



(19) 中華民國智慧財產局

(12) 發明說明書公開本

(11) 公開編號：TW 201920599 A

(43) 公開日：中華民國 108 (2019) 年 06 月 01 日

(21) 申請案號：107121163

(22) 申請日：中華民國 101 (2012) 年 12 月 07 日

(51) Int. Cl.：

C09K11/06 (2006.01)

C07D217/08 (2006.01)

C07F15/00 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

H05B33/14 (2006.01)

(30) 優先權：2011/12/09

美國

13/316,162

(71) 申請人：美商環球展覽公司 (美國) UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION (US)

美國

(72) 發明人：馬斌 MA, BIN (US)；狄安裘利斯艾倫 DEANGELIS, ALAN (US)；夏傳軍

XIA, CHUANJUN (CN)

(74) 代理人：陳長文

申請實體審查：有 申請專利範圍項數：10 項 圖式數：3 共 81 頁

(54) 名稱

新穎有機發光材料

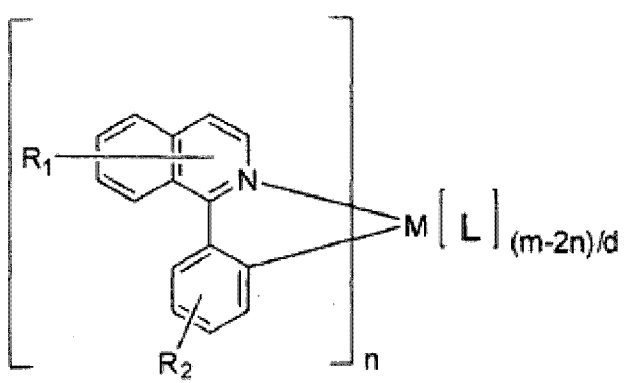
NOVEL ORGANIC LIGHT EMITTING MATERIALS

(57) 摘要

提供含有 2-苯基異喹啉配體之新穎磷光金屬錯合物，該 2-苯基異喹啉配體之異喹啉環上具有至少兩個取代基。所揭示之化合物具有低的昇華溫度，該低的昇華溫度允許純化及製作成各種 OLED 裝置之便利性。

Novel phosphorescent metal complexes containing 2-phenylisoquinoline ligands with at least two substituents on the isoquinoline ring are provided. The disclosed compounds have low sublimation temperatures that allow for ease of purification and fabrication into a variety of OLED devices.

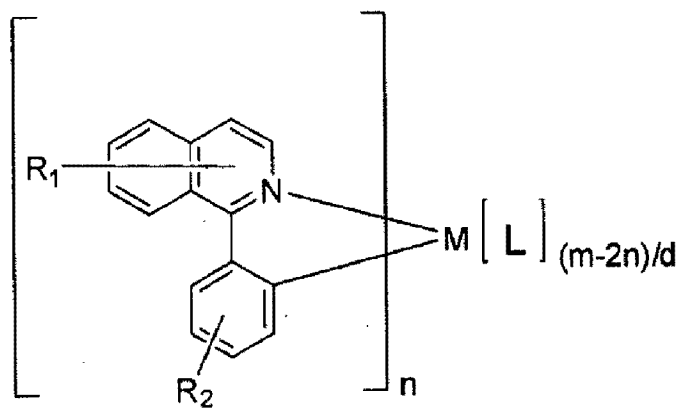
指定代表圖：



式 I

【第 3 圖】

特徵化學式：



式I

【發明說明書】

【中文發明名稱】

新穎有機發光材料

【英文發明名稱】

NOVEL ORGANIC LIGHT EMITTING MATERIALS

【技術領域】

本發明係關於含有雜環配體之金屬錯合物，該雜環配體上具有至少兩個取代基。該等金屬錯合物適用於OLED裝置。

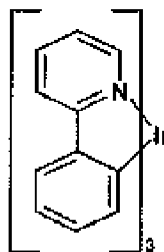
【先前技術】

利用有機材料之光電裝置由於多種原因而變得愈發合意。用於製造此等裝置之許多材料相對便宜，因此有機光電裝置具有優於無機裝置之成本優勢的潛力。此外，有機材料之固有特性，諸如其可撓性，可使其充分適合於特定應用，諸如在一可撓性基板上之製作。有機光電裝置之實例包括有機發光裝置(OLED)、有機光電晶體、有機光伏電池，及有機光偵測器。對於OLED而言，有機材料可具有優於習知材料之效能優勢。例如，使用適當摻雜劑通常可而容易地調諧有機發射層發光之波長。

OLED利用當在裝置上施加電壓時發光之薄有機膜。OLED變成一種日益受關注之用於諸如平板顯示器、照明，及背光照明之應用中的技術。數種OLED材料及構型經描述於美國專利第5,844,363號、第6,303,238號及第5,707,745號中，其係以引用的方式全部併入本文中。

磷光發射分子之一應用為全彩色顯示器。此顯示器之行業標準要求像素適配成發射稱為「飽和」色之特定顏色。詳言之，此等標準要求飽和紅、綠，及藍色像素。顏色可使用在此項技術中熟知之CIE坐標來量測。

綠色發射分子之一實例為參(2-苯基吡啶)銱，表示為 Ir(ppy)_3 ，其具有以下結構：



在此圖及本文之後的圖中，將自氮至金屬(此處為Ir)之配位鍵描繪為直線。

如本文所使用，術語「有機」包括聚合材料以及小分子有機材料，此等材料可用於製作有機光電裝置。「小分子」係指不為聚合物之任何有機材料，且「小分子」可能實際上相當大。在一些情況下，小分子可包括重複單元。舉例而言，使用長鏈烷基作為取代基不會將分子自「小分子」類別排除。亦可將小分子併入聚合物中，例如作為聚合物主鏈上之側基或作為主鏈之一部分。小分子亦可充當樹枝狀聚合物之核心部分，該樹枝狀聚合物包括建立在核心部分之上的一系列化學外殼。樹枝狀聚合物之核心部分可為螢光或磷光小分子發射體。樹枝狀聚合物可為「小分子」，且咸信目前OLED領域中所使用之所有樹枝狀聚合物均為小分子。

如本文所使用，「頂部」意謂距離基板最遠，而「底部」意謂距離基板最近。當第一層經描述為「佈置於第二層之上」時，則第一層經進一步遠離基板佈置。在第一層與第二層之間可存在其他層，除非說明第一層與第二層「接觸」。例如，陰極可經描述為「佈置於陽極之上」，即使兩者之間存在各種有機層。

如本文所使用，「溶液可加工」意謂能夠在液體介質(溶液或懸浮液形式)中溶解、分散，或輸送及/或自液體介質沈積。

當據信配體對發射材料之光敏特性有直接貢獻時，該配體可稱為「光敏的」。當據信配體對發射材料之光敏特性無貢獻時，該配體可稱為「輔助的」，儘管輔助配體可能改變光敏配體之特性。

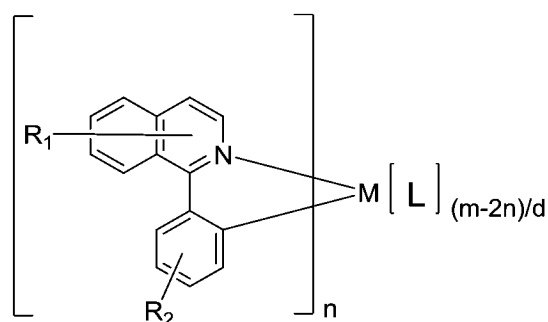
如本文所使用，且如熟習此項技術者通常所理解，若第一能級更接近真空能級，則第一「最高佔據分子軌道」(HOMO)或「最低未佔據分子軌道」(LUMO)之能級「大於」或「高於」第二HOMO或LUMO之能級。由於電離電位(IP)經量測為相對真空能級之負能量，因此較高HOMO能級對應具有較小絕對值之IP (較低負性之IP)。類似地，較高LUMO能級對應具有較小絕對值之電子親和力(EA)(較低負性之EA)。在習知能級圖上，其中真空能級在頂部，材料之LUMO能級高於相同材料之HOMO能級。「較高」HOMO或LUMO能級比「較低」HOMO或LUMO能級看起來更接近此圖的頂部。

如本文所使用，且如熟習此項技術者通常所理解，若第一逸出功具有較高絕對值，則第一逸出功「大於」或「高於」第二逸出功。因為逸出功通常經量測為相對真空能級之負數，因此此點意謂「較高」逸出功之負性更大。在習知能級圖上，其中真空能級在頂部，「較高」逸出功經說明為在向下方向上進一步遠離真空能級。因此，HOMO及LUMO能級之定義遵循與逸出功不同之約定。

關於OLED之更多細節及以上描述之定義可見美國專利第7,279,704號，該專利係以引用的方式全部併入本文中。

【發明內容】

在一態樣中，化合物具有下式：



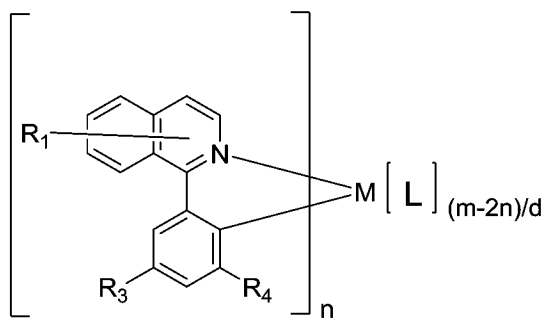
提供式I。

在式I化合物中，**M**為原子量高於40之金屬，**L**為第二配體，**m**為金屬**M**之最大配位數，**d**為**L**之齒合度，且**n**為至少1。**R₁**係對各配體獨立地來選擇，並且表示二、三、四、五取代或無取代。**R₁**中之每一者獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氘、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、鍺烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

R₁中之至少兩者獨立地選自含有二至六個碳之烷基、矽烷基、鍺烷基、環烷基及其組合。**R₂**可以表示單、二、三、四取代或無取代，且**R₂**中之每一者獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氘、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

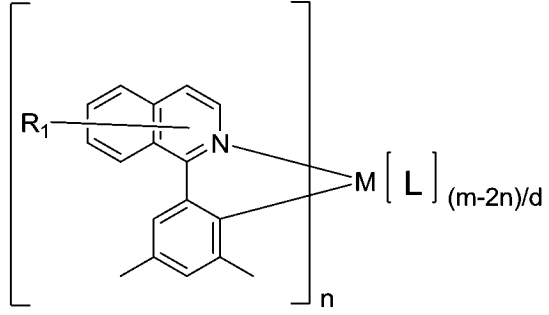
在一態樣中，**R₁**表示二取代。在一態樣中，**R₁**表示二烷基取代。在另一態樣中，**R₁**表示矽烷基或鍺烷基取代。

在一態樣中，化合物具有下式：



，式II，其中R₃及R₄皆為烷基。

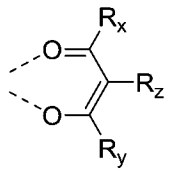
在一態樣中，化合物具有下式：



，式III。

在一態樣中，R₁獨立地選自由以下各項組成之群：CH(CH₃)₂、CH₂CH(CH₃)₂、CH₂C(CH₃)₃、環戊基、環己基、乙基、三甲基矽烷基、三乙基矽烷基、三異丙基矽烷基、三甲基鍺烷基、三乙基鍺烷基以及三異丙基鍺烷基。

在一態樣中，n M為Ir。在一態樣中，n為2。在一態樣中，L為單陰



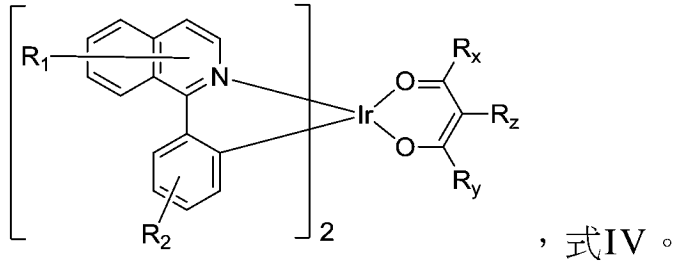
離子二齒配體。在一態樣中，L為，且R_x、R_y以及R_z各自獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氘、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

在一態樣中，R_x、R_y以及R_z獨立地選自由以下各項組成之群：烷基、氫、氘及其組合。

在一態樣中，R_z為氫或氘，且R_x及R_y獨立地選自由以下各項組成之

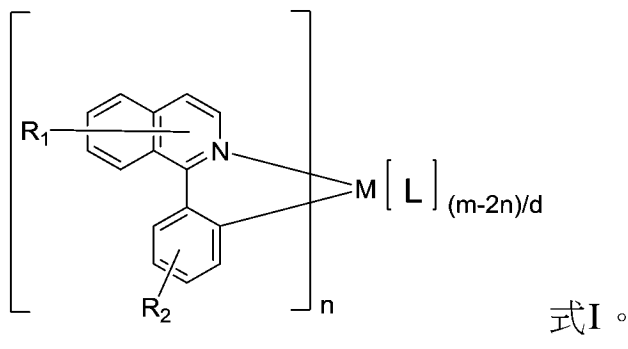
群：甲基、 $\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ 以及 $\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ 。

在一態樣中，化合物具有下式：



在一態樣中，該化合物選自由以下各項組成之群：化合物1-化合物50。

在一態樣中，提供第一裝置。該第一裝置包括一第一有機發光裝置，該第一有機發光裝置進一步包括：一陽極、一陰極以及佈置在該陽極與該陰極之間之一有機層，該有機層包括具有下式之化合物：



在式I化合物中，M為原子量高於40之金屬，L為第二配體，m為金屬M之最大配位數，d為L之齒合度，且n為至少1。R₁係對各配體獨立地來選擇，且表示二、三、四、五取代或無取代。R₁中之每一者獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氖、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、鍍烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

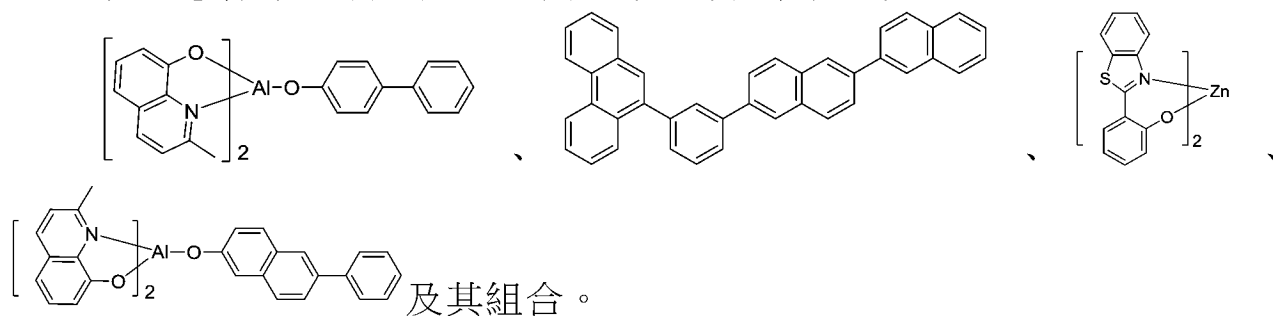
R₁中之至少兩者獨立地選自含有二至六個碳之烷基、矽烷基、鍍烷基、環烷基及其組合。R₂可以表示單、二、三、四取代或無取代，且R₂中

之每一者獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氖、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

在一態樣中，該第一裝置為一消費品。在一態樣中，該第一裝置為一有機發光裝置。在一態樣中，該有機層為發射層並且該化合物為一非發射摻雜劑。在一態樣中，該有機層進一步包括一主體。

在一態樣中，該主體為金屬8-羥基喹啉鹽。

在一態樣中，該主體選自由以下各項組成之群：



【圖式簡單說明】

第1圖展示一種有機發光裝置。

第2圖展示一種不具有獨立電子傳輸層之經倒置的有機發光裝置。

第3圖展示式I化合物。

【實施方式】

所主張之發明由簽署大學-企業聯合研究協議的各方中之一方或多方進行、以各方中之一方或多方為名義進行，或與以下各方中之一方或多方聯合進行：密歇根大學 (University of Michigan)、普林斯頓大學 (Princeton University)、南加利福尼亞大學 (The University of Southern California) 的校董，及通用顯示器公司 (Universal Display Corporation)。

該協議在作出所主張之發明的當日或之前便生效，且所主張之發明係由於在該協議範疇之內進行的活動而進行。

通常，OLED包括至少一佈置於陽極與陰極之間，且電連接至陽極及陰極之有機層。當施加電流時，陽極將電洞注入有機層，且陰極將電子注入有機層。注入之電洞及電子各自向帶相反電荷之電極遷移。當電子及電洞定位在相同分子上時，將形成「激子」，該激子為具有激發態之定位電子-電洞對。當激子經由光電發射機理弛豫時將會發光。在某些情況下，激子可定位在激基締合物或激基複合物上。亦可發生非輻射機理，諸如熱弛豫，但通常認為非輻射機理不合意。

最初之OLED使用可自分子之單線態發光(「螢光」)的發射分子，例如美國專利第4,769,292號所揭示，該專利係以引用的方式全部併入。螢光發射通常發生在小於10納秒的時間幀內。

最近，已經顯示具有發射材料之OLED，此等發射材料可自三線態發射光(「磷光」)。Baldo等人，「Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices」，Nature，第395卷，151-154, 1998(「Baldo-I」)；及Baldo等人，「Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence,」Appl. Phys. Lett.，第75卷，第3版, 4-6 (1999)(「Baldo-II」)，該等文獻係以引用的方式全部併入。磷光經更詳細地描述於美國專利第7,279,704號，第5-6欄中，該專利係以引用的方式併入。

第1圖展示有機發光裝置100。圖式不必按比例繪製。裝置100可包括基板110、陽極115、電洞注入層120、電洞傳輸層125、電子阻擋層130、發射層135、電洞阻擋層140、電子傳輸層145、電子注入層150、保護層

155及陰極160。陰極160為具有第一導電層162及第二導電層164的化合物陰極。裝置100可藉由按順序沈積所描述層來製作。此等不同層以及實例材料之特性及功能經更詳細地描述在US 7,279,704，第6-10欄中，該專利係以引用的方式併入。

可得到此等層之每一者的更多實例。舉例而言，美國專利第5,844,363號中揭示一種可撓性且透明之基板-陽極組合，該專利係以引用的方式全部併入。p型摻雜之電洞傳輸層之實例為在50:1的摩爾比下用F.sub.4-TCNQ 摻雜之 m-MTDATA，如在美國專利申請公開案第2003/0230980號中所揭示，該專利係以引用的方式全部併入。發射及主體材料之實例揭示於Thompson等人之美國專利第6,303,238號中，該專利係以引用的方式全部併入。n型摻雜之電子傳輸層之實例為在1:1的摩爾比下用Li摻雜之BPhen，如在美國專利申請公開案第2003/0230980號中所揭示，該專利係以引用的方式全部併入。美國專利第5,703,436號及第5,707,745號揭示陰極之實例，該等陰極包括具有金屬薄層之化合物陰極，諸如上面覆蓋有透明、導電、濺射沈積之ITO層的Mg:Ag金屬薄層，該等專利係以引用的方式全部併入。阻擋層之理論及用途經更詳細地描述於美國專利第6,097,147號及美國專利申請公開案第2003/0230980號中，該等專利係以引用的方式全部併入。注入層之實例經提供於美國專利申請公開案第2004/0174116號中，該專利係以引用的方式全部併入。保護層之描述可見美國專利申請公開案第2004/0174116號，該專利係以引用的方式全部併入。

第2圖展示經倒置之OLED 200。該裝置包括基板210、陰極215、發射層220、電洞傳輸層225及陽極230。裝置200可藉由按順序沈積所描述

層來製作。因為最常見之OLED構型具有陰極佈置於陽極上，且裝置200具有陰極215佈置於陽極230下，因此裝置200可稱作「倒置」之OLED。類似於關於裝置100所描述之材料的材料可用於裝置200之相對應層中。第2圖提供如何自裝置100之結構中省略一些層之一實例。

藉由非限制性實例提供第1圖及第2圖中所說明之簡單層狀結構，且應理解，本發明之實施例可與廣泛多種其他結構相關聯使用。所描述之特定材料及結構實際上為例示性的，且可使用其他材料及結構。功能化之OLED可藉由以不同方式組合所描述之各種層來實現，或可基於設計、效能及成本因素完全地省略多個層。亦可包括其他未明確描述之層。可使用除明確描述之材料以外的材料。雖然本文提供之許多實例將各種層描述為包括單一材料，但應理解，可使用材料之組合，諸如主體與摻雜劑之混合物，或更通常地混合物。層亦可具有各種子層。本文給予各種層之名稱並不意欲嚴格地限制。舉例而言，在裝置200中，電洞傳輸層225傳輸電洞且將電洞注入發光層220中，且可經描述為電洞傳輸層或電洞注入層。在一實施例中，OLED可經描述為具有「有機層」，該有機層佈置於陰極與陽極之間。此有機層可包括單層，或可進一步包括多個如例如關於第1圖及第2圖所描述之不同有機材料之層。

亦可使用未明確描述之結構及材料，諸如包括諸如揭示於Friend等人之美國專利第5,247,190號中的聚合物材料之OLED (PLED)，該專利係以引用的方式全部併入。進一步舉例而言，可使用具有單一有機層之OLED。OLED可為堆疊的，例如，如在Forrest等人之美國專利第5,707,745號中所描述，該專利係以引用的全部方式併入。OLED結構可偏離第1圖及第2圖中所說明的簡單層狀結構。舉例而言，基板可包括成角度

之反射表面以提高出光，諸如在Forrest等人之美國專利第6,091,195號中所描述之檯面結構，及/或如在Bulovic等人之美國專利第5,834,893號中所描述之坑形結構，該等專利係以引用的方式全部併入。

除非另外指出，否則各種實施例之任一層可藉由任何適合的方法來沈積。對於有機層而言，較佳方法包括熱蒸發、噴墨，諸如在美國專利第6,013,982號及第6,087,196號中所描述，該等專利係以引用的方式全部併入；有機氣相沈積(OVPD)，諸如在Forrest等人之美國專利第6,337,102號中所描述，該專利係以引用的方式全部併入；及藉由有機蒸汽噴印(OVJP)沈積，諸如在美國專利申請序號10/233,470中所描述，該專利係以引用的方式全部併入。其他適合的沈積方法包括旋塗及其他基於溶液之方法。基於溶液之方法較佳地在氮氣或惰性氣氛下進行。對於其他層而言，較佳方法包括熱蒸發。較佳圖案化方法包括經由遮罩沈積、冷焊，諸如在美國專利第6,294,398號及第6,468,819號中所描述，該等專利係以引用的方式全部併入，及與一些沈積方法，諸如噴墨及OVJD，相關聯之圖案化。亦可使用其他方法。可改質待沈積之材料以使其與特定沈積方法相容。舉例而言，在小分子中可使用諸如烷基及芳基、支鏈或直鏈、且較佳地含有至少3個碳原子之取代基，藉此提高其經受溶液加工之能力。可使用具有20個或20個以上碳之取代基，且3至20個碳為較佳範圍。具有不對稱結構之材料可比具有對稱結構之材料有更好之溶液加工性，因為不對稱材料可具有較低之再結晶趨勢。可使用樹枝狀聚合物取代基來提高小分子經受溶液加工之能力。

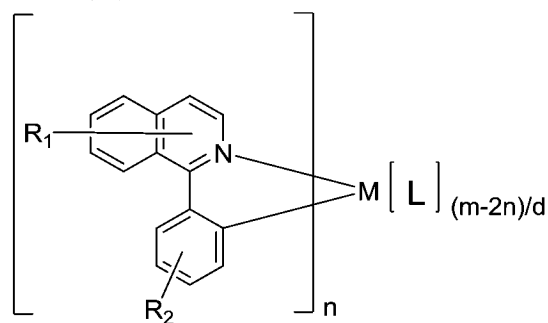
根據本發明之實施例製作的裝置可經併入廣泛多種消費品中，包括：平板顯示器、電腦顯示器、醫療顯示器、電視、廣告牌、用於室內或

室外照明及/或信號傳導之燈、平視顯示器、完全透明之顯示器、可撓性顯示器、激光列印機、電話、手機、個人數位助理(PDA)、便攜式電腦、數碼相機、攝像機、探視器、微顯示器、車輛、大面積牆壁、劇場或運動場屏幕或招牌。可使用各種控制機理來控制根據本發明製作之裝置，包括無源矩陣及有源矩陣。許多裝置意欲在對人體舒適之溫度範圍內使用，諸如18攝氏度至30攝氏度，且更佳地在室溫下(20攝氏度至25攝氏度)使用。

本文描述之材料及結構可在除OLED之外的裝置中應用。例如，其他光電裝置，諸如有機太陽能電池及有機光偵測器，可採用該等材料及結構。更通常地，有機裝置，諸如有機電晶體，可採用該等材料及結構。

術語鹵基、鹵素、烷基、環烷基、烯基、炔基、芳烷基(arylky1)、雜環基、芳基、芳族基團及雜芳基為此項技術所已知，且經定義在US 7,279,704第31-32欄中，該專利係以引用的方式併入本文中。

在一實施例中，化合物具有下式：



提供式I。

在式I化合物中，M為原子量高於40之金屬，L為第二配體，m為金屬M之最大配位數，d為L之齒合度，且n為至少1。「齒合度」意謂d在數字上表示第二配體L與金屬M形成之鍵之數目。因此，若L為單齒配體，則d為1，若L為二齒配體，則d為2，等。L可為一或多個配體，且當L表示一個以上配體時，該等配體可以相同或不同。

R₁係對各配體獨立地來選擇，且表示二、三、四、五取代或無取

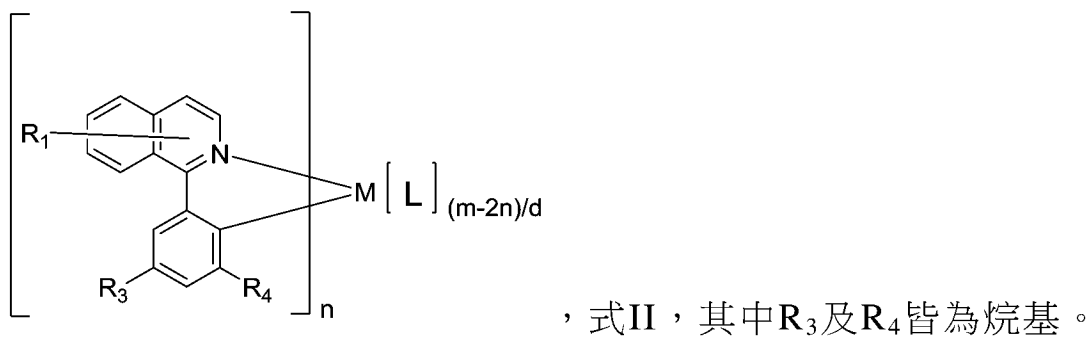
代。 R_1 中之每一者獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氖、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、鍺烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

R_1 中之至少兩者獨立地選自含有二至六個碳之烷基、矽烷基、鍺烷基、環烷基及其組合。 R_2 可以表示單、二、三、四取代或無取代，且 R_2 中之每一者獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氖、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

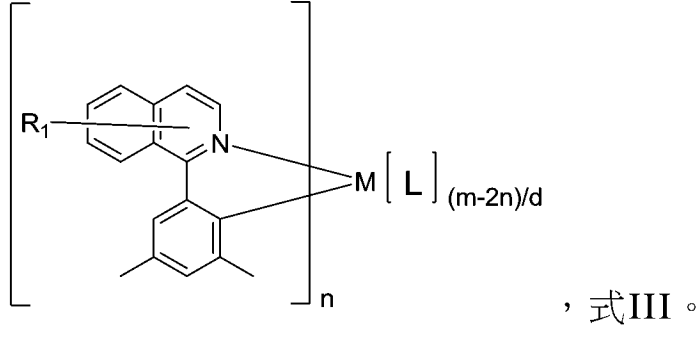
已經出乎意料地發現在式I化合物之雜環上之兩個或兩個以上位置處(即， R_1 表示至少二取代)之取代產生具有所需特性之式I化合物。該等特性使得併入了式I化合物之OLED裝置能夠具有改善之特性，如較高的效率及更長的壽命。如上所述之兩個或兩個以上位置處之取代亦產生具有降低的昇華溫度之化合物，儘管該等化合物具有未取代之或單取代之化合物高的分子量，其中單取代在雜環上。在不受理論束縛情況下，減低昇華溫度之此種降低可能為固態時分子堆砌效率降低或減小之結果，進而降低了破壞晶格所需之能量並導致昇華溫度降低。低昇華溫度有利地允許更容易地純化式I化合物以及於製造中更好之熱穩定性。

在一實施例中， R_1 表示二取代。在一實施例中， R_1 表示二烷基取代。在另一實施例中， R_1 表示矽烷基或鍺烷基取代。

在一實施例中，化合物具有下式：

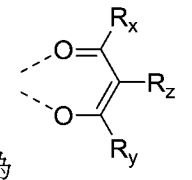


在一實施例中，化合物具有下式：



在一實施例中，R₁獨立地選自由以下各項組成之群：CH(CH₃)₂、CH₂CH(CH₃)₂、CH₂C(CH₃)₃、環戊基、環己基、乙基、三甲基矽烷基、三乙基矽烷基、三異丙基矽烷基、三甲基鍺烷基、三乙基鍺烷基以及三異丙基鍺烷基。

在一實施例中，n M為Ir。在一實施例中，n為2。在一實施例中，L

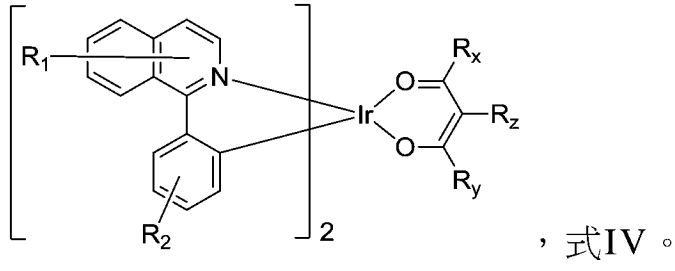
為單陰離子二齒配體。在一實施例中，L為，且R_x、R_y以及R_z各自獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氘、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

在一實施例中，R_x、R_y以及R_z獨立地選自由以下各項組成之群：烷基、氫、氘及其組合。

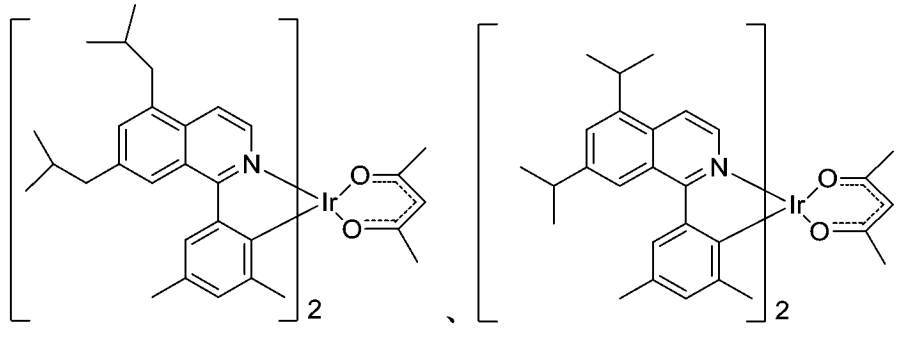
在一實施例中，R_z為氫或氘，且R_x及R_y獨立地選自由以下各項組成

之群：甲基、 $\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ 以及 $\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ 。

在一實施例中，化合物具有下式：

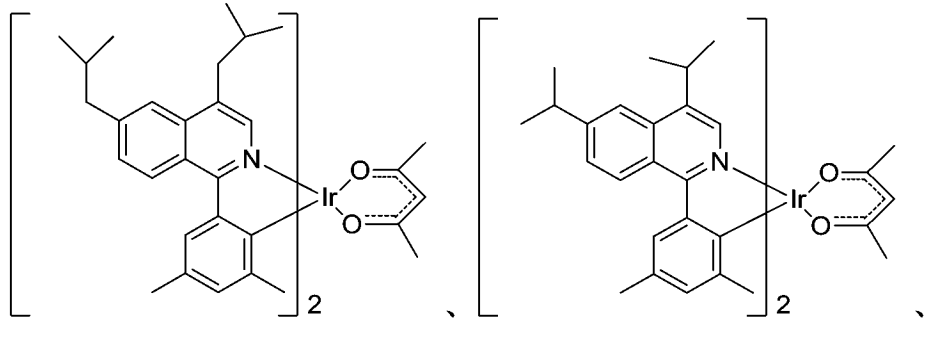


在一實施例中，化合物選自由以下各項組成之群：



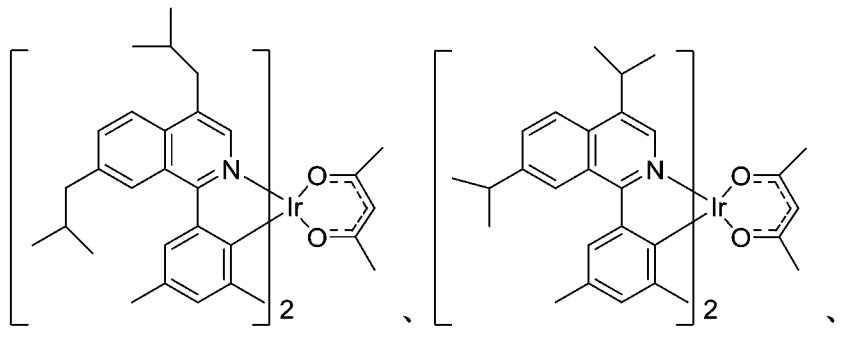
化合物1

化合物2



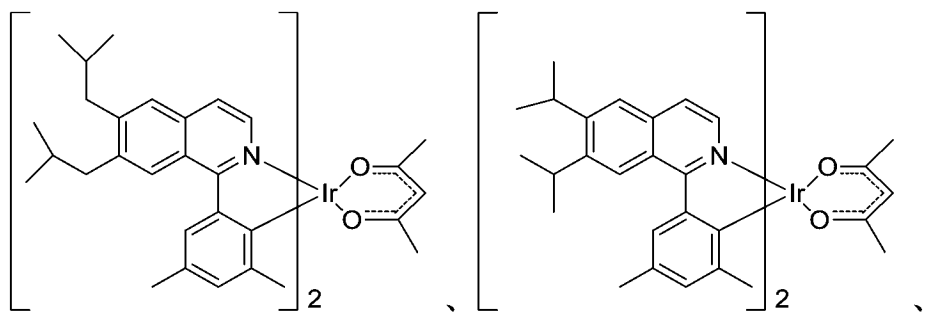
化合物3

化合物4



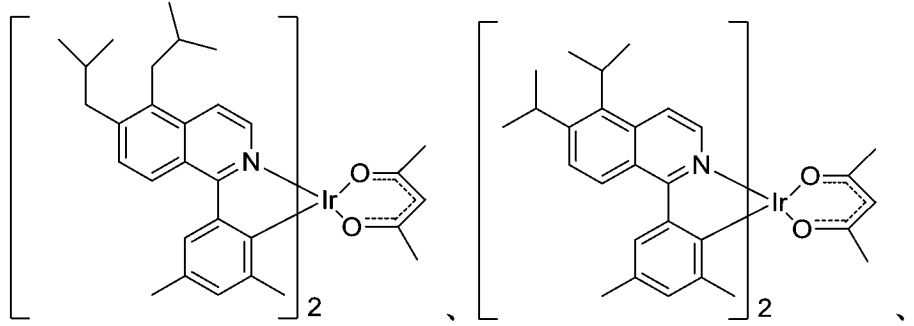
化合物5

化合物6



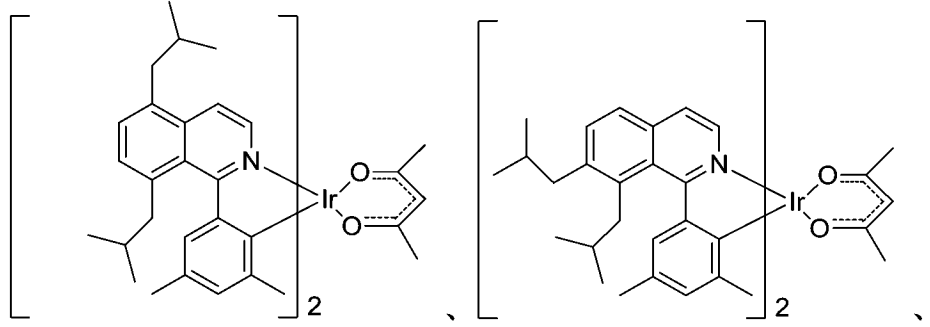
化合物7

化合物8



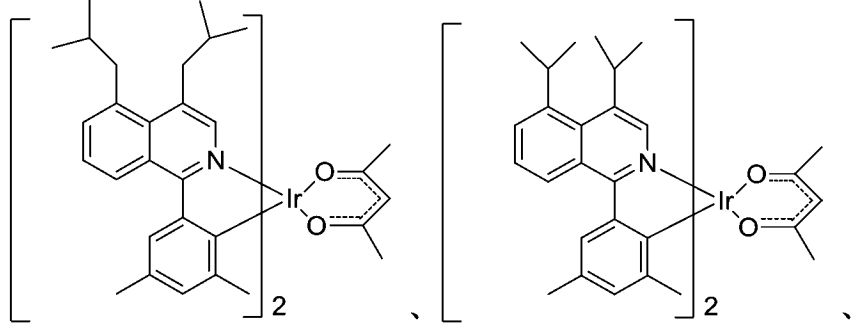
化合物9

化合物10



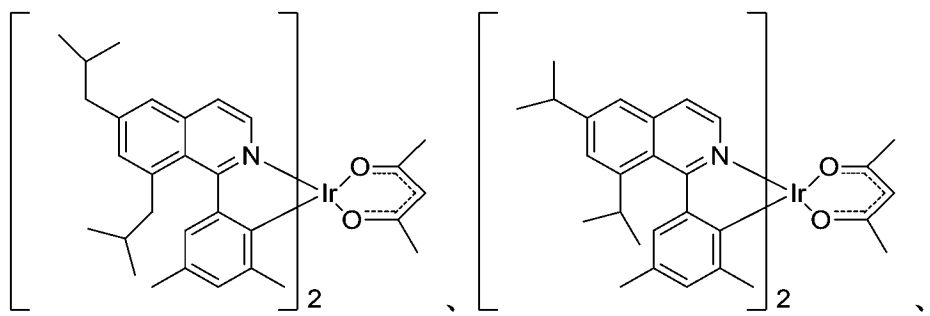
化合物11

化合物12



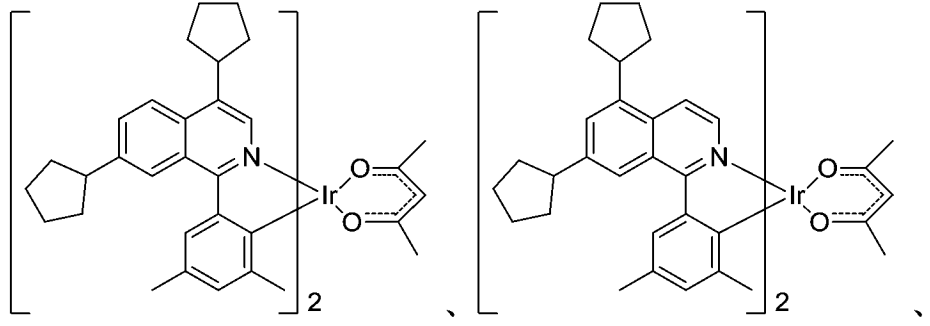
化合物13

化合物14



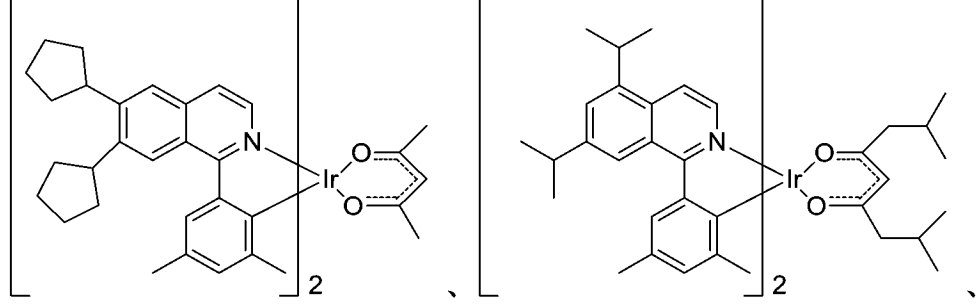
化合物15

化合物16



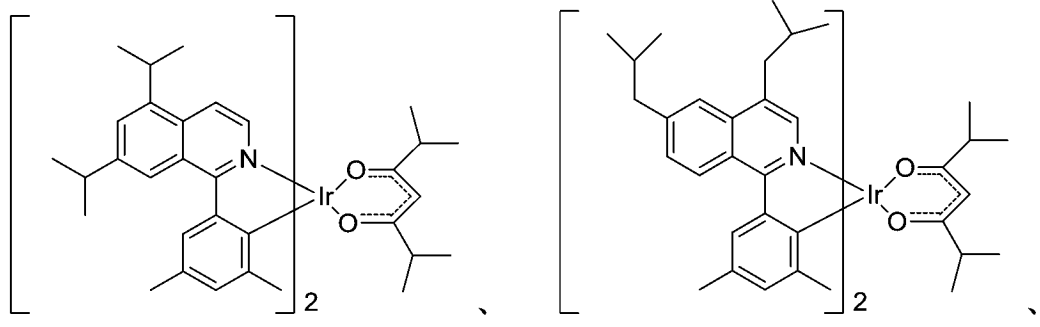
化合物17

化合物18



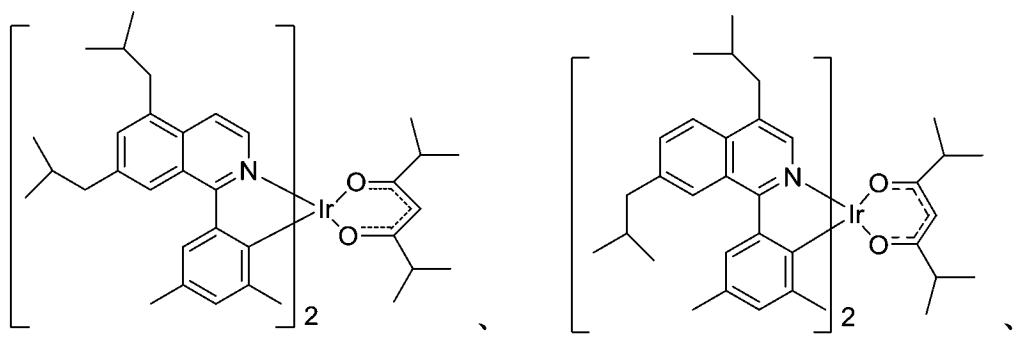
化合物19

化合物20



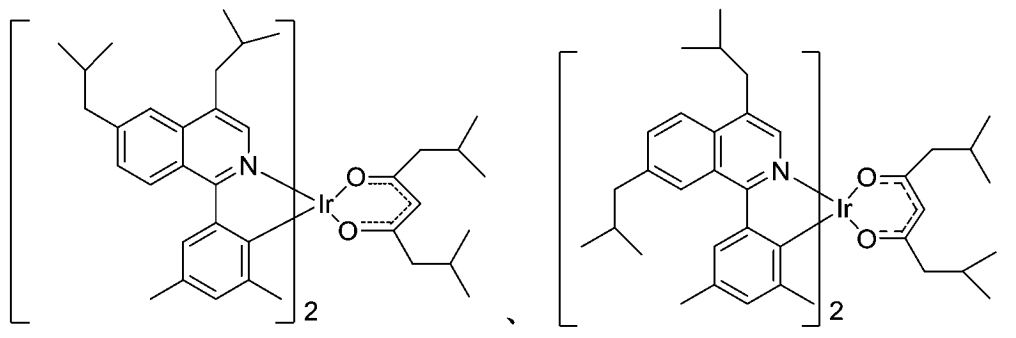
化合物21

化合物22



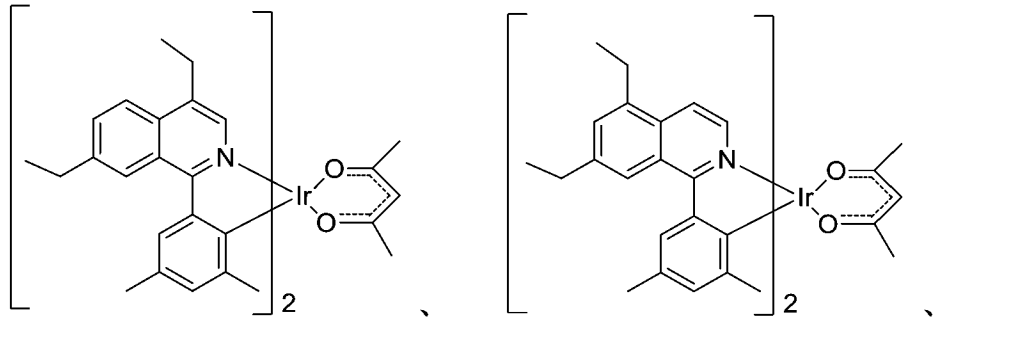
化合物23

化合物24



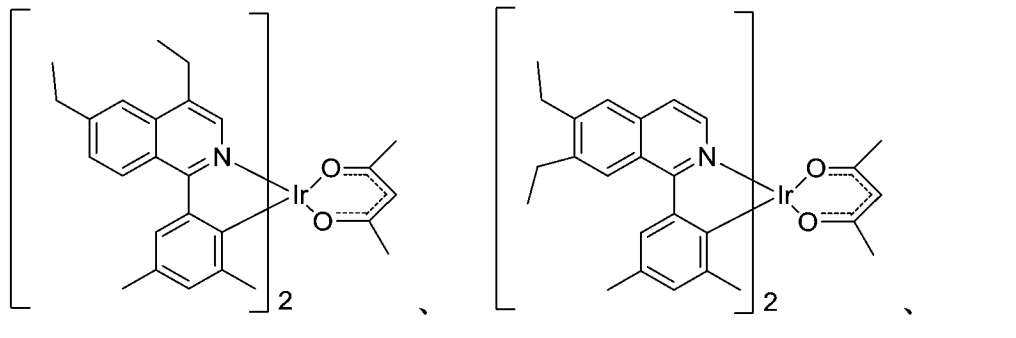
化合物25

化合物26



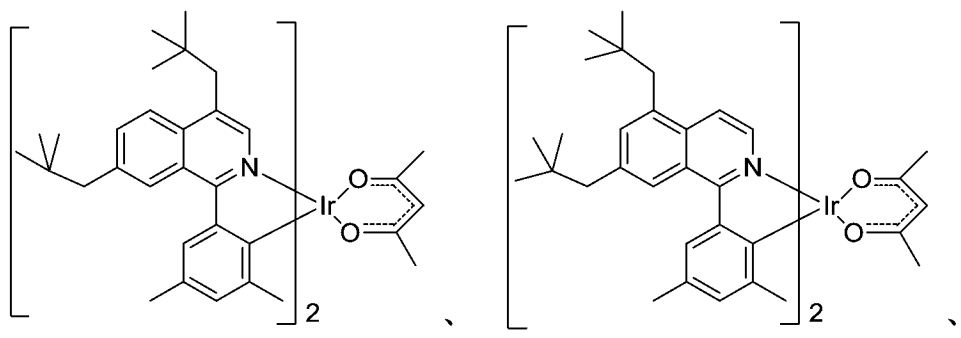
化合物27

化合物28



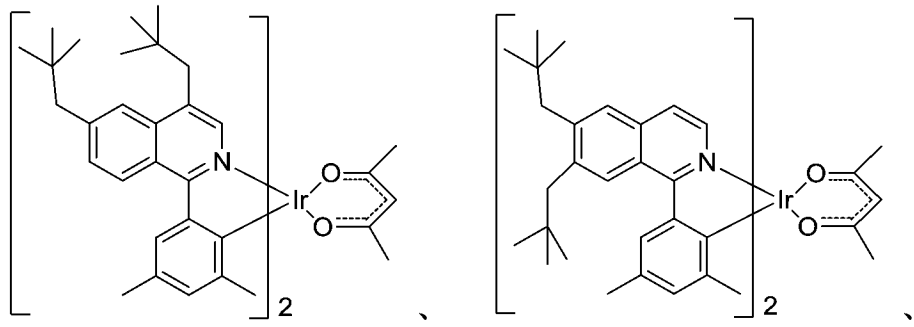
化合物29

化合物30



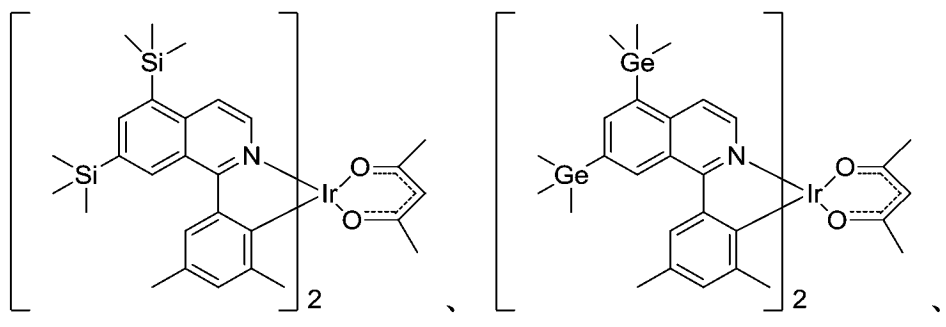
化合物31

化合物32



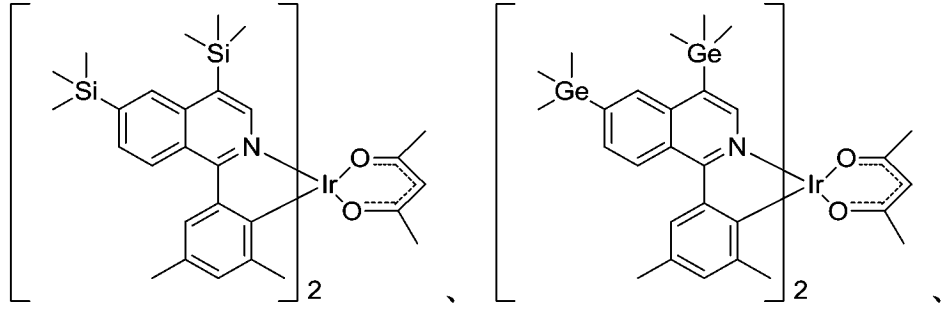
化合物33

化合物34



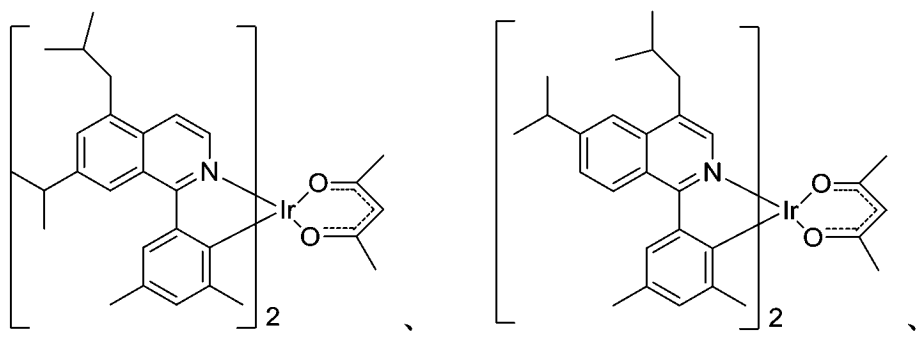
化合物35

化合物36



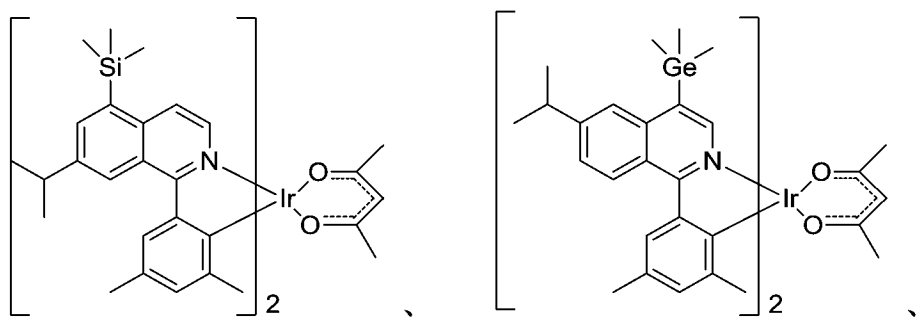
化合物37

化合物38



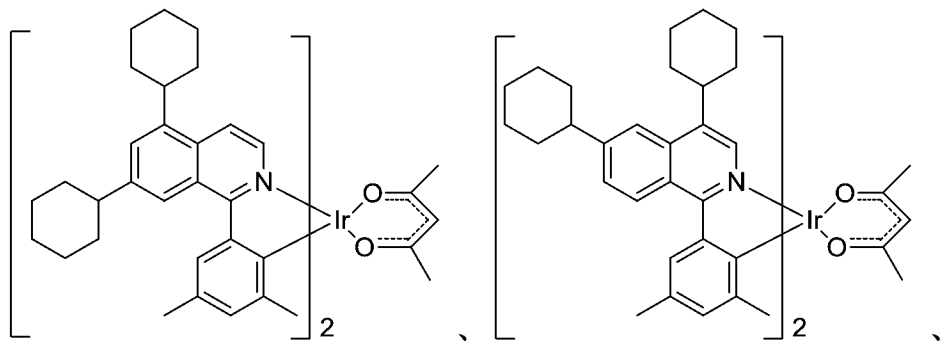
化合物39

化合物40



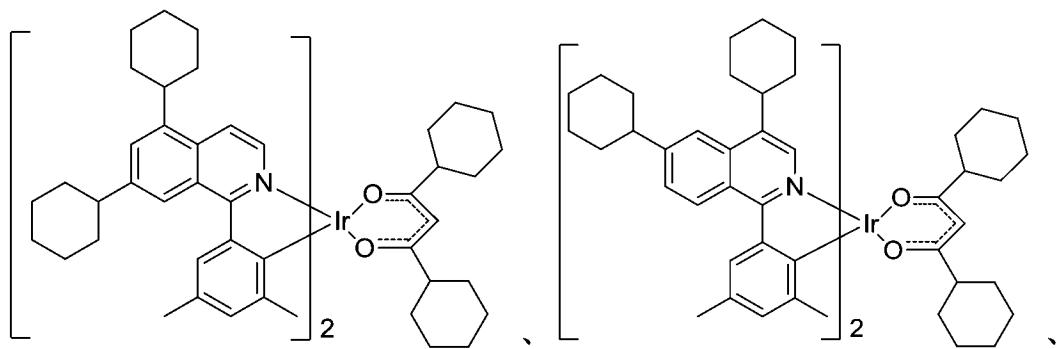
化合物41

化合物42



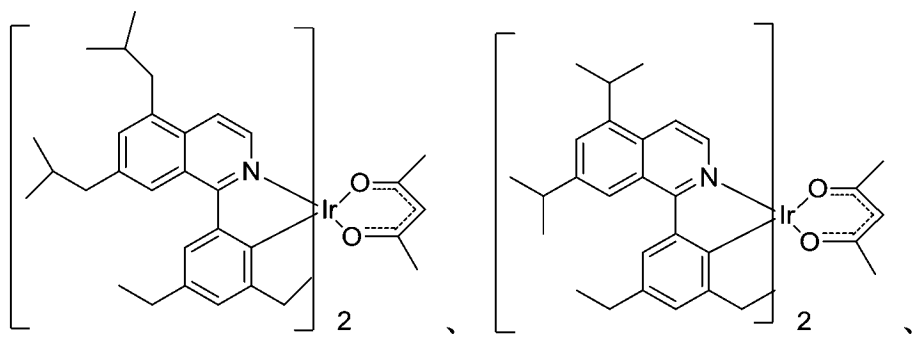
化合物43

化合物44



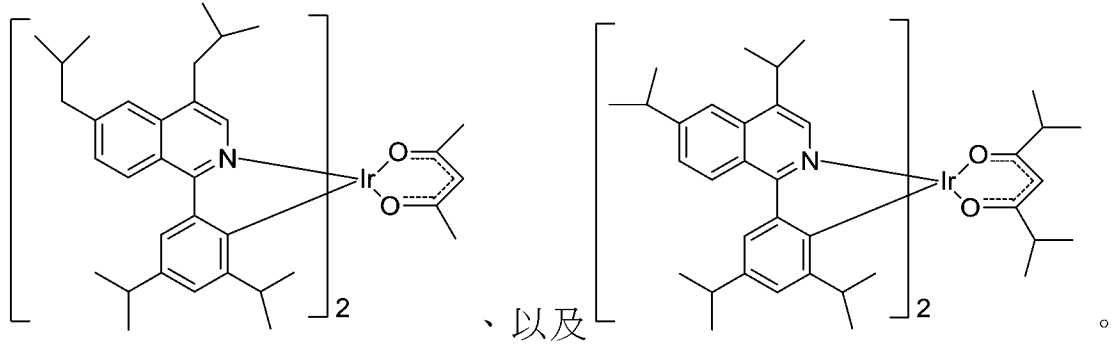
化合物45

化合物46



化合物47

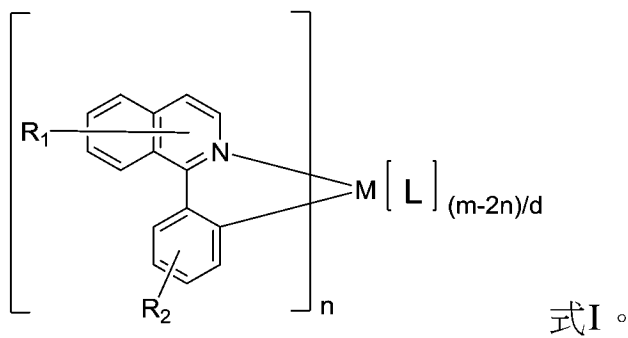
化合物48



化合物49

化合物50

在一實施例中，提供一第一裝置。該第一裝置包括一第一有機發光裝置，該第一有機發光裝置進一步包括：一陽極、一陰極以及佈置在該陽極與該陰極之間之一有機層，該有機層包括具有下式之化合物：



在式I化合物中，M為原子量高於40之金屬，L為第二配體，m為金屬M之最大配位數，d為L之齒合度，且n為至少1。R₁係對各配體獨立地來選擇，且表示二、三、四、五取代或無取代。R₁中之每一者獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氘、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、鍍烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔

作為電洞注入層(HIL)、400 Å的4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-苯基胺基]聯苯(NPD)作為電洞傳輸層(HTL)、摻雜有BAIq的300 Å之式I化合物作為主體，且4 wt%至12 wt%的含銥磷光化合物作為發射層(EML)，450或550 Å的Alq₃ (三-8-羥基喹啉鋁)作為電子傳輸層(ETL)。具有化合物B及C之比較實例係類似於裝置實例來製作，例外為化合物B及C係用作EML中之發射極。

裝置結果及來自彼等裝置之數據總結於表1、表2及表3中。如本文所使用，化合物A、B及C具有下列結構：

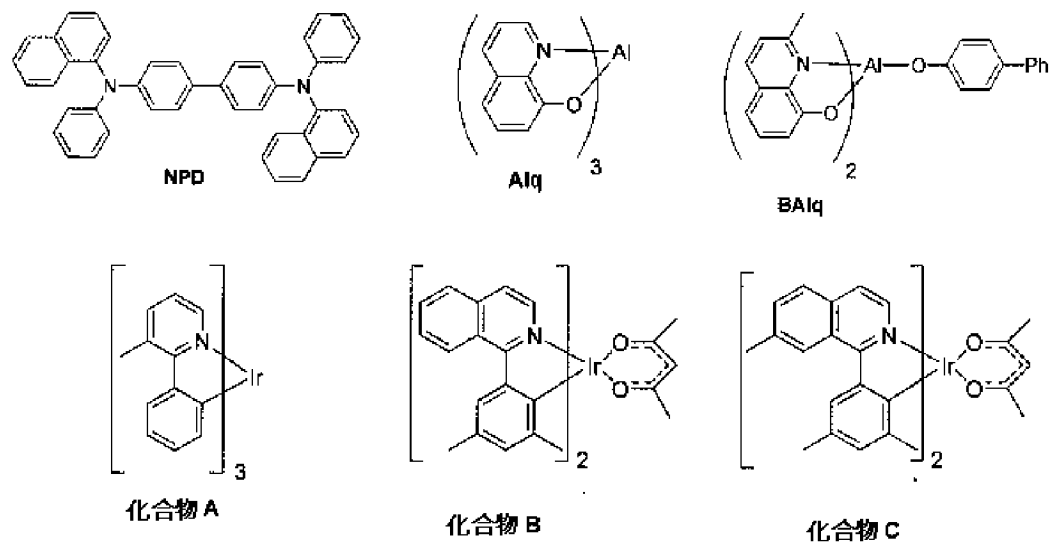


表1：具有本發明化合物和比較化合物之裝置結構

實例	HIL	HTL	EML (300 Å,摻雜百分比(%))		BL	ETL
比較實例1	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物B 6 %	無	Alq ₃ 550Å
比較實例2	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物B 9 %	無	Alq ₃ 550Å
比較實例3	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物B 12 %	無	Alq ₃ 550Å
比較實例4	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物C 6 %	無	Alq ₃ 550Å
比較實例5	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物C 9 %	無	Alq ₃ 550Å

比較實例6	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物C 12 %	無	Alq 550Å
實例1	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物1 4 %	無	Alq 550Å
實例2	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物1 6 %	無	Alq 550Å
實例3	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物1 8 %	無	Alq 550Å
實例4	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物1 6 %	BAIq 100 Å	Alq 450Å
實例5	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物2 5 %	無	Alq 550Å
實例6	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物2 7 %	無	Alq 550Å
實例7	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物2 10 %	無	Alq 550Å
實例8	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物2 7 %	BAIq 100 Å	Alq 450Å
實例9	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物3 5 %	無	Alq 550Å
實例10	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物3 7 %	無	Alq 550Å
實例11	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物3 10 %	無	Alq 550Å
實例12	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物3 7 %	BAIq 100 Å	Alq 450Å
實例13	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物22 4 %	無	Alq 550Å
實例14	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物22 6 %	無	Alq 550Å
實例15	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物22 8 %	無	Alq 550Å
實例16	化合物A 100 Å	NPD 400Å	BAIq	化合物22 6 %	BAIq 100 Å	Alq 450Å

表2：VTE裝置結果

	x	y	$\lambda_{\text{最大}}$ (nm)	FWHM (nm)	電壓 (V)	LE (Cd/A)	EQE (%)	PE (lm/W)	LT80 % (h)
比較 實例1 化合物B	0.693	0.304	635	63	10	10.8	18.3	3.4	606
比較 實例2 化合物B	0.695	0.303	637	66	9.9	10.5	18.5	3.3	799
比較 實例3 化合物B	0.693	0.304	637	66	9.5	10.0	17.7	3.3	948
比較 實例4 化合物C	0.690	0.306	633	63	10.3	12.2	19.1	3.7	650
比較 實例5 化合物C	0.692	0.306	635	65	9.4	11.8	19.3	3.9	475
比較 實例6 化合物C	0.691	0.306	635	66	8.9	11.5	19.0	4.1	700
實例1 化合物1	0.687	0.309	628	52	10.1	12.5	17.8	3.9	178
實例2 化合物1	0.689	0.307	630	56	9.9	12.6	18.7	4.0	174
實例3 化合物1	0.691	0.306	632	56	9.5	12.4	19.0	4.1	171
實例4 化合物1	0.690	0.307	630	56	10.9	12.5	18.6	3.6	160
實例5 化合物2	0.687	0.311	630	58	9.5	13.8	19.6	4.6	350
實例6 化合物2	0.688	0.310	630	60	9.5	13.8	19.9	4.5	360
實例7 化合物2	0.688	0.310	632	62	8.8	13.1	19.4	4.7	400

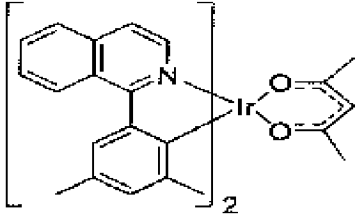
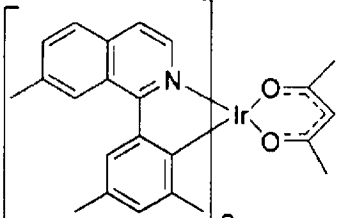
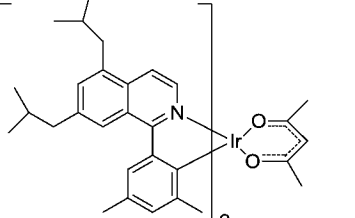
實例8 化合物2	0.687	0.309	630	58	10.5	12.9	18.7	3.9	360
實例9 化合物3	0.685	0.313	626	58	9.5	14.8	19.8	4.9	232
實例10 化合物3	0.687	0.311	628	62	8.9	14.5	20.5	5.1	260
實例11 化合物3	0.688	0.310	630	64	8.1	14.0	20.3	5.4	235
實例12 化合物3	0.687	0.311	628	60	9.7	14.5	20.2	4.7	280
實例13 化合物22	0.684	0.313	626	48	9.3	14.8	18.8	5.0	192
實例14 化合物22	0.686	0.311	626	52	8.8	14.3	19.1	5.1	170
實例15 化合物22	0.686	0.311	628	52	8.2	14.2	19.2	5.4	122
實例16 化合物22	0.686	0.312	626	50	9.3	14.8	19.6	5.0	210

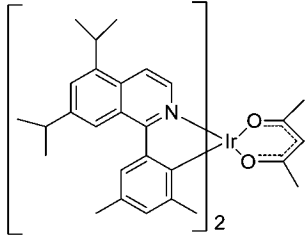
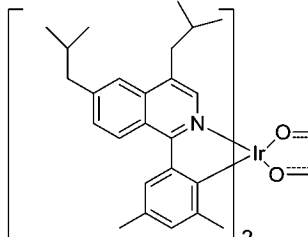
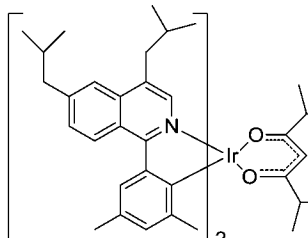
表2為裝置數據之總結。於1000尼特下量測發光效率(LE)、外量子效率(EQE)及功率效率(PE)，而壽命(LT_{80%})經定義為裝置於40 mA/cm²之恆定電流密度下，衰減至其初始亮度的80%所需要之時間。

自表2可見，處於三種不同摻雜濃度下(無電洞阻擋層)之化合物1、2、3以及22 (其為式I化合物)之EQE、LE以及PE全部高於比較化合物B及比較化合物C之彼等EQE、LE以及PE。例如，當裝置具有相同之6%發射極摻雜濃度並無電洞阻擋層時，化合物22分別具有19.1%之EQE，14.3 Cd/A之LE以及5.1 lm/W之PE。此與比較化合物B及比較化合物C形成對比，該比較化合物B及比較化合物C分別具有18.3%及19.1%之EQE，10.8 Cd/A及12.2 Cd/A之LE以及3.4 lm/W及3.7 lm/W之PE。裝置結果令人驚訝地表明，二烷基取代之化合物1、2、3以及22比比比較化合物B及單取代

化合物C更有效。自表2亦可以看出，化合物1、2、3以及22在不同裝置結構下之FWHM（半峰全寬）值在48 nm-64 nm之範圍內，此比化合物B及化合物C之FWHM(在63 nm-66 nm之範圍內)明顯更窄。較小FWHM值在顯示器應用中常常是合乎需要的。因此，利用在化合物所含之雜環上為至少二取代之式I化合物可以改善裝置性能，因為該等化合物具有高的EQE、LE、PE值及低之FWHM值。

表3：昇華溫度之比較

化合物	昇華溫度(℃)	相對於化合物B之溫差
 化合物 B	210	
 化合物C	218	-8
 化合物1	197	13

 化合物2	202	8
 化合物3	204	6
 化合物22	194	16

可見，式I化合物之雜芳族環上的取代可降低錯合物之昇華溫度，如表3所示。意外地發現，二取代之式I化合物具有比未取代或單取代之化合物低的昇華溫度。例如，化合物22具有比較化合物B顯著低之昇華溫度(194℃相比210℃)，儘管化合物22具有比較化合物B高的分子量。

與其他材料組合

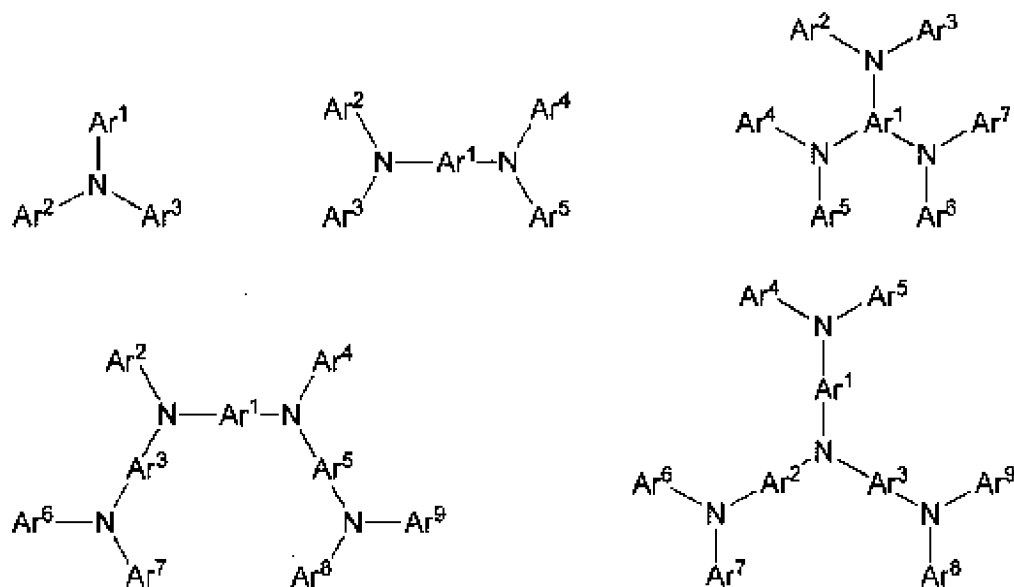
本文描述成可用於有機發光裝置中之特定層的材料可與存在於裝置中之廣泛多種其他材料組合使用。例如，本文揭示之發射摻雜劑可聯合廣泛多種主體、傳輸層、阻擋層、注入層、電極及可能存在之其他層使用。

以下描述或提及的材料為可用於與本文揭示之化合物組合的材料之非限制性實例，且熟習此項技術者可容易地查閱文獻來鑒別可用於組合之其他材料。

HIL/HTL：

在本發明中使用之電洞注入/傳輸材料不特定限制，且可使用任何化合物，只要該化合物典型地用作電洞注入/傳輸材料。材料之實例包括，但不限於：酞菁或卟啉衍生物；芳族胺衍生物；吡啶并呋喃衍生物；含有氟代烴之聚合物；具有導電型摻雜劑之聚合物；導電聚合物，諸如 PEDOT/PSS；由化合物諸如膦酸及矽烷(silane)衍生物衍生之自組裝單體；金屬氧化物衍生物，諸如 MoO_x ；p型半導體有機化合物，諸如 1,4,5,8,9,12-六氮雜聯伸三苯六膦；金屬錯合物，及可交聯之化合物。

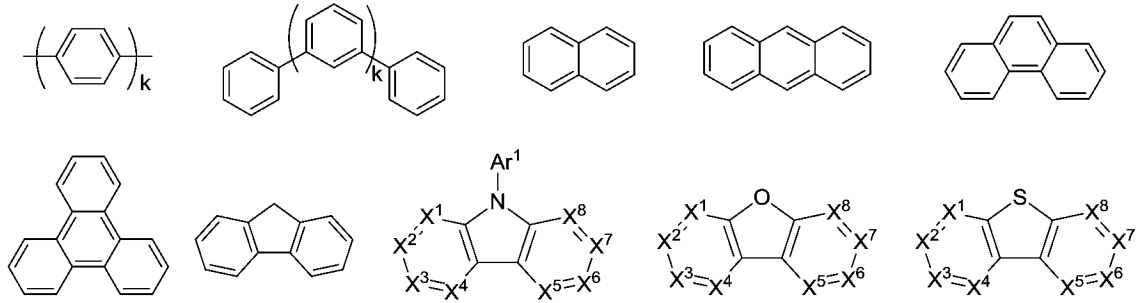
在HIL或HTL中使用之芳族胺衍生物之實例包括，但不限於以下通用結構：



Ar^1 至 Ar^9 各自選自由以下各項組成之群：芳族烴環狀化合物，諸如苯、聯苯基、三苯基、聯伸三苯、萘、蒽、非那烯、菲、芴、芘、蒹、芘、蒹；各自選自由以下各項組成之群：芳族雜環化合物，諸如二苯并噻

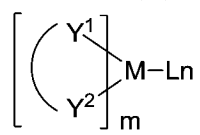
吩、二苯并呋喃、二苯并硒吩、呋喃、噻吩、苯并呋喃、苯并噻吩、苯并
硒吩、呋唑、吡啶并呋唑、吡啶基吡啶、吡咯并吡啶、吡唑、咪唑、三
唑、噁唑、噻唑、噁二唑、噁三唑、二噁唑、噻二唑、吡啶、噻嗪、噻
啶、吡嗪、三嗪、噁嗪、噁噻嗪、噁二嗪、吡啶、苯并咪唑、吡唑、吡啶
噁嗪、苯并噁唑、苯并異噁唑、苯并噻唑、喹啉、異喹啉、吡啶、喹啉
噁嗪、喹諾啉、噻啶、酞嗪、蝶啶、咕啉、吡啶、吩嗪、吩噻嗪、吩噁嗪、
苯并呋喃并吡啶、呋喃并二吡啶(furodipyridine)、苯并噻吩并吡啶、噻吩
并二吡啶、苯并硒吩并吡啶(benzoselenophenopyridine)，及硒吩并二吡
啶；且各自選自由以下各項組成之群：2至10個環狀結構單元，其為選自
芳族烴環狀基團及芳族雜環基團之相同類型或不同類型的基團，且彼此直
接或經由氧原子、氮原子、硫原子、矽原子、磷原子、硼原子、鏈結構單
元及脂族環狀基團中之至少一者鍵合。其中各Ar進一步經選自由以下各項
組成之群的取代基取代：氫、氖、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷
基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳
基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺
醯基、膦基，及其組合。

在一態樣中，Ar¹至Ar⁹獨立地選自由以下各項組成之群：



k為1至20之整數；X¹至X⁸為C(包括CH)或N；Ar¹具有與以上所定義
相同之基團。

HIL或HTL中使用之金屬錯合物的實例包括(但不限於)以下通式：



M為金屬，原子量大於40；(Y¹-Y²)為二齒配體，Y¹及Y²獨立地選自C、N、O、P及S；L為輔助配體；m為1至可附接至金屬之配體最大數的整數值；且m+n為可附接至金屬之配體的最大數。

在一態樣中，(Y¹-Y²)為2-苯基吡啶衍生物。

在另一態樣中，(Y¹-Y²)為碳烯配體。

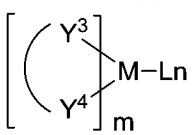
在另一態樣中，M選自Ir、Pt、Os及Zn。

在另一態樣中，金屬錯合物在溶液中相對於Fc⁺/Fc電對之最小氧化電勢為小於約0.6 V。

主體：

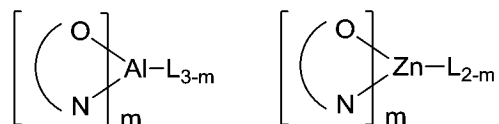
本發明之有機EL裝置的發光層較佳含有至少一種金屬錯合物作為發光材料，且可含有使用該金屬錯合物作為摻雜劑材料之主體材料。主體材料之實例不特定限制，且可使用任何金屬錯合物或有機化合物，只要主體之三線態能量大於摻雜劑之三線態能量。儘管下表將主體材料歸類為較佳用於發射各種顏色之裝置，但可與任何摻雜劑一起使用任何主體材料，只要滿足三線態標準即可。

用作主體之金屬錯合物的實例較佳具有以下通式：



M為金屬；(Y³-Y⁴)為二齒配體，Y³及Y⁴獨立地選自C、N、O、P及S；L為輔助配體；m為1至可附接至金屬之配體最大數的整數值；且m+n為可附接至金屬之配體的最大數。

在一態樣中，金屬錯合物為：



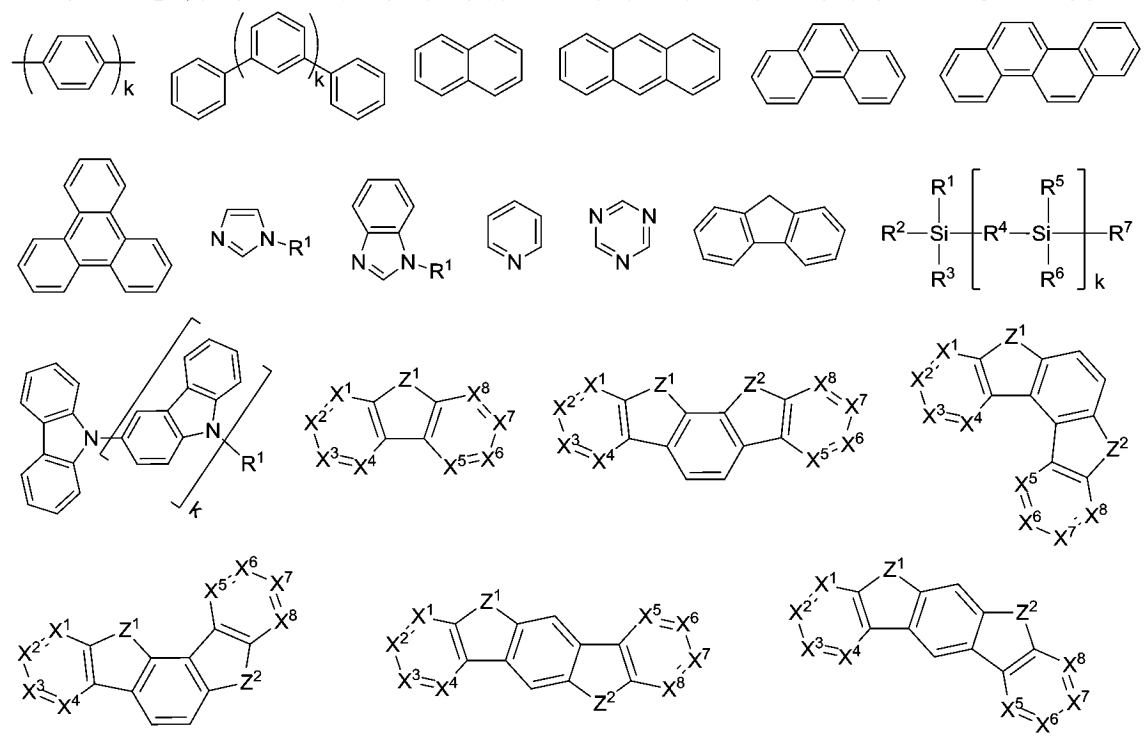
(O-N)為二齒配體，使金屬配位至原子O及N。

在另一熊樣中，M選自Ir及Pt。

在另一態樣中， (Y^3-Y^4) 為碳烯配體。

用作主體之有機化合物的實例選自由以下各項組成之群：芳族烴環狀化合物，諸如苯、聯苯基、三苯基、聯伸三苯、萘、蒽、非那烯、菲、蒾、芘、蒹、芑、萵、萸；選自由以下各項組成之群：芳族雜環化合物，諸如二苯并噻吩、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、呋唑、吡啶并呋唑、吡啶基吡啶、吡咯并吡啶、吡唑、咪唑、三唑、噁唑、噻唑、噁二唑、噁三唑、二噁唑、噻二唑、吡啶、噻嗪、嘧啶、吡嗪、三嗪、噁嗪、噁噻嗪、噁二嗪、吡啶、苯并咪唑、吡啶、吡啶噁嗪、苯并噁唑、苯并異噁唑、苯并噻唑、喹啉、異喹啉、吡啶、喹啉、喹諾啉、喹啶、酞嗪、蝶啶、咕啉、吡啶、吩嗪、吩噻嗪、吩噁嗪、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、苯并硒吩并吡啶及硒吩并二吡啶；且選自由以下各項組成之群：2至10個環狀結構單元，其為選自芳族烴環狀基團及芳族雜環基團之相同類型或不同類型的基團，且彼此直接或經由氧原子、氮原子、硫原子、矽原子、磷原子、硼原子、鏈結構單元及脂肪族環狀基團中之至少一者鍵合。其中各基團進一步經選自由以下各項組成之群的取代基取代：氫、氘、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腓、異腓、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

在一態樣中，主體化合物分子中含有以下基團中之至少一者：



R^1 至 R^7 獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氖、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合，當 R^1 至 R^7 為芳基或雜芳基時，其具有與以上提及之Ar類似的定義。

k 為0至20之整數。

X^1 至 X^8 選自C(包括CH)或N。

Z^1 及 Z^2 選自 NR^1 、O，或S。

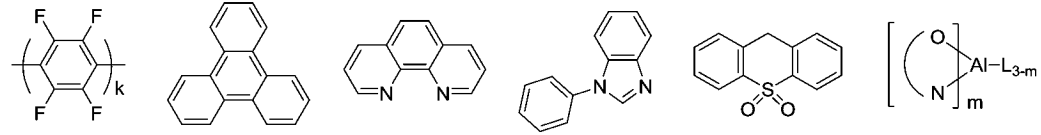
HBL：

電洞阻擋層(HBL)可用於降低離開發射層之電洞及/或激子之數量。裝置中此阻擋層之存在使得效率比缺少阻擋層之類似裝置明顯較高。阻擋層亦可用於將發射限制在OLED之所需區域內。

在一態樣中，HBL使用之化合物含有以上描述之用作主體之相同的

分子或相同的官能團。

在另一態樣中，HBL使用之化合物分子中含有以下基團中之至少一者：

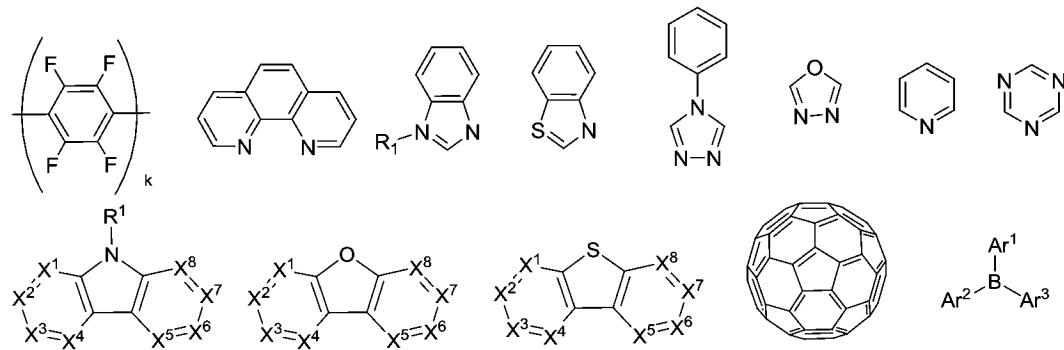


k為0至20之整數；L為輔助配體，m為1至3之整數。

ETL：

電子傳輸層(ETL)可包括能夠傳輸電子之材料。電子傳輸層可為本征的(未摻雜的)，或摻雜的。摻雜可用於加強導電性。ETL材料之實例不特定限制，且可使用任何金屬錯合物或有機化合物，只要其典型地用於傳輸電子。

在一態樣中，ETL使用之化合物分子中含有以下基團中之至少一者：



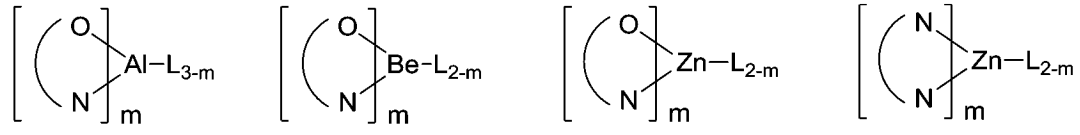
R¹選自由以下各項組成之群：氫、氖、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基，及其組合，當R¹為芳基或雜芳基時，其具有與以上提及之Ar類似的定義。

Ar¹至Ar³具有與以上提及之Ar類似的定義。

k為0至20之整數。

X¹至X⁸選自C (包括CH)或N。

在另一態樣中，ETL中使用之金屬錯合物含有(但不限於)以下通式：

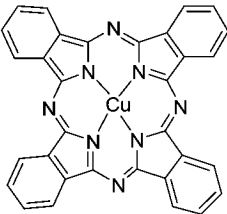
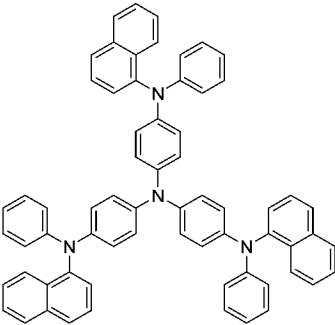
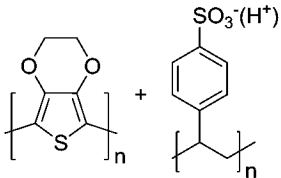
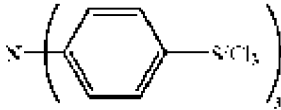
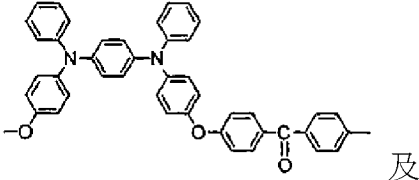


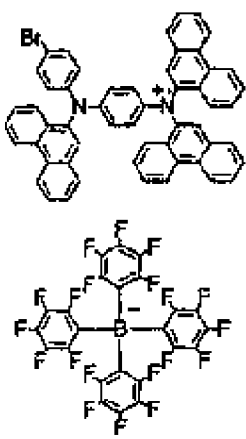
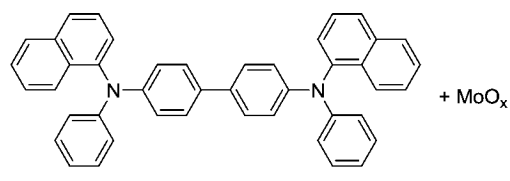
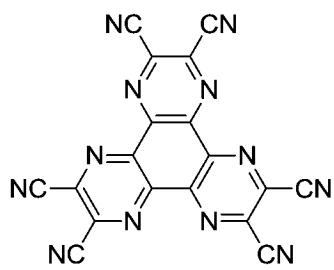
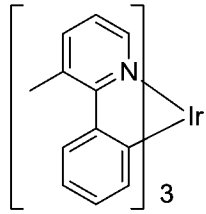
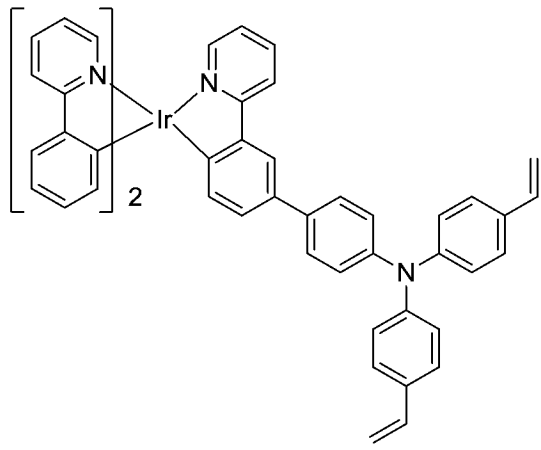
(O-N)或(N-N)為二齒配體，使金屬配位至原子O、N或N、N；L為輔助配體；m為1至可附接至金屬之配體之最大數的整數值。

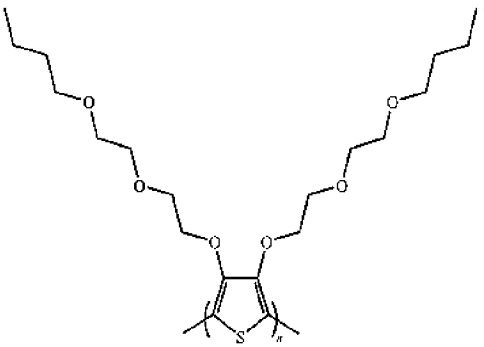
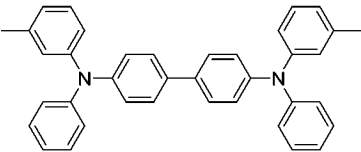
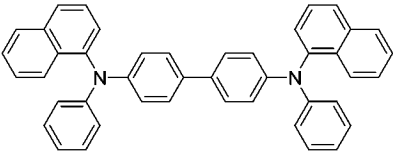
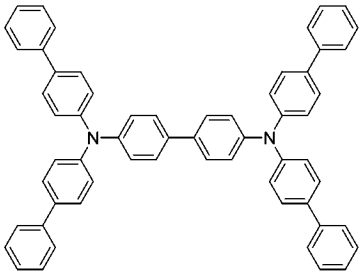
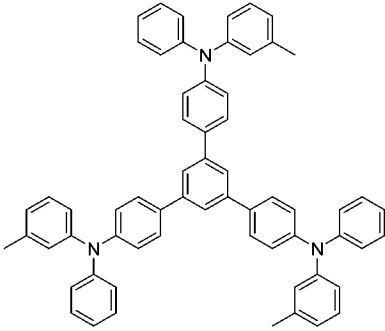
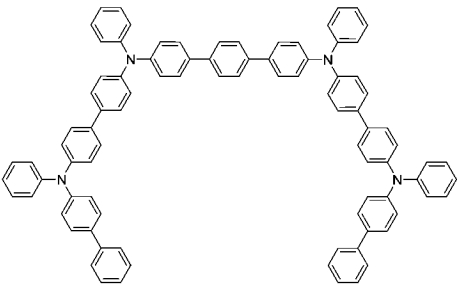
在任何以上提及之用於OLED裝置的各層中之化合物中，氫原子可經部分或完全氙化。

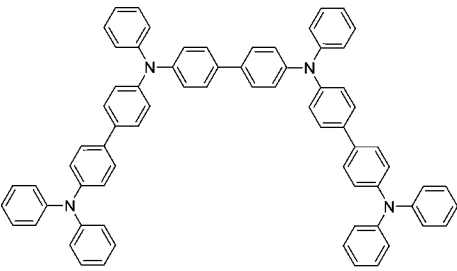
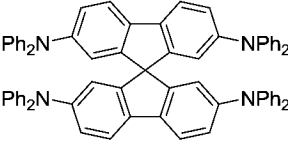
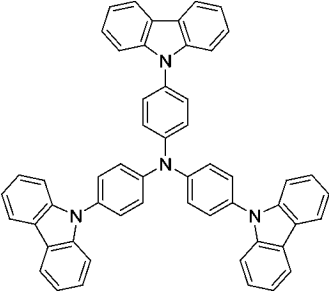
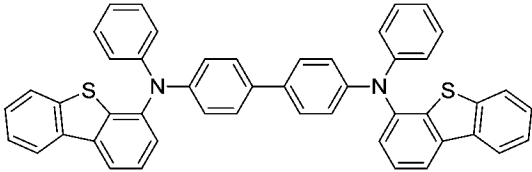
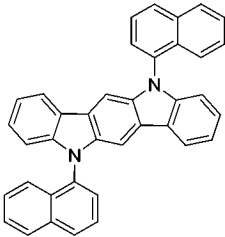
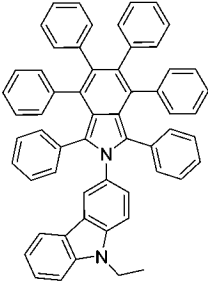
除本文揭示之材料之外，及/或與本文揭示之材料組合，亦可在OLED中使用許多電洞注入材料、電洞傳輸材料、主體材料、摻雜材料、激子/電洞阻擋層材料、電子傳輸及電子注入材料。可在OLED中與本文揭示之材料組合使用的材料之非限制性實例經列在下表4中。表4列出材料之非限制性類別，各類別的化合物之非限制性實例，及揭示所述材料之參考文獻。

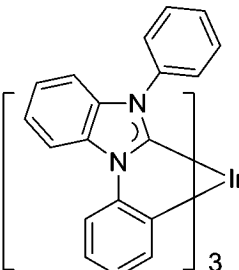
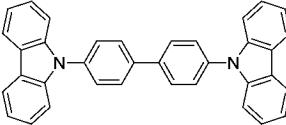
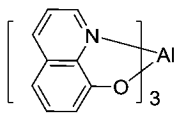
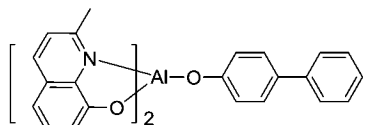
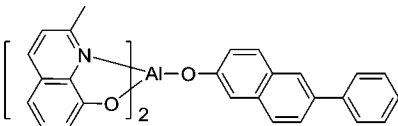
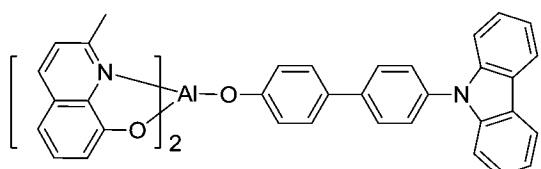
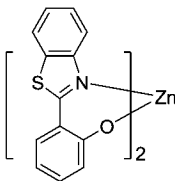
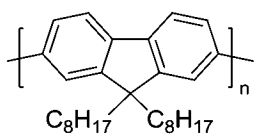
表4

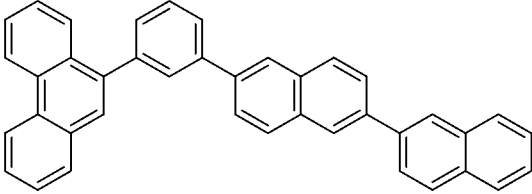
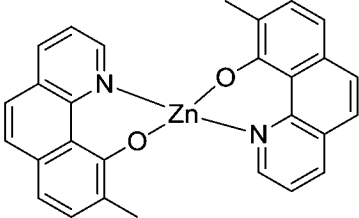
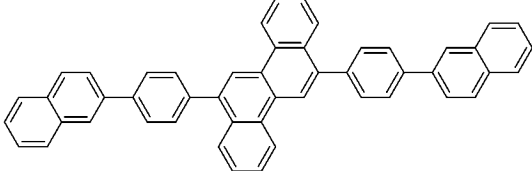
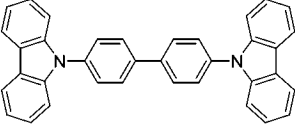
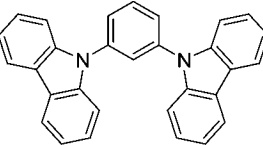
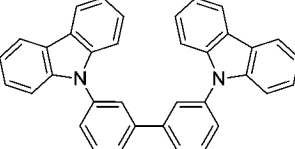
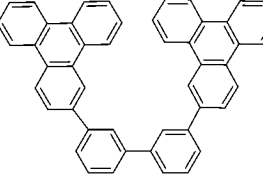
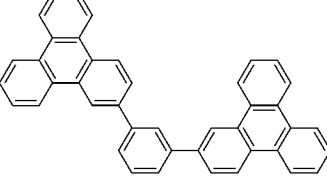
材料	材料實例	出版物
電洞注入材料		
酞菁及卟啉化合物		Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)
星型放射三芳基胺		J. Lumin. 72-74, 985 (1997)
CF _x 氟代烴聚合物	$\left[\text{CH}_x\text{F}_y \right]_n$	Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)
導電聚合物(例如，PEDOT:PSS、聚苯胺、聚噻吩)		Synth. Met. 87, 171 (1997) WO 2007002683
膦酸及矽烷 (sliane) SAMs		US 20030162053
三芳基胺或聚噻吩聚合物與導電性摻雜劑	 及	EP 1725079A1

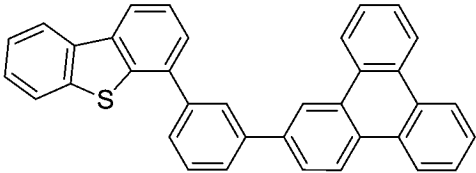
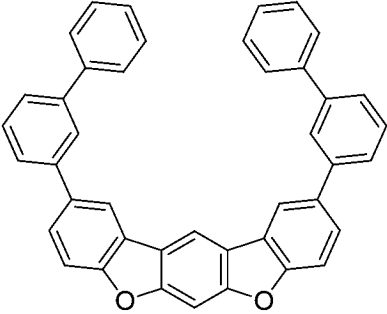
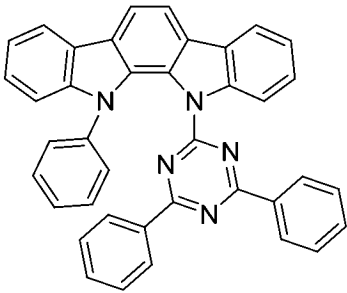
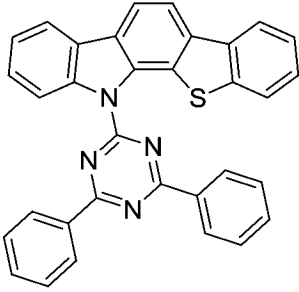
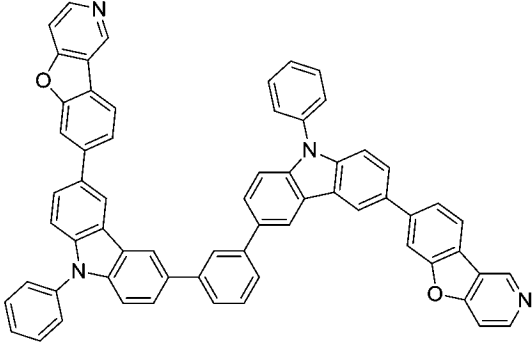
		
有機化合物與導電性無機化合物，諸如鉬及鎢氧化物		US 20050123751 SID Symposium Digest, 37, 923 (2006) WO 2009018009
n型半導體有機錯合物		US 20020158242
金屬有機金屬錯合物		US 20060240279
可交聯化合物		US 20080220265

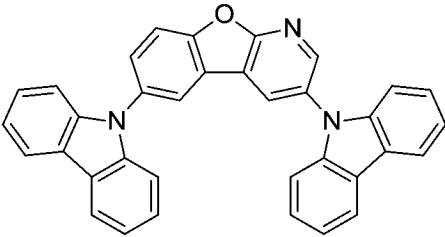
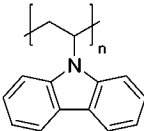
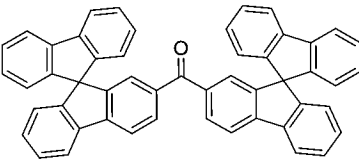
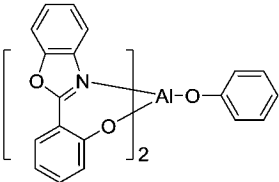
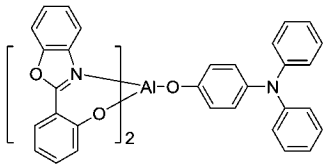
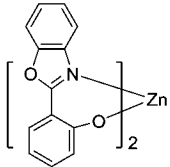
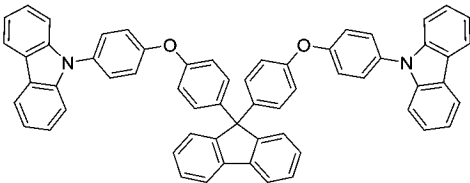
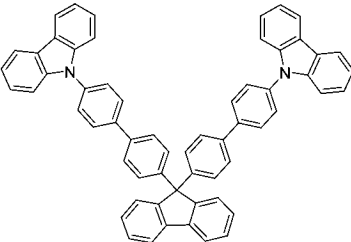
聚噻吩基聚合物及共聚物		WO 2011075644 EP 2350216
電洞傳輸材料		
三芳基胺 (例如，TPD、 α -NPD)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)
		US 5061569
		EP 650955
		J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)

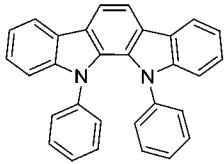
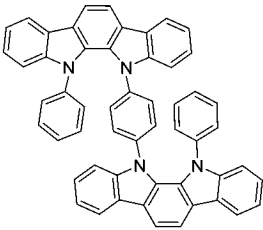
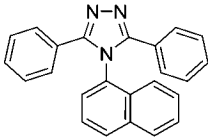
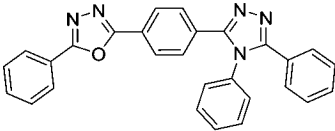
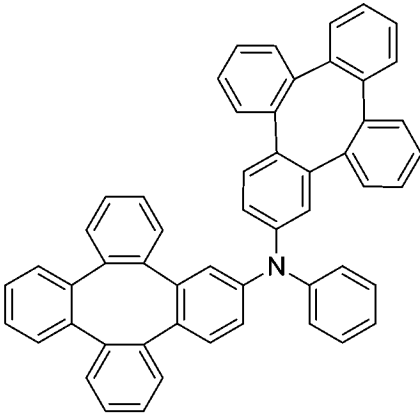
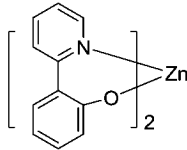
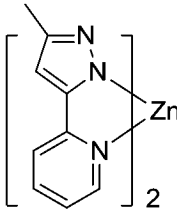
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
螺萘核心上之三芳基胺		Synth. Met. 91, 209 (1997)
芳基胺咔唑化合物		Adv. Mater. 6, 677 (1994), US 20080124572
三芳基胺與(二)苯并噻吩/ (二)苯并呋喃		US 20070278938, US 20080106190 US 20110163302
吡啶并咔唑		Synth. Met. 111, 421 (2000)
異吡啶化合物		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)

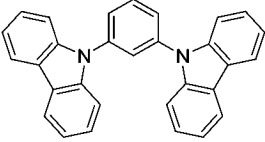
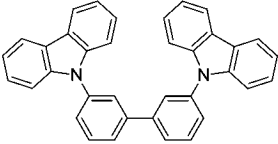
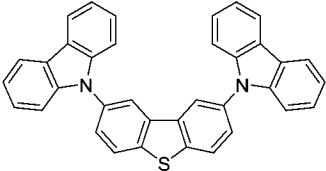
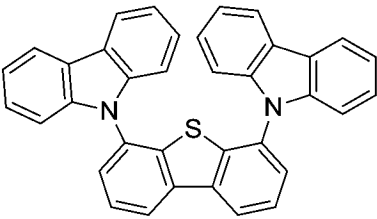
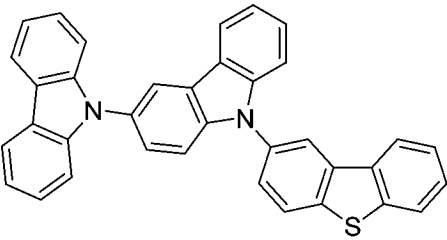
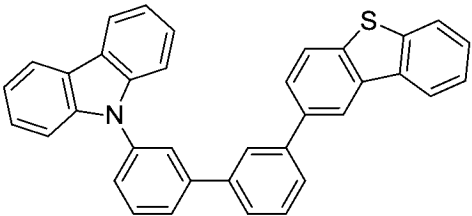
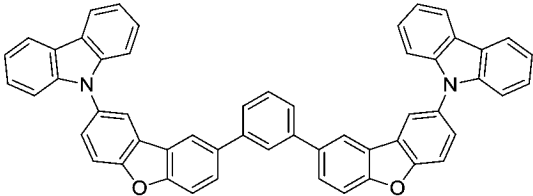
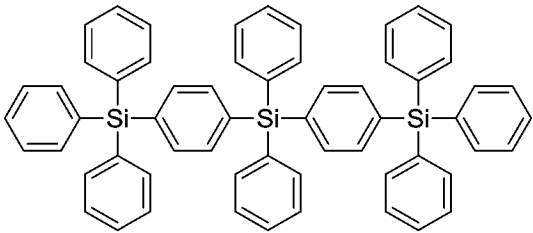
金屬碳烯錯合物		US 20080018221
磷光OLED主體材料		
紅色主體		
芳基咔唑		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
金屬8-羥基喹啉鹽 (例如，Alq ₃ 、BAIq)		Nature 395, 151 (1998)
		US 20060202194
		WO 2005014551
		WO 2006072002
金屬苯氧基苯并噻唑化合物		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
接合寡聚物及聚合物(例如，聚蒽)		Org. Electron. 1, 15 (2000)

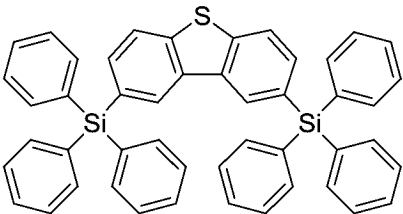
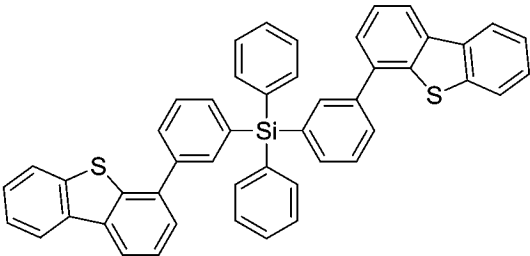
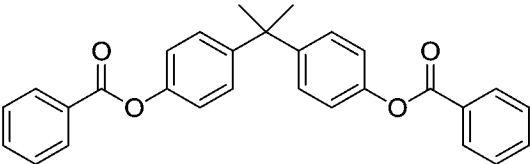
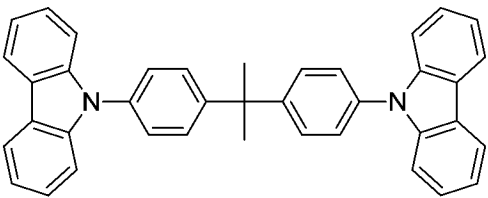
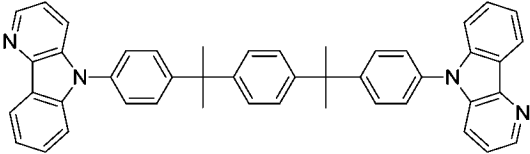
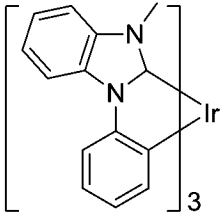
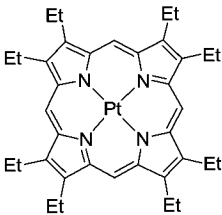
芳族稠合環		WO 2009066779, WO 2009066778, WO 2009063833, US 20090045731, US 20090045730, WO 2009008311, US 20090008605, US 20090009065
鋅錯合物		WO 2010056066
蒽基化合物		WO 2011086863
綠色主體		
芳基吡啶		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US 20030175553
		WO 2001039234
芳基聯伸三苯化合物		US 20060280965
		US 20060280965

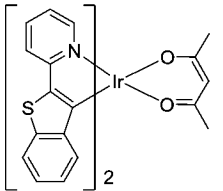
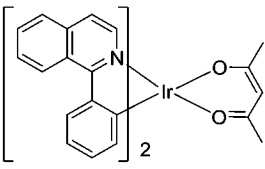
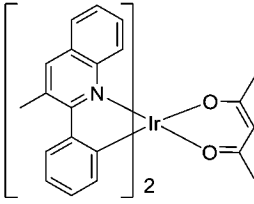
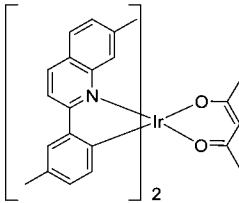
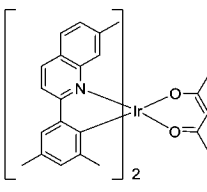
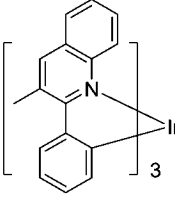
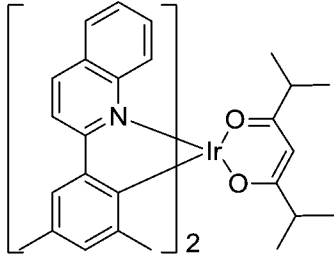
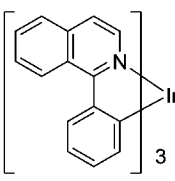
		WO 2009021126
多稠合之雜芳基化合物		US 20090309488 US 20090302743 US 20100012931
供體-受體類型之分子		WO 2008056746
		WO 2010107244
氮雜呋啉/DBT/DBF		JP 2008074939

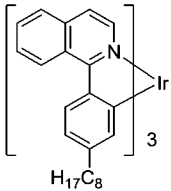
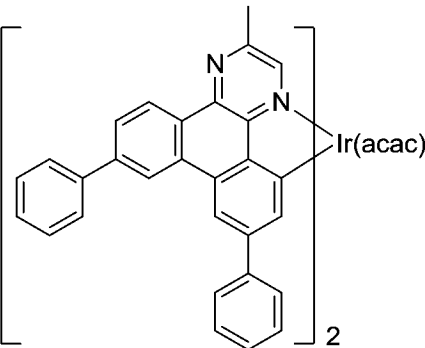
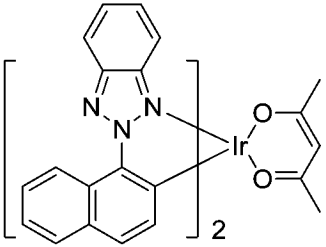
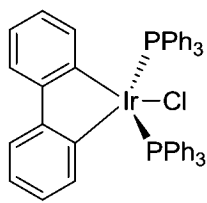
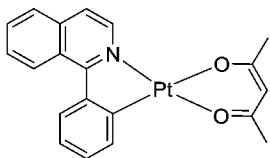
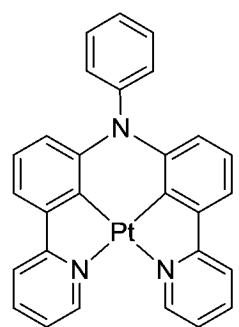
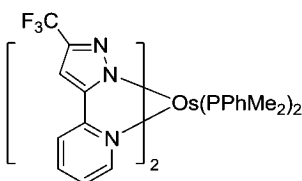
		US 20100187984
聚合物(例如，PVK)		Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)
螺萘化合物		WO 2004093207
金屬苯氧基苯并噁唑化合物		WO 2005089025
		WO 2006132173
		JP 200511610
螺萘-咔唑化合物		JP 2007254297
		JP 2007254297

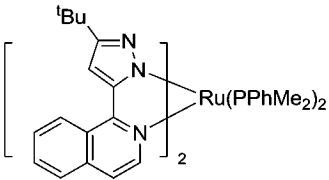
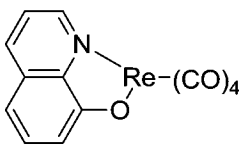
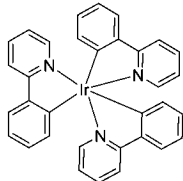
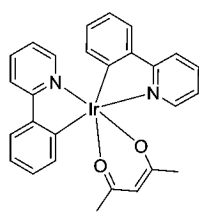
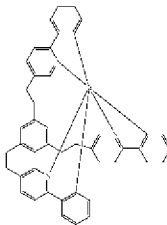
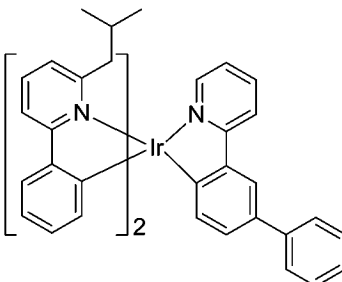
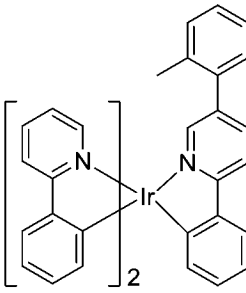
吡啶并呋啉		WO 2007063796
		WO 2007063754
5員環缺電子雜環 (例如三唑、噁二唑)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)
		WO 2004107822
四伸苯錯合物		US 20050112407
金屬苯氧基吡啶化合物		WO 2005030900
金屬配位錯合物(例如， Zn、Al與N^N配體之配 位錯合物)		US 20040137268, US 20040137267
藍色主體		

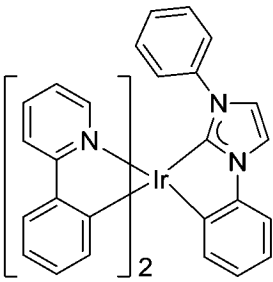
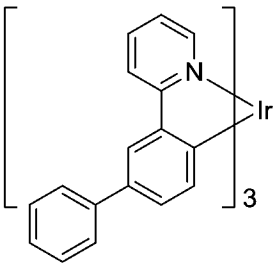
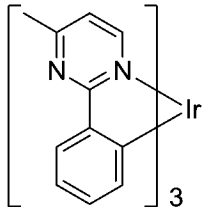
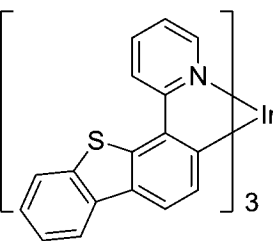
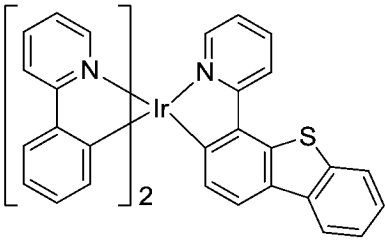
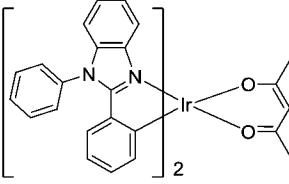
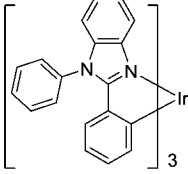
芳基咔唑		Appl. Phys. Lett, 82, 2422 (2003)
		US 20070190359
二苯并噻吩/二苯并呋喃- 咔唑化合物		WO 2006114966, US 20090167162
		US 20090167162
		WO 2009086028
		US 20090030202, US 20090017330
		US 20100084966
矽芳基化合物		US 20050238919

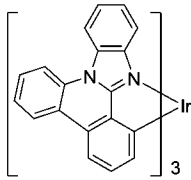
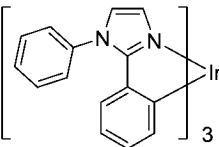
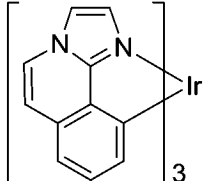
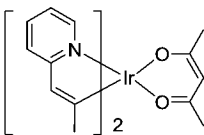
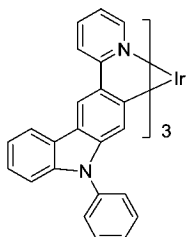
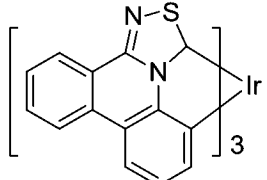
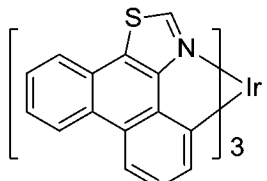
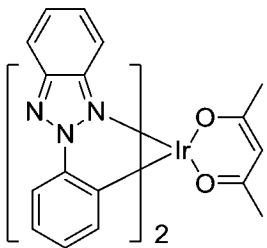
		WO 2009003898
矽/鍺芳基化合物		EP 2034538A
芳基苯甲鹽基酯		WO 2006100298
非接合基團鍵聯之卟啉		US 20040115476
氮雜卟啉		US 20060121308
高三線態金屬有機金屬錯合物		US 7154114
磷光摻雜劑		
紅色摻雜劑		
重金屬卟啉 (例如，PtOEP)		Nature 395, 151 (1998)

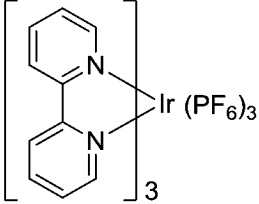
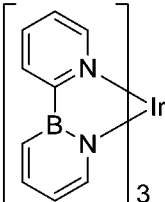
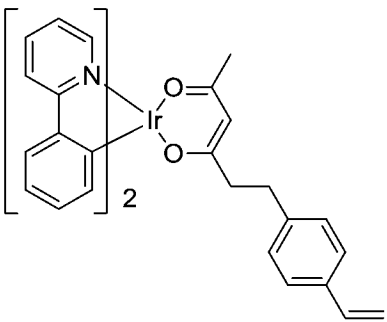
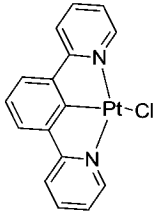
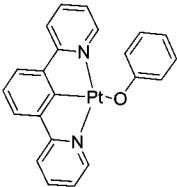
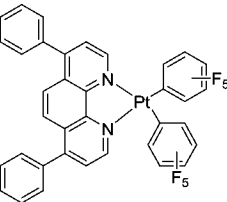
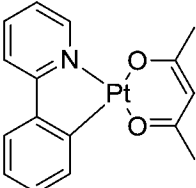
銥(III)有機金屬錯合物		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US 2006835469
		US 2006835469
		US 20060202194
		US 20060202194
		US 20070087321
		US 20080261076 US 20100090591
		US 20070087321

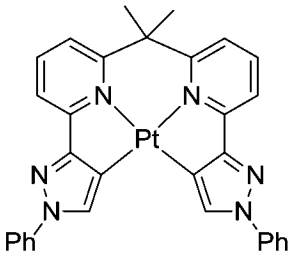
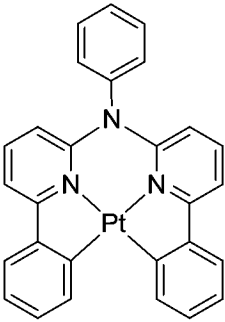
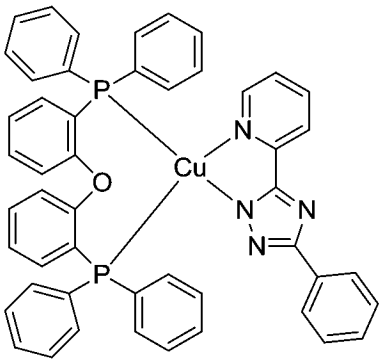
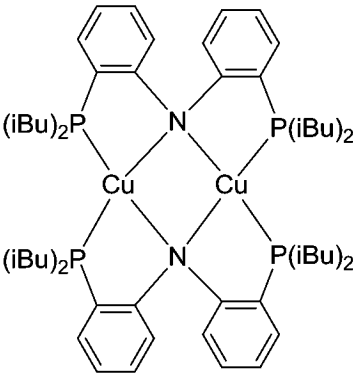
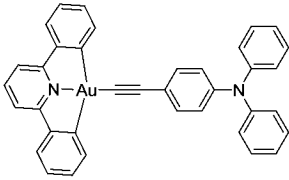
		Adv. Mater. 19, 739 (2007)
		WO 2009100991
		WO 2008101842
		US 7232618
鉑(II)有機金屬錯合物		WO 2003040257
		US 20070103060
鐵(III)錯合物		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)

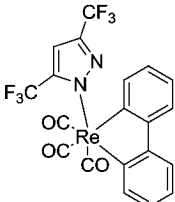
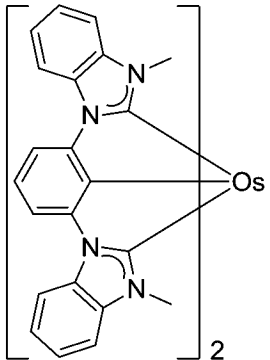
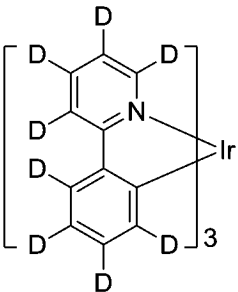
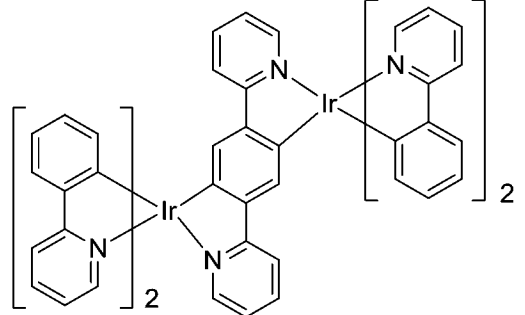
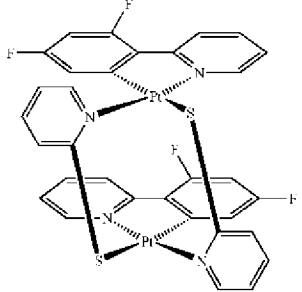
鈺(II)錯合物		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
銻(I)、(II)及(III)錯合物		US 20050244673
綠色摻雜劑		
銥(III)有機金屬錯合物	 及其衍生物	Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)
		US 20020034656
		US 7332232
		US 20090108737
		WO 2010028151

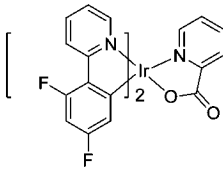
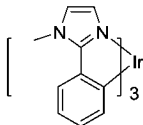
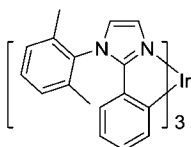
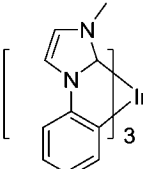
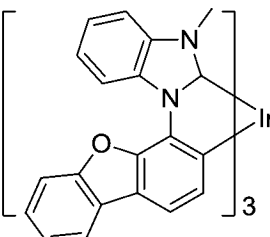
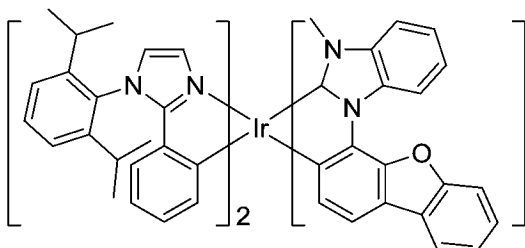
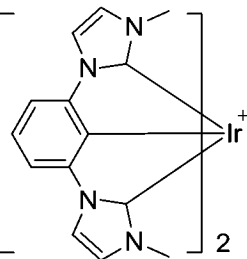
		EP 1841834B
		US 20060127696
		US 20090039776
		US 6921915
		US 20100244004
		US 6687266
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)

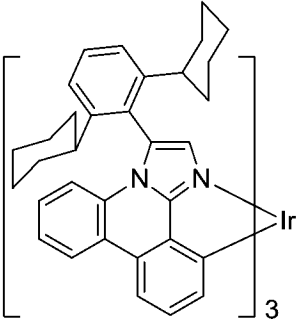
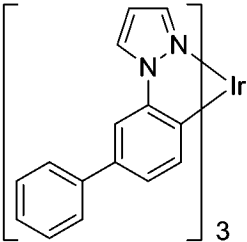
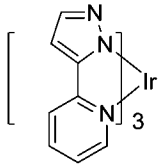
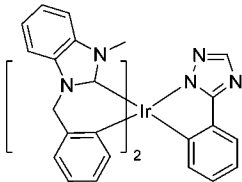
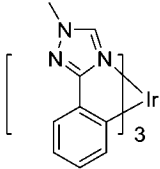
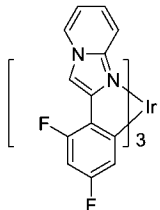
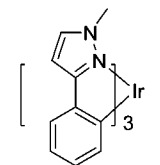
	US 20070190359
	US 20060008670 JP 2007123392
	WO 2010086089, WO 2011044988
	Adv. Mater. 16, 2003 (2004)
	Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
	WO 2009050290
	US 20090165846
	US 20080015355

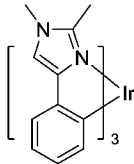
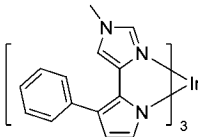
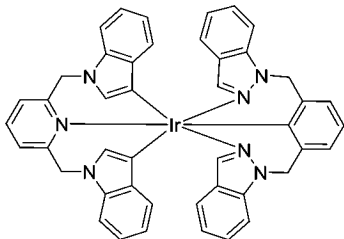
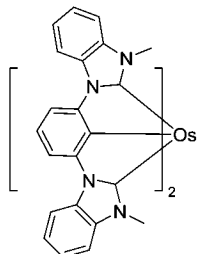
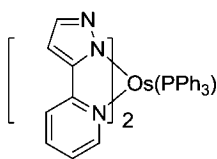
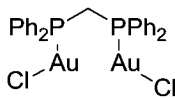
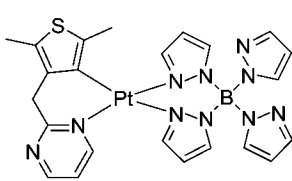
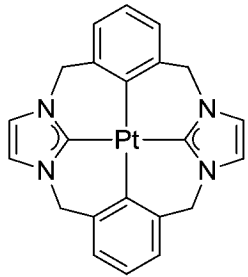
		US 20010015432
		US 20100295032
用於聚合性金屬有機金屬化合物之單體		US 7250226, US 7396598
Pt(II)有機金屬錯合物， 包括多齒配體		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
		WO 2002015645

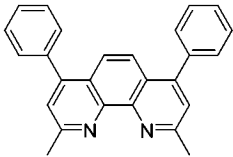
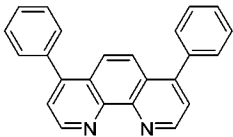
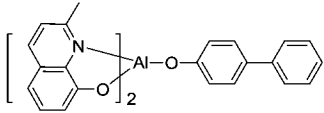
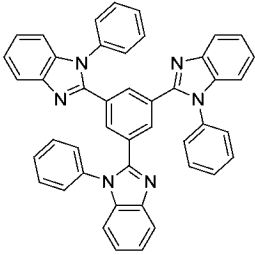
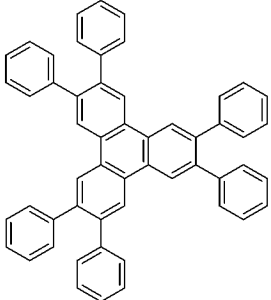
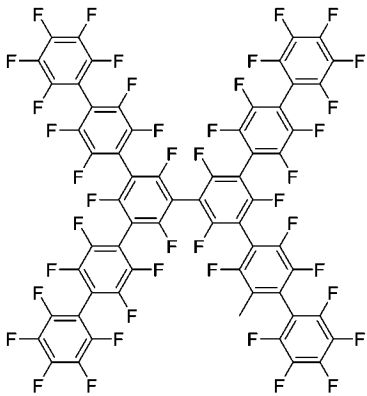
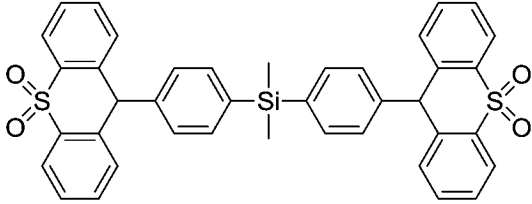
		US 20060263635
		US 20060182992 US 20070103060
Cu錯合物		WO 2009000673
		US 20070111026
金錯合物		Chem. Commun. 2906 (2005)

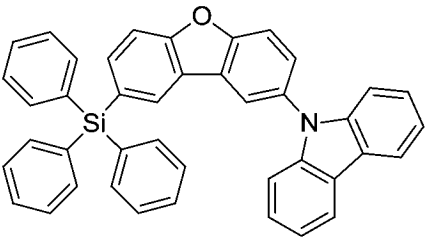
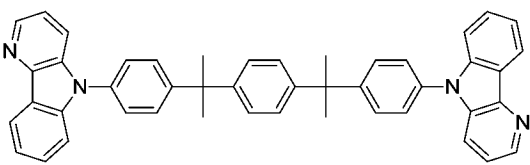
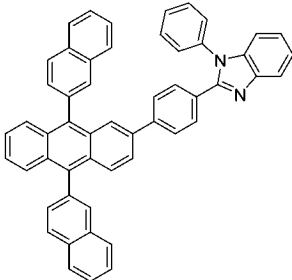
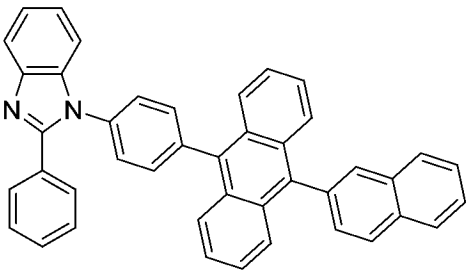
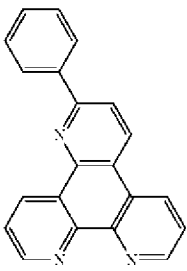
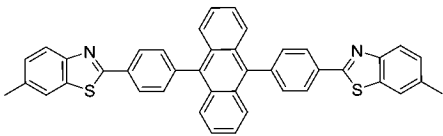
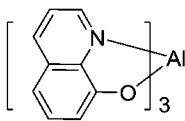
銻(III)錯合物		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
鐵(II)錯合物		US 7279704
氘化有機金屬錯合物		US 20030138657
具有兩個或兩個以上金屬中心之有機金屬錯合物		US 20030152802
		US 7090928
藍色摻雜劑		

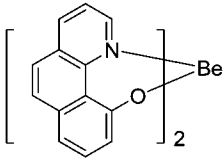
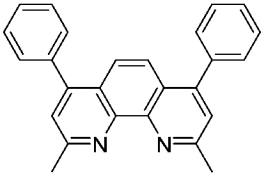
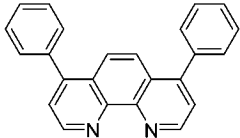
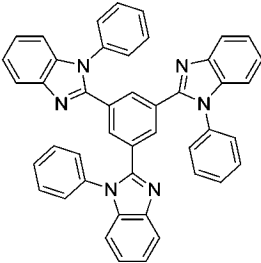
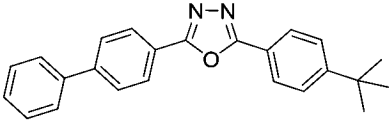
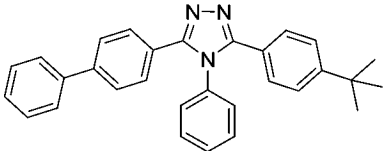
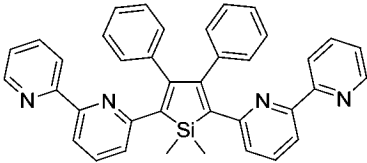
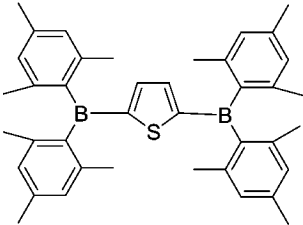
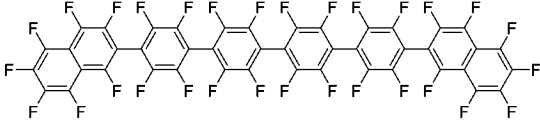
銥(III)有機金屬錯合物		WO 2002002714
		WO 2006009024
		US 20060251923 US 20110057559 US 20110204333
		US 7393599, WO 2006056418, US 20050260441, WO 2005019373
		US 7534505
		WO 2011051404
		US 7445855

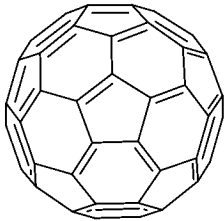
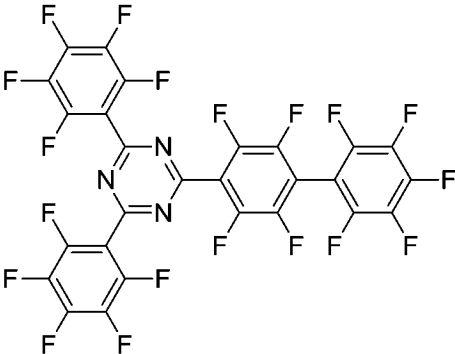
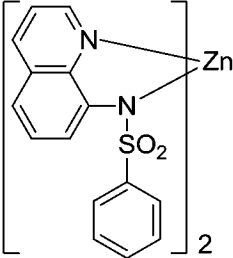
		US 20070190359, US 20080297033 US 20100148663
		US 7338722
		US 20020134984
		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)
		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)
		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)
		WO 2005123873

		WO 2005123873
		WO 2007004380
		WO 2006082742
鐵(II)錯合物		US 7279704
		Organometallics 23, 3745 (2004)
金錯合物		Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)
鉑(II)錯合物		WO 2006098120, WO 2006103874
具有至少一金屬碳烯鍵 之Pt四齒錯合物		US 7655323
激子/電洞阻擋層材料		

浴銅靈 (Bathocuprine) 化合物 (例如，BCP、BPhen)		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
金屬8-羥基喹啉鹽 (例如，BALq)		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
5員環缺電子雜環，諸如三唑、噁二唑、咪唑、苯并咪唑		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
聯伸三苯化合物		US 20050025993
氟化芳族化合物		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)
吩噻嗪-S-氧化物		WO 2008132085

矽烷基化的5員氮、氧、 硫或磷二苯并雜環		WO 2010079051
氮雜吡啶		US 20060121308
電子傳輸材料		
蔥-苯并咪唑化合物		WO 2003060956
		US 20090179554
氮雜聯伸三苯衍生物		US 20090115316
蔥-苯并噻唑化合物		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
金屬 8- 羥基喹啉鹽 (例 如，Alq ₃ 、Zrq ₄)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987) US 7230107

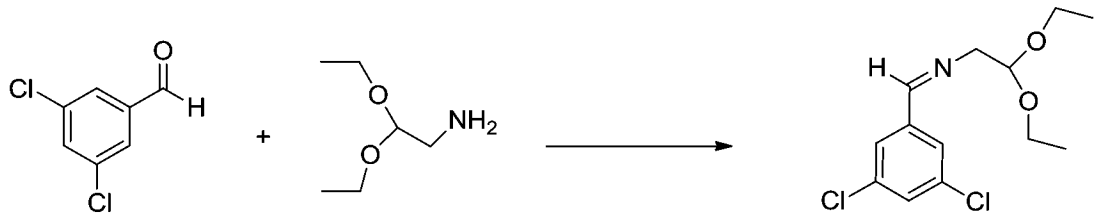
金屬經基苯并喹啉鹽		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
浴銅靈化合物，諸如 BCP、BPhen等		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
5員環缺電子雜環 (例如，三唑、噁二唑、咪唑、苯并咪唑)		Appl. Phys. Lett. 74, 865 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)
		Jpn. J. Apply. Phys. 32, L917 (1993)
噻咯(silole)化合物		Org. Electron. 4, 113 (2003)
芳基硼烷化合物		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714 (1998)
氟化的芳族化合物		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)

富勒烯(例如，C60)		US 20090101870
三嗪錯合物		US 20040036077
Zn(N^N)錯合物		US 6528187

實驗

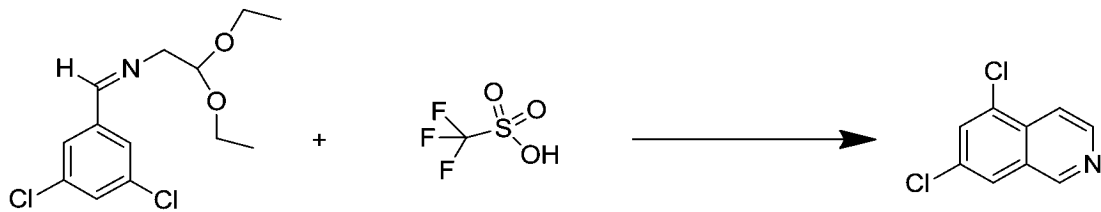
本文通篇使用之化學縮寫如下：Cy為環己基，dba為二苯亞甲基丙酮，EtOAc為乙酸乙酯，DME為二甲氧基乙烷，dppe為1,2-雙(二苯基膦基)乙烷，THF為四氫呋喃，DCM為二氯甲烷，DMF為二甲基甲醯胺，S-Phos為二環己基(2',6'-二甲氧基-[1,1'-聯苯]-2-基)膦。

合成化合物1

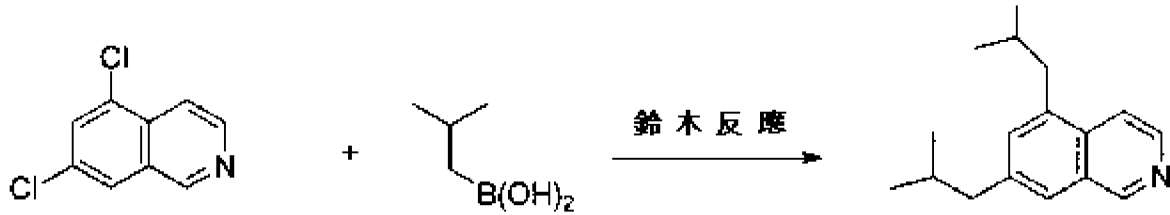


合成N-(3,5-二氯代苯亞甲基)-2,2-二乙氧基乙胺。將3,5-二氯苯甲醛(51.2 g，284 mmol)、2,2-二乙氧基乙胺(38.6 g，284 mmol)以及270 mL 甲苯裝入500 mL三頸燒瓶中。使混合物於N₂下加熱至回流24小時，用

Dean-Stark設備收集水副產物。蒸發溶劑後獲得86 g (100%)淺黃色液體。藉由GC-MS及NMR確認產物，並且無需進一步純化即用於下一步驟。

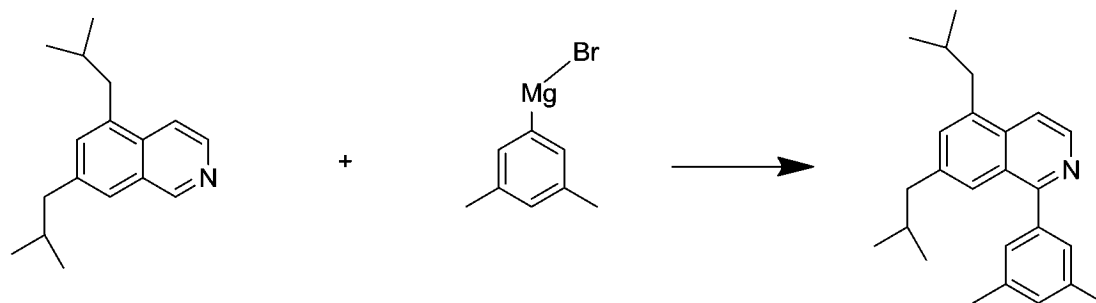


合成5,7-二氯異喹啉。將三氟甲磺酸(15.83 g，103 mmol)裝入配備Dean-Stark設備及加料漏斗之100 mL三頸燒瓶中。首先使三氟甲磺酸加熱至120℃，並向酸中逐滴滴加溶於4 mL DCM中之N-(3,5-二氯苯亞甲基)-2,2-二乙氧基乙胺(4 g, 13.78 mmol)。添加之後，使混合物於120℃下再加熱2小時，然後冷卻至室溫，且加入8 mL之MeOH來淬滅反應。將反應混合物倒入氫氧化銨水溶液(120 mmol)中，用另外之氫氧化銨水溶液製備為鹼性，且攪拌及過濾。蒸餾之後獲得白色固體(2.1 g，77%)。藉由GC及HPLC確認產物之特徵(identity)。以相同方式，使用32.2 g N-(3,5-二氯苯亞甲基)-2,2-二乙氧基乙胺來進行較大規模之反應，並獲得16.5 g (75%)產物以用於下一步驟。

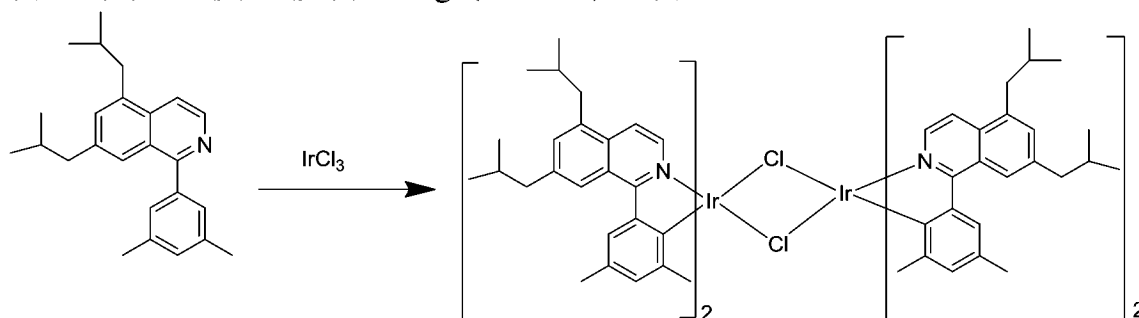


合成5,7-二異丁基異喹啉。將5,7-二氯異喹啉(5.8 g，29.3 mmol)、異丁基硼酸(8.96 g，88 mmol)、二環己基(2',6'-二甲氧基-[1,1'-聯苯]-2-基)膦(0.962 g，2.34 mmol)、Pd₂(dba)₃ (0.536 g，0.586 mmol)、K₃PO₄ (21.8 g，103 mmol)、150 mL甲苯以及15 mL水裝入燒瓶中。藉由N₂鼓泡30分鐘來沖洗反應混合物，隨後加熱至回流隔夜。GC-MS分析表明反應

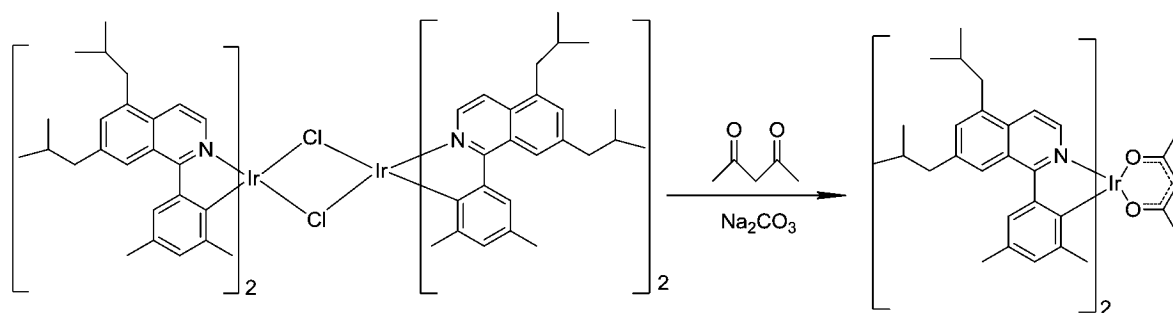
完成。用己烷中之15%乙酸乙酯(v/v)作為溶離劑之矽膠層析法產生6.7 g (95%)產物。



合成1-(3,5-二甲基苯基)-5,7-二異丁基異喹啉。將50 mL無水THF中之5,7-二異丁基異喹啉(7.4 g, 30.7 mmol)在室溫下逐滴加入(3,5-二甲基苯基)溴化鎂(100 mL, 50.0 mmol)，並使其攪拌16小時，之後將反應混合物加熱至回流5小時。GC及HPLC分析表明反應完成，但含有少量之還原副產物，該還原副產物藉由用THF中之DDQ處理幾分鐘而轉化成所需產物。水處理後，獲得6.5 g (61.4%)產物。

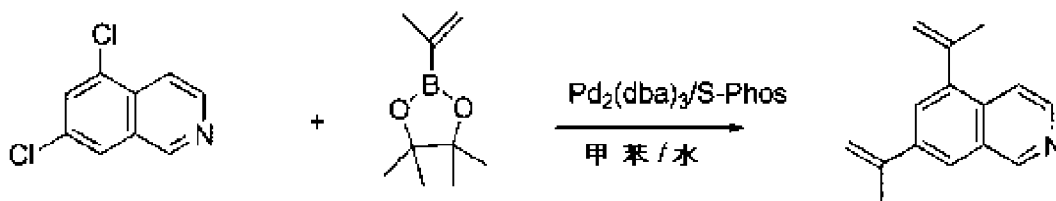


合成銱二聚物。將1-(3,5-二甲基苯基)-5,7-二異丁基異喹啉(6.0 g, 17.37 mmol)及 $\text{IrCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (2.57 g, 6.95 mmol)、90 mL 2-乙氧基乙醇以及30 mL水裝入250 mL燒瓶中。將反應混合物於氮下加熱至回流19小時。過濾並用甲醇洗滌之後獲得3.1 g (24.3%)二聚物，其無需進一步純化即用於下一步驟。

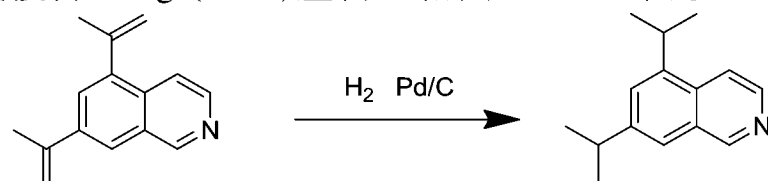


合成化合物1 將2-(3,5-二甲基苯基)-5,7-二異丁基喹啉銦二聚物(1.5 g , 0.82 mmol)、2,4-戊二酮(1.63 g , 16.36 mmol)、Na₂CO₃(1.73 g , 16.36 mmol)以及2-乙氧基乙醇(60 mL)裝入250燒瓶中並在室溫下攪拌72小時。過濾所得沈澱物並且用甲醇洗滌。藉由使固體通過矽膠塞(已用己烷中之15%三乙胺預處理)將其進一步純化。處理後獲得0.55 g (34.3%)產物。藉由LC-MS確認產物之特徵。

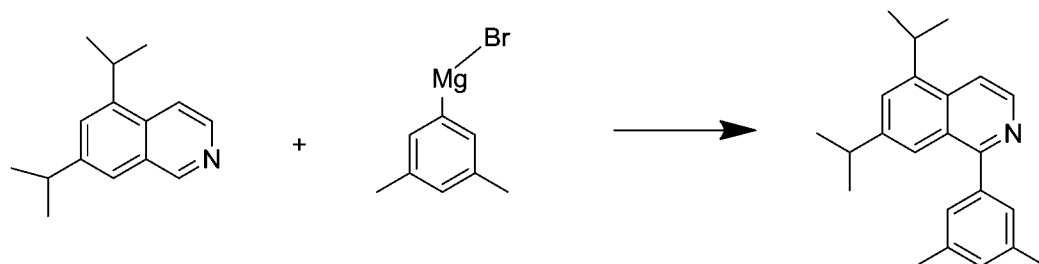
合成化合物2



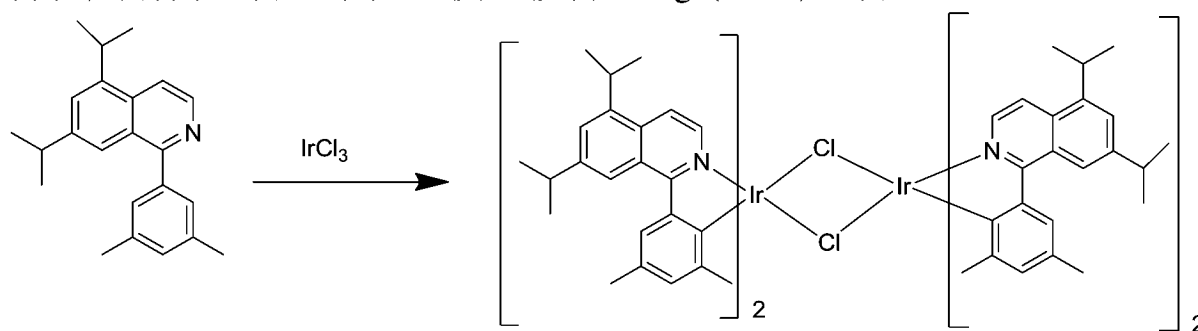
合成5,7-二(丙-1-烯-2-基)異喹啉：將5,7-二氯異喹啉(5.1 g 25.8 mmol)、4,4,5,5-四甲基-2-(丙-1-烯-2-基)-1,3,2-二氧雜戊硼烷(9.95 g , 59.2 mmol)、二環己基(2',6'-二甲氧基-[1,1'-聯苯]-2-基)膦(0.846 g , 2.06 mmol)、Pd₂(dba)₃(0.472 g , 0.515 mmol)、K₃PO₄(19.13 g , 90 mmol)、100 mL甲苯以及10 mL水裝入燒瓶中。藉由N₂鼓泡30分鐘來沖洗反應混合物，隨後加熱至回流隔夜。GC-MS分析表明反應完成。矽膠柱層析法後獲得5.1 g (91%)產物並藉由GC-MS確認。



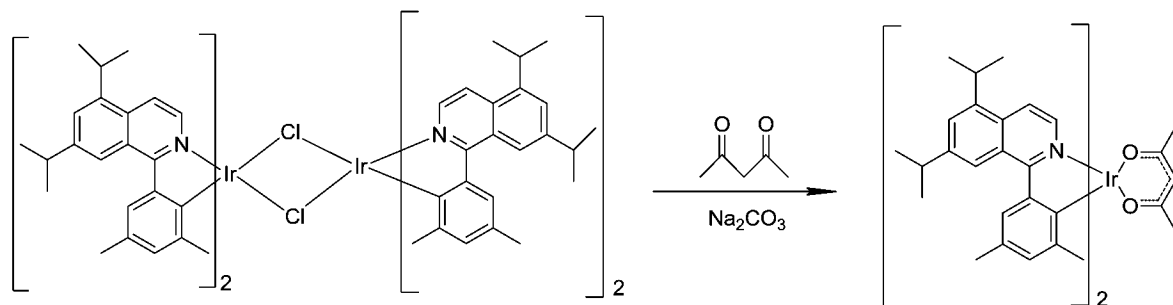
合成5,7-二異丙基異喹啉：將5,7-二(丙-1-烯-2-基)異喹啉(5.1 g，24.37 mmol)溶於玻璃瓶中之50 mL EtOH中，並用N₂沖洗30分鐘。於氮下，向瓶中之溶液加入10% Pd/C (1.3 g，1.218 mmol)。進行4小時之氫化，之後GC-MS分析表明反應完成。



合成1-(3,5-二甲基苯基)-5,7-二異丙基異喹啉。將50 mL無水THF中之5,7-二異丙基異喹啉(3.1 g，14.5 mmol)在室溫下逐滴加入0.5 M (3,5-二甲基苯基)溴化鎂THF溶液(50 mL，25.0 mmol)，並使其攪拌16小時，之後將反應混合物加熱至回流5小時。GC及HPLC分析表明反應完成，但含有少量之還原副產物，該還原副產物藉由用THF中之DDQ處理幾分鐘而轉化成所需產物。水處理後，獲得2.4 g (52%)產物。

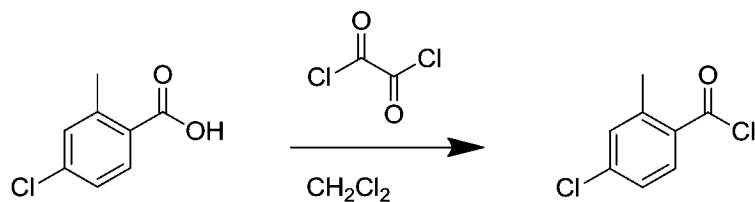


合成銱二聚物。將1-(3,5-二甲基苯基)-5,7-二異丙基異喹啉(2.4 g，7.56 mmol)及IrCl₃·H₂O(1.167 g，3.15 mmol)、45 mL 2-乙氧基乙醇以及15 mL水裝入250 mL燒瓶中。將反應混合物於氮下加熱至回流19小時。冷卻反應、過濾並用甲醇洗滌後，獲得1.2 g (44.2%)二聚物，其無需進一步純化即用於下一步驟。

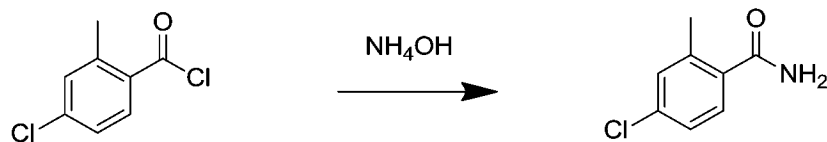


合成化合物2 將2-(3,5-二甲基苯基)-5,7-二異丙基喹啉銨二聚物(1.2 g, 0.697 mmol)、2,4-戊二酮(0.697 g, 6.97 mmol)、Na₂CO₃(0.739 g, 6.97 mmol)以及2-乙氧基乙醇(40 mL)在室溫下攪拌48小時。過濾沈澱物並且用甲醇洗滌。藉由使固體通過矽膠塞(已用己烷中之15%三乙胺(tryethylamine)預處理)將其進一步純化。處理反應後，獲得0.68 g (52.8%)產物，其藉由LC-MS來確認。

合成化合物3

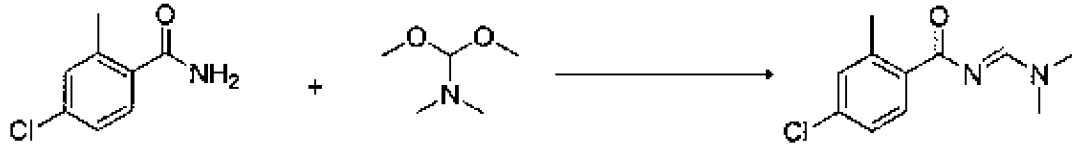


合成4-氯-2-甲基苯甲醯氯。在室溫下，向4-氯-2-甲基苯甲酸(24.0 g, 141 mmol)在二氯甲烷(20 mL)及二甲基甲醯胺(4 mL)中之混合物逐滴滴加草醯氯(26.8 g, 258 mmol)。將反應在室溫下攪拌2小時。加入己烷並且濃縮反應物質以得到4-氯-2-甲基苯甲醯氯(26.6 g, 定量)，並無需純化即用於下一步驟。

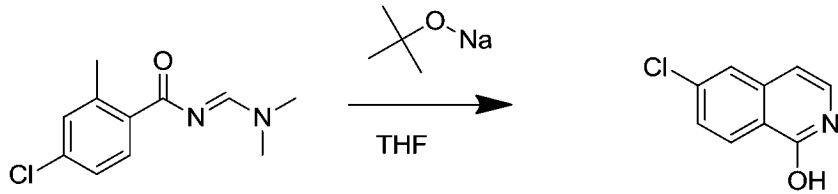


合成4-氯-2-甲基苯甲醯胺。將30%氫氧化銨(300 mL, 4.76 mol)在鹽冰浴中冷卻。加入四氫呋喃(150 mL)中之4-氯-2-甲基苯甲醯氯(26.4 g, 140 mmol)，並且攪拌1 hr。加入水。濾出晶體並用水洗滌，真空乾燥

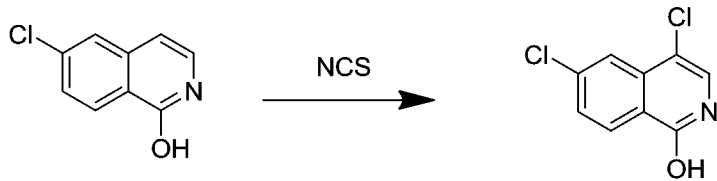
以得到4-氯-2-甲基苯甲醯胺(20.0 g，產率84%)。



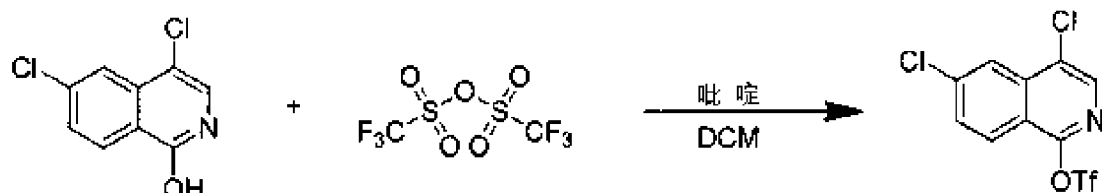
合成4-氯-N-((二甲基胺基)亞甲基)-2-甲基苯甲醯胺。將4-氯-2-甲基苯甲醯胺(20.8 g，123 mmol)及1,1-二甲基甲胺(17.5 g，147 mmol)在四氫呋喃(250 mL)中之混合物回流2.5小時並且隨後濃縮。在己烷中研磨所得晶體並且過濾以得到4-氯-N-((二甲基胺基)亞甲基)-2-甲基苯甲醯胺(25.7 g，產率93%)。



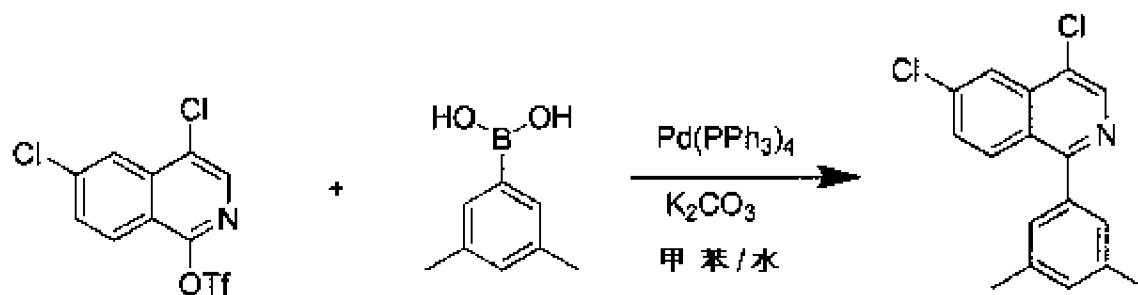
合成6-氯異喹啉-1-醇。將4-氯-N-((二甲基胺基)亞甲基)-2-甲基苯甲醯胺(25.7 g，114 mmol)、第三丁醇鈉(25.7 g，267 mmol)以及四氫呋喃(450 mL)之混合物於N₂下回流3小時，並隨後倒入水(1 L)中。用HCl水溶液將pH調節至4。濾出固體並用水洗滌，並且真空乾燥以得到6-氯異喹啉-1-醇(14.7 g，產率71.6%)。



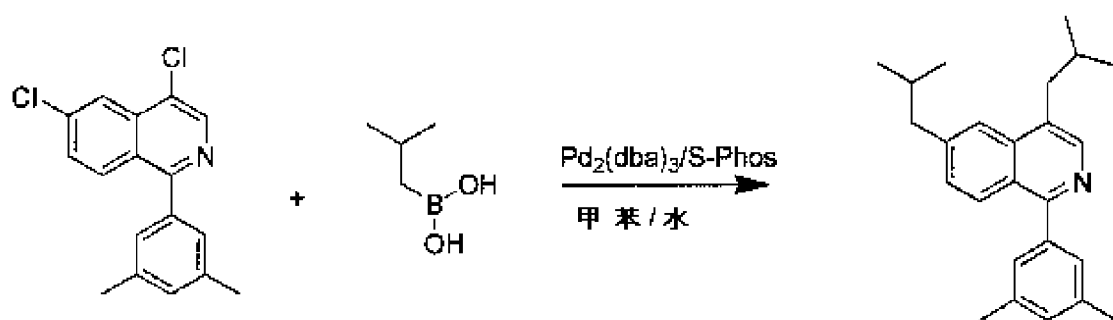
合成4,6-二氯異喹啉-1-醇。將6-氯異喹啉-1-醇(13.5 g，75 mmol)及乙腈(400 mL)之混合物加熱至回流。逐滴滴加乙腈(110 mL)中之N-氯琥珀醯亞胺(10.57 g，79 mmol)。將混合物回流隔夜。濾出晶體。濃縮濾液，並用水洗滌所得晶體，與上述晶體合併，且真空乾燥以得到4,6-二氯異喹啉-1-醇(14.2 g，88%產率)。其無需分析即用於下一步驟。



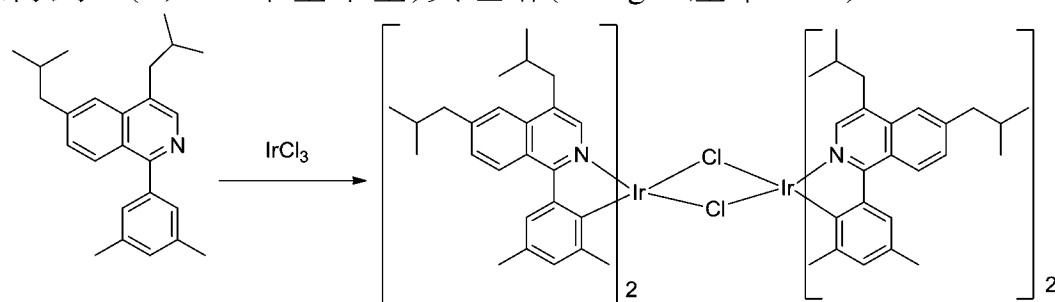
合成三氟甲磺酸4,6-二氯異喹啉-1-基酯。將4,6-二氯異喹啉-1-醇 (14.2 g , 66.5 mmol)、吡啶(10.8 mL , 133 mmol)以及二氯甲烷(200 mL)之混合物在冰浴中冷卻。逐滴滴加三氟甲磺酸酐(22.4 mL , 133 mmol)。將混合物在室溫下攪拌隔夜。加入水並緩慢加入NaHCO₃ (20 g)。有機層經Na₂SO₄乾燥，濃縮並使用矽膠層析法(4:1己烷：二氯甲烷，v/v)快速層析分離以得到三氟甲磺酸4,6-二氯異喹啉-1-基酯(3.7 g，產率16%)。



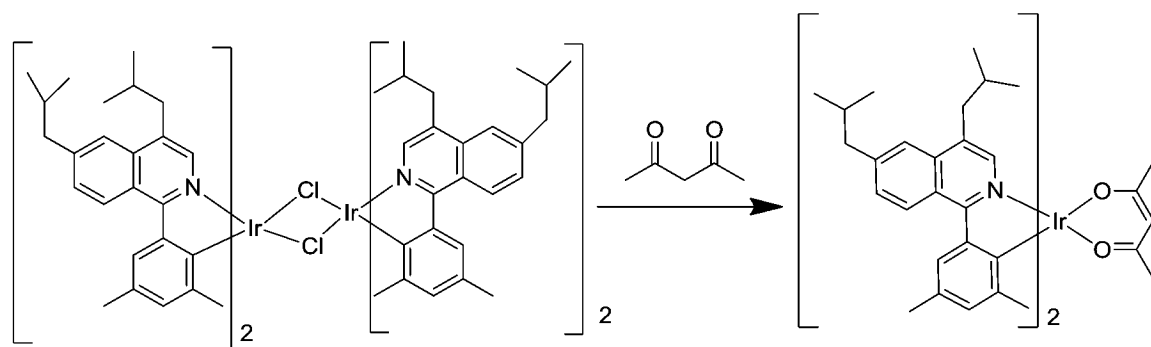
合成4,6-二氯-1-(3,5-二甲基苯基)異喹啉。將三氟甲磺酸4,6-二氯異喹啉-1-基酯(4.0 g , 11.6 mmol)、3,5-二甲基苯基(dimethylphenyl)硼酸(1.6 g , 10.8 g)、Pd(PPh₃)₄ (0.67 g , 0.58 mmol)、碳酸鉀(4.79 , 34.7 mmol)、甲苯(100 mL)以及水(10 mL)之混合物用氮沖洗，並且回流隔夜。使用矽膠層析法(2:1己烷：二氯甲烷，v/v)層析分離濃縮之甲苯層以得到4,6-二氯-1-(3,5-二甲基苯基)異喹啉(3.0 g，產率92%)。



合成1-(3,5-二甲基苯基)異喹啉。將4,6-二氯-1-(3,5-二甲基苯基)異喹啉 (3.2 g , 10.59 mmol) 、異丁基硼酸 (4.32 g , 42.4 mmol) 、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.388 g , 0.424 mmol) 、二環己基(2',6'-二甲氧基-[1,1'-聯苯]-2-基)膦 (0.696 g , 1.694 mmol) 、 $\text{K}_3\text{PO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (24.38 g , 106 mmol) 、甲苯 (133 mL) 以及水 (11 mL) 之混合物用氮沖洗30分鐘並且回流隔夜。使用矽膠層析法 (100% 二氯甲烷至4:1 二氯甲烷:乙酸乙酯, v/v) 層析分離甲苯層以得到1-(3,5-二甲基苯基)異喹啉 (3.3 g , 產率90%)。

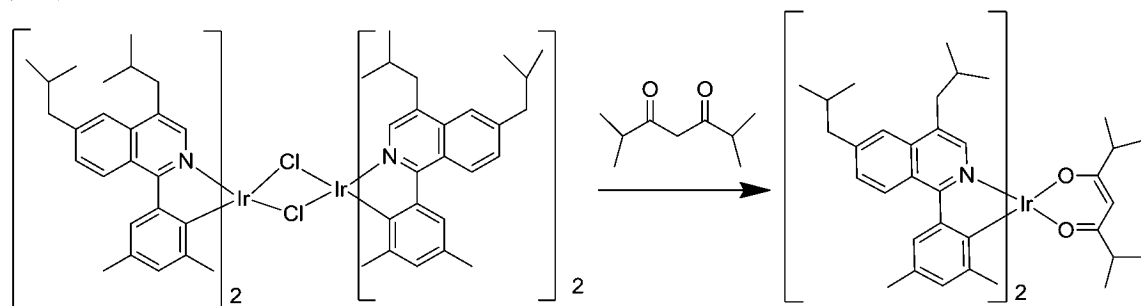


合成1-(3,5-二甲基苯基)異喹啉銱二聚物。將1-(3,5-二甲基苯基)-4,6-二異丁基異喹啉 (3.3 g , 9.55 mmol) 、 $\text{IrCl}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (1.475 g , 3.98 mmol) 、2-乙氧基乙醇 (45 mL) 以及水 (15 mL) 之混合物回流隔夜，並隨後過濾且用甲醇洗滌以得到1-(3,5-二甲基苯基)異喹啉銱二聚物 (2.0 g , 產率54.8%)。



合成化合物3 將1-(3,5-二甲基苯基)異喹啉銨二聚物(1.2 g，0.655 mmol)、戊烷-2,4-二酮(0.655 g，6.55 mmol)、碳酸鉀(0.905 g，6.55 mmol)以及2-乙氧基乙醇(60 mL)之混合物在室溫下攪拌隔夜，並過濾，用甲醇洗滌，並且使用矽膠層析法(4:1己烷：二氯甲烷，v/v，矽膠由三乙胺預處理)層析分離。將殘餘物溶於二氯甲烷及2-丙醇中。在旋轉蒸發器上移除二氯甲烷，濾出0.68 g晶體並隨後在230℃下昇華以得到化合物3(0.32 g，24.9%)，其藉由LC-MS確認。

合成化合物22



合成化合物22 將1-(3,5-二甲基苯基)異喹啉銨二聚物(0.8 g，0.436 mmol)、2,6-二甲基庚烷-3,5-二酮(0.682 g，4.36 mmol)、碳酸鉀(0.603 g，4.36 mmol)以及2-乙氧基乙醇(60 mL)之混合物在室溫下攪拌隔夜，並過濾，用甲醇洗滌，並且在矽膠(4:1己烷：二氯甲烷，v/v，矽膠由三乙胺預處理)上層析分離。將殘餘物溶於二氯甲烷及2-丙醇中。在旋轉蒸發器上移除二氯甲烷，並在過濾後獲得0.60 g晶體。其藉由LC-MS確認。

應理解，本文描述之各種實施例僅為舉例而已，且不意圖限制本發

明之範疇。舉例而言，本文描述之許多材料及結構可在不偏離本發明之精神的情況下經其他材料及結構取代。因此，如對熟習此項技術者而言顯而易見，所主張之發明可包括本文描述之特定實例及較佳實施例之變化。應理解，不意圖限制關於本發明因何生效的各種理論。

【符號說明】

100	有機發光裝置
110	基板
115	陽極
120	電洞注入層
125	電洞傳輸層
130	電子阻擋層
135	發射層
140	電洞阻擋層
145	電子傳輸層
150	電子注入層
155	保護層
160	陰極
162	第一導電層
164	第二導電層
200	經倒置之OLED
210	基板
215	陰極
220	發射層

225	電洞傳輸層
230	陽極



【發明摘要】

【中文發明名稱】

新穎有機發光材料

【英文發明名稱】

NOVEL ORGANIC LIGHT EMITTING MATERIALS

【中文】

提供含有2-苯基異喹啉配體之新穎磷光金屬錯合物，該2-苯基異喹啉配體之異喹啉環上具有至少兩個取代基。所揭示之化合物具有低的昇華溫度，該低的昇華溫度允許純化及製作成各種OLED裝置之便利性。

【英文】

Novel phosphorescent metal complexes containing 2-phenylisoquinoline ligands with at least two substituents on the isoquinoline ring are provided. The disclosed compounds have low sublimation temperatures that allow for ease of purification and fabrication into a variety of OLED devices.

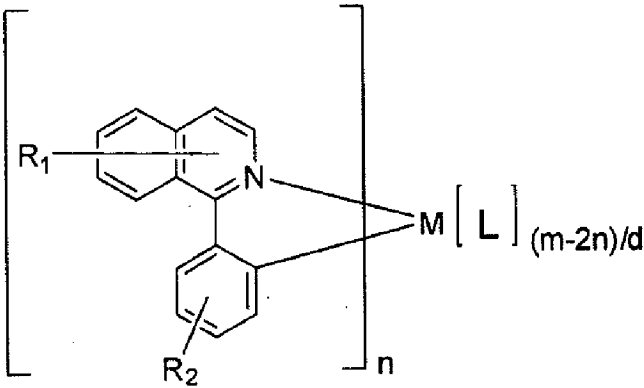
【指定代表圖】

第3圖

【代表圖之符號簡單說明】

無

【特徵化學式】

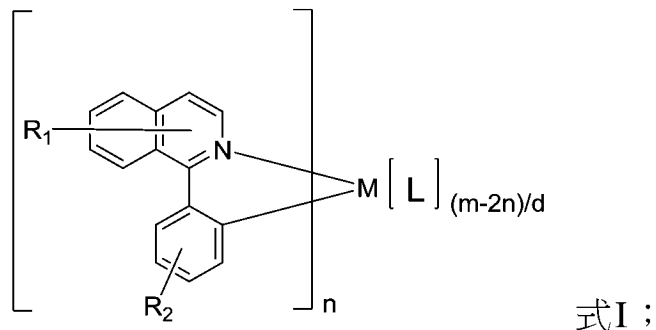


式I

【發明申請專利範圍】

【第1項】

一種具有下式之化合物：



其中M為原子量高於40之金屬；

其中L為第二配體；

其中m為該金屬M之最大配位數；

其中d為L之齒合度；

其中n至少為1；

其中R₁係對各配體獨立地來選擇，且表示二、三、四、五取代或無取代；

其中R₁中之每一者獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氘、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、鍍烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合；

其中R₁中之至少兩者獨立地選自含有二至六個碳之烷基、矽烷基、鍍烷基、環烷基及其組合；

其中R₂可以表示單、二、三、四取代或無取代；並且

其中R₂中之每一者獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氘、鹵

化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

【第2項】

如請求項1之化合物，其中R₁表示二取代。

【第3項】

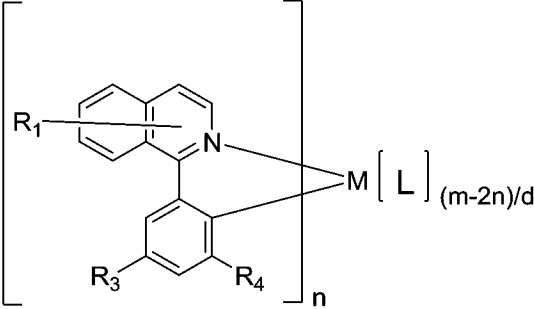
如請求項1之化合物，其中R₁表示二烷基取代。

【第4項】

如請求項1之化合物，其中R₁表示矽烷基或鍍烷基取代。

【第5項】

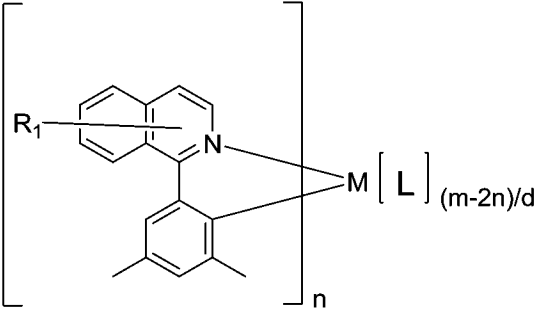
如請求項1之化合物，其中該化合物具有下式：



，式II，其中R₃及R₄皆為烷基。

【第6項】

如請求項1之化合物，其中該化合物具有下式：



，式III。

【第7項】

如請求項1之化合物，其中 R_1 獨立地選自由以下各項組成之群：
 $CH(CH_3)_2$ 、 $CH_2CH(CH_3)_2$ 、 $CH_2C(CH_3)_3$ 、環戊基、環己基、乙基、三甲基矽烷基、三乙基矽烷基、三異丙基矽烷基、三甲基鍺烷基、三乙基鍺烷基以及三異丙基鍺烷基。

【第8項】

如請求項1之化合物，其中 M 為Ir。

【第9項】

如請求項1之化合物，其中 n 為2。

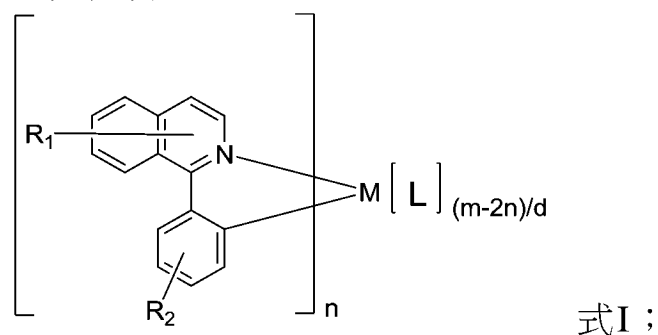
【第10項】

一種包括一第一有機發光裝置的第一裝置，其進一步包括：

一陽極；

一陰極；以及

一有機層，其佈置於該陽極與該陰極之間，該有機層包括具有下式之化合物：



其中 M 為原子量高於40之金屬；

其中 L 為第二配體；

其中 m 為該金屬 M 之最大配位數；

其中 d 為 L 之齒合度；

其中 n 至少為1；

其中 R_1 係對各配體獨立地來選擇，且表示二、三、四、五取代或無取代；

其中 R_1 中之每一者獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氖、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、鍍烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合；

其中 R_1 中之至少兩者獨立地選自含有二至六個碳之烷基、矽烷基、鍍烷基、環烷基及其組合；

其中 R_2 可以表示單、二、三、四取代或無取代；且

其中 R_2 中之每一者獨立地選自由以下各項組成之群：氫、氖、鹵化物、烷基、環烷基、雜烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸、酯、腈、異腈、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

