



(19) 中華民國智慧財產局

(12) 發明說明書公告本

(11) 證書號數：TW I687408 B

(45) 公告日：中華民國 109 (2020) 年 03 月 11 日

(21) 申請案號：107120825

(22) 申請日：中華民國 99 (2010) 年 04 月 27 日

(51) Int. Cl. : C07D213/89 (2006.01)

C07D233/56 (2006.01)

C07D235/06 (2006.01)

C07D215/08 (2006.01)

C07D471/04 (2006.01)

C07F15/00 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

(30) 優先權：2009/04/28 美國

61/173,346

2010/04/27 美國

12/768,068

(71) 申請人：美商環球展覽公司 (美國) UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION (US)
美國(72) 發明人：夏傳軍 XIA, CHUANJUN (CN)；弗羅迪里梭 詹姆士 FIORDELISO, JAMES
(US)；鄺志遠 KWONG, RAYMOND C. (US)；艾里 伯特 ALLEYNE, BERT (TT)

(74) 代理人：陳長文

(56) 參考文獻：

US 20090058279A1

審查人員：官速貞

申請專利範圍項數：8 項 圖式數：4 共 64 頁

(54) 名稱

具有甲基-D₃ 取代之銱錯合物

(57) 摘要

本發明提供包含具有氘取代之配位體的新穎有機化合物。特定言之，該化合物為包含經甲基-d₃ 取代之配位體的銱錯合物。該等化合物可用於有機發光裝置以提供具有改良之顏色、效率及壽命之裝置。

Novel organic compounds comprising ligands with deuterium substitution are provided. In particular, the compound is an iridium complex comprising methyl-d₃ substituted ligands. The compounds may be used in organic light emitting devices to provide devices having improved color, efficiency and lifetime.

指定代表圖：

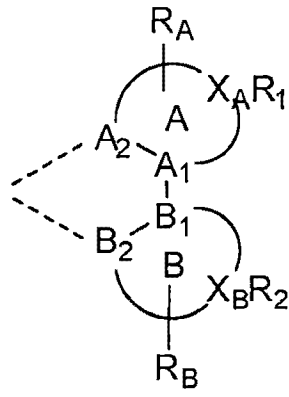
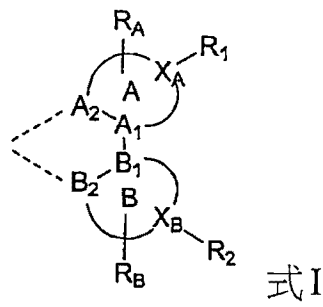


圖 3

特徵化學式：



發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動)

【發明名稱】

具有甲基-D3取代之銱錯合物

IRIDIUM COMPLEX WITH METHYL-D3 SUBSTITUTION

【技術領域】

本發明係關於宜用於有機發光裝置之新穎有機化合物。更特定言之，本發明係關於新穎的經甲基-d3取代之銱錯合物及其在OLED中之用途。

本申請案主張2009年4月28日申請之美國臨時申請案第61/173,346號之優先權，該臨時申請案之揭示內容係以全文引用的方式明確併入本文中。

所主張之發明係由以下一或多方、以以下一或多方之名義及/或聯合以下一或多方根據大學與公司聯合研究協議(joint university corporation research agreement)產生：密西根大學(the University of Michigan)、普林斯頓大學(Princeton University)、南加州大學(The University of Southern California)及環球顯示器公司(Universal Display Corporation)之董事。該協議係在所主張之發明產生之日及之前生效，且所主張之發明係因在協議範疇內進行之活動而產生。

【先前技術】

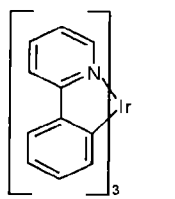
利用有機材料之光電裝置因許多原因而變得日益為吾人所需。由於用以製造該等裝置之許多材料相對廉價，因此有機光電裝置有可能具有優於無機裝置之成本優勢。另外，有機材料之固有性質(諸如其可撓性)可使其充分適於特定應用，諸如在可撓性基板上之製造。有機光電裝置之實例包括有機發光裝置(OLED)、有機光電晶體、有機

光伏電池及有機光偵測器。對於OLED，有機材料可具有優於習知材料之效能優勢。舉例而言，有機發光層發光之波長通常可用適當摻雜劑容易地調整。

OLED利用當在裝置兩端施加電壓時會發光的有機薄膜。OLED正成為日益受關注之適用於諸如平板顯示器、照明及背光之應用的技術。美國專利第5,844,363號、第6,303,238號及第5,707,745號中描述數種OLED材料及組態，該等專利係以全文引用之方式併入本文中。

磷光發射分子之一個應用為全色顯示器。此類顯示器之工業標準要求適用於發射特定顏色(稱為「飽和」色)之像素。詳言之，該等標準要求飽和紅色、綠色及藍色像素。可使用此項技術熟知之CIE座標來量測顏色。

綠光發射分子之一個實例為參(2-苯基吡啶)銱，以Ir(ppy)₃表示，其具有以下結構：



在此圖及本文後續圖中，吾人以直線描繪自氮至金屬(此處為Ir)之配位鍵(dative bond)。

如本文中所用，術語「有機」包括可用於製造有機光電裝置之聚合材料以及小分子有機材料。「小分子」係指任何不為聚合物之有機材料，且「小分子」實際上可能相當大。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能將分子自「小分子」類別中排除。小分子亦可例如作為聚合物主鏈上之側接基團或作為主鏈之一部分併入聚合物中。小分子亦可充當樹狀體之核心部分，該樹狀體係由一系列構築於核心部分上之化學外殼組成。樹狀體

之核心部分可為螢光或磷光小分子發射體。樹狀體可為「小分子」，且咸信目前用於OLED領域之所有樹狀體均為小分子。

如本文中所用，「頂端」意謂離基板最遠，而「底端」意謂離基板最近。當第一層被描述為「安置於第二層上方」時，第一層係經安置離基板較遠。除非指定第一層「與第二層接觸」，否則在第一層與第二層之間可能存在其他層。舉例而言，即使陰極與陽極之間存在各種有機層，陰極亦可描述為「安置於陽極上方」。

如本文中所用，「溶液可加工」意謂能夠在液體介質中溶解、分散或輸送及/或自液體介質中沈積，呈溶液或懸浮液形式。

當咸信配位體直接促成發光材料之光敏性質時，配位體可稱為「光敏性」。當咸信配位體不促成發光材料之光敏性質時，配位體可稱為「輔助性」，但輔助性配位體可能改變光敏性配位體之性質。

如本文中所用且如熟習此項技術者通常所理解，若第一「最高佔用分子軌域(Highest Occupied Molecular Orbital)」(HOMO)或「最低未佔用分子軌域(Lowest Unoccupied Molecular Orbital)」(LUMO)能階更接近於真空能階，則第一能階「大於」或「高於」第二HOMO或LUMO能階。因為電離電位(IP)經量測相對於真空能階為負能量，所以較高HOMO能階對應於具有較小絕對值之IP(IP為負且絕對值較小)。類似地，較高LUMO能階對應於具有較小絕對值之電子親和力(EA)(EA為負且絕對值較小)。在真空能階居於頂部之習知能階圖上，一種材料之LUMO能階高於同一材料之HOMO能階。「較高」HOMO或LUMO能階比「較低」HOMO或LUMO能階更接近於該圖的頂部。

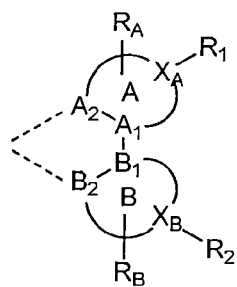
如本文中所用且如熟習此項技術者通常所理解，若第一功函數具有較高絕對值，則第一功函數「大於」或「高於」第二功函數。因為功函數通常經量測相對於真空能階為負數，所以此意謂「較高」功函數為負且絕對值較大。在真空能階居於頂部之習知能階圖上，「較

高」功函數描述為在向下方向上離真空能階較遠。因此，HOMO及LUMO能階之定義遵循與功函數不同的規約。

關於OLED之更多詳情及上述定義可見於美國專利第7,279,704號，該專利係以全文引用的方式併入本文中。

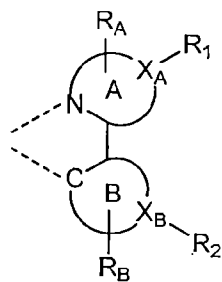
【發明內容】

一種化合物，其包含具有以下結構之配位體：



式I。A及B可獨立地表示5員或6員芳環或雜芳環。A較佳選自由咪唑、吡唑、三唑、噁唑、噁二唑、吡啶、噻吩、嘧啶、吡嗪及三嗪組成之群。B較佳選自由苯、吡啶、呋喃、吡咯及噻吩組成之群。A₁、A₂、B₁及B₂獨立地為C或N。R_A及R_B可表示單、二或三取代。X_A及X_B獨立地為C或雜原子。R_A、R_B、R₁及R₂係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。R_A、R_B、R₁及R₂中之至少一者包括CD、CD₂或CD₃。R_A、R_B、R₁及R₂中之至少一者較佳包括CD₃。R_A、R_B、R₁及R₂可鍵聯。R_A、R_B、R₁及R₂可稠合。該配位體係與具有大於40之原子量的金屬配位。該金屬較佳為Ir。

在一個態樣中，該配位體具有以下結構：



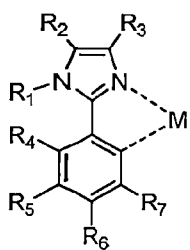
式Ia。

在一個態樣中，X_A及X_B獨立地為C或N，且當X_A為N時，R₁為芳

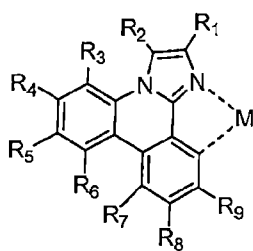
基。在另一個態樣中， X_A 及 X_B 獨立地為C或N，且當 X_A 為N時， R_1 為苯基，進一步經由烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之基團取代，且其中該群包括 CD 、 CD_2 或 CD_3 中之至少一者。

在一個態樣中，提供一類化合物，其中取代基 R_A 及 R_B 中之至少一者為直接連接至環A、環B之 CD_3 或結合或稠合至環A或環B之環。

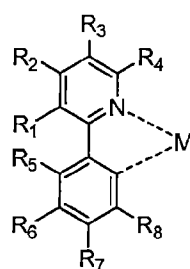
詳言之，提供包含配位體之化合物，其中該配位體係選自由以下組成之群：



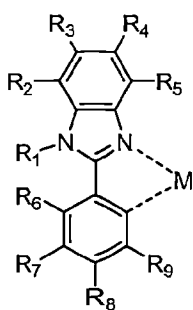
II



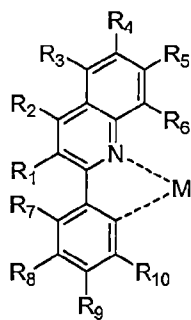
III



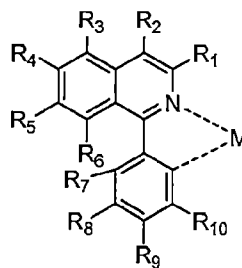
IV



V



VI



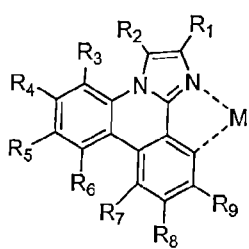
VII

R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 及 R_{10} 係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 及 R_{10} 中之至少一者為 CD_3 。

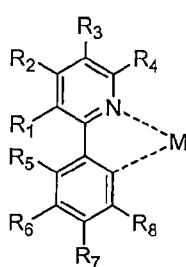
在另一個態樣中，化合物包含選自式II、III、IV、V、VI及VII之配位體。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 及 R_{10} 係獨立地選自

由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉及R₁₀中之至少一者包括CD₃。

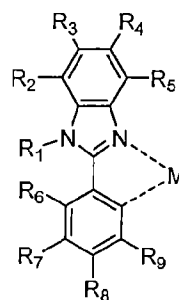
在另一個態樣中，提供包含配位體之化合物，該配位體選自由以下組成之群：



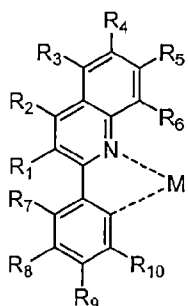
III



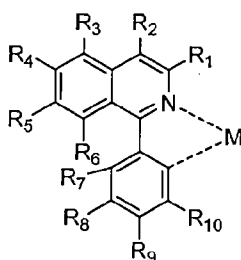
IV



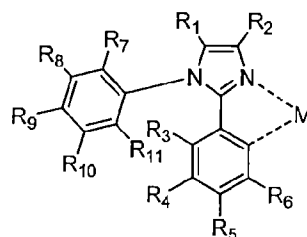
V



VI



VII



VIII

R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉、R₁₀及R₁₁係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉、R₁₀及R₁₁可鍵聯。R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉、R₁₀及R₁₁可耦合。R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉、R₁₀及R₁₁中之至少一者包括包含CD、CD₂或CD₃之烷基。

提供經甲基-氘(在本文中亦稱為甲基-d₃或CD₃)取代之銻錯合物的特定實例，且該等實例包括選自由化合物2-42組成之群之化合物。在

一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式II之配位體，例如化合物2-4。在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式III之配位體，例如化合物5-9。在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式IV之配位體，例如化合物10-14及27-40。在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式V之配位體，例如化合物15-19。在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式VI之配位體，例如化合物20-23。在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式VII之配位體，例如化合物24-26、41及42。

經氬取代之化合物的其他特定實例包括選自由化合物43-化合物82組成之群之化合物。在一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式III之配位體，例如化合物58、59、68-70及75-77。在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式IV之配位體，例如化合物43-52、62-67及80-82。在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式V之配位體，例如化合物55-57、73及74。在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式VI之配位體，例如化合物60、61、78及79。在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式VIII之配位體，例如化合物53、54、71及72。

在一個態樣中，提供均配(homoleptic)化合物。特定言之，提供一類化合物，其中具有式I之配位體為均配化合物中之配位體。在另一個態樣中，提供雜配(heteroleptic)化合物。特定言之，提供一類化合物，其中具有式I之配位體為雜配化合物中之配位體。

亦提供一種有機發光裝置。該裝置可包括陽極、陰極及安置於該陽極與該陰極之間的有機發光層。該有機層另外包含具有如上所述之式I結構之配位體。

A及B可獨立地表示5員或6員芳環或雜芳環。A₁、A₂、B₁及B₂獨

立地為C或N。R_A及R_B可表示單、二或三取代。X_A及X_B獨立地為C或雜原子。R_A、R_B、R₁及R₂係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。R_A、R_B、R₁及R₂中之至少一者包括CD、CD₂或CD₃。R_A、R_B、R₁及R₂中之至少一者較佳包括CD₃。R_A、R_B、R₁及R₂可鍵聯。R_A、R_B、R₁及R₂可稠合。該配位體係與具有大於40之原子量的金屬配位。

在一個態樣中，X_A及X_B獨立地為C或N，且當X_A為N時，R₁為芳基。在另一個態樣中，X_A及X_B獨立地為C或N，且當X_A為N時，R₁為苯基，進一步經由烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之基團取代，且其中該群包括CD、CD₂或CD₃中之至少一者。

描述為包含具有式I之配位體之化合物的較佳芳環、金屬及取代基選擇亦較佳用於包括包含具有式I之配位體之化合物的裝置。該等選擇包括金屬M、環A及B以及取代基R_A、R_B、A₁、A₂、B₁、B₂、R₁及R₂之選擇。

取代基R_A及R_B中之至少一者較佳為直接連接至環A、環B之CD₃或結合或稠合至環A或環B之環。

該金屬較佳為Ir。

A較佳選自由咪唑、吡唑、三唑、噁唑、噁二唑、吡啶、噻嗪、嘧啶、吡嗪及三嗪組成之群。B較佳選自由苯、吡啶、呋喃、吡咯及噻吩組成之群。

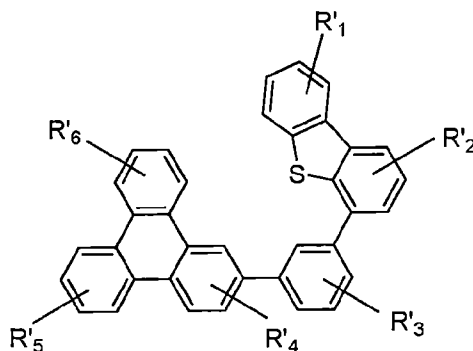
特定言之，該裝置之有機層可包含具有選自由式II-VII組成之群之配位體的化合物，其中R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉及R₁₀係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉及R₁₀中之至少一者為CD₃。該有機層較佳包含選自由化合物2-42組成

之群之化合物。

另外，該裝置之有機層可包含具有選自由式II-VII組成之群之配位體的化合物，其中 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 及 R_{10} 係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 及 R_{10} 中之至少一者為 CD_3 。

此外，該裝置之有機層可包含具有選自由式III-VIII組成之群之配位體的化合物。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 、 R_{10} 及 R_{11} 係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 、 R_{10} 及 R_{11} 可鍵聯。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 、 R_{10} 及 R_{11} 可稠合。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 、 R_{10} 及 R_{11} 中之至少一者包括包含 CD 、 CD_2 或 CD_3 之烷基。該有機層較佳包含選自由化合物43-82組成之群之化合物。

在一個態樣中，該有機層為含有本文中所提供之化合物的發光層，其中該化合物為發光摻雜劑。該有機層可另外包含主體(host)。



該主體較佳具有下式：

。 R'_1 、 R'_2 、 R'_3 、 R'_4 、 R'_5 及 R'_6 可表示單、二、三或四取代；且 R'_1 、 R'_2 、 R'_3 、 R'_4 、 R'_5 及 R'_6 各獨立地選自由氫、烷基及芳基組成之群。該主體更佳為H1。

亦提供一種包含該裝置之消費型產品。該裝置包含陽極、陰極及

安置於該陽極與該陰極之間之有機層。該有機層包含含有具有如上所述之式I結構之配位體的化合物。

A及B可獨立地表示5員或6員芳環或雜芳環。A₁、A₂、B₁及B₂獨立地為C或N。R_A及R_B可表示單、二或三取代。X_A及X_B獨立地為C或雜原子。R_A、R_B、R₁及R₂係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。R_A、R_B、R₁及R₂中之至少一者包括CD、CD₂或CD₃。R_A、R_B、R₁及R₂中之至少一者較佳包括CD₃。R_A、R_B、R₁及R₂可鍵聯。R_A、R_B、R₁及R₂可稠合。該配位體係與具有大於40之原子量的金屬配位。

描述為包含具有式I之配位體之化合物的較佳芳環、金屬及取代基選擇亦較佳用於包含裝置之消費型產品，該裝置包括包含具有式I之配位體之化合物。該等選擇包括金屬M、環A及B以及取代基R_A、R_B、A₁、A₂、B₁、B₂、R₁及R₂之選擇。

【圖式簡單說明】

圖1顯示有機發光裝置。

圖2顯示不具有獨立電子傳輸層之倒置式有機發光裝置。

圖3顯示含有氬取代之配位體的通用結構。

圖4顯示例示性經甲基-d3取代之配位體。

【實施方式】

通常，OLED包含至少一個安置於陽極與陰極之間且與陽極及陰極電連接之有機層。當施加電流時，陽極將電洞注入有機層中且陰極將電子注入有機層中。所注入之電洞及電子各自朝帶相反電荷之電極遷移。當電子及電洞定域於同一分子上時，形成「激子」，其為具有激發態之定域電子-電洞對。當激子經由光發射機制弛豫時發光。在一些情況下，激子可定域於準分子或激發複合體上。亦可能出現諸如熱弛豫之非輻射機制，但通常視為不合需要。

如例如美國專利第4,769,292號(以全文引用的方式併入)中所揭示，最初OLED使用自單重態發光(「螢光」)之發光分子。螢光發射通常在小於10毫微秒之時間範圍(time frame)內發生。

最近，已顯示具有自三重態發光(「磷光」)之發光材料的OLED。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期, 4-6 (1999)(「Baldo-II」)，該等參考文獻係以全文引用的方式併入。美國專利第7,279,704號第5-6欄(以引用的方式併入)中更詳細地描述磷光。

圖1顯示有機發光裝置100。該等圖式未必按比例繪製。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、發光層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之複合陰極(compound cathode)。裝置100可藉由依次沈積所述各層來製造。US 7,279,704第6-10欄(以引用的方式併入)中更詳細地描述此等不同層之性質及功能以及實例材料。

可獲得此等層的更多實例。舉例而言，美國專利第5,844,363號(以全文引用的方式併入)中揭示可撓且透明之基板-陽極組合。如美國專利申請公開案第2003/0230980號(以全文引用的方式併入)中所揭示，p摻雜電洞傳輸層之實例為以50:1之莫耳比摻雜F₄-TCNQ之m-MTDATA。Thompson等人之美國專利第6,303,238號(以全文引用的方式併入)中揭示發光及主體(host)材料之實例。如美國專利申請公開案第2003/0230980號(以全文引用的方式併入)中所揭示，n摻雜電子傳輸層之實例為以1:1之莫耳比摻雜Li之BPhen。美國專利第5,703,436號及

第5,707,745號(以全文引用的方式併入)揭示陰極之實例，包括具有上覆透明、導電、濺鍍沈積之ITO層之金屬(諸如Mg:Ag)薄層的複合陰極。美國專利第6,097,147號及美國專利申請公開案第2003/0230980號(以全文引用的方式併入)更詳細地描述阻擋層之理論及用途。美國專利申請公開案第2004/0174116號(以全文引用的方式併入)中提供注入層之實例。保護層之描述可見於美國專利申請公開案第2004/0174116號，該案係以全文引用的方式併入。

圖2顯示倒置式OLED 200。該裝置包括基板210、陰極215、發光層220、電洞傳輸層225及陽極230。裝置200可由依次沈積所述各層來製造。因為最常見之OLED組態中陰極安置於陽極上方，而裝置200中陰極215安置於陽極230下方，所以裝置200可稱為「倒置式」OLED。類似於裝置100所描述之材料可用於裝置200之相應層中。圖2提供一個如何自裝置100之結構中省去一些層之實例。

圖1及2中說明之簡單層狀結構係作為非限制性實例提供，且應瞭解本發明之實施例可結合多種其他結構使用。所描述之具體材料及結構本質上為例示性的，且可使用其他材料及結構。可藉由以不同方式組合所述各種層來獲得功能性OLED，或可根據設計、效能及成本因素完全省去各層。亦可包括未具體描述之其他層。可使用除具體描述者以外的材料。儘管本文中所提供之許多實例將各種層描述為包含單一材料，但應瞭解亦可使用材料之組合，諸如主體及摻雜劑之混合物，或更一般地為混合物。該等層亦可具有各種次層。本文中指定給各種層之名稱並不意欲具有嚴格限制性。舉例而言，在裝置200中，電洞傳輸層225傳輸電洞且注入電洞至發光層220中，且可描述為電洞傳輸層或電洞注入層。在一個實施例中，OLED可描述為具有安置於陰極與陽極之間的「有機層」。舉例而言，就圖1及2而言，此有機層可包含單層，或另外包含多個不同有機材料層。

如諸如Friend等人之美國專利第5,247,190號(以全文引用的方式併入)中所揭示般，亦可使用並未具體描述之結構及材料，諸如包含聚合材料之 OLED(PLED)。另舉例而言，可使用具有單個有機層之 OLED。舉例而言，如Forrest等人之美國專利第5,707,745號(以全文引用的方式併入)中所述，可堆疊OLED。OLED結構可與圖1及2中所說明之簡單層狀結構存在偏差。舉例而言，基板可包括斜角反射面以改良外部耦合，諸如Forrest等人之美國專利第6,091,195號中所述之台式結構(mesa structure)，及/或Bulovic等人之美國專利第5,834,893號中所述之坑式結構(pit structure)，該等專利係以全文引用的方式併入。

除非另外指定，否則各種實施例之任何層均可藉由任何適合的方法來沈積。對於有機層，較佳方法包括諸如美國專利第6,013,982號及第6,087,196號(以全文引用的方式併入)中所述之熱蒸發、噴墨法(ink-jet)；諸如Forrest等人之美國專利第6,337,102號(以全文引用的方式併入)中所述之有機氣相沈積(OVPD)；及諸如美國專利申請案第10/233,470號(以全文引用的方式併入)中所述藉由有機蒸氣噴印(organic vapor jet printing, OVJP)進行沈積。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係在氮氣或惰性氛圍中進行。對於其他層，較佳方法包括熱蒸發。較佳圖案化方法包括經由遮罩沈積、冷熔接(諸如美國專利第6,294,398號及第6,468,819號中所述，以全文引用的方式併入)，及與諸如噴墨及OVJD之一些沈積方法聯合進行圖案化。亦可使用其他方法。可改質欲沈積之材料以使其與特定沈積法相容。舉例而言，可在小分子中使用分支或未分支且較佳含有至少3個碳之取代基(諸如烷基及芳基)以增強小分子進行溶液加工的能力。可使用具有20或20個以上碳的取代基，且3-20個碳為較佳範圍。因為不對稱材料可具有較低之再結晶傾向，所以具有不對稱結構之材料之溶液可加工性可比彼等具有對稱結構之材料更佳。

可使用樹狀體取代基來增強小分子進行溶液加工之能力。

可將根據本發明實施例製造之裝置併入多種消費型產品中，包括平板顯示器、電腦監視器、電視、廣告牌、用於室內或室外照明及/或發信號的燈、抬頭顯示器、全透視顯示器、可撓顯示器、雷射印表機、電話、行動電話、個人數位助理(PDA)、膝上型電腦、數位相機、攝錄像機、取景器、微顯示器、運載工具、大面積壁、劇場或運動場螢幕或招牌。可使用各種控制機構來控制根據本發明製造之裝置，包括被動式矩陣及主動式矩陣。許多裝置意欲在人類感覺舒適之溫度範圍內使用，諸如 18°C 至 30°C ，且更佳在室溫($20\text{-}25^{\circ}\text{C}$)下。

本文中描述之材料及結構可應用於除OLED以外之裝置中。舉例而言，諸如有機太陽能電池及有機光偵測器之其他光電裝置可使用該等材料及結構。更一般而言，諸如有機電晶體之有機裝置可使用該等材料及結構。

術語鹵基、鹵素、烷基、環烷基、烯基、炔基、芳烷基、雜環基、芳基、芳族基及雜芳基為此項技術中已知的，且在US 7,279,704第31-32欄(以引用的方式併入本文中)中予以定義。

如本文中所用，術語烷基、芳基及雜芳基亦包括氘以代替氫。舉例而言，烷基可包括 CH_3 或 CD_3 及 CH_2CH_3 或 CH_2CD_3 。類似地，芳基及雜芳基可包括經氘而非氫取代之芳族基。

文獻(參見例如美國公開案第2008/0194853號及美國專利第6,699,599號)中已報導以氫之同位素氘置換銻錯合物中之氫。值得注意的是，直接在環上之氘原子取代似乎不提供顏色調整。詳言之，發明者未瞭解到關於經氘原子取代之化合物的發光概況發生變化之任何報導。

亦已報導主體材料中之 CD_3 取代(參見WO 2008029670)。然而，發光摻雜劑之發光概況為化合物之重要性質，且主體材料之取代無法

提供任何關於顏色調整之資訊。特定而言，當本文中所提供之經修飾之化合物為主體材料而非發光材料時，不能評估氬取代對光致發光光譜(例如顏色調整性質)的效應。因此，可能需要具有甲基取代之有益性質(亦即顏色調整、改良之量子效率及改良之壽命)以及與氬有關之改良穩定性的發光化合物。

金屬錯合物之甲基取代已顯示適用於調整化合物之光物理及電致發光性質。舉例而言，在某些位置之甲基取代可有益於其改良量子效率、線形及改良OLED壽命之能力。

本文提供新穎化合物，該等化合物包含具有甲基-d3取代基之配位體(說明於圖3中)。此外，亦提供含有甲基-d3取代之特定配位體(說明於圖4中)。值得注意的是，所揭示之化合物可提供改良之光致發光及改良之裝置效率。

本文所提供之化合物包含具有甲基-d3取代之配位體。該等化合物宜用於OLED以使裝置具有改良之效率、長壽命及改良之顏色(例如顏色調整)。在不受理論限制的情況下，氬信 CD_3 取代基因有強C-D鍵而可改良穩定性。如上所討論，C-D鍵的強度大於C-H鍵的強度。另外，氬之較小凡得瓦爾(van der Waals)半徑可理解為較小的空間取代基(例如在鄰位含有 CD_3 取代基而非 CH_3 取代基之芳環上的扭曲較小)，且因此在具有 CD_3 取代之系統中之共軛獲得改良。此外，歸因於動力學同位素效應(kinetic isotope effect)，涉及存在於甲基-d3中之C-D鍵的化學過程的反應速率可能較慢。若發光化合物之化學降解涉及斷裂甲基C-H鍵，則較強C-D鍵可改良該化合物之穩定性。

甲基為加至化合物中作為修飾之最簡單的烷基取代。其可為修飾OLED中主體與發射體性質的極重要取代基團。甲基可影響固態填充性質(亦即昇華性質及電荷傳輸性質)，修飾光物理性質，且影響裝置穩定性。已引入甲基以改變參(2-苯基吡啶)銻(III)家族之性質。舉例

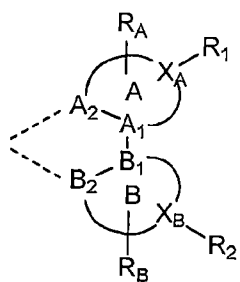
而言，以參(3-甲基-2-苯基吡啶)銻(III)作為發射體之裝置之穩定性優於以參(2-苯基吡啶)銻(III)作為發射體之裝置。此外，參(3-甲基-2-苯基吡啶)銻(III)之發射峰紅移約10 nm。參(3-甲基-2-苯基吡啶)銻(III)之蒸發溫度亦比參(2-苯基吡啶)銻(III)低約20度。

另一方面，因苯甲基質子，甲基亦被認為具有反應性。在不受理論限制下，存在於甲基中之氫原子可能尤其具有反應性，因此可能為發光化合物中之化學降解位點。另外，該領域中公認，在OLED工作期間，摻雜化合物被氧化。在氧化狀態下，苯甲基位置可能變成最弱的位置而進行進一步化學降解。當使用發光摻雜劑時，所提出之機制可能與某些主體(諸如聯伸三苯/DBT雜合材料)較多相關，而與其他主體(諸如Balq)較少相關。因此，甲基中氫原子以氘原子置換(甲基-d3)可穩定發光化合物。

因為氘原子質量為氫原子質量的兩倍，此產生較低零點能及較低振動能階，所以氘取代可改良效率及穩定性。另外，氘所涉及之化學鍵鍵長及鍵角不同於氫所涉及者。詳言之，由於C-D鍵比C-H鍵伸展幅度小，因此氘之凡得瓦爾半徑小於氫。C-D鍵一般比C-H鍵短且強。因此，CD₃取代可提供相同顏色調整及與鍵強度增加有關之所有優勢(亦即改良效率及壽命)。

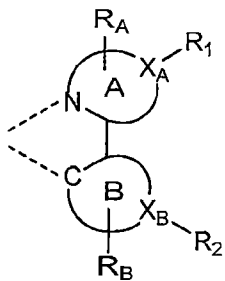
如上所討論，氘取代提供許多益處，例如增加效率及壽命。因此，包含具有氘取代之配位體的化合物宜用於有機發光裝置。該等化合物包括例如包含氘位於烷基鏈內(例如C(D)(H)CH₃、CD₂CH₃及CH₂CD₂CH₃)以及氘位於烷基鏈末端(例如CD₃)之配位體的化合物。

本文提供新穎化合物，該等化合物包含配位體，該配位體具有以下結構：



式I。A及B可獨立地表示5員或6員芳環或雜芳環。A較佳選自由咪唑、吡唑、三唑、噁唑、噁二唑、吡啶、噻嗪、嘧啶、吡嗪及三嗪組成之群。B較佳選自由苯、吡啶、呋喃、吡咯及噻吩組成之群。A₁、A₂、B₁及B₂獨立地為C或N。R_A及R_B可表示單、二或三取代。X_A及X_B獨立地為C或雜原子。R_A、R_B、R₁及R₂係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。R_A、R_B、R₁及R₂中之至少一者包括CD、CD₂或CD₃。R_A、R_B、R₁及R₂中之至少一者較佳包括CD₃。R_A、R_B、R₁及R₂可鍵聯。R_A、R_B、R₁及R₂可稠合。該配位體係與具有大於40之原子量的金屬配位。該金屬較佳為Ir。

在一個態樣中，該配位體具有以下結構：



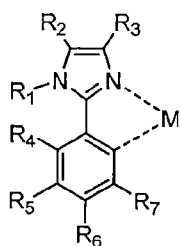
式Ia。

在一個態樣中，X_A及X_B獨立地為C或N，且當X_A為N時，R₁為芳基。在另一個態樣中，X_A及X_B獨立地為C或N，且當X_A為N時，R₁為苯基，進一步經由烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之基團取代，且其中該群包括CD、CD₂或CD₃中之至少一者。

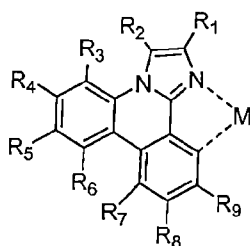
在一個態樣中，提供一類化合物，其中取代基R_A及R_B中之至少一者為直接連接至環A、環B之CD₃或結合或稠合至環A或環B之環。

如上所討論，取代基 R_A 及 R_B 可稠合至環A及/或環B。取代基 R_A 及 R_B 可為任何取代基，包括鍵聯、稠合至環A及/或環B或未稠合至環A及/或環B之取代基。

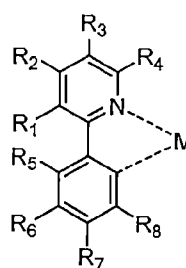
詳言之，提供包含配位體之化合物，其中該配位體係選自由以下組成之群：



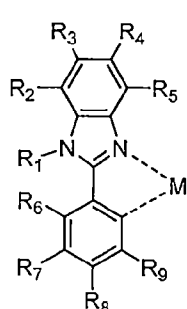
II



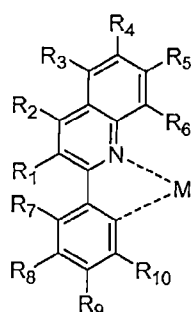
III



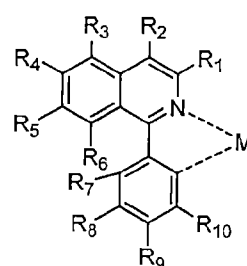
IV



V



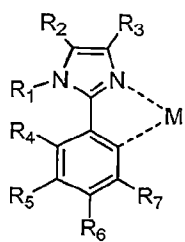
VI



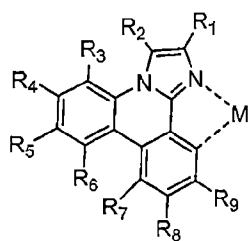
VII

R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 及 R_{10} 係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群；且 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 及 R_{10} 中之至少一者為 CD_3 。

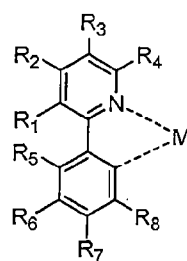
此外，提供包含配位體之化合物，其中該配位體係選自由以下組成之群：



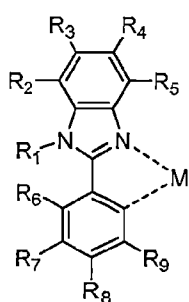
II



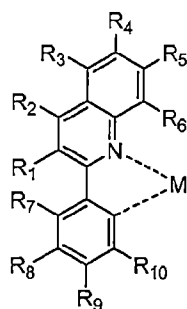
III



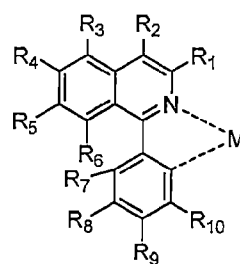
IV



V



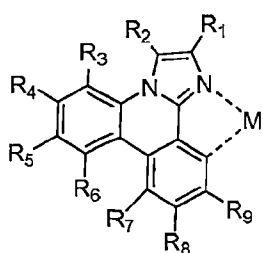
VI



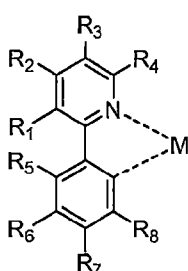
VII

R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 及 R_{10} 係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群；且 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 及 R_{10} 中之至少一者包括 CD_3 。

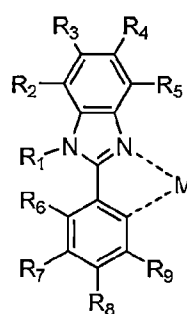
化合物包含選自由以下組成之群之配位體：



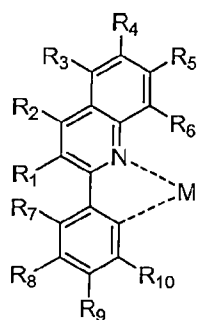
III



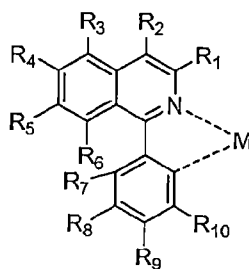
IV



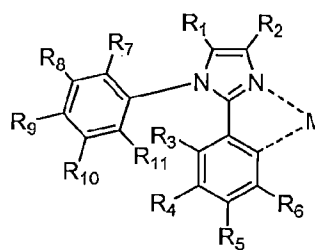
V



VI



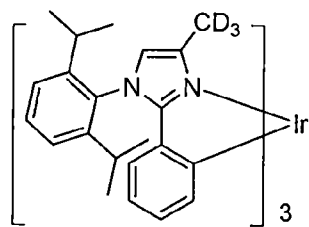
VII



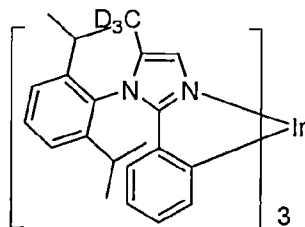
VIII

R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 、 R_{10} 及 R_{11} 係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群；且 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 、 R_{10} 及 R_{11} 可鍵聯。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 、 R_{10} 及 R_{11} 可耦合。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 、 R_6 、 R_7 、 R_8 、 R_9 、 R_{10} 及 R_{11} 中之至少一者包括包含CD、 CD_2 或 CD_3 之烷基。

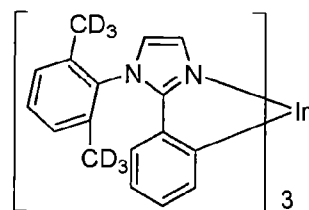
提供經甲基-d3取代之銥錯合物之特定實例，包括選自由以下組成之群之化合物：



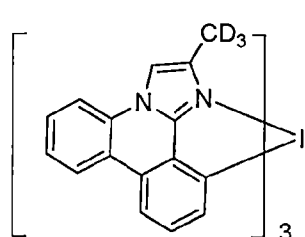
化合物2



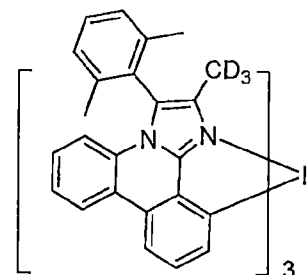
化合物3



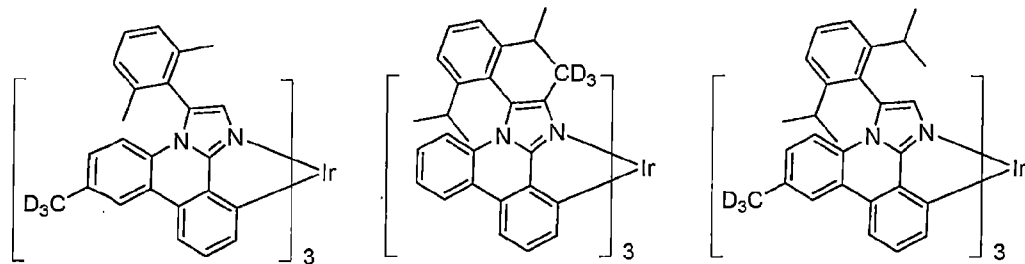
化合物4



化合物5



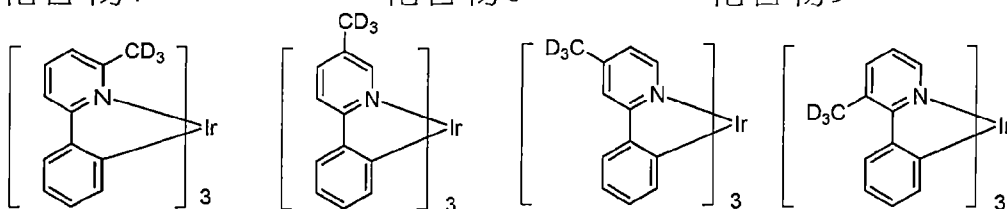
化合物6



化合物7

化合物8

化合物9

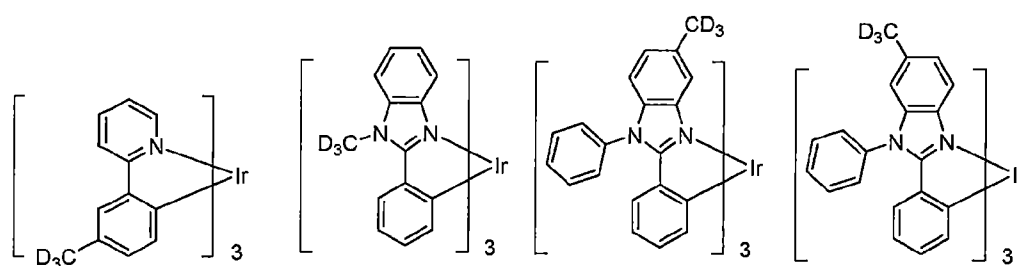


化合物10

化合物11

化合物12

化合物13

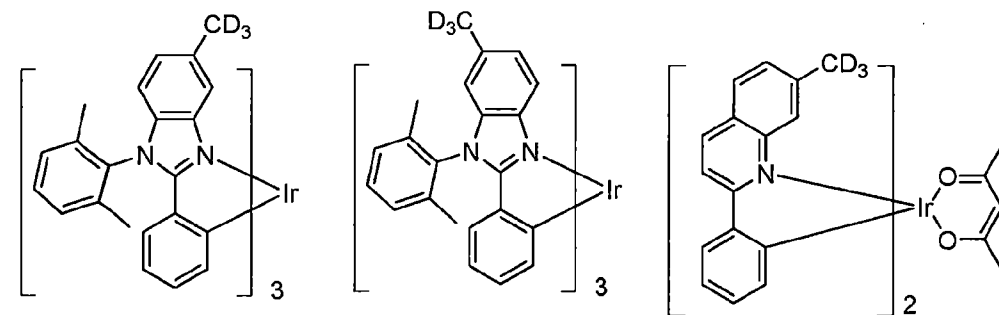


化合物14

化合物15

化合物16

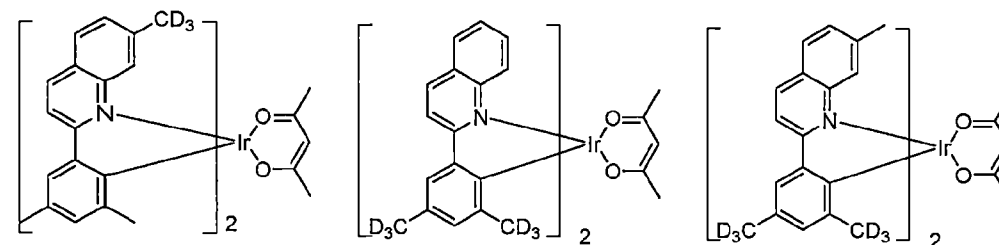
化合物17



化合物18

化合物19

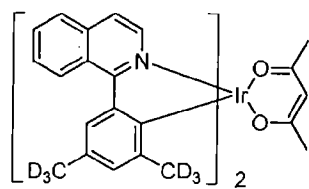
化合物20



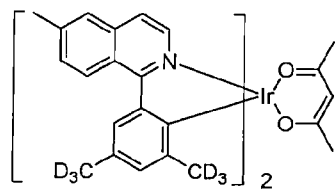
化合物21

化合物22

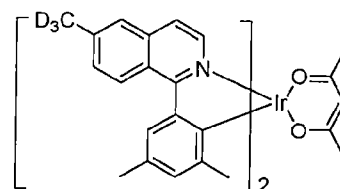
化合物23



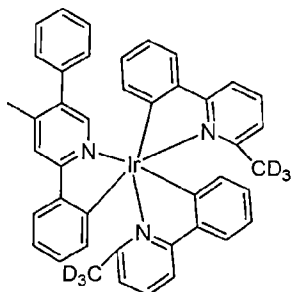
化合物24



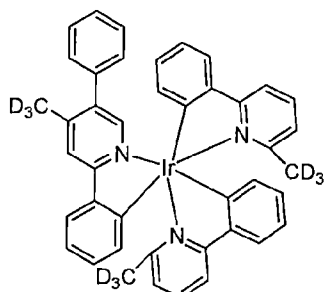
化合物25



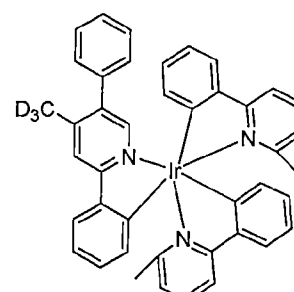
化合物26



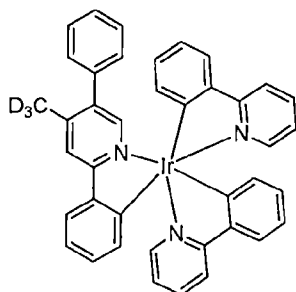
化合物27



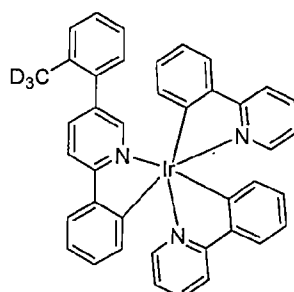
化合物28



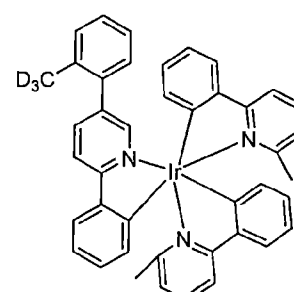
化合物29



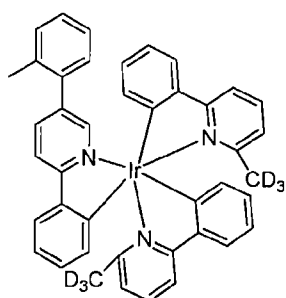
化合物30



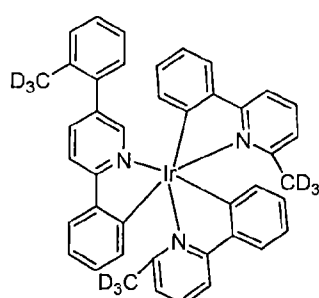
化合物31



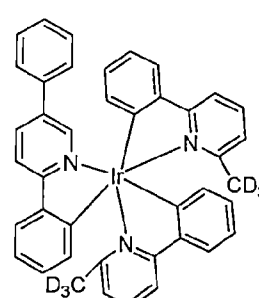
化合物32



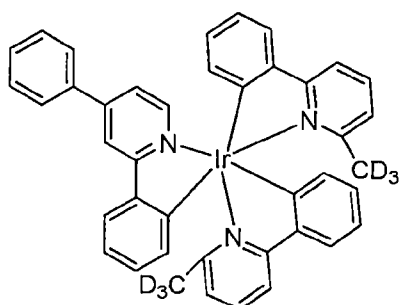
化合物33



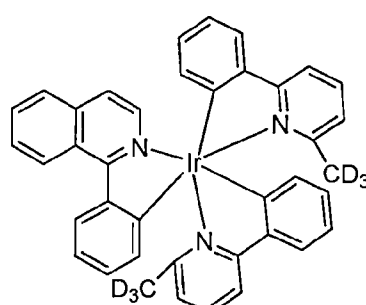
化合物34



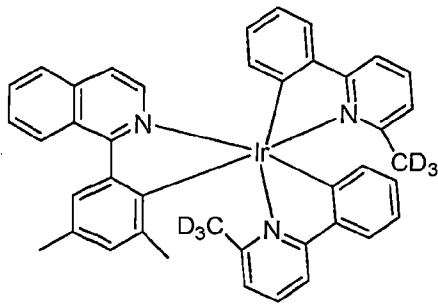
化合物35



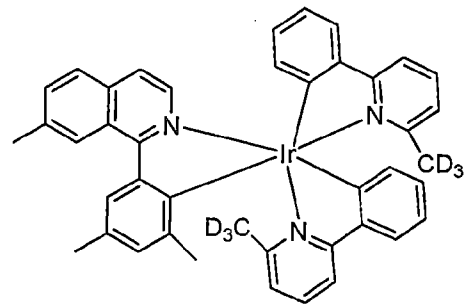
化合物36



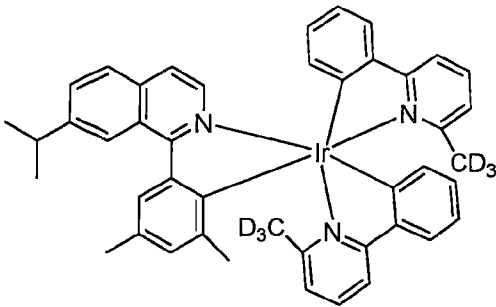
化合物37



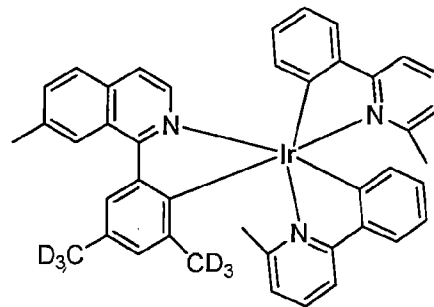
化合物38



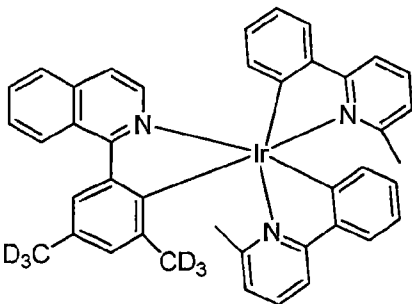
化合物39



化合物40

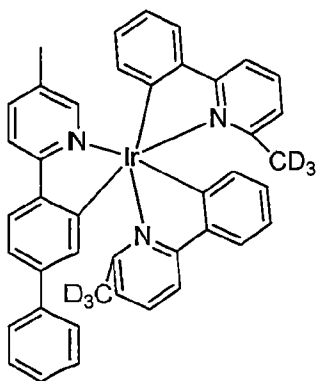


化合物41

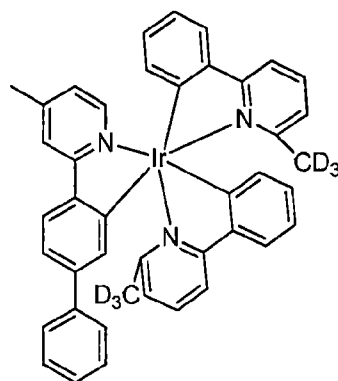


化合物42。

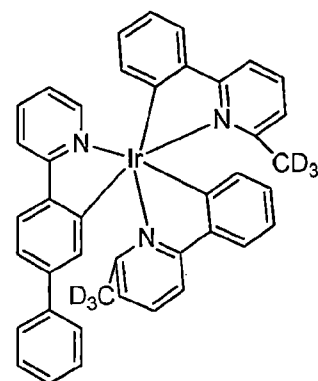
提供經氘取代之銥錯合物的其他特定實例，包括選自由以下組成之群之化合物：



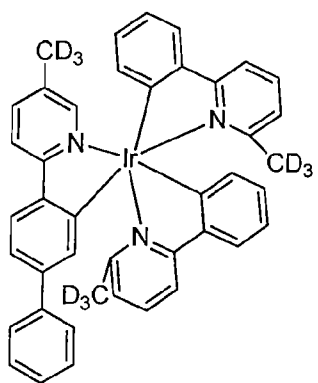
化合物43



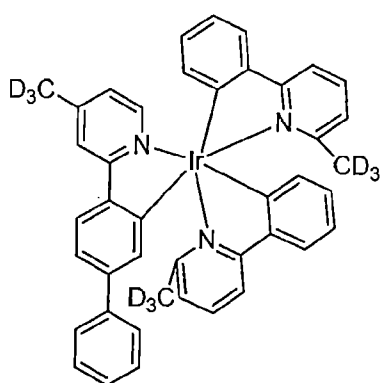
化合物44



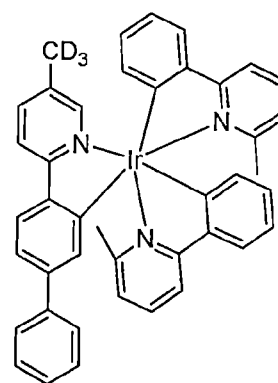
化合物45



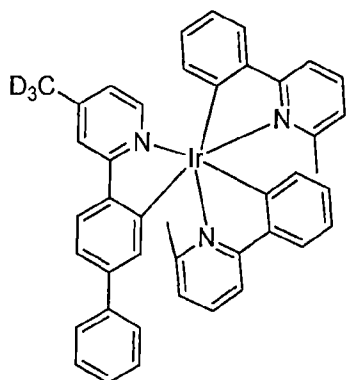
化合物46



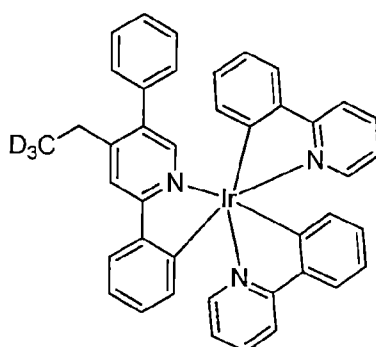
化合物47



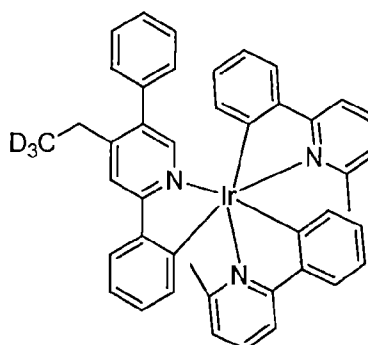
化合物48



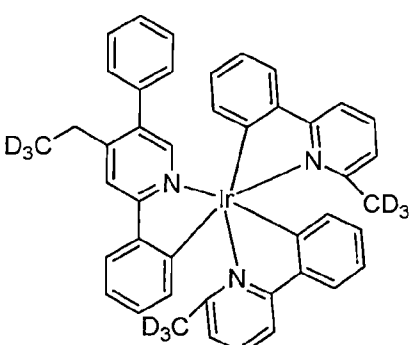
化合物49



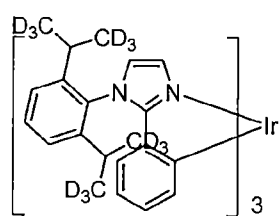
化合物50



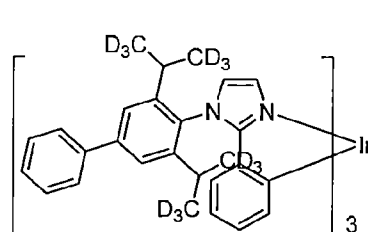
化合物51



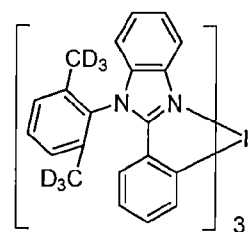
化合物52



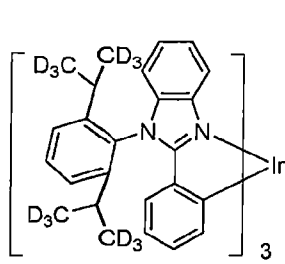
化合物53



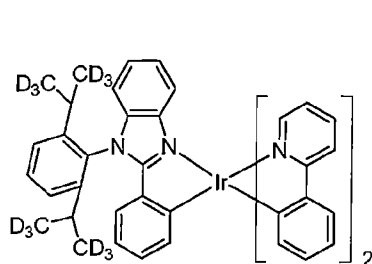
化合物54



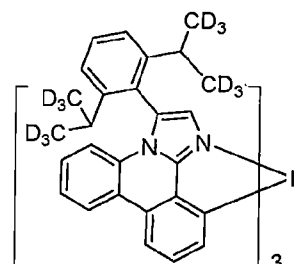
化合物55



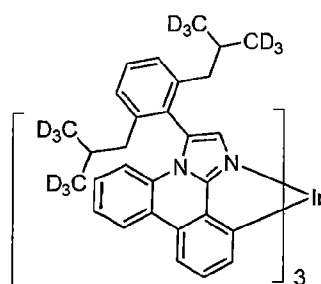
化合物 56



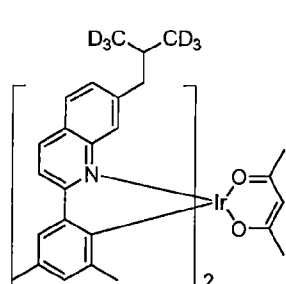
化合物 57



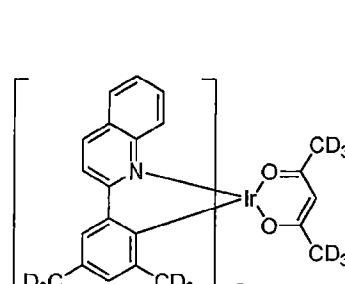
化合物 58



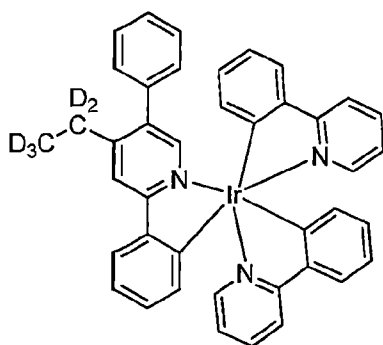
化合物 59



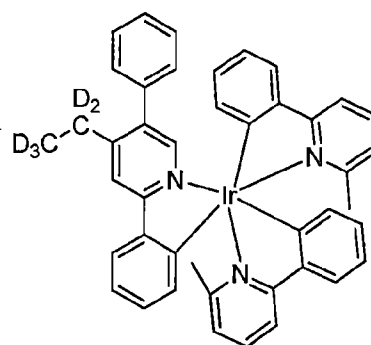
化合物 60



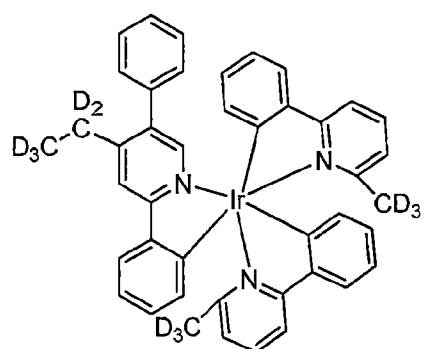
化合物 61



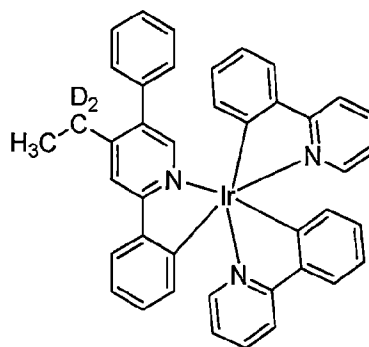
化合物 62



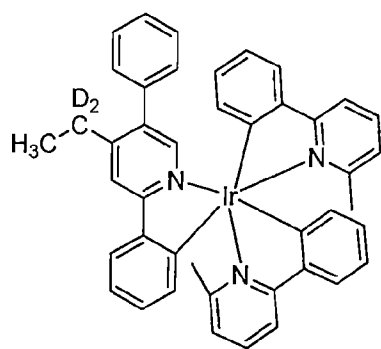
化合物 63



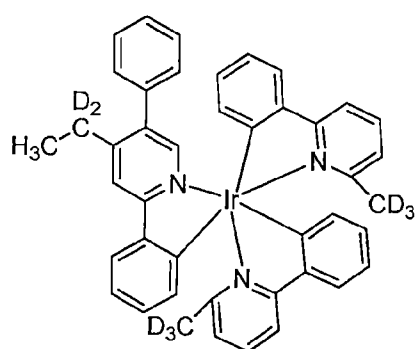
化合物 64



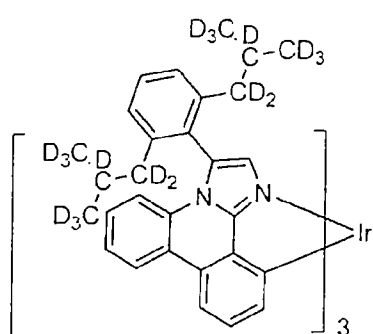
化合物 65



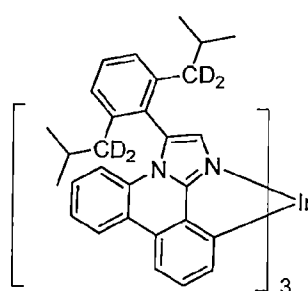
化合物66



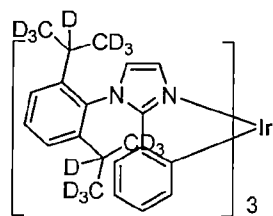
化合物67



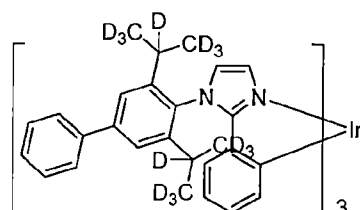
化合物69



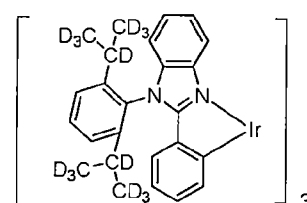
化合物70



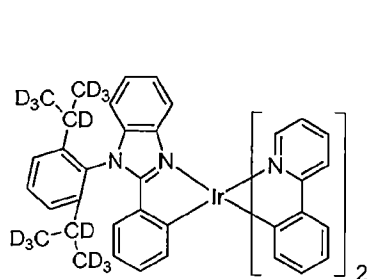
化合物71



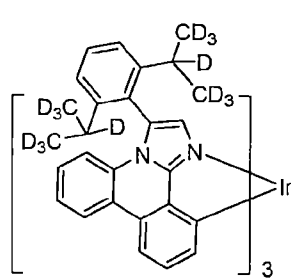
化合物72



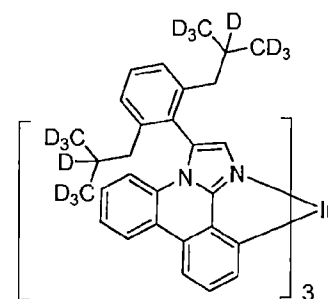
化合物73



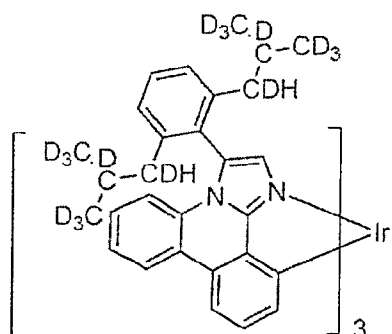
化合物74



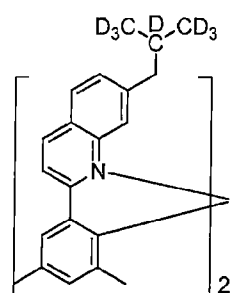
化合物75



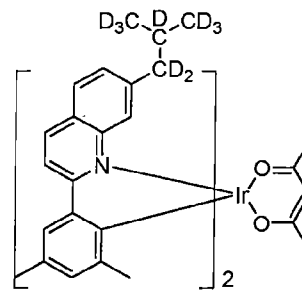
化合物76



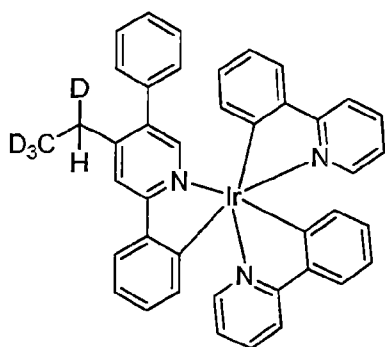
化合物77



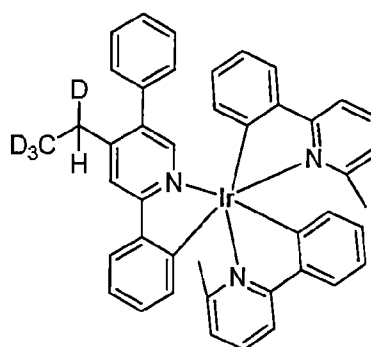
化合物78



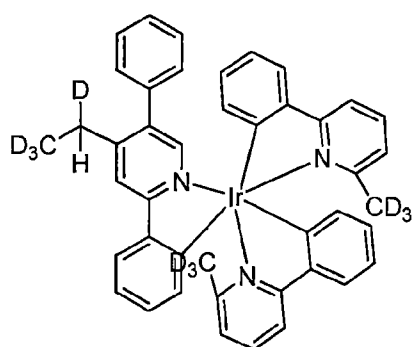
化合物79



化合物80



化合物81



化合物82。

在一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式II之配位體，例如化合物2-4。

在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式III之配位體，例如化合物5-9。

在另一個態樣中，提供包含具有式III之配位體的其他化合物，包括化合物58、59、68-70及75-77。

在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式IV之配位體，例如化合物10-14及27-40。

在另一個態樣中，提供包含具有式IV之配位體的其他化合物，包括化合物43-52、62-67及80-82。

在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式V之配位體，例如化合物15-19。

在另一個態樣中，提供包含具有式V之配位體的其他化合物，包括化合物55-57、73及74。

在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式VI之配位體，例如化合物20-23。

在另一個態樣中，提供包含具有式VI之配位體的其他化合物，包括化合物60、61、78及79。

在另一個態樣中，提供一類化合物，其中化合物包含具有式VII之配位體，例如化合物24-26、41及42。

在另一個態樣中，提供包含具有式III之配位體的化合物，包括化合物53、54、71及72。

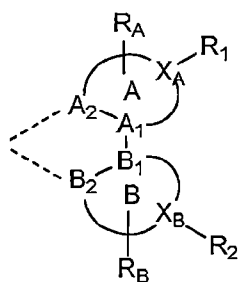
包含具有選自式II、式III、式IV、式V、式VI及式VII之式之配位體的化合物可為特別穩定之摻雜化合物。

另外，包含具有式VIII之配位體的化合物亦可為特別穩定之化合物。

在一個態樣中，提供含有 CD_3 之均配化合物。特定言之，提供一類化合物，其中具有式I之配位體為均配化合物中之配位體。本文中所提供之均配化合物包括例如化合物2-19。在另一個態樣中，提供含有 CD_3 之雜配化合物。特定言之，提供一類化合物，其中具有式I之配位體為雜配化合物中之配位體。本文中所提供之雜配化合物包括例如化合物20-42。含有 CD_3 之雜配化合物可包括具有發光配位體及不發光配位體之化合物，諸如含有兩個發光配位體及一個乙醯丙酮配位體之化合物20-26。此外，含有 CD_3 之雜配化合物可包括其中所有配位體為

發光配位體且該等發光配位體具有不同結構之化合物。在一個態樣中，含有 CD_3 之雜配化合物可具有2個包括 CD_3 之發光配位體及一個不含 CD_3 之發光配位體。舉例而言，化合物27、33、35-40。在另一個態樣中，含有 CD_3 之雜配化合物可具有1個包括 CD_3 之發光配位體及2個不含 CD_3 之發光配位體。舉例而言，化合物29-32、41及42。包括 CD_3 之發光配位體可包括單個 CD_3 基團(例如化合物29-32)，或該配位體可包括數個 CD_3 基團(例如化合物41及42含有一個具有2個 CD_3 取代基之發光配位體)。在另一個態樣中，含有 CD_3 之雜配化合物可含有2種或2種以上不同類型的發光配位體，其中所有配位體均含有 CD_3 。舉例而言，化合物28及34。

另外，提供一種有機發光裝置。該裝置包含陽極、陰極及安置於該陽極與該陰極之間的有機發光層。該有機層包含含有配位體之化合物，該配位體具有以下結構：

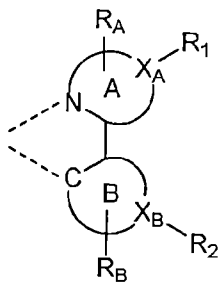


式I，如上所述。描述為包含具有式I之配位體之化合物的較佳芳環、金屬及取代基選擇亦較佳用於包括包含具有式I之配位體之化合物的裝置。該等選擇包括金屬M、環A及B以及取代基 R_A 、 R_B 、 A_1 、 A_2 、 B_1 、 B_2 、 R_1 及 R_2 之選擇。

A及B可獨立地表示5員或6員芳環或雜芳環。A較佳選自由咪唑、吡唑、三唑、噁唑、噁二唑、吡啶、噻吩、嘧啶、吡嗪及三嗪組成之群。B較佳選自由苯、吡啶、呋喃、吡咯及噻吩組成之群。 A_1 、 A_2 、 B_1 及 B_2 獨立地為C或N。 R_A 及 R_B 可表示單、二或三取代。 X_A 及 X_B 獨立地為C或雜原子。 R_A 、 R_B 、 R_1 及 R_2 係獨立地選自由氫、烷基、烷氧

基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。R_A、R_B、R₁及R₂中之至少一者包括CD、CD₂或CD₃。R_A、R_B、R₁及R₂中之至少一者較佳包括CD₃。R_A、R_B、R₁及R₂可鍵聯。R_A、R_B、R₁及R₂可稠合。該配位體係與具有大於40之原子量的金屬配位。該金屬較佳為Ir。

在一個態樣中，該配位體具有以下結構：



式Ia。

在一個態樣中，X_A及X_B獨立地為C或N，且當X_A為N時，R₁為芳基。在另一個態樣中，X_A及X_B獨立地為C或N，且當X_A為N時，R₁為苯基，進一步經由烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之基團取代，且其中該群包括CD、CD₂或CD₃中之至少一者。

在一個態樣中，提供一類化合物，其中取代基R_A及R_B中之至少一者為直接連接至環A、環B之CD₃或結合或稠合至環A或環B之環。

如上所討論，取代基R_A及R_B可稠合至環A及/或環B。取代基R_A及R_B可為任何取代基，包括鍵聯、稠合至環A及/或環B或未稠合至環A及/或環B之取代基。

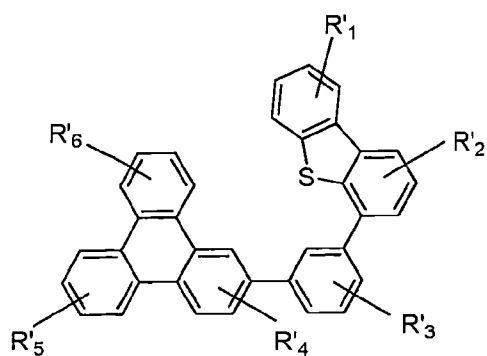
詳言之，該裝置之有機層包含具有選自由式II-VII組成之群之配位體的化合物。R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉及R₁₀係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉及R₁₀中之至少一者為CD₃。該有機層較佳包含選自由化合物2-42組成之群之化合

物。

另外，該裝置之有機層包含具有選自由式II-VII組成之群之配位體的化合物。R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉及R₁₀係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉及R₁₀中之至少一者包括CD₃。

此外，該裝置之有機層可包含選自由式III-VIII組成之群之配位體的化合物。R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉、R₁₀及R₁₁係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉、R₁₀及R₁₁可鍵聯。R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉、R₁₀及R₁₁可稠合。R₁、R₂、R₃、R₄、R₅、R₆、R₇、R₈、R₉、R₁₀及R₁₁中之至少一者包括包含CD、CD₂或CD₃之烷基。該有機層較佳包含選自由化合物43-82組成之群之化合物。

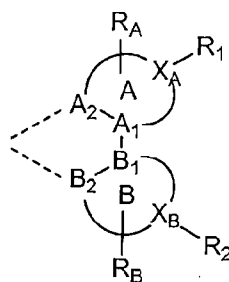
在一個態樣中，該有機層為含有所提供的具有式I之配位體之化合物的發光層，其中該化合物為發光摻雜劑。該有機層可另外包含主體。該主體較佳具有下式：



。R'₁、R'₂、R'₃、R'₄、R'₅及R'₆可表示單、二、三或四取代；且R'₁、R'₂、R'₃、R'₄、R'₅及R'₆各獨立地選自由氫、烷基及芳基組成之群。該主體更佳為H1。

亦提供一種包含該裝置之消費型產品。該裝置包含陽極、陰極及

安置於該陽極與該陰極之間之有機層。該有機層包含含有配位體之化



合物，該配位體具有以下結構：

式I，如上所述。描述為

包含具有式I之配位體之化合物的較佳芳環、金屬及取代基選擇亦較佳用於包括包含具有式I之配位體之化合物的裝置。該等選擇包括金屬M、環A及B以及取代基 R_A 、 R_B 、 A_1 、 A_2 、 B_1 、 B_2 、 R_1 及 R_2 之選擇。

A及B可獨立地表示5員或6員芳環或雜芳環。A較佳選自由咪唑、吡唑、三唑、噁唑、噁二唑、吡啶、噻嗪、嘧啶、吡嗪及三嗪組成之群。B較佳選自由苯、吡啶、呋喃、吡咯及噻吩組成之群。 A_1 、 A_2 、 B_1 及 B_2 獨立地為C或N。 R_A 及 R_B 可表示單、二或三取代。 X_A 及 X_B 獨立地為C或雜原子。 R_A 、 R_B 、 R_1 及 R_2 係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群。 R_A 、 R_B 、 R_1 及 R_2 中之至少一者包括CD、 CD_2 或 CD_3 。 R_A 、 R_B 、 R_1 及 R_2 中之至少一者較佳包括 CD_3 。 R_A 、 R_B 、 R_1 及 R_2 可鍵聯。 R_A 、 R_B 、 R_1 及 R_2 可稠合。該配位體係與具有大於40之原子量的金屬配位。該金屬較佳為Ir。

在一個態樣中， X_A 及 X_B 獨立地為C或N，且當 X_A 為N時， R_1 為芳基。在另一個態樣中， X_A 及 X_B 獨立地為C或N，且當 X_A 為N時， R_1 為苯基，進一步經由烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之基團取代，且其中該群包括CD、 CD_2 或 CD_3 中之至少一者。

該消費型產品可包含另外包含有機層的裝置，該有機層含有包含

配位體之化合物，該配位體具有選自由式II-VII組成之群的結構。詳言之，該化合物可選自由化合物2-42組成之群。

此外，該裝置之有機層可包含具有選自由式III-VIII組成之群之配位體的化合物。該有機層較佳包含選自由化合物43-82組成之群之化合物。

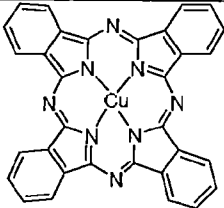
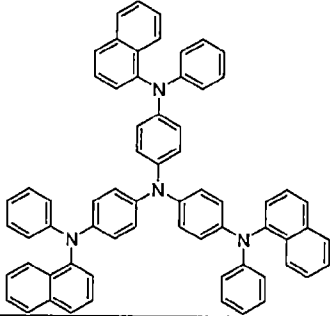
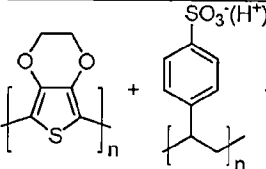
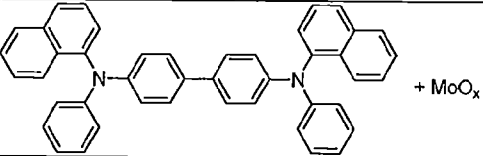
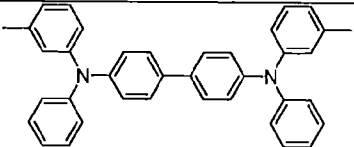
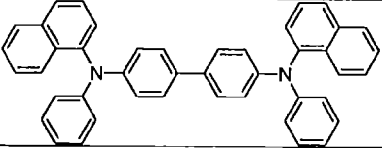
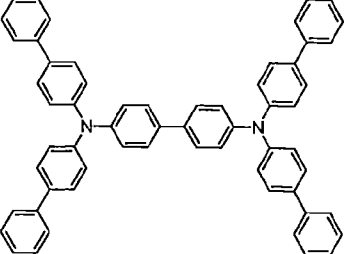
在一個態樣中，提供包含該裝置之特定消費型產品。該裝置較佳含有一類化合物，其中取代基 R_A 及 R_B 中之至少一者為直接連接至環A、環B之 CD_3 或結合或稠合至環A或環B之環。

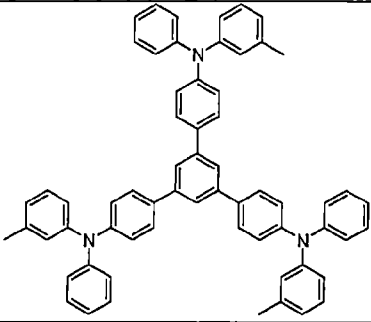
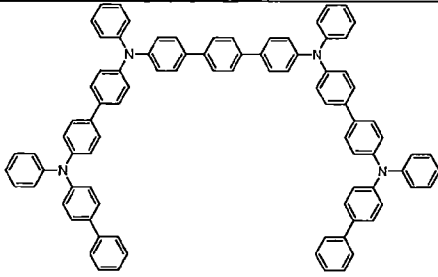
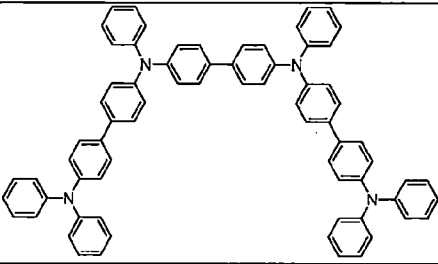
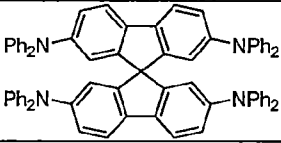
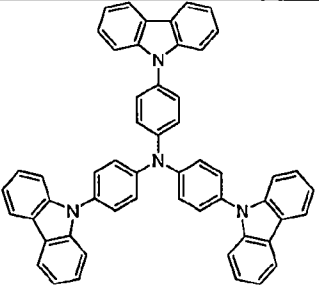
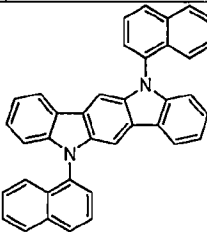
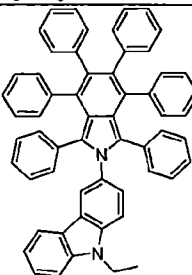
如上所討論，取代基 R_A 及 R_B 可稠合至環A及/或環B。取代基 R_A 及 R_B 可為任何取代基，包括鍵聯、稠合至環A及/或環B或未稠合至環A及/或環B之取代基。

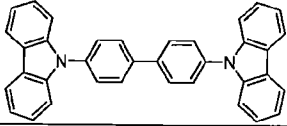
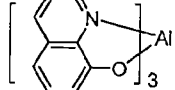
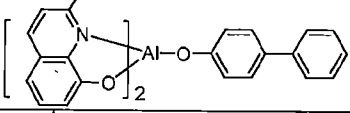
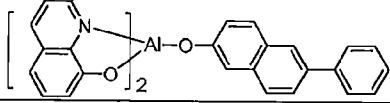
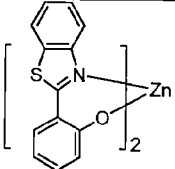
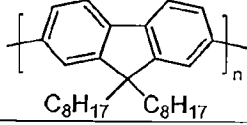
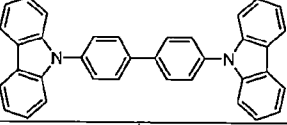
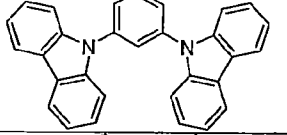
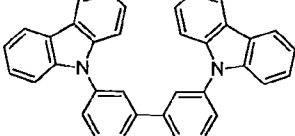
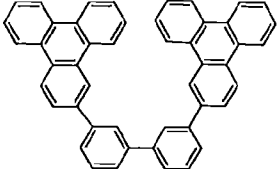
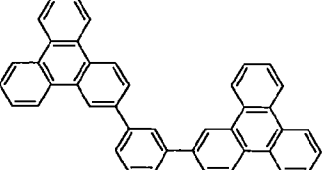
本文中所描述在有機發光裝置中適用於特定層之材料可與存在於該裝置中之多種其他材料組合使用。舉例而言，本文中所揭示之發光摻雜劑可與多種主體、傳輸層、阻擋層、注入層、電極及其他可能存在之層結合使用。下文所描述或提及之材料為可適用於與本文中所揭示之化合物組合之材料的非限制性實例，且熟習此項技術者可輕易地查閱文獻以鑑別可適用於組合之其他材料。

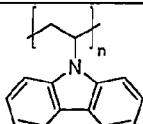
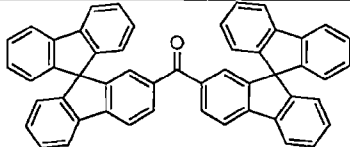
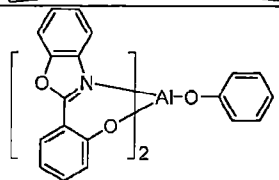
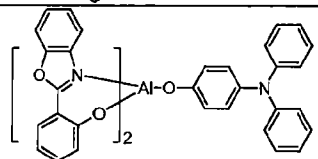
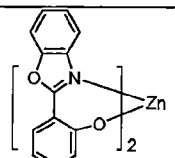
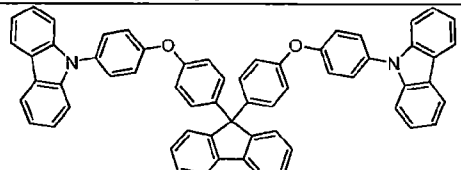
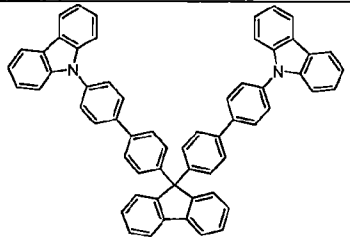
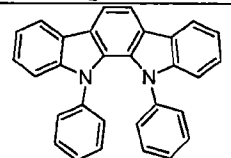
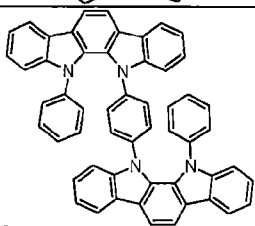
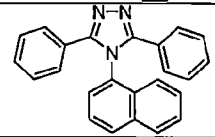
除本文中所揭示之材料之外及/或與本文中所揭示之材料組合，許多電洞注入材料、電洞傳輸材料、主體材料、摻雜材料、激子/電洞阻擋層材料、電子傳輸及電子注入材料可用於OLED中。可與本文中所揭示之材料組合用於OLED中之材料的非限制性實例列於下表1中。表1列出材料之非限制性種類、各類化合物之非限制性實例及揭示該等材料之參考文獻。

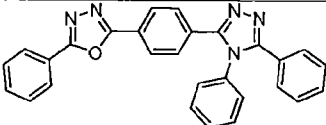
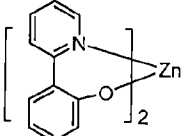
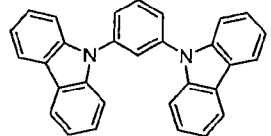
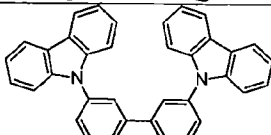
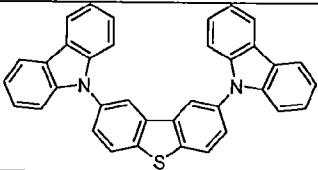
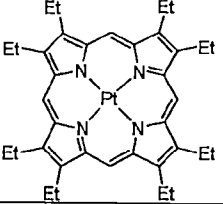
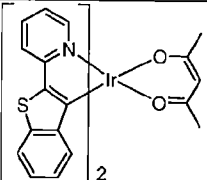
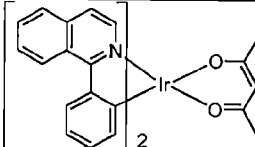
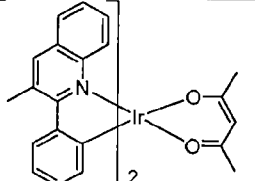
表1

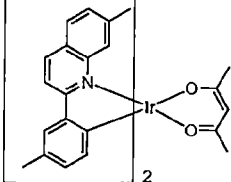
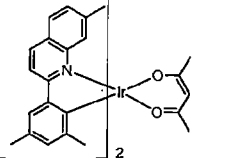
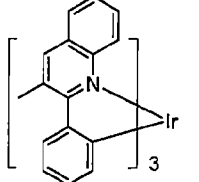
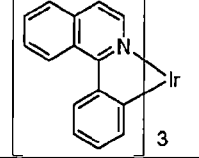
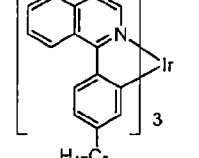
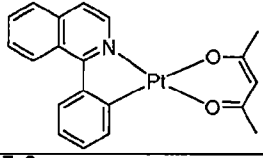
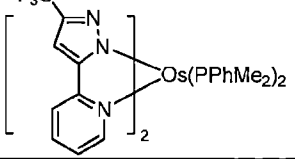
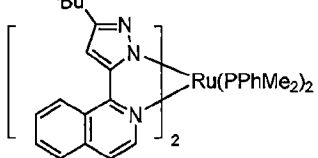
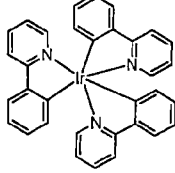
材料	材料實例	出版物
電洞注入材料		
酞菁及卟啉化合物		Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)
星爆式(starburst)三芳基胺		J. Lumin. 72-74, 985 (1997)
CF _x 氟代烴聚合物	$\left[-\text{CH}_2\text{F}_y \right]_n$	Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)
導電聚合物(例如 PEDOT:PSS、聚苯胺、聚噻吩)		Synth. Met. 87, 171 (1997)
與諸如氧化鋁及氧化鎢之金屬氧化物錯合之芳基胺		SID Symposium Digest, 37, 923 (2006)
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

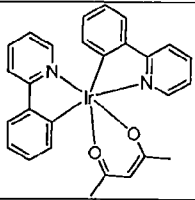
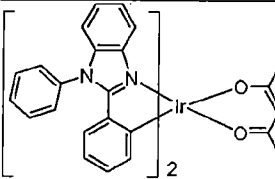
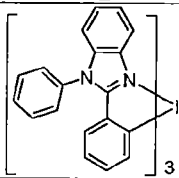
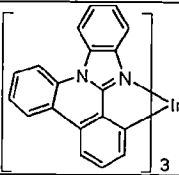
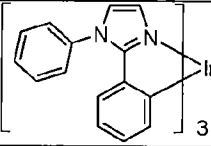
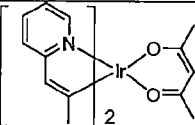
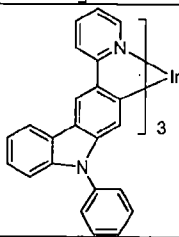
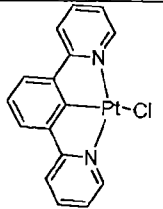
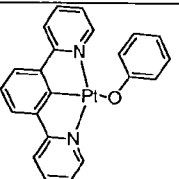
材料	材料實例	出版物
		J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
螺萸核心上之三芳基胺		Synth. Met. 91, 209 (1997)
芳基胺咪唑化合物		Adv. Mater. 6, 677 (1994)
吡啶并咪唑		Synth. Met. 111, 421 (2000)
異吡啶化合物		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)

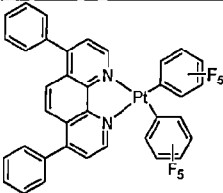
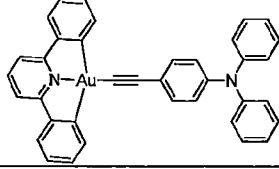
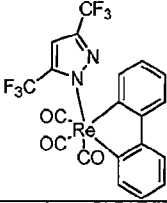
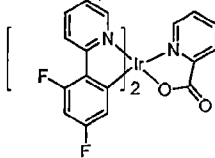
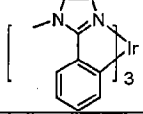
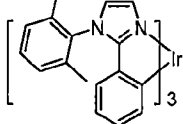
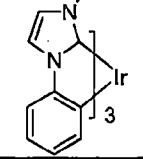
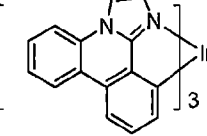
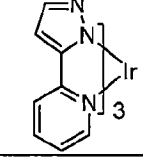
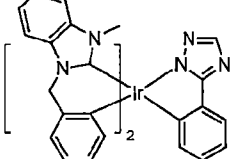
材料	材料實例	出版物
磷光OLED主體材料		
紅光主體		
芳基咔唑		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
8-羥基喹啉金屬鹽(例如Alq ₃ 、BAIq)		Nature 395, 151 (1998)
		US 20060202194
		WO 2005014551
金屬苯氧基苯并噻唑化合物		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
共軛寡聚物及聚合物(例如聚萘)		Org. Electron. 1, 15 (2000)
綠光主體		
芳基咔唑		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US 2003175553
		WO 2001039234
芳基聯伸三苯化合物		US 20060280965
		US 20060280965

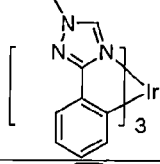
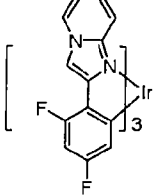
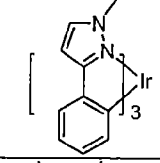
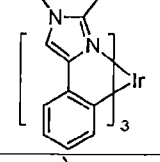
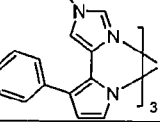
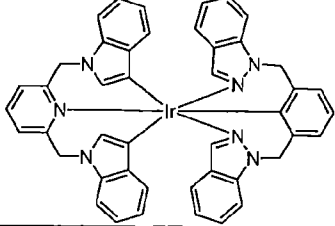
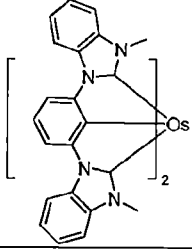
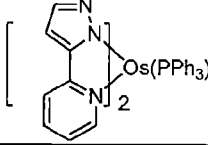
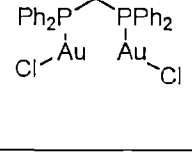
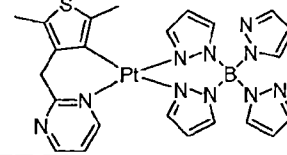
材料	材料實例	出版物
聚合物(例如PVK)		Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)
螺萘化合物		WO 2004093207
金屬苯氧基苯并噁唑 化合物		WO 05089025
		WO 06132173
		JP 200511610
螺萘-咪唑化合物		JP 2007254297
		JP 2007254297
吲哚并咪唑		WO 07063796
		WO 07063754
5員環缺電子雜環(例如 三唑、噁二唑)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)

材料	材料實例	出版物
		WO 04107822
金屬苯氧基吡啶化合物		WO 05030900
藍光主體		
芳基咪唑		Appl. Phys. Lett, 82, 2422 (2003)
		US 20070190359
二苯并噻吩-咪唑化合物		WO 2006114966
磷光摻雜劑		
紅光摻雜劑		
重金屬卟啉(例如 PtOEP)		Nature 395, 151 (1998)
銱(III)有機金屬錯合物		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US 06835469
		US 06835469

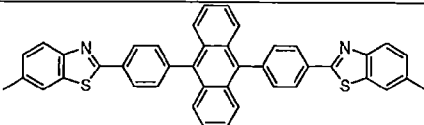
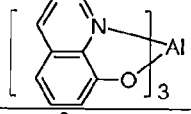
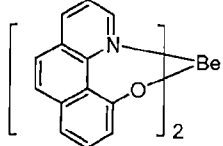
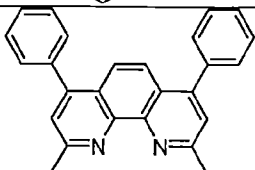
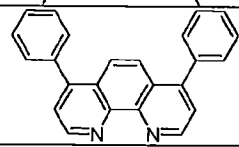
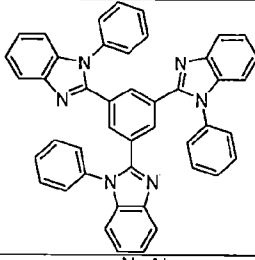
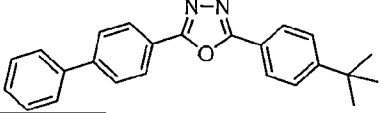
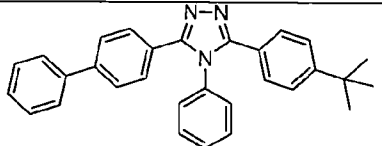
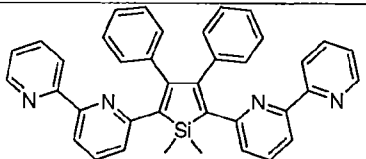
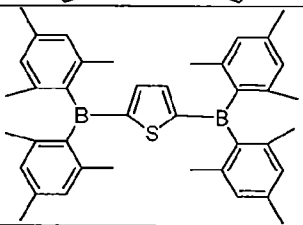
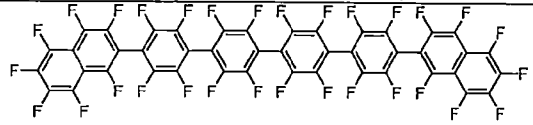
材料	材料實例	出版物
		US 20060202194
		US 20060202194
		US 07087321
		US 07087321
		Adv. Mater. 19, 739 (2007)
鉑(II)有機金屬錯合物		WO 2003040257
鐵(III)錯合物		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)
鈥(II)錯合物		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
綠光摻雜劑		
鈱(III)有機金屬錯合物	 <p data-bbox="774 1859 957 1892">及其衍生物</p>	Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)

材料	材料實例	出版物
		US 2002034656
		US 06687266
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)
		US 2007190359
		US 2006008670 JP 2007123392
		Adv. Mater. 16, 2003 (2004)
		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
鉑(II)有機金屬錯合物		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)

材料	材料實例	出版物
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
金錯合物		Chem. Commun. 2906 (2005)
銻(III)錯合物		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
藍光摻雜劑		
銻(III)有機金屬錯合物		WO 2002002714
		WO 2006009024
		US 2006251923
		WO 2006056418、US 2005260441
		US 2007190359
		US 2002134984
		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)

材料	材料實例	出版物
		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)
		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)
		WO 05123873
		WO 05123873
		WO 07004380
		WO 06082742
鐵(II)錯合物		US 2005260449
		Organometallics 23, 3745 (2004)
金錯合物		Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)
鉑(II)錯合物		WO 06098120、 WO 06103874

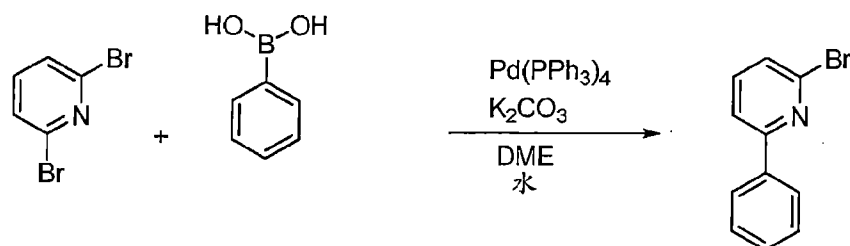
材料	材料實例	出版物
激子/電洞阻擋層材料		
浴銅靈(bathocuprine) 化合物(例如BCP、BPhen)		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
8-羥基喹啉金屬鹽(例如BAIq)		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
5員環缺電子雜環(諸如三唑、噁二唑、咪唑、苯并咪唑)		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
聯伸三苯化合物		US 20050025993
氟化芳族化合物		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)
電子傳輸材料		
蔥-苯并咪唑化合物		WO 03060956

材料	材料實例	出版物
蔥-苯并噻啉化合物		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
8-羥基喹啉金屬鹽(例如Alq ₃)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)
羥基苯并喹啉金屬鹽		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
浴靈銅化合物(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)
矽羅(silole)化合物		Org. Electron. 4, 113 (2003)
芳基硼烷化合物		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714 (1998)
氟化芳族化合物		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)

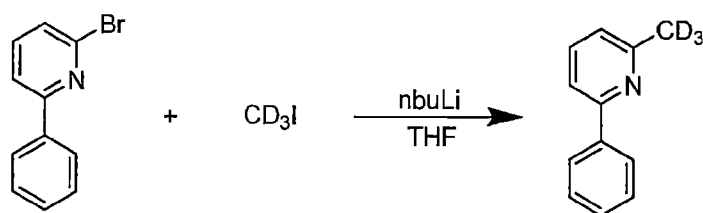
實驗

化合物實例

實例1. 合成化合物10

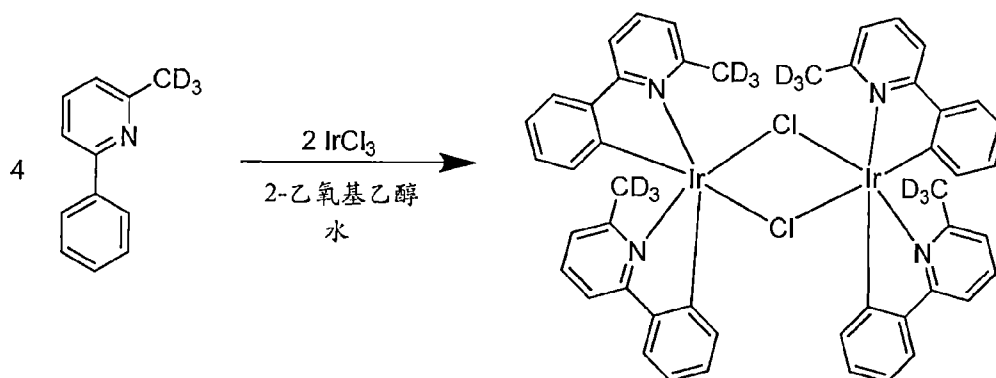


合成2-溴-6-苯基吡啶。在配備有冷凝器、氮氣入口及2個塞子之3頸1 L圓底燒瓶中添加含2,6-二溴吡啶(15.3 g, 64.58 mmol)、苯基硼酸(7.87 g, 64.58 mmol)及碳酸鉀(17.85 g, 129.16 mmol)之二甲氧基乙烷(228 mL)及水(150 mL)。將氮氣直接鼓泡至混合物中維持15分鐘。添加肆(三苯基膦)鈀(0)(1.85 g, 1.60 mmol)，且加熱反應混合物至回流。加熱3小時後，反應完成。冷卻至室溫，且以水及乙酸乙酯稀釋。分離各層且以乙酸乙酯萃取水層。經硫酸鎂乾燥有機層，過濾且蒸發。利用管柱層析以2%乙酸乙酯/己烷溶離純化物質，隨後使用Kugelrohr真空蒸餾，收集150°C下之產物。獲得5.2 g產物(34%)。

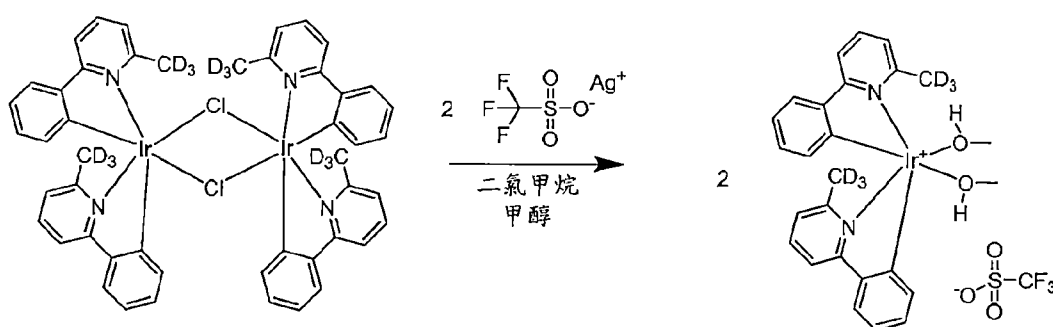


合成2-苯基-6-甲基-d₃-吡啶。在真空下藉由空氣加熱槍(heat gun)加熱乾燥配備有滴液漏斗、氮氣入口及塞子之3頸500 mL圓底燒瓶。向冷卻之乾燥燒瓶中添加2-溴-6-苯基吡啶(11.3 g, 48.27 mmol)及100 mL無水THF。在氮氣下，在乾冰/丙酮浴中冷卻溶液，且逐滴添加碘甲烷-d₃(6 mL, 96.54 mmol)。冷攪拌溶液1小時，隨後溫至室溫後隔

夜。以水稀釋，且以乙酸乙酯萃取兩次。經硫酸鎂乾燥有機層，過濾且蒸發。利用管柱層析以2%乙酸乙酯/己烷溶離兩次純化粗物質。獲得5.8 g 2-苯基-6-甲基-d3-吡啶(70%)。

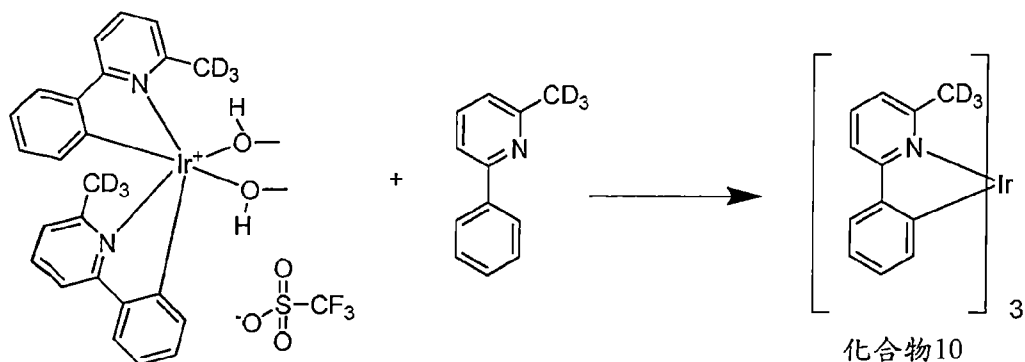


合成二聚體。在氮氣下加熱2-苯基-6-甲基(d₃)吡啶(1.65 g, 9.58 mmol)、氯化銱(1.6 g, 4.35 mmol)及30 mL 2-乙氧基乙醇之混合物至回流後隔夜。冷卻混合物至室溫，且濾出紅色固體。以甲醇及己烷洗滌固體且在通風櫥中風乾。獲得1.09 g二聚體產物(44%)，其可按原樣用於下一步驟中。



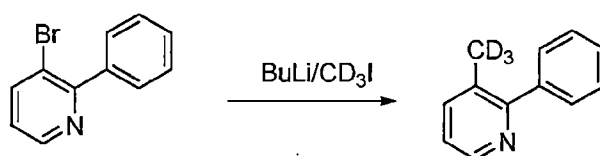
合成三氟甲磺酸鹽中間體。在250 mL圓底燒瓶中準備二聚體(1.09 g, 0.956 mmol)及125 mL二氯甲烷之混合物。向該紅色混合物中添加三氟甲磺酸銀(0.51 g, 2.00 mmol)之甲醇(10 mL)溶液，且混合物變綠。在室溫下在氮氣中，攪拌燒瓶之內容物隔夜。經矽藻土墊過濾混合物，且以二氯甲烷沖洗矽藻土。蒸發濾液，得到綠黃色固體。在高真空下乾燥固體。獲得1 g固體(71%)且按原樣用於下一步反應

中。

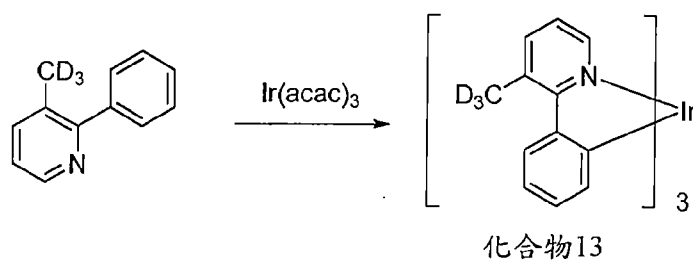


合成化合物10。在50 mL玻璃管中添加三氟甲磺酸鹽錯合物(1 g, 1.3 mmol)及2-苯基-6-甲基(d_3)吡啶(0.7 g, 4.0 mmol)且抽空該管並重新裝入氬氣。重複該程序，且隨後在氬氣下加熱該管至200°C後隔夜。冷卻該管，且添加二氯甲烷以溶解物質以便轉移至燒瓶中。利用管柱層析以20%、40%及50%二氯甲烷/己烷溶離純化粗物質，隨後在250°C下昇華。昇華後獲得0.58 g產物(63%)。

實例2. 合成化合物13

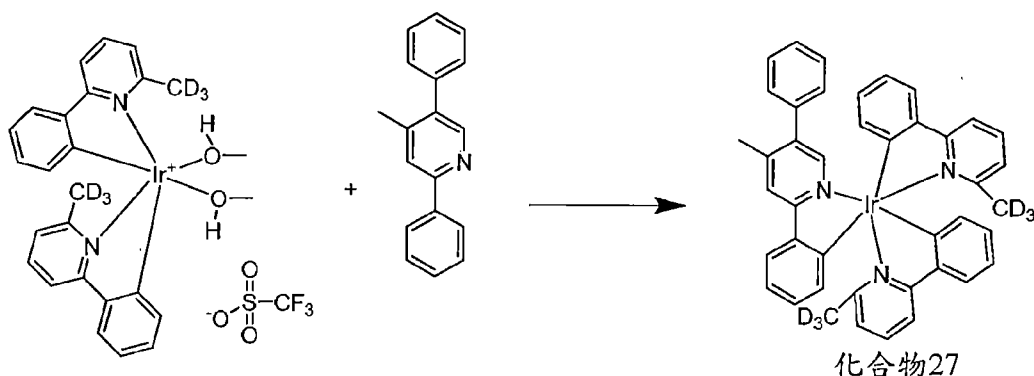


合成3-甲基- d_3 -2-苯基吡啶。將3-溴-2-苯基吡啶(9.9 g, 42 mmol)溶解於100 mL四氫呋喃中，且冷卻至-78°C。向溶液中逐滴添加BuLi(26.4 mL, 1.6 M己烷溶液)。添加完成後，在-78°C下攪拌反應混合物1小時。添加碘代甲烷- d_3 (9.3 g, 63 mmol)，且溫至室溫後維持2小時。隨後以水淬滅反應且以乙酸乙酯萃取。經由管柱使用己烷及乙酸乙酯作為溶離劑純化粗產物。純化後獲得2.3 g純產物。



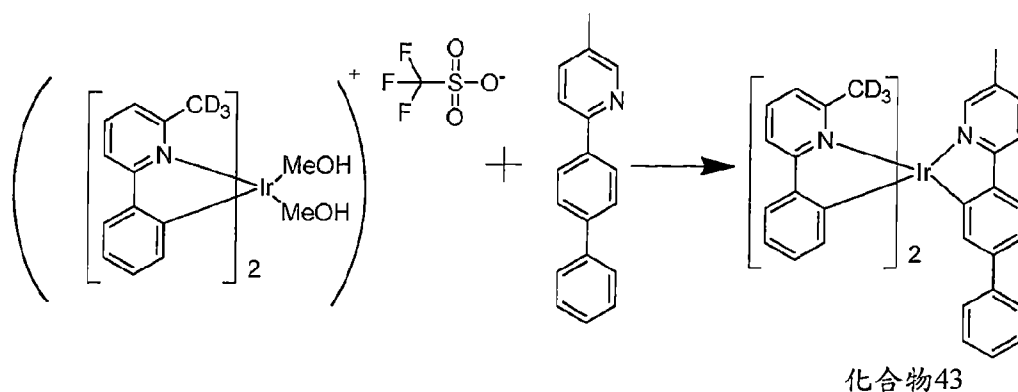
合成化合物13。在氮氣下加熱3-甲基-d3-2-苯基吡啶(1.8 g, 10.4 mmol)及Ir(acac)₃(0.64 g, 1.3 mmol)至260°C後維持48小時。冷卻至室溫後，添加二氯甲烷以溶解產物。隨後將二氯甲烷溶液倒入己烷中。收集沈澱，且流經矽膠塞。獲得0.6 g產物。藉由自1,2-二氯苯再結晶進一步純化產物。

實例3. 合成化合物27



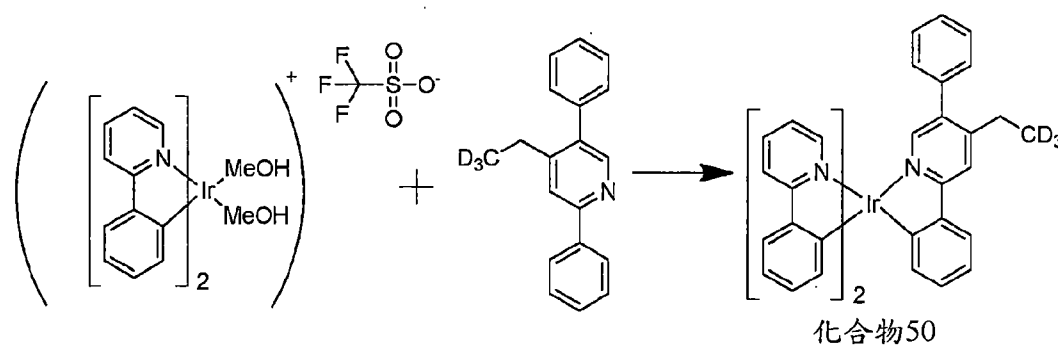
合成化合物27。混合三氟甲磺酸鹽錯合物(1.4 g)、4-甲基-2,5-二苯基吡啶(1.5 g)及50 mL乙醇，且在氮氣下加熱至回流後隔夜。過濾沈澱。利用管柱層析以50%二氯甲烷/己烷溶離純化粗物質。獲得1.1 g所需產物。

實例4. 合成化合物43



合成化合物43。在100 mL圓底燒瓶中置放銱三氟甲磺酸鹽錯合物(1.0 g, 1.3 mmol)及2-聯苯基-4-甲基吡啶(1.0 g, 4 mmol)。向燒瓶中添加20 mL乙醇及甲醇之50:50溶液。使反應混合物回流後維持8小時。隨後冷卻反應混合物至室溫。將反應混合物傾倒於二氧化矽塞上，且依序以乙醇及己烷洗滌。捨棄濾液。隨後以二氯甲烷洗滌該塞以溶離產物。在旋轉蒸發器上自濾液中移除溶劑。使用管柱層析以二氯甲烷及己烷(50:50)作為溶離劑進一步純化產物，得到0.5 g(產率為50%)產物。

實例5. 合成化合物50



合成化合物50。在1000 mL圓底燒瓶中置放銱三氟甲磺酸鹽錯合物(6.58 g, 9.2 mmol)及4-(乙基,d₃)-2,5-二苯基吡啶(6.58 g, 25.0 mmol)。向燒瓶中添加140 mL乙醇及甲醇之50:50溶液。使反應混合物回流後維持8小時。隨後冷卻反應混合物至室溫。將反應混合物傾倒於二氧化矽塞上，且依序以乙醇及己烷洗滌。捨棄濾液。隨後以二氯

甲烷洗滌該塞以溶離產物。在旋轉蒸發器上自濾液中移除溶劑。使用管柱層析以二氯甲烷及己烷(50:50)作為溶離劑進一步純化產物，得到3.8 g(產率為54%)產物。

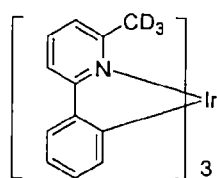
裝置實例

所有裝置均藉由高真空($<10^{-7}$ 托(Torr))熱蒸發製造。陽極為1200 Å之氧化銦錫(ITO)。陰極由10 Å之LiF繼之以1000 Å之Al組成。所有裝置在製造後均立即用以環氧樹脂密封之玻璃蓋封裝於氮氣手套箱(nitrogen glove box)中(<1 ppm H₂O及O₂)，且在包裝內併入除濕劑(moisture getter)。

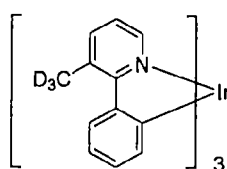
提供特定裝置，其中本發明化合物(化合物10、化合物13及化合物27)為發光摻雜劑且H1為主體。所有裝置實例均具有自ITO表面依序由以下組成之有機堆疊：100 Å E1作為電洞注入層(HIL)、300 Å 4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-苯胺基]聯苯(α -NPD)作為電洞傳輸層(HTL)、摻雜有7%或10%本發明化合物之300 Å H1(主體材料)作為發光層(EML)、50 Å H1作為阻擋層(BL)及400 Å Alq₃(參-8-羥基喹啉鋁)作為ETL。

比較實例1-5係類似於裝置實例製造，除了EML及BL中所用之材料不同。詳言之，比較實例1與2、3、4與5之EML中分別使用E1、E2或E3作為發光摻雜劑。此外，在比較實例3中，HPT為BL材料。

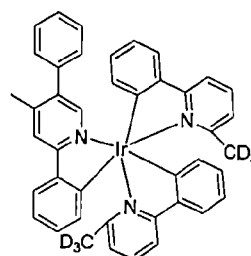
如本文所用，以下化合物具有以下結構：



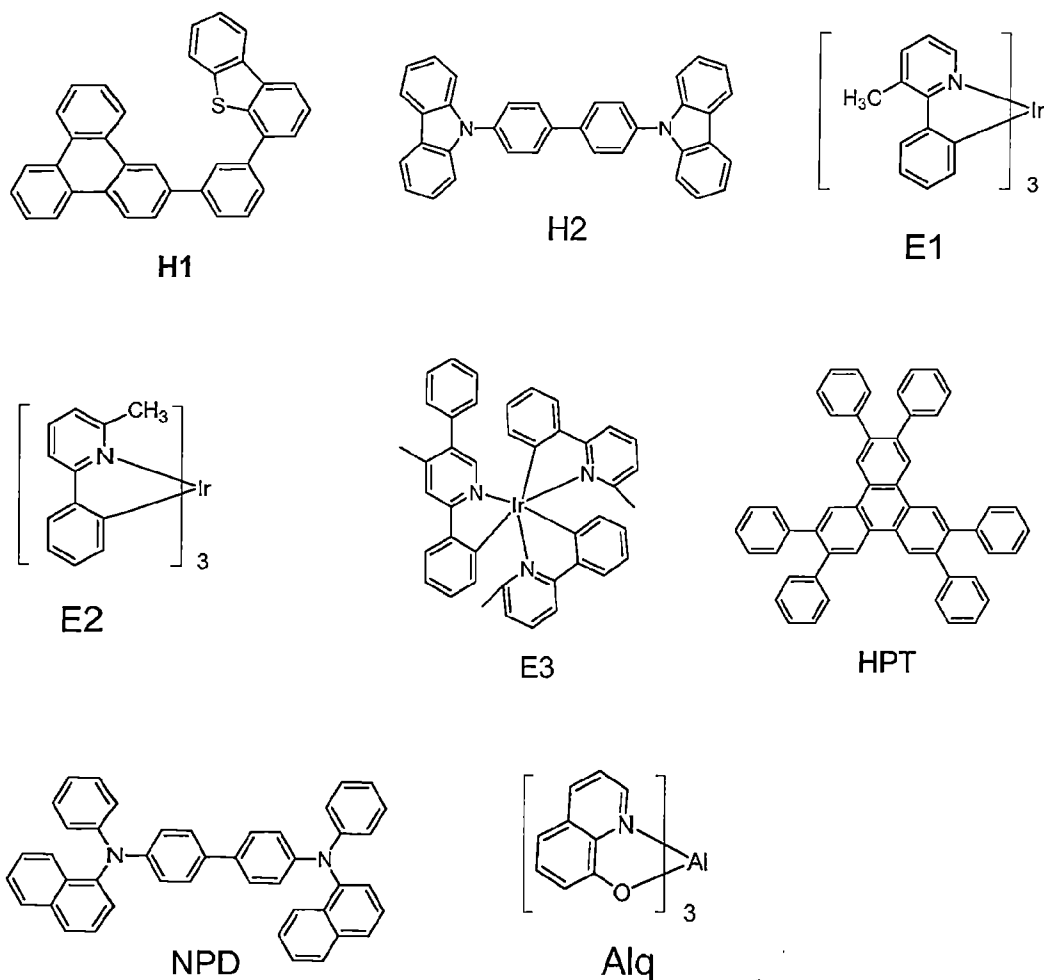
化合物10



化合物13



化合物27



提供用於OLED之特定材料。特定而言，該等材料可用作該裝置發光層(EML)中之發光摻雜劑。本文中所提供之化合物可在裝置中用於改良顏色、效率及壽命。Cmpd為化合物之縮寫。Ex.為實例之縮寫。Comp.為比較之縮寫。

表2

實例	HIL	HTL	主體	A%	BL	ETL
Ex. 1	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	Cmpd 10 7%	H1 50 Å	Alq 400 Å
Ex. 2	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	Cmpd 10 10%	H1 50 Å	Alq 400 Å
Ex. 3	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	Cmpd 13 7%	H1 50 Å	Alq 400 Å
Ex. 4	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	Cmpd 13 10%	H1 50 Å	Alq 400 Å

Ex. 5	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	Cmpd 27 7%	H1 50 Å	Alq 400 Å
Ex. 6	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	Cmpd 27 10%	H1 50 Å	Alq 400 Å
Comp. Ex. 1	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	E1 7%	H1 50 Å	Alq 400 Å
Comp. Ex. 2	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	E1 10%	H1 50 Å	Alq 400 Å
Comp. Ex. 3	E1 100 Å	NPD 300 Å	H2	E2 10%	HPT 50 Å	Alq 400 Å
Comp. Ex. 4	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	E3 7%	H1 50 Å	Alq 400 Å
Comp. Ex. 5	E1 100 Å	NPD 300 Å	H1	E3 10%	H1 50 Å	Alq 400 Å

表 3

實例	λ_{\max} (nm)	FWHM (nm)	CIE		1000尼特(nit)下				40 mA/cm ² 下	
			X	Y	V (V)	LE (cd/A)	EQE (%)	PE (lm/W)	Lo (尼特)	RT _{80%} (h)
Ex. 1	510	70	0.290	0.622	5.7	48.7	14.2	26.7	14,486	76
Ex. 2	512	68	0.282	0.629	5.2	51.6	14.9	31.2	16,186	67
Ex. 3	527	76	0.349	0.610	6.1	54.1	14.9	28.1	15,179	204
Ex. 4	527	75	0.350	0.611	5.6	54.3	15	30.2	15,810	220
Ex. 5	522	68	0.329	0.623	5.4	66.6	18.2	38.6	18,557	174
Ex. 6	526	72	0.342	0.616	4.9	66.5	18.1	42.7	19,885	184
Comp. Ex. 1	527	72	0.341	0.617	6	55.6	15.2	29.1	16,066	165
Comp. Ex. 2	527	79	0.344	0.614	6.4	56.7	15.6	27.6	15,436	155
Comp. Ex. 3	507	68	0.294	0.615	5.8	44.2	13.1	23.9	13,930	14
Comp. Ex. 4	522	66	0.328	0.624	5.5	65	17.8	37.3	18,170	116
Comp. Ex. 5	526	72	0.340	0.616	5.1	65.3	17.9	40.4	19,740	128

由裝置實例1-6可以看出，以本文中所提供之 CD_3 化合物作為發光摻雜劑提供長壽命。詳言之，含有所提供之化合物之裝置實例的壽命 $\text{RT}_{80\%}$ (定義為在室溫下，在 $40 \text{ mA}/\text{cd}^2$ 之恆定電流密度下，由最初亮度 L_0 衰減至其值之80%所需的時間)明顯高於含有對應的經 CH_3 取代之化合物的比較實例。特定言之，與使用對應的經 CH_3 取代之化合物(E1)的比較實例1及3的165 h及155 h之 $\text{RT}_{80\%}$ 相比，裝置實例3及4中所使用之化合物13分別提供204 h及220 h之 $\text{RT}_{80\%}$ 。

上述資料亦說明本文中所提供之含 CD_3 的雜配化合物可使裝置具有改良之壽命及效率。詳言之，含有化合物27之裝置實例5及6提供之壽命及效率優於含有相應的經 CH_3 取代之化合物(E3)之比較實例4及5。特定言之，與對應的甲基取代化合物E3的116 h及128 h之 $\text{RT}_{80\%}$ 相比，化合物27提供174 h及184 h之 $\text{RT}_{80\%}$ 。

另外，甲基-d3取代化合物提供裝置改良之效率。詳言之，化合物10、13及27獲得的工作電壓低於使用對應 CH_3 取代化合物之比較實例。特定言之，相比於6.4 V、5.8 V及5.1 V，化合物10、13及27分別提供5.2 V、5.6 V及4.9 V之工作電壓(V)。

上述資料表明本文中所提供之甲基-d3取代化合物可為用於磷光OLED之極佳發光摻雜劑。該等化合物提供裝置改良之顏色、效率及壽命。

如本文所用，以下化合物具有以下結構：

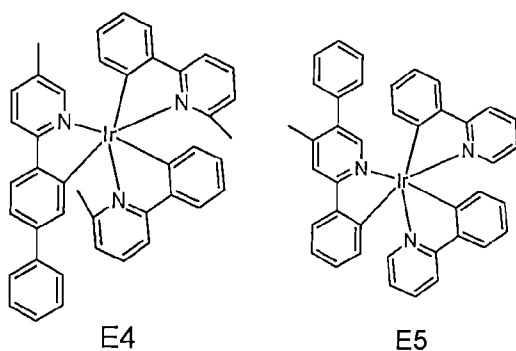


表4

實例	HIL	HTL	主體	A%	BL	ETL
Ex. 7	E5 100 Å	NPD 300 Å	H 1	Cmpd 43 7%	H1 100 Å	Alq 400 Å
Ex. 8	E5 100 Å	NPD 300 Å	H 1	Cmpd 43 10%	H1 100 Å	Alq 400 Å
Comp. Ex. 6	E1100 Å	NPD 300 Å	H 1	E4 7%	H1 100 Å	Alq 400 Å
Comp. Ex. 7	E1 100 Å	NPD 300 Å	H 1	E4 10%	H1 100 Å	Alq 400 Å

表5

實例	λ_{\max} (nm)	FWHM (nm)	CIE		1000尼特下			40 mA/cm ² 下		
			X	Y	V (V)	LE (cd/A)	EQE (%)	PE (lm/W)	Lo (尼特)	RT ₈₀ %
Ex. 7	534	62	0.368	0.604	6.1	63.3	17.2	32.7	14,037	374
Ex. 8	534	64	0.380	0.597	5.3	69	18.8	40.7	18,702	365
Comp. Ex. 6	534	64	0.380	0.596	5.7	68	18.6	37.3	17,776	212
Comp. Ex. 7	534	64	0.380	0.597	5.3	68.8	18.8	40.5	19,306	283

由裝置實例7及8可以看出，化合物43具有可比於E4之效率及顏

色，且裝置壽命更長。裝置實例7顯示374 h之LT₈₀且比較實例6顯示212 h之壽命。裝置實例8顯示365 h之LT₈₀且比較實例7顯示283 h之壽命。裝置資料顯示所提供之甲基-d3取代化合物可延長裝置壽命。

應瞭解，本文中所述之各種實施例僅作為實例且不意欲限制本發明之範疇。舉例而言，在不背離本發明之精神的情況下，本文中所述之許多材料及結構可經其他材料及結構取代。因此，熟習此項技術者將顯而易知，所主張之本發明可包括本文中所述之特定實例及較佳實施例之變體。應瞭解，有關本發明為何起作用之各種理論不意欲為限制性的。

【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	發光層
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	倒置式OLED
210	基板

215	陰極
220	發光層
225	電洞傳輸層
230	陽極

I687408

發明摘要

※ 申請案號：

※ 申請日：

※IPC 分類：C07D

【發明名稱】

具有甲基-D3取代之銱錯合物

IRIDIUM COMPLEX WITH METHYL-D3 SUBSTITUTION

【中文】

本發明提供包含具有氘取代之配位體的新穎有機化合物。特定言之，該化合物為包含經甲基-d₃取代之配位體的銱錯合物。該等化合物可用於有機發光裝置以提供具有改良之顏色、效率及壽命之裝置。

【英文】

Novel organic compounds comprising ligands with deuterium substitution are provided. In particular, the compound is an iridium complex comprising methyl-d₃ substituted ligands. The compounds may be used in organic light emitting devices to provide devices having improved color, efficiency and lifetime.

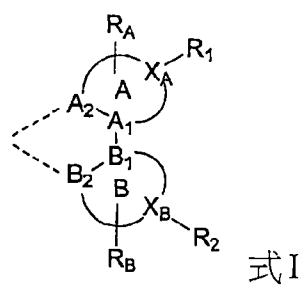
【代表圖】

【本案指定代表圖】：第（3）圖。

【本代表圖之符號簡單說明】：

（無）

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：



圖式

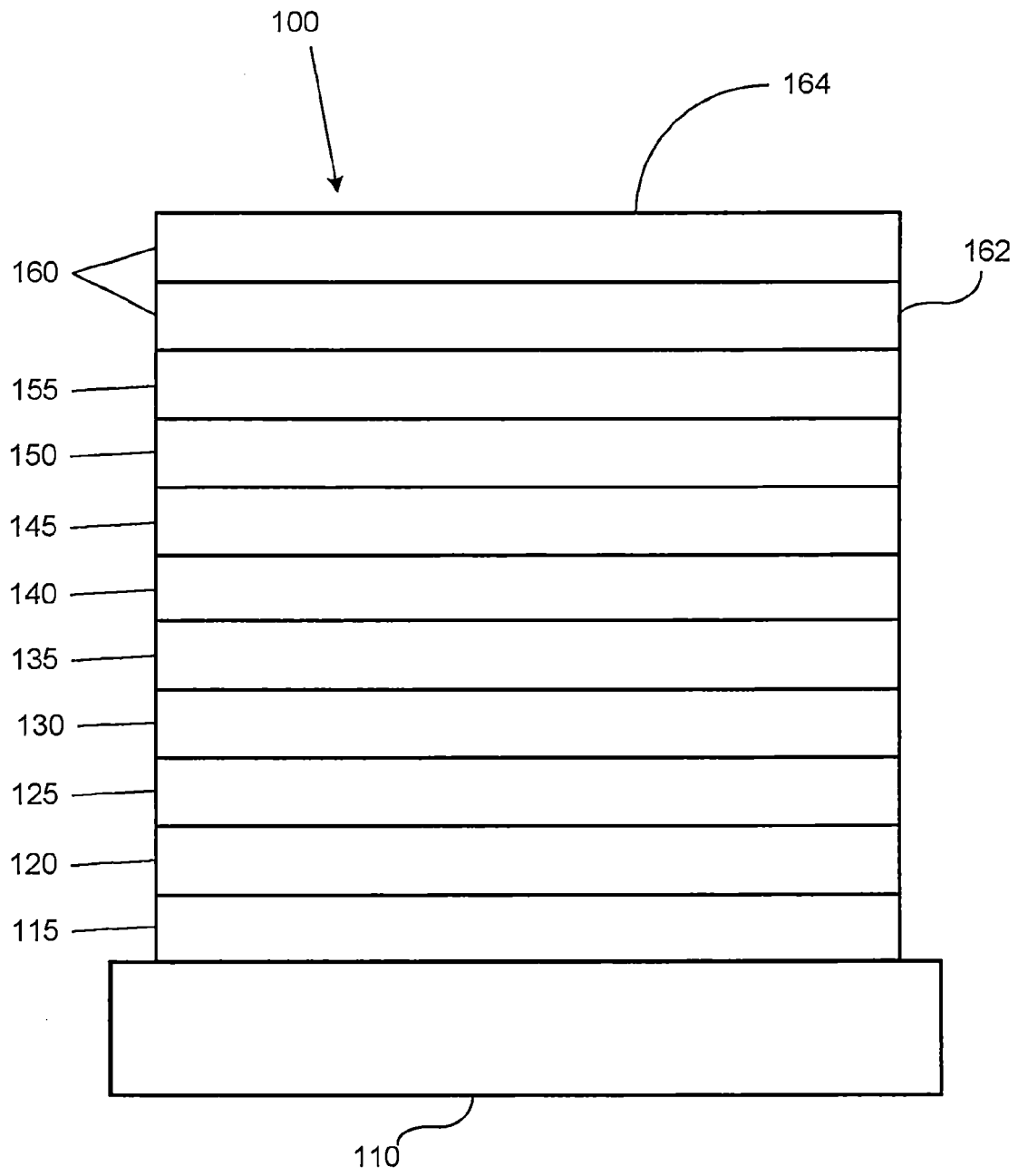


圖 1

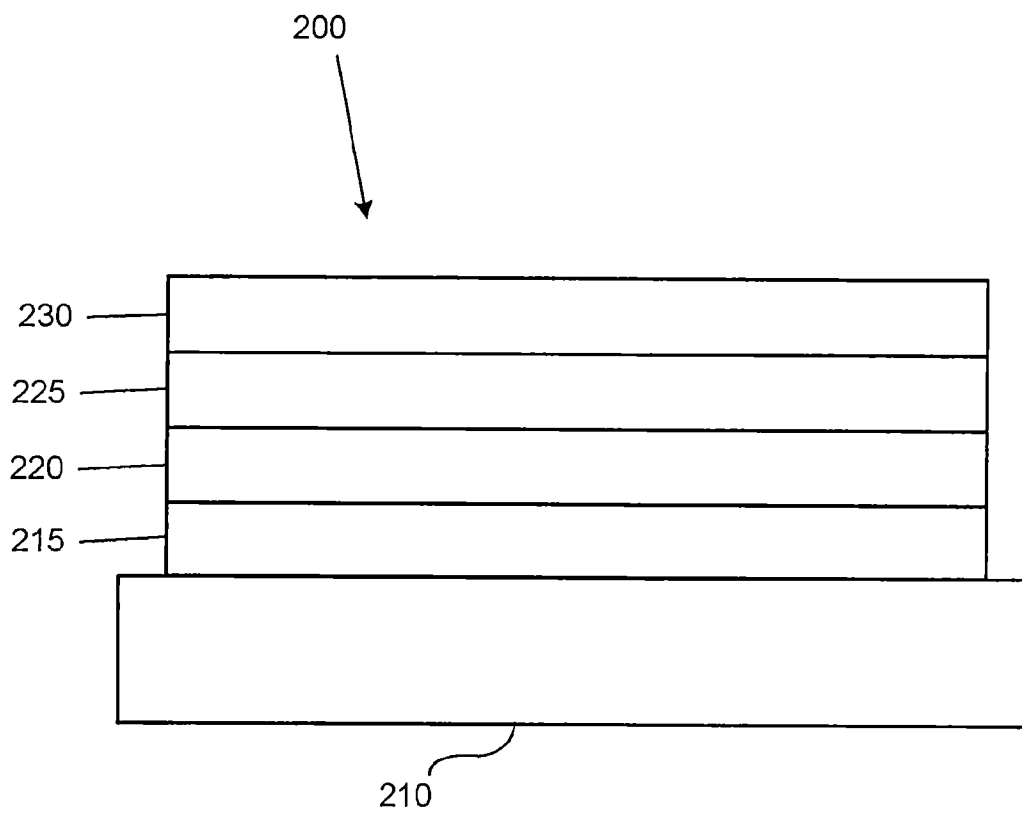


圖 2

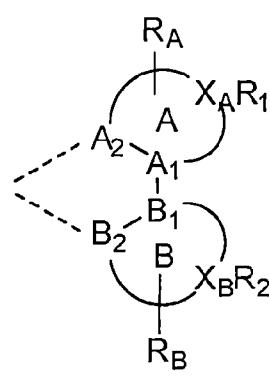
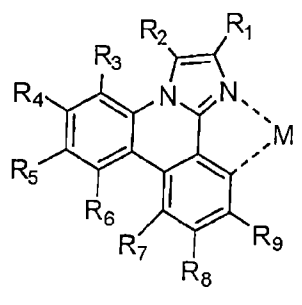
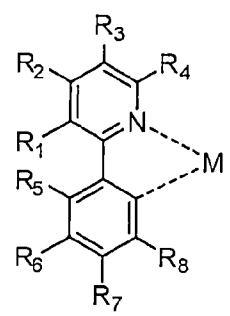


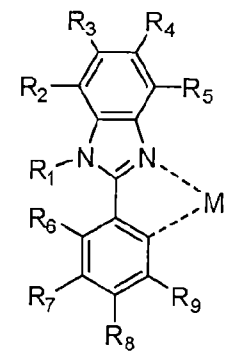
圖 3



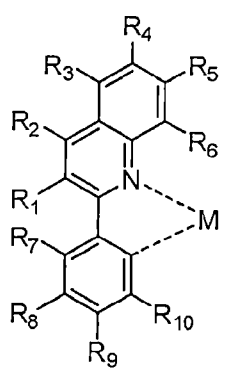
III



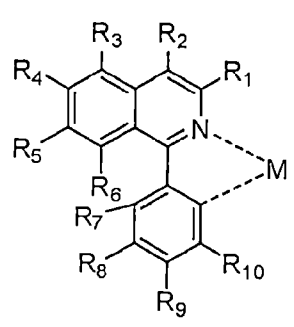
IV



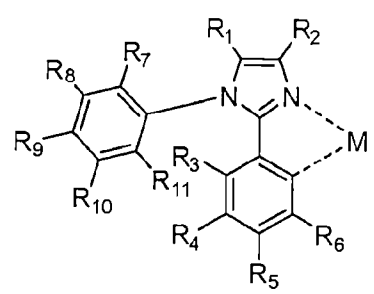
V



VI



VII

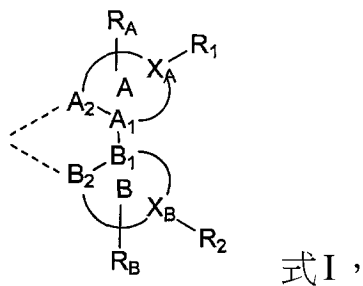


VIII

圖 4

申請專利範圍

1. 一種化合物，其包含具有以下結構之配位體：



其中A表示咪唑及B表示苯；

其中A₁及A₂獨立地為C或N；

其中R_A及R_B可表示單、二或三取代；

其中B₁、B₂及X_B獨立地為C；

其中X_A為N；

其中R_A、R_B及R₂係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之群；

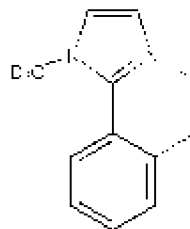
其中R₁為苯基或烷基；


其中R_A、R_B、R₁及R₂中之至少一者包括CD、CD₂或CD₃；

其中R_A、R_B、R₁及R₂可鍵聯；

其中R_A、R_B、R₁及R₂可稠合；及

其中該配位體係與Ir配位，



其限制條件在於該配位體不為 。

2. 如請求項1之化合物，其中該等取代基R_A及R_B中之至少一者為直接連接至環A、環B、或結合或稠合至環A或環B之環之CD₃。
3. 如請求項1之化合物，其中R₁為苯基，其進一步經由烷基、烷氧

基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基組成之基團取代，且其中該基團包括CD、CD₂或CD₃中之至少一者。

4. 一種有機發光裝置，其包含：

陽極；

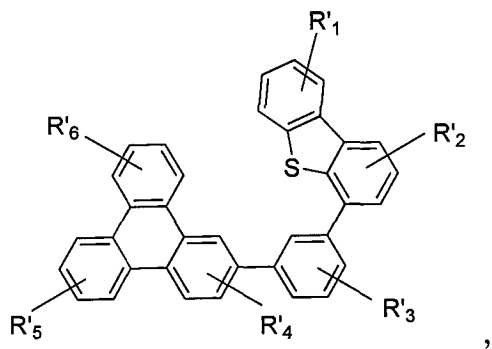
陰極；及

安置於該陽極與該陰極之間的有機層，其中該有機層包含如請求項1至3中任一項之化合物。

5. 如請求項4之裝置，其中該有機層為發光層，該化合物為發光摻雜劑。

6. 如請求項5之裝置，其中該有機層另外包含主體(host)。

7. 如請求項6之裝置，其中該主體具有下式：



其中R'₁、R'₂、R'₃、R'₄、R'₅及R'₆可表示單、二、三或四取代；

其中R'₁、R'₂、R'₃、R'₄、R'₅及R'₆各獨立地選自由氫、烷基及芳基組成之群。

8. 一種包含裝置之消費型產品，其包含如請求項4至7中任一項之裝置。