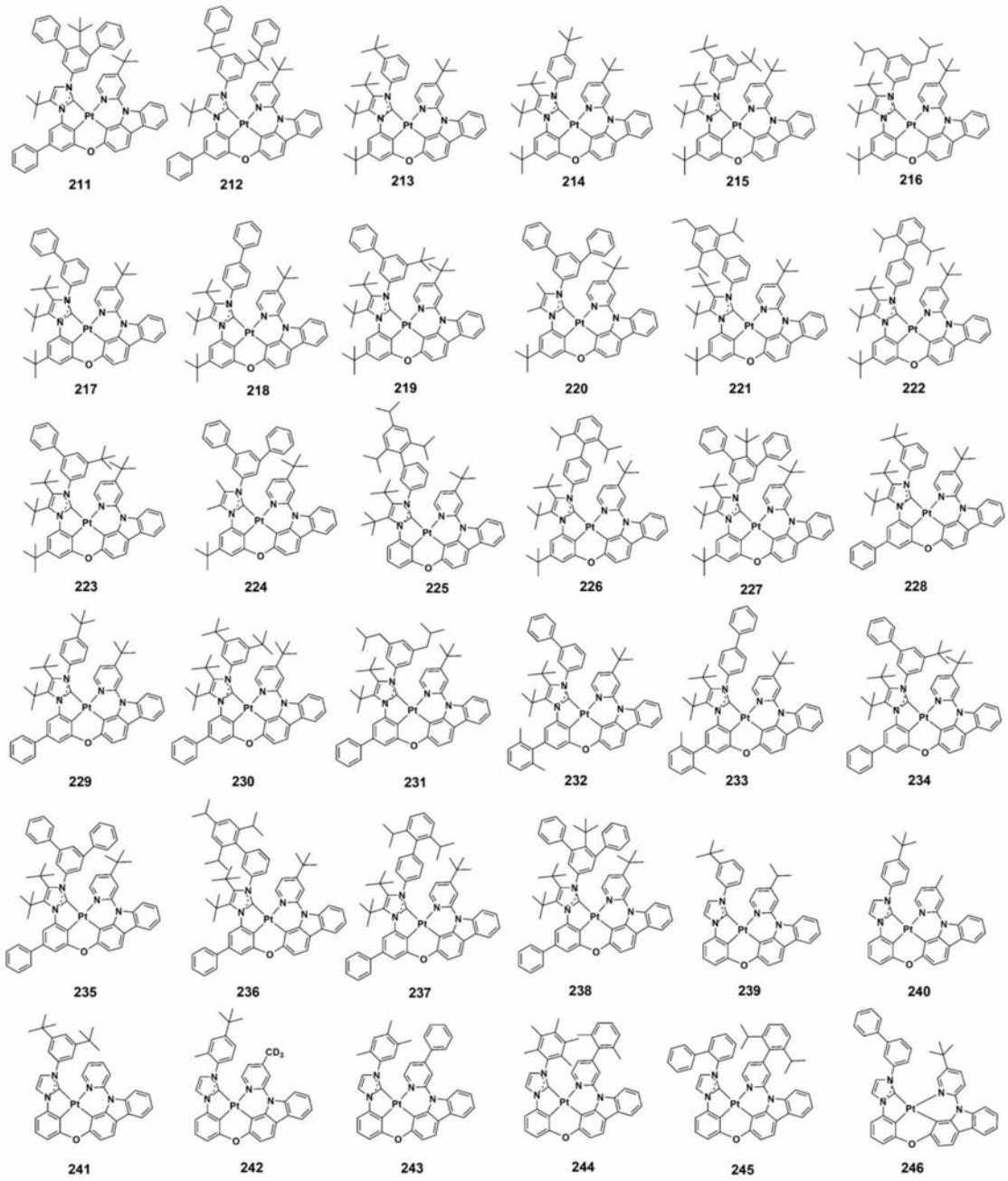
[0265]



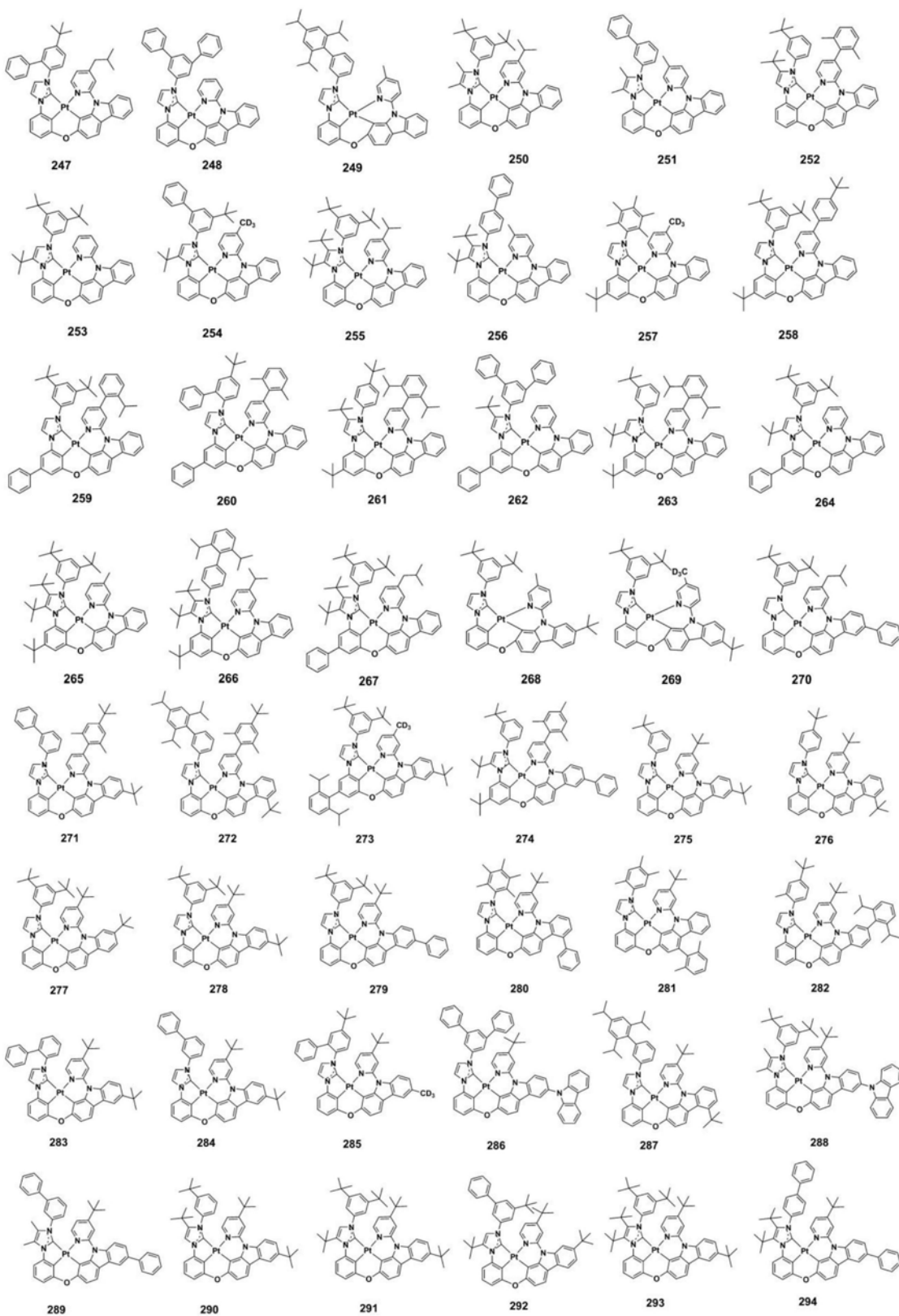
[0266]

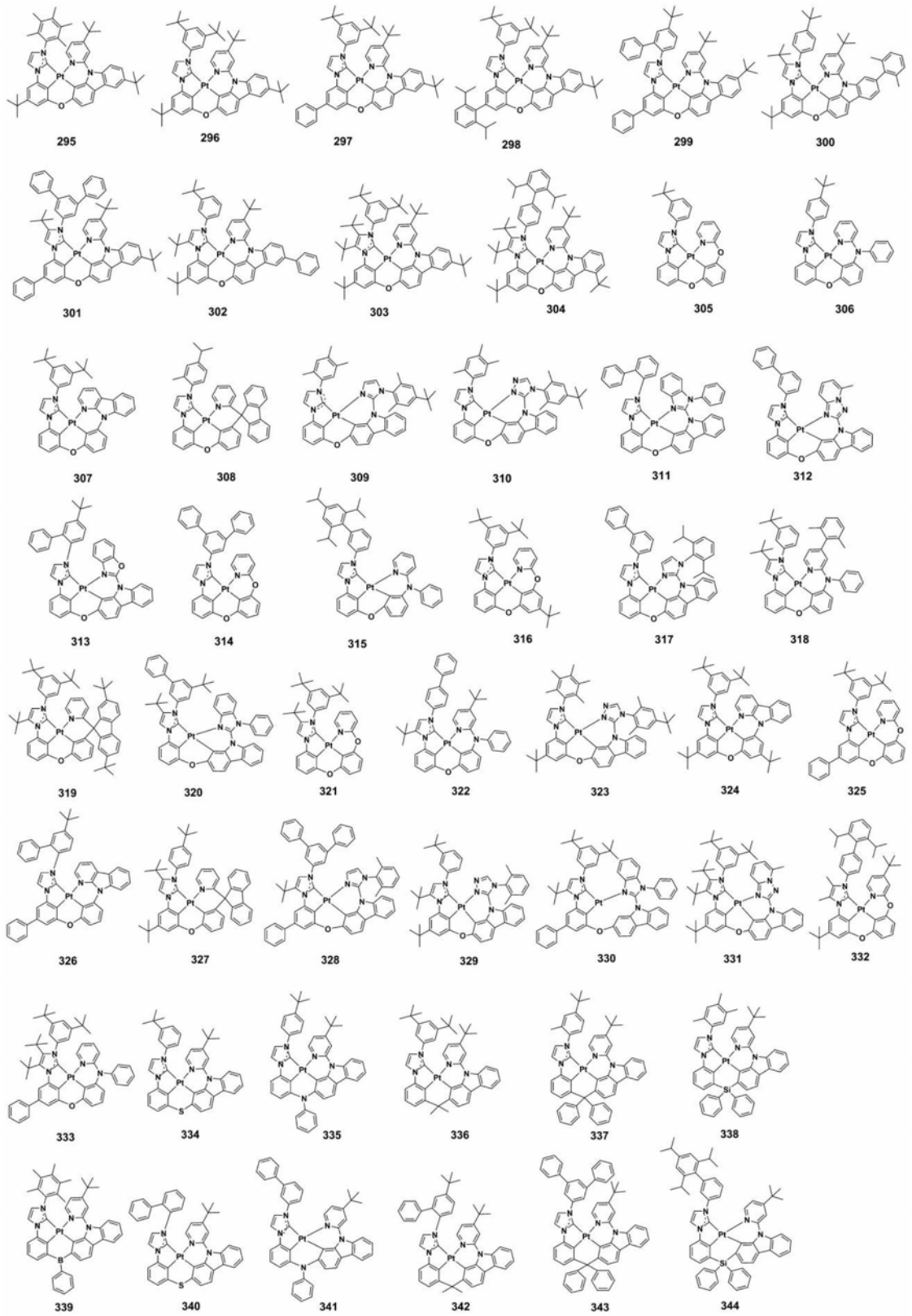


[0267]



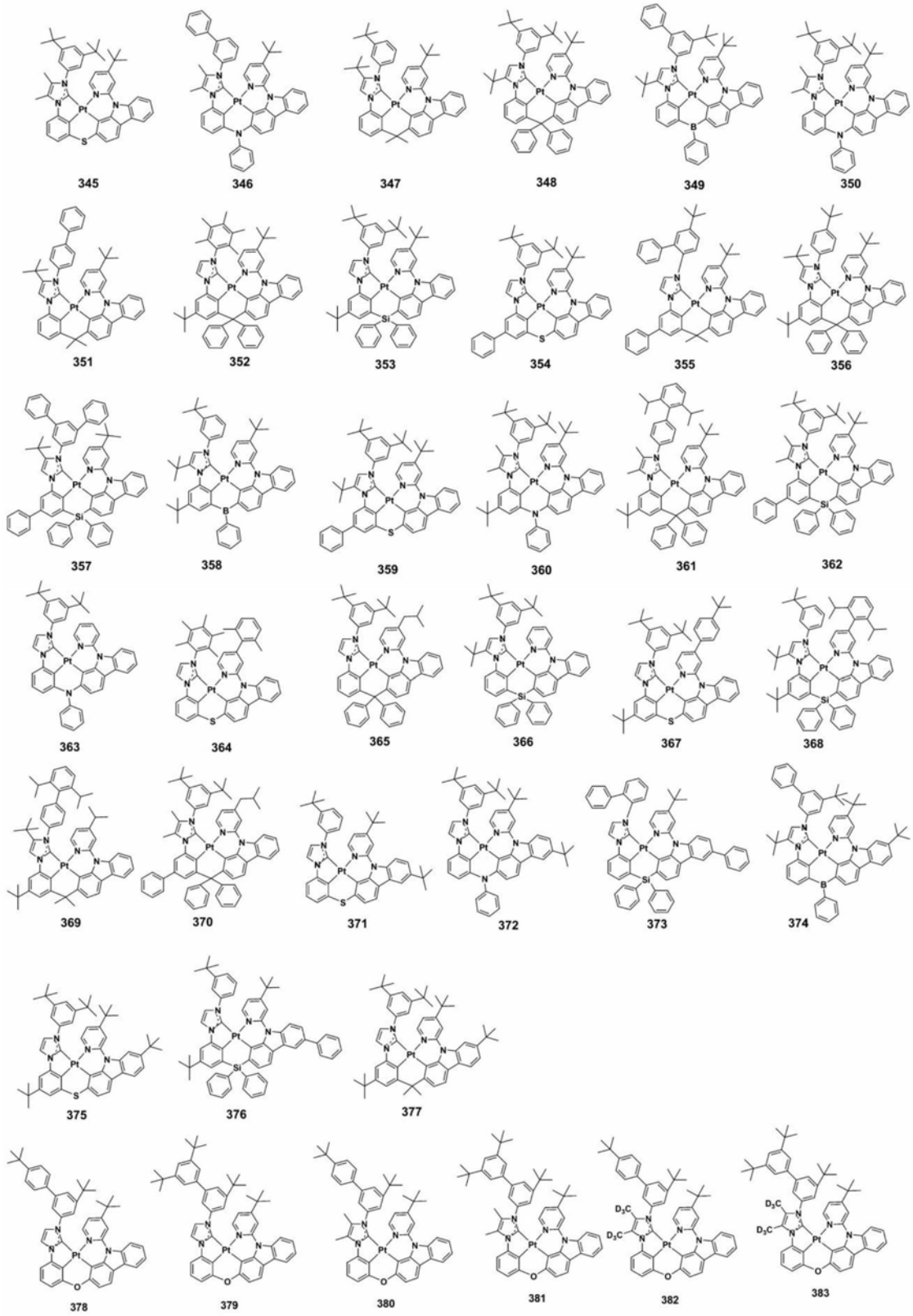
[0268]

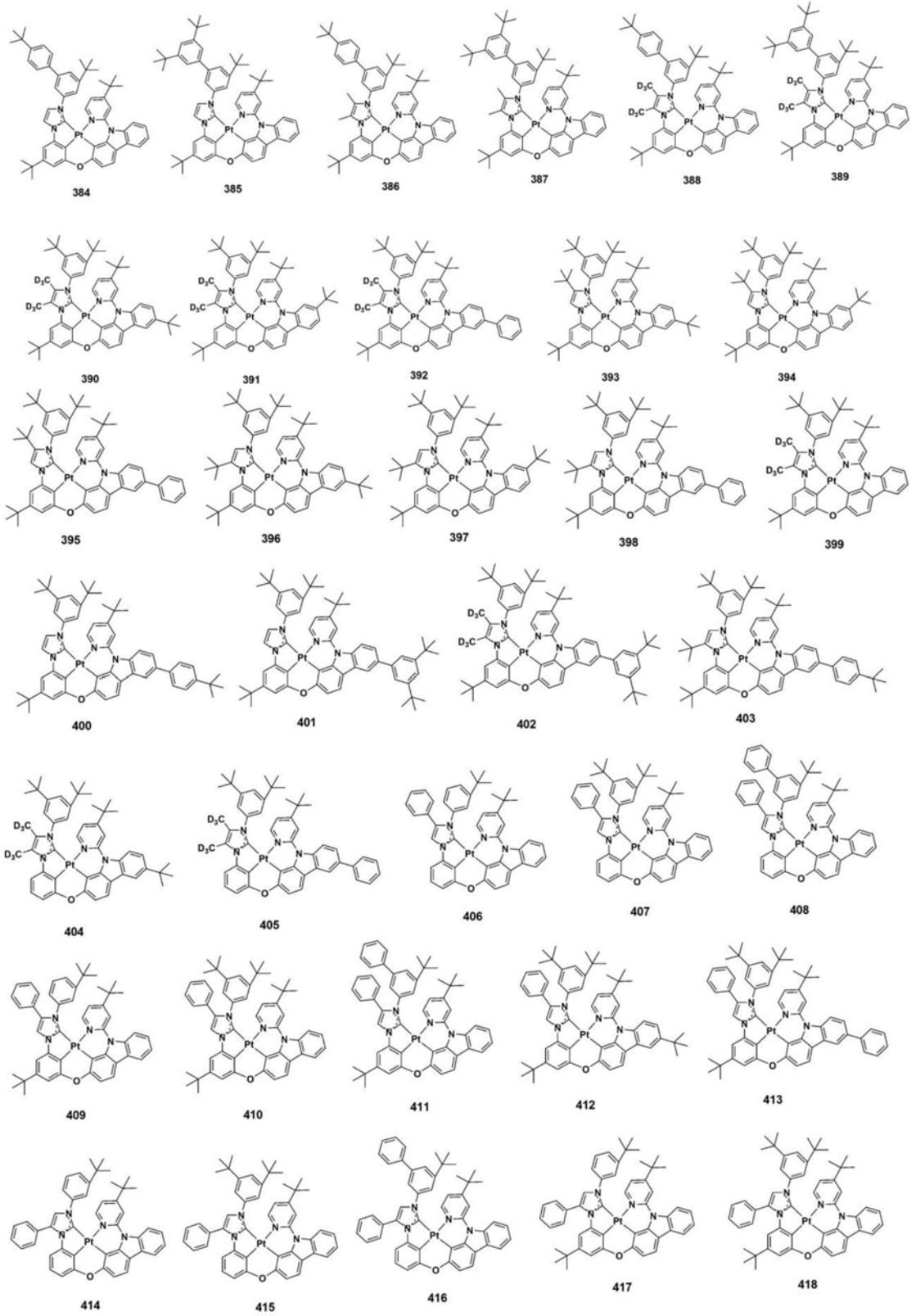


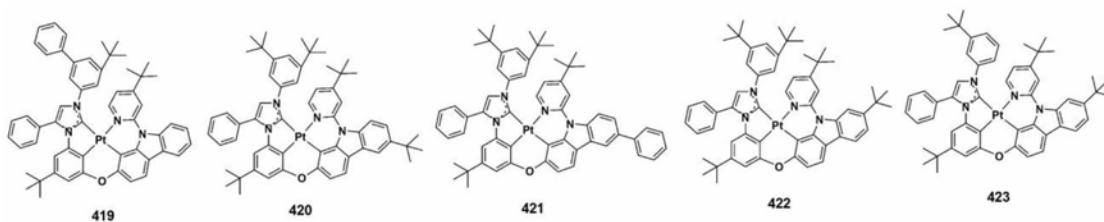


[0269]

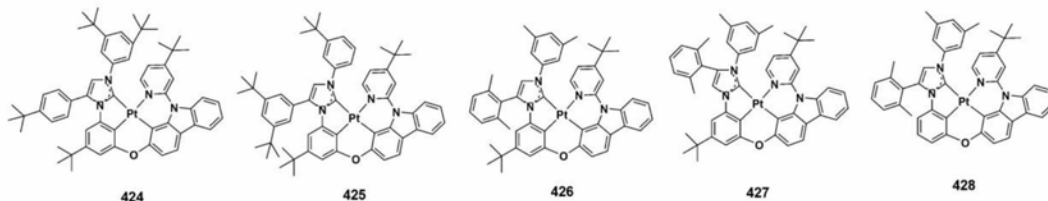
[0270]







[0272]



[0273] 由式1表示的有机金属化合物可满足以上描述的式1的结构,并且由于其中L₁₁配体中的A₁₀环为用Ar₁基团进行N-取代的结构,因此所述有机金属化合物可具有改善的光化学稳定性,并且可适合用于深蓝色光发射。使用由式1表示的有机金属化合物的电子器件例如有机发光器件在发光效率、寿命、和色纯度方面可为优异的。

[0274] 此外,所述有机金属化合物具有如下结构:其中A₁₀为含N的5元杂环型环,并且其未与其它环稠合。因此,共轭长度短,并且因此,发光量子产率提高并且可发射深蓝色光。因此,使用所述有机金属化合物的有机发光器件的寿命可增加。

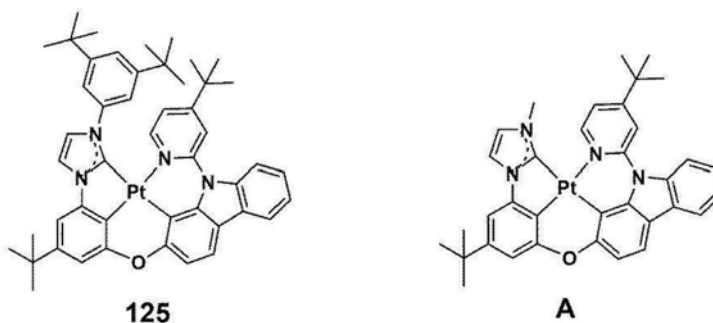
[0275] 在一种或多种实施方式中,通过使用(在B3LYP,6-31G(d,p)的水平上进行结构优化的)高斯程序的DFT方法评价化合物125和对比化合物A的最高占据分子轨道(HOMO)、最低未占分子轨道(LUMO)、三线态(T₁)能级、和自旋密度。其结果示于表1中。

[0276] 表1

[0277]

化合物编号	HOMO (eV)	LUMO (eV)	T ₁ 能级 (eV)	自旋密度
化合物125	-4.55	-1.10	2.71	0.357
对比例A	-4.58	-1.21	2.68	0.309

[0278]



[0279] 由表1确认,由式1表示的有机金属化合物具有这样的电特性:适于用作用于电子器件例如有机发光器件的发射层的材料。

[0280] 此外,与对比化合物A相比,由式1表示的有机金属化合物呈现出更高的自旋密度,并且因此金属-配体电荷转移(MLCT)高效地发生,导致有机发光器件的效率和寿命的提高。

[0281] 由式1表示的有机金属化合物的合成方法可为由本领域普通技术人员通过参考下面提供的合成实施例可认识到的。

[0282] 因此,由式1表示的有机金属化合物适于用作用于有机发光器件的有机层、例如发

射层的材料。因此,另一方面提供有机发光器件,其包括:第一电极;第二电极;以及安置在所述第一电极和所述第二电极之间并且包括发射层的有机层,并且所述有机层包括至少一种由式1表示的有机金属化合物。

[0283] 由于包括包含由式1表示的有机金属化合物的有机层,所述有机发光器件可具有低的驱动电压、高的效率、高的功率效率、高的量子效率、长的寿命、低的滚降比、和优异的色纯度。

[0284] 在一种或多种实施方式中,在所述有机发光器件中,所述第一电极为阳极,并且所述第二电极为阴极,并且所述有机层进一步包括在所述第一电极和所述发射层之间的空穴传输区域以及在所述发射层和所述第二电极之间的电子传输区域,和所述空穴传输区域包括空穴注入层、空穴传输层、电子阻挡层、或其任意组合,和所述电子传输区域包括空穴阻挡层、电子传输层、电子注入层、或其任意组合。

[0285] 在一种或多种实施方式中,由式1表示的有机金属化合物可包括在所述发射层中。

[0286] 包括在所述发射层中的所述有机金属化合物可充当发射体。例如,包括由式1表示的有机金属化合物的发射层可发射通过所述有机金属化合物的三线态激子向基态的转移而产生的磷光。

[0287] 在一种或多种实施方式中,包括由式1表示的有机金属化合物的发射层可进一步包括主体。所述主体可为任何主体,并且所述主体的细节可与下面描述的相同。所述发射层中的所述主体的量可大于由式1表示的有机金属化合物的量。

[0288] 在一种或多种实施方式中,所述发射层可包括主体和掺杂剂,所述主体可为任何主体,并且所述掺杂剂可包括由式1表示的有机金属化合物。所述发射层可发射通过充当掺杂剂的所述有机金属化合物的三线态激子向基态的转移而产生的磷光。

[0289] 根据一种或多种实施方式,当所述发射层进一步包括主体时,所述主体的量可大于所述有机金属化合物的量。

[0290] 在一种或多种实施方式中,所述发射层可包括主体和掺杂剂,所述主体可为任何主体,并且所述掺杂剂可包括由式1表示的有机金属化合物,且所述发射层可进一步包括荧光掺杂剂。所述发射层可发射通过如下而产生的荧光:所述有机金属化合物的三线态激子向所述荧光掺杂剂转移,然后其跃迁。

[0291] 根据一种或多种实施方式,所述发射层可发射具有约410nm-约490nm的最大发光波长的蓝色光。

[0292] 本文中使用的表述“(有机层)包括至少一种由式1表示的有机金属化合物”可包括其中“(有机层)包括相同的由式1表示的有机金属化合物”的情况和其中“(有机层)包括两种或更多种不同的由式1表示的有机金属化合物”的情况。

[0293] 例如,所述有机层可包括仅化合物1作为所述有机金属化合物。在该实施方式中,化合物1可包括在所述有机发光器件的发射层中。在一种或多种实施方式中,所述有机层可包括化合物1和化合物2作为所述有机金属化合物。在这方面,化合物1和化合物2可存在于相同的层中(例如,化合物1和化合物2全部可存在于发射层中)。

[0294] 本文中使用的术语“有机层”指的是在有机发光器件的第一电极和第二电极之间的单个层和/或多个层。除了有机化合物之外,“有机层”还可包括包含金属的有机金属络合物。

[0295] 图1为根据示例性实施方式的有机发光器件10的示意性横截面图。下文中,将关于图1描述根据实施方式的有机发光器件的结构和根据实施方式的有机发光器件的制造方法。有机发光器件10包括顺序地堆叠的第一电极11、有机层15、和第二电极19。

[0296] 可另外在第一电极11下面或者在第二电极19上方设置基板。对于用作所述基板,可使用本领域中可利用的用于有机发光器件中的任何基板,并且所述基板可为各自具有优异的机械强度、热稳定性、透明度、表面光滑度、易操作性、和耐水性的玻璃基板或透明塑料基板。

[0297] 在一种或多种实施方式中,第一电极11可通过将用于形成第一电极11的材料沉积或溅射在所述基板上而形成。第一电极11可为阳极。用于形成第一电极11的材料可为具有高的功函以促进空穴注入的材料。第一电极11可为反射性电极、半透射性电极、或透射性电极。用于形成第一电极11的材料可为氧化铟锡(ITO)、氧化铟锌(IZO)、氧化锡(SnO₂)、或氧化锌(ZnO)。在一种或多种实施方式中,用于形成第一电极11的材料可为金属例如镁(Mg)、铝(Al)、铝-锂(Al-Li)、钙(Ca)、镁-铟(Mg-In)、或镁-银(Mg-Ag)。

[0298] 第一电极11可具有单层结构或者包括两个或更多个层的多层结构。例如,第一电极11可具有ITO/Ag/ITO的三层结构,但是第一电极11的结构不限于此。

[0299] 有机层15位于第一电极11上。

[0300] 有机层15可包括空穴传输区域、发射层、和电子传输区域。

[0301] 所述空穴传输区域可在第一电极11和所述发射层之间。

[0302] 所述空穴传输区域可包括空穴注入层、空穴传输层、电子阻挡层、缓冲层、或其任意组合。

[0303] 所述空穴传输区域可包括仅空穴注入层或空穴传输层。在一种或多种实施方式中,所述空穴传输区域可具有空穴注入层/空穴传输层结构或者空穴注入层/空穴传输层/电子阻挡层结构,其中对于各结构,各层是从第一电极11起以该陈述的次序顺序地堆叠的。

[0304] 当所述空穴传输区域包括空穴注入层(HIL)时,可通过使用一种或多种合适的方法例如真空沉积、旋涂、流延、和/或朗缪尔-布罗杰特(LB)沉积在第一电极11上形成所述空穴注入层。

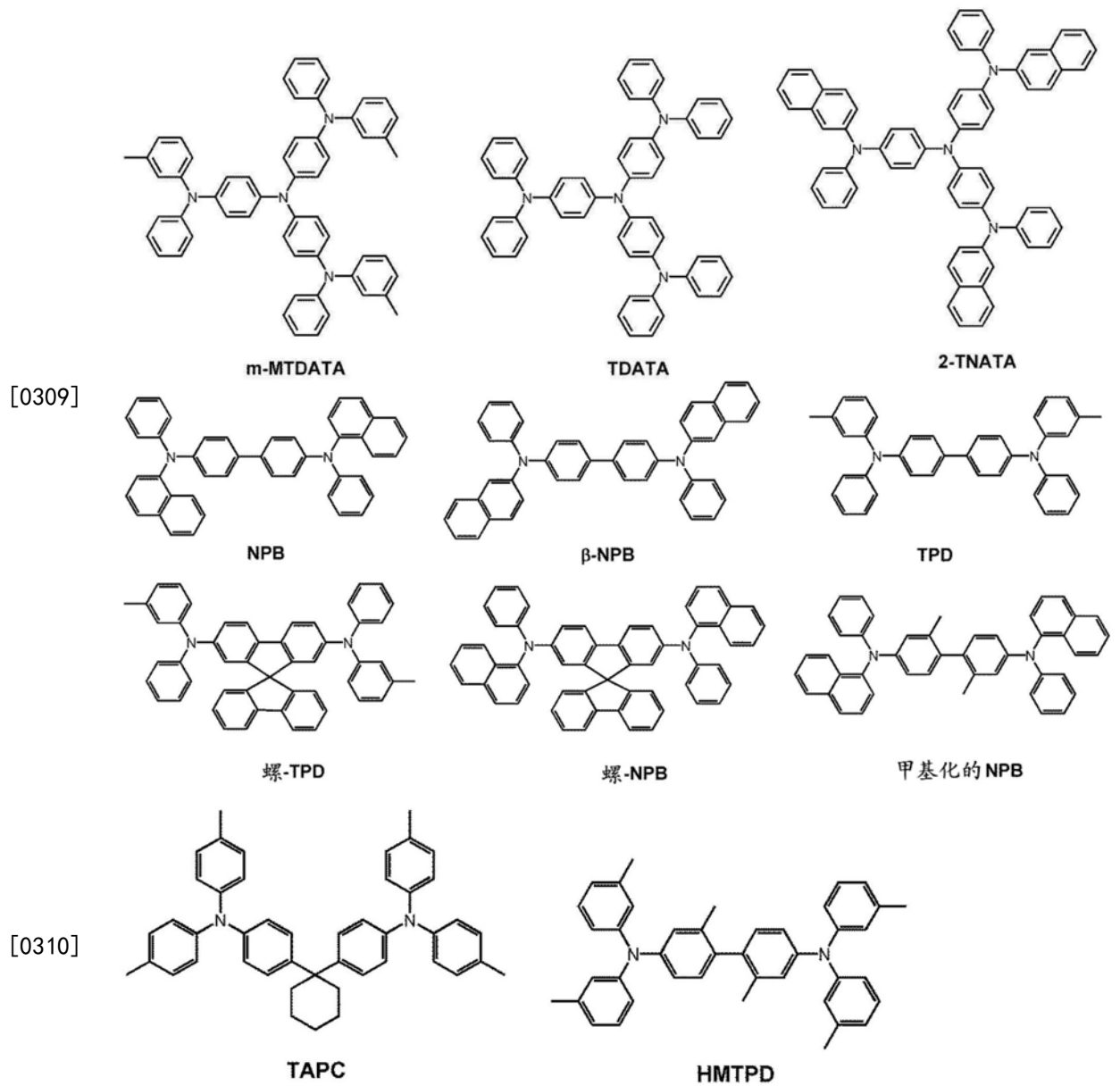
[0305] 当通过真空沉积形成空穴注入层时,沉积条件可根据用于形成所述空穴注入层的材料、以及所述空穴注入层的结构和热特性而变化。例如,沉积条件可包括约100°C-约500°C的沉积温度、约10⁻⁸托-约10⁻³托的真空压力、和约0.01 Å/秒-约100 Å/秒的沉积速率。然而,沉积条件不限于此。

[0306] 当使用旋涂形成所述空穴注入层时,涂布条件可根据用于形成所述空穴注入层的材料、以及所述空穴注入层的结构和热性质而变化。例如,涂布速度可为约2,000rpm-约5,000rpm,并且在涂布之后进行热处理以除去溶剂的温度可为约80°C-约200°C。然而,涂布条件不限于此。

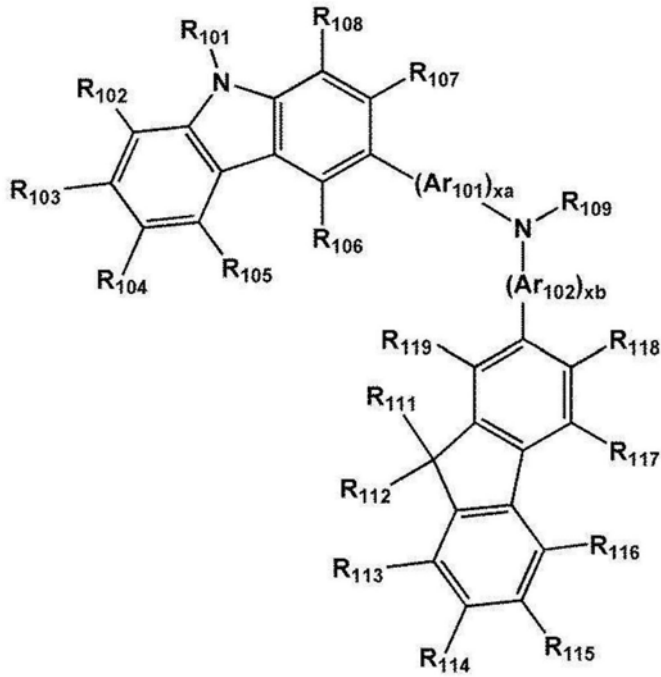
[0307] 用于形成空穴传输层和电子阻挡层的条件可通过参照用于形成所述空穴注入层的条件而理解。

[0308] 所述空穴传输区域可包括如下的至少一种:m-MTDATA、TDATA、2-TNATA、NPB、β-NPB、TPD、螺-TPD、螺-NPB、甲基化的NPB、TAPC、HMTDP、4,4',4''-三(N-咔唑基)三苯基胺(TCTA)、聚苯胺/十二烷基苯磺酸(PANI/DBSA)、聚(3,4-亚乙基二氧噻吩)/聚(4-磺苯乙烯)

(PEDOT/PSS)、聚苯胺/樟脑磺酸(PANI/CSA)、聚苯胺/聚(4-磺苯乙烯)(PANI/PSS)、由下式201表示的化合物、由下式202表示的化合物、或其任意组合：

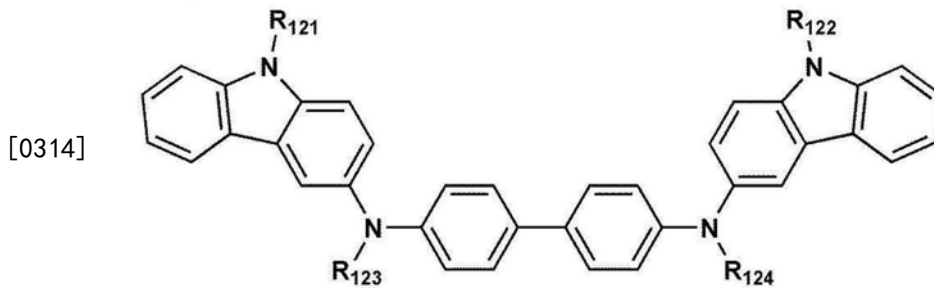


[0311] <式201>



[0312]

[0313] <式202>



[0314]

[0315] 式201中的Ar₁₀₁-Ar₁₀₂可各自独立地为:

[0316] 亚苯基、亚并环戊二烯基、亚茛基、亚萘基、亚**萘**基、亚庚搭烯基、亚茛基、亚茛基、亚非那烯基、亚菲基、亚蒽基、亚荧蒽基、苯并[9,10]菲基、亚芘基、亚**蒽**基、亚并四苯基、亚茛基、亚茛基、或亚并五苯基;或

[0317] 各自被如下取代的亚苯基、亚并环戊二烯基、亚茛基、亚萘基、亚**萘**基、亚庚搭烯基、亚茛基、亚茛基、亚非那烯基、亚菲基、亚蒽基、亚荧蒽基、苯并[9,10]菲基、亚芘基、亚**蒽**基、亚并四苯基、亚茛基、亚茛基、或亚并五苯基:至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、羟基、氰基、硝基、氨基、脒基、胂基、胟基、羧基、羧基或其盐、磺基、磺基或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₆₀烷基、C₂-C₆₀烯基、C₂-C₆₀炔基、C₁-C₆₀烷氧基、C₃-C₁₀环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、单价非芳族稠合杂多环基团、或其任意组合。

[0318] 式201中的xa和xb可各自独立地为0-5的整数,或者0、1或2。例如,xa可为1并且xb可为0,但是xa和xb不限于此。

[0319] 式201和202中的R₁₀₁-R₁₀₈、R₁₁₁-R₁₁₉和R₁₂₁-R₁₂₄可各自独立地为:

[0320] 氢、氘、-F、-Cl、-Br、-I、羟基、氰基、硝基、氨基、脒基、胂基、胟基、羧基、羧基或其盐、磺基、磺基或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₁₀烷基(例如甲基、乙基、丙基、丁基、戊基、己基

等)、或C₁-C₁₀烷氧基(例如甲氧基、乙氧基、丙氧基、丁氧基、戊氧基等)；

[0321] 各自被如下取代的C₁-C₁₀烷基或C₁-C₁₀烷氧基：至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、羟基、氰基、硝基、氨基、脒基、胼基、脞基、羧基、羧基团或其盐、磺基、磺基团或其盐、磷酸基团或其盐、或其任意组合；

[0322] 苯基、萘基、蒽基、茚基、或茚基；或

[0323] 各自被如下取代的苯基、萘基、蒽基、茚基、或茚基：至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、羟基、氰基、硝基、氨基、脒基、胼基、脞基、羧基、羧基团或其盐、磺基、磺基团或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₁₀烷基、C₁-C₁₀烷氧基、或其任意组合，

[0324] 但是本公开内容的实施方式不限于此。

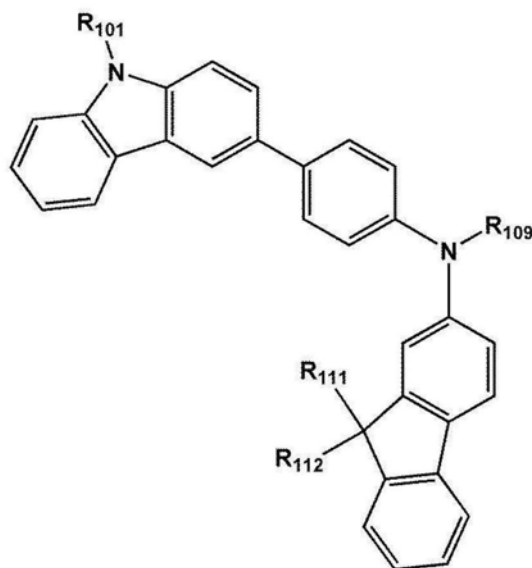
[0325] 式201中的R₁₀₉可为：

[0326] 苯基、萘基、蒽基、或吡啶基；或

[0327] 各自被如下取代的苯基、萘基、蒽基、或吡啶基：至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、羟基、氰基、硝基、氨基、脒基、胼基、脞基、羧基、羧基团或其盐、磺基、磺基团或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₂₀烷基、C₁-C₂₀烷氧基、苯基、萘基、蒽基、吡啶基、或其任意组合。

[0328] 根据一种实施方式，由式201表示的化合物可由下式201A表示，但是本公开内容的实施方式不限于此：

[0329] <式201A>

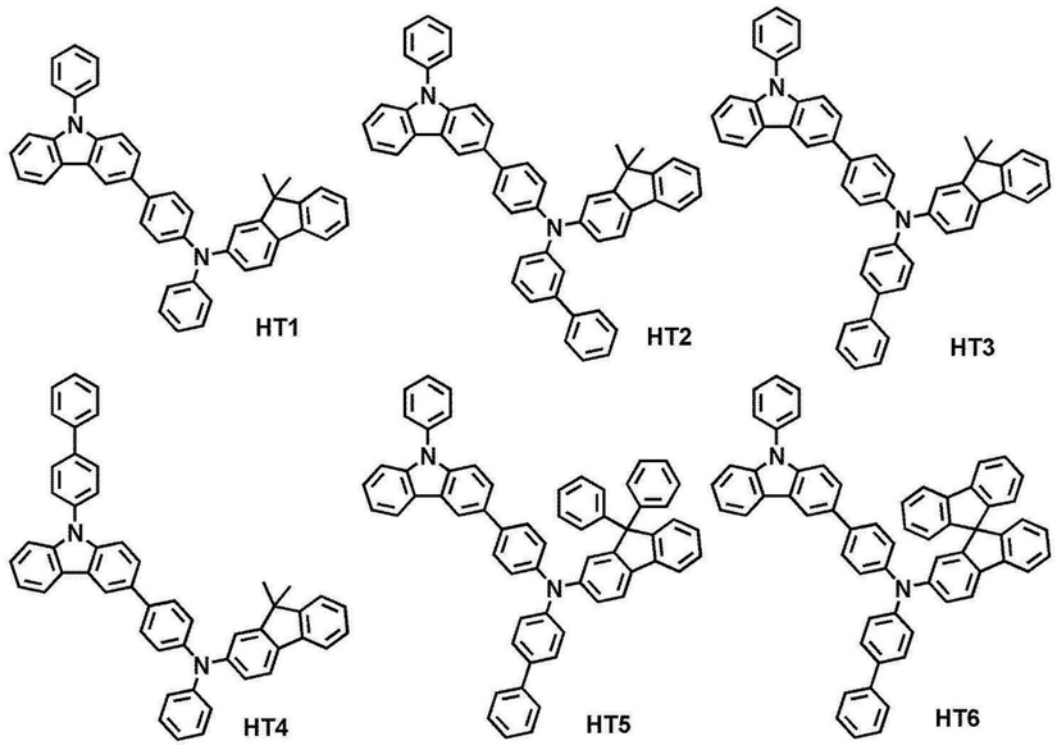


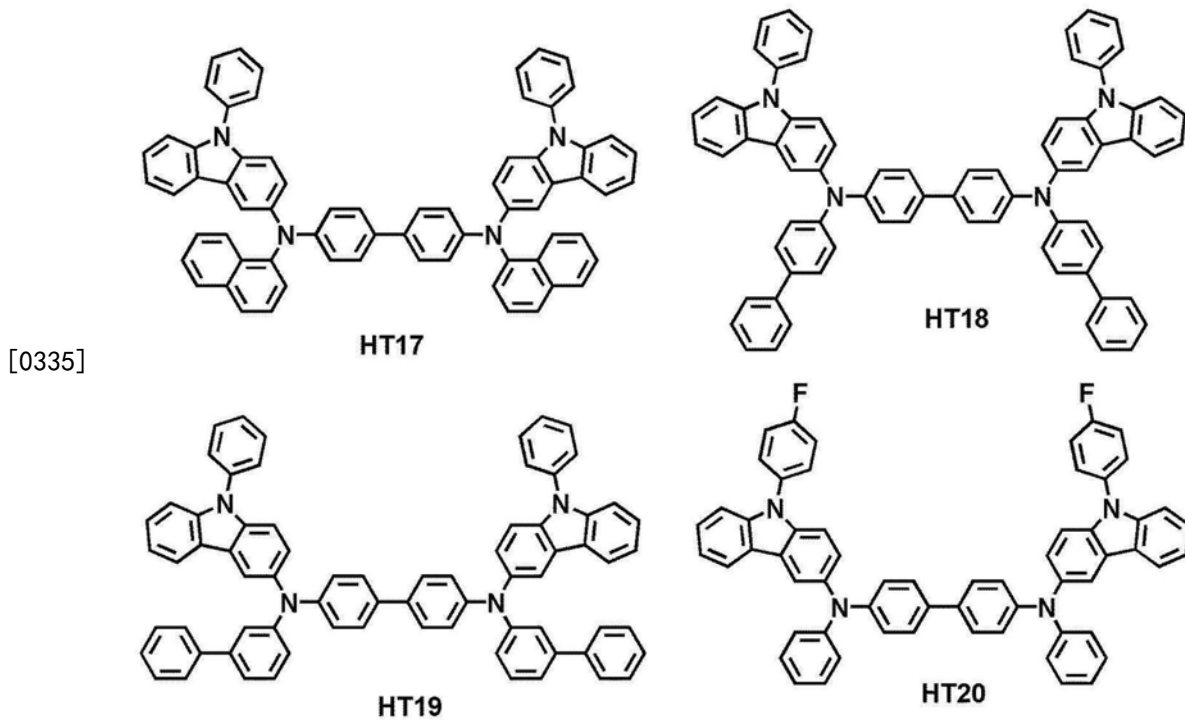
[0330]

[0331] 式201A中的R₁₀₁、R₁₁₁、R₁₁₂和R₁₀₉可通过参照本文中提供的描述而理解。

[0332] 例如，由式201表示的化合物和由式202表示的化合物可包括下面所示的化合物HT1至HT20，但是不限于此：

[0333]



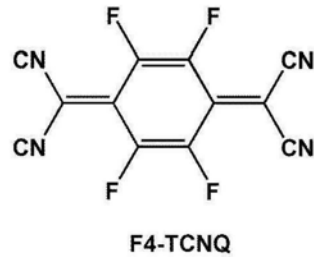
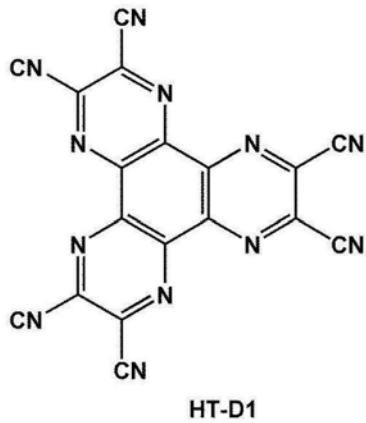


[0336] 所述空穴传输区域的厚度可在约 100 Å-约 10,000 Å、例如约 100 Å-约 1,000 Å 的范围内。当所述空穴传输区域包括空穴注入层、空穴传输层、或其任意组合的至少一个时,所述空穴注入层的厚度可在约 100 Å-约 10,000 Å、例如约 100 Å-约 1,000 Å 的范围内,并且所述空穴传输层的厚度可在约 50 Å-约 2,000 Å、例如约 100 Å-约 1,500 Å 的范围内。当所述空穴传输区域、空穴注入层和空穴传输层的厚度在这些范围内时,可获得令人满意的空穴传输特性而没有驱动电压的显著升高。

[0337] 除了这些材料之外,所述空穴传输区域可进一步包括电荷产生材料以改善导电性质。所述电荷产生材料可均匀地或非均匀地分散在所述空穴传输区域中。

[0338] 所述电荷产生材料可为例如p-掺杂剂。所述p-掺杂剂可为醌衍生物、金属氧化物、或含有氰基的化合物之一,但是本公开内容的实施方式不限于此。所述p-掺杂剂的实例为:醌衍生物例如四氰基醌二甲烷(TCNQ)或者2,3,5,6-四氟-四氰基-1,4-苯醌二甲烷(F4-TCNQ);金属氧化物例如氧化钨或氧化钼;和含有氰基的化合物例如下面的化合物HT-D1,但是不限于此。

[0339]



[0340] 所述空穴传输区域可包括缓冲层。

[0341] 而且,所述缓冲层可根据从所述发射层发射的光的波长而补偿光学谐振距离,并且因此,所形成的有机发光器件的效率可改善。

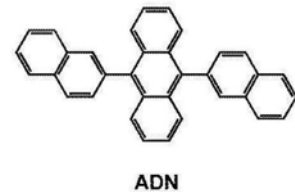
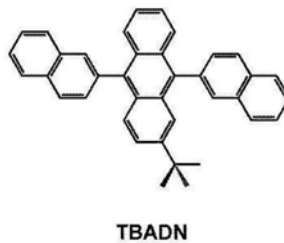
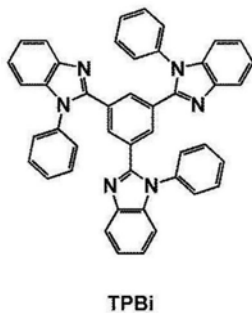
[0342] 同时,当所述空穴传输区域包括电子阻挡层时,用于所述电子阻挡层的材料可为以上描述的用于所述空穴传输区域的材料或将稍后说明的用于主体的材料。然而,用于所述电子阻挡层的材料不限于此。例如,当所述空穴传输区域包括电子阻挡层时,用于所述电子阻挡层的材料可为将稍后说明的mCP。

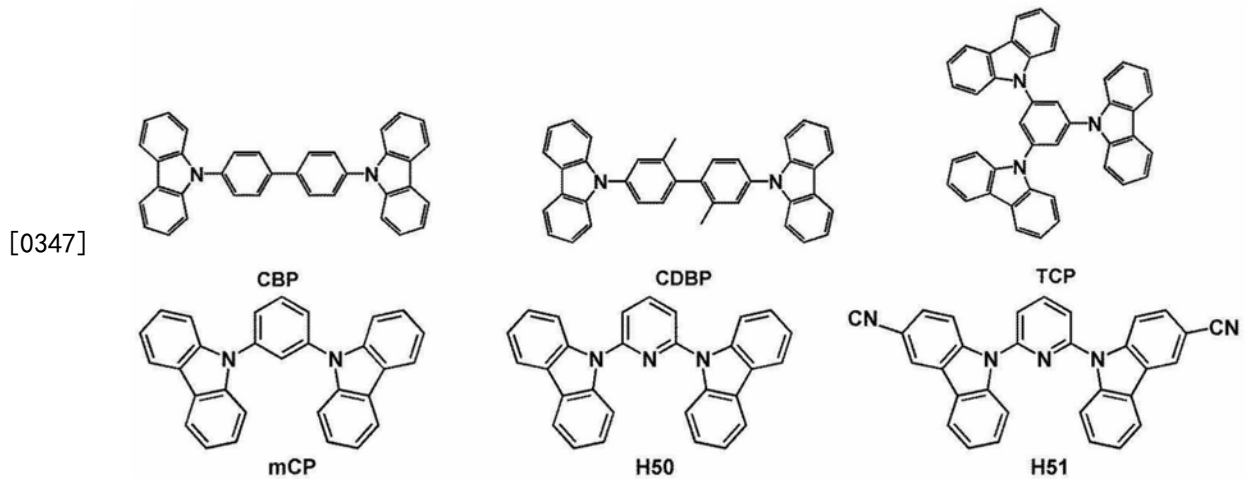
[0343] 然后,可通过真空沉积、旋涂、流延、LB沉积等在所述空穴传输区域上形成发射层(EML)。当通过真空沉积或旋涂形成所述发射层时,尽管沉积或涂布条件可根据用于形成所述发射层的材料而改变,但是沉积或涂布条件可与在形成所述空穴注入层时应用的那些类似。

[0344] 所述发射层可包括主体和掺杂剂,并且所述掺杂剂可包括由式1表示的有机金属化合物。

[0345] 所述主体可包括TPBi、TBADN、ADN(也称作“DNA”)、CBP、CDBP、TCP、mCP、化合物H50、化合物H51、或其任意组合的至少一种:

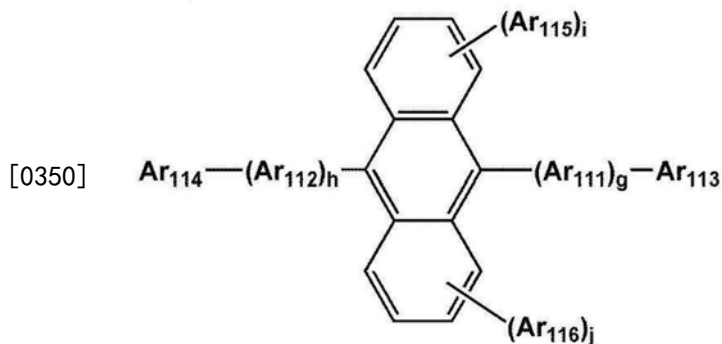
[0346]





[0348] 在一种或多种实施方式中,所述主体可进一步包括由下式301表示的化合物。

[0349] <式301>



[0351] 式301中的 Ar_{111} 和 Ar_{112} 可各自独立地为:

[0352] 亚苯基、亚萘基、亚菲基、或亚芘基;或

[0353] 各自被如下取代的亚苯基、亚萘基、亚菲基、或亚芘基:至少一个苯基、萘基、蒽基、或其任意组合。

[0354] 式301中的 Ar_{113} - Ar_{116} 可各自独立地为:

[0355] C_1 - C_{10} 烷基、苯基、萘基、菲基、或芘基;或

[0356] 各自被如下取代的苯基、萘基、菲基、或芘基:至少一个苯基、萘基、蒽基、或其任意组合。

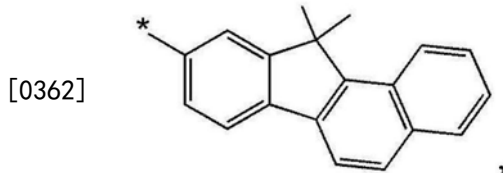
[0357] 式301中的 g 、 h 、 i 和 j 可各自独立地为0-4的整数,并且可为例如0、1、或2。

[0358] 式301中的 Ar_{113} 和 Ar_{116} 可各自独立地为:

[0359] 被至少一个苯基、萘基、蒽基、或其任意组合取代的 C_1 - C_{10} 烷基;

[0360] 苯基、萘基、蒽基、芘基、菲基、或芴基;

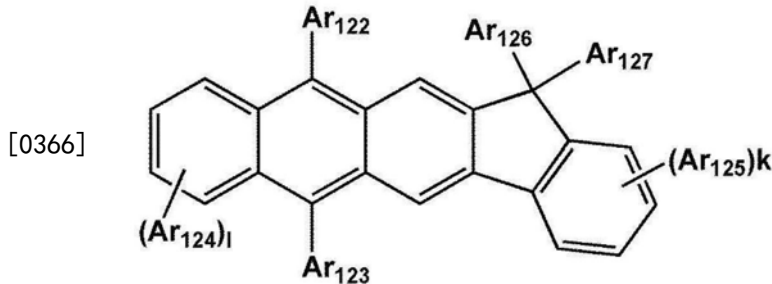
[0361] 各自被如下取代的苯基、萘基、蒽基、芘基、菲基、或芴基:至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、羟基、氰基、硝基、氨基、脒基、胍基、脞基、羧基、羧基或其盐、磺基、磺基或其盐、磷酸基团或其盐、 C_1 - C_{60} 烷基、 C_2 - C_{60} 烯基、 C_2 - C_{60} 炔基、 C_1 - C_{60} 烷氧基、苯基、萘基、蒽基、芘基、菲基、芴基、或其任意组合;或



[0363] 但是本公开内容的实施方式不限于此。

[0364] 在一种或多种实施方式中,所述主体可包括由下式302表示的化合物:

[0365] <式302>



[0367] 式302中的Ar₁₂₂-Ar₁₂₅与关于式301中的Ar₁₁₃详细描述相同。

[0368] 式302中的Ar₁₂₆和Ar₁₂₇可各自独立地为C₁-C₁₀烷基(例如甲基、乙基、或丙基)。

[0369] 式302中的k和l可各自独立地为0-4的整数。例如,k和l可为0、1、或2。

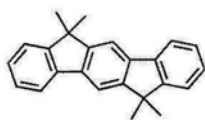
[0370] 当所述有机发光器件为全色有机发光器件时,可将所述发射层图案化成红色发射层、绿色发射层、和蓝色发射层。在一种或多种实施方式中,由于包括红色发射层、绿色发射层、和/或蓝色发射层的堆叠结构,所述发射层可发射白色光。

[0371] 当所述发射层包括主体和掺杂剂时,基于100重量份的所述主体,所述掺杂剂的量可在约0.01重量份-约15重量份的范围内,但是本公开内容的实施方式不限于此。

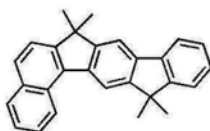
[0372] 在一种或多种实施方式中,除了由式1表示的有机金属化合物之外,所述有机发光器件的有机层可进一步包括荧光掺杂剂。

[0373] 例如,所述荧光掺杂剂可为稠合多环化合物或苯乙烯基化合物。

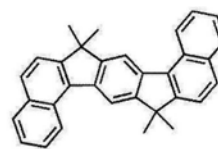
[0374] 例如,所述荧光掺杂剂可包括如下之一:含有萘的核心、含有芴的核心、含有螺-二芴的核心、含有苯并芴的核心、含有二苯并芴的核心、含有菲的核心、含有蒽的核心、含有荧蒽的核心、含有苯并[9,10]菲的核心、含有芘的核心、含有蒹的核心、含有并四苯的核心、含有蒽的核心、含有芘的核心、含有戊芬的核心、含有茚并蒽的核心、含有联蒽的核心、以及由式501-1至501-18表示的核心,但是本公开内容的实施方式不限于此:



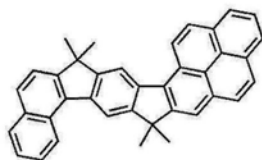
501-1



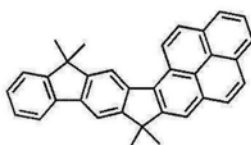
501-2



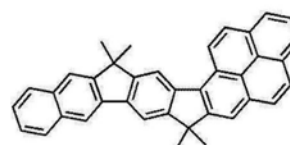
501-3



501-4



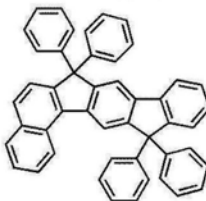
501-5



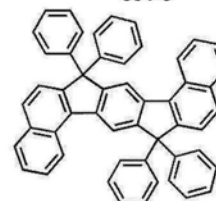
501-6



501-7

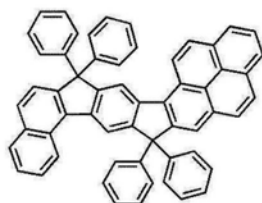


501-8

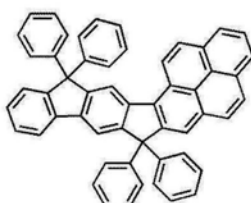


501-9

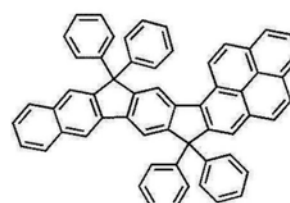
[0375]



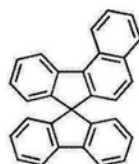
501-10



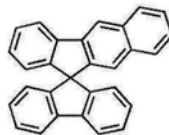
501-11



501-12



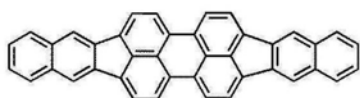
501-13



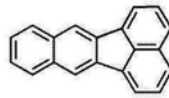
501-14



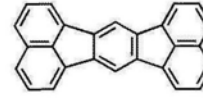
501-15



501-16



501-17

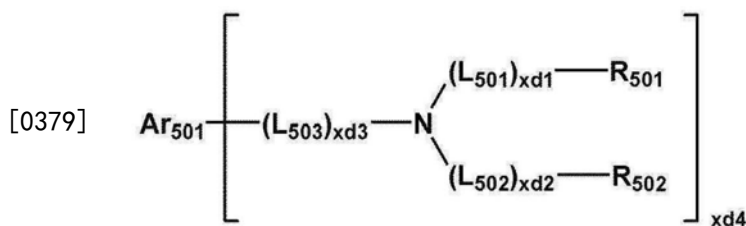


501-18

[0376] 在一种或多种实施方式中,所述荧光掺杂剂可为基于苯乙烯基-胺的化合物和基于苯乙烯基-咪唑的化合物,但是本公开内容的实施方式不限于此。

[0377] 在一种或多种实施方式中,所述荧光掺杂剂可为由式501表示的化合物:

[0378] <式501>



[0380] 在式501中,

[0381] Ar₅₀₁可为:

[0382] 萘基团、苈基团、螺-二苈基团、苯并苈基团、二苯并苈基团、菲基团、蒽基团、荧蒽基团、苯并[9,10]菲基团、芘基团、**蒾**基团、并四苯基团、苝基团、花基团、戊芬基团、茛并蒽基团、联蒽基团、或由式501-1至501-18表示的基团;或

[0383] 各自被如下取代的萘基团、苈基团、螺-二苈基团、苯并苈基团、二苯并苈基团、菲基团、蒽基团、荧蒽基团、苯并[9,10]菲基团、芘基团、**蒾**基团、并四苯基团、苝基团、花基团、戊芬基团、茛并蒽基团、联蒽基团、或由式501-1至501-18表示的基团:至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、羟基、氰基、硝基、氨基、脞基、胼基、脞基、羧基、羧基或其盐、磺基、磺基或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₆₀烷基、C₂-C₆₀烯基、C₂-C₆₀炔基、C₁-C₆₀烷氧基、C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、单价非芳族稠合杂多环基团、-Si(Q₅₀₁)(Q₅₀₂)(Q₅₀₃)(其中Q₅₀₁-Q₅₀₃可各自独立地为氢、C₁-C₆₀烷基、C₁-C₆₀烷氧基、C₆-C₆₀芳基、C₁-C₆₀杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、或单价非芳族稠合杂多环基团)、或其任意组合;

[0384] L₅₀₁-L₅₀₃可各自独立地为取代或未取代的C₃-C₁₀亚环烷基、取代或未取代的C₁-C₁₀亚杂环烷基、取代或未取代的C₃-C₁₀亚环烯基、取代或未取代的C₂-C₁₀亚杂环烯基、取代或未取代的C₆-C₆₀亚芳基、取代或未取代的C₁-C₆₀亚杂芳基、取代或未取代的二价非芳族稠合多环基团、或者取代或未取代的二价非芳族稠合杂多环基团,

[0385] R₅₀₁和R₅₀₂可各自独立地为:

[0386] 苯基、联苯基、三联苯基、萘基、苈基、螺-二苈基、苯并苈基、二苯并苈基、菲基、蒽基、芘基、**蒾**基、吡啶基、吡嗪基、嘧啶基、哒嗪基、喹啉基、异喹啉基、喹啉基、喹啉基、咪唑基、三嗪基、二苯并咪唑基、或二苯并噻吩基;或

[0387] 各自被如下取代的苯基、联苯基、三联苯基、萘基、苈基、螺-二苈基、苯并苈基、二苯并苈基、菲基、蒽基、芘基、**蒾**基、吡啶基、吡嗪基、嘧啶基、哒嗪基、喹啉基、异喹啉基、喹啉基、喹啉基、咪唑基、三嗪基、二苯并咪唑基、或二苯并噻吩基:至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、羟基、氰基、硝基、氨基、脞基、胼基、脞基、羧基、羧基或其盐、磺基、磺基或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₂₀烷基、C₁-C₂₀烷氧基、苯基、联苯基、三联苯基、萘基、苈基、螺-二苈基、苯并苈基、二苯并苈基、菲基、蒽基、芘基、**蒾**基、吡啶基、吡嗪基、嘧啶基、哒嗪基、喹啉基、异喹啉基、喹啉基、喹啉基、咪唑基、三嗪基、二苯并咪唑基、二苯并噻吩基、或其任意组合,

[0388] xd₁-xd₃可各自独立地为0、1、2或3,和

[0389] xd₄可为0、1、2、3、4、5或6。

[0390] 例如,在式501中,

[0391] Ar₅₀₁可为:

[0392] 萘基团、茛基团、螺-二茛基团、苯并茛基团、二苯并茛基团、菲基团、蒽基团、荧蒽基团、苯并[9,10]菲基团、苝基团、**蒾**基团、并四苯基团、苝基团、花基团、戊芬基团、茛并蒽基团、联蒽基团、或由式501-1至501-18表示的基团；或

[0393] 各自被如下取代的萘基团、茛基团、螺-二茛基团、苯并茛基团、二苯并茛基团、菲基团、蒽基团、荧蒽基团、苯并[9,10]菲基团、苝基团、**蒾**基团、并四苯基团、苝基团、花基团、戊芬基团、茛并蒽基团、联蒽基团、或由式501-1至501-18表示的基团：至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、羟基、氰基、硝基、氨基、脒基、胼基、脞基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₂₀烷基、C₁-C₂₀烷氧基、苯基、联苯基、三联苯基、萘基、茛基、二苯并呋喃基、二苯并噻吩基、咪唑基、吡啶基、嘧啶基、三嗪基、喹啉基、异喹啉基、-Si(Q₅₀₁)(Q₅₀₂)(Q₅₀₃) (Q₅₀₁-Q₅₀₃可各自独立地为氢、C₁-C₂₀烷基、C₁-C₂₀烷氧基、苯基、联苯基、三联苯基、或萘基)、或其任意组合，

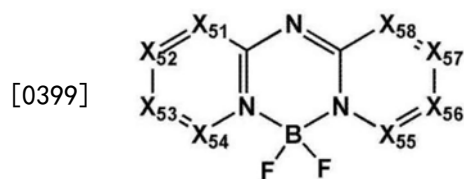
[0394] L₅₀₁-L₅₀₃与关于L₁描述的相同，

[0395] x_{d1}-x_{d3}可各自独立地为0、1或2，和

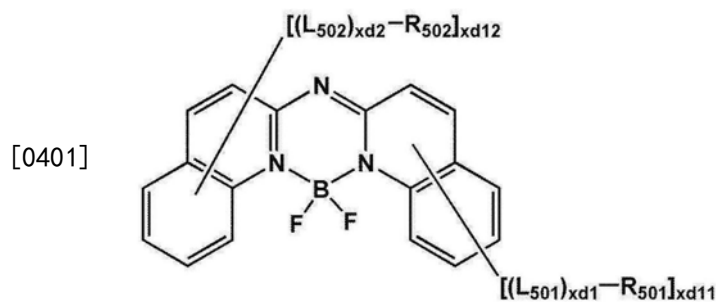
[0396] x_{d4}可为0、1、2或3，但是本公开内容的实施方式不限于此。

[0397] 在一种或多种实施方式中，所述荧光掺杂剂可包括由式502-1至502-5之一表示的化合物：

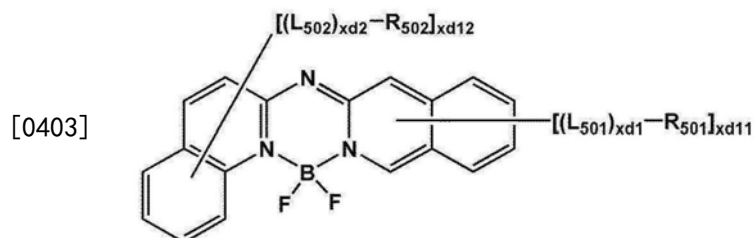
[0398] <式502-1>



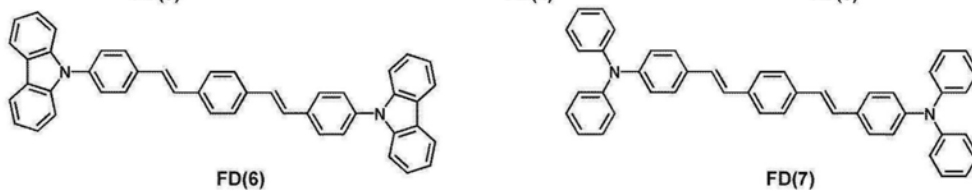
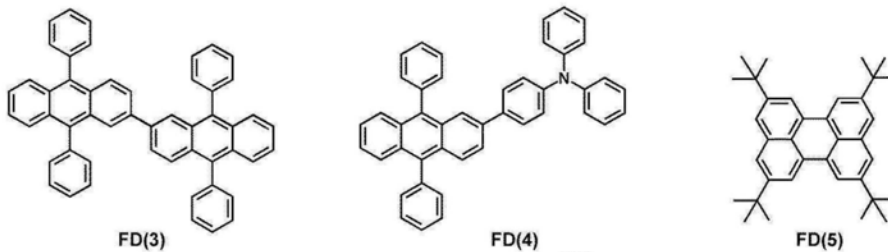
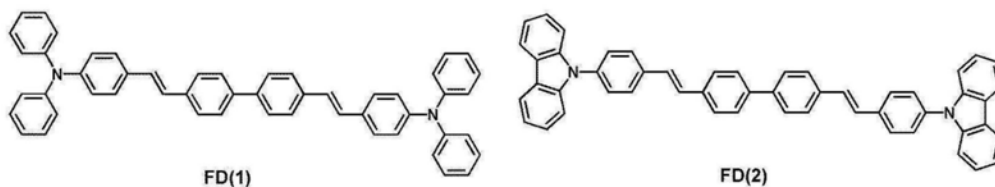
[0400] <式502-2>



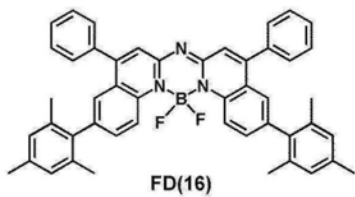
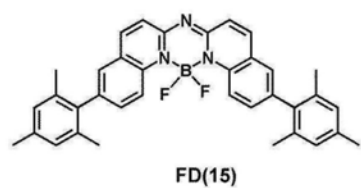
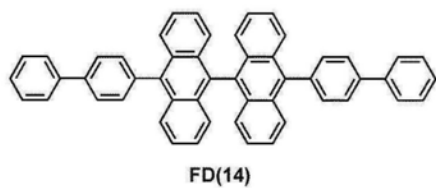
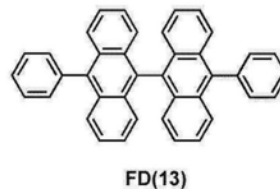
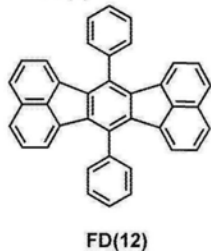
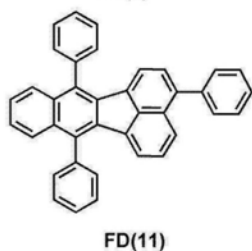
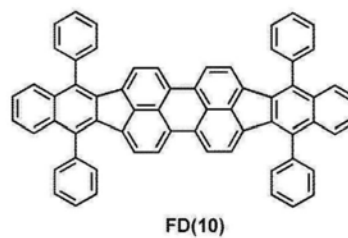
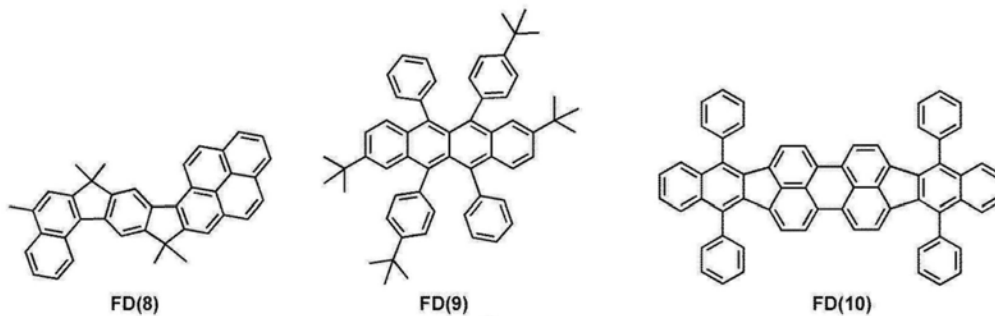
[0402] <式502-3>

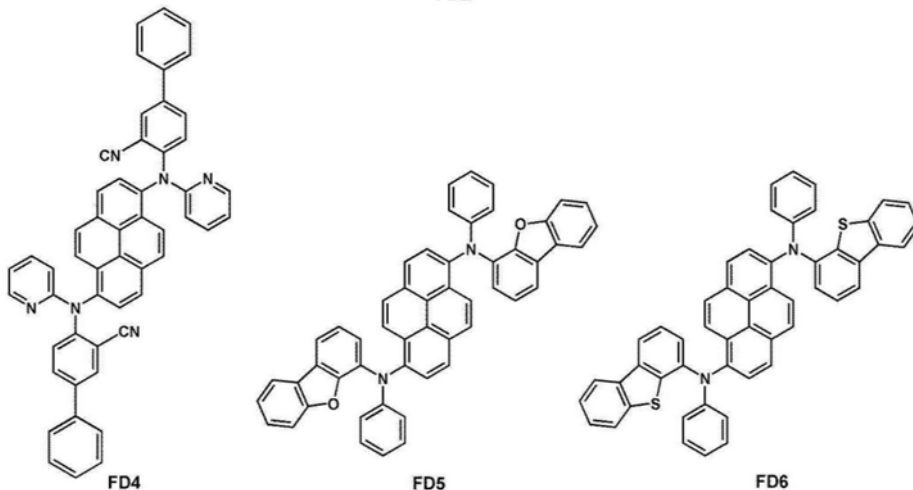
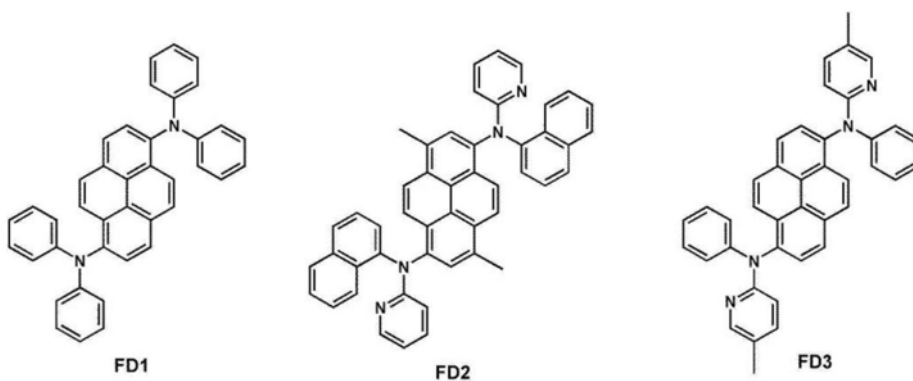


[0404] <式502-4>

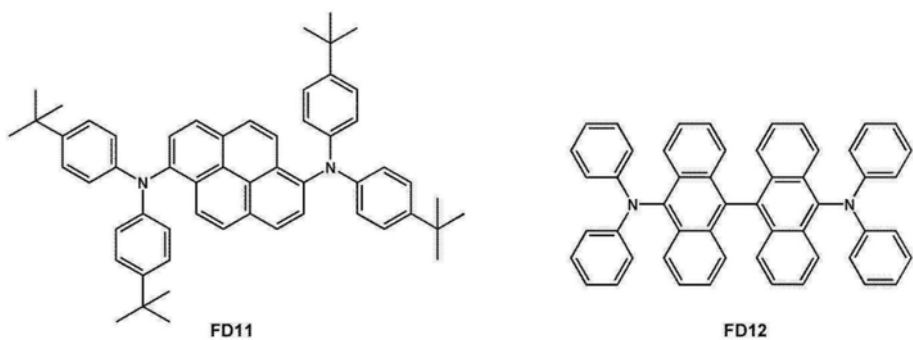
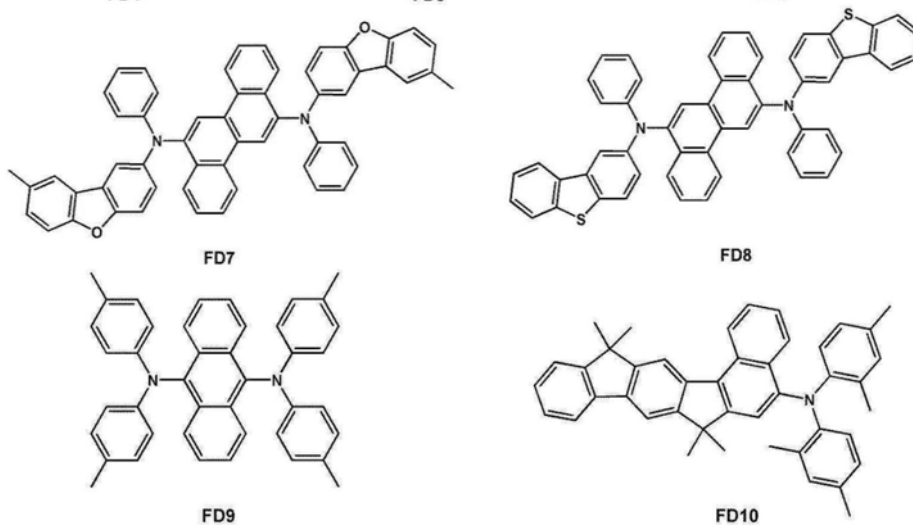


[0420]

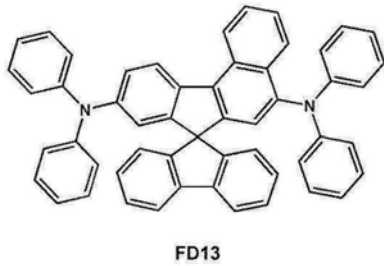




[0421]



[0422]



[0423] 所述发射层的厚度可在约100 Å-约1,000 Å、例如约200 Å-约600 Å的范围内。当所述发射层的厚度在该范围内时,可获得优异的发光特性可获得而没有驱动电压的显著升高。

[0424] 然后,可在所述发射层上设置电子传输区域。

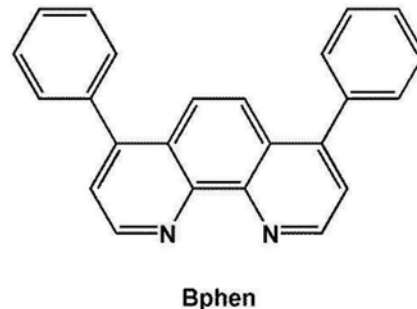
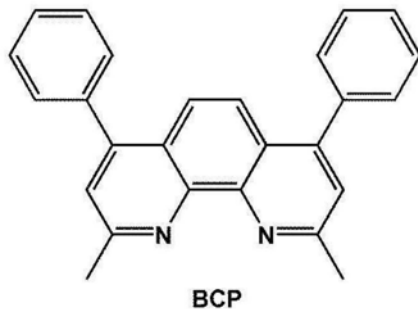
[0425] 所述电子传输区域可包括空穴阻挡层、电子传输层、电子注入层、或其任意组合。

[0426] 例如,所述电子传输区域可具有空穴阻挡层/电子传输层/电子注入层结构或者电子传输层/电子注入层结构,并且所述电子传输区域的结构不限于此。所述电子传输层可具有包括两种或更多种不同材料的多层结构或者单层结构。

[0427] 用于形成构成所述电子传输区域的空穴阻挡层、电子传输层、和电子注入层的条件可通过参照用于形成所述空穴注入层的条件而理解。

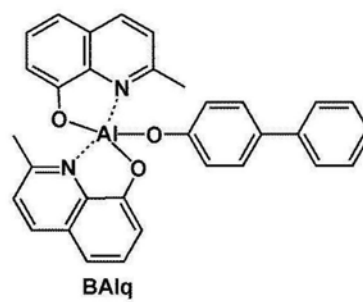
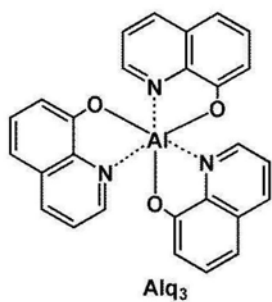
[0428] 当所述电子传输区域包括空穴阻挡层时,所述空穴阻挡层可包括,例如,BCP、Bphen、BA1q、或其任意组合的至少一种,但是本公开内容的实施方式不限于此。

[0429]

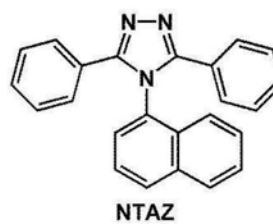


[0430] 所述空穴阻挡层的厚度可在约20 Å-约1,000 Å、例如约30 Å-约300 Å的范围内。当所述空穴阻挡层的厚度在这些范围内时,所述空穴阻挡层可具有优异的空穴阻挡层特性而没有驱动电压的显著升高。

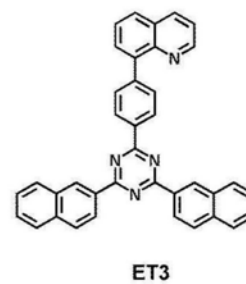
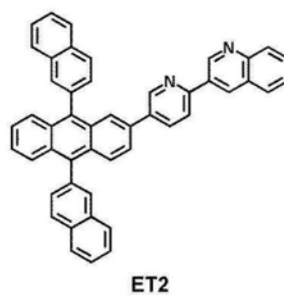
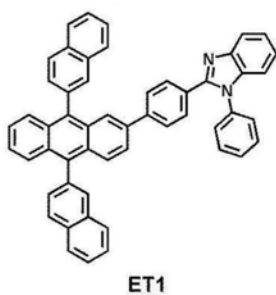
[0431] 所述电子传输层可包括如下的至少一种:BCP、Bphen、Alq₃、BA1q、TAZ、NTAZ、或其任意组合。



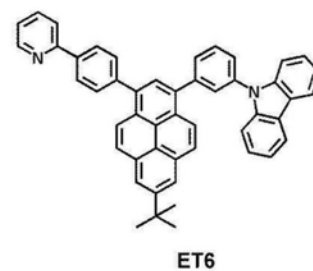
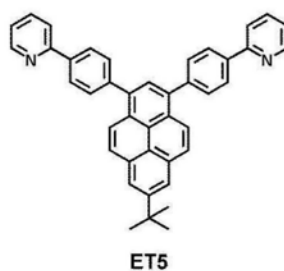
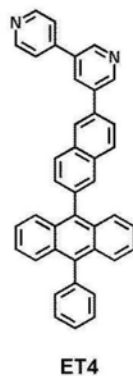
[0432]

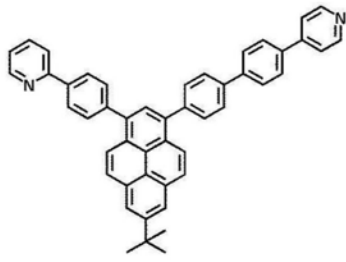


[0433] 在一种或多种实施方式中,所述电子传输层可包括ET1至ET25的至少一种,但是不限于此:

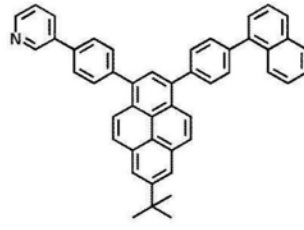


[0434]

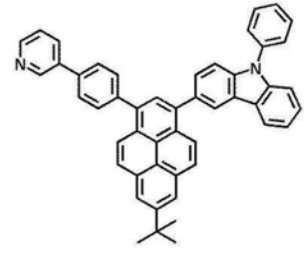




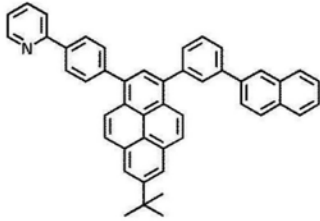
ET7



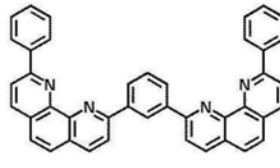
ET8



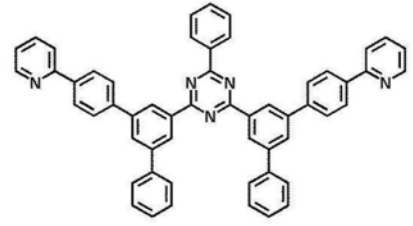
ET9



ET10

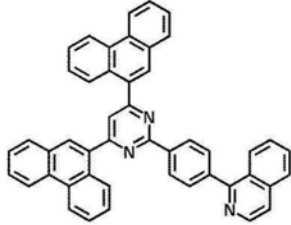


ET11

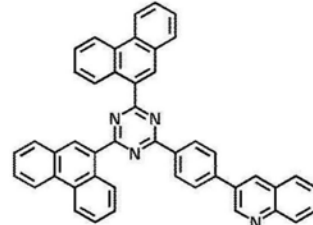


ET12

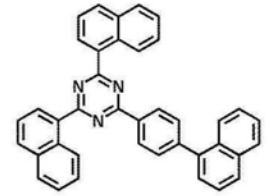
[0435]



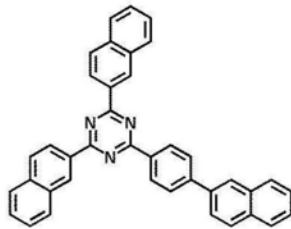
ET13



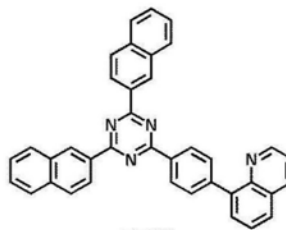
ET14



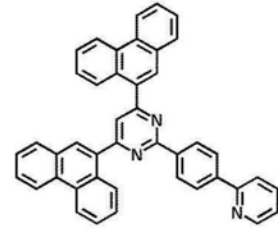
ET15



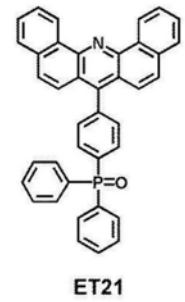
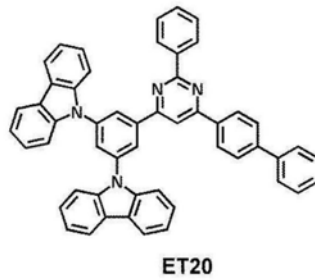
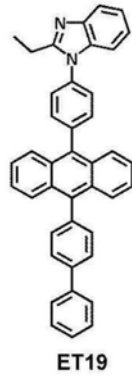
ET16



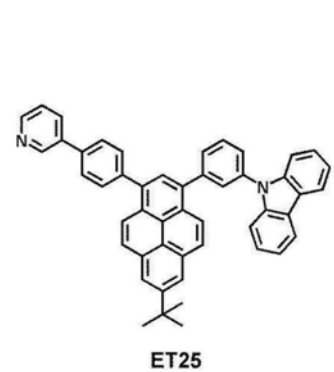
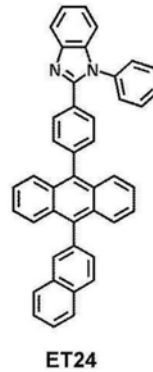
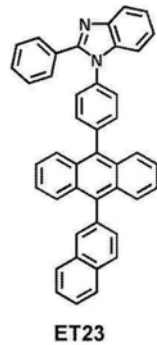
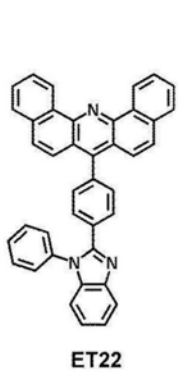
ET17



ET18



[0436]

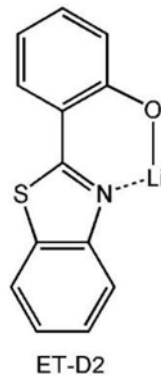
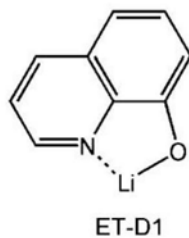


[0437] 所述电子传输层的厚度可在约100 Å-约1,000 Å、例如约150 Å-约500 Å的范围内。当所述电子传输层的厚度在以上描述的范围时,所述电子传输层可具有令人满意的电子传输特性而没有驱动电压的显著升高。

[0438] 而且,除了以上描述的材料之外,所述电子传输层可进一步包括含有金属的材料。

[0439] 所述含有金属的材料可包括Li络合物。所述Li络合物可包括例如化合物ET-D1 (8-羟基喹啉锂,LiQ) 或ET-D2:

[0440]



[0441] 所述电子传输区域可包括促进电子从第二电极19流入其中的电子注入层(EIL)。

[0442] 所述电子注入层可包括如下的至少一种:LiF、NaCl、CsF、Li₂O、BaO、或其任意组合。

[0443] 所述电子注入层的厚度可在约1 Å-约100 Å、和例如约3 Å-约90 Å的范围内。当所述电子注入层的厚度在以上描述的范围时,所述电子注入层可具有令人满意的电子注入特性而没有驱动电压的显著升高。

[0444] 第二电极19位于有机层15上。第二电极19可为阴极。用于形成第二电极19的材料

可为具有相对低的功函的金属、合金、导电化合物、或其组合。例如,可使用锂(Li)、镁(Mg)、铝(Al)、铝-锂(Al-Li)、钙(Ca)、镁-铟(Mg-In)、或镁-银(Mg-Ag)作为用于形成第二电极19的材料。在一种或多种实施方式中,为了制造顶发射型发光器件,使用ITO或IZO形成的透射性电极可用作第二电极19。

[0445] 前文中,已经参照图1描述了有机发光器件,但是本公开内容的实施方式不限于此。

[0446] 另一方面提供诊断组合物,其包括至少一种由式1表示的有机金属化合物。

[0447] 由式1表示的有机金属化合物提供高的发光效率。因此,包括所述有机金属化合物的诊断组合物可具有高的诊断效率。

[0448] 所述诊断组合物可用于包括诊断试剂盒、诊断试剂、生物传感器、和生物标志物在内的多种应用中。

[0449] 如本文中使用的术语“C₁-C₆₀烷基”指的是具有1-60个碳原子的直链或支化的饱和脂族烃单价基团,并且其非限制性实例包括甲基、乙基、丙基、异丁基、仲丁基、叔丁基、戊基、异戊基、和己基。如本文中使用的术语“C₁-C₆₀亚烷基”指的是具有与C₁-C₆₀烷基相同的结构的二价基团。

[0450] 本文中使用的术语“C₁-C₆₀烷氧基”指的是由-OA₁₀₁(其中A₁₀₁为C₁-C₆₀烷基)表示的单价基团,并且其实例包括甲氧基、乙氧基、和异丙氧基。

[0451] 本文中使用的术语“C₁-C₆₀烷硫基”指的是由-SA₁₀₂(其中A₁₀₂为C₁-C₆₀烷基)表示的单价基团,并且其实例包括甲硫基、乙硫基、和异丙硫基。

[0452] 如本文中使用的术语“C₂-C₆₀烯基”指的是通过在C₂-C₆₀烷基的中间或末端处代入至少一个碳-碳双键而形成的烃基团,并且其实例包括乙烯基丙烯基、和丁烯基。如本文中使用的术语“C₂-C₆₀亚烯基”指的是具有与C₂-C₆₀烯基相同的结构的二价基团。

[0453] 如本文中使用的术语“C₂-C₆₀炔基”指的是通过在C₂-C₆₀烷基的中间或末端处代入至少一个碳-碳三键而形成的烃基团,并且其实例包括乙炔基、和丙炔基。如本文中使用的术语“C₂-C₆₀亚炔基”指的是具有与C₂-C₆₀炔基相同的结构的二价基团。

[0454] 如本文中使用的术语“C₃-C₁₀环烷基”指的是具有3-10个碳原子的单价饱和单环基团,并且其实例包括环丙基、环丁基、环戊基、环己基、和环庚基。如本文中使用的术语“C₃-C₁₀亚环烷基”指的是具有与C₃-C₁₀环烷基相同的结构的二价基团。

[0455] 如本文中使用的术语“C₁-C₁₀杂环烷基”指的是具有至少一个N、O、P、Si、B、Se、Ge、Te、S、或其任意组合作为成环原子以及1-10个碳原子的单价饱和单环基团,并且其非限制性实例包括四氢呋喃基和四氢噻吩基。如本文中使用的术语“C₁-C₁₀亚杂环烷基”指的是具有与C₁-C₁₀杂环烷基相同的结构的二价基团。

[0456] 如本文中使用的术语“C₃-C₁₀环烯基”指的是在其环中具有3-10个碳原子和至少一个碳-碳双键并且没有芳香性的单价单环基团,并且其非限制性实例包括环戊烯基、环己烯基、和环庚烯基。如本文中使用的术语“C₃-C₁₀亚环烯基”指的是具有与C₃-C₁₀环烯基相同的结构的二价基团。

[0457] 如本文中使用的术语“C₂-C₁₀杂环烯基”指的是在其环中具有至少一个N、O、P、Si、B、Se、Ge、Te、S、或其任意组合作为成环原子、2-10个碳原子、和至少一个碳-碳双键的单价单环基团。C₂-C₁₀杂环烯基的实例为2,3-二氢呋喃基和2,3-二氢噻吩基。如本文中使用的术

语“C₂-C₁₀亚杂环烯基”指的是具有与C₂-C₁₀杂环烯基相同的结构的二价基团。

[0458] 如本文中使用的术语“C₆-C₆₀芳基”指的是具有拥有6-60个碳原子的碳环芳族体系的单价基团,并且如本文中使用的术语“C₆-C₆₀亚芳基”指的是具有拥有6-60个碳原子的碳环芳族体系的二价基团。C₆-C₆₀芳基的实例包括苯基、萘基、蒽基、菲基、芘基、和蒹基。当C₆-C₆₀芳基和C₆-C₆₀亚芳基各自包括两个或更多个环时,所述环可彼此稠合。C₇-C₆₀烷基芳基指的是被至少一个C₁-C₆₀烷基取代的C₆-C₆₀芳基。

[0459] 如本文中使用的术语“C₁-C₆₀杂芳基”指的是具有如下的环状芳族体系的单价基团:所述环状芳族体系具有至少一个N、O、P、Si、B、Se、Ge、Te、S、或其任意组合作为成环原子,以及1-60个碳原子。如本文中使用的术语“C₁-C₆₀亚杂芳基”指的是具有如下的环状芳族体系的二价基团:所述环状芳族体系具有至少一个N、O、P、Si、B、Se、Ge、Te、S、或其任意组合作为成环原子,以及1-60个碳原子。C₁-C₆₀杂芳基的实例包括吡啶基、嘧啶基、吡嗪基、哒嗪基、三嗪基、喹啉基、和异喹啉基。当C₁-C₆₀杂芳基和C₁-C₆₀亚杂芳基各自包括两个或更多个环时,所述环可彼此稠合。C₂-C₆₀烷基杂芳基指的是被至少一个C₁-C₆₀烷基取代的C₁-C₆₀杂芳基。

[0460] 如本文中使用的术语“C₆-C₆₀芳氧基”表示-OA₁₀₂(其中A₁₀₂为C₆-C₆₀芳基),并且如本文中使用的术语“C₆-C₆₀芳硫基”表示-SA₁₀₃(其中A₁₀₃为C₆-C₆₀芳基)。

[0461] 如本文中使用的术语“单价非芳族稠合多环基团”指的是具有两个或更多个彼此稠合的环,仅具有碳原子作为成环原子,并且在其整个分子结构方面没有芳香性的单价基团(例如,具有8-60个碳原子)。单价非芳族稠合多环基团的实例包括茛基。如本文中使用的术语“二价非芳族稠合多环基团”指的是具有与单价非芳族稠合多环基团相同的结构的二价基团。

[0462] 如本文中使用的术语“单价非芳族稠合杂多环基团”指的是具有两个或更多个彼此稠合的环,除了碳原子之外还具有至少一个N、O、P、Si、B、Se、Ge、Te、S、或其任意组合作为成环原子,并且在其整个分子结构方面没有芳香性的单价基团(例如,具有2-60个碳原子)。单价非芳族稠合杂多环基团的实例包括咪唑基。如本文中使用的术语“二价非芳族稠合杂多环基团”指的是具有与单价非芳族稠合杂多环基团相同的结构的二价基团。

[0463] 如本文中使用的术语“C₅-C₃₀碳环基团”指的是仅具有5-30个碳原子作为成环原子的饱和或不饱和的环状基团。C₅-C₃₀碳环基团可为单环基团或者多环基团。

[0464] 如本文中使用的术语“C₁-C₃₀杂环基团”指的是除了1-30个碳原子之外还具有至少一个N、O、Si、P、B、Se、Ge、Te、S、或其任意组合作为成环原子的饱和或不饱和的环状基团。C₁-C₃₀杂环基团可为单环基团或多环基团。

[0465] 取代的C₅-C₃₀碳环基团、取代的C₁-C₃₀杂环基团、取代的C₁-C₆₀烷基、取代的C₂-C₆₀烯基、取代的C₂-C₆₀炔基、取代的C₁-C₆₀烷氧基、取代的C₁-C₆₀烷硫基、取代的C₃-C₁₀环烷基、取代的C₁-C₁₀杂环烷基、取代的C₃-C₁₀环烯基、取代的C₂-C₁₀杂环烯基、取代的C₆-C₆₀芳基、取代的C₇-C₆₀烷基芳基、取代的C₆-C₆₀芳氧基、取代的C₆-C₆₀芳硫基、取代的C₁-C₆₀杂芳基、取代的C₂-C₆₀烷基杂芳基、取代的C₁-C₆₀杂芳氧基、取代的C₁-C₆₀杂芳硫基、取代的单价非芳族稠合多环基团、和取代的单价非芳族稠合杂多环基团的至少一个取代基可为:

[0466] 氬、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、胂基、胛基、胺基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₆₀烷基、C₂-C₆₀烯基、

C₂-C₆₀炔基、或C₁-C₆₀烷氧基；

[0467] 各自被如下取代的C₁-C₆₀烷基、C₂-C₆₀烯基、C₂-C₆₀炔基、或C₁-C₆₀烷氧基：至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、脒基、胼基、脞基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₇-C₆₀烷基芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、C₂-C₆₀烷基杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、单价非芳族稠合杂多环基团、-N(Q₁₁)(Q₁₂)、-Si(Q₁₃)(Q₁₄)(Q₁₅)、-B(Q₁₆)(Q₁₇)、-P(=O)(Q₁₈)(Q₁₉)、或其任意组合；

[0468] C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₇-C₆₀烷基芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、C₂-C₆₀烷基杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、或单价非芳族稠合杂多环基团；

[0469] 各自被如下取代的C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₇-C₆₀烷基芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、C₂-C₆₀烷基杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、或单价非芳族稠合杂多环基团：至少一个氘、-F、-Cl、-Br、-I、-CD₃、-CD₂H、-CDH₂、-CF₃、-CF₂H、-CFH₂、羟基、氰基、硝基、脒基、胼基、脞基、羧酸基团或其盐、磺酸基团或其盐、磷酸基团或其盐、C₁-C₆₀烷基、C₂-C₆₀烯基、C₂-C₆₀炔基、C₁-C₆₀烷氧基、C₃-C₁₀环烷基、C₁-C₁₀杂环烷基、C₃-C₁₀环烯基、C₂-C₁₀杂环烯基、C₆-C₆₀芳基、C₇-C₆₀烷基芳基、C₆-C₆₀芳氧基、C₆-C₆₀芳硫基、C₁-C₆₀杂芳基、C₂-C₆₀烷基杂芳基、单价非芳族稠合多环基团、单价非芳族稠合杂多环基团、-N(Q₂₁)(Q₂₂)、-Si(Q₂₃)(Q₂₄)(Q₂₅)、-B(Q₂₆)(Q₂₇)、-P(=O)(Q₂₈)(Q₂₉)、或其任意组合；或

[0470] -N(Q₃₁)(Q₃₂)、-Si(Q₃₃)(Q₃₄)(Q₃₅)、-B(Q₃₆)(Q₃₇)、或-P(=O)(Q₃₈)(Q₃₉)，

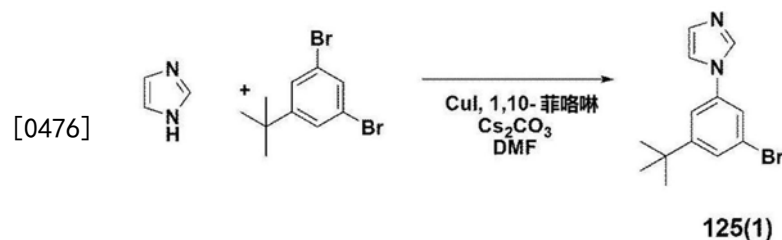
[0471] 其中Q₁-Q₉、Q₁₁-Q₁₉、Q₂₁-Q₂₉、和Q₃₁-Q₃₉可各自独立地为：氢，氘，-F，-Cl，-Br，-I，羟基，氰基，硝基，脒基，胼基，脞基，羧酸基团或其盐，磺酸基团或其盐，磷酸基团或其盐，C₁-C₆₀烷基，被至少一个氘、C₁-C₆₀烷基、或C₆-C₆₀芳基取代的C₁-C₆₀烷基，C₂-C₆₀烯基，C₂-C₆₀炔基，C₁-C₆₀烷氧基，C₃-C₁₀环烷基，C₁-C₁₀杂环烷基，C₃-C₁₀环烯基，C₂-C₁₀杂环烯基，C₆-C₆₀芳基，被至少一个氘、C₁-C₆₀烷基、C₆-C₆₀芳基、或其任意组合取代的C₆-C₆₀芳基，C₆-C₆₀芳氧基，C₆-C₆₀芳硫基，C₁-C₆₀杂芳基，C₂-C₆₀烷基杂芳基，单价非芳族稠合多环基团，单价非芳族稠合杂多环基团，或其任意组合。

[0472] 下文中，参照合成实施例和实施例详细地描述根据实施方式的化合物和有机发光器件。然而，所述化合物和有机发光器件不限于此。在描述合成实施例时使用的措辞“使用’B’代替’A’”意指，就摩尔当量而言，所使用的’A’的量与所使用的’B’的量相同。

[0473] 实施例

[0474] 合成实施例1：化合物125的合成

[0475] (1) 中间体125(1)的合成

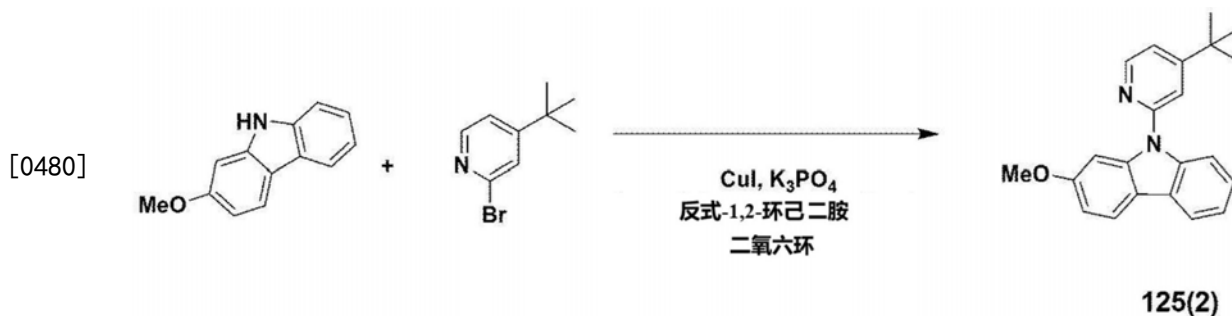


[0477] 将102.8mmol (7g) 1H-咪唑、133.7mmol (39g) 1,3-二溴-5-(叔丁基)苯、25.7mmol

(4.9g) CuI、30.9mmol (5.6g) 1,10-菲咯啉、和205.7mmol (67g) Cs₂CO₃添加至200mL的二甲基甲酰胺(DMF),然后将所得混合物在130℃的温度下回流12小时。将由其获得的反应产物冷却,并且与乙酸乙酯和水组合。将有机层分离,用水洗涤三次并且使用硫酸镁干燥,然后在减压下从其除去溶剂,从而获得粗产物。对所述粗产物进行硅胶柱层析(洗脱液:乙酸乙酯:己烷)以获得中间体125(1) (60%的产率)。

[0478] MALDI-TOF (m/z) : 278.05 [M]⁺

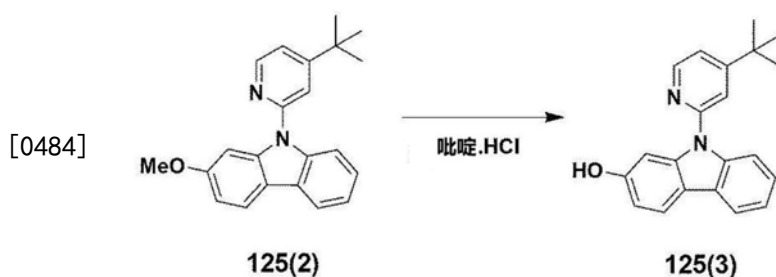
[0479] (2) 中间体125(2)的合成



[0481] 将101.4mmol (20.0g) 2-甲氧基-9H-吡啶和152.1mmol (32.6g) 2-溴-4-(叔丁基)吡啶溶解在340ml二氧六环中,然后,向其添加50.7mmol (9.7g) CuI、152.1mmol (32.3g) K₃PO₄、和72.4mmol (12.2ml) 反式-1,2-环己二胺,继之以在120℃的温度下回流12小时。在反应完成之后,将混合物冷却至室温,并且与乙酸乙酯和水混合。将有机层分离,用水洗涤三次并且使用硫酸镁干燥,然后在减压下从其除去溶剂,从而获得粗产物。对所述粗产物进行硅胶柱层析(洗脱液:乙酸乙酯:己烷)以获得中间体125(2) (85%的产率)。

[0482] MALDI-TOF (m/z) : 331.16 [M]⁺

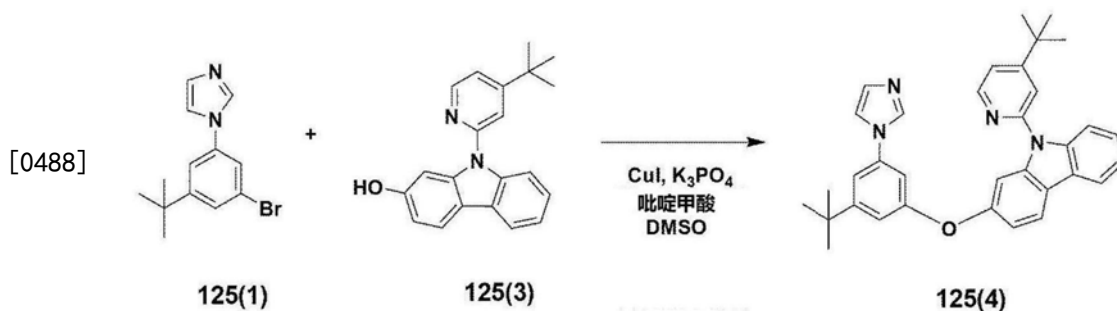
[0483] (3) 中间体125(3)的合成



[0485] 在洁净(neat)条件下,添加95.3mmol (31.5g) 中间体125(2)和1.4mol (165.3g) 吡啶盐酸盐并且使其在180℃的温度下回流20小时。在反应完成之后,将混合物冷却至室温,并且与二氯甲烷和水混合。将有机层分离,用水洗涤三次并且使用硫酸镁干燥,然后在减压下从其除去溶剂,从而获得粗产物。对所述粗产物进行硅胶柱层析(洗脱液:乙酸乙酯:二氯甲烷:己烷)以获得中间体125(3) (65%的产率)。

[0486] MALDI-TOF (m/z) : 317.15 [M]⁺

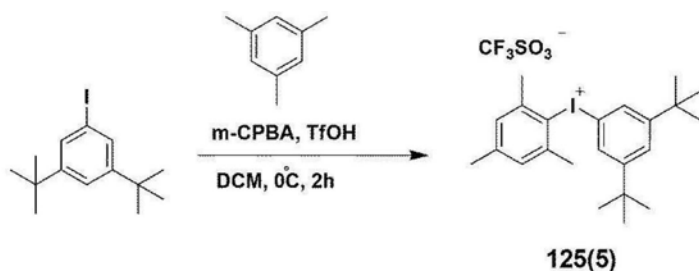
[0487] (4) 中间体125(4)的合成



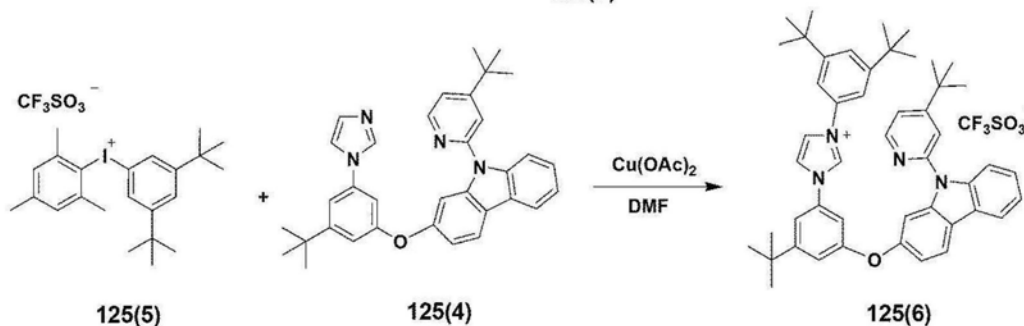
[0489] 将17.9mmol (5g) 中间体125 (1) 和15.0mmol (4.7g) 中间体125 (3) 溶解在300ml的二甲亚砜(DMSO)中,然后,向其添加4.9mmol (0.8g) CuI、59.9mmol (12.7g) K₃PO₄、和22.5mmol (2.7g) 吡啶甲酸,并且将所得混合物在100℃的温度下回流12小时。在反应完成之后,将混合物冷却至室温,并且与乙酸乙酯和水混合。将有机层分离,用水洗涤三次并且使用硫酸镁干燥,然后,在减压下从其除去溶剂,从而获得粗产物。对所述粗产物进行硅胶柱层析(洗脱液:乙酸乙酯:己烷)以获得中间体125 (4) (71%的产率)。

[0490] MALDI-TOF (m/z) : 514.26 [M]⁺

[0491] (5) 中间体125 (5) 和125 (6) 的合成



[0492]

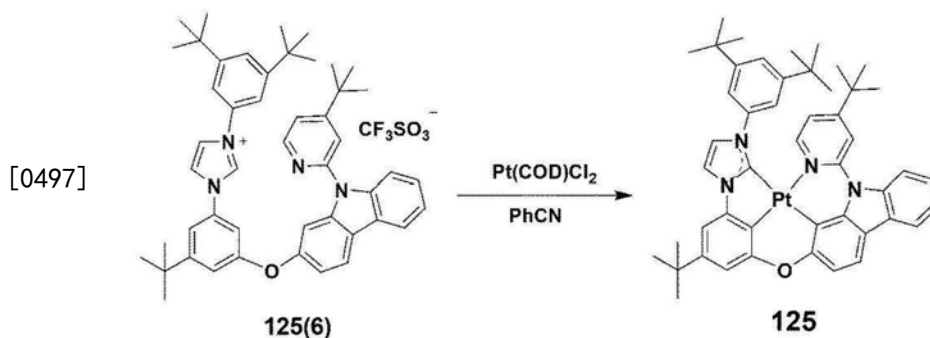


[0493] 将19.0mmol (6.0g) 1,3-二叔丁基-5-碘苯、28.8mmol (3.5g) 均三甲苯化合物、和24.0mmol (4.1g) 3-氯过氧化苯甲酸 (m-CPBA) 溶解在50ml的二氯甲烷(DCM)中,然后,在冰浴中在0℃的温度下冷却。向其逐滴添加48.0mmol (4.2ml) 三氟甲磺酸(TfOH)。在将温度升高至室温之后,将所得混合物搅拌2小时,然后从其完全地除去溶剂。向其添加少量的二乙醚,继之以搅拌和过滤。将所获得的粗产物125 (5) 用于接下来的反应。

[0494] 将8.6mmol (5.0g) 中间体125 (5) 、5.7mmol (3.3g) 中间体125 (4) 、和0.4mmol (0.1g) 乙酸铜(Cu(OAc)₂) 添加至30mL的二甲基甲酰胺(DMF),然后,将所得混合物在130℃的温度下回流12小时。对通过在减压下从其除去溶剂而获得的粗产物进行硅胶柱层析(洗脱液:二氯甲烷:丙酮)以获得中间体125 (6) (82%的产率)。

[0495] MALDI-TOF (m/z) : 702.42 [M]⁺

[0496] (6) 化合物125的合成



[0498] 将4.0mmol (1.5g) (1,5-环辛二烯) 二氯化铂(II) (Pt (COD) Cl₂)、4.0mmol (3.4g) 中间体125 (6)、和12.0mmol (1.0g) 乙酸钠(NaOAc)添加至200mL的苕腈(PhCN),然后,在180℃的温度下回流12小时。在反应完成之后,将所得混合物冷却至室温并且在减压下从其除去溶剂以获得粗产物,然后对所述粗产物进行硅胶柱层析(洗脱液:二氯甲烷和己烷)以获得化合物125 (53%的产率)。

[0499] MALDI-TOF (m/z) :895.36 [M]⁺

[0500] 评价实施例1:光致发光量子产率(PLQY)的评价

[0501] 将在CH₂Cl₂中的PMMA溶液、5重量%的CBP、和化合物125混合,然后,将所得物通过使用旋涂器涂布在石英基板上,然后,在烘箱中在80℃的温度下热处理,和冷却至室温以获得膜。

[0502] 通过使用装备有氙灯光源、单色器、光子多通道分析仪、和积分球并且使用PLQY测量软件的Hamamatsu Photonics绝对PL量子产率测量系统(Hamamatsu Photonics,Ltd., Shizuoka,日本)评价在膜中的化合物125的PLQY,并且对化合物A进行相同的实验。其结果示于表2中。

[0503] 表2

[0504]

化合物	最大发光波长(PL _{max}) (nm)	PLQY (相对值)
化合物125	449	0.916
化合物A	447	0.861

[0505] 由表2可以确认,化合物125具有与化合物A基本上相同的最大发光波长,并且具有高的发光量子效率且因此具有优异的发光特性。

[0506] 实施例1

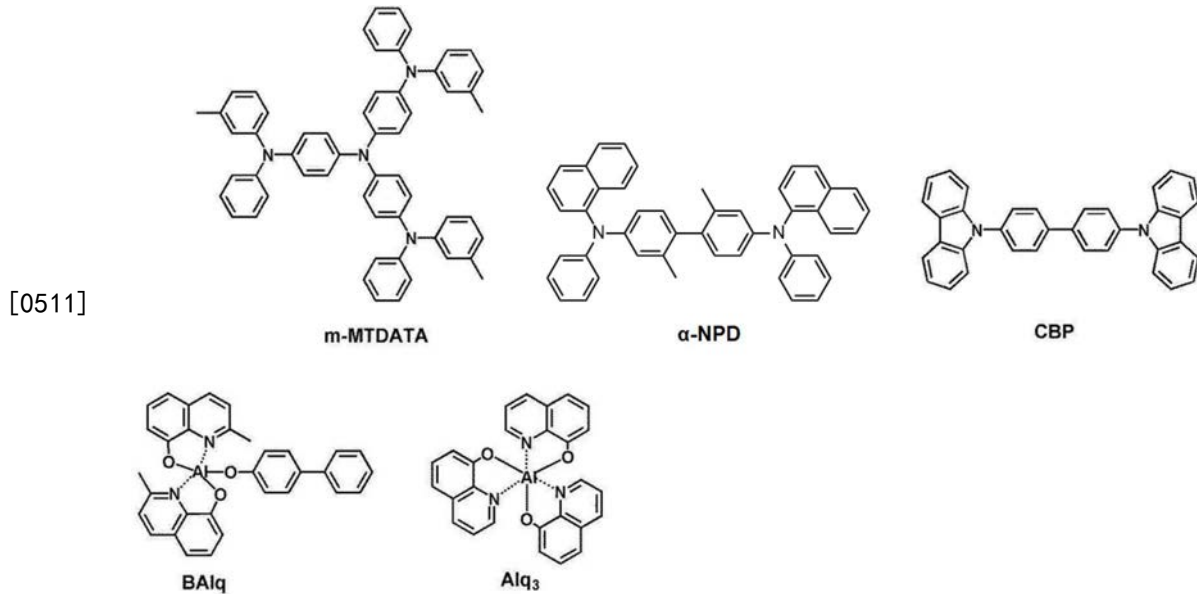
[0507] 将ITO玻璃基板切割成50mm×50mm×0.5mm的尺寸,然后在丙酮、异丙醇和纯水中超声处理,各自15分钟,然后通过暴露于UV臭氧而洗涤30分钟。

[0508] 然后,将m-MTDATA以1 Å/秒的沉积速率沉积在所述玻璃基板的ITO电极(阳极)上以形成具有600 Å的厚度的空穴注入层,然后,将α-NPD以1 Å/秒的沉积速率沉积在所述空穴注入层上以形成具有250 Å的厚度的空穴传输层。

[0509] 将化合物125(掺杂剂)和CBP(主体)以分别为0.1 Å/秒的沉积速率和1 Å/秒的沉积速率共沉积在所述空穴传输层上,以形成具有400 Å的厚度的发射层。

[0510] 将BA1q以1 Å/秒的沉积速率沉积在所述发射层上以形成具有50 Å的厚度的空穴

阻挡层,并且将Alq₃沉积在所述空穴阻挡层上以形成具有300 Å的厚度的电子传输层,然后将LiF沉积在所述电子传输层上以形成具有10 Å的厚度的电子注入层,然后,将Al真空沉积在所述电子注入层上以形成具有1,200 Å的厚度的第二电极(阴极),从而完成具有ITO/m-MTDATA(600 Å)/α-NPD(250 Å)/CBP+化合物125(10%)(400 Å)/BAIq(50 Å)/Alq₃(300 Å)/LiF(10 Å)/Al(1,200 Å)的结构有机发光器件的制造。



[0512] 对比例1

[0513] 以与实施例1中相同的方式制造有机发光器件,除了如下之外:在形成发射层时,对于用作掺杂剂,使用表3中所示的相应化合物。

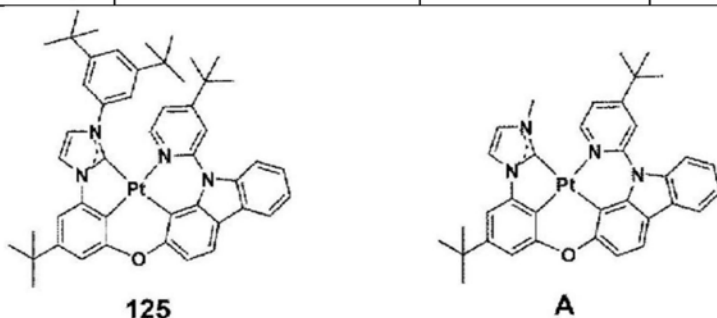
[0514] 评价实施例2:有机发光器件的性质的评价(1)

[0515] 根据实施例1和对比例1制造的有机发光器件各自的驱动电压、外量子效率(EQE)、和寿命(T₈₀)作为相对值进行评价。其结果示于表3中。该评价是使用电流-电压计(Keithley 2400)和亮度计(Minolta Cs-1000A)进行的,并且寿命(T₈₀) (在1200尼特下)是通过如下评价的:测量直至亮度降低至100%的初始亮度的80%时所流逝的时间的量。

[0516] 表3

编号	掺杂剂化合物	EQE (相对值)	寿命(T ₈₀) (相对值)	最大发光波长 (nm)
实施例 1	化合物 125	109	115	452
对比例 1	化合物 A	100	100	452

[0517]



[0518] 参照表3,可以看出,实施例1的有机发光器件具有优异的外量子效率和寿命,并且与对比例1的有机发光器件相比,具有更高的外量子效率和更长的寿命。

[0519] 实施例2

[0520] 以与实施例1中相同的方式制造有机发光器件,除了如下之外:在形成发射层时,用作主体的化合物CBP的重量比率为88.5%,并且用作掺杂剂的化合物125和化合物FD的重量比率为10%:1.5%。

[0521] 对比例2

[0522] 以与实施例1中相同的方式制造有机发光器件,除了如下之外:在形成发射层时,对于用作掺杂剂,使用化合物FD代替化合物1。

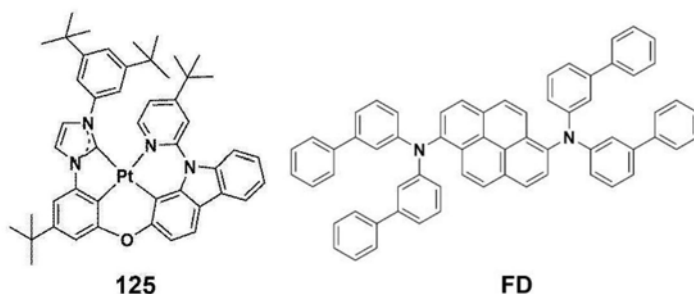
[0523] 实施例3的评价:有机发光器件的性质的评价(2)

[0524] 评价根据实施例2和对比例2制造的有机发光器件各自的驱动电压、外量子效率(EQE)、最大发光波长和寿命(T₈₀)。其结果示于表4中。使用电流-电压计(Keithley 2400)和亮度计(Minolta Cs-1000A)作为用于评价的设备,并且寿命(T₈₀) (在1200尼特下)是通过如下评价的:测量直至亮度降低为100%的初始亮度的80%时所流逝的时间的量。

[0525] 表4

编号	掺杂剂化合物	驱动电压 (V)	EQE (相对值)	寿命(T ₈₀) (相对值)	最大发光波长 (nm)
实施例 2	化合物 125 + 化合物 FD	4.88	120	318	461
对比例 2	化合物 FD	5.81	100	100	461

[0527]



[0528] 由表4可以看出,与对比例2的有机发光器件相比,实施例2的有机发光器件具有更

低的驱动电压以及显著改善的外量子效率和寿命特性。

[0529] 所述有机金属化合物具有优异的光化学稳定性,并且使用所述有机金属化合物的有机发光器件可具有改善的效率和寿命。这样的有机金属化合物具有优异的磷光发光特性,并且因此,在使用时,可提供具有高的诊断效率的诊断组合物。

[0530] 应理解,本文中描述的实施方式应仅在描述的意义考虑且不用于限制的目的。在各实施方式中的特征或方面的描述应典型地被认为可用于其它实施方式中的其它类似特征或方面。尽管已经参照附图描述了一种或多种实施方式,但是本领域普通技术人员将理解,在不背离如由所附权利要求所限定的精神和范围的情况下,可在其中进行形式和细节方面的多种变化。

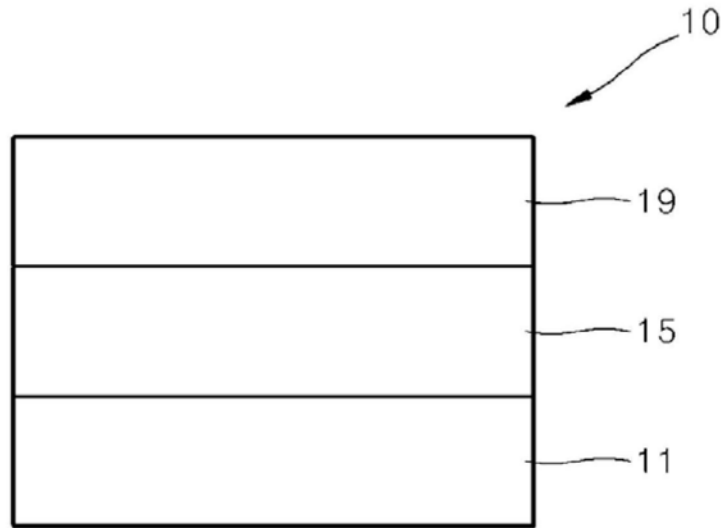


图1