(19)中华人民共和国国家知识产权局

(12)发明专利申请

(10)申请公布号 CN 109384816 A
(43)申请公布日 2019.02.26

(21)申请号 201810910304.X

(22)申请日 2018.08.10

(30)优先权数据
62/543,694 2017.08.10 US
16/044,620 2018.07.25 US

(71)申请人 环球展览公司
地址 美国新泽西州

(72)发明人 格扎·西盖蒂
约瑟夫·A·马克尔
查尔斯·斯坦顿
贾琳娜·杜比琳娜
道格拉斯·威廉姆斯

(74)专利代理机构 北京律盟知识产权代理有限责任公司 11287
代理人 李琳

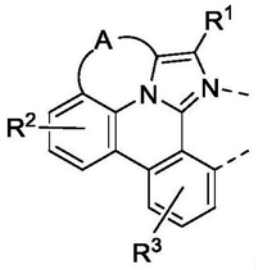
(51)Int.Cl.
C07F 15/00(2006.01)
C09K 11/06(2006.01)
H01L 51/50(2006.01)
H01L 51/54(2006.01)

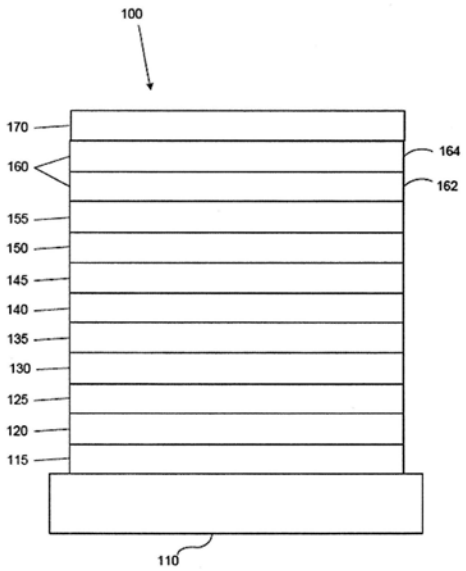
权利要求书35页 说明书87页 附图2页

(54)发明名称

有机电致发光材料和装置

(57)摘要

本申请涉及有机电致发光材料和装置。本发明公开了一种化合物，其具有式$Ir(L_A)(L_B)$的结构，其中L_A是双齿、三齿、四齿、五齿或六齿配体，且L_B是单齿、双齿、三齿或四齿配体，或不存在，且其中L_A加L_B的总齿合度是6，且L_A包括至少一种式I结构：  ，其用作适用的磷光发射体化合物。



CN 109384816 A

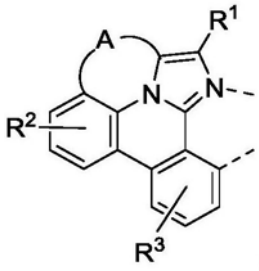
1.一种化合物,其具有式Ir(L_A)(L_B);

其中L_A是双齿、三齿、四齿、五齿或六齿配体;

其中L_B是单齿、双齿、三齿或四齿配体,或不存在;

其中L_A加L_B的总齿合度是6;

其中L_A包含至少一种式I结构:



,式I;

其中A是具有两至三个键联原子的键联基团,其中所述键联原子各自独立地选自由以下组成的群组:C、Si、O、S、N、B;

其中R^2和R^3各自独立地表示单取代到最大可允许数目的取代或无取代;

其中R^1、R^2和R^3中的每一个独立地选自由以下组成的群组:氢、氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳基、杂芳基、酰基、羧酸、醚、酯、腈、异腈、硫基、亚磺酰基、磺酰基、膦基和其组合;

其中任两个取代基可以接合或稠合在一起以形成环;且

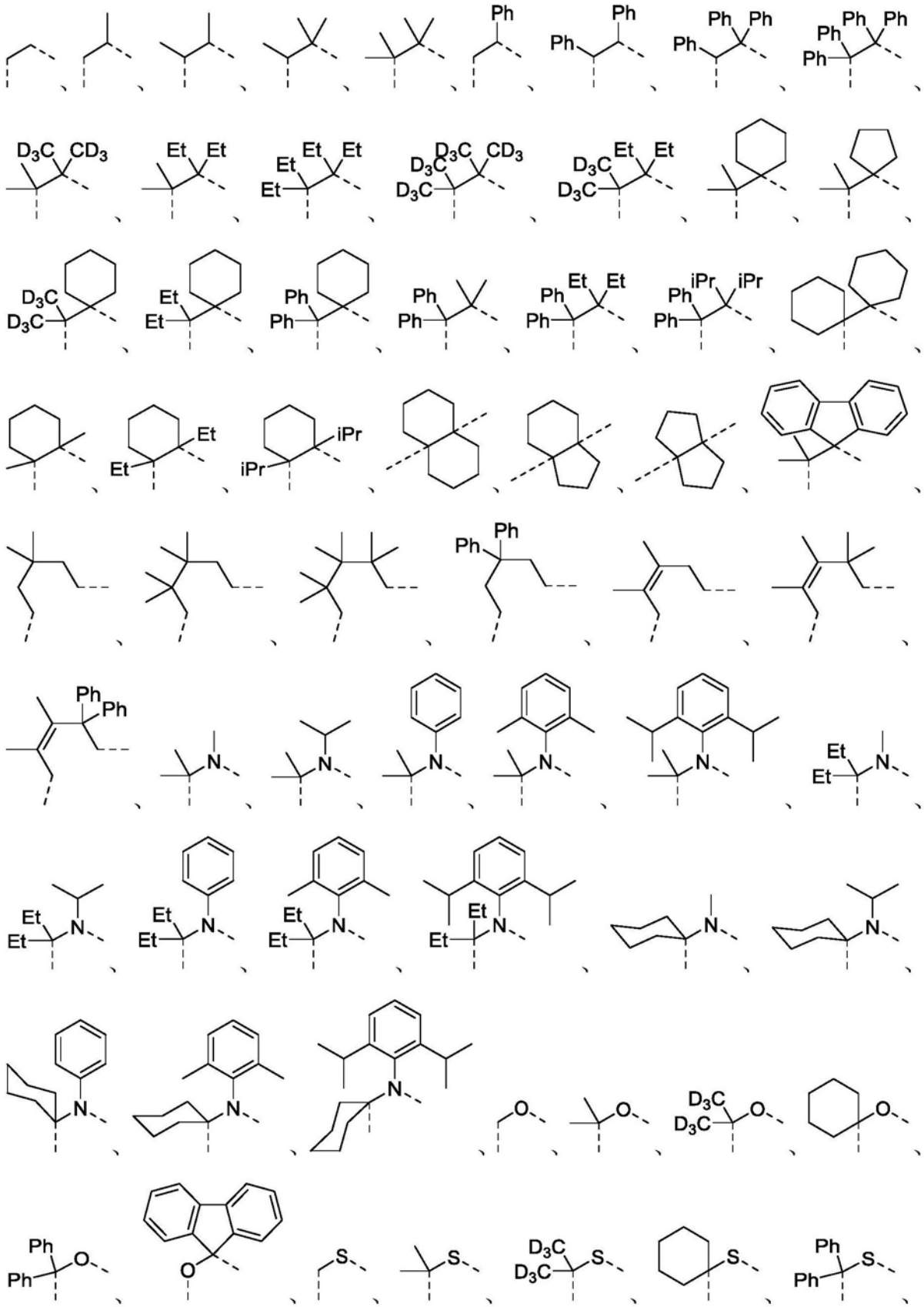
其中R^1或R^3能够经由键联基团与另一配体接合以形成较高齿合度配体。

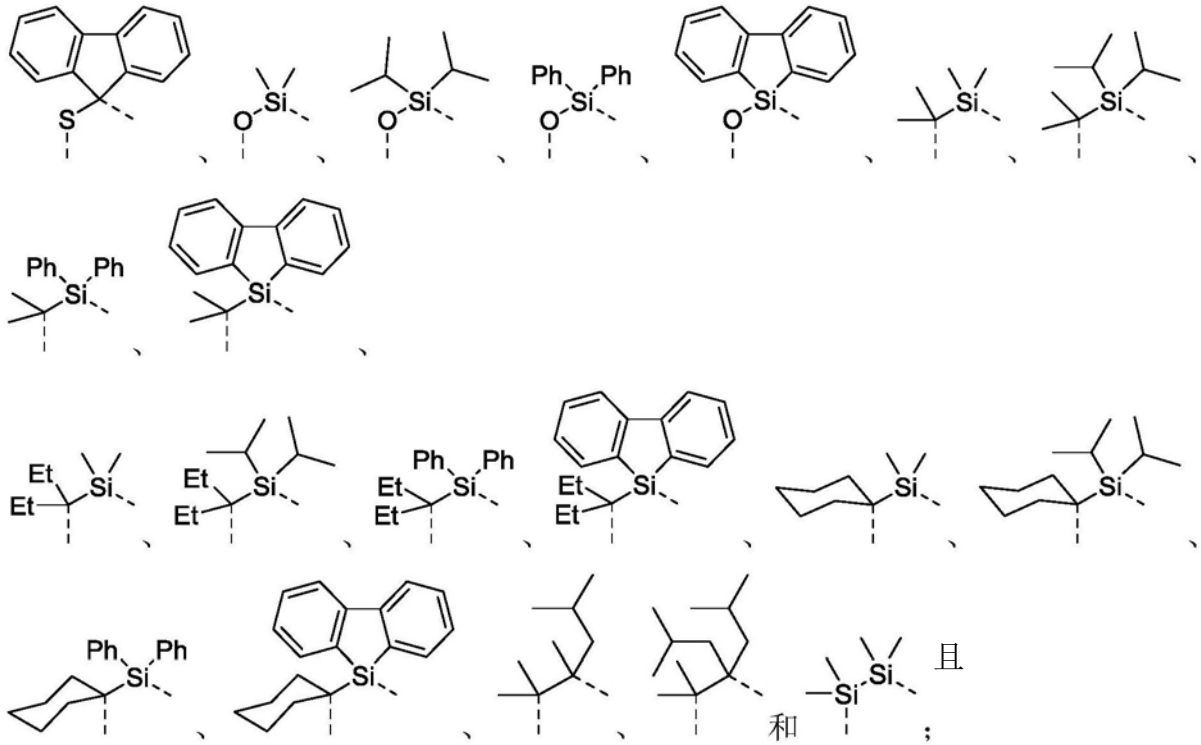
2.根据权利要求1所述的化合物,其中R^1、R^2和R^3中的每一个独立地选自由以下组成的群组:氘、氟、烷基、环烷基、杂烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、芳基、杂芳基、腈、异腈、硫基和其组合。

3.根据权利要求1所述的化合物,其中所述键联基团A独立地选自由以下组成的群组:-CR^AR^B-CR^CR^D-、-CR^AR^B-CR^CR^D-CR^ER^F-、-CR^AR^B-NR^C-、-CR^A=CR^B-CR^CR^D-、-O-SiR^AR^B-、-CR^AR^B-S-、-CR^AR^B-O-和-C-SiR^AR^B-,其中R^A到R^F各自可相同或不同,且独立地选自由以下组成的群组:氢、氘、烷基、环烷基、芳基、杂芳基和其组合;且

其中任何相邻的R^A到R^F任选地接合或稠合成5元或6元环。

4.根据权利要求1所述的化合物,其中所述键联基团A是选自由以下组成的群组:





其中虚线表示连接键。

5.根据权利要求1所述的化合物,其中L_A包含一种式I结构。

6.根据权利要求1所述的化合物,其中L_A是包含两个相同或两个不同式I结构的四齿配体。

7.根据权利要求1所述的化合物,其中L_A是包含三个相同或三个不同式I结构的六齿配体。

8.根据权利要求1所述的化合物,其中所述化合物是根据式$Ir(L_A)_n(L_B)_m(Link)$的化合物;

其中L_A和L_B各自表示双齿配体片段;

其中L_A中的至少一个含有由式I描述的片段;

其中n=1、2或3;

其中m=0、1或2;

其中n+m=3;且

其中Link是有机连接基团,另外称为L_1或L_2,用于连接L_A和/或L_B中的一或多个,以形成四齿或六齿配体。

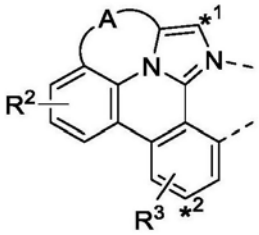
9.根据权利要求8所述的化合物,其中L_1和L_2各自独立地包含6到20个碳原子。

10.根据权利要求8所述的化合物,其中L_1和L_2各自独立地包含6元芳香族环或环烷基环。

11.根据权利要求8所述的化合物,其中所述化合物是选自下表中的以下结构G_{nk}=Ir(配体1)(配体2)(配体3),其中k是1到16的整数:

G_{nk}	配体 1	配体 2	配体 3
G_{n1}	L_{Ai}，其中 i = 1 到 6 的整数	L_{Ai}，其中 i = 7 到 12 的整数	L_{Ai}，其中 i = 7 到 12 的整数
G_{n2}	L_{Ai}，其中 i = 7 到 12 的整数	L_{Ai}，其中 i = 7 到 12 的整数	L_{Ai}，其中 i = 7 到 12 的整数
G_{n3}	L_{Ai}，其中 i = 1 到 6 的整数	L_{Ai}，其中 i = 13 到 18 的整数	L_{Ai}，其中 i = 13 到 18 的整数
G_{n4}	L_{Ai}，其中 i = 13 到 18 的整数	L_{Ai}，其中 i = 13 到 18 的整数	L_{Ai}，其中 i = 13 到 18 的整数
G_{n5}	L_{Ai}，其中 i = 1 到 6 的整数	L_{Bp}，其中 p = 16 到 26 的整数	L_{Bp}，其中 p = 16 到 26 的整数
G_{n6}	L_{Ai}，其中 i = 7 到 12 的整数	L_{Bp}，其中 p = 16 到 26 的整数	L_{Bp}，其中 p = 16 到 26 的整数
G_{n7}	L_{Ai}，其中 i = 1 到 6 的整数	L_{Bp}，其中 p = 27 到 41 的整数	L_{Bp}，其中 p = 27 到 41 的整数
G_{n8}	L_{Ai}，其中 i = 13 到 18 的整数	L_{Bp}，其中 p = 27 到 41 的整数	L_{Bp}，其中 p = 27 到 41 的整数
G_{n9}	L_{Ai}，其中 i = 7 到 12 的整数	L_{Ai}，其中 i = 7 到 12 的整数	L_{Bp}，其中 p = 16 到 26 的整数
G_{n10}	L_{Ai}，其中 i = 13 到 18 的整数	L_{Ai}，其中 i = 13 到 18 的整数	L_{Bp}，其中 p = 27 到 41 的整数
G_{n11}	L_{Ai}，其中 i = 1 到 6 的整数	L_{Ai}，其中 i = 7 到 12 的整数	L_{Bp}，其中 p = 16 到 26 的整数
G_{n12}	L_{Ai}，其中 i = 1 到 6 的整数	L_{Ai}，其中 i = 13 到 18 的整数	L_{Bp}，其中 p = 27 到 41 的整数
G_{n13}	L_{Bp}，其中 p = 1 到 15 的整数	L_{Ai}，其中 i = 7 到 12 的整数	L_{Bp}，其中 p = 16 到 26 的整数
G_{n14}	L_{Bp}，其中 p = 1 到 15 的整数	L_{Ai}，其中 i = 13 到 18 的整数	L_{Bp}，其中 p = 27 到 41 的整数
G_{n15}	L_{Bp}，其中 p = 1 到 15 的整数	L_{Ai}，其中 i = 7 到 12 的整数	L_{Ai}，其中 i = 7 到 12 的整数
G_{n16}	L_{Bp}，其中 p = 1 到 15 的整数	L_{Ai}，其中 i = 13 到 18 的整数	L_{Ai}，其中 i = 13 到 18 的整数

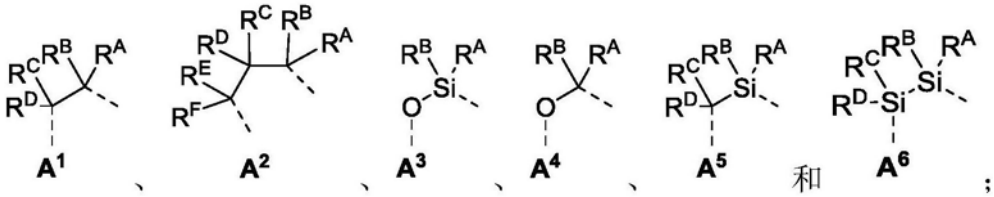
其中所述配体L_{Ai}包含以下结构：



；

其中虚线表示与铱原子的键；

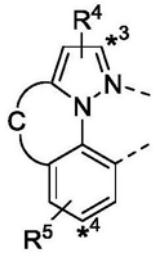
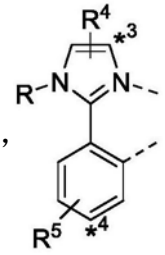
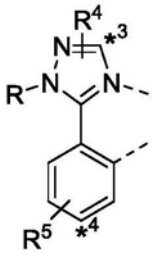
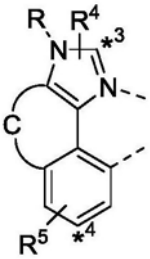
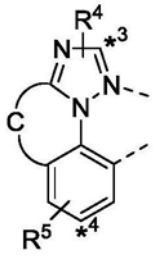
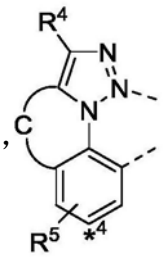
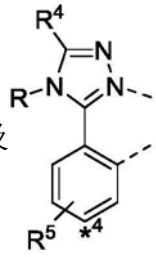
其中A是选自由以下组成的群组的键联基团：



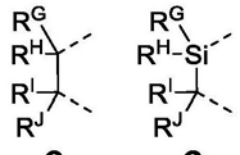
、　、　、　、　和　；

其中A^1到A^6中的虚线指示连接键；

其中L_{Bp}是选自由以下组成的群组：


其中m是1， 
其中m是2， 
其中m是3， 
其中m是4， 
其中m是5， 
其中m是6，以及 
其中m是7；

其中C是选自由以下组成的群组的有机连接基团：

不存在  ；

其中虚线指示连接键；

其中由$*^1$标记的碳连接于L_1或R^1；

其中由$*^2$标记的碳连接于L_2或R^3；

其中由$*^3$标记的碳连接于L_1或R^4；

其中由$*^4$标记的碳连接于L_2或R^5；

其中R^4和R^5中的每一个独立地表示单取代到最大可能数目的取代或无取代；

其中R^4、R^5、R^G、R^H、R^I和R^J中的每一个独立地选自由以下组成的群组：氢、氘、氟、烷基、环烷基、杂烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、芳基、杂芳基、腈、异腈、硫基和其组合；

其中所述配体L_{Ai}定义如下，其中i是1到18的整数：

L_{Ai}	A	$*^1$	$*^2$
L_{A1}	A^1	R^1	R^3
L_{A2}	A^2	R^1	R^3
L_{A3}	A^3	R^1	R^3
L_{A4}	A^4	R^1	R^3
L_{A5}	A^5	R^1	R^3
L_{A6}	A^6	R^1	R^3
L_{A7}	A^1	L_1	R^3
L_{A8}	A^2	L_1	R^3
L_{A9}	A^3	L_1	R^3
L_{A10}	A^4	L_1	R^3
L_{A11}	A^5	L_1	R^3
L_{A12}	A^6	L_1	R^3
L_{A13}	A^1	R^1	L_2
L_{A14}	A^2	R^1	L_2
L_{A15}	A^3	R^1	L_2
L_{A16}	A^4	R^1	L_2
L_{A17}	A^5	R^1	L_2
L_{A18}	A^6	R^1	L_2

;

其中所述配体L_{Bp}定义如下，其中p是1到41的整数：

L_{Bp}	m	C	$*^3$	$*^4$
L_{B1}	1	C_1	R^4	R^5
L_{B2}	1	C_2	R^4	R^5
L_{B3}	1	C_3	R^4	R^5
L_{B4}	2	-	R^4	R^5
L_{B5}	3	-	R^4	R^5
L_{B6}	4	C_1	R^4	R^5

L_{B7}	4	C_2	R^4	R^5
L_{B8}	4	C_3	R^4	R^5
L_{B9}	5	C_1	R^4	R^5
L_{B10}	5	C_2	R^4	R^5
L_{B11}	5	C_3	R^4	R^5
L_{B12}	6	C_1	-	R^5
L_{B13}	6	C_2	-	R^5
L_{B14}	6	C_3	-	R^5
L_{B15}	7	-	-	R^5
L_{B16}	1	C_1	L_1	R^5
L_{B17}	1	C_2	L_1	R^5
L_{B18}	1	C_3	L_1	R^5
L_{B19}	2	-	L_1	R^5
L_{B20}	3	-	L_1	R^5
L_{B21}	4	C_1	L_1	R^5
L_{B22}	4	C_2	L_1	R^5
L_{B23}	4	C_3	L_1	R^5
L_{B24}	5	C_1	L_1	R^5
L_{B25}	5	C_2	L_1	R^5
L_{B26}	5	C_3	L_1	R^5
L_{B27}	1	C_1	R^4	L_2
L_{B28}	1	C_2	R^4	L_2
L_{B29}	1	C_3	R^4	L_2
L_{B30}	2	-	R^4	L_2
L_{B31}	3	-	R^4	L_2
L_{B32}	4	C_1	R^4	L_2
L_{B33}	4	C_2	R^4	L_2
L_{B34}	4	C_3	R^4	L_2
L_{B35}	5	C_1	R^4	L_2
L_{B36}	5	C_2	R^4	L_2
L_{B37}	5	C_3	R^4	L_2
L_{B38}	6	C_1	-	L_2
L_{B39}	6	C_2	-	L_2
L_{B40}	6	C_3	-	L_2
L_{B41}	7	-	-	L_2

。

12.根据权利要求8所述的化合物,其中所述化合物是具有式$Ir(L_x)(L_y-L_z-Link_q)$的化合物V或具有式$Ir(L_x-L_y-L_z-Link_q)$的化合物W;

其中在化合物V中,L_x是双齿配体;

其中$(L_y-L_z-Link_q)$是通过使双齿配体L_y和双齿配体L_z与$Link_q$连接而形成的四齿配体;

其中V是由V=371((478((478(q-1)+z)-1)+y)-1)+x定义的整数;

其中以下条件(a)-(d)中的一个为真:

(a)其中x是1到132的整数,y和z各自独立地是1到371的整数,且q是1到8的整数;

(b)其中x是1到132的整数,y和z各自独立地是372到478的整数,且q是9到21的整数;

(c)其中x是133到371的整数,y是1到132的整数,z是1到371的整数,且q是1到8的整数;且

(d)其中x是133到371的整数,y是440到478的整数,z是372到478的整数,且q是9到21的整数;且

其中在化合物W中,$(L_x-L_y-L_z-Link_q)$是通过使双齿L_x、L_y和L_z与连接基团$Link_q$连接而形成的六齿配体;

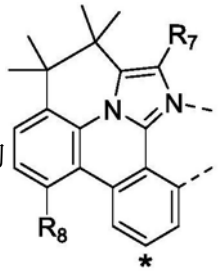
其中W是由W=478((478((478(q-1)+z)-1)+y)-1)+x定义的整数,

其中x是1到132的整数,且y和z各自独立地是1到371的整数,且q是22到39的整数;或

其中x是440到478的整数,且y和z各自独立地是372到478的整数,且q是40到53的整数;

其中在所述化合物V和所述化合物W两者中,L_x、L_y和L_z中的每一个是以下结构L1到L478中的一个:

L1、L2、L3、L4、L5、L6、L7、L8、L9、L10、L11、L12、L13、L14、L15、L16、L17、L18、L19、L20和L21具有结构



,

其中在L1中,R_7=H,且R_8=H,在L2中,R_7=D,且R_8=H,

在L3中,R_7=H,且R_8=Me,在L4中,R_7=D,且R_8=Me,

在L5中,R_7=H,且R_8=CD_3,在L6中,R_7=D,且R_8=CD_3,

在L7中,R_7=Ph,且R_8=H,在L8中,R_7=Ph,且R_8=Me,

在L9中,R_7=Ph,且R_8=CD_3,在L10中,R_7=m-tol,且R_8=H,

在L11中,R_7=m-tol,且R_8=Me,在L12中,R_7=m-tol,且R_8=CD_3,

在L13中,R_7=m-$CD_3C_6H_4$,且R_8=H,在L14中,R_7=m-$CD_3C_6H_4$,且R_8=Me,

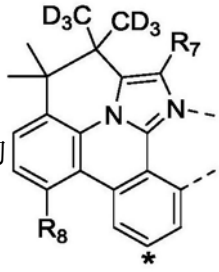
在L15中,R_7=m-$CD_3C_6H_4$,且R_8=CD_3,在L16中,R_7=p-tol,且R_8=H,

在L17中,R_7=p-tol,且R_8=Me,在L18中,R_7=p-tol,且R_8=CD_3,

在L19中,R_7=p-$CD_3C_6H_4$,且R_8=H,在L20中,R_7=p-$CD_3C_6H_4$,且R_8=Me,

以及在L21中,R_7=p-$CD_3C_6H_4$,且R_8=CD_3,

L22、L23、L24、L25、L26、L27、L28、L29、L30、L31、L32、L33、L34、L35、L36、L37、L38、L39、L40、L41和L42具有结构



,

其中在L22中,R_7=H,且R_8=H,在L23中,R_7=D,且R_8=H,

在L24中,R_7=H,且R_8=Me,在L25中,R_7=D,且R_8=Me,

在L26中,R_7=H,且R_8=CD_3,在L27中,R_7=D,且R_8=CD_3,

在L28中,R_7=Ph,且R_8=H,在L29中,R_7=Ph,且R_8=Me,

在L30中，R_7＝Ph，且R_8＝CD_3，在L31中，R_7＝m-tol，且R_8＝H，

在L32中，R_7＝m-tol，且R_8＝Me，在L33中，R_7＝m-tol，且R_8＝CD_3，

在L34中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L35中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，

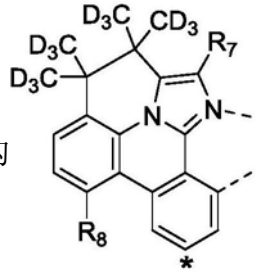
在L36中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，在L37中，R_7＝p-tol，且R_8＝H，

在L38中，R_7＝p-tol，且R_8＝Me，在L39中，R_7＝p-tol，且R_8＝CD_3，

在L40中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L41中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，

以及在L42中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，

L43、L44、L45、L46、L47、L48、L49、L50、L51、L52、L53、L54、L55、L56、L57、L58、L59、L60、L61、L62和L63具有结构



，

其中在L43中，R_7＝H，且R_8＝H，在L44中，R_7＝D，且R_8＝H，

在L45中，R_7＝H，且R_8＝Me，在L46中，R_7＝D，且R_8＝Me，

在L47中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，在L48中，R_7＝D，且R_8＝CD_3，

在L49中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L50中，R_7＝Ph，且R_8＝Me，

在L51中，R_7＝Ph，且R_8＝CD_3，在L52中，R_7＝m-tol，且R_8＝H，

在L53中，R_7＝m-tol，且R_8＝Me，在L54中，R_7＝m-tol，且R_8＝CD_3，

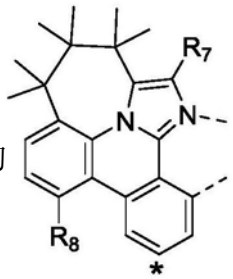
在L55中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L56中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，

在L57中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，在L58中，R_7＝p-tol，且R_8＝H，

在L59中，R_7＝p-tol，且R_8＝Me，在L60中，R_7＝p-tol，且R_8＝CD_3，

在L61中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L62中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，以及在L63中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，

L64、L65、L66、L67、L68、L69、L70、L71、L72、L73、L74、L75、L76、L77、L78、L79、L80、L81、L82、L83和L84具有结构



，

其中在L64中，R_7＝H，且R_8＝H，在L65中，R_7＝D，且R_8＝H，

在L66中，R_7＝H，且R_8＝Me，在L67中，R_7＝D，且R_8＝Me，

在L68中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，在L69中，R_7＝D，且R_8＝CD_3，

在L70中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L71中，R_7＝Ph，且R_8＝Me，

在L72中，R_7＝Ph，且R_8＝CD_3，在L73中，R_7＝m-tol，且R_8＝H，

在L74中，R_7＝m-tol，且R_8＝Me，在L75中，R_7＝m-tol，且R_8＝CD_3，

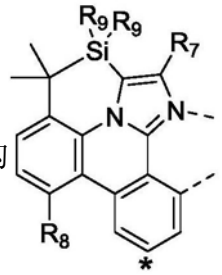
在L76中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L77中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，

在L78中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，在L79中，R_7＝p-tol，且R_8＝H，

在L80中，R_7＝p-tol，且R_8＝Me，在L81中，R_7＝p-tol，且R_8＝CD_3，

在L82中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L83中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，以及在L84中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，

L85、L86、L87、L88、L89、L90、L91、L92、L93、L94、L95、L96、L97、L98、L99、L100、L101和L102具有结构



，

其中在L85中，R_7＝H，R_8＝H，且R_9＝Me，在L86中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝Me，

在L87中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，在L88中，R_7＝Ph，R_8＝H，且R_9＝Me，

在L89中，R_7＝Ph，R_8＝Me，且R_9＝Me，在L90中，R_7＝Ph，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，

在L91中，R_7＝H，R_8＝H，且R_9＝^{i}Pr，在L92中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝^{i}Pr，

在L93中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝^{i}Pr，在L94中，R_7＝Ph，R_8＝H，且R_9＝^{i}Pr，

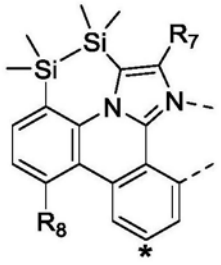
在L95中，R_7＝Ph，R_8＝Me，且R_9＝^{i}Pr，在L96中，R_7＝Ph，R_8＝CD_3，且R_9＝^{i}Pr，

在L97中，R_7＝H，R_8＝H，且R_9＝Ph，在L98中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝Ph，

在L99中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝Ph，在L100中，R_7＝Ph，R_8＝H，且R_9＝Ph，

在L101中，R_7＝Ph，R_8＝Me，且R_9＝Ph，以及在L102中，R_7＝Ph，R_8＝CD_3，且R_9＝Ph，

L103、L104、L105、L106、L107和L108具有结构



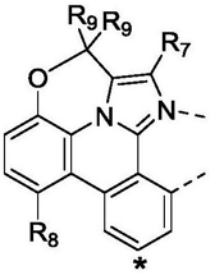
，

其中在L103中，R_7＝H，且R_8＝H，在L104中，R_7＝H，且R_8＝Me，

在L105中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，在L106中，R_7＝Ph，且R_8＝H，

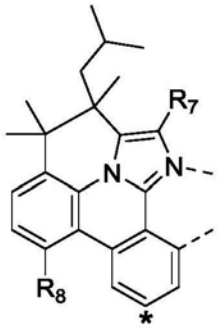
在L107中，R_7＝Ph，且R_8＝Me，以及在L108中，R_7＝Ph，且R_8＝CD_3，

L109、L110、L111、L112、L113、L114、L115、L116、L117、L118、L119、L120、L121、L122、

L123、L124、L125和L126具有结构 

，

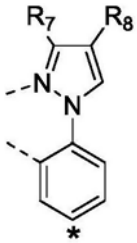
其中在L109中，R_7＝H，R_8＝H，且R_9＝Me，在L110中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝Me，
在L111中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，在L112中，R_7＝Ph，R_8＝H，且R_9＝Me，
在L113中，R_7＝Ph，R_8＝Me，且R_9＝Me，在L114中，R_7＝Ph，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，
在L115中，R_7＝H，R_8＝H，且R_9＝CD_3，在L116中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝CD_3，
在L117中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝CD_3，在L118中，R_7＝Ph，R_8＝H，且R_9＝CD_3，
在L119中，R_7＝Ph，R_8＝Me，且R_9＝CD_3，在L120中，R_7＝Ph，R_8＝CD_3，且R_9＝CD_3，
在L121中，R_7＝H，R_8＝H，且R_9＝Ph，在L122中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝Ph，
在L123中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝Ph，在L124中，R_7＝Ph，R_8＝H，且R_9＝Ph，
在L125中，R_7＝Ph，R_8＝Me，且R_9＝Ph，以及在L126中，R_7＝Ph，R_8＝CD_3，且R_9＝Ph，

L127、L128、L129、L130、L131和L132具有结构 

，

其中在L127中，R_7＝H，且R_8＝H，在L128中，R_7＝H，且R_8＝Me，
在L129中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，在L130中，R_7＝Ph，且R_8＝H，
在L131中，R_7＝Ph，且R_8＝Me，以及在L132中，R_7＝Ph，且R_8＝CD_3，

L133、L134、L135、L136、L137、L138、L139、L140、L141、L142、L143和L144具有结构



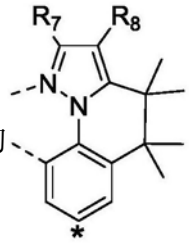
，

其中在L133中，R_7＝H，且R_8＝H，在L134中，R_7＝H，且R_8＝Ph，
在L135中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，在L136中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，
在L137中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(^iBu)_2$-C_6H_3，在L138中，R_7＝Ph，且R_8＝H，
在L139中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝H，以及在L140中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝H，
在L141中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝Ph，以及在L142中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝Ph，

在L143中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

以及在L144中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，

L145、L146、L147、L148、L149、L150、L151、L152和L153具有结构



，

其中在L145中，R_7＝H，且R_8＝H，在L146中，R_7＝H，且R_8＝Ph，

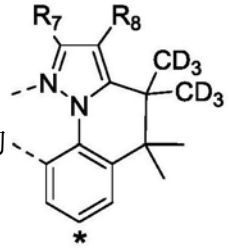
在L147中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，在L148中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，

在L149中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L150中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝H，

在L151中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝H，以及在L152中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝Ph，

以及在L153中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝Ph，

L154、L155、L156、L157、L158、L159、L160、L161和L162具有结构



，

其中在L154中，R_7＝H，且R_8＝H，在L155中，R_7＝H，且R_8＝Ph，

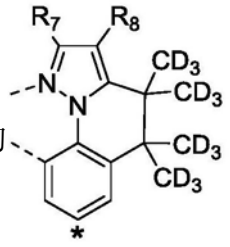
在L156中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，在L157中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，

在L158中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L159中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝H，

在L160中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝H，以及在L161中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝Ph，

以及在L162中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝Ph，

L163、L164、L165、L166、L167、L168、L169、L170和L171具有结构



，

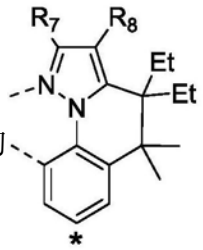
其中在L163中，R_7＝H，且R_8＝H，在L164中，R_7＝H，且R_8＝Ph，

在L165中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，在L166中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，

在L167中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L168中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝H，

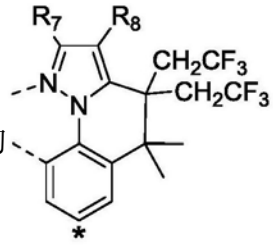
在L169中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝H，以及在L170中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝Ph，

以及在L171中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝Ph，

L172、L173、L174、L175、L176、L177、L178、L179和L180具有结构 

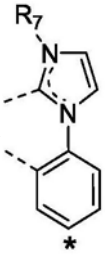
，

其中在L172中，R_7＝H，且R_8＝H，在L173中，R_7＝H，且R_8＝Ph，
在L174中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，在L175中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，
在L176中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L177中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝H，
在L178中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝H，以及在L179中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝Ph，
以及在L180中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝Ph

L181、L182、L183、L184、L185、L186、L187、L188和L189具有结构 

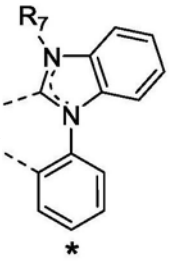
，

其中在L181中，R_7＝H，且R_8＝H，在L182中，R_7＝H，且R_8＝Ph，
在L183中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，在L184中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，
在L185中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L186中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝H，
在L187中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝H，以及在L188中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝Ph，
以及在L189中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝Ph，

L190、L191、L192、L193、L194和L195具有结构 

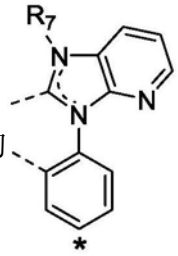
，

其中在L190中，R_7＝Me，在L191中，R_7＝CD_3，在L192中，R_7＝^{i}Pr，
在L193中，R_7＝Ph，在L194中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L195中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L196、L197、L198、L199、L200和L201具有结构 

，

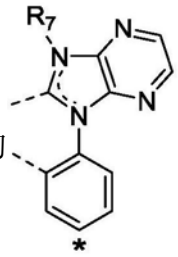
其中在L196中，R_7＝Me，在L197中，R_7＝CD_3，在L198中，R_7＝^{i}Pr，
在L199中，R_7＝Ph，在L200中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L201中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L202、L203、L204、L205、L206和L207具有结构 

，

其中在L202中，R_7＝Me，在L203中，R_7＝CD_3，在L204中，R_7＝^{i}Pr，

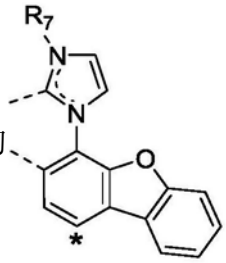
在L205中，R_7＝Ph，在L206中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L207中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L208、L209、L210、L211、L212和L213具有结构 

，

其中在L208中，R_7＝Me，在L209中，R_7＝CD_3，在L210中，R_7＝^{i}Pr，

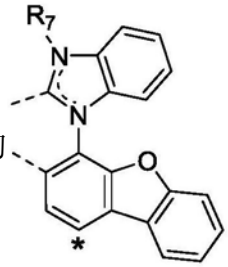
在L211中，R_7＝Ph，在L212中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L213中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L214、L215、L216、L217、L218和L219具有结构 

，

其中在L214中，R_7＝Me，在L215中，R_7＝CD_3，在L216中，R_7＝^{i}Pr，

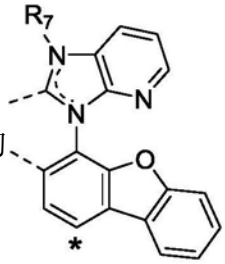
在L217中，R_7＝Ph，在L218中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L219中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L220、L221、L222、L223、L224和L225具有结构 

，

其中在L220中，R_7＝Me，在L221中，R_7＝CD_3，在L222中，R_7＝^{i}Pr，

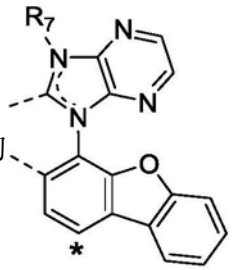
在L223中，R_7＝Ph，在L224中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L225中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L226、L227、L228、L229、L230和L231具有结构 

，

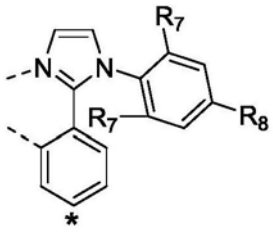
其中在L226中，R_7＝Me，在L227中，R_7＝CD_3，在L228中，R_7＝^{i}Pr，

在L229中，R_7＝Ph，在L230中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L231中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L232、L233、L234、L235、L236和L237具有结构  ，

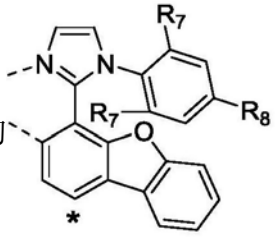
其中在L232中，R_7＝Me，在L233中，R_7＝CD_3，在L234中，R_7＝^{i}Pr，

在L235中，R_7＝Ph，在L236中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L237中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

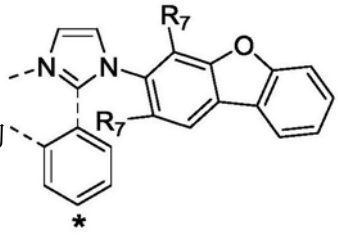
L238、L239、L240和L241具有结构  ，

其中在L238中，R_7＝Me，且R_8＝H，在L239中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，

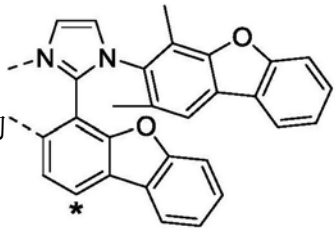
在L240中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，以及在L241中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

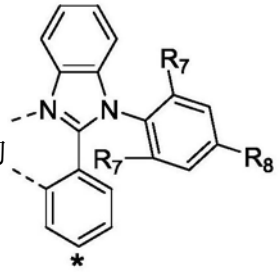
L242和L243具有结构  ，

其中在L242中，R_7＝Me，且R_8＝H，以及在L243中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，

L244和L245具有结构  ，

其中在L244中，R_7＝Me，以及在L245中，R_7＝^{i}Pr，

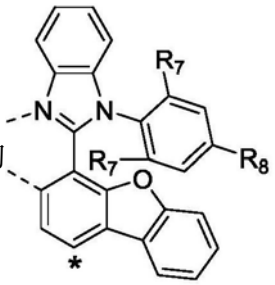
L246具有结构  ，

L247、L248、L249和L250具有结构 

，

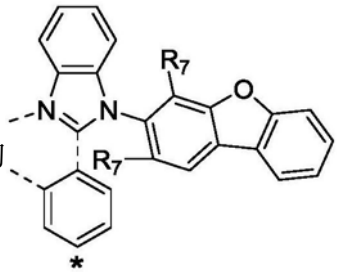
其中在L247中，R_7＝Me，且R_8＝H，在L248中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，

在L249中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，以及在L250中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

L250和L251具有结构 

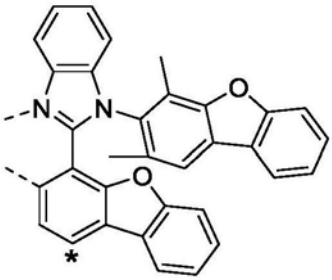
，

其中在L250中，R_7＝Me，且R_8＝H，以及在L251中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，

L252和L253具有结构 

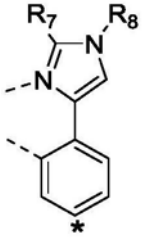
，

其中在L252中，R_7＝Me，以及在L253中，R_7＝^{i}Pr，

L255具有结构 

，

L256、L257、L258、L259、L260、L261、L262、L263、L264、L265、L266、L267和L268具有结构



，

其中在L256中，R_7＝H，且R_8＝Me，在L257中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，

在L258中，R_7＝H，且R_8＝^{i}Pr，在L259中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

在L260中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L261中，R_7＝Me，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

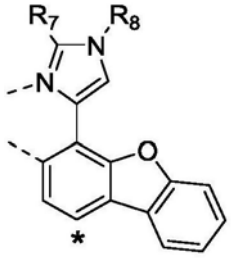
在L262中，R_7＝Me，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L263中，R_7＝CD_3，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

在L264中，R_7＝CD_3，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L265中，R_7＝Ph，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

在L266中，R_7＝Ph，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L267中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

以及在L268中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，

L269、L270、L271、L272、L273、L274、L275、L276、L277、L278、L279、L280和L281具有结构



，

其中在L269中，R_7＝H，且R_8＝Me，在L270中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，

在L271中，R_7＝H，且R_8＝^{i}Pr，在L272中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

在L273中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L274中，R_7＝Me，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

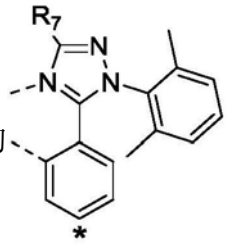
在L275中，R_7＝Me，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L276中，R_7＝CD_3，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

在L277中，R_7＝CD_3，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L278中，R_7＝Ph，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

在L279中，R_7＝Ph，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L280中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

以及在L281中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，

L282、L283、L284和L285具有结构

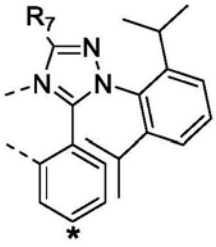


，

其中在L282中，R_7＝H，在L283中，R_7＝Me，

在L284中，R_7＝CD_3，以及在L285中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

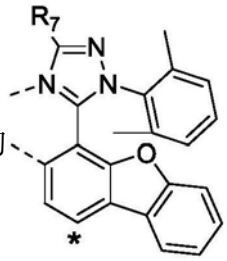
L286、L287、L288和L289具有结构



，

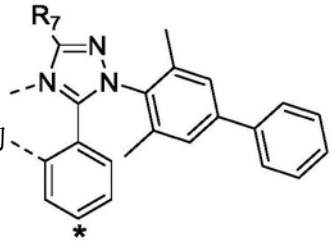
其中在L286中，R_7＝H，在L287中，R_7＝Me，

在L288中，R_7＝CD_3，以及在L289中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L290、L291、L292和L293具有结构  ，

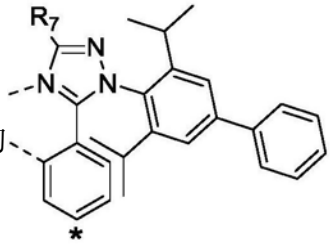
其中在L290中，R_7＝H，在L291中，R_7＝Me，

在L292中，R_7＝CD_3，以及在L293中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L294、L295、L296和L297具有结构  ，

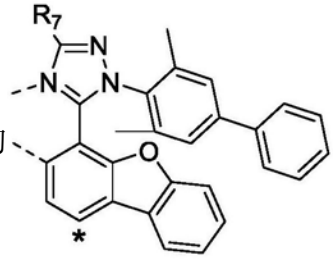
其中在L294中，R_7＝H，在L295中，R_7＝Me，

在L296中，R_7＝CD_3，以及在L297中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L298、L299、L300和L301具有结构  ，

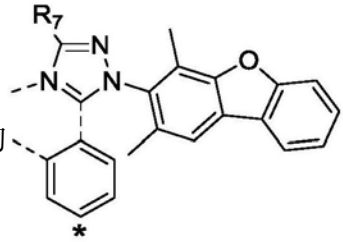
其中在L298中，R_7＝H，在L299中，R_7＝Me，

在L300中，R_7＝CD_3，以及在L301中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L302、L303、L304和L305具有结构  ，

其中在L302中，R_7＝H，在L303中，R_7＝Me，

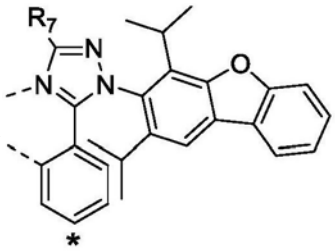
在L304中，R_7＝CD_3，以及在L305中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L306、L307、L308和L309具有结构  ，

其中在L306中，R_7＝H，在L307中，R_7＝Me，

在L308中，R_7＝CD_3，以及在L309中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L310、L311、L312和L313具有结构

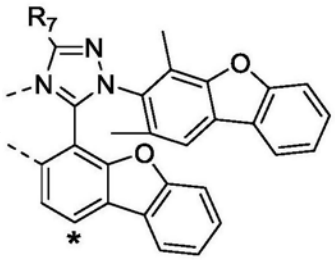


，

其中在L310中，R_7＝H，在L311中，R_7＝Me，

在L312中，R_7＝CD_3，以及在L313中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L314、L315、L316和L317具有结构

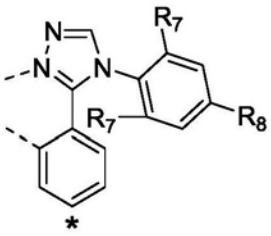


，

其中在L314中，R_7＝H，在L315中，R_7＝Me，

在L316中，R_7＝CD_3，以及在L317中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

L318、L319、L320和L321具有结构

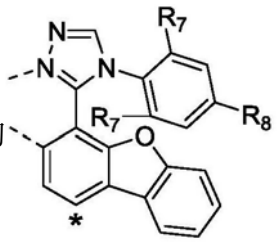


，

其中在L318中，R_7＝Me，且R_8＝H，在L319中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，

在L320中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，以及在L321中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

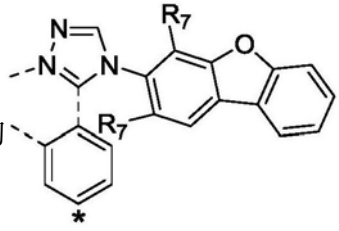
L322和L323具有结构



，

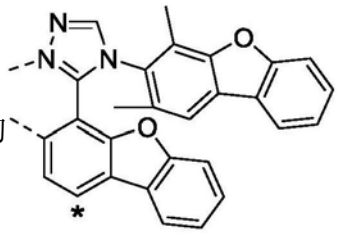
其中在L322中，R_7＝Me，且R_8＝H，以及在L323中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，

L324和L325具有结构

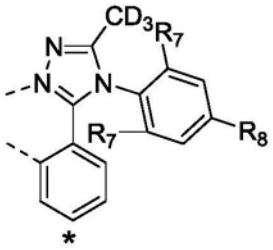


，

其中在L324中，R_7＝Me，以及在L325中，R_7＝^{i}Pr，

L326具有结构 

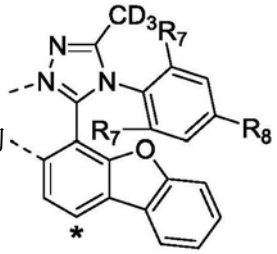
，

L327、L328、L329和L330具有结构 

，

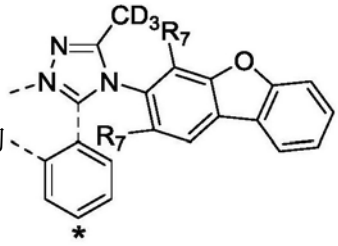
其中在L327中，R_7＝Me，且R_8＝H，在L328中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，

在L329中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，以及在L330中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

L331和L332具有结构 

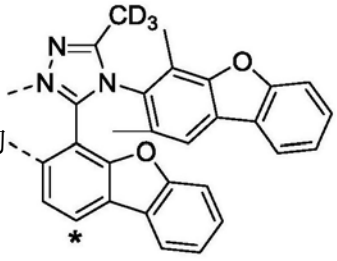
，

其中在L331中，R_7＝Me，且R_8＝H，以及在L332中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，

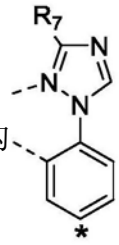
L333和L334具有结构 

，

其中在L333中，R_7＝Me，以及在L334中，R_7＝^{i}Pr，

L335具有结构 

，

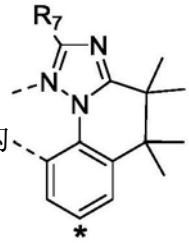
L336、L337、L338、L339、L340和L341具有结构 

，

其中在L336中，R_7＝H，在L337中，R_7＝Me，

在L338中，R_7＝CD_3，在L339中，R_7＝Ph，

在L340中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，以及在L341中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3

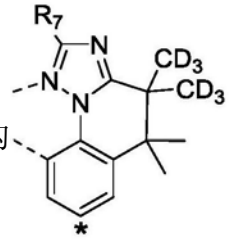
L342、L343、L344、L345、L346和L347具有结构 

，

其中在L342中，R_7＝H，在L343中，R_7＝Me，

在L344中，R_7＝CD_3，在L345中，R_7＝Ph，

在L346中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，以及在L347中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3

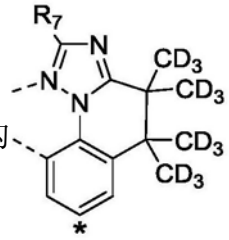
L348、L349、L350、L351、L352和L353具有结构 

，

其中在L348中，R_7＝H，在L349中，R_7＝Me，

在L350中，R_7＝CD_3，在L351中，R_7＝Ph，

在L352中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，以及在L353中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3

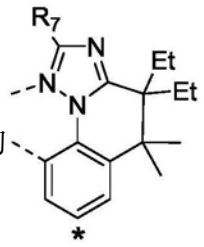
L354、L355、L356、L357、L358和L359具有结构 

，

其中在L354中，R_7＝H，在L355中，R_7＝Me，

在L356中，R_7＝CD_3，在L357中，R_7＝Ph，

在L358中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，以及在L359中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3

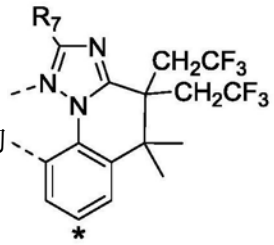
L360、L361、L362、L363、L364和L365具有结构 

，

其中在L360中，R_7＝H，在L361中，R_7＝Me，

在L362中，R_7＝CD_3，在L363中，R_7＝Ph，

在L364中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，以及在L365中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3

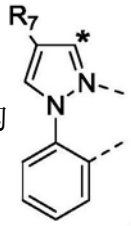
L366、L367、L368、L369、L370和L371具有结构 

，

其中在L366中，R_7＝H，在L367中，R_7＝Me，

在L368中，R_7＝CD_3，在L369中，R_7＝Ph，

在L370中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，以及在L371中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3

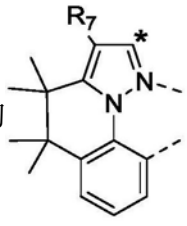
L372、L373、L374、L375和L376具有结构 

，

其中在L372中，R_7＝H，在L373中，R_7＝Ph，

在L374中，R_7＝2,6-$Me_2C_6H_3$，在L375中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，

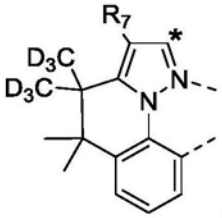
以及在L376中，R_7＝2,6-$(^iBu)_2C_6H_3$，

L377、L378和L379具有结构 

，

其中在L377中，R_7＝H，在L378中，R_7＝Ph，

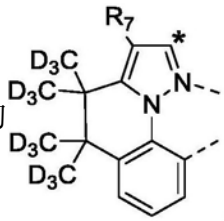
以及在L379中，R_7＝2,6-$Me_2C_6H_3$，

L380、L381、L382和L383具有结构 

，

其中在L380中，R_7＝H，在L381中，R_7＝Ph，

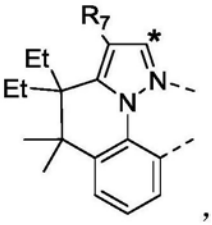
在L382中，R_7＝2,6-$Me_2C_6H_3$，以及在L383中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，

L384、L385、L386和L387具有结构 

，

其中在L384中，R_7＝H，在L385中，R_7＝Ph，

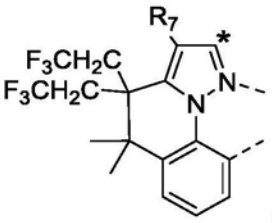
在L386中，R_7＝2,6-$Me_2C_6H_3$，以及在L387中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，

L388、L389、L390和L391具有结构 

，

其中在L388中，R_7＝H，在L389中，R_7＝Ph，

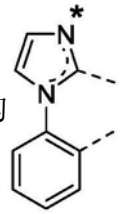
在L390中，R_7＝2,6-$Me_2C_6H_3$，以及在L391中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，

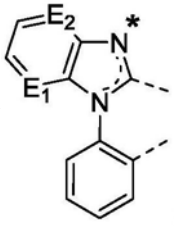
L392、L393、L394和L395具有结构 

，

其中在L392中，R_7＝H，在L393中，R_7＝Ph，

在L394中，R_7＝2,6-$Me_2C_6H_3$，以及在L395中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，

L396具有结构 

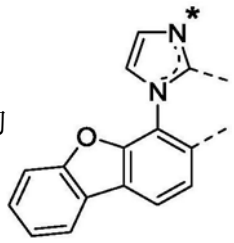
L397、L398和L399具有结构 

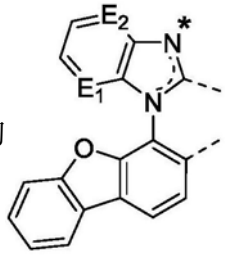
，

其中在L397中，E_1＝CH，且E_2＝CH，

在L398中，E_1＝N，且E_2＝CH，

以及在L399中，E_1＝N，且E_2＝N，

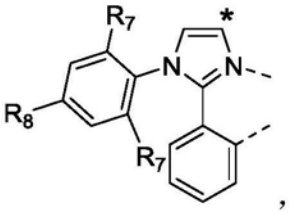
L400具有结构 

L401、L402和L403具有结构  ,

其中在L401中，E_1＝CH，且E_2＝CH，

在L402中，E_1＝N，且E_2＝CH，

以及在L403中，E_1＝N，且E_2＝N，

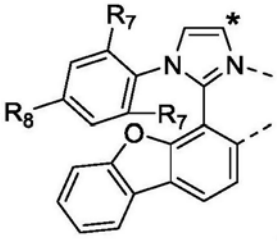
L404、L405、L406和L407具有结构  ,

其中在L404中，R_7＝Me，且R_8＝H，

在L405中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，

在L406中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，

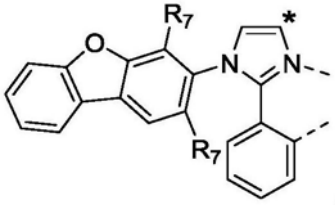
以及在L407中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

L408、L409和L410具有结构  ,

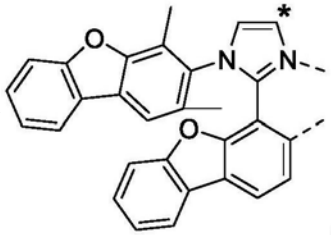
其中在L408中，R_7＝Me，且R_8＝H，

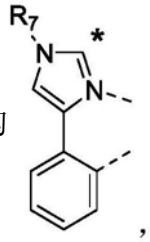
在L409中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，

以及在L410中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

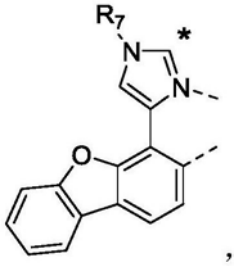
L411和L412具有结构  ,

其中在L411中，R_7＝Me，以及在L412中，R_7＝^{i}Pr，

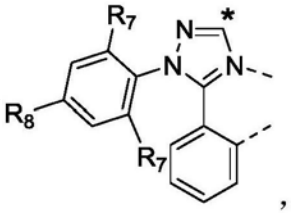
L413具有结构  ，

L414、L415、L416、L417和L418具有结构  ，

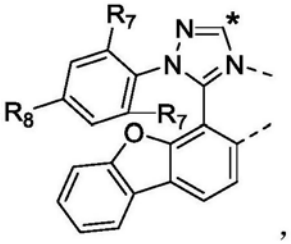
其中在L414中，R_7＝Me，在L415中，R_7＝CD_3，
在L416中，R_7＝^{i}Pr，在L417中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，
以及在L418中，R_7＝2,6-$(^{i}Pr)_2C_6H_3$，

L419、L420、L421、L422和L423具有结构  ，

其中在L419中，R_7＝Me，在L420中，R_7＝CD_3，
在L421中，R_7＝^{i}Pr，在L422中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，
以及在L423中，R_7＝2,6-$(^{i}Pr)_2C_6H_3$，

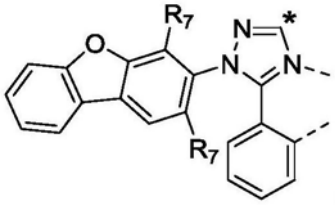
L424、L425、L426和L427具有结构  ，

其中在L424中，R_7＝Me，且R_8＝H，
在L425中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，
在L426中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，
以及在L427中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

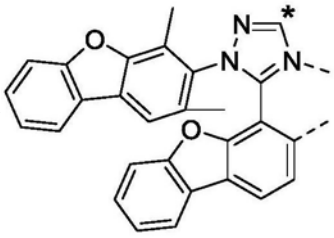
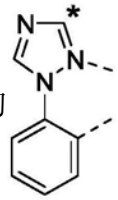
L428、L429和L430具有结构  ，

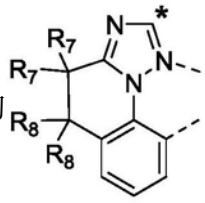
其中在L428中，R_7＝Me，且R_8＝H，
在L429中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，

以及在L430中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

L431和L432具有结构  ，

其中在L431中，R_7＝Me，以及在L432中，R_7＝^{i}Pr，

L433具有结构  ，L434具有结构  ，

L435、L436、L437、L438和L439具有结构  ，

其中在L435中，R_7＝Me，且R_8＝Me，

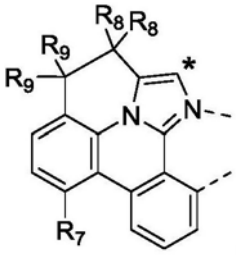
在L436中，R_7＝CD_3，且R_8＝Me，

在L437中，R_7＝CD_3，且R_8＝CD_3，

在L438中，R_7＝Et，且R_8＝Me，

以及在L439中，R_7＝CH_2CF_3，且R_8＝Me，

L440、L441、L442、L443、L444、L445、L446、L447、L448、L449、L450和L451具有结构

 ，

其中在L440中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝Me，在L441中，R_7＝Me，R_8＝Me，且R_9＝Me，

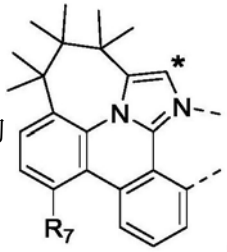
在L442中，R_7＝CD_3，R_8＝Me，且R_9＝Me，在L443中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，

在L444中，R_7＝Me，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，在L445中，R_7＝CD_3，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，

在L446中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝CD_3，在L447中，R_7＝Me，R_8＝Me，且R_9＝CD_3，

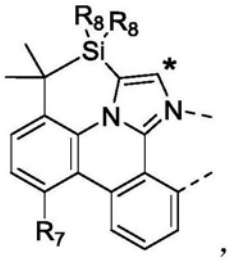
在L448中，R_7＝CD_3，R_8＝Me，且R_9＝CD_3，在L449中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝CD_3，

在L450中，R_7＝Me，R_8＝CD_3，且R_9＝CD_3，以及在L451中，R_7＝CD_3，R_8＝CD_3，且R_9＝CD_3，

L452、L453和L454具有结构  ,

其中在L452中,R_7=H,在L453中,R_7=Me,

以及在L454中,R_7=CD_3,

L455、L456、L457、L458、L459、L460、L461、L462和L463具有结构  ,

其中在L455中,R_7=H,且R_8=Me,

在L456中,R_7=Me,且R_8=Me,

在L457中,R_7=CD_3,且R_8=Me,

在L458中,R_7=H,且R_8=^{i}Pr,

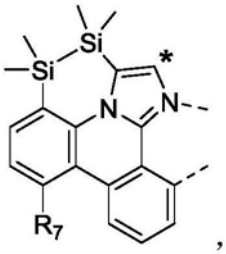
在L459中,R_7=Me,且R_8=^{i}Pr,

在L460中,R_7=CD_3,且R_8=^{i}Pr,

在L461中,R_7=H,且R_8=Ph,

在L462中,R_7=Me,且R_8=Ph,以及

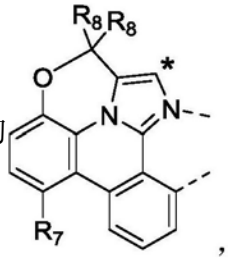
在L463中,R_7=CD_3,且R_8=Ph,

L464、L465和L466具有结构  ,

其中在L464中,R_7=H,

在L465中,R_7=Me,以及

在L466中:R_7=CD_3,

L467、L468、L469、L470、L471、L472、L473、L474和L475具有结构  ,

其中在L467中,R_7=H,且R_8=Me,

在L468中,R_7=Me,且R_8=Me,

在L469中，R_7＝CD_3，且R_8＝Me，

在L470中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，

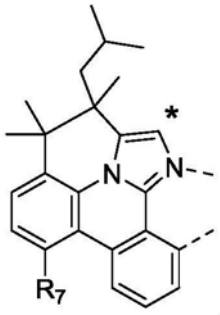
在L471中，R_7＝Me，且R_8＝CD_3，

在L472中，R_7＝CD_3，且R_8＝CD_3，

在L473中，R_7＝H，且R_8＝Ph，

在L474中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，以及

在L475中，R_7＝CD_3，且R_8＝Ph，

L476、L477和L478具有结构 

，

其中在L476中，R_7＝H，

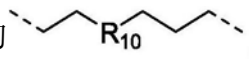
在L477中，R_7＝Me，以及

在L478中，R_7＝CD_3；

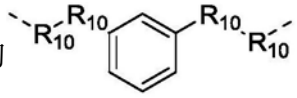
其中虚线指示与铱原子的键；

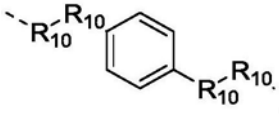
其中标记有*的碳在所有L_x结构中连接于H原子或在L_y和L_z结构中连接于$Link_q$；且

其中在化合物V中，$Link_q$是以下定义的结构Link1到Link21中的一个，且在化合物W中，$Link_q$是以下定义的结构Link22到Link53中的一个：

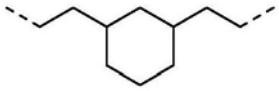
Link1和Link2具有结构 

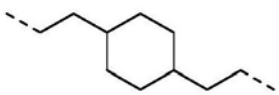
，其中在Link1中，R_{10}＝CH_2，以及在Link2中，R_{10}＝CH_2CH_2，

Link3和Link4具有结构 

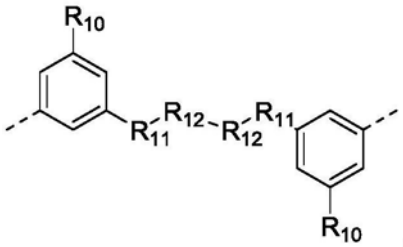
，其中在Link3中，R_{10}＝CH_2，以及在Link4中，R_{10}＝CD_2，Link5和Link6具有结构 

，其中在Link5中，R_{10}＝CH_2，以及在Link6中，R_{10}＝CD_2，


Link7 ，


Link8 ，

Link9、Link10、Link11、Link12、Link13、Link14、Link15、Link16和Link17具有结构



，

其中在Link9中，R_{10}＝H，R_{11}＝CH_2，且R_{12}＝CH_2，

在Link10中，R_{10}＝Me，R_{11}＝CH_2，且R_{12}＝CH_2，

在Link11中，R_{10}＝CD_3，R_{11}＝CH_2，且R_{12}＝CH_2，

在Link12中，R_{10}＝H，R_{11}＝CD_2，且R_{12}＝CH_2，

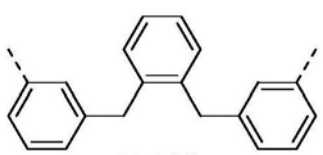
在Link13中，R_{10}＝Me，R_{11}＝CD_2，且R_{12}＝CH_2，

在Link14中，R_{10}＝CD_3，R_{11}＝CD_2，且R_{12}＝CH_2，

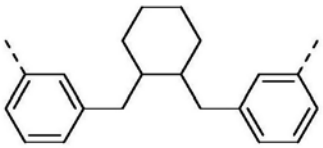
在Link15中，R_{10}＝H，R_{11}＝CD_2，且R_{12}＝CD_2，

在Link16中，R_{10}＝Me，R_{11}＝CD_2，且R_{12}＝CD_2，

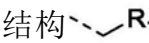
在Link17中，R_{10}＝CD_3，R_{11}＝CD_2，且R_{12}＝CD_2，

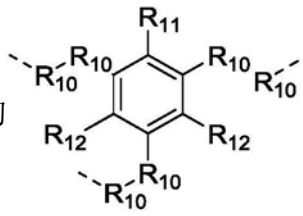


Link18 ，



Link19 ，

Link20和Link21具有结构  ，其中在Link20中，R_{10}＝CH_2，以及在Link21中，R_{10}＝CH_2CH_2，

Link22、Link23、Link24、Link25、Link26、Link27、Link28、Link29、Link30、Link31、Link32和Link33具有结构  ，

其中，在Link22中，R_{10}＝CH_2，且R_{11}＝R_{12}＝H，

在Link23中，R_{10}＝CD_2，且R_{11}＝R_{12}＝H，

在Link24中，R_{10}＝CH_2，且R_{11}＝R_{12}＝Me，

在Link25中，R_{10}＝CD_2，且R_{11}＝R_{12}＝Me，

在Link26中，R_{10}＝CH_2，R_{11}＝Me，且R_{12}＝H，

在Link27中，R_{10}＝CD_2，R_{11}＝Me，且R_{12}＝H，

在Link28中，R_{10}＝CH_2，R_{11}＝Et，且R_{12}＝H，

在Link29中，R_{10}＝CD_2，R_{11}＝Et，且R_{12}＝H，

在Link30中，R_{10}＝CH_2，R_{11}＝CH_2CF_3，且R_{12}＝H，

在Link31中，R_{10}＝CD_2，R_{11}＝CH_2CF_3，且R_{12}＝H，

在Link32中，R_{10}＝CH_2，R_{11}＝^{i}Bu，且R_{12}＝H，

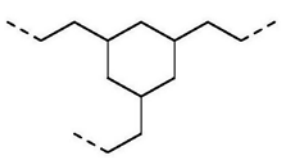
在Link33中，R_{10}＝CD_2，R_{11}＝^{i}Bu，且R_{12}＝H，

在Link34中，R_{10}＝CH_2，R_{11}＝$CH_2(CH_3)_3$，且R_{12}＝H，

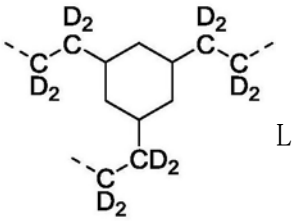
在Link35中，R_{10}＝CD_2，R_{11}＝$CH_2(CH_3)_3$，且R_{12}＝H，

在Link36中，R_{10}＝CH_2，R_{11}＝$CH_2CH(CH_3)(CF_3)$，且R_{12}＝H，

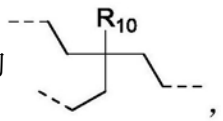
在Link37中，R_{10}＝CD_2，R_{11}＝$CH_2CH(CH_3)(CF_3)$，且R_{12}＝H，



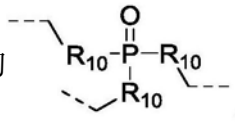
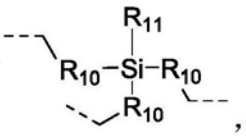
Link38 ，



Link39 ，

Link40和Link41具有结构  ，

其中，在Link40中，R_{10}＝Me，以及在Link41中，R_{10}＝Ph，

Link42和Link43具有结构  ，其中，在Link42中，R_{10}＝CH_2，以及在Link43中，R_{10}＝O，Link44、Link45、Link46和Link47具有结构  ，

其中，在Link44中，R_1＝CH_2，且R_2＝Me，

在Link45中，R_1＝CH_2，且R_2＝Ph，

在Link46中，R_1＝O，且R_2＝Me，以及

在Link47中，R_1＝O，且R_2＝Ph，

Link48、Link49、Link50、Link51、Link52和Link53具有结构  ，

其中，在Link48中，E＝C，R_{10}＝CH_2，且R_{11}＝Me，

在Link49中，E＝C，R_{10}＝CH_2，且R_{11}＝Ph，

在Link50中，E＝C，R_{10}＝CD_2，且R_{11}＝Me，

在Link51中，E＝C，R_{10}＝CD_2，且R_{11}＝Ph，

在Link52中，E＝Si，R_{10}＝CH_2，且R_{11}＝Me，以及

在Link53中，E＝Si，R_{10}＝CH_2，且R_{11}＝Ph；其中虚线表示连接于L_x、L_y和L_z上由*标记的碳的键。

13.根据权利要求12所述的化合物，其中所述化合物是选自由以下组成的群组：Ir(L_{51}-L_{51}-L_{51}-$Link_{22}$)、Ir(L_{51}-L_{51}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{51}-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{51}-L_{51}-L_{51}-$Link_{23}$)、Ir(L_{51}-L_{51}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{51}-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_9-L_9-L_9-$Link_{22}$)、Ir(L_9-L_9-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_9-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_9-L_9-L_9-$Link_{23}$)、Ir(L_9-L_9-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_9-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{47}-L_{47}-L_{47}-$Link_{22}$)、Ir(L_{47}-L_{47}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{47}-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{47}-L_{47}-L_{471}-$Link_{23}$)、Ir(L_{47}-L_{47}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{47}-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_5-L_5-L_5-$Link_{22}$)、Ir(L_5-L_5-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_5-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_5-L_5-L_5-$Link_{23}$)、Ir(L_5-L_5-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_5-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_1-L_1-L_1-$Link_{22}$)、Ir(L_1-L_1-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_1-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_1-L_1-L_1-$Link_{23}$)、Ir(L_1-L_1-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_1-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{43}-L_{43}-L_{43}-$Link_{22}$)、Ir(L_{43}-L_{43}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{43}-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{43}-L_{43}-L_{43}-

$Link_{23}$)、Ir(L_{43}-L_{43}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{43}-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{117}-L_{117}-L_{117}-$Link_{22}$)、Ir(L_{117}-L_{117}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{117}-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{117}-L_{117}-L_{117}-$Link_{23}$)、Ir(L_{117}-L_{117}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{117}-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{120}-L_{120}-L_{120}-$Link_{22}$)、Ir(L_{120}-L_{120}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{120}-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{120}-L_{120}-L_{120}-$Link_{23}$)、Ir(L_{120}-L_{120}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{120}-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_9)(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_9)(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{51})(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{51})(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{47})(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{47})(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_5)(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_5)(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_1)(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_1)(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{43})(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{43})(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{117})(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{117})(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{120})(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{120})(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_9)(L_9-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_9)(L_9-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{51})(L_{51}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{51})(L_{51}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{47})(L_{47}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{47})(L_{47}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_5)(L_5-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_5)(L_5-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_1)(L_1-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_1)(L_1-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{43})(L_{43}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{43})(L_{43}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{117})(L_{117}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{117})(L_{117}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{120})(L_{120}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{120})(L_{120}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_9-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_9-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{51}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{51}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{47}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{47}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_5-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_5-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_1-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_1-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{43}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{43}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{117}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{117}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{120}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{120}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_9-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_9-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_9-L_9-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_9-L_9-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{51}-L_{51}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{51}-L_{51}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{47}-L_{47}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{47}-L_{47}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_5-L_5-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_5-L_5-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_1-L_1-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_1-L_1-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{43}-L_{43}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{43}-L_{43}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{117}-L_{117}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{117}-L_{117}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{120}-L_{120}-$Link_3$)和Ir(L_{146})(L_{120}-L_{120}-$Link_4$)。

14.一种有机发光装置OLED,其包含:

阳极;

阴极;以及

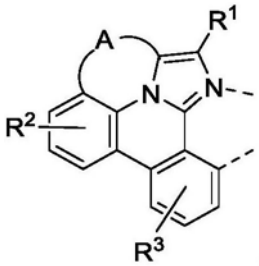
安置于所述阳极与所述阴极之间的有机层,其包含具有式Ir(L_A)(L_B)的化合物;

其中L_A是双齿、三齿、四齿、五齿或六齿配体;

其中L_B是单齿、双齿、三齿或四齿配体,或不存在;

其中L_A加L_B的总齿合度是6;

其中L_A包含至少一种式I结构:



,式I;

其中A是具有两至三个键联原子的键联基团,其中所述键联原子各自独立地选自由以

下组成的群组:C、Si、O、S、N、B;

其中R^2和R^3各自独立地表示单取代到最大可允许数目的取代或无取代;

其中R^1、R^2和R^3中的每一个独立地选自由以下组成的群组:氢、氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳基、杂芳基、酰基、羧酸、醚、酯、腈、异腈、硫基、亚磺酰基、磺酰基、膦基和其组合;

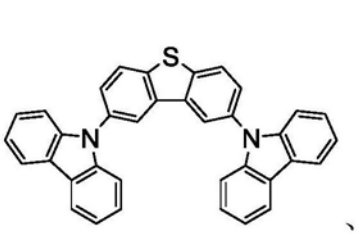
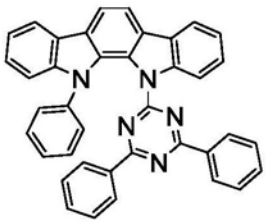
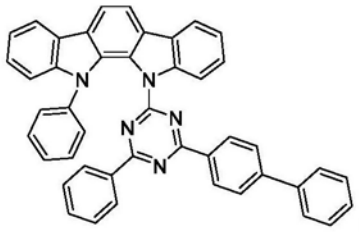
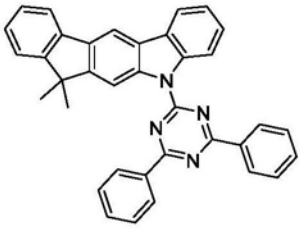
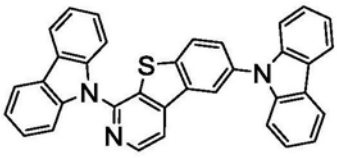
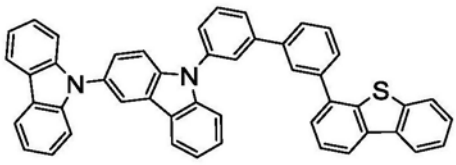
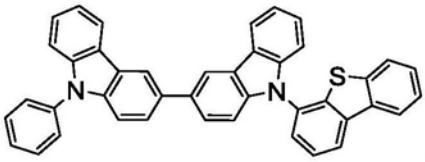
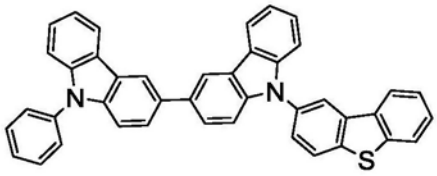
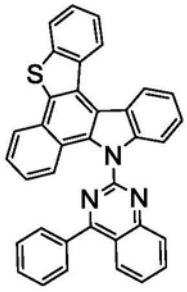
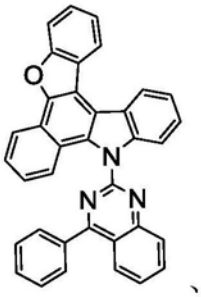
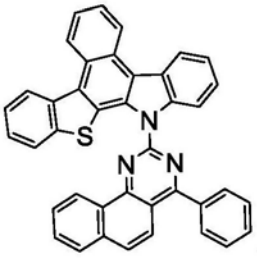
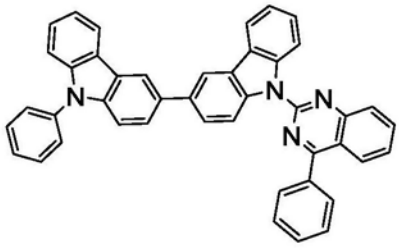
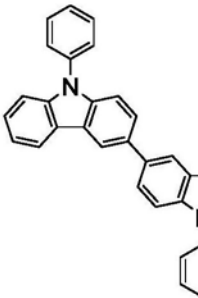
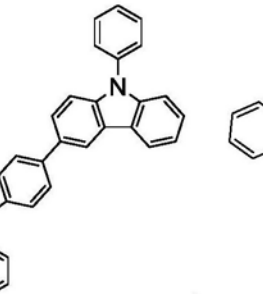
其中任两个取代基可以接合或稠合在一起以形成环;且

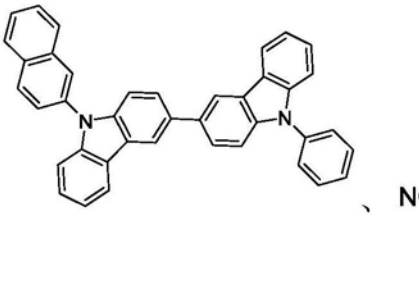
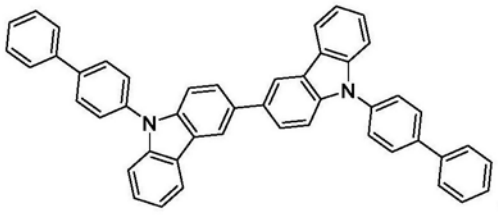
其中R^1或R^3能够经由键联基团与另一配体接合以形成较高齿合度配体。

15.根据权利要求14所述的OLED,其中所述有机层是发射层,并且所述化合物是发射掺杂剂或非发射掺杂剂。

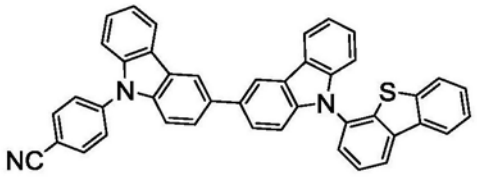
16.根据权利要求14所述的OLED,其中所述有机层进一步包含主体,其中所述主体包含至少一个选自由以下组成的群组的化学基团:金属络合物、三亚苯、咔唑、二苯并噻吩、二苯并呋喃、二苯并硒吩、氮杂三亚苯、氮杂咔唑、氮杂-二苯并噻吩、氮杂-二苯并呋喃和氮杂-二苯并硒吩。

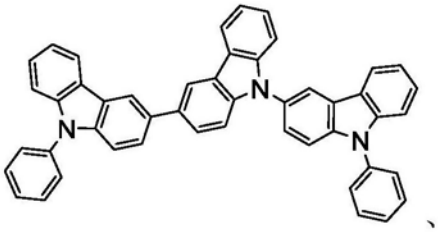
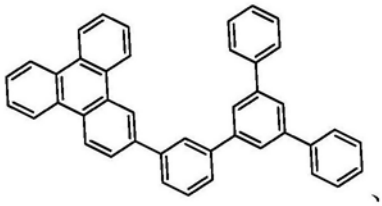
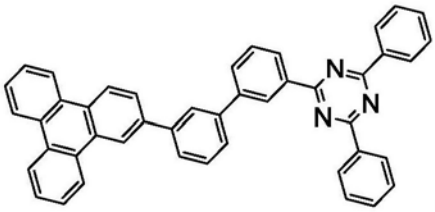
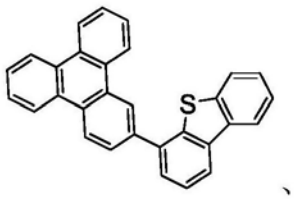
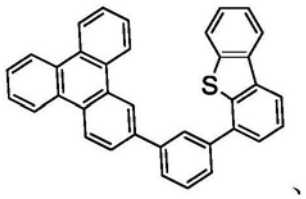
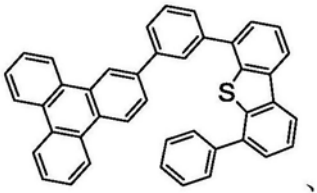
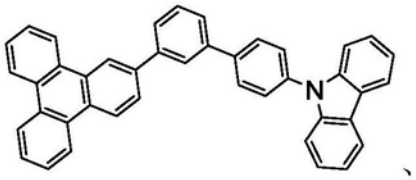
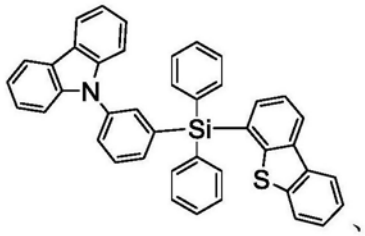
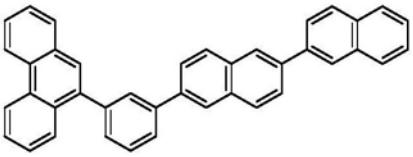
17.根据权利要求14所述的OLED,其中所述有机层进一步包含主体,并且所述主体是选自由以下组成的群组:


、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、










和其组合。

18.一种消费型产品，其包含有机发光装置，所述有机发光装置包含：

阳极；

阴极；以及

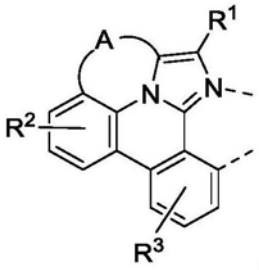
安置于所述阳极与所述阴极之间的有机层，其包含具有式Ir(L$_A$)(L$_B$)的化合物；

其中L$_A$是双齿、三齿、四齿、五齿或六齿配体；

其中L$_B$是单齿、双齿、三齿或四齿配体，或不存在；

其中L$_A$加L$_B$的总齿合度是6；

其中L$_A$包含至少一种式I结构：


，式I；

其中A是具有两至三个键联原子的键联基团，其中所述键联原子各自独立地选自由以下组成的群组：C、Si、O、S、N、B；

其中R^{2}和R^{3}各自独立地表示单取代到最大可允许数目的取代或无取代；

其中R^1、R^{2}和R^{3}中的每一个独立地选自由以下组成的群组：氢、氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳

基、杂芳基、酰基、羧酸、醚、酯、腈、异腈、硫基、亚磺酰基、磺酰基、膦基和其组合；

其中任两个取代基可以接合或稠合在一起以形成环；且

其中R^1或R^3能够经由键联基团与另一配体接合以形成较高齿合度配体。

19.根据权利要求18所述的消费型产品，其中所述消费型产品是以下中的一种：平板显示器、曲面显示器、计算机监视器、医疗监视器、电视机、告示牌、用于内部或外部照明和/或发信号的灯、平视显示器、全透明或部分透明的显示器、柔性显示器、可卷曲显示器、可折叠显示器、可拉伸显示器、激光打印机、电话、蜂窝电话、平板电脑、平板手机、个人数字助理PDA、可佩戴装置、膝上型计算机、数码相机、摄像机、取景器、对角线小于2英寸的微型显示器、3-D显示器、虚拟现实或增强现实显示器、交通工具、包含多个平铺在一起的显示器的视频墙、剧院或体育馆屏幕或指示牌。

20.一种调配物，其包含根据权利要求1所述的化合物。

有机电致发光材料和装置

[0001] 相关申请的交叉参考

[0002] 本申请根据35U.S.C.§119(e)要求2017年8月10日提交的美国临时申请第62/543,694号的优先权,其全部内容以引入的方式并入本文中。

技术领域

[0003] 本发明涉及供用作发射体的化合物;和包括其的装置,如有机发光二极管。

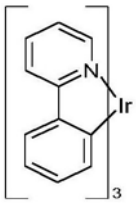
背景技术

[0004] 出于多种原因,利用有机材料的光电装置变得越来越受欢迎。用于制造所述装置的许多材料相对较为便宜,因此有机光电装置具有优于无机装置的成本优势的潜力。另外,有机材料的固有性质(例如其柔性)可以使其较适用于特定应用,如在柔性衬底上的制造。有机光电装置的实例包括有机发光二极管/装置(OLED)、有机光电晶体管、有机光伏电池和有机光电检测器。对于OLED,有机材料可以具有优于常规材料的性能优势。举例来说,有机发射层发射光的波长通常可以容易地用适当的掺杂剂来调节。

[0005] OLED利用有机薄膜,其在电压施加于装置上时会发射光。OLED正成为用于如平板显示器、照明和背光的应用中的日益受关注的技术。美国专利第5,844,363号、第6,303,238号和第5,707,745号中描述若干OLED材料和配置,所述专利以全文引用的方式并入本文中。

[0006] 磷光发射分子的一个应用是全色显示器。针对此类显示器的行业标准需要适合于发射特定颜色(称为“饱和”色)的像素。具体来说,这些标准需要饱和红色、绿色和蓝色像素。或者,OLED可经设计以发射白光。在常规液晶显示器中,使用吸收滤光器过滤来自白色背光的发射以产生红色、绿色和蓝色发射。相同技术也可以用于OLED。白色OLED可以是单EML装置或堆叠结构。可以使用所属领域中所熟知的CIE坐标来测量色彩。

[0007] 绿色发射分子的一个实例是三(2-苯基吡啶)铱,表示为$Ir(ppy)_3$,其具有以下结构:

[0008] 

[0009] 在这个图和下文的图中,我们以直线形式描绘氮与金属(此处是Ir)的配价键。

[0010] 如本文所用,术语“有机”包括可以用于制造有机光电装置的聚合材料和小分子有机材料。“小分子”是指并非聚合物的任何有机材料,并且“小分子”可能实际上相当大。在一些情况下,小分子可以包括重复单元。举例来说,使用长链烷基作为取代基并不会将某一分子从“小分子”类别中去除。小分子还可以并入聚合物中,例如作为聚合物主链上的侧接基团或作为主链的一部分。小分子还可以充当树枝状聚合物的核心部分,所述树枝状聚合物由一系列构建在核心部分上的化学壳层组成。树枝状聚合物的核心部分可以是荧光或磷光小分子发射体。树枝状聚合物可以是“小分子”,并且认为当前在OLED领域中使用的所有树

枝状聚合物都是小分子。

[0011] 如本文所用，“顶部”意指离衬底最远，而“底部”意指最靠近衬底。在第一层被描述为“安置于”第二层“上方”的情况下，第一层被安置于离基板较远处。除非规定第一层“与”第二层“接触”，否则第一与第二层之间可以存在其它层。举例来说，即使阴极和阳极之间存在各种有机层，仍可以将阴极描述为“安置于”阳极“上方”。

[0012] 如本文所用，“溶液可处理”意指能够以溶液或悬浮液的形式在液体介质中溶解、分散或传输和/或从液体介质沉积。

[0013] 当认为配体直接促成发射材料的光敏性质时，所述配体可以被称为“光敏性的”。当认为配体并不促成发射材料的光敏性质时，所述配体可以被称为“辅助性的”，但辅助性配体可以改变光敏性配体的性质。

[0014] 如本文所用，并且如所属领域的技术人员通常将理解，如果第一能级较接近真空能级，那么第一“最高占用分子轨道”(Highest Occupied Molecular Orbital，HOMO)或“最低未占用分子轨道”(Lowest Unoccupied Molecular Orbital，LUMO)能级“大于”或“高于”第二HOMO或LUMO能级。由于将电离电位(IP)测量为相对于真空能级的负能量，因此较高HOMO能级对应于具有较小绝对值的IP(较不负(less negative)的IP)。类似地，较高LUMO能级对应于具有较小绝对值的电子亲和性(EA)(较不负的EA)。在顶部是真空能级的常规能级图上，材料的LUMO能级高于相同材料的HOMO能级。“较高”HOMO或LUMO能级表现为比“较低”HOMO或LUMO能级更靠近这个图的顶部。

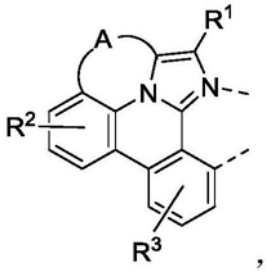
[0015] 如本文所用，并且如所属领域的技术人员通常将理解，如果第一功函数具有较高绝对值，那么第一功函数“大于”或“高于”第二功函数。因为通常将功函数测量为相对于真空能级的负数，所以这意指“较高”功函数是更负的(more negative)。在顶部是真空能级的常规能级图上，“较高”功函数经说明为在向下方向上离真空能级较远。因此，HOMO和LUMO能级的定义遵循与功函数不同的定则。

[0016] 关于OLED和上文所述的定义的更多细节可以见于美国专利第7,279,704号中，所述专利以全文引用的方式并入本文中。

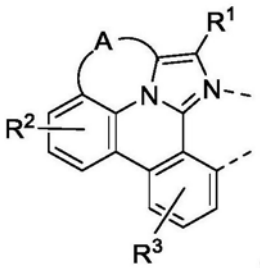
发明内容

[0017] 一种产生稳定金属络合物的常见策略是使配位部分彼此栓系(tether)，增加其热、电化学和光化学稳定性。此类栓系可具有除稳定性以外的其它有益性质，如增强或改变磷光性质和效率以及有助于其纯化。本公开详述了使用此类拴系的双-和三-双齿配体来改进并有内部束带(internally-strapped)的菲啶咪唑配体的有机金属磷光发射体的稳定性和发光性质。

[0018] 公开了一种化合物，其具有式$Ir(L_A)(L_B)$的结构，其中L_A是双齿、三齿、四齿、五齿或六齿配体，且L_B是单齿、双齿、三齿或四齿配体，或不存在。L_A加L_B的总齿合度是6，其中L_A包含至少一种式I结构：

[0019]  其中A是具有两到三个键联原子的键联基团，其中所述键联原子各自独立地选自由以下组成的群组：C、Si、O、S、N、B；其中R^2和R^3各自独立地表示单取代到最大可允许数目的取代或无取代；其中R^1、R^2和R^3中的每一个独立地选自由以下组成的群组：氢、氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳基、杂芳基、酰基、羧酸、醚、酯、腈、异腈、硫基、亚磺酰基、磺酰基、膦基和其组合；其中任两个取代基可以接合或稠合在一起以形成环；且其中R^1或R^3可经由键联基团与另一配体接合以形成齿合度比双齿高的配体。

[0020] 还公开了一种OLED，其包含阳极、阴极和安置在所述阳极与所述阴极之间的有机层，其中所述有机层包含具有式$Ir(L_A)(L_B)$的化合物；其中L_A是双齿、三齿、四齿、五齿或六齿配体；其中L_B是单齿、双齿、三齿、或四齿配体，或不存在；其中L_A加L_B的总齿合度是6；其中L_A包含至少一种式I结构：

[0021]  式I；其中A是具有两到三个键联原子的键联基团，其中所述键联原子各自独立地选自由以下组成的群组：C、Si、O、S、N、B；其中R^2和R^3各自独立地表示单取代到最大可允许数目的取代或无取代；其中R^1、R^2和R^3中的每一个独立地选自由以下组成的群组：氢、氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳基、杂芳基、酰基、羧酸、醚、酯、腈、异腈、硫基、亚磺酰基、磺酰基、膦基和其组合；其中任两个取代基可以接合或稠合在一起以形成环；且其中R^1或R^3可经由键联基团与另一配体接合以形成较高齿合度配体。

[0022] 还公开了一种包含OLED的消费型产品。

附图说明

[0023] 图1展示一种有机发光装置。

[0024] 图2展示不具有独立电子传输层的倒置式有机发光装置。

具体实施方式

[0025] 一般来说，OLED包含至少一个有机层，其安置于阳极与阴极之间并且与阳极和阴极电连接。当施加电流时，阳极注入空穴并且阴极注入电子到有机层中。所注入的空穴和电子各自朝带相反电荷的电极迁移。当电子和空穴定位在同一分子上时，形成“激子”，其为具有激发能态的定域电子-空穴对。当激子通过光发射机制弛豫时，发射光。在一些情况下，激

子可以定位于准分子(excimer)或激态复合物上。非辐射机制(如热弛豫)也可能发生,但通常被视为不合需要的。

[0026] 最初的OLED使用从单态发射光(“荧光”)的发射分子,如例如美国专利第4,769,292号中所公开,其以全文引用的方式并入。荧光发射通常在小于10纳秒的时帧内发生。

[0027] 最近,已经展示了具有从三重态发射光(“磷光”)的发射材料的OLED。巴尔多(Baldo)等人,“来自有机电致发光装置的高效磷光发射(Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices)”,自然(Nature),第395卷,151-154,1998(“巴尔多-I”);和巴尔多等人,“基于电致磷光的极高效绿色有机发光装置(Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence)”,应用物理快报(Appl.Phys.Lett.),第75卷,第3,4-6期(1999)(“巴尔多-II”),所述文献以全文引用的方式并入。美国专利第7,279,704号第5-6栏中更详细地描述磷光,所述专利以引用的方式并入。

[0028] 图1展示有机发光装置100。图不一定按比例绘制。装置100可以包括衬底110、阳极115、空穴注入层120、空穴传输层125、电子阻挡层130、发射层135、空穴阻挡层140、电子传输层145、电子注入层150、保护层155、阴极160和阻挡层170。阴极160是具有第一导电层162和第二导电层164的复合阴极。装置100可以通过按顺序沉积所述层来制造。这些各种层和实例材料的性质和功能在US 7,279,704第6-10栏中更详细地描述,所述专利以引用的方式并入。

[0029] 可以得到这些层中的每一个的更多实例。举例来说,柔性并且透明的衬底-阳极组合公开于美国专利第5,844,363号中,所述专利以全文引用的方式并入。经p掺杂的空穴传输层的实例是以50:1的摩尔比掺杂有F_4-TCNQ的m-MTDATA,如美国专利申请公开第2003/0230980号中所公开,所述专利以全文引用的方式并入。发光和主体材料的实例公开于汤普森(Thompson)等人的美国专利第6,303,238号中,所述专利以全文引用的方式并入。经n掺杂的电子传输层的实例是以1:1的摩尔比掺杂有Li的BPhen,如美国专利申请公开第2003/0230980号中所公开,所述公开案以全文引用的方式并入。以全文引用的方式并入的美国专利第5,703,436号和第5,707,745号公开了阴极的实例,所述阴极包括具有含上覆的透明、导电、溅镀沉积的ITO层的金属(如Mg:Ag)薄层的复合阴极。阻挡层的理论和使用更详细地描述于美国专利第6,097,147号和美国专利申请公开第2003/0230980号中,所述专利以全文引用的方式并入。注入层的实例提供于美国专利申请公开第2004/0174116号中,其以全文引用的方式并入。保护层的描述可以见于美国专利申请公开第2004/0174116号中,其以全文引用的方式并入。

[0030] 图2展示倒置式OLED 200。所述装置包括衬底210、阴极215、发射层220、空穴传输层225和阳极230。装置200可以通过按顺序沉积所述层来制造。因为最常见OLED配置具有安置于阳极上方的阴极,并且装置200具有安置于阳极230下的阴极215,所以装置200可以被称为“倒置式”OLED。可以在装置200的对应层中使用与关于装置100所述的那些材料类似的材料。图2提供如何可以从装置100的结构省去一些层的一个实例。

[0031] 图1和2中所说明的简单分层结构借助于非限制性实例提供,并且应理解本发明的实施例可以与各种其它结构结合使用。所描述的具体材料和结构本质上是示范性的,并且可以使用其它材料和结构。可以通过以不同方式组合所述的各种层来获得功能性OLED,或

可以基于设计、性能和成本因素完全省略各层。也可以包括未具体描述的其它层。可以使用除具体描述的材料以外的材料。尽管本文中所提供的许多实例将各种层描述为包括单一材料，但应理解，可以使用材料的组合，如主体和掺杂剂的混合物，或更一般来说，混合物。此外，所述层可以具有各种子层。本文中给予各种层的名称并不意图具有严格限制性。举例来说，在装置200中，空穴传输层225传输空穴并且将空穴注入到发射层220中，并且可以被描述为空穴传输层或空穴注入层。在一个实施例中，可以将OLED描述为具有安置于阴极与阳极之间的“有机层”。这一有机层可以包含单个层，或可以进一步包含如例如关于图1和2所述的不同有机材料的多个层。

[0032] 还可以使用未具体描述的结构和材料，例如包含聚合材料的OLED(PLED)，例如弗兰德(Friend)等人的美国专利第5,247,190号中所公开，所述专利以全文引用的方式并入。借助于另一实例，可以使用具有单个有机层的OLED。OLED可以堆叠，例如如在以全文引用的方式并入的福利斯特(Forrest)等人的美国专利第5,707,745号中所述。OLED结构可以偏离图1和2中所说明的简单分层结构。举例来说，衬底可以包括有角度的反射表面以改进出耦(out-coupling)，例如如在福利斯特等人的美国专利第6,091,195号中所述的台式结构，和/或如在布尔维克(Bulovic)等人的美国专利第5,834,893号中所述的凹点结构，所述专利以全文引用的方式并入。

[0033] 除非另外规定，否则可以通过任何合适的方法来沉积各个实施例的层中的任一个。对于有机层，优选方法包括热蒸发、喷墨(如以全文引用的方式并入的美国专利第6,013,982号和第6,087,196号中所述)、有机气相沉积(OVPD)(如以全文引用的方式并入的福利斯特等人的美国专利第6,337,102号中所述)和通过有机蒸气喷射印刷(OVJP)的沉积(如以全文引用的方式并入的美国专利第7,431,968号中所述)。其它合适的沉积方法包括旋涂和其它基于溶液的工艺。基于溶液的工艺优选在氮气或惰性气氛中进行。对于其它层，优选的方法包括热蒸发。优选的图案化方法包括通过掩模的沉积、冷焊(如以全文引用的方式并入的美国专利第6,294,398号和第6,468,819号中所述)和与例如喷墨和有机蒸气喷射印刷(OVJP)的沉积方法中的一些方法相关联的图案化。还可以使用其它方法。可以将待沉积的材料改性以使其与具体沉积方法相适合。举例来说，可以在小分子中使用支链或非支链并且优选含有至少3个碳的例如烷基和芳基的取代基来增强其经受溶液处理的能力。可以使用具有20个或更多个碳的取代基，并且3到20个碳是优选范围。具有不对称结构的材料可以比具有对称结构的材料具有更好的溶液可处理性，因为不对称材料可能具有更低的再结晶倾向性。可以使用树枝状聚合物取代基来增强小分子经受溶液处理的能力。

[0034] 根据本发明实施例制造的装置可以进一步任选地包含阻挡层。阻挡层的一个用途是保护电极和有机层免受暴露于包括水分、蒸气和/或气体等的环境中的有害物质的损害。阻挡层可以沉积在衬底、电极上，沉积在衬底、电极下或沉积在衬底、电极旁，或沉积在装置的任何其它部分(包括边缘)上。阻挡层可以包含单个层或多个层。阻挡层可以通过各种已知的化学气相沉积技术形成，并且可以包括具有单一相的组合物和具有多个相的组合物。任何合适的材料或材料组合都可以用于阻挡层。阻挡层可以并有有无机化合物或有机化合物或两者。优选的阻挡层包含聚合材料与非聚合材料的混合物，如以全文引用的方式并入本文中的美国专利第7,968,146号、PCT专利申请第PCT/US2007/023098号和第PCT/US2009/042829号中所述。为了被视为“混合物”，构成阻挡层的前述聚合材料和非聚合材料应在相

同反应条件下沉积和/或同时沉积。聚合材料与非聚合材料的重量比可以在95:5到5:95范围内。聚合材料和非聚合材料可以由同一前体材料产生。在一个实例中，聚合材料与非聚合材料的混合物基本上由聚合硅和无机硅组成。

[0035] 根据本发明的实施例而制造的装置可以并入到多种多样的电子组件模块(或单元)中，所述电子组件模块可以并入到多种电子产品或中间组件中。所述电子产品或中间组件的实例包括可以为终端用户产品制造商所利用的显示屏、照明装置(如离散光源装置或照明面板)等。所述电子组件模块可以任选地包括驱动电子装置和/或电源。根据本发明的实施例而制造的装置可以并入到多种多样的消费型产品中，所述消费型产品具有一或多个电子组件模块(或单元)并入于其中。公开一种包含OLED的消费型产品，所述OLED在OLED中的有机层中包括本公开的化合物。所述消费型产品应包括含一或多个光源和/或某种类型的视觉显示器中的一或多个的任何种类的产品。所述消费型产品的一些实例包括平板显示器、曲面显示器、计算机监视器、医疗监视器、电视机、告示牌、用于内部或外部照明和/或发信号的灯、平视显示器、全透明或部分透明的显示器、柔性显示器、可卷曲显示器、可折叠显示器、可拉伸显示器、激光打印机、电话、蜂窝电话、平板电脑、平板手机、个人数字助理(PDA)、可佩戴装置、膝上型计算机、数码相机、摄像机、取景器、微型显示器(对角线小于2英寸的显示器)、3-D显示器、虚拟现实或增强现实显示器、交通工具、包含多个平铺在一起的显示器的视频墙、剧院或体育馆屏幕，和指示牌。可以使用各种控制机制来控制根据本发明而制造的装置，包括无源矩阵和有源矩阵。意图将所述装置中的许多装置用于对人类来说舒适的温度范围中，例如18摄氏度到30摄氏度，并且更优选在室温下(20-25摄氏度)，但可以在这一温度范围外(例如-40摄氏度到+80摄氏度)使用。

[0036] 本文所述的材料和结构可以应用于除OLED以外的装置中。举例来说，如有机太阳能电池和有机光电检测器的其它光电装置可以采用所述材料和结构。更一般来说，如有机晶体管的有机装置可以采用所述材料和结构。

[0037] 术语“卤”、“卤素”和“卤基”可互换地使用并且指氟、氯、溴和碘。

[0038] 术语“酰基”是指被取代的羰基(C(O)-R_s)。

[0039] 术语“酯”是指被取代的氧基羰基(-O-C(O)-R_s或-C(O)-O-R_s)基团。

[0040] 术语“醚”是指-OR_s基团。

[0041] 术语“硫基”或“硫醚”可互换地使用并且指-SR_s基团。

[0042] 术语“亚磺酰基”是指-S(O)-R_s基团。

[0043] 术语“磺酰基”是指-SO_2-R_s基团。

[0044] 术语“膦基”是指-P(R_s)$_3$基团，其中每个R_s可以相同或不同。

[0045] 术语“硅烷基”是指-Si(R_s)$_3$基团，其中每个R_s可以相同或不同。

[0046] 在上述每一个中，R_s可以是氢或选自由以下组成的群组的取代基：氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳基、杂芳基和其组合。优选的R_s选自由以下组成的群组：烷基、环烷基、芳基、杂芳基和其组合。

[0047] 术语“烷基”是指并且包括直链和支链烷基。优选的烷基是含有一到十五个碳原子的烷基，并且包括甲基、乙基、丙基、1-甲基乙基、丁基、1-甲基丙基、2-甲基丙基、戊基、1-甲基丁基、2-甲基丁基、3-甲基丁基、1,1-二甲基丙基、1,2-二甲基丙基、2,2-二甲基丙基等。

另外，烷基任选地被取代。

[0048] 术语“环烷基”是指并且包括单环、多环和螺烷基。优选的环烷基为含有3到12个环碳原子的环烷基，并且包括环丙基、环戊基、环己基、双环[3.1.1]庚基、螺[4.5]癸基、螺[5.5]十一烷基、金刚烷基等。另外，环烷基任选地被取代。

[0049] 术语“杂烷基”或“杂环烷基”分别指烷基或环烷基，其具有至少一个被杂原子置换的碳原子。任选地，所述至少一个杂原子选自O、S、N、P、B、Si和Se，优选地O、S或N。另外，杂烷基或杂环烷基任选地被取代。

[0050] 术语“烯基”是指并且包括直链和支链烯基。烯基基本上是在烷基链中包括至少一个碳-碳双键的烷基。环烯基基本上是在环烷基环中包括至少一个碳-碳双键的环烷基。如本文所用的术语“杂烯基”是指至少一个碳原子被杂原子置换的烯基。任选地，所述至少一个杂原子选自O、S、N、P、B、Si和Se，优选地O、S或N。优选的烯基、环烯基或杂烯基是含有二到十五个碳原子的那些。另外，烯基、环烯基或杂烯基任选地被取代。

[0051] 术语“炔基”是指并且包括直链和支链炔基。优选的炔基是含有二到十五个碳原子的炔基。另外，炔基任选地被取代。

[0052] 术语“芳烷基”或“芳基烷基”可互换地使用并且是指被芳基取代的烷基。另外，芳烷基任选地被取代。

[0053] 术语“杂环基”是指并且包括含有至少一个杂原子的芳香族和非芳香族环状基团。任选地，所述至少一个杂原子选自O、S、N、P、B、Si和Se，优选地O、S或N。芳香族杂环基可与杂芳基互换使用。优选的非芳香族杂环基是含有包括至少一个杂原子的3到7个环原子的杂环基，并且包括环胺，如吗啉基、哌啶基、吡咯烷基等，和环醚/硫醚，如四氢呋喃、四氢吡喃、四氢噻吩等。另外，杂环基可以是任选被取代的。

[0054] 术语“芳基”是指并且包括单环芳香族烃基和多环芳香族环系统。多环可以具有其中两个碳为两个邻接环(所述环是“稠合的”)共用的两个或更多个环，其中所述环中的至少一个是芳香族烃基，例如其它环可以是环烷基、环烯基、芳基、杂环和/或杂芳基。优选的芳基是含有六到三十个碳原子、优选六到二十个碳原子、更优选六到十二个碳原子的芳基。尤其优选的是具有六个碳、十个碳或十二个碳的芳基。合适的芳基包括苯基、联苯、联三苯、三亚苯、四亚苯、萘、蒽、⿰艹⿱白龰、菲、芴、苊、茚、芘和⿰艹⿱白奠，优选苯基、联苯、联三苯、三亚苯、芴和萘。另外，芳基任选地被取代。

[0055] 术语“杂芳基”是指并且包括了包括至少一个杂原子的单环芳香族基团和多环芳香族环系统。杂原子包括但不限于O、S、N、P、B、Si和Se。在许多情况下，O、S或N是优选的杂原子。单环杂芳香族系统优选是具有5或6个环原子的单环，并且环可以具有一到六个杂原子。杂多环系统可以具有其中两个原子为两个邻接环(所述环是“稠合的”)共用的两个或更多个环，其中所述环中的至少一个是杂芳基，例如其它环可以是环烷基、环烯基、芳基、杂环和/或杂芳基。杂多环芳香族环系统可以在多环芳香族环系统的每个环上具有一到六个杂原子。优选的杂芳基是含有三到三十个碳原子、优选三到二十个碳原子、更优选三到十二个碳原子的杂芳基。合适的杂芳基包括二苯并噻吩、二苯并呋喃、二苯并硒吩、呋喃、噻吩、苯并呋喃、苯并噻吩、苯并硒吩、咔唑、吲哚并咔唑、吡啶基吲哚、吡咯并二吡啶、吡唑、咪唑、三唑、噁唑、噻唑、噁二唑、噁三唑、二噁唑、噻二唑、吡啶、哒嗪、嘧啶、吡嗪、三嗪、噁嗪、噁噻嗪、噁二嗪、吲哚、苯并咪唑、吲唑、吲噁嗪、苯并噁唑、苯并异噁唑、苯并噻唑、喹啉、异喹啉、

噌啉、喹唑啉、喹喔啉、萘啶、酞嗪、喋啶、氧杂蒽(xanthene)、吖啶、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、苯并硒吩并吡啶和硒吩并二吡啶,优选二苯并噻吩、二苯并呋喃、二苯并硒吩、咔唑、吲哚并咔唑、咪唑、吡啶、三嗪、苯并咪唑、1,2-氮杂硼烷、1,3-氮杂硼烷、1,4-氮杂硼烷、硼氮炔和其氮杂类似物。另外,杂芳基任选地被取代。

[0056] 在上面列出的芳基和杂芳基中,三亚苯、萘、蒽、二苯并噻吩、二苯并呋喃、二苯并硒吩、咔唑、吲哚并咔唑、咪唑、吡啶、吡嗪、嘧啶、三嗪和苯并咪唑的基团以及其各自对应的氮杂类似物尤其受到关注。

[0057] 如本文所用的术语烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳烷基、杂环基、芳基和杂芳基独立地为未取代的或独立地被一或多个一般取代基取代。

[0058] 在许多情况下,一般取代基选自由以下组成的群组:氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳基、杂芳基、酰基、羧酸、醚、酯、腈、异腈、硫基、亚磺酰基、磺酰基、膦基和其组合。

[0059] 在一些情况下,优选的一般取代基选自由以下组成的群组:氘、氟、烷基、环烷基、杂烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、芳基、杂芳基、腈、异腈、硫基和其组合。

[0060] 在一些情况下,优选的一般取代基选自由以下组成的群组:氘、氟、烷基、环烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、芳基、杂芳基、硫基和其组合。

[0061] 在其它情况下,更优选的一般取代基选自由以下组成的群组:氘、氟、烷基、环烷基、芳基、杂芳基和其组合。

[0062] 术语“被取代的”是指除H以外的取代基键结到相关位置,如碳。举例来说,在R^1表示单取代时,则一个R^1必须不是H。类似地,在R^1表示二取代时,则两个R^1必须不是H。类似地,在R^1未被取代时,R^1对于所有可用位置来说都是氢。结构中可能的最大取代数(例如,特定的环或稠环系统)将取决于具有可用化合价的原子的数目。

[0063] 如本文所使用,“其组合”表示适用清单的一或多个成员被组合以形成本领域普通技术人员能够从适用清单中设想的已知或化学稳定的布置。举例来说,烷基和氘可以组合形成部分或完全氘化的烷基;卤素和烷基可以组合形成卤代烷基取代基;并且卤素、烷基和芳基可以组合形成卤代芳烷基。在一种情况下,术语取代包括两到四个列出的基团的组合。在另一种情况下中,术语取代包括两到三个基团的组合。在又一种情况下中,术语取代包括两个基团的组合。取代基的优选组合是含有多达五十个不是氢或氘的原子的组合,或包括多达四十个不是氢或氘的原子的组合,或包括多达三十个不是氢或氘的原子的组合。在许多情况下,取代基的优选组合将包括多达二十个不是氢或氘的原子。

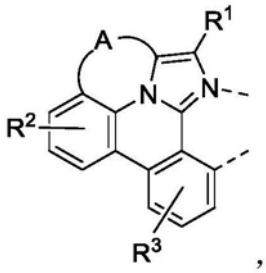
[0064] 本文所述的片段,即氮杂-二苯并呋喃、氮杂-二苯并噻吩等中的“氮杂”名称意指相应片段中的C-H基团中的一或多个可以被氮原子置换,例如并且无任何限制性,氮杂三亚苯涵盖二苯并[f,h]喹喔啉和二苯并[f,h]喹啉。所属领域的一般技术人员可以容易地预想上文所述的氮杂-衍生物的其它氮类似物,并且所有此类类似物都意图由如本文所阐述的术语涵盖。

[0065] 如本文所用,“氘”是指氢的同位素。氘代化合物可以使用本领域已知的方法容易地制备。举例来说,美国专利第8,557,400号、专利公开第WO 2006/095951号和美国专利申

请公开第US 2011/0037057号(其以全文引用的方式并入本文中)描述了氘取代的有机金属络合物的制备。进一步参考鄢明(Ming Yan)等人,四面体(Tetrahedron)2015,71,1425-30和阿兹罗特(Atzrodt)等人,德国应用化学(Angew.Chem.Int.Ed.)(综述)2007,46,7744-65(其以全文引用的方式并入),分别描述了苄基胺中亚甲基氢的氘化和用氘置换芳香族环氢的有效途径。

[0066] 应理解,当将分子片段描述为取代基或另外连接到另一部分时,其名称可以如同其是片段(例如苯基、亚苯基、萘基、二苯并呋喃基)一般或如同其是整个分子(例如苯、萘、二苯并呋喃)一般书写。如本文所用,这些不同的命名取代基或连接片段的方式被视为等效的。

[0067] 公开了一种化合物,其具有式$Ir(L_A)(L_B)$。在式$Ir(L_A)(L_B)$中,L_A是双齿、三齿、四齿、五齿或六齿配体。L_B是单齿、双齿、三齿或四齿配体,或其不存在。L_A加L_B的总齿合度是6,其中L_A包含至少一种式I结构:

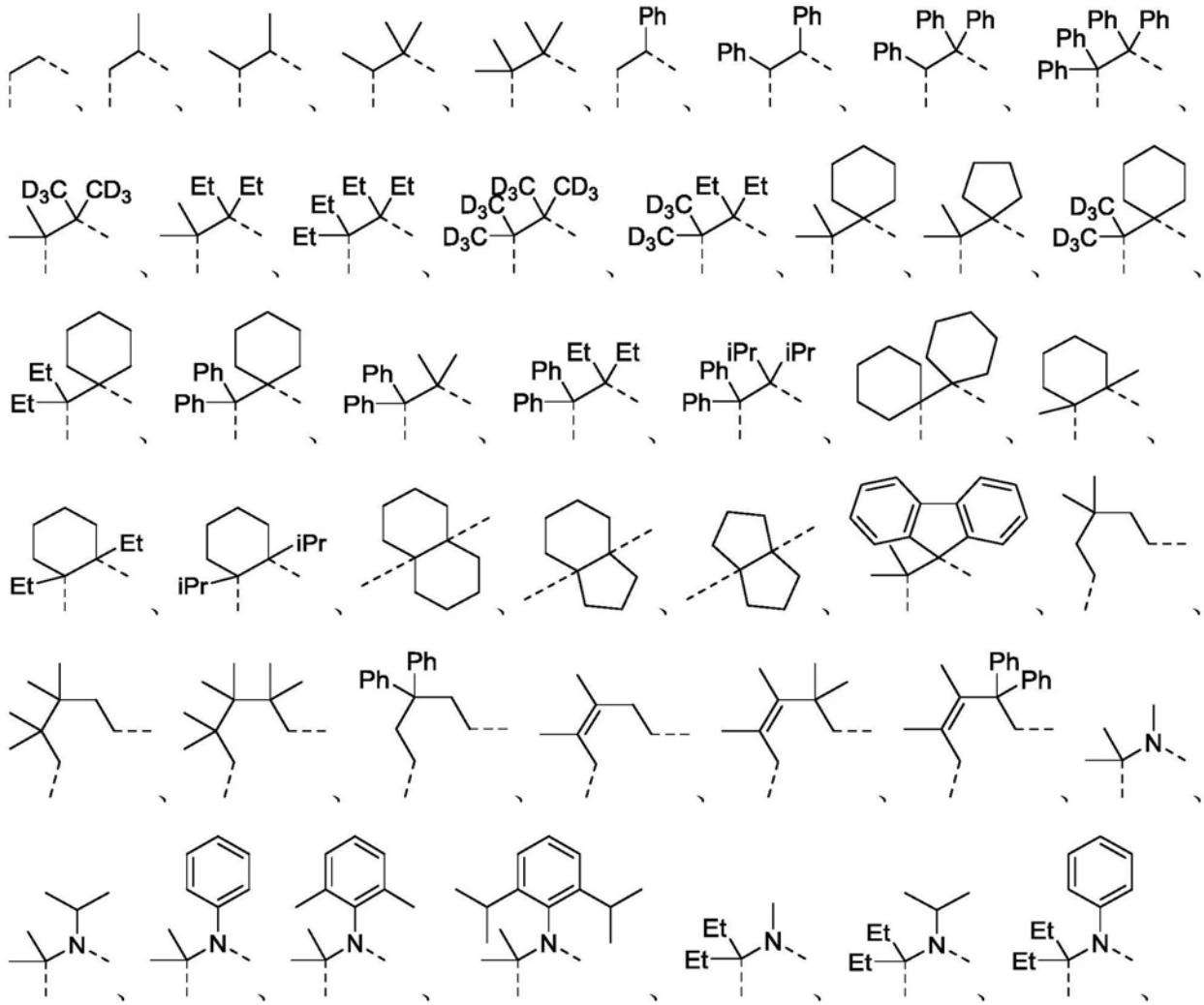
[0068]  其中A是具有两到三个键联原子的键联基团,其中所述键联原子各自独立地选自由以下组成的群组:C、Si、O、S、N、B;其中R^2和R^3各自独立地表示单取代到最大可允许数目的取代或无取代;其中R^1、R^2和R^3中的每一个独立地选自由以下组成的群组:氢、氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳基、杂芳基、酰基、羧酸、醚、酯、腈、异腈、硫基、亚磺酰基、磺酰基、膦基和其组合;其中任两个取代基可以接合或稠合在一起以形成环;且其中R^1或R^3可经由键联基团与另一配体接合以形成齿合度比双齿高的配体。当配体与另一配体接合以形成较高齿合度配体时。

[0069] 在化合物的一些实施例中,R^1、R^2和R^3中的每一个独立地选自由以下组成的群组:氘、氟、烷基、环烷基、杂烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、芳基、杂芳基、腈、异腈、硫基和其组合。

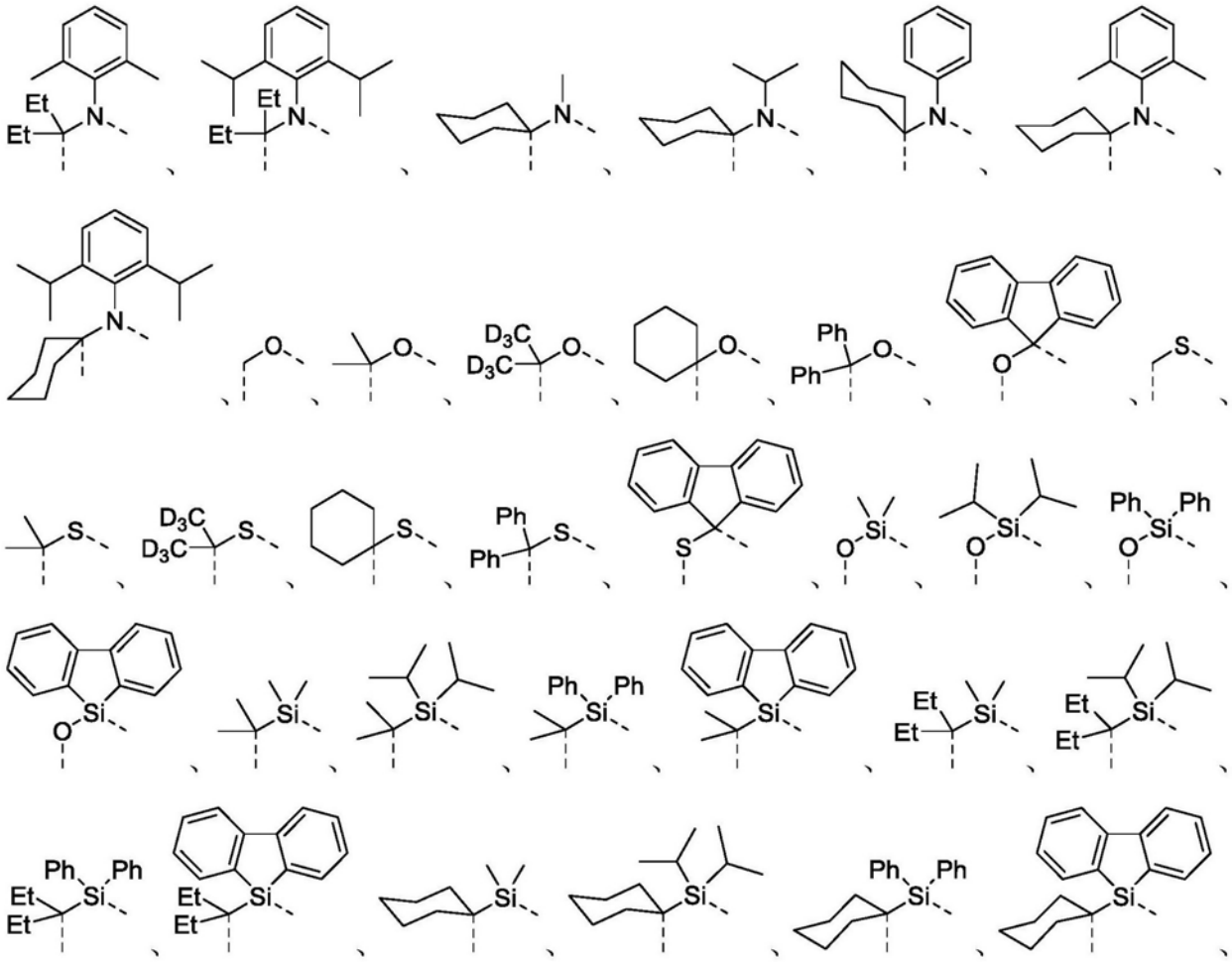
[0070] 在一些实施例中,键联基团A独立地选自由以下组成的群组:$-CR^AR^B-CR^CR^D-$、$-CR^AR^B-CR^CR^D-CR^ER^F-$、$-CR^AR^B-NR^C-$、$-CR^A=CR^B-CR^CR^D-$、$-O-SiR^AR^B-$、$-CR^AR^B-S-$、$-CR^AR^B-O-$、$-C-SiR^AR^B-$和$-SiR^AR^B-SiR^CR^D-$,其中$R^A$到$R^F$各自可相同或不同,且独立地选自由以下组成的群组:氢、氘、烷基、环烷基、芳基、杂芳基和其组合;且任何相邻R^A到R^F任选地接合或稠合成5元或6元环。

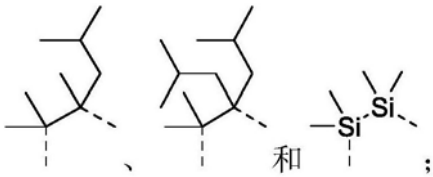
[0071] 在一些实施例中,式I中的键联基团A选自由以下组成的群组:

[0072]


Ph
Ph Ph
Ph Ph Ph
Ph Ph Ph Ph
D3C CD3
Et Et
Et Et Et
D3C CD3 D3C
D3C Et Et D3C
D3C
Et Et
Ph Ph
Ph
Ph Et Et
Ph iPr iPr Ph
Et Et
iPr iPr
Ph Ph
Ph Ph
N
N
N
N
Et Et N
Et Et N
Et Et N

[0073]



[0074]  且虚线表示连接键。

[0075] 在化合物的一些实施例中，配体L_A包含一种式I结构。在一些实施例中，L_A是包含两个相同或两个不同式I结构的四齿配体。在一些实施例中，L_A是包含三个相同或三个不同式I结构的六齿配体。在化合物的一些实施例中，配体L_B包含一种式I结构。在一些实施例中，L_A是包含仅一种式I结构的四齿配体。在一些实施例中，L_A是包含仅一种或两种式I结构的六齿配体。

[0076] 在一些实施例中，L_A是双齿配体，且L_B是四齿配体。在一些实施例中，L_A是三齿配体，且L_B是三齿配体。在一些实施例中，L_A是四齿配体，且L_B是双齿配体。在一些实施例中，L_A是五齿配体，且L_B是单齿配体。在一些实施例中，L_A是六齿配体，且L_B不存在。

[0077] 在一些实施例中，化合物是根据式$Ir(L_A)_n(L_B)_m(Link)$的化合物；其中L_A和L_B各自表示双齿单阴离子环金属化配体，其可能包含或可能不包含一种式I结构，可以任选地与其它双齿部分结合；其中L_A中的至少一个含有由式I所描述的片段；其中n＝1、2或3；其中m＝0、1或2；其中n+m＝3；且其中Link是有机连接基团，另外称为L_1或L_2，用于连接L_A和/或L_B中的一或多个，以形成四齿或六齿配体。在一些实施例中，L_1和L_2各自可独立地包含6到20个碳

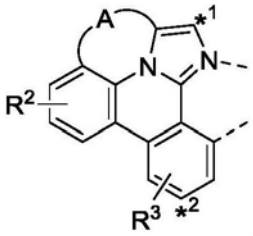
原子。在一些实施例中，L_1和L_2各自可独立地包含6元芳香族环。在一些实施例中，L_1和L_2各自可独立地包含环烷基环。在一些实施例中，L_1和L_2可独立地部分或完全氘化。

[0078] 在具有式$Ir(L_A)_n(L_B)_m(Link)$的化合物的一些实施例中，化合物选自以下结构：下表中定义的G_{nk}＝Ir(配体1)(配体2)(配体3)，其中k是1到16的整数：

[0079]

G_{nk}	配体 1	配体 2	配体 3
G_{n1}	L_{Ai}，其中 $i=1$ 到 6 的整数	L_{Ai}，其中 $i=7$ 到 12 的整数	L_{Ai}，其中 $i=7$ 到 12 的整数
G_{n2}	L_{Ai}，其中 $i=7$ 到 12 的整数	L_{Ai}，其中 $i=7$ 到 12 的整数	L_{Ai}，其中 $i=7$ 到 12 的整数
G_{n3}	L_{Ai}，其中 $i=1$ 到 6 的整数	L_{Ai}，其中 $i=13$ 到 18 的整数	L_{Ai}，其中 $i=13$ 到 18 的整数
G_{n4}	L_{Ai}，其中 $i=13$ 到 18 的整数	L_{Ai}，其中 $i=13$ 到 18 的整数	L_{Ai}，其中 $i=13$ 到 18 的整数
G_{n5}	L_{Ai}，其中 $i=1$ 到 6 的整数	L_{Bp}，其中 $p=16$ 到 26 的整数	L_{Bp}，其中 $p=16$ 到 26 的整数
G_{n6}	L_{Ai}，其中 $i=7$ 到 12 的整数	L_{Bp}，其中 $p=16$ 到 26 的整数	L_{Bp}，其中 $p=16$ 到 26 的整数
G_{n7}	L_{Ai}，其中 $i=1$ 到 6 的整数	L_{Bp}，其中 $p=27$ 到 41 的整数	L_{Bp}，其中 $p=27$ 到 41 的整数
G_{n8}	L_{Ai}，其中 $i=13$ 到 18 的整数	L_{Bp}，其中 $p=27$ 到 41 的整数	L_{Bp}，其中 $p=27$ 到 41 的整数
G_{n9}	L_{Ai}，其中 $i=7$ 到 12 的整数	L_{Ai}，其中 $i=7$ 到 12 的整数	L_{Bp}，其中 $p=16$ 到 26 的整数
G_{n10}	L_{Ai}，其中 $i=13$ 到 18 的整数	L_{Ai}，其中 $i=13$ 到 18 的整数	L_{Bp}，其中 $p=27$ 到 41 的整数
G_{n11}	L_{Ai}，其中 $i=1$ 到 6 的整数	L_{Ai}，其中 $i=7$ 到 12 的整数	L_{Bp}，其中 $p=16$ 到 26 的整数
G_{n12}	L_{Ai}，其中 $i=1$ 到 6 的整数	L_{Ai}，其中 $i=13$ 到 18 的整数	L_{Bp}，其中 $p=27$ 到 41 的整数
G_{n13}	L_{Bp}，其中 $p=1$ 到 15 的整数	L_{Ai}，其中 $i=7$ 到 12 的整数	L_{Bp}，其中 $p=16$ 到 26 的整数
G_{n14}	L_{Bp}，其中 $p=1$ 到 15 的整数	L_{Ai}，其中 $i=13$ 到 18 的整数	L_{Bp}，其中 $p=27$ 到 41 的整数
G_{n15}	L_{Bp}，其中 $p=1$ 到 15 的整数	L_{Ai}，其中 $i=7$ 到 12 的整数	L_{Ai}，其中 $i=7$ 到 12 的整数
G_{n16}	L_{Bp}，其中 $p=1$ 到 15 的整数	L_{Ai}，其中 $i=13$ 到 18 的整数	L_{Ai}，其中 $i=13$ 到 18 的整数

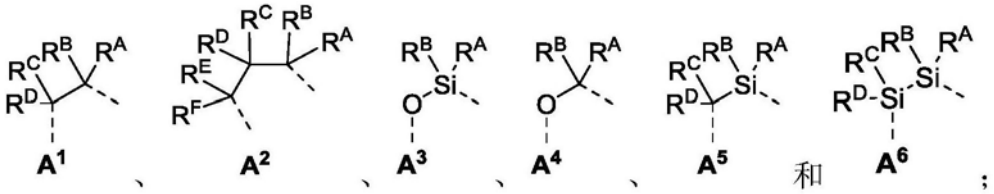
[0080] 其中配体L_{Ai}包含以下结构：

[0081] 

；

[0082] 其中虚线表示与铱原子的键；

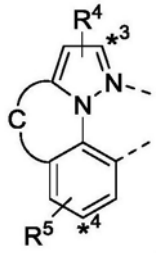
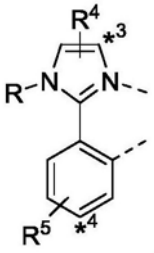
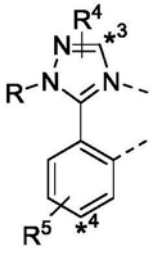
[0083] 其中A是选自由以下组成的群组的键联基团：

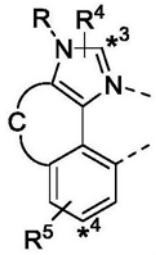
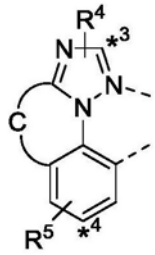
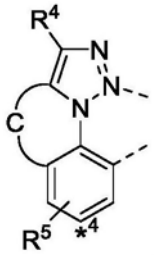
[0084] 

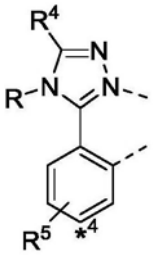
；

[0085] 其中A^1到A^6中的虚线指示连接键；

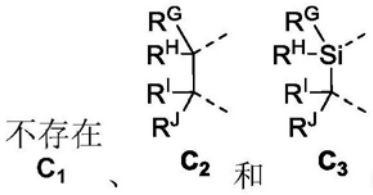
[0086] 其中L_{Bp}选自由以下组成的群组：

[0087] 
其中m是1， 
其中m是2， 
其中m是3，

[0088] 
其中m是4， 
其中m是5， 
其中m是6，和


其中m是7；

[0089] 其中C是选自由以下组成的群组的有机连接基团：

[0090] 

；

[0091] 其中虚线指示连接键；

[0092] 其中由$*^1$标记的碳连接于L_1或R^1；

[0093] 其中由$*^2$标记的碳连接于L_2或R^3；

[0094] 其中由$*^3$标记的碳连接于L_1或R^4；

[0095] 其中由$*^4$标记的碳连接于L_2或R^5；

[0096] 其中R^4和R^5中的每一个独立地表示单取代到最大可能数目的取代或无取代；

[0097] 其中R^4、R^5、R^G、R^H、R^I和R^J中的每一个独立地选自由以下组成的群组：氢、氘、氟、烷基、环烷基、杂烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、芳基、杂芳基、腈、异腈、硫基和其组合；

[0098] 其中配体L_{Ai}(其中i是1到18的整数)定义如下：

L_{Ai}	A	* 1	* 2
L_{A1}	A^1	R^1	R^3
L_{A2}	A^2	R^1	R^3
L_{A3}	A^3	R^1	R^3
L_{A4}	A^4	R^1	R^3
L_{A5}	A^5	R^1	R^3
L_{A6}	A^6	R^1	R^3
L_{A7}	A^1	L_1	R^3
L_{A8}	A^2	L_1	R^3
L_{A9}	A^3	L_1	R^3
L_{A10}	A^4	L_1	R^3
L_{A11}	A^5	L_1	R^3
L_{A12}	A^6	L_1	R^3
L_{A13}	A^1	R^1	L_2
L_{A14}	A^2	R^1	L_2
L_{A15}	A^3	R^1	L_2
L_{A16}	A^4	R^1	L_2
L_{A17}	A^5	R^1	L_2
L_{A18}	A^6	R^1	L_2

[0099] ;

[0100] 其中配体L_{Bp}(其中p是1到41的整数)定义如下：

L_{Bp}	m	C	* 3	* 4
L_{B1}	1	C_1	R^4	R^5
L_{B2}	1	C_2	R^4	R^5
L_{B3}	1	C_3	R^4	R^5
L_{B4}	2	-	R^4	R^5

[0101]

[0102]

L_{B5}	3	-	R^4	R^5
L_{B6}	4	C_1	R^4	R^5
L_{B7}	4	C_2	R^4	R^5
L_{B8}	4	C_3	R^4	R^5
L_{B9}	5	C_1	R^4	R^5
L_{B10}	5	C_2	R^4	R^5
L_{B11}	5	C_3	R^4	R^5
L_{B12}	6	C_1	-	R^5
L_{B13}	6	C_2	-	R^5
L_{B14}	6	C_3	-	R^5
L_{B15}	7	-	-	R^5
L_{B16}	1	C_1	L_1	R^5
L_{B17}	1	C_2	L_1	R^5
L_{B18}	1	C_3	L_1	R^5
L_{B19}	2	-	L_1	R^5
L_{B20}	3	-	L_1	R^5
L_{B21}	4	C_1	L_1	R^5
L_{B22}	4	C_2	L_1	R^5
L_{B23}	4	C_3	L_1	R^5
L_{B24}	5	C_1	L_1	R^5
L_{B25}	5	C_2	L_1	R^5
L_{B26}	5	C_3	L_1	R^5
L_{B27}	1	C_1	R^4	L_2
L_{B28}	1	C_2	R^4	L_2
L_{B29}	1	C_3	R^4	L_2
L_{B30}	2	-	R^4	L_2
L_{B31}	3	-	R^4	L_2
L_{B32}	4	C_1	R^4	L_2
L_{B33}	4	C_2	R^4	L_2
L_{B34}	4	C_3	R^4	L_2
L_{B35}	5	C_1	R^4	L_2
L_{B36}	5	C_2	R^4	L_2
L_{B37}	5	C_3	R^4	L_2
L_{B38}	6	C_1	-	L_2
L_{B39}	6	C_2	-	L_2
L_{B40}	6	C_3	-	L_2
L_{B41}	7	-	-	L_2

[0103] 在具有式$Ir(L_A)_n(L_B)_m(Link)$的化合物的一些实施例中，化合物是具有式$Ir(L_x)(L_y\text{-}L_z\text{-}Link_q)$的化合物V或具有式$Ir(L_x\text{-}L_y\text{-}L_z\text{-}Link_q)$的化合物W。

[0104] 在化合物V中，L_x是双齿配体，且$(L_y\text{-}L_z\text{-}Link_q)$是通过使双齿配体$L_y$和$L_z$与$Link_q$连接而形成的四齿配体；

[0105] 其中V是由V＝371((478((478(q-1)+z)-1)+y)-1)+x定义的整数；

[0106] 其中以下条件(a)-(d)中的一个为真：

[0107] (a)其中x是1到132的整数，y和z各自独立地是1到371的整数，且q是1到8的整数；

[0108] (b)其中x是1到132的整数，y和z各自独立地是372到478的整数，且q是9到21的整

数；

[0109] (c)其中x是133到371的整数，y是1到132的整数，z是1到371的整数，且q是1到8的整数；且

[0110] (d)其中x是133到371的整数，y是440到478的整数，z是372到478的整数，且q是9到21的整数。

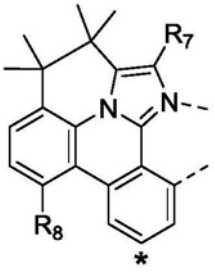
[0111] 在化合物W中，$(L_x-L_y-L_z-Link_q)$是通过使双齿L_x、L_y和L_z与连接基团$Link_q$连接而形成的六齿配体；

[0112] 其中W是由W＝478((478((478(q-1)+z)-1)+y)-1)+x定义的整数，

[0113] 其中x是1到132的整数，且y和z各自独立地是1到371的整数，且q是22到39的整数；或

[0114] 其中x是440到478的整数，且y和z各自独立地是372到478的整数，且q是40到53的整数。

[0115] 在化合物V和化合物W两者中，L_x、L_y和L_z中的每一个是以下结构L1到L478中的一个：

[0116] L1、L2、L3、L4、L5、L6、L7、L8、L9、L10、L11、L12、L13、L14、L15、L16、L17、L18、L19、L20和L21具有结构 

，

[0117] 其中在L1中，R_7＝H，且R_8＝H，在L2中，R_7＝D，且R_8＝H，

[0118] 在L3中，R_7＝H，且R_8＝Me，在L4中，R_7＝D，且R_8＝Me，

[0119] 在L5中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，在L6中，R_7＝D，且R_8＝CD_3，

[0120] 在L7中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L8中，R_7＝Ph，且R_8＝Me，

[0121] 在L9中，R_7＝Ph，且R_8＝CD_3，在L10中，R_7＝m-tol，且R_8＝H，

[0122] 在L11中，R_7＝m-tol，且R_8＝Me，在L12中，R_7＝m-tol，且R_8＝CD_3，

[0123] 在L13中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L14中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，

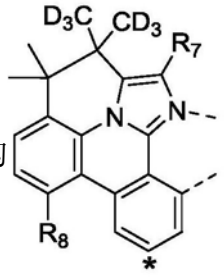
[0124] 在L15中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，在L16中，R_7＝p-tol，且R_8＝H，

[0125] 在L17中，R_7＝p-tol，且R_8＝Me，在L18中，R_7＝p-tol，且R_8＝CD_3，

[0126] 在L19中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L20中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，

[0127] 以及在L21中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，

[0128] L22、L23、L24、L25、L26、L27、L28、L29、L30、L31、L32、L33、L34、L35、L36、L37、L38、

L39、L40、L41和L42具有结构 

，

[0129] 其中在L22中，R_7＝H，且R_8＝H，在L23中，R_7＝D，且R_8＝H，

[0130] 在L24中，R_7＝H，且R_8＝Me，在L25中，R_7＝D，且R_8＝Me，

[0131] 在L26中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，在L27中，R_7＝D，且R_8＝CD_3，

[0132] 在L28中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L29中，R_7＝Ph，且R_8＝Me，

[0133] 在L30中，R_7＝Ph，且R_8＝CD_3，在L31中，R_7＝m-tol，且R_8＝H，

[0134] 在L32中，R_7＝m-tol，且R_8＝Me，在L33中，R_7＝m-tol，且R_8＝CD_3，

[0135] 在L34中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L35中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，

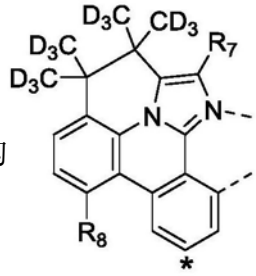
[0136] 在L36中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，在L37中，R_7＝p-tol，且R_8＝H，

[0137] 在L38中，R_7＝p-tol，且R_8＝Me，在L39中，R_7＝p-tol，且R_8＝CD_3，

[0138] 在L40中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L41中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，

[0139] 以及在L42中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，

[0140] L43、L44、L45、L46、L47、L48、L49、L50、L51、L52、L53、L54、L55、L56、L57、L58、L59、

L60、L61、L62和L63具有结构 

，

[0141] 其中在L43中，R_7＝H，且R_8＝H，在L44中，R_7＝D，且R_8＝H，

[0142] 在L45中，R_7＝H，且R_8＝Me，在L46中，R_7＝D，且R_8＝Me，

[0143] 在L47中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，在L48中，R_7＝D，且R_8＝CD_3，

[0144] 在L49中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L50中，R_7＝Ph，且R_8＝Me，

[0145] 在L51中，R_7＝Ph，且R_8＝CD_3，在L52中，R_7＝m-tol，且R_8＝H，

[0146] 在L53中，R_7＝m-tol，且R_8＝Me，在L54中，R_7＝m-tol，且R_8＝CD_3，

[0147] 在L55中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L56中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，

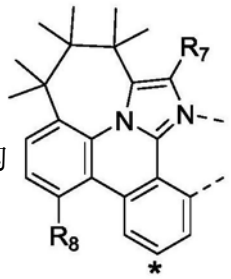
[0148] 在L57中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，在L58中，R_7＝p-tol，且R_8＝H，

[0149] 在L59中，R_7＝p-tol，且R_8＝Me，在L60中，R_7＝p-tol，且R_8＝CD_3，

[0150] 在L61中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L62中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，

[0151] 以及在L63中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，

[0152] L64、L65、L66、L67、L68、L69、L70、L71、L72、L73、L74、L75、L76、L77、L78、L79、L80、

L81、L82、L83和L84具有结构 

，

[0153] 其中在L64中，R_7＝H，且R_8＝H，在L65中，R_7＝D，且R_8＝H，

[0154] 在L66中，R_7＝H，且R_8＝Me，在L67中，R_7＝D，且R_8＝Me，

[0155] 在L68中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，在L69中，R_7＝D，且R_8＝CD_3，

[0156] 在L70中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L71中，R_7＝Ph，且R_8＝Me，

[0157] 在L72中，R_7＝Ph，且R_8＝CD_3，在L73中，R_7＝m-tol，且R_8＝H，

[0158] 在L74中，R_7＝m-tol，且R_8＝Me，在L75中，R_7＝m-tol，且R_8＝CD_3，

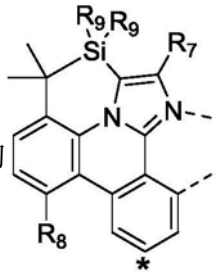
[0159] 在L76中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L77中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，

[0160] 在L78中，R_7＝m-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，在L79中，R_7＝p-tol，且R_8＝H，

[0161] 在L80中，R_7＝p-tol，且R_8＝Me，在L81中，R_7＝p-tol，且R_8＝CD_3，

[0162] 在L82中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝H，在L83中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝Me，

[0163] 以及在L84中，R_7＝p-$CD_3C_6H_4$，且R_8＝CD_3，

[0164] L85、L86、L87、L88、L89、L90、L91、L92、L93、L94、L95、L96、L97、L98、L99、L100、L101和L102具有结构 

，

[0165] 其中在L85中，R_7＝H，R_8＝H，且R_9＝Me，在L86中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝Me，

[0166] 在L87中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，在L88中，R_7＝Ph，R_8＝H，且R_9＝Me，

[0167] 在L89中，R_7＝Ph，R_8＝Me，且R_9＝Me，在L90中，R_7＝Ph，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，

[0168] 在L91中，R_7＝H，R_8＝H，且R_9＝^{i}Pr，在L92中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝^{i}Pr，

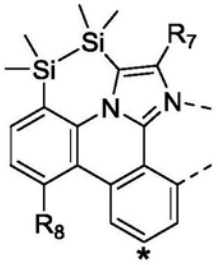
[0169] 在L93中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝^{i}Pr，在L94中，R_7＝Ph，R_8＝H，且R_9＝^{i}Pr，

[0170] 在L95中，R_7＝Ph，R_8＝Me，且R_9＝^{i}Pr，在L96中，R_7＝Ph，R_8＝CD_3，且R_9＝^{i}Pr，

[0171] 在L97中，R_7＝H，R_8＝H，且R_9＝Ph，在L98中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝Ph，

[0172] 在L99中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝Ph，在L100中，R_7＝Ph，R_8＝H，且R_9＝Ph，

[0173] 在L101中，R_7＝Ph，R_8＝Me，且R_9＝Ph，以及在L102中，R_7＝Ph，R_8＝CD_3，且R_9＝Ph，

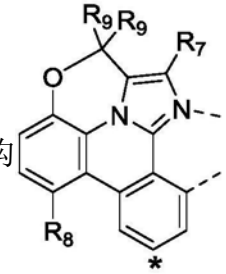
[0174] L103、L104、L105、L106、L107和L108具有结构 

，

[0175] 其中在L103中，R_7＝H，且R_8＝H，在L104中，R_7＝H，且R_8＝Me，

[0176] 在L105中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，在L106中，R_7＝Ph，且R_8＝H，

[0177] 在L107中，R_7＝Ph，且R_8＝Me，以及在L108中，R_7＝Ph，且R_8＝CD_3，

[0178] L109、L110、L111、L112、L113、L114、L115、L116、L117、L118、L119、L120、L121、L122、L123、L124、L125和L126具有结构 

，

[0179] 其中在L109中，R_7＝H，R_8＝H，且R_9＝Me，在L110中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝Me，

[0180] 在L111中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，在L112中，R_7＝Ph，R_8＝H，且R_9＝Me，

[0181] 在L113中，R_7＝Ph，R_8＝Me，且R_9＝Me，在L114中，R_7＝Ph，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，

[0182] 在L115中，R_7＝H，R_8＝H，且R_9＝CD_3，在L116中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝CD_3，

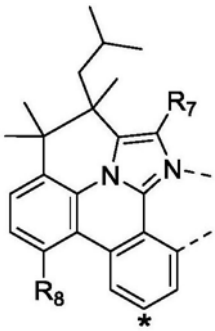
[0183] 在L117中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝CD_3，在L118中，R_7＝Ph，R_8＝H，且R_9＝CD_3，

[0184] 在L119中，R_7＝Ph，R_8＝Me，且R_9＝CD_3，在L120中，R_7＝Ph，R_8＝CD_3，且R_9＝CD_3，

[0185] 在L121中，R_7＝H，R_8＝H，且R_9＝Ph，在L122中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝Ph，

[0186] 在L123中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝Ph，在L124中，R_7＝Ph，R_8＝H，且R_9＝Ph，

[0187] 在L125中，R_7＝Ph，R_8＝Me，且R_9＝Ph，以及在L126中，R_7＝Ph，R_8＝CD_3，且R_9＝Ph，

[0188] L127、L128、L129、L130、L131和L132具有结构 

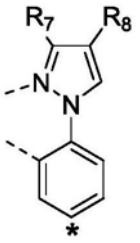
，

[0189] 其中在L127中，R_7＝H，且R_8＝H，在L128中，R_7＝H，且R_8＝Me，

[0190] 在L129中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，在L130中，R_7＝Ph，且R_8＝H，

[0191] 在L131中，R_7＝Ph，且R_8＝Me，以及在L132中，R_7＝Ph，且R_8＝CD_3，

[0192] L133、L134、L135、L136、L137、L138、L139、L140、L141、L142、L143和L144具有结构



，

[0193] 其中在L133中，R_7＝H，且R_8＝H，在L134中，R_7＝H，且R_8＝Ph，

[0194] 在L135中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，在L136中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，

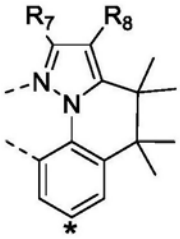
[0195] 在L137中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(^iBu)_2$-C_6H_3，在L138中，R_7＝Ph，且R_8＝H，

[0196] 在L139中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝H，以及在L140中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝H，

[0197] 在L141中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝Ph，以及在L142中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝Ph，

[0198] 在L143中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

[0199] 以及在L144中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，

[0200] L145、L146、L147、L148、L149、L150、L151、L152和L153具有结构  ，

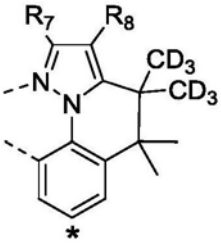
[0201] 其中在L145中，R_7＝H，且R_8＝H，在L146中，R_7＝H，且R_8＝Ph，

[0202] 在L147中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，在L148中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，

[0203] 在L149中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L150中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝H，

[0204] 在L151中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝H，以及在L152中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝Ph，

[0205] 以及在L153中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝Ph，

[0206] L154、L155、L156、L157、L158、L159、L160、L161和L162具有结构  ，

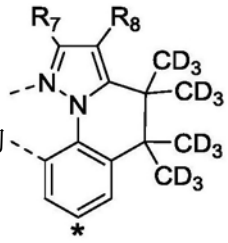
[0207] 其中在L154中，R_7＝H，且R_8＝H，在L155中，R_7＝H，且R_8＝Ph，

[0208] 在L156中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，在L157中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，

[0209] 在L158中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L159中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝H，

[0210] 在L160中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝H，以及在L161中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝Ph，

[0211] 以及在L162中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝Ph，

[0212] L163、L164、L165、L166、L167、L168、L169、L170和L171具有结构 

，

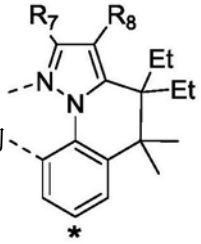
[0213] 其中在L163中，R_7＝H，且R_8＝H，在L164中，R_7＝H，且R_8＝Ph，

[0214] 在L165中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，在L166中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，

[0215] 在L167中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L168中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝H，

[0216] 在L169中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝H，以及在L170中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝Ph，

[0217] 以及在L171中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝Ph，

[0218] L172、L173、L174、L175、L176、L177、L178、L179和L180具有结构 

，

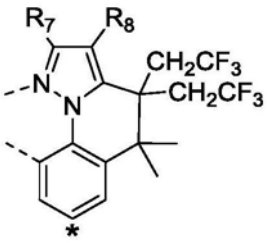
[0219] 其中在L172中，R_7＝H，且R_8＝H，在L173中，R_7＝H，且R_8＝Ph，

[0220] 在L174中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，在L175中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，

[0221] 在L176中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L177中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝H，

[0222] 在L178中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝H，以及在L179中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝Ph，

[0223] 以及在L180中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝Ph，

[0224] L181、L182、L183、L184、L185、L186、L187、L188和L189具有结构 

，

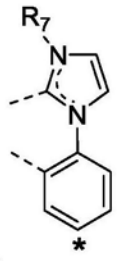
[0225] 其中在L181中，R_7＝H，且R_8＝H，在L182中，R_7＝H，且R_8＝Ph，

[0226] 在L183中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，在L184中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$(CD_3)_2$-C_6H_3，

[0227] 在L185中，R_7＝Ph，且R_8＝H，在L186中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝H，

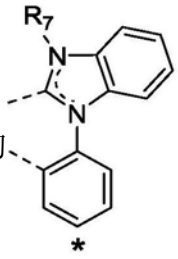
[0228] 在L187中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝H，以及在L188中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝Ph，

[0229] 以及在L189中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3，且R_8＝Ph，

[0230] L190、L191、L192、L193、L194和L195具有结构  ，

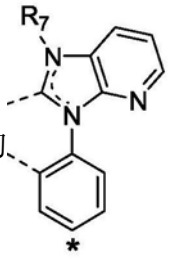
[0231] 其中在L190中，R_7＝Me，在L191中，R_7＝CD_3，在L192中，R_7＝^iPr，

[0232] 在L193中，R_7＝Ph，在L194中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L195中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0233] L196、L197、L198、L199、L200和L201具有结构  ，

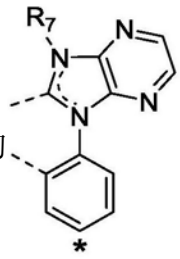
[0234] 其中在L196中，R_7＝Me，在L197中，R_7＝CD_3，在L198中，R_7＝^iPr，

[0235] 在L199中，R_7＝Ph，在L200中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L201中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0236] L202、L203、L204、L205、L206和L207具有结构  ，

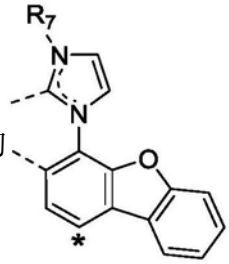
[0237] 其中在L202中，R_7＝Me，在L203中，R_7＝CD_3，在L204中，R_7＝^iPr，

[0238] 在L205中，R_7＝Ph，在L206中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L207中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0239] L208、L209、L210、L211、L212和L213具有结构  ，

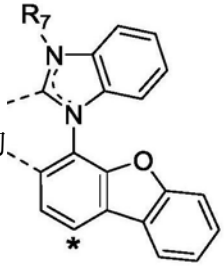
[0240] 其中在L208中，R_7＝Me，在L209中，R_7＝CD_3，在L210中，R_7＝^iPr，

[0241] 在L211中，R_7＝Ph，在L212中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L213中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0242] L214、L215、L216、L217、L218和L219具有结构  ，

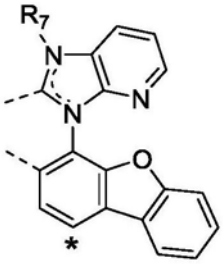
[0243] 其中在L214中，R_7＝Me，在L215中，R_7＝CD_3，在L216中，R_7＝^{i}Pr，

[0244] 在L217中，R_7＝Ph，在L218中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L219中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0245] L220、L221、L222、L223、L224和L225具有结构  ，

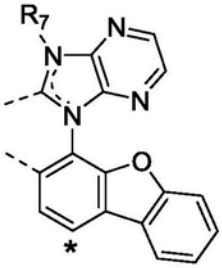
[0246] 其中在L220中，R_7＝Me，在L221中，R_7＝CD_3，在L222中，R_7＝^{i}Pr，

[0247] 在L223中，R_7＝Ph，在L224中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L225中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0248] L226、L227、L228、L229、L230和L231具有结构  ，

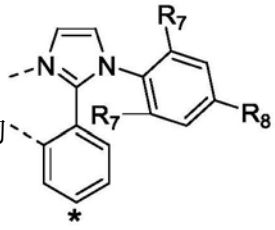
[0249] 其中在L226中，R_7＝Me，在L227中，R_7＝CD_3，在L228中，R_7＝^{i}Pr，

[0250] 在L229中，R_7＝Ph，在L230中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L231中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0251] L232、L233、L234、L235、L236和L237具有结构  ，

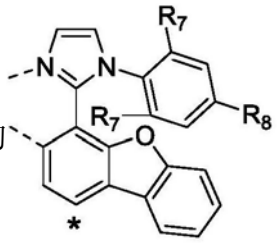
[0252] 其中在L232中，R_7＝Me，在L233中，R_7＝CD_3，在L234中，R_7＝^{i}Pr，

[0253] 在L235中，R_7＝Ph，在L236中，R_7＝2,6-Me_2-C_6H_3，以及在L237中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

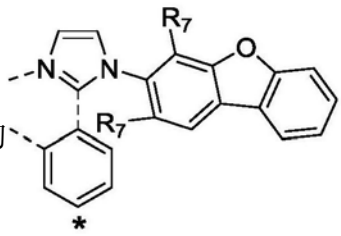
[0254] L238、L239、L240和L241具有结构  ，

[0255] 其中在L238中，R_7＝Me，且R_8＝H，在L239中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，

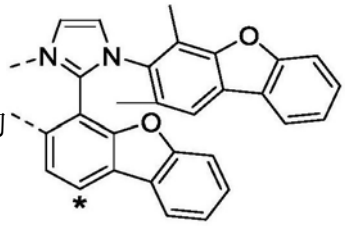
[0256] 在L240中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，以及在L241中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

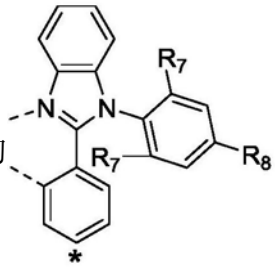
[0257] L242和L243具有结构  ，

[0258] 其中在L242中，R_7＝Me，且R_8＝H，以及在L243中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，

[0259] L244和L245具有结构  ，

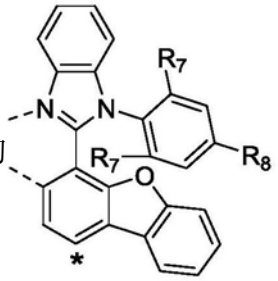
[0260] 其中在L244中，R_7＝Me，以及在L245中，R_7＝^{i}Pr，

[0261] L246具有结构  ，

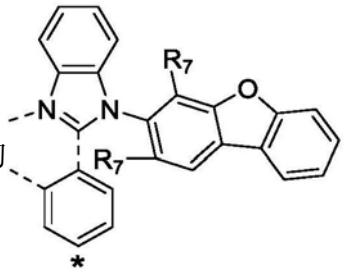
[0262] L247、L248、L249和L250具有结构  ，

[0263] 其中在L247中，R_7＝Me，且R_8＝H，在L248中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，

[0264] 在L249中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，以及在L250中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

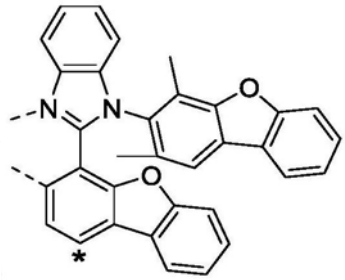
[0265] L250和L251具有结构  ，

[0266] 其中在L250中，R_7＝Me，且R_8＝H，以及在L251中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，

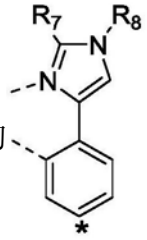
[0267] L252和L253具有结构 

，

[0268] 其中在L252中，R_7＝Me，以及在L253中，R_7＝^{i}Pr，

[0269] L255具有结构 

，

[0270] L256、L257、L258、L259、L260、L261、L262、L263、L264、L265、L266、L267和L268具有 

结构，

[0271] 其中在L256中，R_7＝H，且R_8＝Me，在L257中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，

[0272] 在L258中，R_7＝H，且R_8＝^{i}Pr，在L259中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

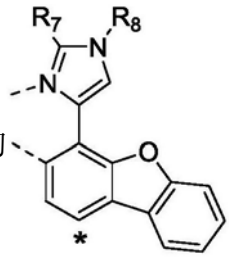
[0273] 在L260中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L261中，R_7＝Me，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

[0274] 在L262中，R_7＝Me，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L263中，R_7＝CD_3，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

[0275] 在L264中，R_7＝CD_3，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L265中，R_7＝Ph，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

[0276] 在L266中，R_7＝Ph，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L267中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

[0277] 以及在L268中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，

[0278] L269、L270、L271、L272、L273、L274、L275、L276、L277、L278、L279、L280和L281具有 

结构，

[0279] 其中在L269中，R_7＝H，且R_8＝Me，在L270中，R_7＝H，且R_8＝CD_3，

[0280] 在L271中，R_7＝H，且R_8＝^{i}Pr，在L272中，R_7＝H，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

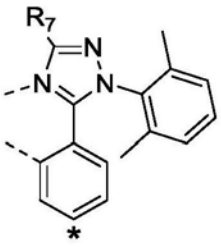
[0281] 在L273中，R_7＝H，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L274中，R_7＝Me，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

[0282] 在L275中，R_7＝Me，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L276中，R_7＝CD_3，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

[0283] 在L277中，R_7＝CD_3，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L278中，R_7＝Ph，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

[0284] 在L279中，R_7＝Ph，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，在L280中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝2,6-Me_2-C_6H_3，

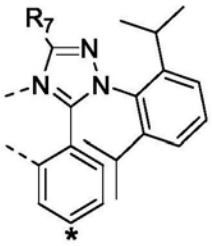
[0285] 以及在L281中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，且R_8＝2,6-$^{i}Pr_2$-C_6H_3，

[0286] L282、L283、L284和L285具有结构 

，

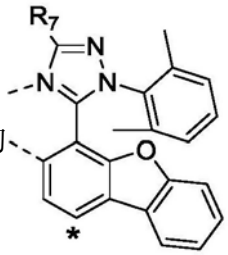
[0287] 其中在L282中，R_7＝H，在L283中，R_7＝Me，

[0288] 在L284中，R_7＝CD_3，以及在L285中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0289] L286、L287、L288和L289具有结构 

，

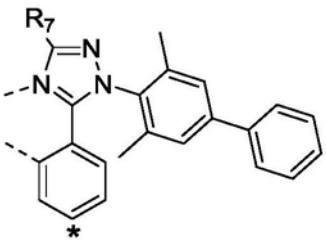
[0290] 其中在L286中，R_7＝H，在L287中，R_7＝Me，

[0291] 在L288中，R_7＝CD_3，以及在L289中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，L290、L291、L292和L293具有结构 

，

[0292] 其中在L290中，R_7＝H，在L291中，R_7＝Me，

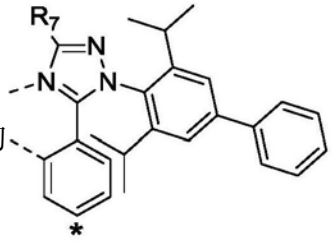
[0293] 在L292中，R_7＝CD_3，以及在L293中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0294] L294、L295、L296和L297具有结构 

，

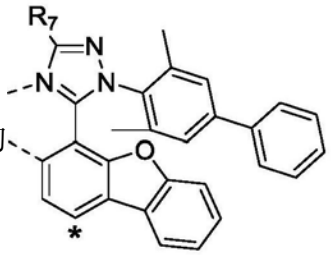
[0295] 其中在L294中，R_7＝H，在L295中，R_7＝Me，

[0296] 在L296中，R_7＝CD_3，以及在L297中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0297] L298、L299、L300和L301具有结构  ，

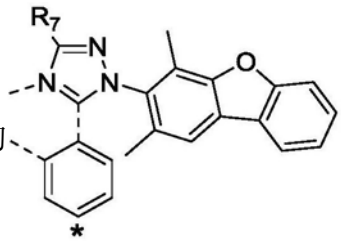
[0298] 其中在L298中，R_7＝H，在L299中，R_7＝Me，

[0299] 在L300中，R_7＝CD_3，以及在L301中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0300] L302、L303、L304和L305具有结构  ，

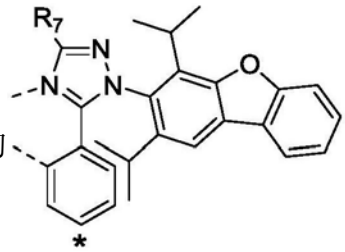
[0301] 其中在L302中，R_7＝H，在L303中，R_7＝Me，

[0302] 在L304中，R_7＝CD_3，以及在L305中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0303] L306、L307、L308和L309具有结构  ，

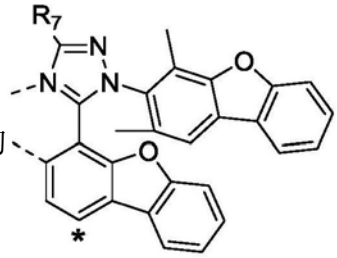
[0304] 其中在L306中，R_7＝H，在L307中，R_7＝Me，

[0305] 在L308中，R_7＝CD_3，以及在L309中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0306] L310、L311、L312和L313具有结构  ，

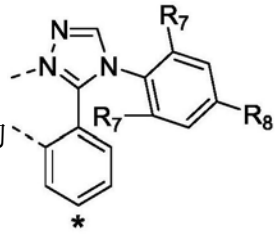
[0307] 其中在L310中，R_7＝H，在L311中，R_7＝Me，

[0308] 在L312中，R_7＝CD_3，以及在L313中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

[0309] L314、L315、L316和L317具有结构  ，

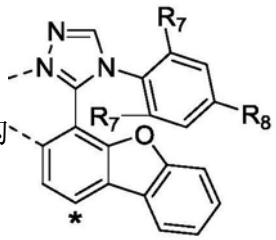
[0310] 其中在L314中，R_7＝H，在L315中，R_7＝Me，

[0311] 在L316中，R_7＝CD_3，以及在L317中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，

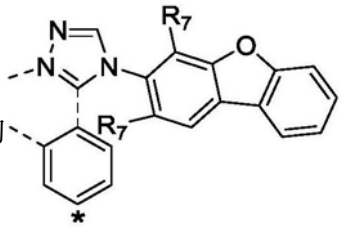
[0312] L318、L319、L320和L321具有结构  ，

[0313] 其中在L318中，R_7＝Me，且R_8＝H，在L319中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，

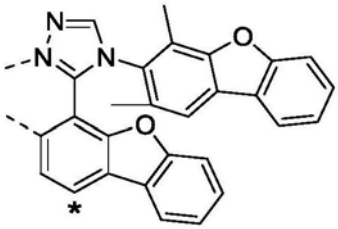
[0314] 在L320中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，以及在L321中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

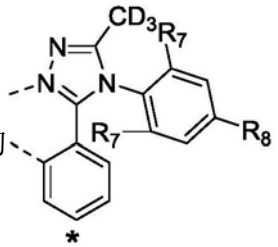
[0315] L322和L323具有结构  ，

[0316] 其中在L322中，R_7＝Me，且R_8＝H，以及在L323中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，

[0317] L324和L325具有结构  ，

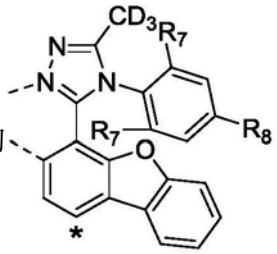
[0318] 其中在L324中，R_7＝Me，以及在L325中，R_7＝^{i}Pr，

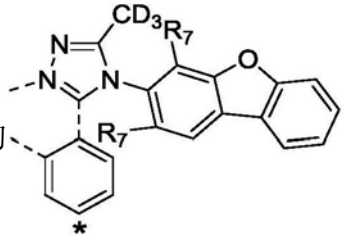
[0319] L326具有结构  ，

[0320] L327、L328、L329和L330具有结构  ，

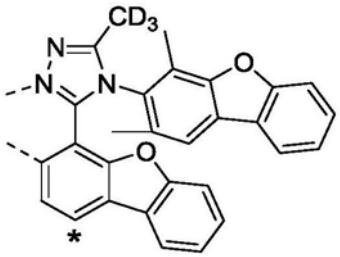
[0321] 其中在L327中，R_7＝Me，且R_8＝H，在L328中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，

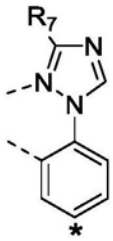
[0322] 在L329中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，以及在L330中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

[0323] L331和L332具有结构  ，

[0324] 其中在L331中，R_7＝Me，且R_8＝H，以及在L332中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，L333和L334具有结构  ，

[0325] 其中在L333中，R_7＝Me，以及在L334中，R_7＝^{i}Pr，

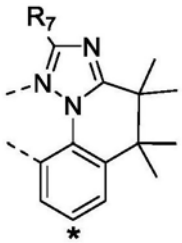
[0326] L335具有结构  ，

[0327] L336、L337、L338、L339、L340和L341具有结构  ，

[0328] 其中在L336中，R_7＝H，在L337中，R_7＝Me，

[0329] 在L338中，R_7＝CD_3，在L339中，R_7＝Ph，

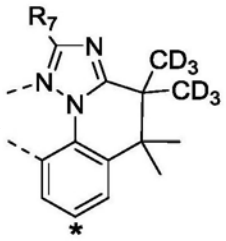
[0330] 在L340中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，以及在L341中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3

[0331] L342、L343、L344、L345、L346和L347具有结构  ，

[0332] 其中在L342中，R_7＝H，在L343中，R_7＝Me，

[0333] 在L344中，R_7＝CD_3，在L345中，R_7＝Ph，

[0334] 在L346中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，以及在L347中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3

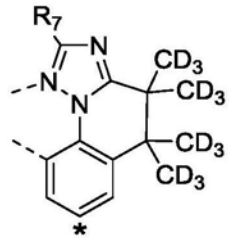
[0335] L348、L349、L350、L351、L352和L353具有结构 

，

[0336] 其中在L348中，R_7＝H，在L349中，R_7＝Me，

[0337] 在L350中，R_7＝CD_3，在L351中，R_7＝Ph，

[0338] 在L352中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，以及在L353中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3

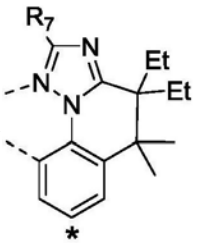
[0339] L354、L355、L356、L357、L358和L359具有结构 

，

[0340] 其中在L354中，R_7＝H，在L355中，R_7＝Me，

[0341] 在L356中，R_7＝CD_3，在L357中，R_7＝Ph，

[0342] 在L358中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，以及在L359中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3

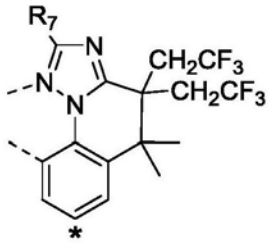
[0343] L360、L361、L362、L363、L364和L365具有结构 

，

[0344] 其中在L360中，R_7＝H，在L361中，R_7＝Me，

[0345] 在L362中，R_7＝CD_3，在L363中，R_7＝Ph，

[0346] 在L364中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，以及在L365中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3

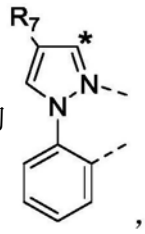
[0347] L366、L367、L368、L369、L370和L371具有结构 

，

[0348] 其中在L366中，R_7＝H，在L367中，R_7＝Me，

[0349] 在L368中，R_7＝CD_3，在L369中，R_7＝Ph，

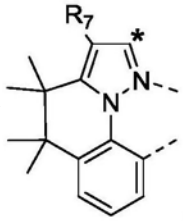
[0350] 在L370中，R_7＝3,5-Me_2-C_6H_3，以及在L371中，R_7＝3,5-$(CD_3)_2$-C_6H_3

[0351] L372、L373、L374、L375和L376具有结构  ，

[0352] 其中在L372中，R_7＝H，在L373中，R_7＝Ph，

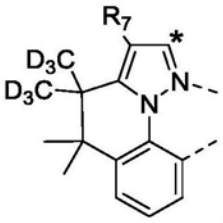
[0353] 在L374中，R_7＝2,6-$Me_2C_6H_3$，在L375中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，

[0354] 以及在L376中，R_7＝2,6-$(^iBu)_2C_6H_3$，

[0355] L377、L378和L379具有结构  ，

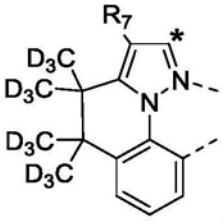
[0356] 其中在L377中，R_7＝H，在L378中，R_7＝Ph，

[0357] 以及在L379中，R_7＝2,6-$Me_2C_6H_3$，

[0358] L380、L381、L382和L383具有结构  ，

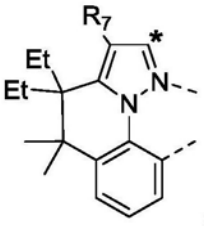
[0359] 其中在L380中，R_7＝H，在L381中，R_7＝Ph，

[0360] 在L382中，R_7＝2,6-$Me_2C_6H_3$，以及在L383中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，

[0361] L384、L385、L386和L387具有结构  ，

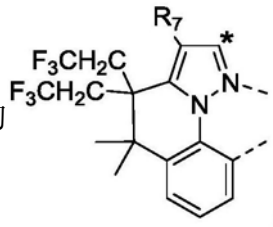
[0362] 其中在L384中，R_7＝H，在L385中，R_7＝Ph，

[0363] 在L386中，R_7＝2,6-$Me_2C_6H_3$，以及在L387中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，

[0364] L388、L389、L390和L391具有结构  ，

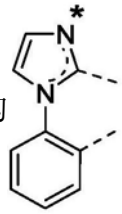
[0365] 其中在L388中，R_7＝H，在L389中，R_7＝Ph，

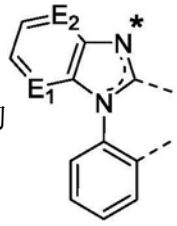
[0366] 在L390中，R_7＝2,6-$Me_2C_6H_3$，以及在L391中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，

[0367] L392、L393、L394和L395具有结构  ，

[0368] 其中在L392中，R_7＝H，在L393中，R_7＝Ph，

[0369] 在L394中，R_7＝2,6-$Me_2C_6H_3$，以及在L395中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，

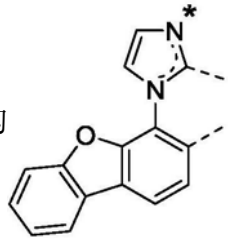
[0370] L396具有结构 

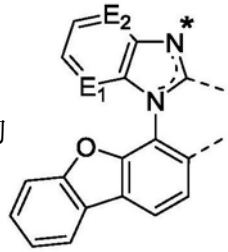
[0371] L397、L398和L399具有结构  ，

[0372] 其中在L397中，E_1＝CH，且E_2＝CH，

[0373] 在L398中，E_1＝N，且E_2＝CH，

[0374] 以及在L399中，E_1＝N，且E_2＝N，

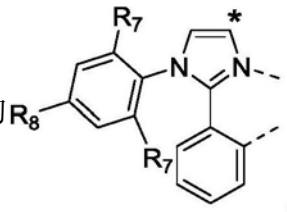
[0375] L400具有结构 

[0376] L401、L402和L403具有结构  ，

[0377] 其中在L401中，E_1＝CH，且E_2＝CH，

[0378] 在L402中，E_1＝N，且E_2＝CH，

[0379] 以及在L403中，E_1＝N，且E_2＝N，

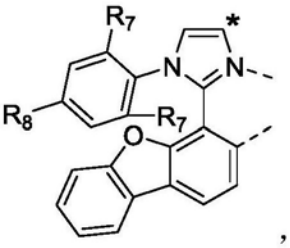
[0380] L404、L405、L406和L407具有结构  ，

[0381] 其中在L404中，R_7＝Me，且R_8＝H，

[0382] 在L405中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，

[0383] 在L406中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，

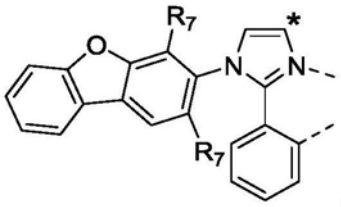
[0384] 以及在L407中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

[0385] L408、L409和L410具有结构  ，

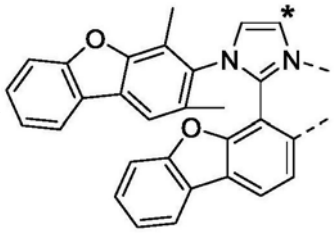
[0386] 其中在L408中，R_7＝Me，且R_8＝H，

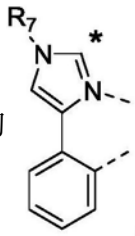
[0387] 在L409中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，

[0388] 以及在L410中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

[0389] L411和L412具有结构  ，

[0390] 其中在L411中，R_7＝Me，以及在L412中，R_7＝^{i}Pr，

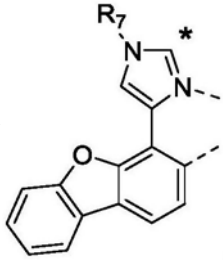
[0391] L413具有结构  ，

[0392] L414、L415、L416、L417和L418具有结构  ，

[0393] 其中在L414中，R_7＝Me，在L415中，R_7＝CD_3，

[0394] 在L416中，R_7＝^{i}Pr，在L417中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，

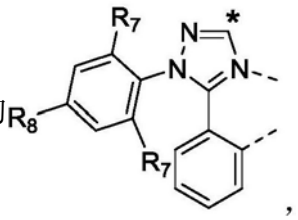
[0395] 以及在L418中，R_7＝2,6-$(^iPr)_2C_6H_3$，

[0396] L419、L420、L421、L422和L423具有结构  ，

[0397] 其中在L419中，R_7＝Me，在L420中，R_7＝CD_3，

[0398] 在L421中，R_7＝^{i}Pr，在L422中，R_7＝2,6-$(CD_3)_2C_6H_3$，

[0399] 以及在L423中，R_7＝2,6-$(^{i}Pr)_2C_6H_3$，

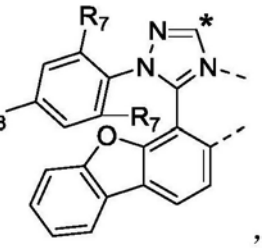
[0400] L424、L425、L426和L427具有结构  ，

[0401] 其中在L424中，R_7＝Me，且R_8＝H，

[0402] 在L425中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝H，

[0403] 在L426中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，

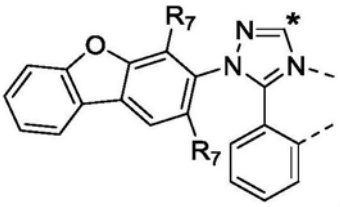
[0404] 以及在L427中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

[0405] L428、L429和L430具有结构  ，

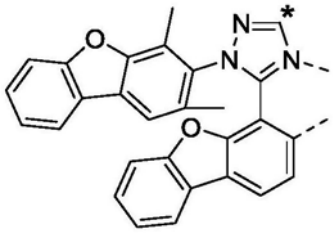
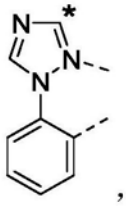
[0406] 其中在L428中，R_7＝Me，且R_8＝H，

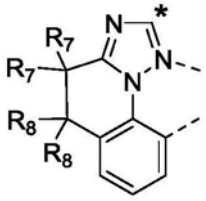
[0407] 在L429中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，

[0408] 以及在L430中，R_7＝^{i}Pr，且R_8＝Ph，

[0409] L431和L432具有结构  ，

[0410] 其中在L431中，R_7＝Me，以及在L432中，R_7＝^{i}Pr，

[0411] L433具有结构  ，L434具有结构  ，

[0412] L435、L436、L437、L438和L439具有结构  ，

[0413] 其中在L435中，R_7＝Me，且R_8＝Me，

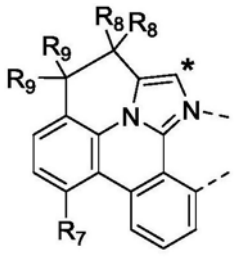
[0414] 在L436中，R_7＝CD_3，且R_8＝Me，

[0415] 在L437中，R_7＝CD_3，且R_8＝CD_3，

[0416] 在L438中，R_7＝Et，且R_8＝Me，

[0417] 以及在L439中，R_7＝CH_2CF_3，且R_8＝Me，

[0418] L440、L441、L442、L443、L444、L445、L446、L447、L448、L449、L450和L451具有结构



，

[0419] 其中在L440中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝Me，在L441中，R_7＝Me，R_8＝Me，且R_9＝Me，

[0420] 在L442中，R_7＝CD_3，R_8＝Me，且R_9＝Me，在L443中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，

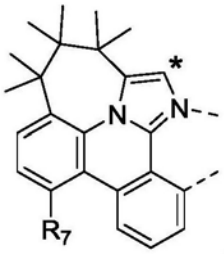
[0421] 在L444中，R_7＝Me，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，在L445中，R_7＝CD_3，R_8＝CD_3，且R_9＝Me，

[0422] 在L446中，R_7＝H，R_8＝Me，且R_9＝CD_3，在L447中，R_7＝Me，R_8＝Me，且R_9＝CD_3，

[0423] 在L448中，R_7＝CD_3，R_8＝Me，且R_9＝CD_3，在L449中，R_7＝H，R_8＝CD_3，且R_9＝CD_3，

[0424] 在L450中，R_7＝Me，R_8＝CD_3，且R_9＝CD_3，以及在L451中，R_7＝CD_3，R_8＝CD_3，且R_9＝CD_3，

[0425] L452、L453和L454具有结构

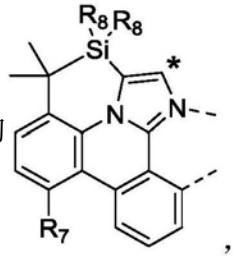


，

[0426] 其中在L452中，R_7＝H，在L453中，R_7＝Me，

[0427] 以及在L454中，R_7＝CD_3，

[0428] L455、L456、L457、L458、L459、L460、L461、L462和L463具有结构



，

[0429] 其中在L455中，R_7＝H，且R_8＝Me，

[0430] 在L456中，R_7＝Me，且R_8＝Me，

[0431] 在L457中，R_7＝CD_3，且R_8＝Me，

[0432] 在L458中，R_7＝H，且R_8＝^{i}Pr，

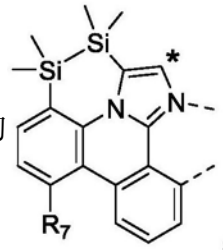
[0433] 在L459中，R_7＝Me，且R_8＝^{i}Pr，

[0434] 在L460中，R_7＝CD_3，且R_8＝^{i}Pr，

[0435] 在L461中，R_7＝H，且R_8＝Ph，

[0436] 在L462中，R_7＝Me，且R_8＝Ph，以及

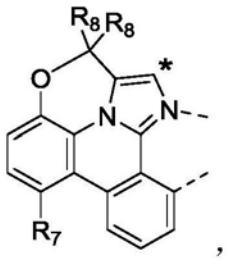
[0437] 在L463中，R_7＝CD_3，且R_8＝Ph，

[0438] L464、L465和L466具有结构  ,

[0439] 其中在L464中,R_7=H,

[0440] 在L465中,R_7=Me,以及

[0441] 在L466中:R_7=CD_3,

[0442] L467、L468、L469、L470、L471、L472、L473、L474和L475具有结构  ,

[0443] 其中在L467中,R_7=H,且R_8=Me,

[0444] 在L468中,R_7=Me,且R_8=Me,

[0445] 在L469中,R_7=CD_3,且R_8=Me,

[0446] 在L470中,R_7=H,且R_8=CD_3,

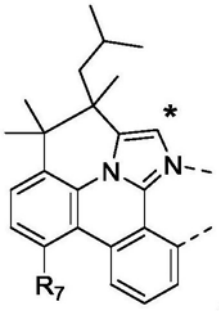
[0447] 在L471中,R_7=Me,且R_8=CD_3,

[0448] 在L472中,R_7=CD_3,且R_8=CD_3,

[0449] 在L473中,R_7=H,且R_8=Ph,

[0450] 在L474中,R_7=Me,且R_8=Ph,以及

[0451] 在L475中,R_7=CD_3,且R_8=Ph,

[0452] L476、L477和L478具有结构  ,

[0453] 其中在L476中,R_7=H,

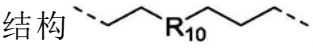
[0454] 在L477中,R_7=Me,以及

[0455] 在L478中,R_7=CD_3;

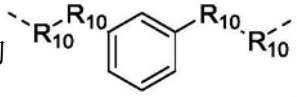
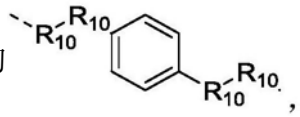
[0456] 其中虚线指示与铱原子的键;

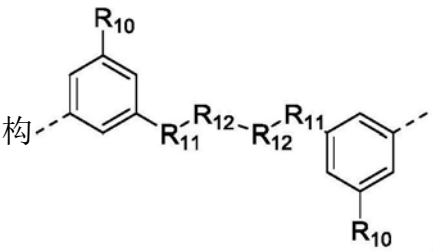
[0457] 其中标记有*的碳在所有L_x结构中连接于H原子或在L_y和L_z结构中连接于$Link_q$;且

[0458] 其中在化合物V中,$Link_q$是下文定义的结构Link1到Link21中的一个,且在化合物W中,$Link_q$是下文定义的结构Link22到Link53中的一个:

[0459] Link1和Link 2具有结构  ,其中在Link1中,R_{10}=CH_2,以及在

Link2中，R_{10}＝CH_2CH_2，

[0460] Link 3和Link 4具有结构  其中在Link 3中，R_{10}＝CH_2，以及在Link4中，R_{10}＝CD_2，Link 5和Link6具有结构  其中在Link5中，R_{10}＝CH_2，以及在Link6中，R_{10}＝CD_2，  Link7 ， Link8 ，

[0461] Link9、Link10、Link11、Link12、Link13、Link14、Link15、Link16和Link17具有结构  ，

[0462] 其中在Link9中，R_{10}＝H，R_{11}＝CH_2，且R_{12}＝CH_2，

[0463] 在Link10中，R_{10}＝Me，R_{11}＝CH_2，且R_{12}＝CH_2，

[0464] 在Link11中，R_{10}＝CD_3，R_{11}＝CH_2，且R_{12}＝CH_2，

[0465] 在Link12中，R_{10}＝H，R_{11}＝CD_2，且R_{12}＝CH_2，

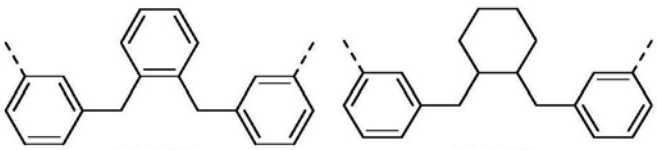
[0466] 在Link13中，R_{10}＝Me，R_{11}＝CD_2，且R_{12}＝CH_2，

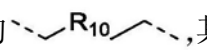
[0467] 在Link14中，R_{10}＝CD_3，R_{11}＝CD_2，且R_{12}＝CH_2，

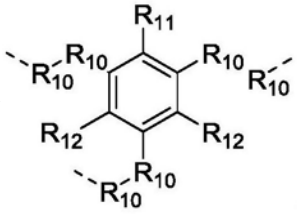
[0468] 在Link15中，R_{10}＝H，R_{11}＝CD_2，且R_{12}＝CD_2，

[0469] 在Link16中，R_{10}＝Me，R_{11}＝CD_2，且R_{12}＝CD_2，

[0470] 在Link17中，R_{10}＝CD_3，R_{11}＝CD_2，且R_{12}＝CD_2，

[0471]  Link18 ， Link19 ，

[0472] Link20和Link21具有结构  ，其中在Link20中，R_{10}＝CH_2，以及在Link21中，R_{10}＝CH_2CH_2，

[0473] Link22、Link23、Link24、Link25、Link26、Link27、Link28、Link29、Link30、Link31、Link32和Link33具有结构  ，

[0474] 其中，在Link22中，R_{10}＝CH_2，且R_{11}＝R_{12}＝H，

[0475] 在Link23中，R_{10}＝CD_2，且R_{11}＝R_{12}＝H，

[0476] 在Link24中，R_{10}＝CH_2，且R_{11}＝R_{12}＝Me，

[0477] 在Link25中，R_{10}＝CD_2，且R_{11}＝R_{12}＝Me，

[0478] 在Link26中，R_{10}＝CH_2，R_{11}＝Me，且R_{12}＝H，

[0479] 在Link27中，R_{10}＝CD_2，R_{11}＝Me，且R_{12}＝H，

[0480] 在Link28中，R_{10}＝CH_2，R_{11}＝Et，且R_{12}＝H，

[0481] 在Link29中，R_{10}＝CD_2，R_{11}＝Et，且R_{12}＝H，

[0482] 在Link30中，R_{10}＝CH_2，R_{11}＝CH_2CF_3，且R_{12}＝H，

[0483] 在Link31中，R_{10}＝CD_2，R_{11}＝CH_2CF_3，且R_{12}＝H，

[0484] 在Link32中，R_{10}＝CH_2，R_{11}＝^{i}Bu，且R_{12}＝H，

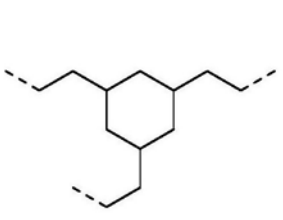
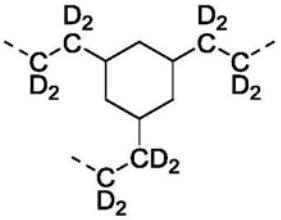
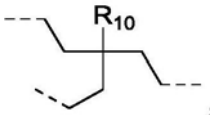
[0485] 在Link33中，R_{10}＝CD_2，R_{11}＝^{i}Bu，且R_{12}＝H，

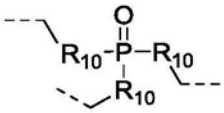
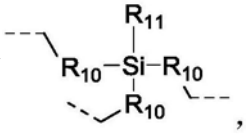
[0486] 在Link34中，R_{10}＝CH_2，R_{11}＝$CH_2(CH_3)_3$，且R_{12}＝H，

[0487] 在Link35中，R_{10}＝CD_2，R_{11}＝$CH_2(CH_3)_3$，且R_{12}＝H，

[0488] 在Link36中，R_{10}＝CH_2，R_{11}＝$CH_2CH(CH_3)(CF_3)$，且R_{12}＝H，

[0489] 在Link37中，R_{10}＝CD_2，R_{11}＝$CH_2CH(CH_3)(CF_3)$，且R_{12}＝H，

[0490]  Link38 ，  Link39 ， Link40和Link41具有结构  ，其中，在Link40中，R_{10}＝Me，以及在Link41中，R_{10}＝Ph，

[0491] Link42和Link43具有结构  ，其中，在Link42中，R_{10}＝CH_2，以及在Link43中，R_{10}＝O，Link 44、Link 45、Link 46和Link47具有结构  ，

[0492] 其中，在Link44中，R_1＝CH_2，且R_2＝Me，

[0493] 在Link45中，R_1＝CH_2，且R_2＝Ph，

[0494] 在Link46中，R_1＝O，且R_2＝Me，以及

[0495] 在Link47中，R_1＝O，且R_2＝Ph，

[0496] Link48、Link49、Link50、Link51、Link52和Link53具有结构  ，

[0497] 其中,在Link48中,E=C,R_{10}=CH_2,且R_{11}=Me,

[0498] 在Link49中,E=C,R_{10}=CH_2,且R_{11}=Ph,

[0499] 在Link50中,E=C,R_{10}=CD_2,且R_{11}=Me,

[0500] 在Link51中,E=C,R_{10}=CD_2,且R_{11}=Ph,

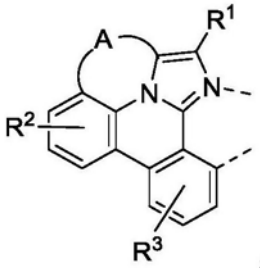
[0501] 在Link52中,E=Si,R_{10}=CH_2,且R_{11}=Me,以及

[0502] 在Link53中,E=Si,R_{10}=CH_2,且R_{11}=Ph;其中虚线表示连接于L_x、L_y和L_z上由*标记的碳的键。

[0503] 在一个实施例中,所述化合物选自由以下组成的群组:Ir(L_{51}-L_{51}-L_{51}-$Link_{22}$)、Ir(L_{51}-L_{51}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{51}-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{51}-L_{51}-L_{51}-$Link_{23}$)、Ir(L_{51}-L_{51}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{51}-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_9-L_9-L_9-$Link_{22}$)、Ir(L_9-L_9-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_9-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_9-L_9-L_9-$Link_{23}$)、Ir(L_9-L_9-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_9-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{47}-L_{47}-L_{47}-$Link_{22}$)、Ir(L_{47}-L_{47}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{47}-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{47}-L_{47}-L_{471}-$Link_{23}$)、Ir(L_{47}-L_{47}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{47}-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_5-L_5-L_5-$Link_{22}$)、Ir(L_5-L_5-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_5-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_5-L_5-L_5-$Link_{23}$)、Ir(L_5-L_5-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_5-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_1-L_1-L_1-$Link_{22}$)、Ir(L_1-L_1-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_1-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_1-L_1-L_1-$Link_{23}$)、Ir(L_1-L_1-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_1-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{43}-L_{43}-L_{43}-$Link_{22}$)、Ir(L_{43}-L_{43}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{43}-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{43}-L_{43}-L_{43}-$Link_{23}$)、Ir(L_{43}-L_{43}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{43}-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{117}-L_{117}-L_{117}-$Link_{22}$)、Ir(L_{117}-L_{117}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{117}-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{117}-L_{117}-L_{117}-$Link_{23}$)、Ir(L_{117}-L_{117}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{117}-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{120}-L_{120}-L_{120}-$Link_{22}$)、Ir(L_{120}-L_{120}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{120}-L_{146}-L_{146}-$Link_{22}$)、Ir(L_{120}-L_{120}-L_{120}-$Link_{23}$)、Ir(L_{120}-L_{120}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_{120}-L_{146}-L_{146}-$Link_{23}$)、Ir(L_9)(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_9)(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{51})(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{51})(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{47})(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{47})(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_5)(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_5)(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_1)(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_1)(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{43})(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{43})(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{117})(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{117})(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{120})(L_{146}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{120})(L_{146}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_9)(L_9-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_9)(L_9-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{51})(L_{51}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{51})(L_{51}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{47})(L_{47}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{47})(L_{47}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_5)(L_5-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_5)(L_5-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_1)(L_1-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_1)(L_1-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{43})(L_{43}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{43})(L_{43}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{117})(L_{117}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{117})(L_{117}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{120})(L_{120}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{120})(L_{120}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_9-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_9-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{51}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{51}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{47}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{47}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_5-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_5-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_1-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_1-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{43}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{43}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{117}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{117}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{120}-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{120}-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_9-L_{146}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_9-L_{146}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_9-L_9-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_9-L_9-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{51}-L_{51}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{51}-L_{51}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{47}-L_{47}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{47}-L_{47}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_5-L_5-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_5-L_5-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_1-L_1-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_1-L_1-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{43}-L_{43}-$Link_3$)、Ir(L_{146})(L_{43}-L_{43}-$Link_4$)、Ir(L_{146})(L_{117}-L_{117}-$Link_3$)、Ir

$(L_{146})(L_{117}-L_{117}-Link_4)$、$Ir(L_{146})(L_{120}-L_{120}-Link_3)$和$Ir(L_{146})(L_{120}-L_{120}-Link_4)$。

[0504] 还公开了一种OLED，其包含阳极、阴极和安置在所述阳极与所述阴极之间的有机层。所述有机层包含具有式$Ir(L_A)(L_B)$的化合物；其中L_A是双齿、三齿、四齿、五齿或六齿配体；其中L_B是单齿、双齿、三齿、或四齿配体，或不存在；其中L_A加L_B的总齿合度是6；其中L_A包含至少一种式I结构：

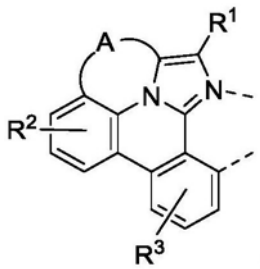
[0505] 

式I；其中A是具有两到三个键联原子的键联基团，其中所述键联原子各自独立地选自由以下组成的群组：C、Si、O、S、N、B；其中R^2和R^3各自独立地表示单取代到最大可允许数目的取代或无取代；其中R^1、R^2和R^3中的每一个独立地选自由以下组成的群组：氢、氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳基、杂芳基、酰基、羧酸、醚、酯、腈、异腈、硫基、亚磺酰基、磺酰基、膦基和其组合；其中任两个取代基可以接合或稠合在一起以形成环；且其中R^1或R^3可经由键联基团与另一配体接合以形成较高齿合度配体。

[0506] 在一些实施例中，所述OLED具有一或多种选自由以下组成的群组的特征：柔性、可卷曲、可折叠、可拉伸和弯曲。在一些实施例中，所述OLED是透明或半透明的。在一些实施例中，所述OLED进一步包含包括碳纳米管的层。

[0507] 在一些实施例中，所述OLED进一步包含包括延迟荧光发射体的层。在一些实施例中，所述OLED包含RGB像素排列或白色加彩色滤光片像素排列。在一些实施例中，所述OLED是移动装置、手持式装置或可佩戴装置。在一些实施例中，所述OLED是对角线小于10英寸或面积小于50平方英寸的显示面板。在一些实施例中，所述OLED是对角线为至少10英寸或面积为至少50平方英寸的显示面板。在一些实施例中，所述OLED是照明面板。

[0508] 还公开一种OLED中的发射区域。所述发射区域包含具有式$Ir(L_A)(L_B)$的化合物；其中L_A是双齿、三齿、四齿、五齿或六齿配体；其中L_B是单齿、双齿、三齿、或四齿配体，或不存在；其中L_A加L_B的总齿合度是6；其中L_A包含至少一种式I结构：

[0509] 

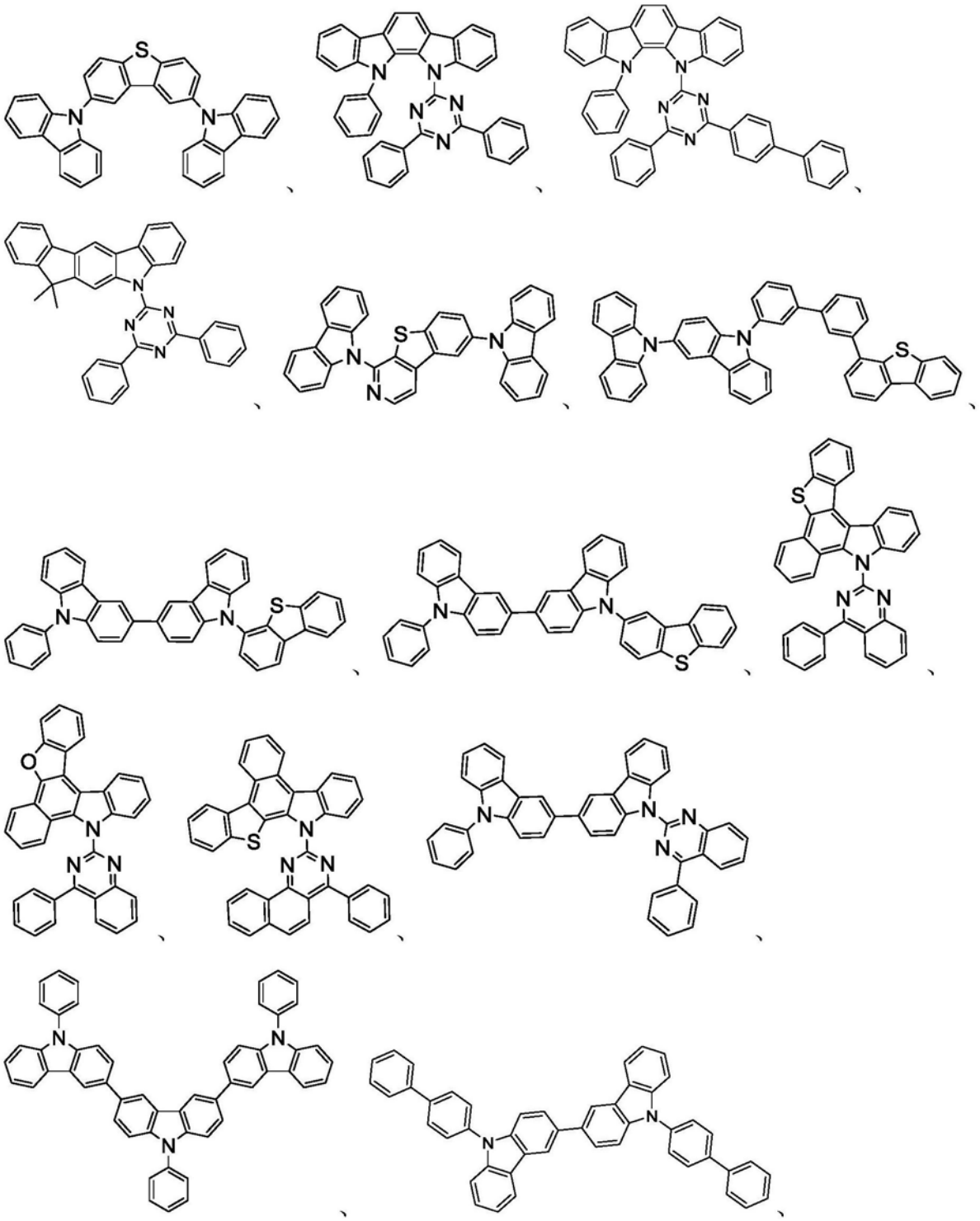
式I；其中A是具有两到三个键联原子的键联基团，其中所述键联原子各自独立地选自由以下组成的群组：C、Si、O、S、N、B；其中R^2和R^3各自独立地表示单取代到最大可允许数目的取代或无取代；其中R^1、R^2和R^3中的每一个独立地选自由以下组成的群组：氢、氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳基、杂芳基、酰基、羧酸、醚、酯、腈、异腈、硫基、亚磺酰基、磺酰基、膦基和其组合；其中任两个取代基可以接合或稠合在一起以形成环；且其中R^1或R^3可

经由键联基团与另一配体接合以形成较高齿合度配体。

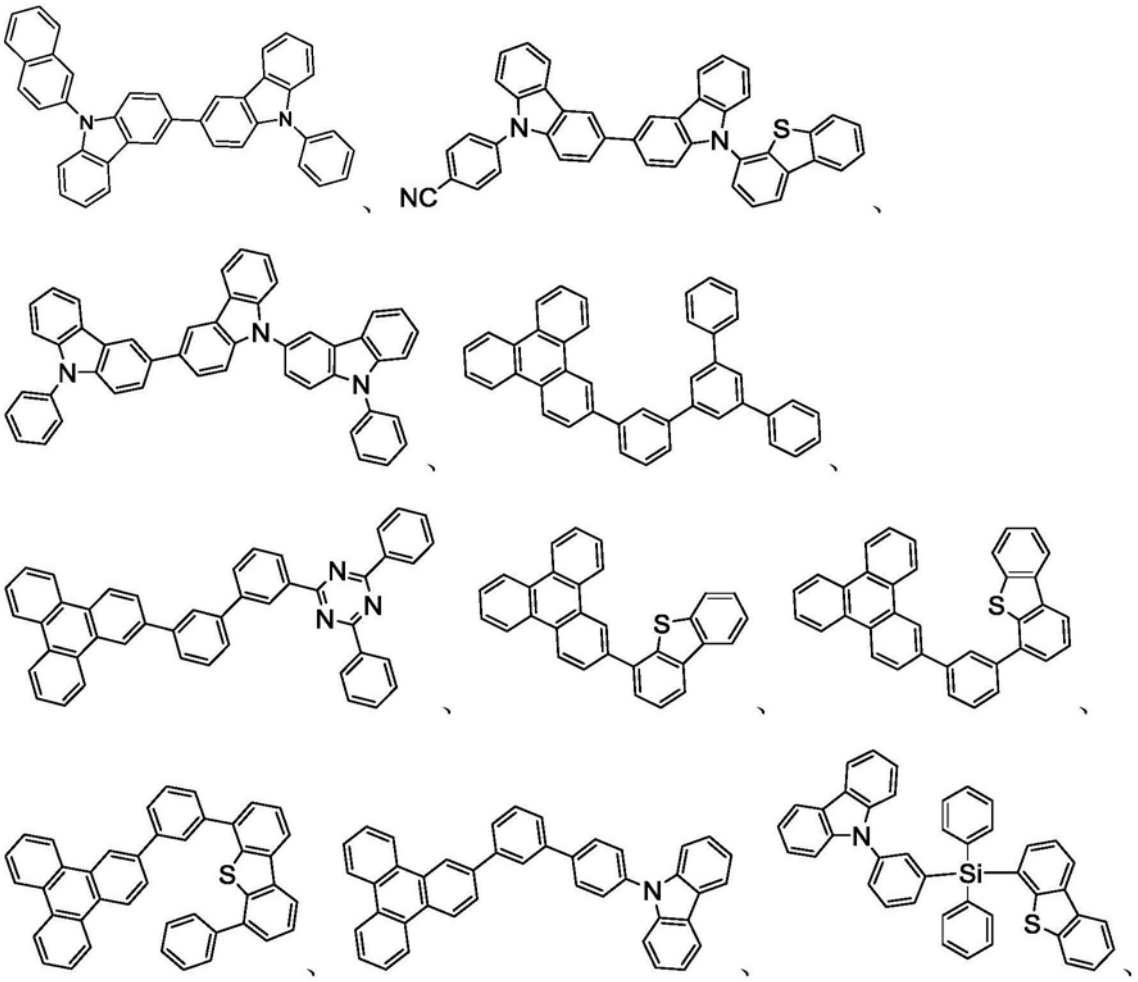
[0510] 在发射区域的一些实施例中，化合物是发射掺杂剂或非发射掺杂剂。在一些实施例中，所述发射区域进一步包含主体，其中所述主体包含选自由以下组成的群组的至少一种：金属络合物、三亚苯、咔唑、二苯并噻吩、二苯并呋喃、二苯并硒吩、氮杂-三亚苯、氮杂-咔唑、氮杂-二苯并噻吩、氮杂-二苯并呋喃和氮杂-二苯并硒吩。

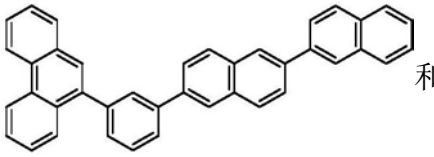
[0511] 在发射区域的一些实施例中，所述发射区域进一步包含主体，其中所述主体选自由以下组成的群组：

[0512]



[0513]



[0514]  和其组合。

[0515] 在一些实施例中，所述化合物可以是发射掺杂剂。在一些实施例中，所述化合物可以经由磷光、荧光、热激活延迟荧光(即TADF，也称为E型延迟荧光，参见例如美国申请第15/700,352号，其以全文引用的方式并入本文中)、三重态-三重态消灭或这些工艺的组合产生发射。

[0516] 根据另一方面，还公开一种包含本文所述化合物的调配物。

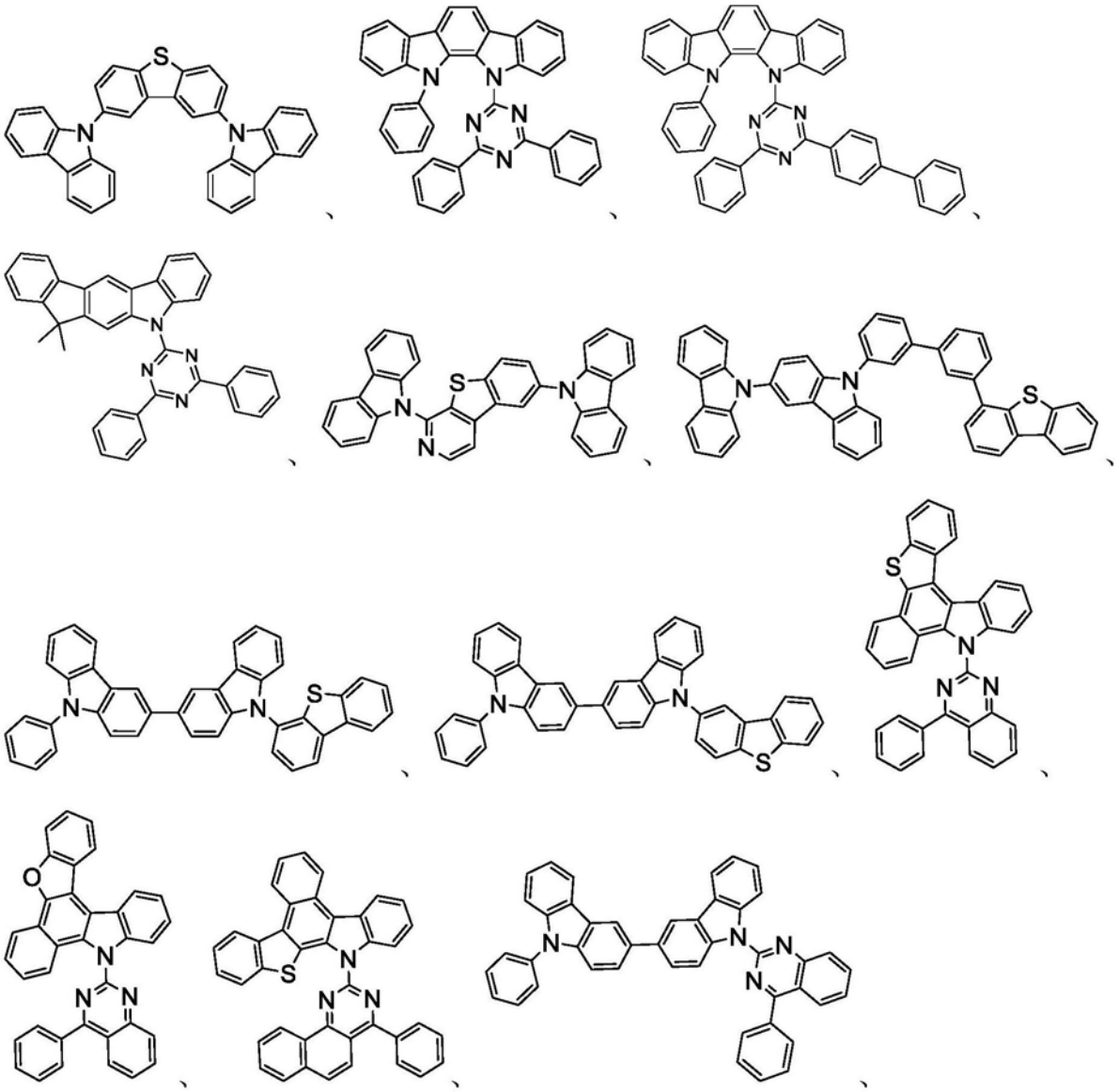
[0517] 本文所公开的OLED可以并入到消费型产品、电子组件模块和照明面板中的一或多种中。有机层可以是发射层，并且化合物在一些实施例中可以是发射掺杂剂，而化合物在其它实施例中可以是非发射掺杂剂。

[0518] 所述有机层还可以包括主体。在一些实施例中，两种或更多种主体是优选的。在一些实施例中，所用的主体可以是在电荷传输中起极小作用的a)双极，b)电子传输，c)空穴传输，或d)宽带隙材料。在一些实施例中，主体可以包括金属络合物。主体可以是含有苯并稠合噻吩或苯并稠合呋喃的三亚苯。主体中的任何取代基可以是独立地选自由以下组成的群组的非稠合取代基：C_nH_{2n+1}、OC_nH_{2n+1}、OAr_1、$N(C_nH_{2n+1})_2$、$N(Ar_1)(Ar_2)$、$CH=CH-C_nH_{2n+1}$、$C\equiv C-C_nH_{2n+1}$、Ar_1、Ar_1-Ar_2和$C_nH_{2n}-Ar_1$，或主体无取代。在前述取代基中，n可以在1到10范围内；并

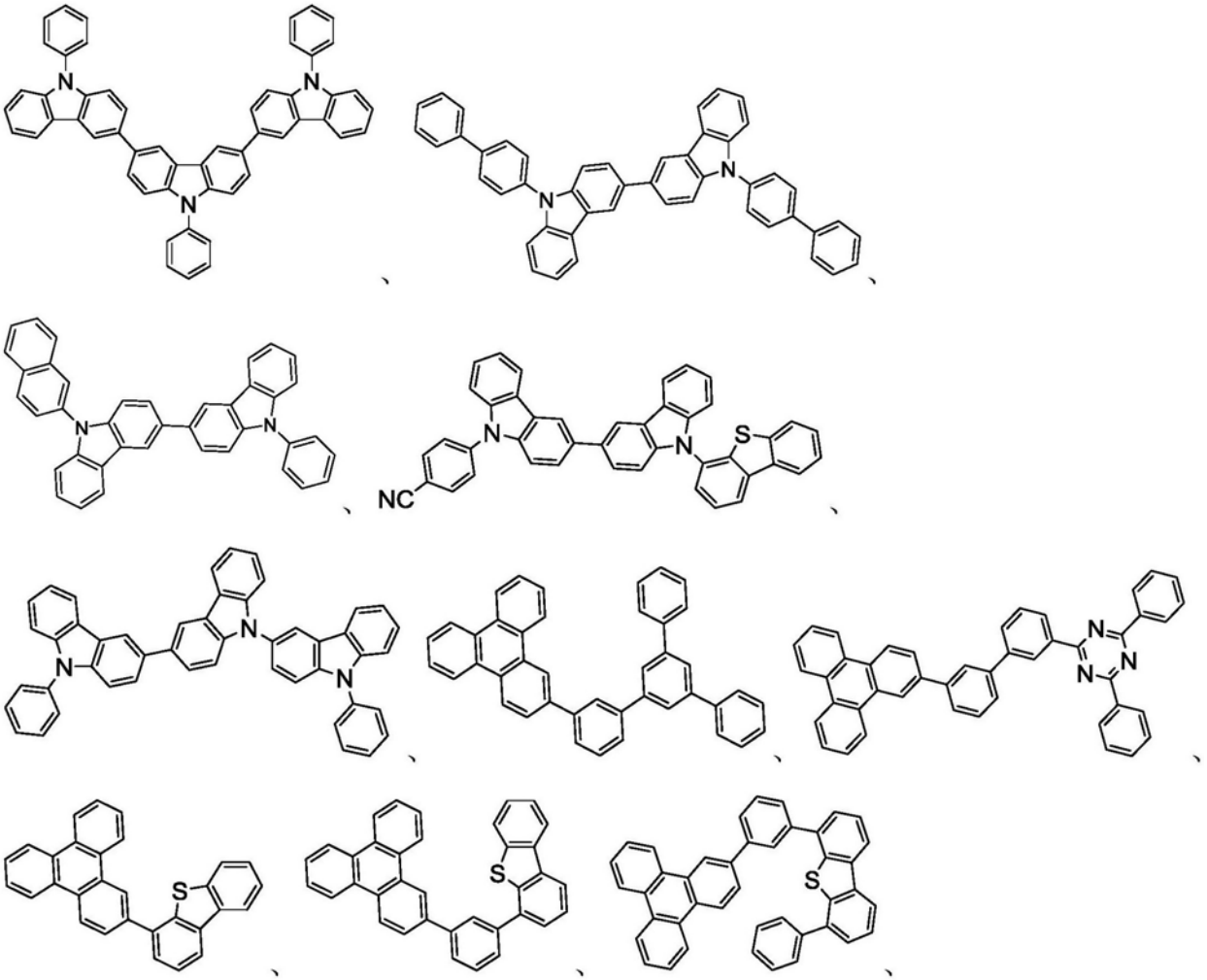
且Ar_1和Ar_2可以独立地选自由以下组成的群组：苯、联苯、萘、三亚苯、咔唑和其杂芳香族类似物。主体可以是无机化合物。举例来说，含Zn的无机材料，例如ZnS。

[0519] 主体可以是包含至少一个选自由以下组成的群组的化学基团的化合物：三亚苯、咔唑、二苯并噻吩、二苯并呋喃、二苯并硒吩、氮杂三亚苯、氮杂咔唑、氮杂-二苯并噻吩、氮杂-二苯并呋喃和氮杂-二苯并硒吩。主体可以包括金属络合物。主体可以是(但不限于)选自由以下组成的群组的特定化合物：

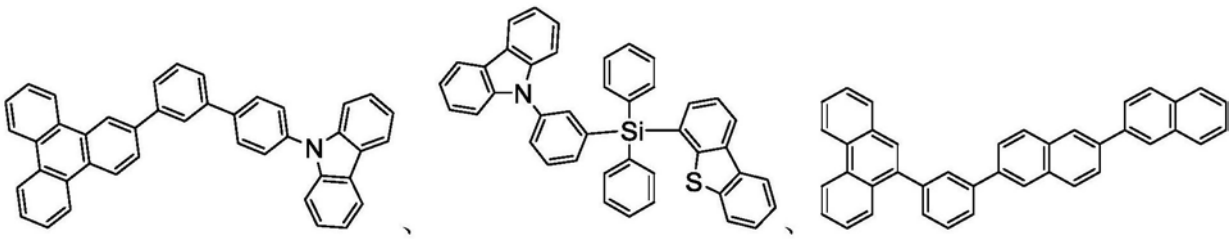
[0520]



[0521]



[0522]



和其组合。

[0523] 以下提供关于可能的主体的额外信息。

[0524] 在本发明的又一方面中，描述一种包含本文所公开的新颖化合物的调配物。调配物可以包括一或多种本文所公开的选自由以下组成的群组的组分：溶剂、主体、空穴注入材料、空穴传输材料、电子阻挡材料、空穴阻挡材料和电子传输材料。

[0525] 与其它材料的组合

[0526] 本文中描述为适用于有机发光装置中的特定层的材料可以与装置中存在的多种其它材料组合使用。举例来说，本文所公开的发射掺杂剂可以与可能存在的广泛多种主体、传输层、阻挡层、注入层、电极和其它层结合使用。下文描述或提及的材料是可以与本文所公开的化合物组合使用的材料的非限制性实例，并且所属领域的技术人员可以容易地查阅

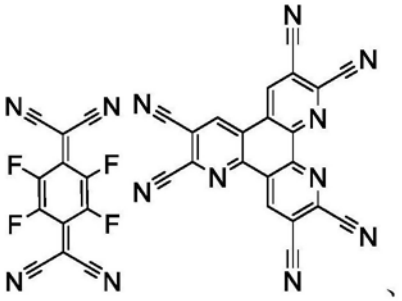
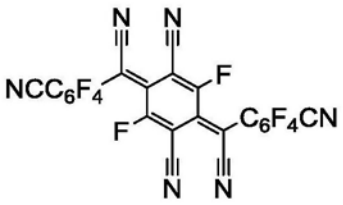
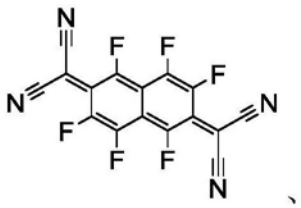
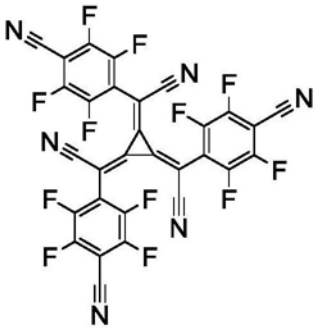
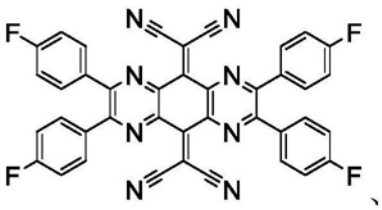
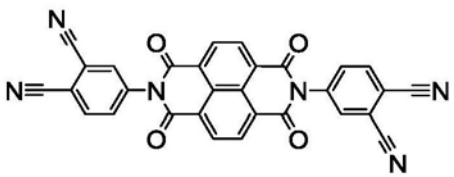
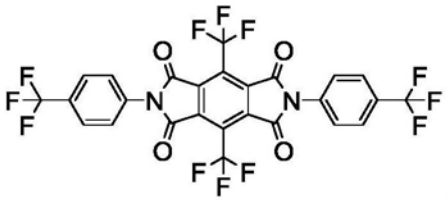
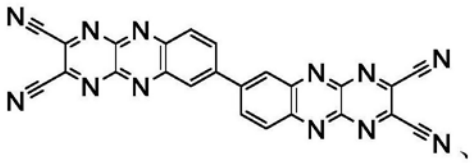
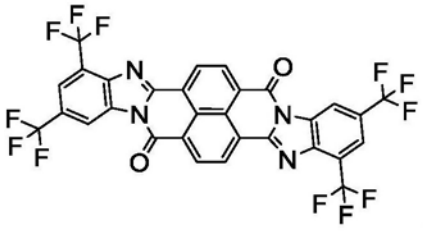
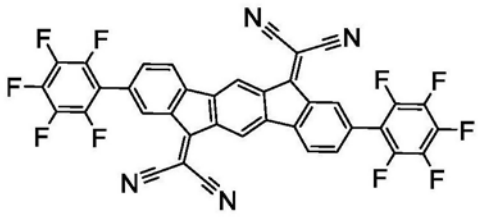
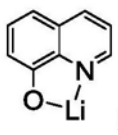
文献以鉴别可以组合使用的其它材料。

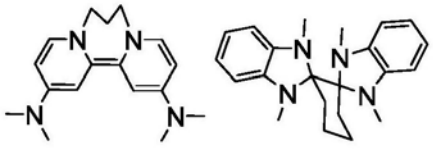
[0527] 导电性掺杂剂：

[0528] 电荷传输层可以掺杂有导电性掺杂剂以大体上改变其电荷载体密度，这转而将改变其导电性。导电性通过在基质材料中生成电荷载体而增加，并且取决于掺杂剂的类型，还可以实现半导体的费米能级(Fermi level)的变化。空穴传输层可以掺杂有p型导电性掺杂剂，并且n型导电性掺杂剂用于电子传输层中。

[0529] 可以与本文中所公开的材料组合用于OLED中的导电性掺杂剂的非限制性实例与公开那些材料的参考文献一起例示如下：EP01617493、EP01968131、EP2020694、EP2684932、US20050139810、US20070160905、US20090167167、US2010288362、WO06081780、WO2009003455、WO2009008277、WO2009011327、WO2014009310、US2007252140、US2015060804、US20150123047和US2012146012。

[0530]

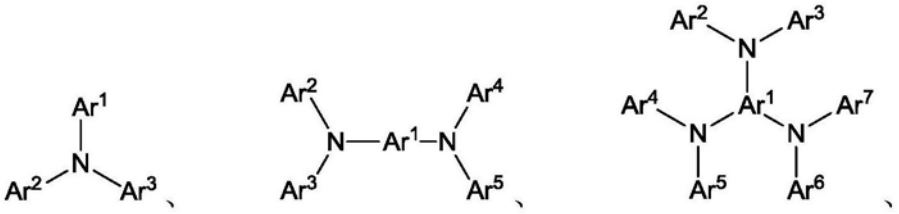

、

、

、

、

、

、

、

、

、

、

和

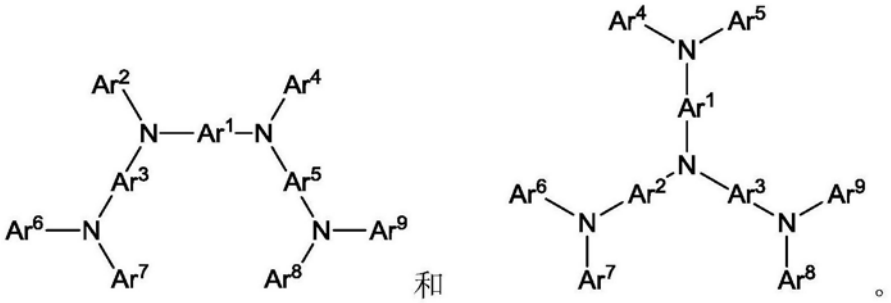
[0531] 

[0532] HIL/HTL：

[0533] 本发明中所用的空穴注入/传输材料不受特别限制，并且可以使用任何化合物，只要化合物通常用作空穴注入/传输材料即可。材料的实例包括(但不限于)：酞菁或卟啉衍生物；芳香族胺衍生物；吲哚并咔唑衍生物；含有氟烃的聚合物；具有导电性掺杂剂的聚合物；导电聚合物，如PEDOT/PSS；衍生自如膦酸和硅烷衍生物的化合物的自组装单体；金属氧化物衍生物，如MoO_x；p型半导电有机化合物，如1,4,5,8,9,12-六氮杂三亚苯六甲腈；金属络合物；以及可交联化合物。

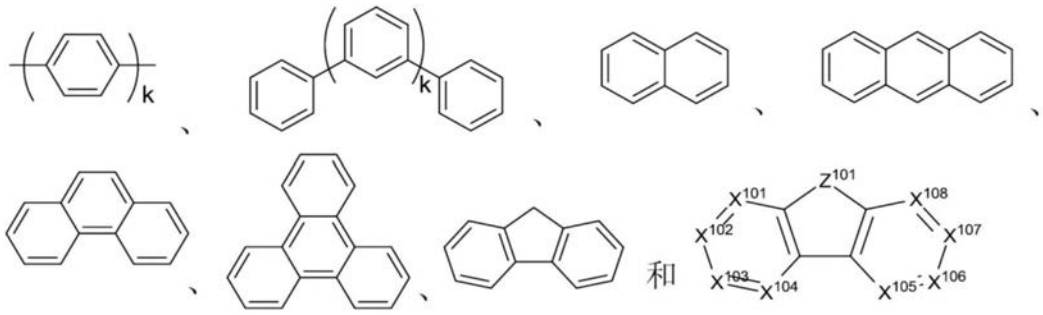
[0534] 用于HIL或HTL的芳香族胺衍生物的实例包括(但不限于)以下一般结构：



[0535] 

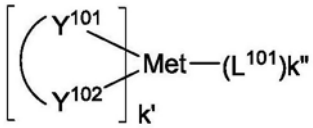
[0536] Ar^1到Ar^9中的每一个选自：由例如以下的芳香族烃环状化合物组成的群组：苯、联苯、联三苯、三亚苯、萘、蒽、苊、菲、芴、芘、䓛、苉和蒽；由例如以下的芳香族杂环化合物组成的群组：二苯并噻吩、二苯并呋喃、二苯并硒吩、呋喃、噻吩、苯并呋喃、苯并噻吩、苯并硒吩、咔唑、吲哚并咔唑、吡啶基吲哚、吡咯并二吡啶、吡唑、咪唑、三唑、噁唑、噻唑、噁二唑、噁三唑、二噁唑、噻二唑、吡啶、哒嗪、嘧啶、吡嗪、三嗪、噁嗪、噁噻嗪、噁二嗪、吲哚、苯并咪唑、吲唑、吲噁嗪、苯并噁唑、苯并异噁唑、苯并噻唑、喹啉、异喹啉、噌啉、喹唑啉、喹喔啉、萘啶、酞嗪、喋啶、氧杂蒽、吖啶、吩嗪、吩噻嗪、吩噁嗪、苯并呋喃并吡啶、呋喃并二吡啶、苯并噻吩并吡啶、噻吩并二吡啶、苯并硒吩并吡啶和硒吩并二吡啶；以及由2到10个环状结构单元组成的群组，所述环状结构单元是选自芳香族烃环基和芳香族杂环基的相同类型或不同类型的基团并且直接或经由氧原子、氮原子、硫原子、硅原子、磷原子、硼原子、链结构单元和脂肪族环基中的至少一个彼此键结。每个Ar可以未被取代或可以被选自由以下组成的群组的取代基取代：氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳基、杂芳基、酰基、羧酸、醚、酯、腈、异腈、硫基、亚磺酰基、磺酰基、膦基和其组合。

[0537] 在一个方面中，Ar^1到Ar^9独立地选自由以下组成的群组：

[0538] 

[0539] 其中k是1到20的整数;X^{101}到X^{108}是C(包括CH)或N;Z^{101}是NAr^1、O或S;Ar^1具有上文所定义的相同基团。

[0540] HIL或HTL中所用的金属络合物的实例包括(但不限于)以下通式:

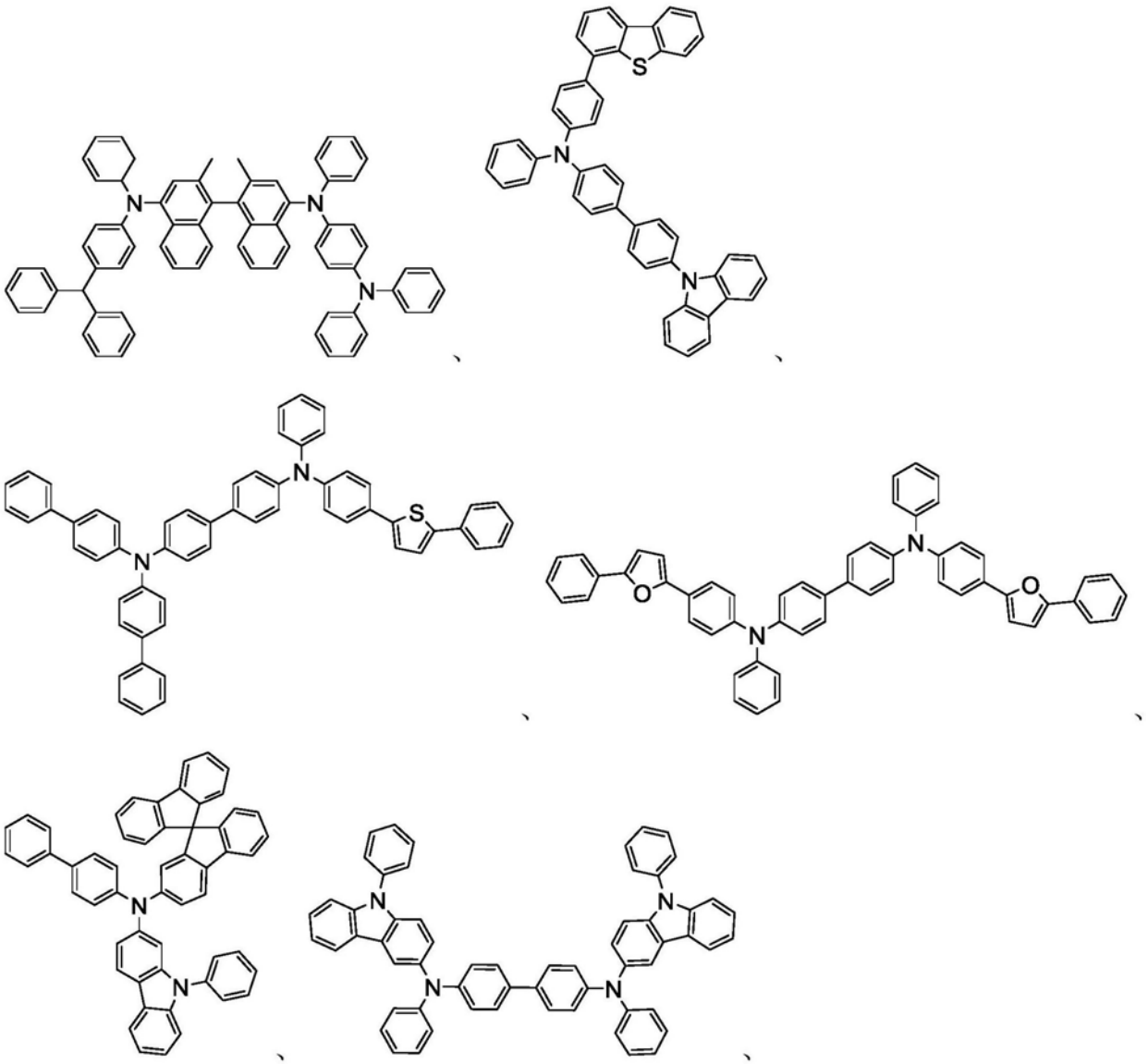
[0541] 

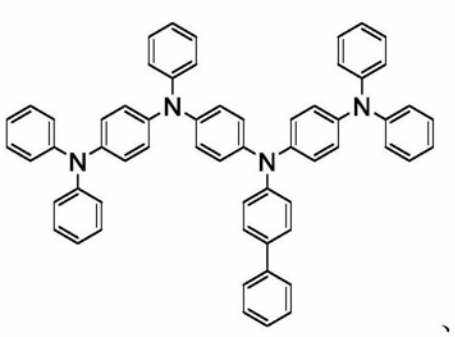
[0542] 其中Met是原子量可以大于40的金属;(Y^{101}-Y^{102})是双齿配体,Y^{101}和Y^{102}独立地选自C、N、O、P和S;L^{101}是辅助配体;k'是1到可以与金属连接的最大配体数的整数值;并且k'+k"是可以与金属连接的最大配体数。

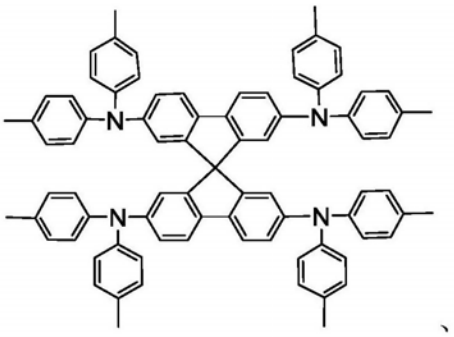
[0543] 在一个方面中,(Y^{101}-Y^{102})是2-苯基吡啶衍生物。在另一方面中,(Y^{101}-Y^{102})是碳烯配体。在另一方面中,Met选自Ir、Pt、Os和Zn。在另一方面中,金属络合物具有相较于Fc^+/Fc耦合的小于约0.6V的溶液中最小氧化电势。

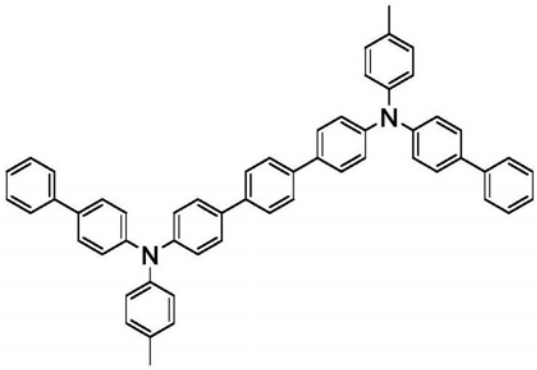
[0544] 可以与本文中所公开的材料组合用于OLED中的HIL和HTL材料的非限制性实例与公开那些材料的参考文献一起例示如下:CN102702075、DE102012005215、EP01624500、EP01698613、EP01806334、EP01930964、EP01972613、EP01997799、EP02011790、EP02055700、EP02055701、EP1725079、EP2085382、EP2660300、EP650955、JP07-073529、JP2005112765、JP2007091719、JP2008021687、JP2014-009196、KR20110088898、KR20130077473、TW201139402、US06517957、US20020158242、US20030162053、US20050123751、US20060182993、US20060240279、US20070145888、US20070181874、US20070278938、US20080014464、US20080091025、US20080106190、US20080124572、US20080145707、US20080220265、US20080233434、US20080303417、US2008107919、US20090115320、US20090167161、US2009066235、US2011007385、US20110163302、US2011240968、US2011278551、US2012205642、US2013241401、US20140117329、US2014183517、US5061569、US5639914、WO05075451、WO07125714、WO08023550、WO08023759、WO2009145016、WO2010061824、WO2011075644、WO2012177006、WO2013018530、WO2013039073、WO2013087142、WO2013118812、WO2013120577、WO2013157367、WO2013175747、WO2014002873、WO2014015935、WO2014015937、WO2014030872、WO2014030921、WO2014034791、WO2014104514、WO2014157018。

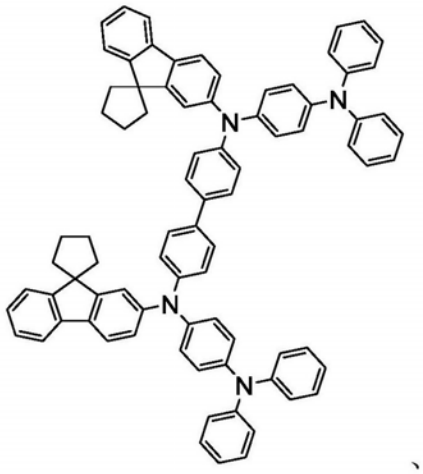
[0545]



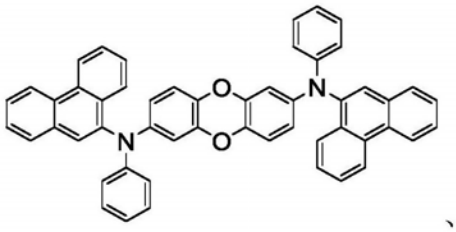


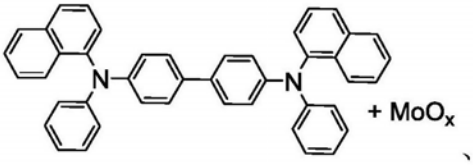


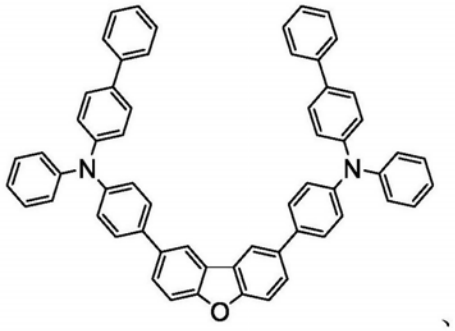


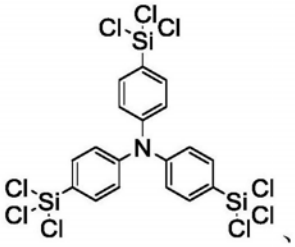


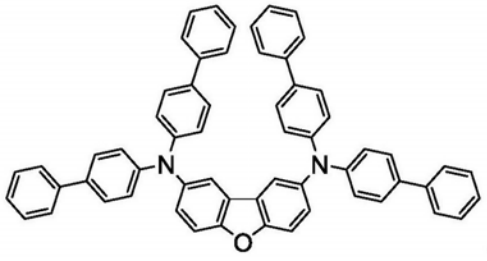
[0546]

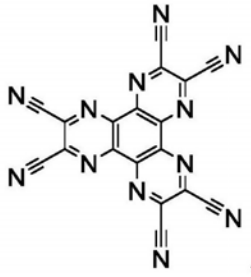


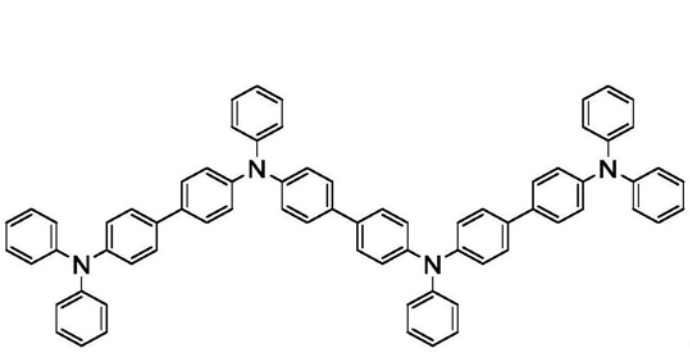


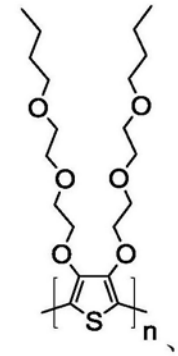


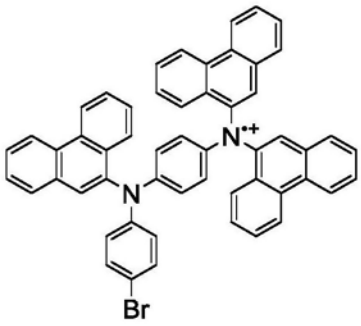


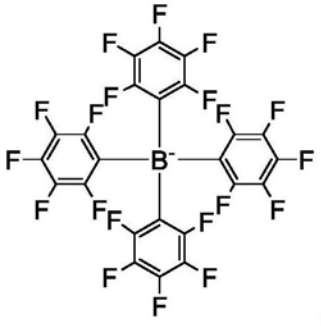


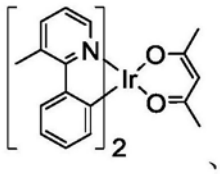




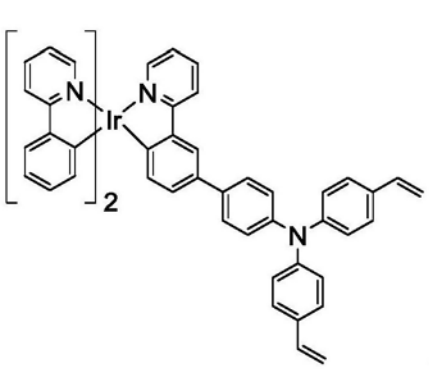


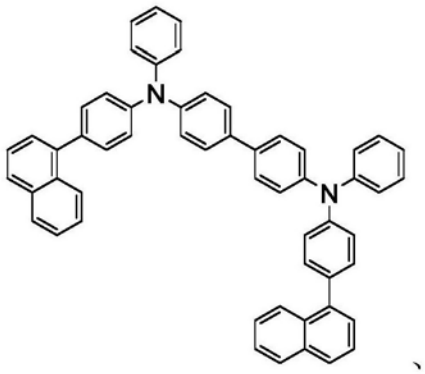


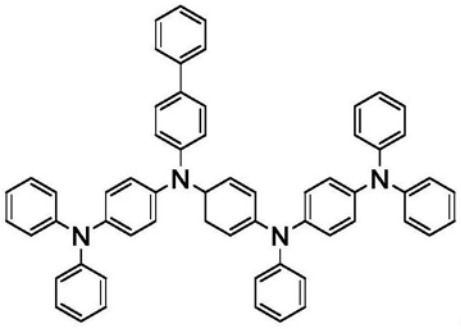


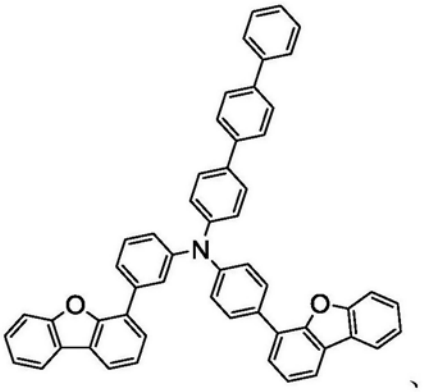


[0547]

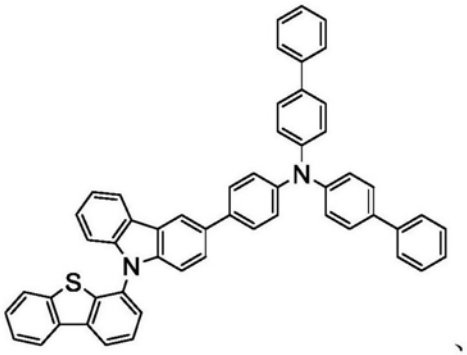
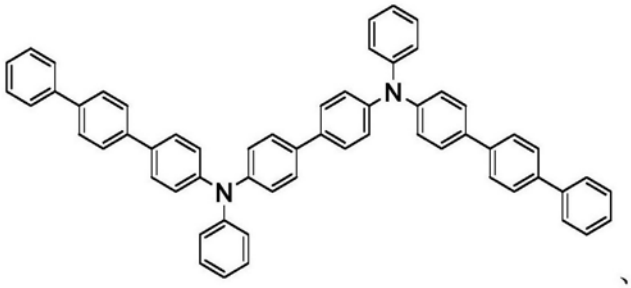
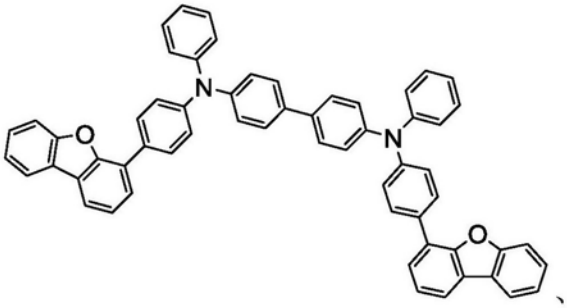
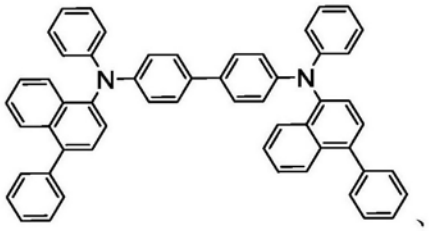
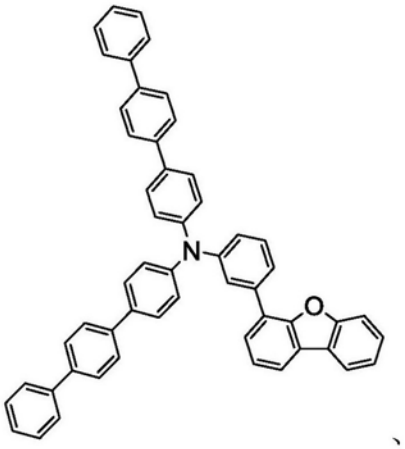
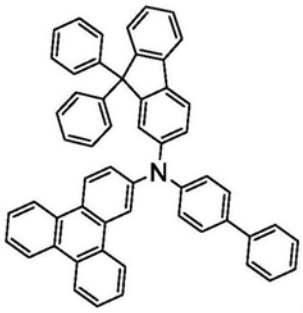
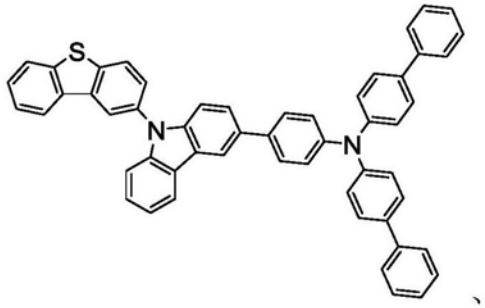
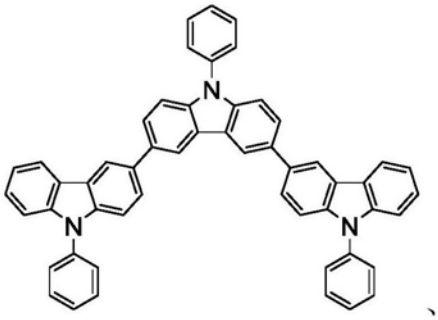
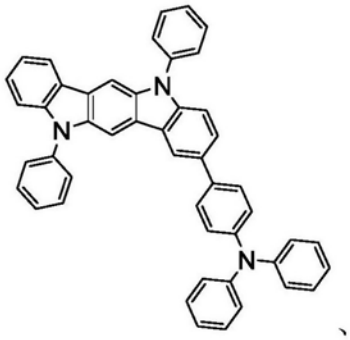




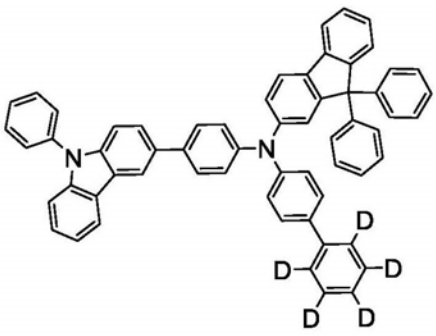
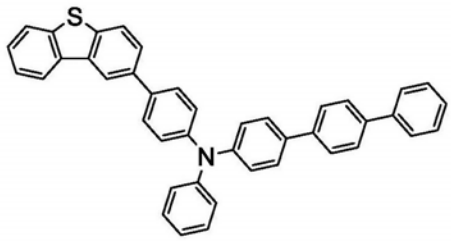
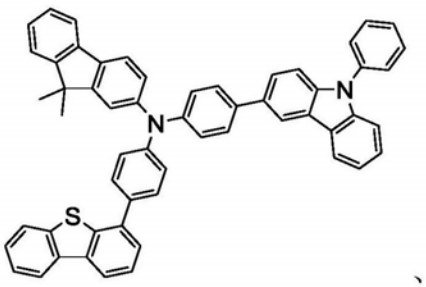
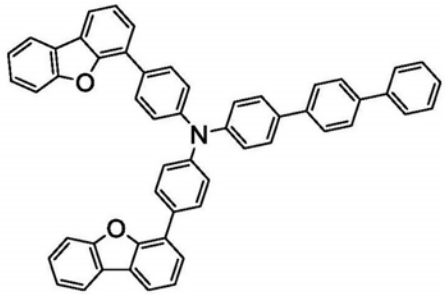
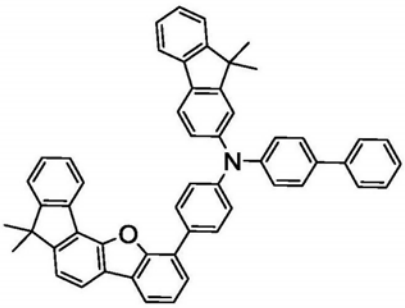
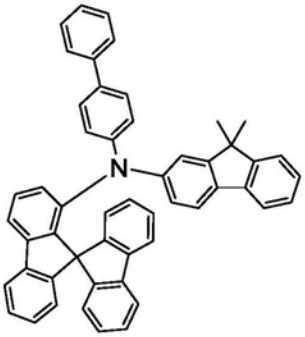
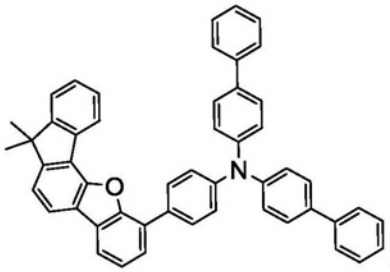
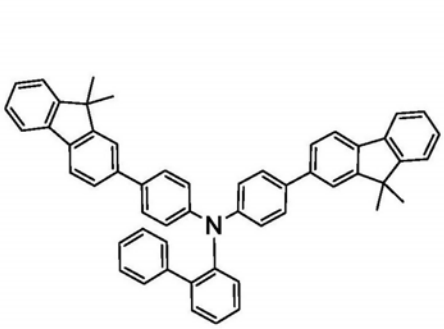
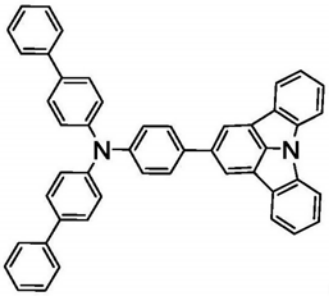
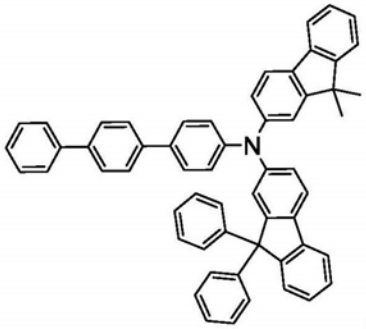
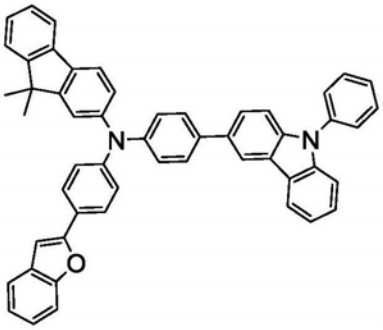
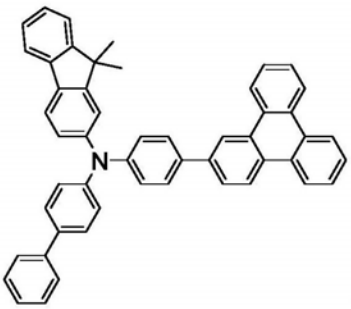
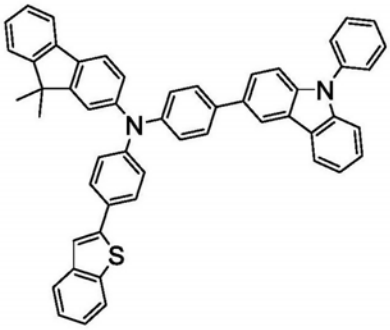




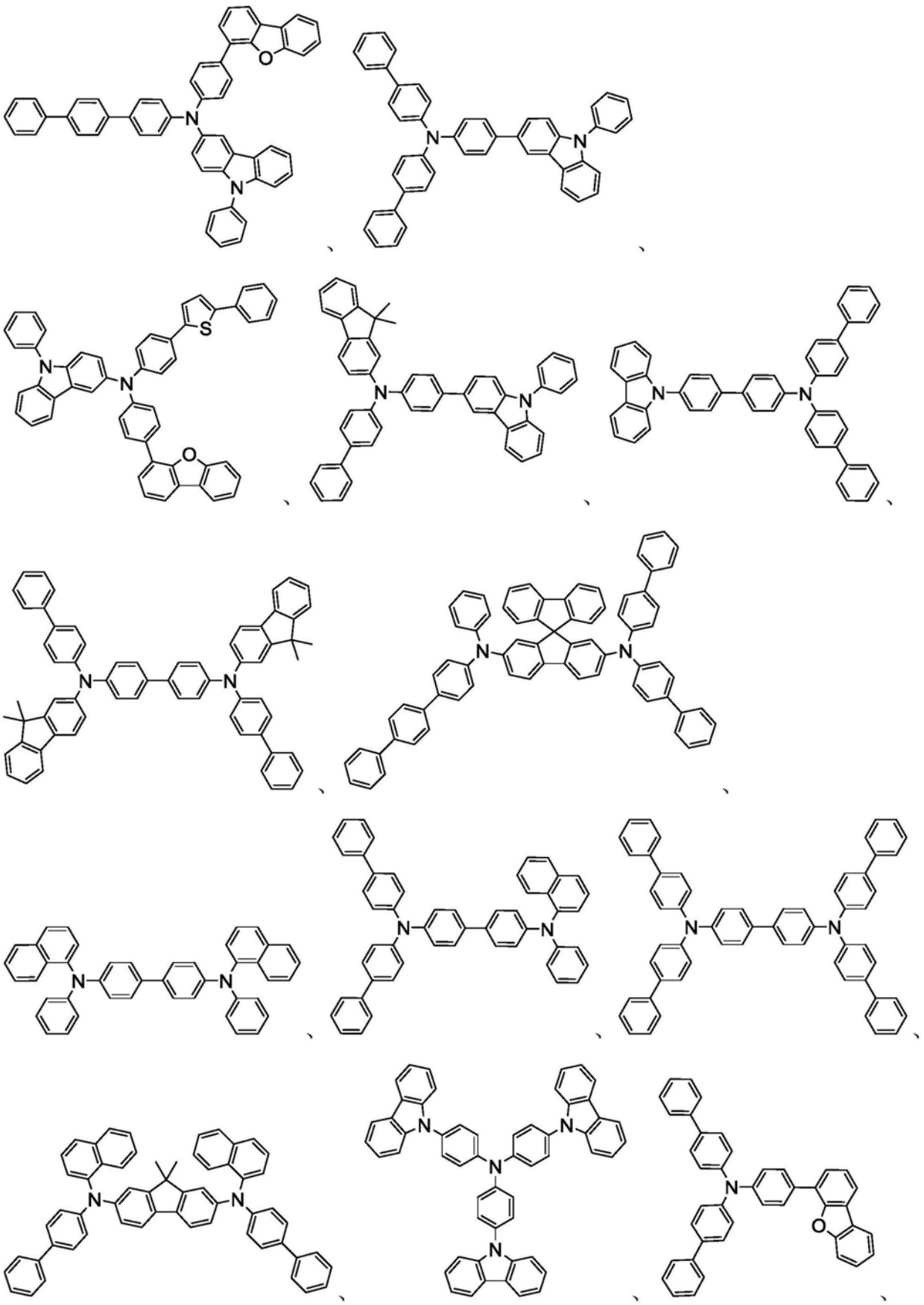
[0548]

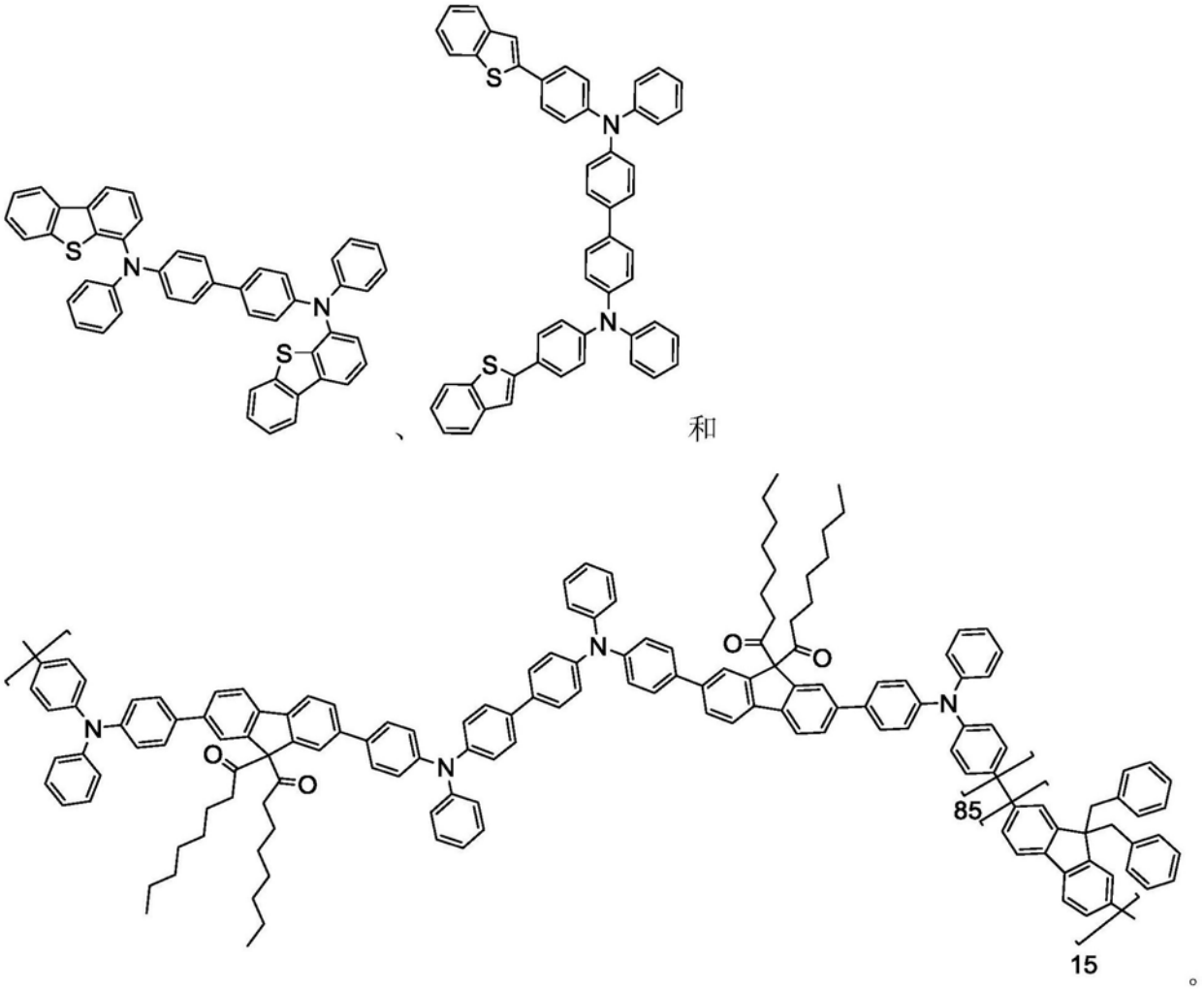
[0549]

[0550]



[0551]



和

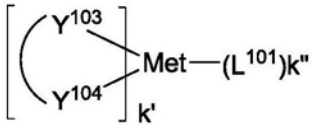
[0552] EBL：

[0553] 电子阻挡层(EBL)可以用以减少离开发射层的电子和/或激子的数目。与缺乏阻挡层的类似装置相比，在装置中存在此类阻挡层可以产生大体上较高的效率和/或较长的寿命。此外，可以使用阻挡层来将发射限制于OLED的所需区域。在一些实施例中，与最接近EBL界面的发射体相比，EBL材料具有较高LUMO(较接近真空能级)和/或较高三重态能量。在一些实施例中，与最接近EBL界面的主体中的一或多种相比，EBL材料具有较高LUMO(较接近真空能级)和/或较高三重态能量。在一个方面中，EBL中所用的化合物含有与下文所述的主体中的一个所用相同的分子或相同的官能团。

[0554] 主体：

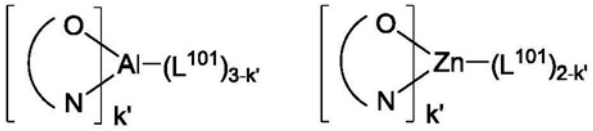
[0555] 本发明的有机EL装置的发光层优选地至少含有金属络合物作为发光材料，并且可以含有使用金属络合物作为掺杂剂材料的主体材料。主体材料的实例不受特别限制，并且可以使用任何金属络合物或有机化合物，只要主体的三重态能量大于掺杂剂的三重态能量即可。任何主体材料可以与任何掺杂剂一起使用，只要满足三重态准则即可。

[0556] 用作主体的金属络合物的实例优选具有以下通式：

[0557] 

[0558] 其中Met是金属;(Y^{103}-Y^{104})是双齿配体,Y^{103}和Y^{104}独立地选自C、N、O、P和S;L^{101}是另一配体;k'是1到可以与金属连接的最大配体数的整数值;并且k'+k"是可以与金属连接的最大配体数。

[0559] 在一个方面中,金属络合物是:

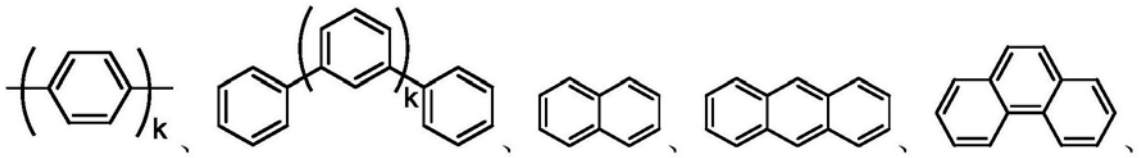
[0560] 

[0561] 其中(O-N)是具有与O和N原子配位的金属的双齿配体。

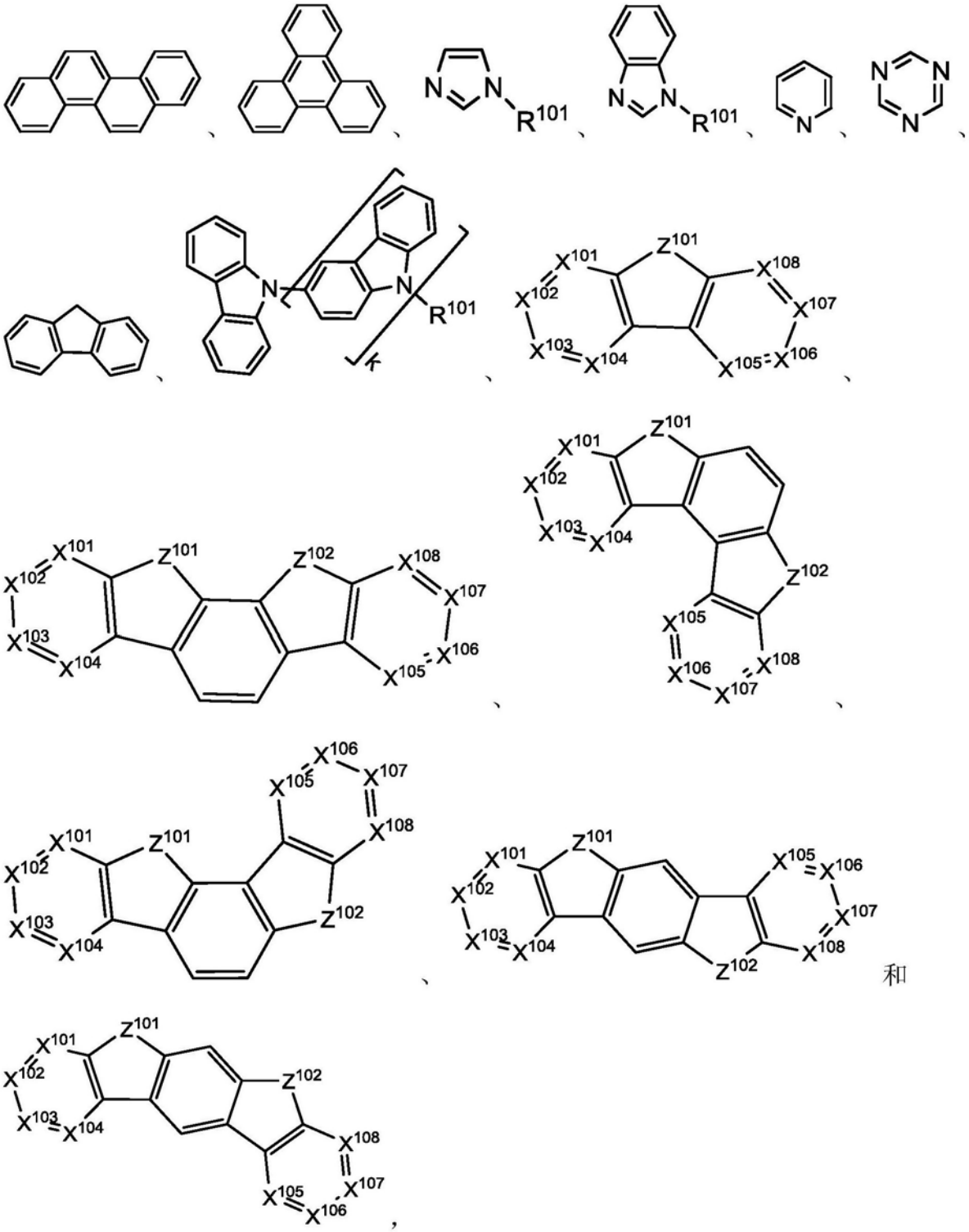
[0562] 在另一方面中,Met选自Ir和Pt。在另一方面中,(Y^{103}-Y^{104})是碳烯配体。

[0563] 用作主体的其它有机化合物的实例选自:由例如以下的芳香族烃环状化合物组成的群组:苯、联苯、联三苯、三亚苯、四亚苯、萘、蒽、苊、菲、芴、芘、䓛、苉和薁;由例如以下的芳香族杂环化合物组成的群组: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、吡唑、吲哚并咔唑、吡啶基吲哚、吡咯并二吡啶、吡唑、咪唑、三唑、噁唑、噻唑、噁二唑、噁三唑、二噁唑、噻二唑、吡啶、哒嗪、嘧啶、吡嗪、三嗪、噁嗪、噁噻嗪、噁二嗪、吲哚、苯并咪唑、吲唑、吲噁嗪、苯并噁唑、苯并异噁唑、苯并噻唑、喹啉、异喹啉、噌啉、喹唑啉、喹喔啉、萘啶、酞嗪、喋啶、氧杂蒽、吖啶、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、苯并硒吩并吡啶和硒吩并二吡啶;以及由2到10个环状结构单元组成的群组,所述环状结构单元是选自芳香族烃环基和芳香族杂环基的相同类型或不同类型的基团并且直接或经由氧原子、氮原子、硫原子、硅原子、磷原子、硼原子、链结构单元和脂肪族环基中的至少一个彼此键结。每个基团中的每个选项可以未被取代或可以被选自由以下组成的群组的取代基取代:氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳基、杂芳基、酰基、羧酸、醚、酯、腈、异腈、硫基、亚磺酰基、磺酰基、膦基和其组合。

[0564] 在一个方面中,主体化合物在分子中含有以下基团中的至少一个:

[0565] 

[0566]



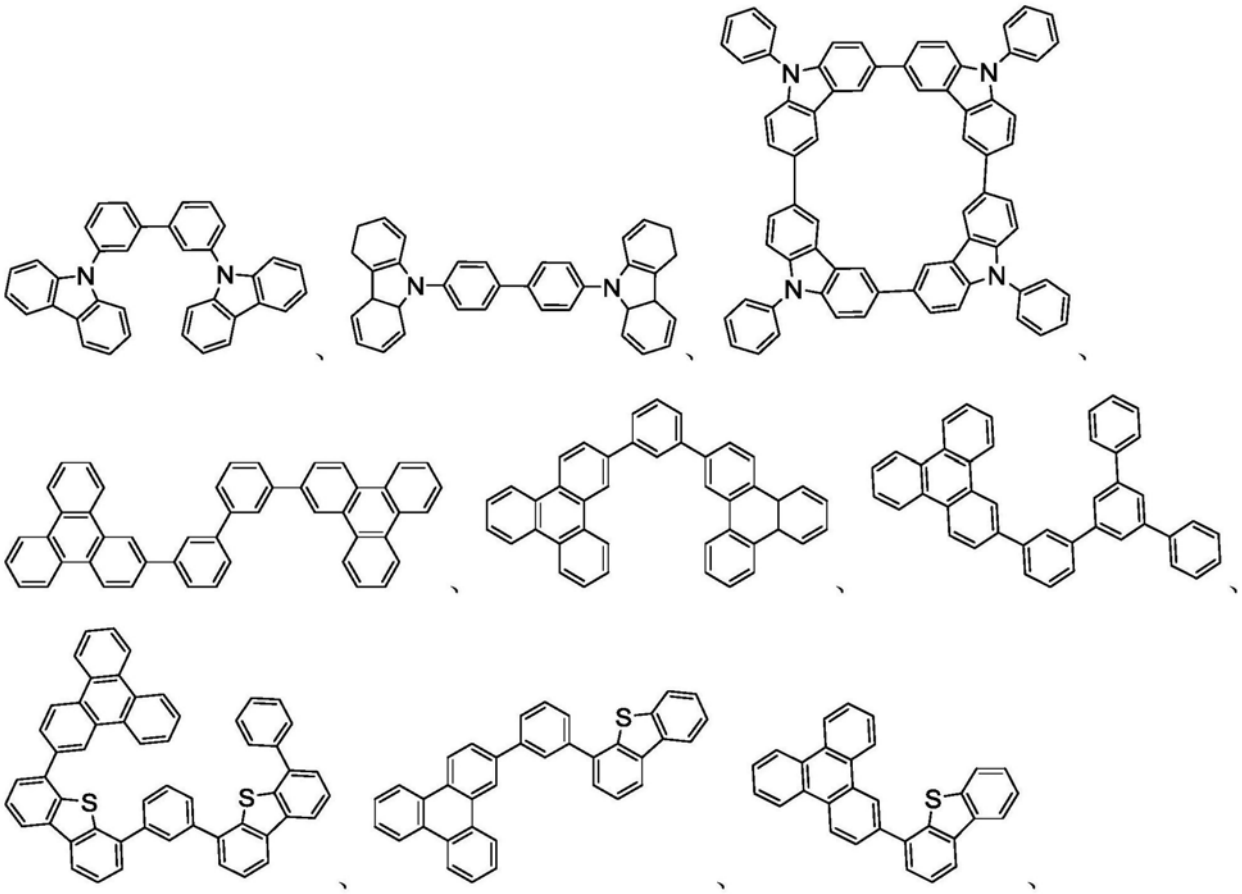
和

[0567] 其中R^{101}选自由以下组成的群组:氢、氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳基、杂芳基、酰基、羧酸、醚、酯、腈、异腈、硫基、亚磺酰基、磺酰基、膦基和其组合,且当其是芳基或杂芳基时,其具有与上文所提及的Ar类似的定义。k是0到20或1到20的整数。X^{101}到X^{108}独立地选自C(包括CH)或N。Z^{101}和Z^{102}独立地选自NR^{101}、O或S。

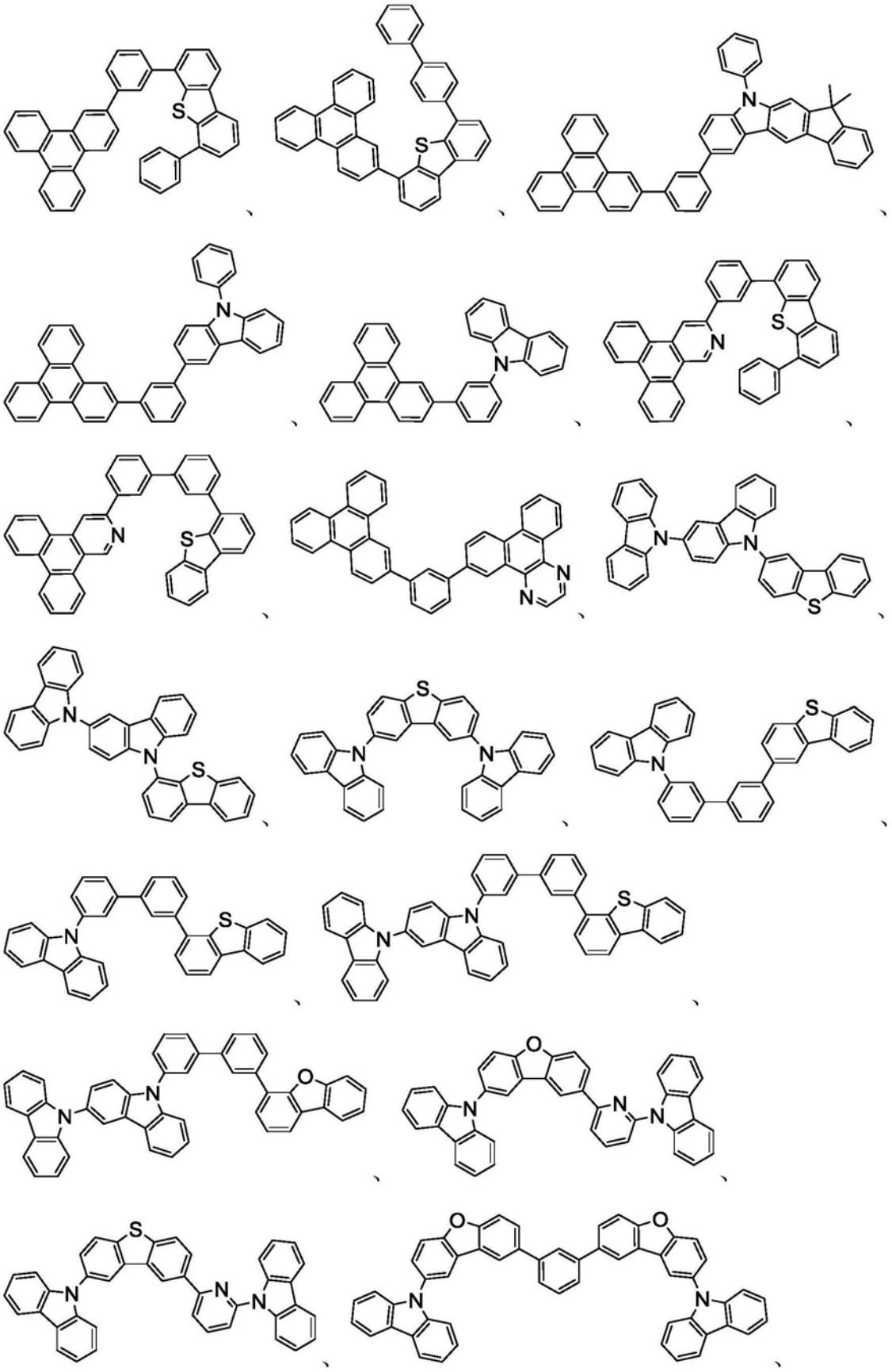
[0568] 可以与本文中所公开的材料组合用于OLED中的主体材料的非限制性实例与公开

那些材料的参考文献一起例示如下:EP2034538、EP2034538A、EP2757608、JP2007254297、KR20100079458、KR20120088644、KR20120129733、KR20130115564、TW201329200、US20030175553、US20050238919、US20060280965、US20090017330、US20090030202、US20090167162、US20090302743、US20090309488、US20100012931、US20100084966、US20100187984、US2010187984、US2012075273、US2012126221、US2013009543、US2013105787、US2013175519、US2014001446、US20140183503、US20140225088、US2014034914、US7154114、WO2001039234、WO2004093207、WO2005014551、WO2005089025、WO2006072002、WO2006114966、WO2007063754、WO2008056746、WO2009003898、WO2009021126、WO2009063833、WO2009066778、WO2009066779、WO2009086028、WO2010056066、WO2010107244、WO2011081423、WO2011081431、WO2011086863、WO2012128298、WO2012133644、WO2012133649、WO2013024872、WO2013035275、WO2013081315、WO2013191404、WO2014142472,US20170263869、US20160163995、US9466803,

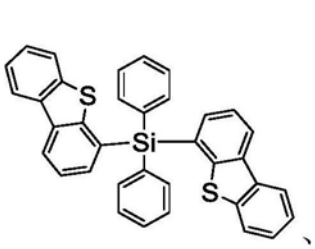
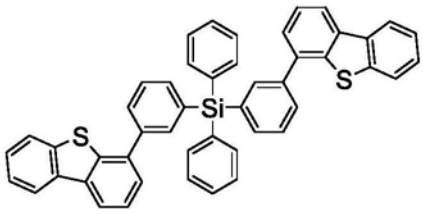
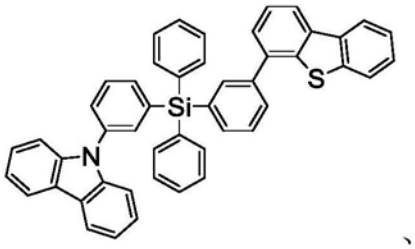
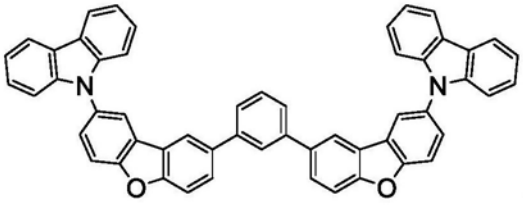
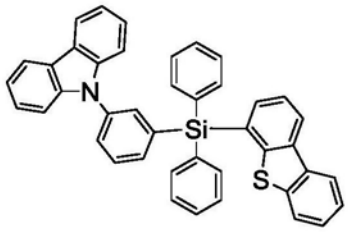
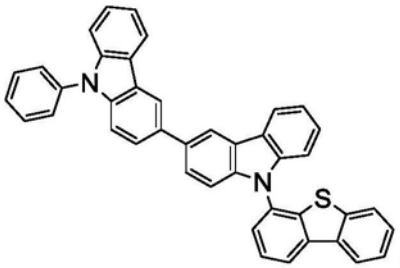
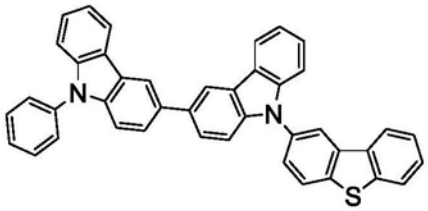
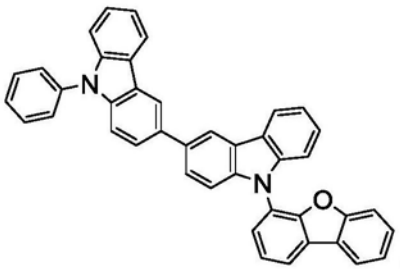
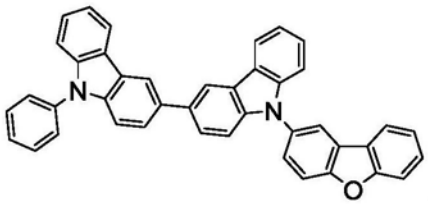
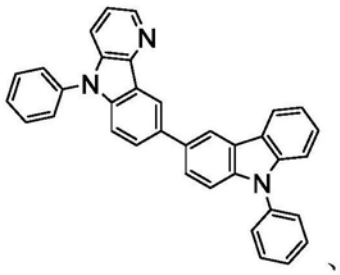
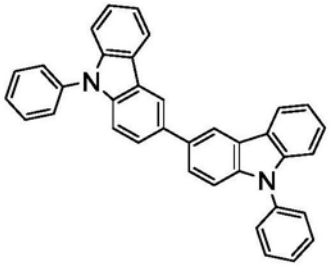
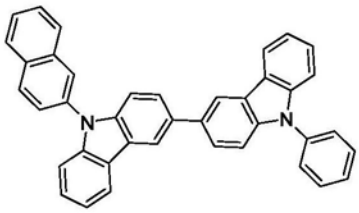
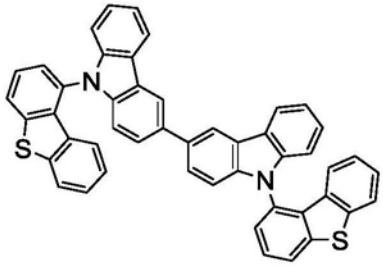
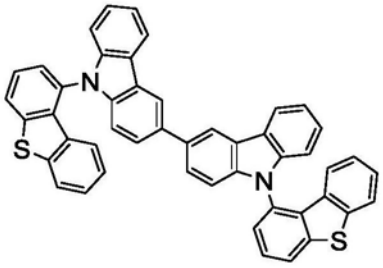
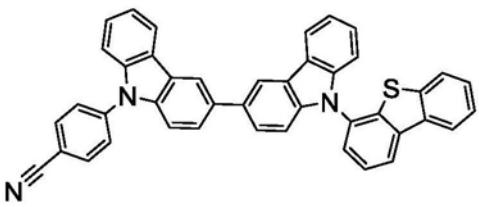
[0569]



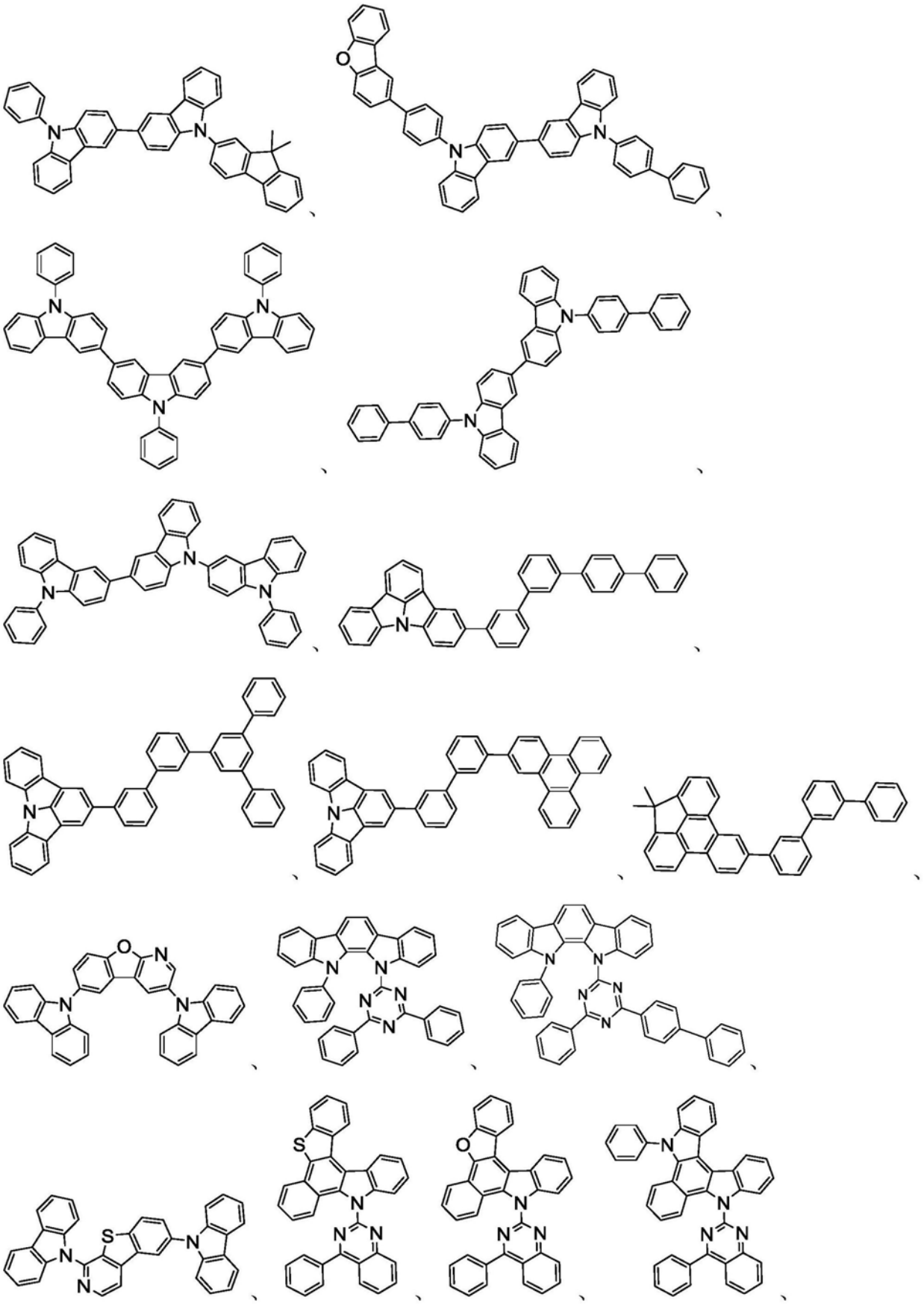
[0570]



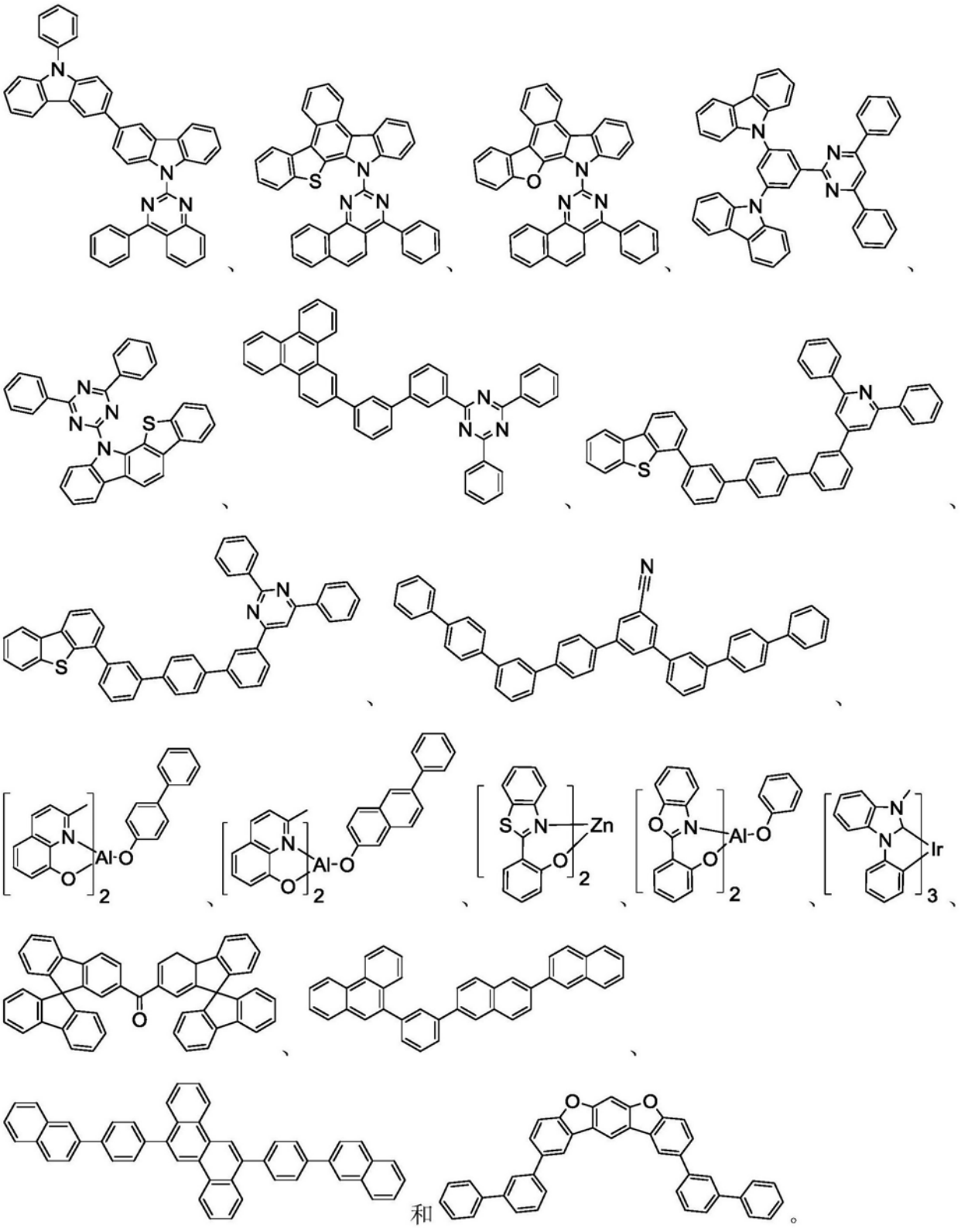
[0571]

[0572]



[0573]



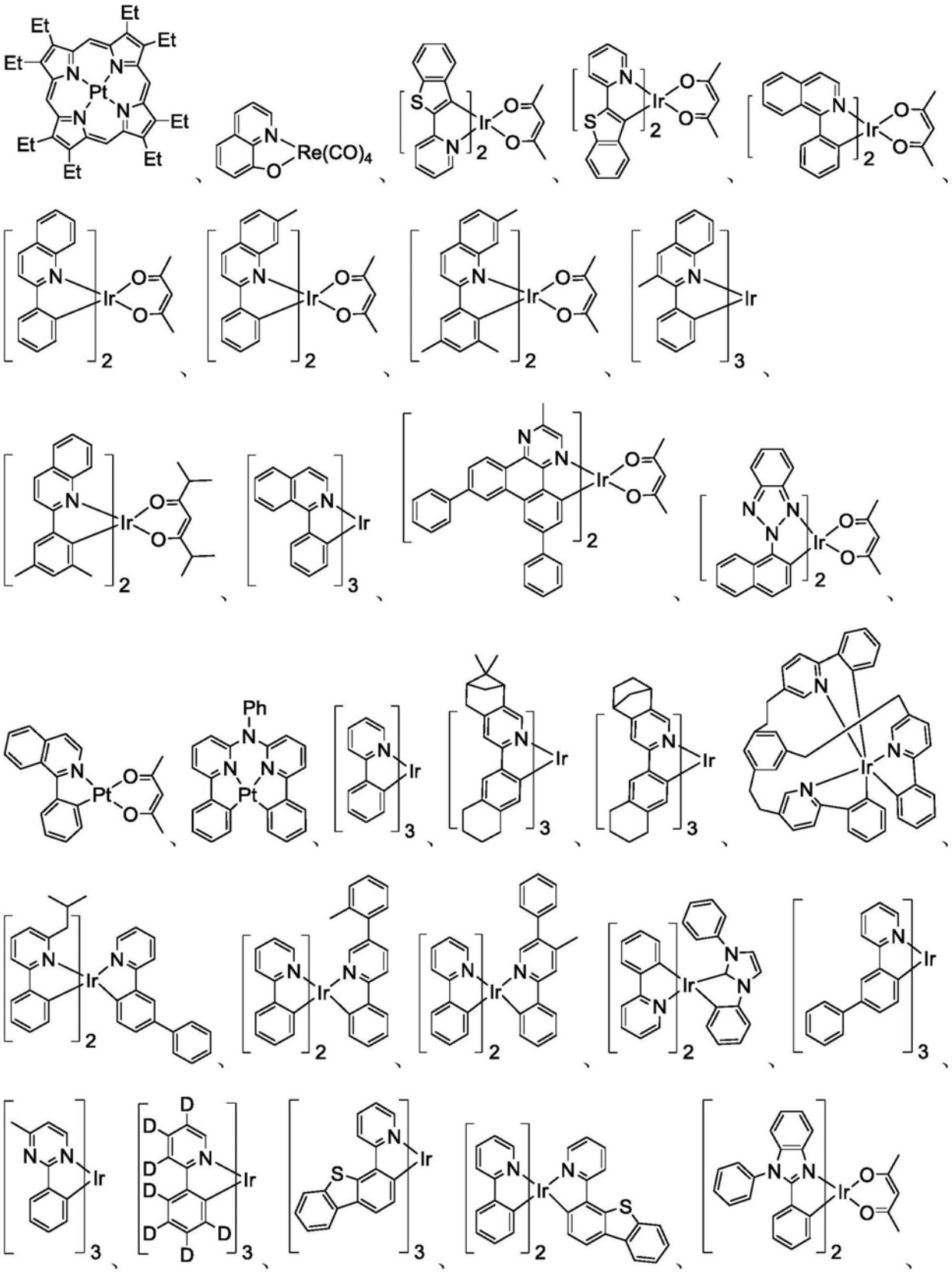
[0574] 其它发射体：

[0575] 一或多种其它发射体掺杂剂可以与本发明化合物结合使用。其它发射体掺杂剂的实例不受特别限制，并且可以使用任何化合物，只要化合物通常用作发射体材料即可。合适发射体材料的实例包括(但不限于)可以经由磷光、荧光、热激活延迟荧光(即TADF，也称为E

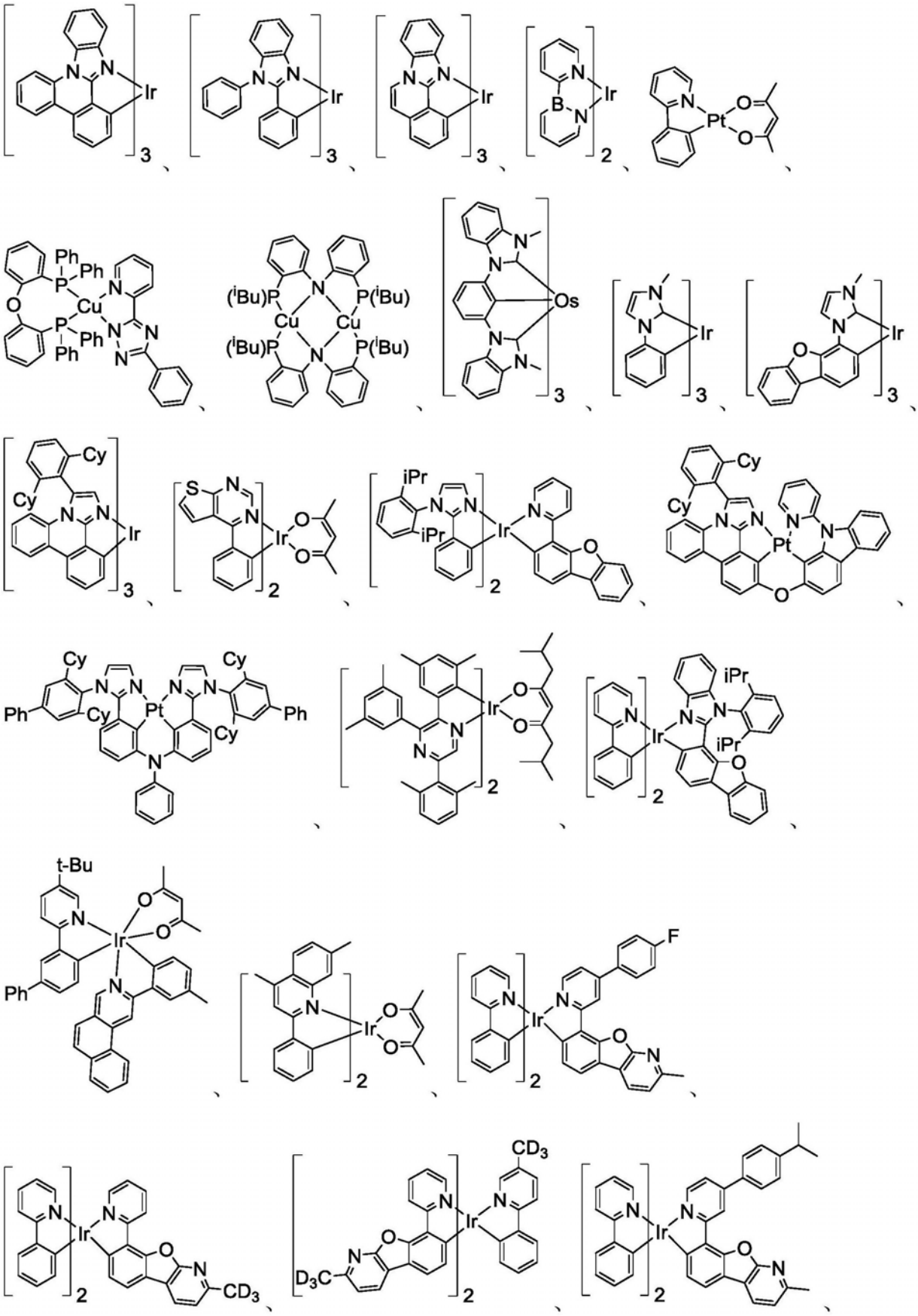
型延迟荧光)、三重态-三重态消灭或这些工艺的组合产生发射的化合物。

[0576] 可以与本文中所公开的材料组合用于OLED中的发射体材料的非限制性实例与公开那些材料的参考文献一起例示如下:CN103694277、CN1696137、EB01238981、EP01239526、EP01961743、EP1239526、EP1244155、EP1642951、EP1647554、EP1841834、EP1841834B、EP2062907、EP2730583、JP2012074444、JP2013110263、JP4478555、KR1020090133652、KR20120032054、KR20130043460、TW201332980、US06699599、US06916554、US20010019782、US20020034656、US20030068526、US20030072964、US20030138657、US20050123788、US20050244673、US2005123791、US2005260449、US20060008670、US20060065890、US20060127696、US20060134459、US20060134462、US20060202194、US20060251923、US20070034863、US20070087321、US20070103060、US20070111026、US20070190359、US20070231600、US2007034863、US2007104979、US2007104980、US2007138437、US2007224450、US2007278936、US20080020237、US20080233410、US20080261076、US20080297033、US200805851、US2008161567、US2008210930、US20090039776、US20090108737、US20090115322、US20090179555、US2009085476、US2009104472、US20100090591、US20100148663、US20100244004、US20100295032、US2010102716、US2010105902、US2010244004、US2010270916、US20110057559、US20110108822、US20110204333、US2011215710、US2011227049、US2011285275、US2012292601、US20130146848、US2013033172、US2013165653、US2013181190、US2013334521、US20140246656、US2014103305、US6303238、US6413656、US6653654、US6670645、US6687266、US6835469、US6921915、US7279704、US7332232、US7378162、US7534505、US7675228、US7728137、US7740957、US7759489、US7951947、US8067099、US8592586、US8871361、WO06081973、WO06121811、WO07018067、WO07108362、WO07115970、WO07115981、WO08035571、WO2002015645、WO2003040257、WO2005019373、WO2006056418、WO2008054584、WO2008078800、WO2008096609、WO2008101842、WO2009000673、WO2009050281、WO2009100991、WO2010028151、WO2010054731、WO2010086089、WO2010118029、WO2011044988、WO2011051404、WO2011107491、WO2012020327、WO2012163471、WO2013094620、WO2013107487、WO2013174471、WO2014007565、WO2014008982、WO2014023377、WO2014024131、WO2014031977、WO2014038456、WO2014112450。

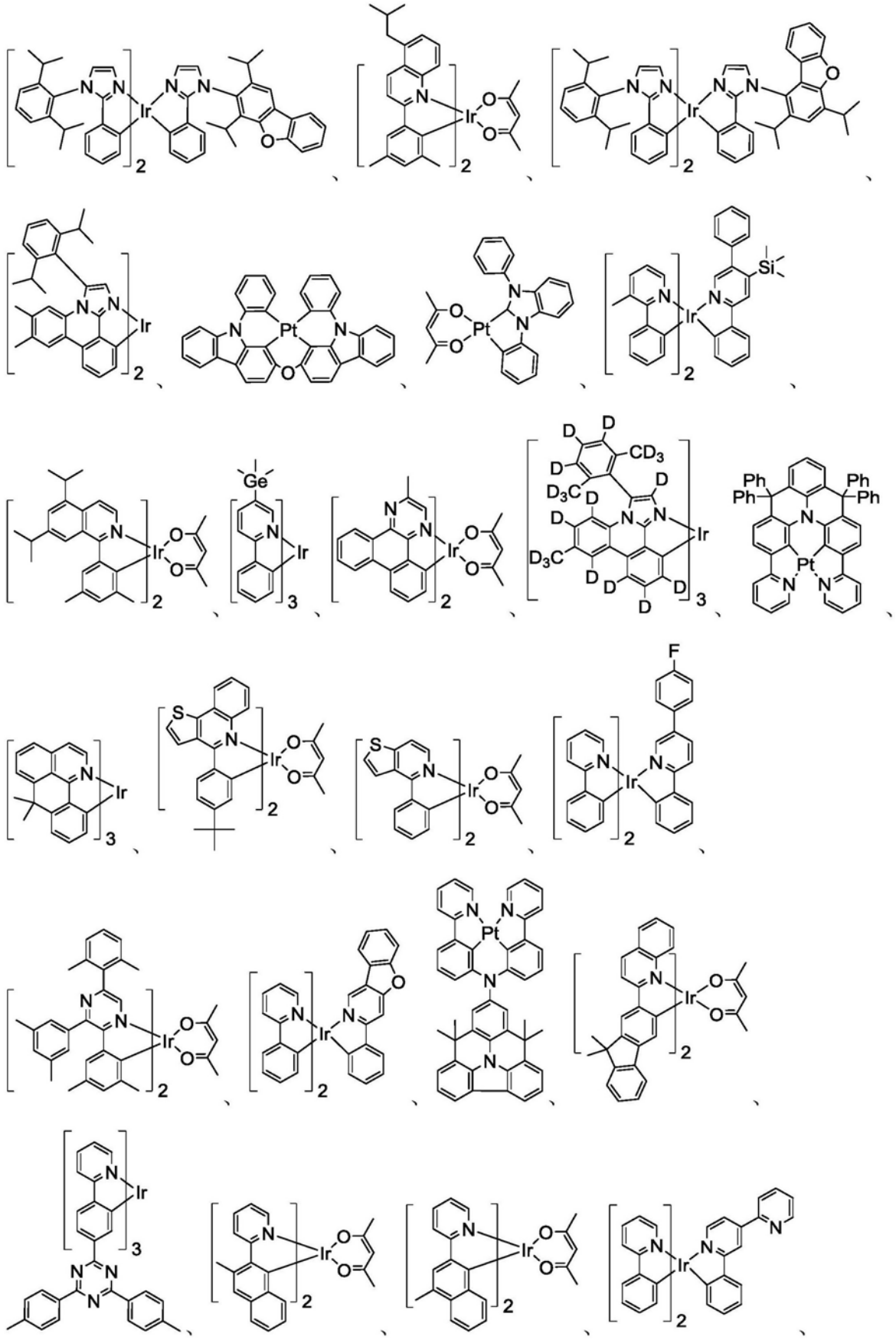
[0577]



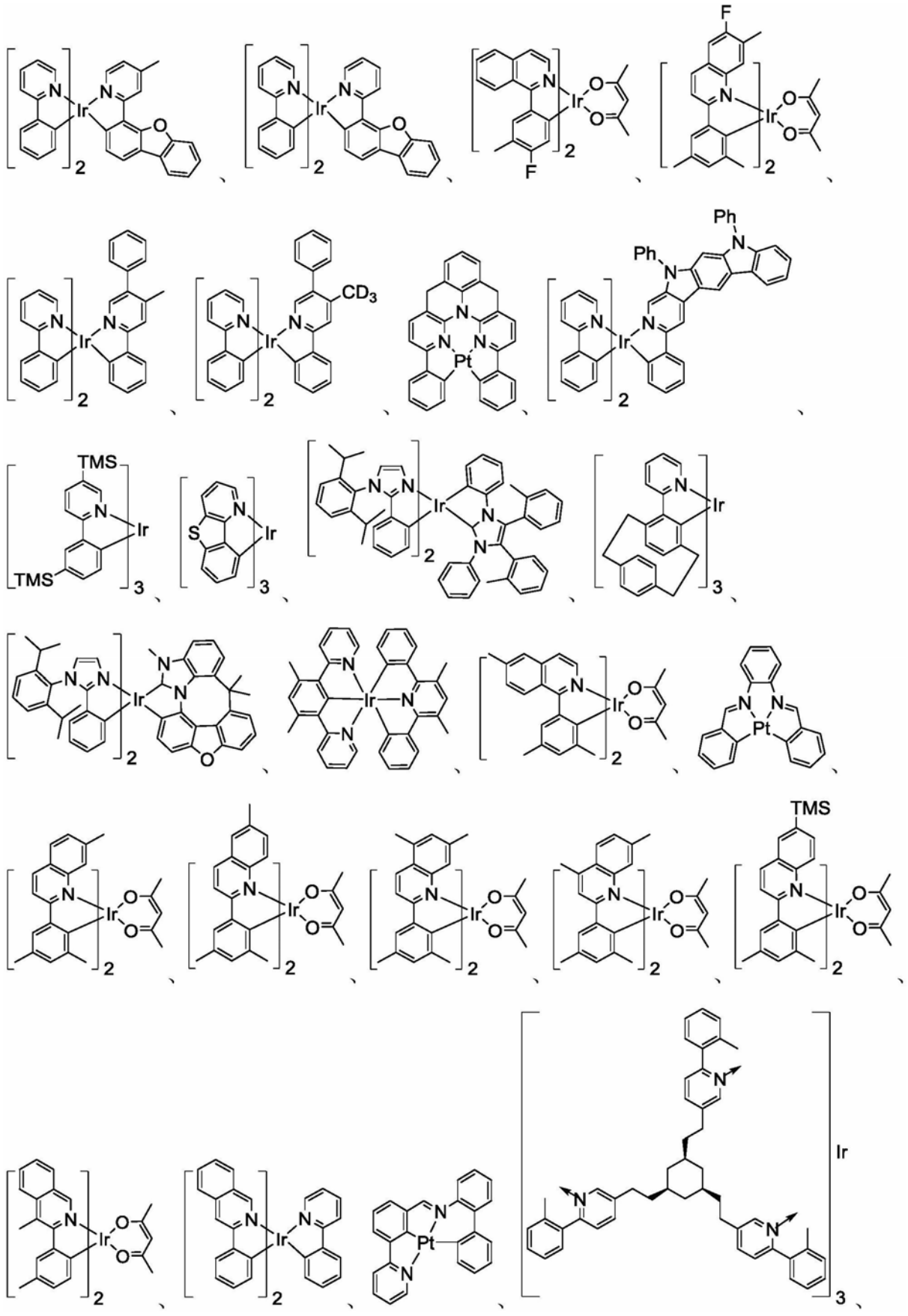
[0578]



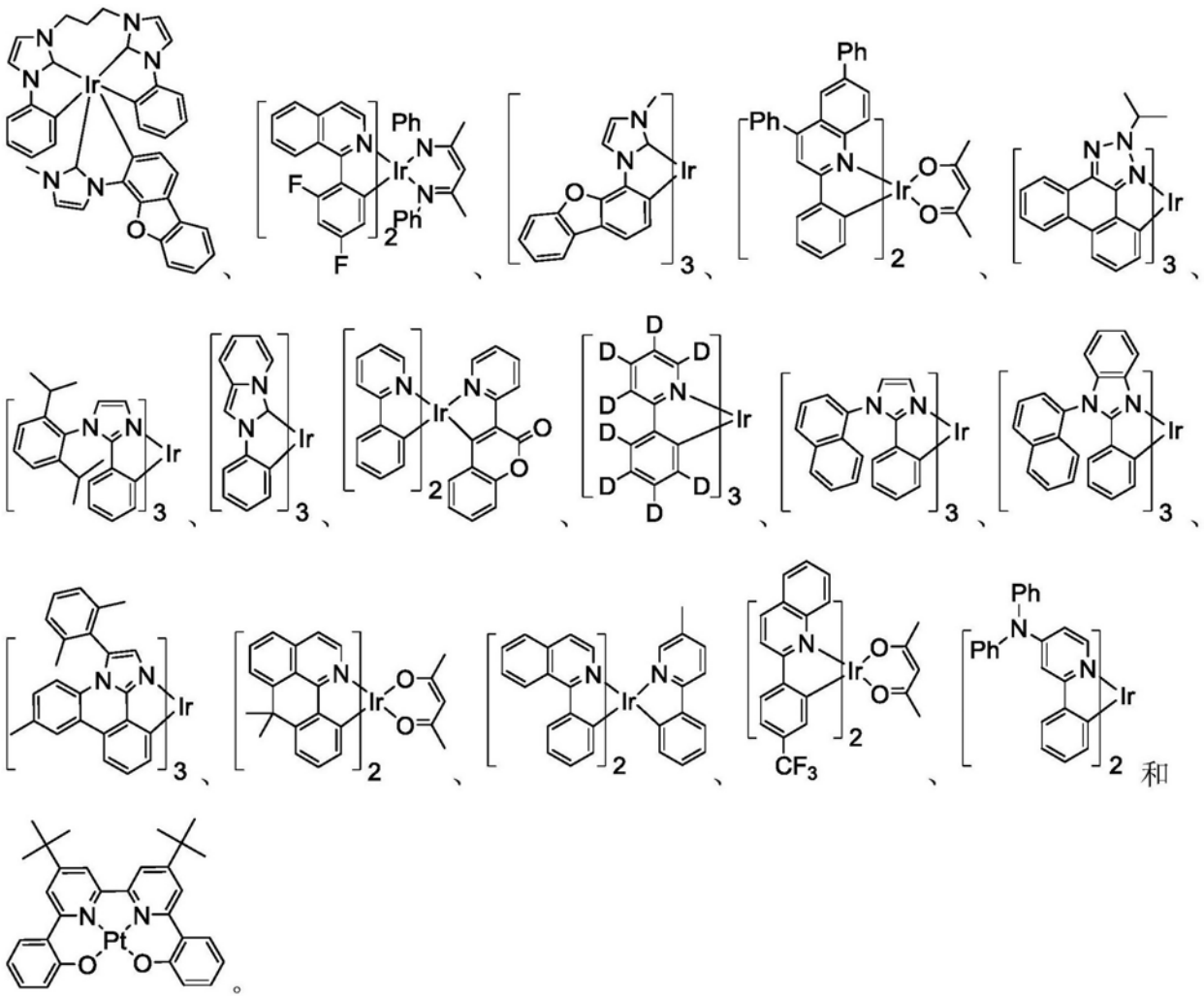
[0579]



[0580]



[0581]



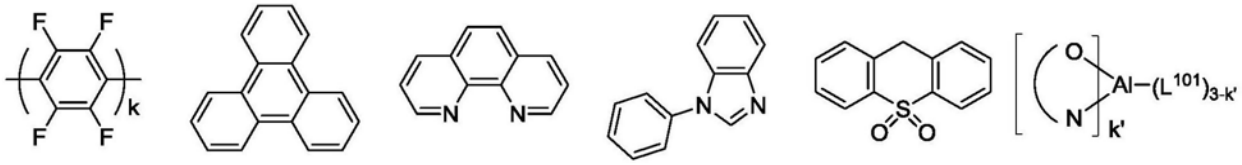
[0582] HBL：

[0583] 空穴阻挡层(HBL)可以用以减少离开发射层的空穴和/或激子的数目。与缺乏阻挡层的类似装置相比，此类阻挡层在装置中的存在可以产生大体上较高的效率和/或较长的寿命。此外，可以使用阻挡层来将发射限制于OLED的所需区域。在一些实施例中，与最接近HBL界面的发射体相比，HBL材料具有较低HOMO(距真空能级较远)和/或较高三重态能量。在一些实施例中，与最接近HBL界面的主体中的一或多种相比，HBL材料具有较低HOMO(距真空能级较远)和/或较高三重态能量。

[0584] 在一个方面中，HBL中所用的化合物含有与上文所述的主体所用相同的分子或相同的官能团。

[0585] 在另一方面中，HBL中所用的化合物在分子中含有以下基团中的至少一个：

[0586]



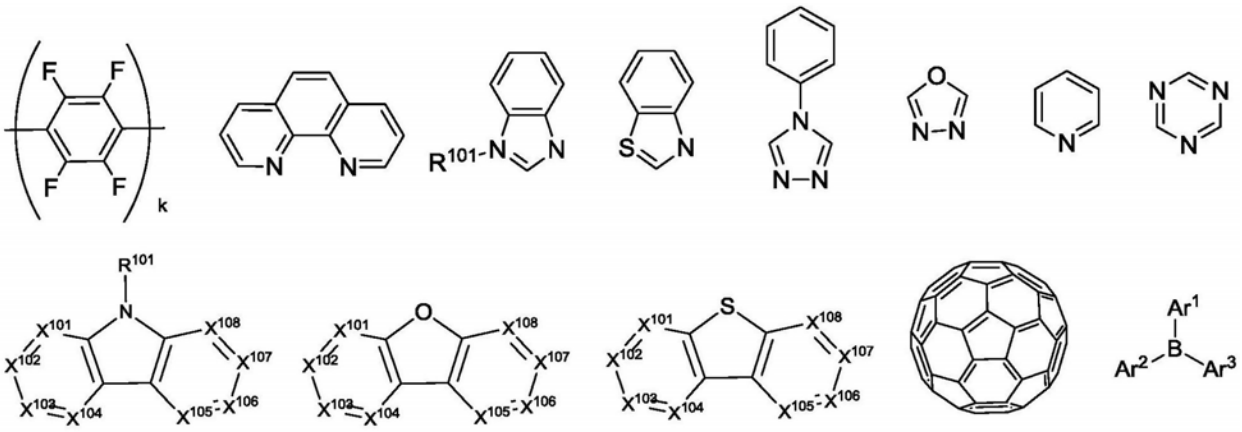
[0587] 其中k是1到20的整数；L^{101}是另一个配体，k'是1到3的整数。

[0588] ETL：

[0589] 电子传输层(ETL)可以包括能够传输电子的材料。电子传输层可以是固有的(未经掺杂的)或经掺杂的。可以使用掺杂来增强导电性。ETL材料的实例不受特别限制,并且可以使用任何金属络合物或有机化合物,只要其通常用以传输电子即可。

[0590] 在一个方面中,ETL中所用的化合物在分子中含有以下基团中的至少一个:

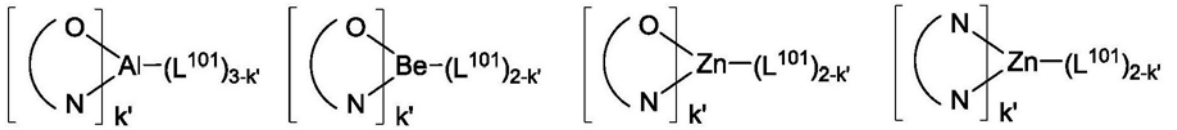
[0591]



[0592] 其中R^{101}选自由以下组成的群组:氢、氘、卤素、烷基、环烷基、杂烷基、杂环烷基、芳烷基、烷氧基、芳氧基、氨基、硅烷基、烯基、环烯基、杂烯基、炔基、芳基、杂芳基、酰基、羧酸、醚、酯、腈、异腈、硫基、亚磺酰基、磺酰基、膦基和其组合,当其为芳基或杂芳基时,其具有与上述Ar类似的定义。Ar^1到Ar^3具有与上文所提及的Ar类似的定义。k是1到20的整数。X^{101}到X^{108}选自C(包括CH)或N。

[0593] 在另一方面中,ETL中所用的金属络合物含有(但不限于)以下通式:

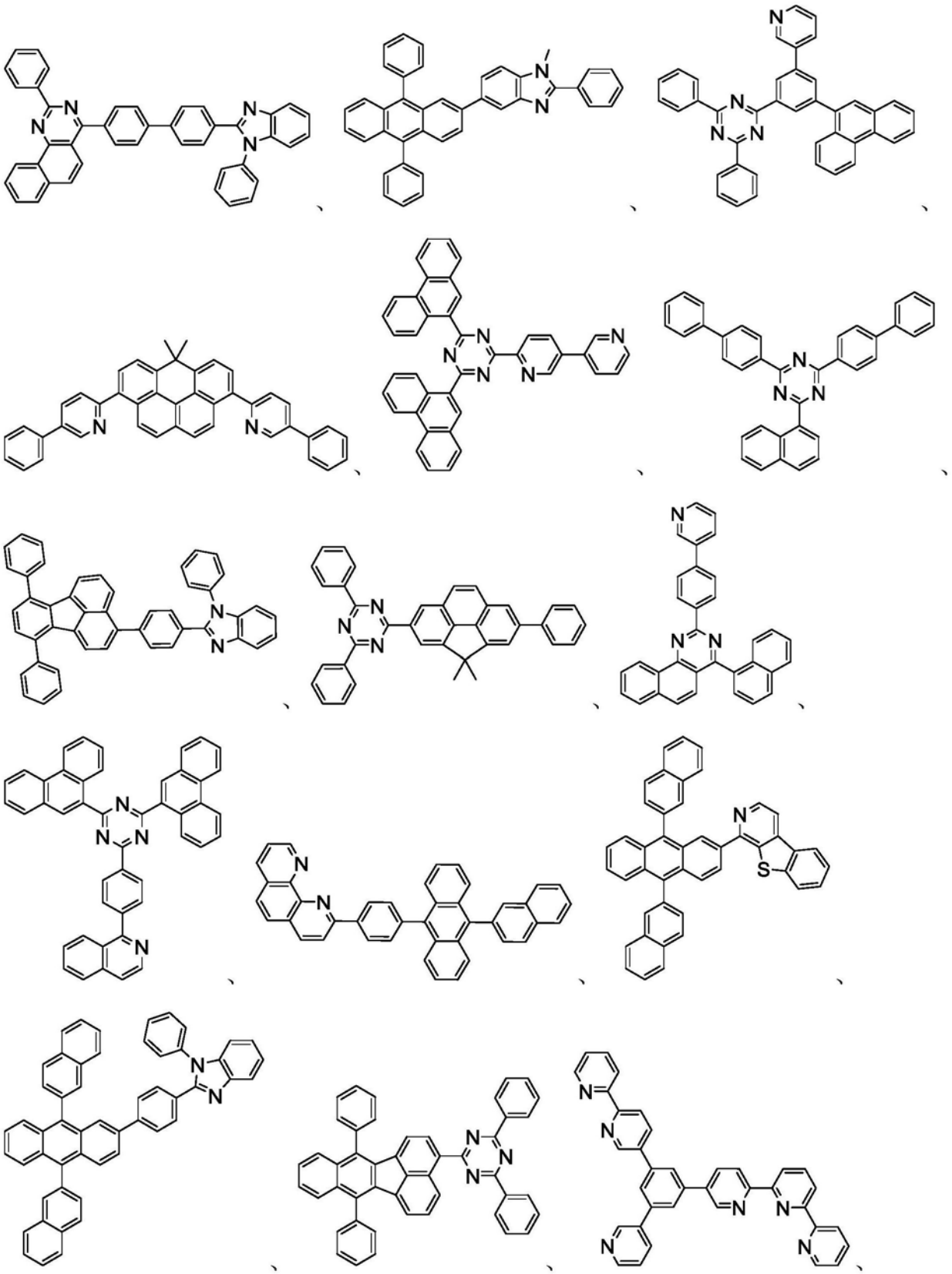
[0594]



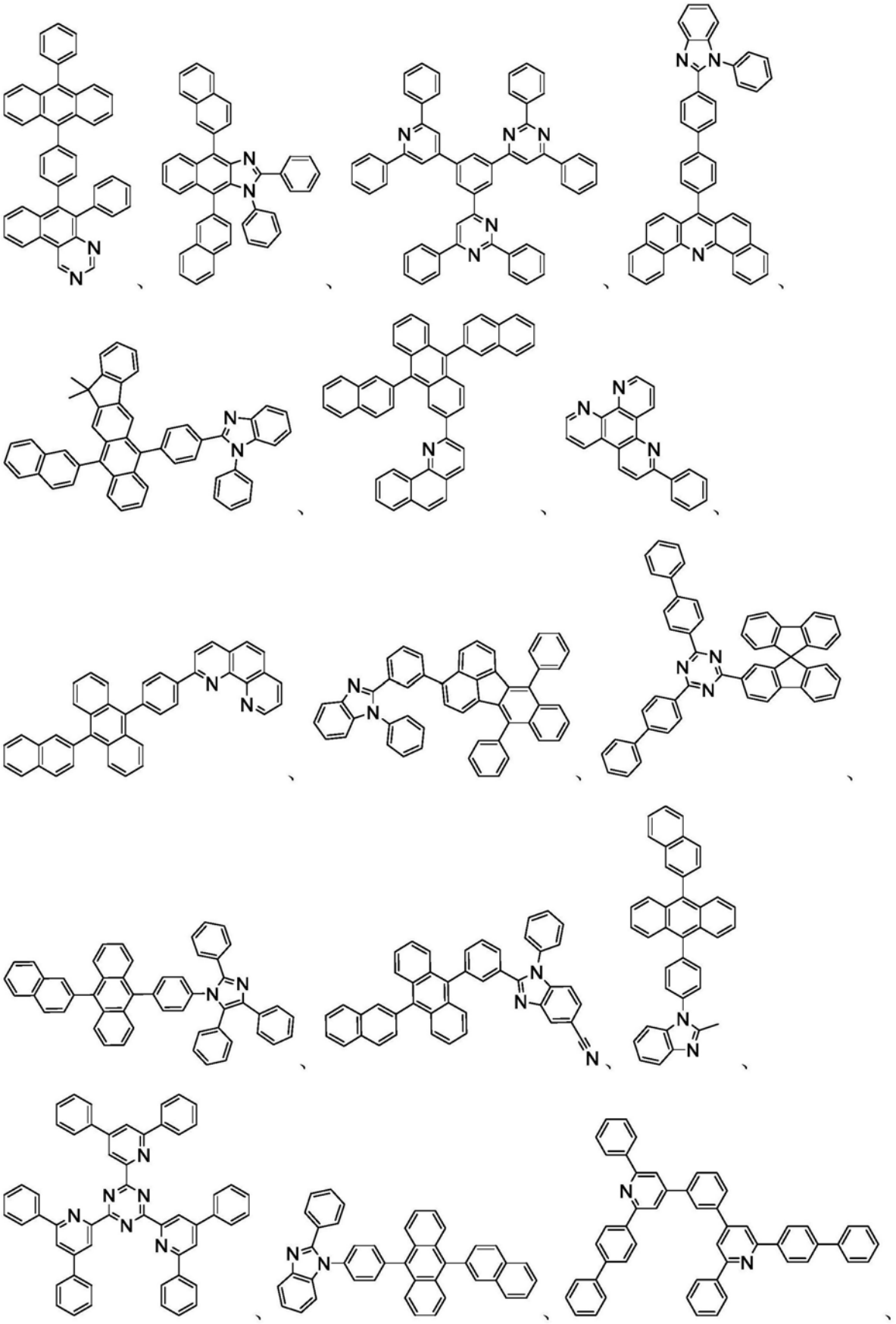
[0595] 其中(O-N)或(N-N)是具有与原子O、N或N、N配位的金属的双齿配体;L^{101}是另一个配体;k'是1到可以与金属连接的最大配体数的整数值。

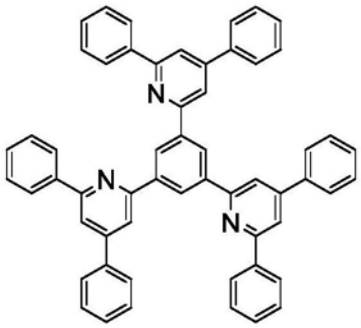
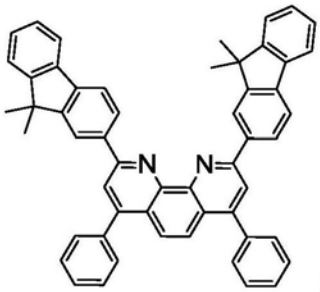
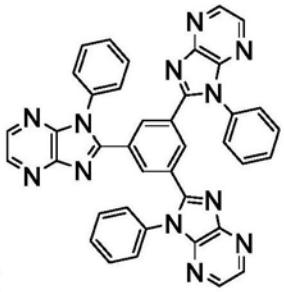
[0596] 可以与本文中所公开的材料组合用于OLED中的ETL材料的非限制性实例与公开那些材料的参考文献一起例示如下:CN103508940、EP01602648、EP01734038、EP01956007、JP2004-022334、JP2005149918、JP2005-268199、KR0117693、KR20130108183、US20040036077、US20070104977、US2007018155、US20090101870、US20090115316、US20090140637、US20090179554、US2009218940、US2010108990、US2011156017、US2011210320、US2012193612、US2012214993、US2014014925、US2014014927、US20140284580、US6656612、US8415031、WO2003060956、WO2007111263、WO2009148269、WO2010067894、WO2010072300、WO2011074770、WO2011105373、WO2013079217、WO2013145667、WO2013180376、WO2014104499、WO2014104535,

[0597]



[0598]



[0599]  、  和  。

[0600] 电荷产生层(CGL)

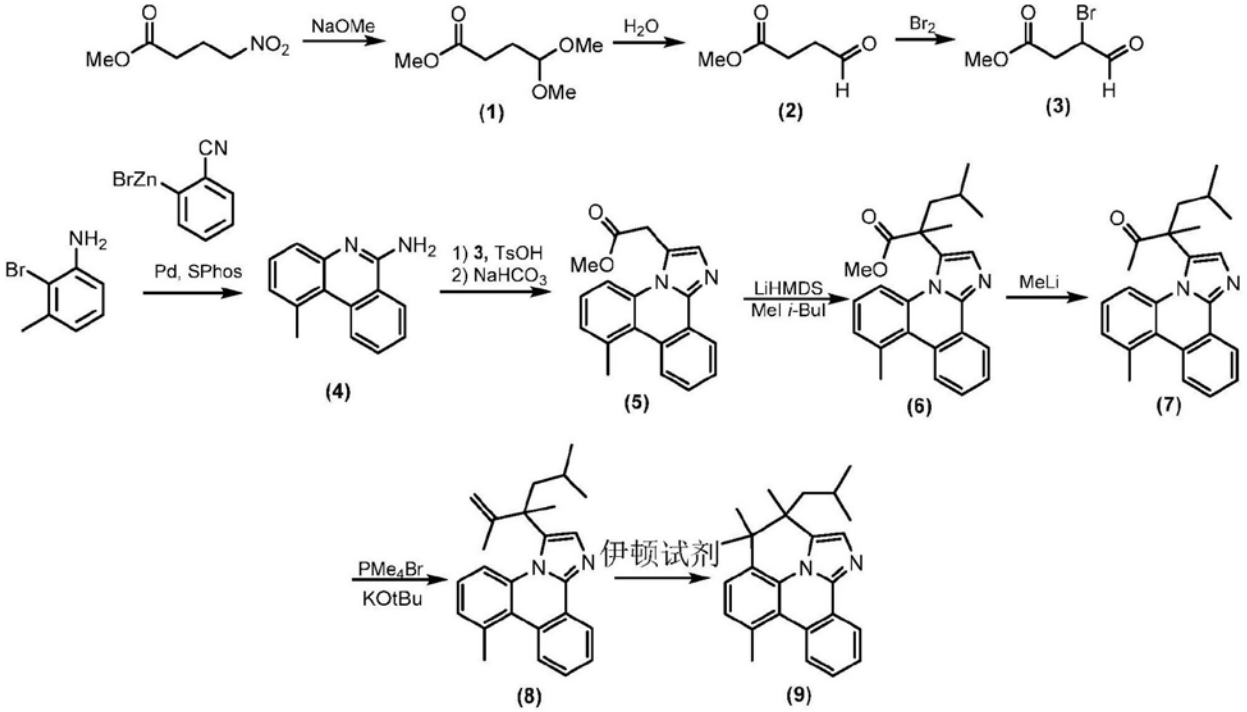
[0601] 在串联或堆叠OLED中,CGL对性能起基本作用,其由分别用于注入电子和空穴的经n掺杂的层和经p掺杂的层组成。电子和空穴由CGL和电极供应。CGL中消耗的电子和空穴由分别从阴极和阳极注入的电子和空穴再填充;随后,双极电流逐渐达到稳定状态。典型CGL材料包括传输层中所用的n和p导电性掺杂剂。

[0602] 在OLED装置的每个层中所用的任何上文所提及的化合物中,氢原子可以部分或完全氘化。因此,任何具体列出的取代基,如(但不限于)甲基、苯基、吡啶基等可以是其非氘化、部分氘化以及和完全氘化形式。类似地,取代基类别(例如(但不限于)烷基、芳基、环烷基、杂芳基等)还可以是其非氘化、部分氘化和完全氘化形式。

[0603] 实验

[0604] 代表性配体合成:

[0605] 在以下合成步骤描述中,中间物化合物被标记且称为(n)。

[0606] 

[0607] 4,4-二甲氧基丁酸甲酯(1):将含4-硝基丁酸甲酯(70g,476mmol,1当量)的甲醇(400mL)缓慢添加到甲醇钠(113mL,524mmol,1.1当量)于甲醇(1L)中的25重量%甲醇溶液中。在室温下搅拌反应混合物15分钟。将反应混合物逐滴转移到硫酸(140mL,2620mmol,5.5当量)于甲醇(1L)中的溶液中。在室温下搅拌反应混合物45分钟,得到混浊溶液。反应混合

物用10％氢氧化钠水溶液调节到pH7-8。反应混合物用二氯甲烷(2L)稀释，且分离各层。水层用二氯甲烷(3×2L)萃取。合并的有机层经硫酸钠干燥，且在减压下浓缩，得到呈无色油状物的(1)(49g，64％产率)。

[0608] 4-氧代丁酸甲酯(2)：将(1)(49g，300mmol)于水(150mL)中的溶液回流两小时。将反应物冷却到室温，且用二氯甲烷(300mL)稀释。分离各层，且水层用二氯甲烷(3×300mL)萃取。合并的有机层经硫酸钠干燥，且在减压下浓缩，得到呈无色油状物的(2)(24.2g，50％产率)。

[0609] 3-溴-4-氧代丁酸甲酯(3)：在0℃下将溴(10.2mL，199mmol，1当量)逐滴添加到(2)(23.1g，199mmol，1当量)于二氯甲烷(1L)中的溶液中。调节添加速率以维持温度低于5℃。在室温下搅拌30分钟后，在减压下浓缩反应混合物，得到呈浅棕色油状物的(3)(40g，定量产率，95％纯度)。

[0610] 1-甲基菲啶-6-胺(4)：2-溴-3-甲基苯胺(38.8g，208mmol，1当量)、(氯(2-二环己基膦-2',6'-二甲氧基-1,1'-联苯)[2-(2'-氨基-1,1'-联苯)]钯(II)(2.99g，4.16mmol，0.02当量)、2-二环己基-膦基-2',6'-二甲氧基联苯(1.71g，4.16mmol，0.02当量)于THF(832mL)中的混合物用氮气鼓泡15分钟。将0.5M 2-氰基苯基溴化锌的THF溶液(500mL，250mmol，1.2当量)添加到混合物中，且将反应混合物回流过夜。在冷却到室温之后，反应混合物用饱和盐水(10mL)稀释且在减压下浓缩。将固体溶解于含10％甲醇的二氯甲烷(500mL)和24重量％氢氧化钠水溶液(500mL)中。分离各层，且水层用二氯甲烷(3×500mL)萃取。合并的有机层经硫酸钠干燥，且在减压下浓缩。棕色固体依序用含25％MTBE的庚烷(1.5L)和二氯甲烷(5×25mL)湿磨，得到呈淡黄色固体状的(4)(10.7g，25％产率)。

[0611] 2-(8-甲基咪唑并[1,2-f]菲啶-3-基)乙酸甲酯(5)：将(4)(16.5g，80mmol，1当量)、(3)(40g，200mmol，1.5当量)和单水合对甲苯磺酸(755mg，4mmol，0.05当量)于2-丙醇(635mL)中的混合物在室温下搅拌30分钟。添加碳酸钠(13.3g，160mmol，2当量)和水(32mL)，且将反应混合物回流过夜。将反应混合物冷却到室温，且用饱和碳酸氢钠水溶液(300mL)和二氯甲烷(500mL)稀释。分离各层，且水层用二氯甲烷(3×500mL)萃取。合并的有机层经硫酸钠干燥，过滤并且在减压下浓缩。粗产物用MTBE(2×100mL)湿磨，得到呈浅棕色固体状的(5)(18g，75％产率)。

[0612] 2,4-二甲基-2-(8-甲基咪唑并[1,2-f]菲啶-3-基)戊酸甲酯(6)：经5分钟将THF中的1M LHMDS(10.8mL，10.8mmol，1.1当量)逐滴添加到(5)(3.0g，9.86mmol，1当量)于无水THF(270mL)中的溶液中。添加碘甲烷(0.62mL，9.86mmol，1当量)，且将反应混合物搅拌1小时。在室温下依序添加额外的THF中的1M LHMDS(10.84mL，10.84mmol，1.1当量)和异丁基碘(1.7mL，14.79mmol，1.5当量)，且将反应混合物搅拌16小时。反应混合物用1M HCl(10mL)淬灭。在减压下浓缩粗混合物。残余物用二氯甲烷(200mL)和水(150mL)稀释。分离各层，且有机层经硫酸钠干燥且在减压下浓缩。粗产物预吸收在硅胶(10g)上，且通过柱色谱纯化，得到呈黄色固体状的(6)(1.95g，53％产率)。

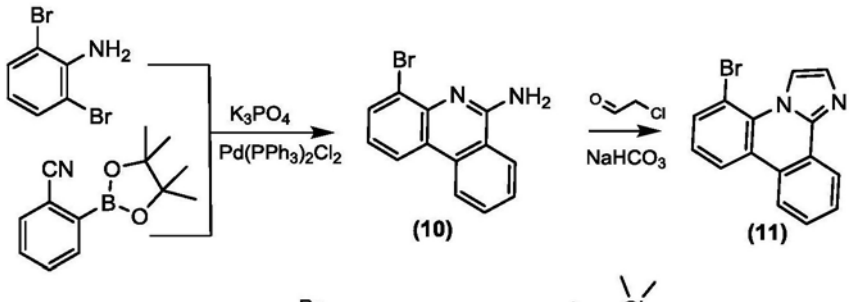
[0613] 3,5-二甲基-3-(8-甲基咪唑并[1,2-f]菲啶-3-基)己-2-酮(7)：在-20℃下将乙醚中的1.6M甲基锂(12.8mL，20.51mmol，4当量)逐滴添加到(6)(1.92g，5.13mmol，1当量)于THF中的溶液中。使反应混合物升温到室温且搅拌16小时。反应物用冰淬灭，且在减压下浓缩粗混合物。残余物用二氯甲烷(200mL)和水(100mL)稀释。分离各层，且有机层经硫酸钠干

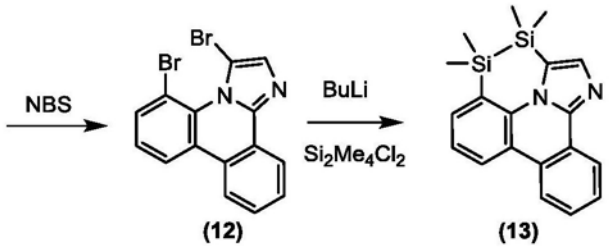
燥且在减压下浓缩。粗产物通过柱色谱纯化，得到呈白色固体状的(7)(1.35g，74％产率)。

[0614] 8-甲基-3-(2,3,5-三甲基己-1-烯-3-基)咪唑并[1,2-f]菲啶(8)：在55-60℃下将溴化四甲基鏻(1.76g，10.29mmol，3当量)和叔丁醇钾(1.16g，10.29mmol，3当量)添加到7(1.23g，3.43mmol，1当量)于THF(30mL)中的溶液中。将反应混合物回流过夜。在冷却到室温之后，在减压下浓缩反应混合物。粗残余物用二氯甲烷(100mL)和水(80mL)稀释。分离各层，且有机层经硫酸钠干燥且在减压下浓缩，且通过柱色谱纯化，得到呈黄色固体状的(8)(0.70g，57％产率)。

[0615] 3-异丁基-3,4,4,7-四甲基-3,4-二氢二苯并[b,ij]咪唑并[2,1,5-de]喹嗪(9)：将(8)(0.70g，1.96mmol，1当量)于伊顿试剂(Eaton's reagent)(5mL)中的溶液在室温下搅拌4小时。反应混合物用冰块淬灭，用水(100mL)稀释，且用二氯甲烷(5×30mL)萃取。合并的有机层依序用1M氢氧化钠(50mL)、饱和碳酸氢钠水溶液(50mL)和饱和盐水(50mL)洗涤。有机层经硫酸钠干燥，并且在减压下浓缩。粗产物预吸收在二氧化硅(3g)上，且通过柱色谱纯化，得到呈白色固体状的(9)(0.63g，90％产率)。

[0616]





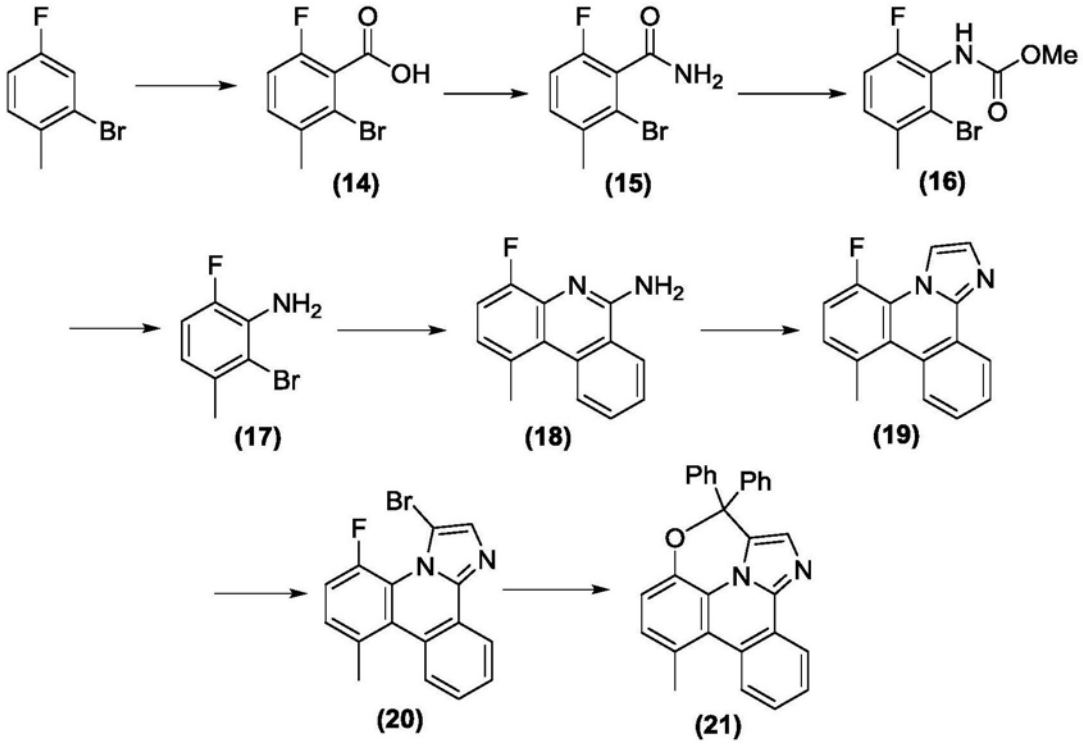
[0617] 4-溴菲啶-6-胺(10)：将2-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊-2-基)苯甲腈(17.4g，75.6mmol，1.0当量)和2,6-二溴-苯胺(19g，75.6mmol，1.0当量)溶解于甲苯(200mL)中。将水合磷酸三钾(50g，227mol，3.0当量)溶解于水(40mL)中，且添加到反应溶液中。反应混合物用氮气鼓泡10分钟。添加反式-二氯双(三苯基膦)钯(II)(2.6g，3.8mmol，0.05当量)，且将反应混合物在回流下加热4小时。在冷却到室温之后，分离各层，且有机相用热水(4×75mL)洗涤。水相用乙酸乙酯(50mL)萃取。合并有机相；添加乙酸乙酯(100mL)以溶解一些残留的固体。有机溶液用盐水(100mL)洗涤，经由硅藻土过滤且浓缩至棕色半固体(27g)。材料用二氯甲烷(约50mL)湿磨，得到约5.6g淡黄色固体。浓缩滤液，且残余物在硅胶上色谱分离，得到呈灰白色固体状的(10)(7.4g，36％产率)。

[0618] 5-溴咪唑并[1,2-f]菲啶(11)：向(10)(7.35g，27mmol，1.0当量)于2-丙醇(190mL)中的溶液中添加含50％氯乙醛的水(8.5g，54mmol，2.0当量)。添加碳酸氢钠(5.7g，68mmol，2.5当量)，且将反应物在回流下加热2小时。在冰浴中冷却之后，反应混合物用二氯甲烷(100mL)和饱和碳酸氢钠溶液(200mL)稀释。分离各层，且水相用二氯甲烷(2×100mL)萃取。合并有机相，经硫酸钠干燥且浓缩。粗产物在硅胶(100g)上色谱分离，得到呈灰白色固体状的(11)(5.5g，70％产率)。

[0619] 3,5-二溴咪唑并[1,2-f]菲啶(12)：在50℃下将(11)(5.5g,18.5mmol,1.0当量)溶解于N,N-二甲基甲酰胺(275mL)中。一次性添加N-溴代琥珀酰亚胺(3.3g,18.5mmol,1.0当量)，且在室温下搅拌溶液18小时。添加10％二氯甲烷于甲基叔丁基醚(200mL)和水(600mL)中的混合物，分离各层，且水相用含10％二氯甲烷的甲基叔丁基醚(3×150mL)萃取。合并有机相，经硫酸钠干燥且浓缩。粗产物在硅胶上色谱分离，得到呈灰白色固体状的(12)(5.4g，73％产率)。

[0620] 3,3,4,4-四甲基-3,4-二氢-1,2a1-二氮杂-3,4-二硅杂苯并[fg]醋蒽烯(13)：将(12)(2.05g,5.45mmol)溶解于THF(200ml)中且在^{i}PrOH/CO_2浴中冷却。缓慢添加丁基锂的己烷溶液(7.15mL,11.45mmol)，变成深棕色。在冷搅拌15分钟之后，将1,2-二氯-1,1,2,2-四甲基二硅烷(1.111ml,6.00mmol)添加到浅米色悬浮液中，且使混合物升温到室温。用水淬灭，继而EtOAc萃取，干燥有机物，且进行柱色谱，得到呈淡黄色玻璃样残余物的(13)，1.11g(61％)。

[0621]



[0622] 2-溴-6-氟-3-甲基苯甲酸(14)：将300mL无水THF装入装配有两个隔垫和一个氮气入口的烘干的1000mL三颈RBF。二异丙胺(20.0ml,142mmol)于THF(300mL)中的溶液在冰/水浴中。缓慢添加正丁基锂(45ml,113mmol)，且在0℃下再搅拌15分钟，随后在^{i}PrOH/CO_2浴中冷却。经10分钟缓慢添加2-溴-4-氟-1-甲基苯(12mL,97mmol)，且冷搅拌1小时，随后将二氧化碳鼓泡通过混合物。冷的同时鼓泡20分钟后，使反应物升温到室温，同时仍然鼓泡，之后添加100mL水。有机层用3×100mL 0.1M NaOH水溶液萃取。合并的水层用EtOAc洗涤且用6M HCl酸化到pH 1。用EtOAc萃取，干燥且在减压下缩合，获得19.24g(85％)的(14)。

[0623] 2-溴-6-氟-3-甲基苯甲酰胺(15)：经1小时向(14)(17.06g,73.2mmol)和两滴DMF于250mL DCM中的搅拌混合物中缓慢添加乙二酰氯(7.40ml,87mmol)于50mL DCM中的溶液。1.5小时后停止释放气体，且将溶液再搅拌30分钟，随后在冰/水浴中冷却。接着，经约10分钟缓慢添加氢氧化铵(30％水溶液,40ml,342mmol)，且再搅拌30分钟，形成白色沉淀物。添

加水(100mL)和DCM(100mL)，且分离各层。进一步用DCM萃取水层，继而干燥且在减压下冷凝，得到15.86g(93％)的(15)。

[0624] (2-溴-6-氟-3-甲基苯基)氨基甲酸甲酯(16)：将钠金属(6.00g，261mmol)以约1g份逐份添加到400mL MeOH中，同时在氮气下在冰浴中冷却且搅拌，直到看不到进一步气体释放。将溶液在^{i}PrOH/CO_2浴中冷却，且经约4分钟经由注射器逐滴添加纯的二溴(4.0ml，78mmol)。再搅拌5分钟后，添加(15)(15.9g，68.5mmol)，且冷搅拌淡黄色溶液1小时，接着在回流下再加热2小时。在减压下移除挥发物，且将残余物分配在DCM与水之间。利用DCM进一步萃取水层，且将合并的有机层干燥，继而在减压下冷凝，得到呈白色固体状的16.2g(90％)的(16)。

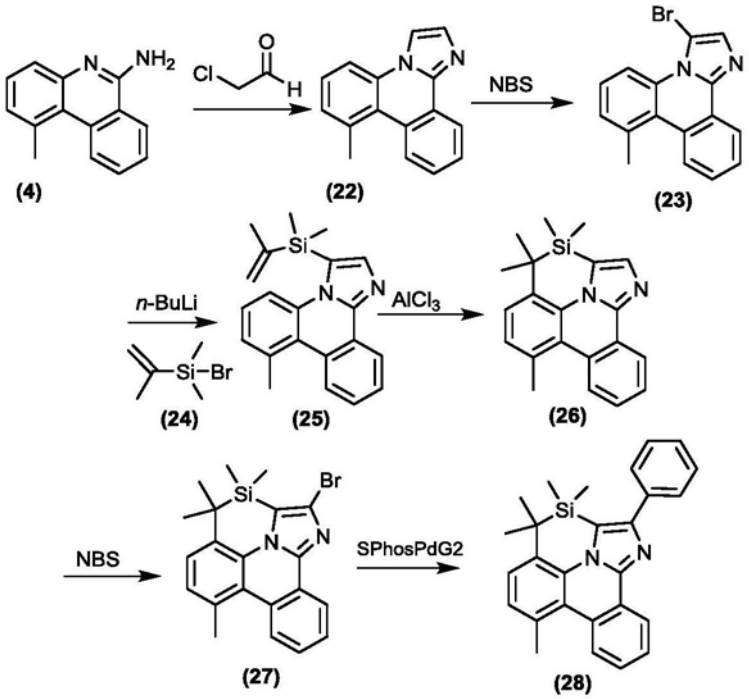
[0625] 2-溴-6-氟-3-甲基苯胺(17)：将(16)(16.20g，61.8mmol)装入500mL RBF中，继而装入试剂级乙醇(120mL)。接着添加60mL 40％(w/v)氢氧化钾溶液(60ml，428mmol)，且将反应混合物在回流下加热6小时。在减压下移除乙醇，且所得水性混合物用DCM萃取三次。干燥且在减压下冷凝有机层，得到9.53g(76％)黄色油状物，所述黄色油状物在室温下缓慢固化。

[0626] 4-氟-1-甲基菲啶-6-胺(18)：将2-频哪醇基硼烷基-苯甲腈(0.176g，0.770mmol)、单水合磷酸钾(0.444g，1.926mmol)和(17)(0.131g，0.642mmol)装入舒伦克瓶(Schlenk flask)，继而添加3mL二噁烷和180μL水。反应混合物用N_2鼓泡20分钟，继而添加XphosPd-G3(6.1mg，7.21μmol)，接着放置于100℃油浴中持续16小时。在冷却到室温之后，添加水(5mL)和DCM(5mL)。用DCM进一步萃取，且干燥有机层，继而通过柱色谱纯化，得到101mg(70％)呈淡黄色固体状的(18)。

[0627] 5-氟-8-甲基咪唑并[1,2-f]菲啶(19)：将含(18)(65.0mg，287μmol)、2-氯乙醛(0.080ml的50％水溶液，630μmol)和碳酸氢钠(0.060g，718μmol)的2mL iPrOH加热到80℃后持续14小时。在冷却到室温之后，添加冰冷水。褐色沉淀物通过真空过滤收集，且用水洗涤，得到呈褐色固体状的(19)(61mg，85％)。

[0628] 3-溴-5-氟-8-甲基咪唑并[1,2-f]菲啶(20)：将1-溴吡咯烷-2,5-二酮(1.509g，8.48mmol)添加到(19)(2.122g，8.48mmol)于80mL DMF中的溶液中，且将混合物在80℃下加热18小时。将反应混合物冷却到室温，且添加150mL冰冷水。过滤黄色/褐色固体，且用水洗涤，继而干燥，得到1.86g呈黄色固体状的(20)(67％)。

[0629] 7-甲基-3,3-二苯基-3H-4-氧杂-1,2a1-二氮杂苯并[fg]醋蒽烯(21)：将丁基锂溶液(0.250ml，0.625mmol)逐滴添加到在iPrOH/CO_2浴中冷却的(20)(0.205g，0.623mmol)于10mL THF中的溶液中，且将深棕色溶液冷搅拌20分钟。经由套管添加二苯甲酮(0.136g，0.747mmol)于5mL THF中的预冷却溶液，且将混合物冷搅拌1小时，随后使其升温到室温。有机层用饱和NH_4Cl水溶液淬灭，且用DCM萃取，继而干燥，且冷凝残余物通过柱色谱纯化，得到220mg呈白色固体状的(21)(85％)。

[0630] 

[0631] 8-甲基咪唑并[1,2-f]菲啶(22):在50℃下向(4)(42g,202mmol)和碳酸氢钠(67.8g,807mmol,4当量)于2-丙醇(2L)中的悬浮液中一次性添加50%氯乙醛水溶液(92mL,726mmol,3.6当量)。将反应混合物回流17小时,冷却到室温,且通过硅藻土短柱过滤。滤过物用二氯甲烷(2.5L)稀释且用水(4×1.5L)洗涤。有机层经硫酸钠(70g)干燥,且在减压下浓缩。将残余物溶解于THF(500mL)中,且通过二氧化硅(100g)短柱过滤,用THF(500mL)溶离。在减压下浓缩滤液,且残余物用乙醚和己烷的2比1混合物(450mL)湿磨,得到呈浅棕色固体状的22(46.0g,98%产率)。

[0632] 3-溴-8-甲基咪唑并[1,2-f]菲啶(23):将N-溴代琥珀酰亚胺(33.5g,188mmol,0.95当量)一次性添加到(22)(46.0g,198mmol)于二氯甲烷(0.8L)中的溶液中。在室温下搅拌17小时后,反应混合物用饱和硫代硫酸钠(40mL)淬灭。将所得混合物搅拌15分钟,用二氯甲烷(2L)稀释,且用1M氢氧化钠(1L)和水(3×1.3L)洗涤。有机层经硫酸钠干燥,并且在减压下浓缩。残余物通过柱色谱纯化,得到呈褐色固体状的(23)(48.2g,82%产率)。

[0633] 溴二甲基(丙-1-烯-2-基)硅烷(24):经一小时将含0.5M溴化异丙烯基镁的THF(814mL,407mmol)逐滴添加到氯二甲基硅烷(35.0g,370mmol,1.0当量)于THF(150mL)中的溶液中,同时在添加期间使内部温度维持在约-20℃。在40℃下加热反应混合物过夜。将反应混合物冷却到室温,且经十分钟添加烯丙基溴(44.8mL,518mmol,1.4当量)。在完成添加之后,添加氯化钯(0.7g,3.7mmol,0.01当量),且将反应混合物在60℃下加热过夜。在冷却到室温之后,在减压下浓缩反应混合物(水浴保持在20℃)。将所得固体悬浮于戊烷(500mL)中且过滤。所收集的固体用戊烷(250mL)洗涤,且在减压下浓缩滤液,得到呈浅棕色油状物的粗产物。将粗产物溶解于戊烷(400mL)中,且过滤以移除固体。固体用戊烷(200mL)洗涤,且在减压下浓缩滤液,得到呈浅棕色油状物的粗物质(24)(41.0g,62%产率)。

[0634] 3-(二甲基(丙-1-烯-2-基)硅烷基)-8-甲基咪唑并[1,2-f]菲啶(25):在-78℃下将含2.5M正丁基锂的己烷(7.6mL,18.9mmol,1.05当量)逐滴添加到(23)(5.6g,18mmol,1当量)于无水THF(100mL)中的溶液中。将反应混合物在-78℃下搅拌15分钟,且接着经由注射

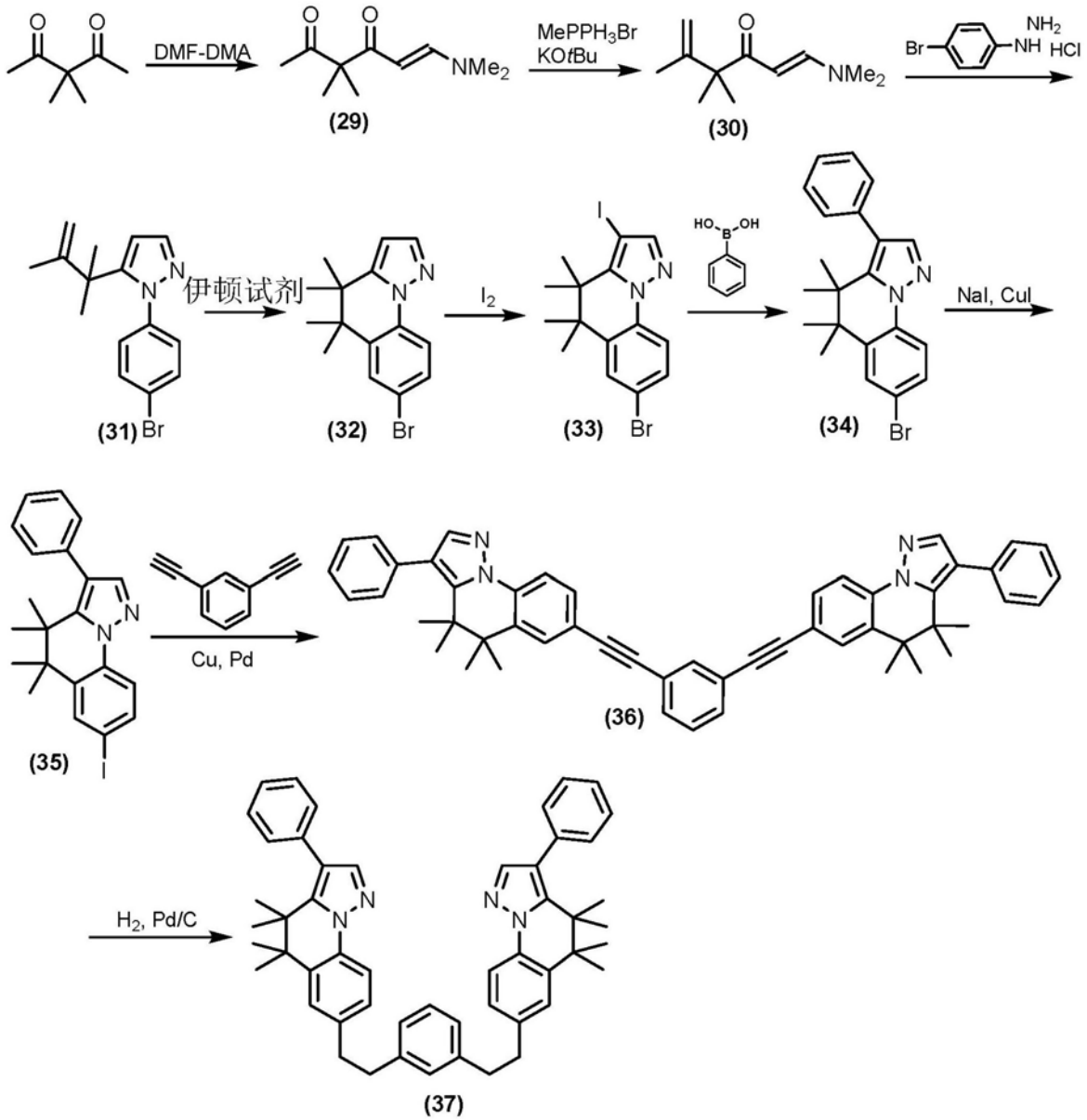
器添加(24)(18mL,99mmol,5.5当量)。使反应混合物升温到室温且搅拌16小时。反应混合物用冰淬灭,且在减压下浓缩。残余物用二氯甲烷(200mL)和水(100mL)稀释。分离各层,且有机层经硫酸钠干燥且在减压下浓缩。粗产物通过柱色谱纯化,得到呈白色固体状的25(4.5g,76%产率,>95%纯度)。

[0635] 3,3,4,4,7-五甲基-3,4-二氢-1,2a^1-二氮杂-3-硅杂苯并[fg]醋蒽烯(26):在-5℃下将无水氯化铝(9.1g,68mmol,5当量)添加到(25)(4.5g,13.6mmol,1当量)于二氯甲烷(500mL)中的溶液中。经1.5小时使反应混合物升温到室温。再添加无水氯化铝(1.81g,13.6mmol,1当量),且将反应物搅拌40分钟,且反应混合物通过TLC监测。将反应混合物倾入冰冷却的饱和碳酸氢钠(350mL)中。分离各层,且水层用二氯甲烷(3×100mL)萃取。合并的有机层经硫酸钠干燥,且在减压下浓缩。粗产物通过柱色谱纯化,得到呈白色固体状的(26)(3.34g,74%产率,95%纯度)。

[0636] 2-溴-3,3,4,4,7-五甲基-3,4-二氢-1,2a^1-二氮杂-3-硅杂苯并[fg]醋蒽烯(27):在室温下将无水N-溴代琥珀酰亚胺(1.24g,6.96mmol,1当量)添加到(26)(2.30g,6.96mmol,1当量)于无水二氯甲烷(200ml)中的溶液中。搅拌72小时后,再添加N-溴代琥珀酰亚胺(0.5g,2.81mmol,0.4当量)和催化量的三氟乙酸(1μL,0.013μmol)。在室温下搅拌反应混合物1小时。添加20重量%五水合硫代硫酸钠水溶液(50mL),且分离各层。有机层用饱和盐水(100mL)洗涤,经硫酸钠干燥,且在减压下浓缩,得到呈黄色固体状的(27)(2.85g,定量产率,90%纯度)。

[0637] 3,3,4,4,7-五甲基-2-苯基-3,4-二氢-1,2a^1-二氮杂-3-硅杂苯并[fg]-醋蒽烯(28):(27)(4.0g,9.8mmol,1当量)于1,4-二噁烷和水的混合物(22:1)(230mL)中的溶液用氮气鼓泡40分钟。添加苯基硼酸(1.43g,11.7mmol,1.2当量)、单水合磷酸钾(5.4g,23.5mmol,2.4当量)和SPhosPdG2(0.7g,0.98mmol,0.1当量),且反应混合物再用氮气鼓泡5分钟。反应混合物在55-60℃下加热过夜。将反应混合物冷却到室温,且在减压下浓缩。残余物用二氯甲烷(200mL)和水(150mL)稀释。分离各层,且有机层经硫酸钠干燥且在减压下浓缩。粗产物通过柱色谱纯化,得到两批次呈白色固体状的(28)(2.25g,69%产率)。

[0638]



[0639] (E)-6-(二甲氨基)-3,3-二甲基己-5-烯-2,4-二酮(29):将3,3-二甲基戊烷-2,4-二酮(100g,780mmol,1当量)和N,N-二甲基甲酰胺二甲基缩醛(102.3g,855mmol,1.1当量)的溶液回流过夜。在冷却到室温之后,将水(0.3L)和二氯甲烷(300mL)添加到反应混合物中,且将浆料搅拌10分钟。分离各层,且水层用二氯甲烷(300mL)萃取。合并的有机层用饱和盐水(300mL)洗涤,经硫酸钠干燥,过滤,且在减压下浓缩,得到随后使用的(29)(94g,粗物质)。

[0640] (E)-1-(二甲氨基)-4,4,5-三甲基己-1,5-二烯-3-酮(30):将溴化甲基-三苯基鏻(205g,575mmol,1.15当量)和叔丁醇钾(67.3g,600mmol,1.2当量)于THF(1L)中的溶液在室温下搅拌30分钟。在室温下将粗(29)(94g,500mmol,1当量)于THF(500mL)中的溶液添加到反应混合物中,且将浆料搅拌过夜。将水(300mL)添加到反应混合物中,并且将浆料搅拌10分钟。分离各层,且水层用二氯甲烷(400mL)萃取。合并的有机层用饱和盐水(2×200mL)洗涤,经硫酸钠干燥,过滤且在减压下浓缩,得到随后使用的呈深色固体状的(30)(231g,38%

纯度)。

[0641] 1-(4-溴苯基)-5-(2,3-二甲基丁-3-烯-2-基)-1H-吡唑(31):将(4-溴苯基)肼盐酸盐(44.3g,199mmol,1当量)添加到(30)(38%纯度,90.5g,199mmol,1当量)于乙醇(900mL)中的溶液中。在温和的回流过夜之后,将反应混合物冷却到室温,且在减压下浓缩。残余物用二氯甲烷(2L)稀释,且用饱和碳酸氢钠(2×250mL)和饱和盐水(500mL)洗涤。有机层经硫酸钠干燥,并且在减压下浓缩。粗物质通过柱色谱纯化,得到呈深红色油状物的(31)(36g,60%产率)。

[0642] 7-溴-4,4,5,5-四甲基-4,5-二氢吡唑并[1,5-a]喹诺酮(32):将(31)(36g,118mmol,1当量)于伊顿试剂(250mL)中的溶液在室温下搅拌过夜。将反应物小心地倾入冰水(300mL)中且用乙酸乙酯(200mL)稀释。反应混合物小心地用固体碳酸氢钠碱化且进一步用水(300mL)稀释。分离各层,且水层用乙酸乙酯(400mL)和二氯甲烷(400mL)萃取。合并的有机层用饱和盐水(400mL)洗涤,经硫酸钠干燥,且在减压下浓缩。粗产物通过柱色谱纯化,得到呈深红色油状物状的(32)(34g,76%产率)。

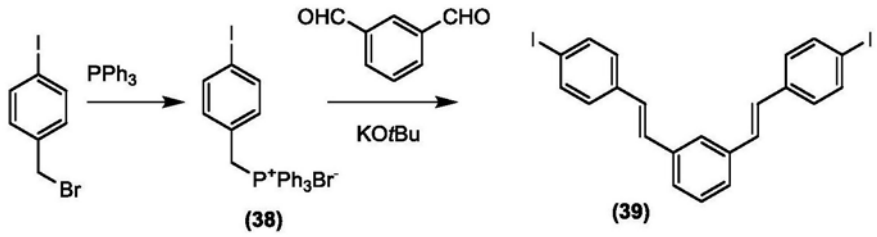
[0643] 7-溴-3-碘-4,4,5,5-四甲基-4,5-二氢吡唑并[1,5-a]喹诺酮(33):将碘(17g,67mmol,0.6当量)和硝酸铈铵(36.7g,67mmol,0.6当量)依序添加到(32)(34g,111mmol,1当量)于乙腈(800mL)中的溶液中。在室温下搅拌过夜后,在减压下浓缩反应混合物。添加乙酸乙酯(1.5L),且溶液用5%亚硫酸氢钠(500mL)、饱和盐水(2×500mL)洗涤,经硫酸钠干燥且在减压下浓缩。粗产物通过柱色谱纯化,得到呈黄色固体状的(33)(22g,67%产率)。

[0644] 7-溴-4,4,5,5-四甲基-3-苯基-4,5-二氢吡唑并[1,5-a]喹诺酮(34):(33)(22g,51mmol,1当量)、苯基硼酸(6.2g,51mmol,1当量)和碳酸钠(10.8g,102mmol,2当量)于二甲氧基乙烷(300mL)和水(150mL)中的混合物用氮气鼓泡20分钟。添加四(三苯基膦)钯(0)(2.9g,2.6mmol,0.05当量),且反应混合物在温和的回流下加热3天。将反应混合物冷却到室温,且用乙酸乙酯(400mL)和饱和盐水(200mL)稀释。分离各层,且水层用乙酸乙酯(2×150mL)萃取。合并的有机层经硫酸钠干燥,且在减压下浓缩。粗棕色固体通过柱色谱纯化,得到呈白色固体状的(34)(9g,46%产率)。

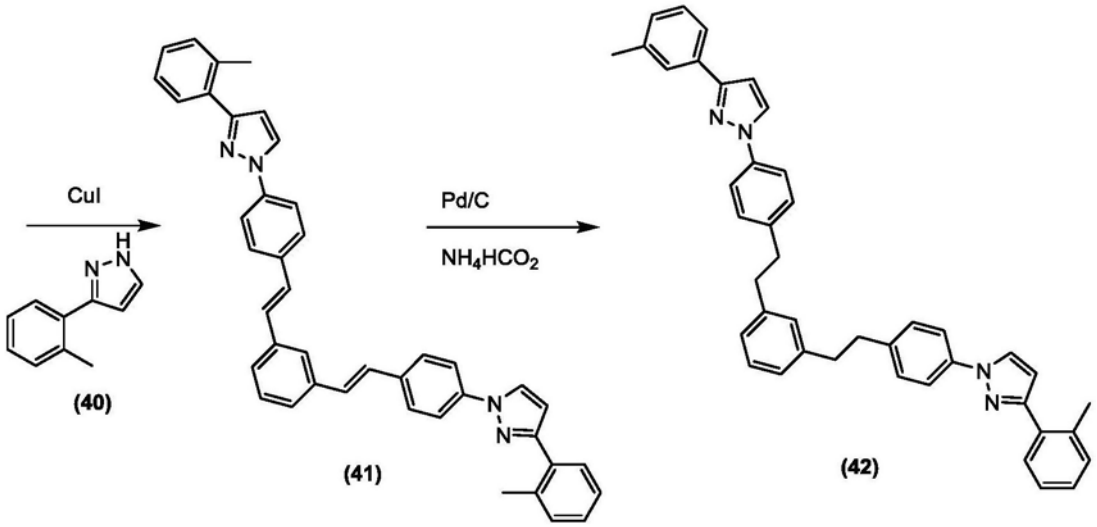
[0645] 7-碘-4,4,5,5-四甲基-3-苯基-4,5-二氢吡唑并[1,5-a]喹诺酮(35):(34)(9g,24mmol,1当量)和碘化钠(7.1g,47mmol,2当量)于二噁烷(131mL)中的混合物用氮气鼓泡20分钟。添加碘化铜(1.3g,7mmol,0.3当量)和反式-二甲基环己烷-1,2-二胺(1.1ml,7.1mmol,0.3当量)。将反应物回流七天。在冷却到室温之后,混合物通过硅藻土垫过滤,其用乙酸乙酯(600mL)洗涤。滤过物用饱和氯化铵(100mL)、水(200mL)和饱和盐水(200mL)洗涤。有机层经硫酸钠干燥,并且在减压下浓缩。粗固体通过柱色谱纯化,得到呈略带黄色固体状的(35)(6.9g,68%产率)与(34)的9比1混合物。

[0646] 1,3-双((4,4,5,5-四甲基-3-苯基-4,5-二氢吡唑并[1,5-a]喹啉-7-基)乙炔基)苯(36):(35)(8.4g,19.9mmol,1当量)和三乙胺(48mL,358mmol,18当量)于无水THF(200mL)中的混合物用氮气鼓泡40分钟。在室温下搅拌反应混合物1.5小时,直到大部分固体溶解为止。添加二氯化双(三苯基膦)钯(II)(554mg,0.8mmol,0.04当量)、碘化铜(112mg,0.6mmol,0.03当量)和1,3-二乙炔基苯(1.2mL,8.8mmol,0.45当量)。在室温下搅拌反应混合物1小时,接着回流过夜。在冷却到室温之后,在减压下浓缩反应混合物,且粗固体通过柱色谱纯化,得到呈白色固体状的3.0g(36)(48%)。

[0647] 1,3-双(2-(4,4,5,5-四甲基-3-苯基-4,5-二氧吡唑并[1,5-a]喹啉-7-基)乙基)苯(37):将10%无水钯/碳(436mg,0.28mmol,0.1当量)和(36)(3.0g,4.1mmol,1当量)于THF(60mL)和乙酸乙酯(30mL)中的混合物在45psi下氢化,用两批新鲜催化剂重复,继而通过硅藻土过滤。通过柱色谱纯化,得到呈白色固体状的1.57(37)。



[0648]



[0649] 溴化(4-碘苯甲基)三苯基鏻(38):将4-碘苯甲基溴(103g,0.347mol,1.0当量)和三苯基膦(91g,0.347mol,1.0当量)于甲苯(1.0L)中的溶液在回流下加热过夜。将反应混合物冷却到室温,且将所得固体过滤且在真空下在40℃下干燥过夜,得到呈白色固体状的(38)(190g,98%产率)。

[0650] 1,3-双(4-碘苯乙烯基)苯(39):在室温下将叔丁醇钾(44.5g,0.397mol)添加到(38)(190g,0.340mol,2.4当量)于无水THF(2.4L)中的悬浮液中,得到亮橙色混合物,在室温下搅拌所述亮橙色混合物20分钟。添加间苯二醛(19g,0.142mol,1.0当量),且在室温下搅拌反应混合物过夜。将反应混合物倾入冰水(12L)中且用乙酸乙酯(3×1.2L)萃取。合并的有机层用饱和盐水(1.0L)洗涤,经硫酸钠干燥,过滤且在减压下浓缩。粗固体依序用MTBE和MeOH湿磨,且在真空下干燥,得到呈灰白色固体状的(39),33.4g,44%,呈反式和顺式区位异构体的混合物的形式。

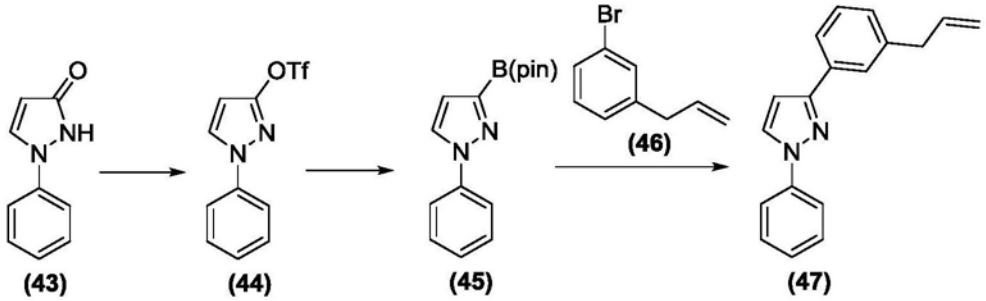
[0651] 3-(2-甲基苯基)-1H-吡唑(40):将2-甲基苯乙酮(5.0g,37.2mmol,1.0当量)和N,N-二甲基甲酰胺二甲基缩醛(50mL,376mmol,10当量)的混合物加热回流3天。将反应混合物冷却到室温且在减压下浓缩,得到橙色油状物,其在不进一步纯化的情况下接受。将此材料溶解于乙醇(50mL)中,且添加水合肼(2.4g,75mmol,2当量)。将反应混合物在室温下搅拌16小时且在减压下浓缩,得到呈橙色油状物的(40)(6.1g,99%产率,90%纯度)。

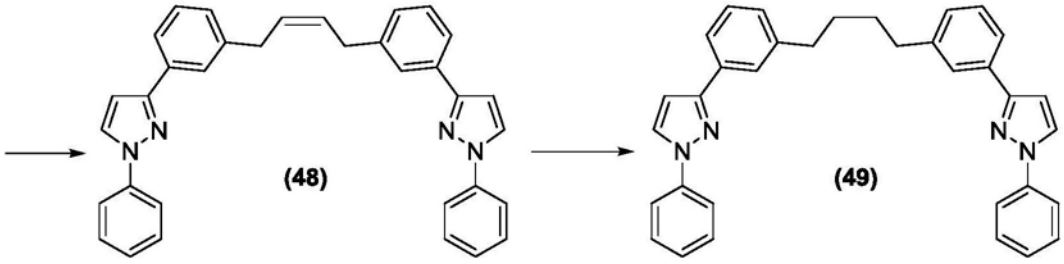
[0652] 1,3-双(4-(3-(2-甲基苯基)-1H-吡唑-1-基)苯乙烯基)苯(41):将(39)(2.0g,3.7mmol,1当量)、(40)(1.8g,11.1mmol,3当量)、碘化铜(I)(71mg,0.37mmol,0.1当量)、吡

啶甲酸(92mg,0.75mmol,0.2当量)和磷酸三钾(4.3g,18.5mmol,5当量)于DMSO(50mL)中的混合物用氮气流鼓泡30分钟,且接着在130℃下加热48小时。将反应混合物倾入水中,且用乙酸乙酯(3×150mL)萃取。合并的有机层用水(50mL)和饱和盐水溶液(50mL)洗涤,经硫酸钠干燥,过滤,且在减压下浓缩,得到绿色固体。粗产物通过柱色谱纯化,得到1.5g呈不纯的褐色固体状的(41)。

[0653] 1,3-双(4-(3-(2-甲基苯基)-1H-吡唑-1-基)苯乙基)苯(42):将(41)(1.5g,2.0mmol)、10%Pd/C(500mg)和甲酸铵(25g,过量)于2-丙醇(500mL)中的混合物在回流下加热经周末。过滤催化剂,且在减压下浓缩滤液,得到半固体残余物。将此溶解于乙酸乙酯(200mL)中,用水(50mL)和饱和盐水溶液(50mL)洗涤,经硫酸钠干燥,过滤,且在减压下浓缩,得到粗产物,所述粗产物通过柱色谱纯化,得到450mg呈白色结晶固体状的(42)。

[0654]





[0655] 1-苯基-1,2-二氢-3H-吡唑-3-酮(43):将1-苯基吡唑烷-3-酮(40g,247mmol)溶解于DMF(150ml)中,且添加六水合氯化铁(III)(3.33g,12.33mmol)。在搅拌下,随着温度升高到80℃,鼓入空气,直到TLC指示完成。将反应混合物倾入1.5L水中,且在冰浴中冷却到室温,继而过滤,且用水洗涤沉淀,且干燥,得到36g(91%)呈淡灰色固体状的(43)。

[0656] 三氟甲磺酸1-苯基-1H-吡唑-3-基酯(44):将(43)(14.1g,88mmol)和三乙胺(15ml,108mmol)于DCM(400ml)中的溶液在冰浴中冷却,且逐份添加三氟甲烷磺酸酐(16.5ml,98mmol)。在升温到室温之后,添加300mL 50%盐水,且将有机层分离。干燥,且蒸发溶剂,得到残余物,所述残余物通过柱色谱纯化,得到24.1g(94%)呈黄色油状物的(44)。

[0657] 1-苯基-3-(4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧杂硼杂环戊-2-基)-1H-吡唑(45):将(44)(10g,34.2mmol)、4,4,4',4',5,5,5',5'-八甲基-2,2'-二(1,3,2-二氧杂硼杂环戊烷)(9.56g,37.6mmol)、$Pd(PPh_3)_4$(3.16g,2.74mmol)、溴化钾(4.48g,37.6mmol)和乙酸钾(10.08g,103mmol)合并于二噁烷(171ml)中,且在回流下加热16小时。将混合物分配在EtOAc与水之间,且有机物用盐水洗涤,干燥,降低真空度,且通过柱色谱纯化,得到7.84g(85%)呈黄色油状物的(45)。

[0658] 1-烯丙基-3-溴苯(46):将1,3-二溴苯(5ml,41.4mmol)于THF(207ml)中的溶液在$^{i}PrOH/CO_2$浴中冷却,经5分钟缓慢添加丁基锂的己烷溶液(16.55ml,41.4mmol),且冷搅拌30

分钟。添加碘化铜(I)(3.94g,20.69mmol)于20mL THF中的悬浮液,且使反应混合物在冰浴中升温至0℃,同时搅拌。添加3-溴基丙-1-烯(10.74ml,124mmol),且冷搅拌反应混合物1小时,随后用饱和NH_4Cl和水淬灭。反应混合物用EtOAc萃取,干燥有机物,且蒸发溶剂,得到黄色油状物,所述黄色油状物通过柱色谱纯化,得到4.63g(57%)呈无色油状物的(46)。

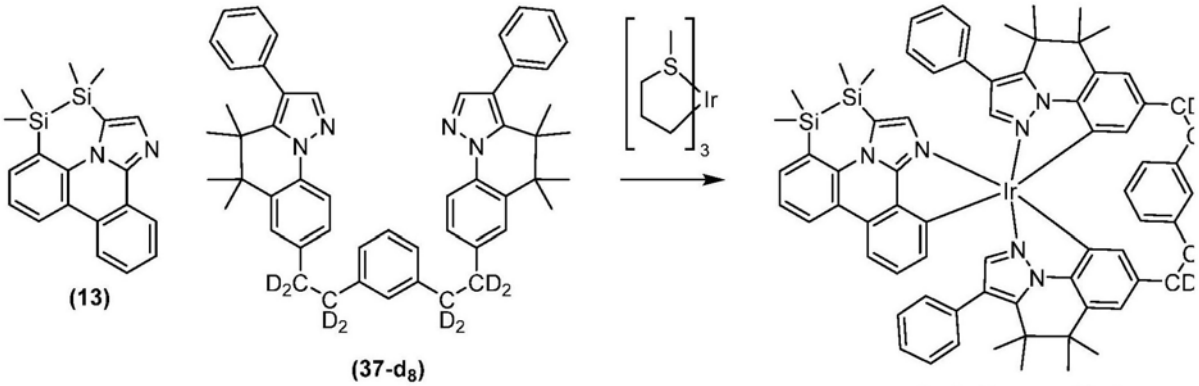
[0659] 3-(3-烯丙基苯基)-1-苯基-1H-吡唑(47):将(45)(7.20g,26.7mmol)、磷酸钾(9.44g,44.5mmol)、$Pd_2(dba)_3$(0.407g,0.445mmol)、(46)(4.38g,22.23mmol)和S-Phos(0.730g,1.778mmol)合并于二噁烷(123ml)中,且将反应混合物在回流下加热16小时。添加水,且混合物用EtOAc萃取。有机物用盐水洗涤,且蒸发溶剂。所得残余物通过柱色谱纯化,得到2.41g(42%)呈浅黄色油状物的(47)。

[0660] 1,4-双(3-(1-苯基-1H-吡唑-3-基)苯基)丁-2-烯(48):将(47)(2.41g,9.26mmol)和格拉布氏催化剂(Grubbs Catalyst,0.190g,0.231mmol)溶解于脱气的DCM(50ml)中,且在回流下加热16小时。反应混合物通过柱色谱纯化,得到1.46g(64%)呈黄色油状物的(48),其在室温下缓慢固化。

[0661] 1,4-双(3-(1-苯基-1H-吡唑-3-基)苯基)丁烷(49):将(48)(1.46g,2.96mmol)于EtOAc(100ml)中的溶液倾倒到钯/碳(10%,无水)(0.141g,0.132mmol)上,且在50psi下氢化。通过硅藻土过滤,且蒸发溶剂,继而进行柱色谱,得到1.07g(73%)白色结晶固体。

[0662] 代表性金属化程序:

[0663]



[0664] 将(13)(0.054g,0.163mmol)和(37-d_8)(0.081g,0.109mmol)和三-[(3-甲硫基)丙基]铱(III)(0.050g,0.109mmol)在1,2-二氯苯(1ml)中在HOTf存在下加热到回流后持续16小时。纯化粗反应混合物,得到37mg(27%)呈淡黄色固体状的络合物$Ir(L_{103})(L_{146}\text{-}L_{146}\text{-}Link_4)$(v=280070600)。

[0665] 表1:化合物V和W的物理性质:

[0666]

化合物化学式	化合物编号	λ_{max} (nm, 77K)[a]	λ_{max} (nm, RT)[a]	CIEx	CIEy	PLQY (%, PMMA)
$Ir(L_9)(L_{372}\text{-}L_{372}\text{-}Link_9)$	V = 744070560	450	456	0.171	0.269	48
$Ir(L_9)(L_{133}\text{-}L_{133}\text{-}Link_3)$	V = 192992725		454	0.165	0.252	44

[0667]

$Ir(L_9)(L_{146}\text{-}L_{146}\text{-}Link_3)$	$V = 195302942$	450	455	0.161	0.235	73
$Ir(L_7)(L_{133}\text{-}L_{133}\text{-}Link_3)$	$V = 19299272$	445	450	0.167	0.214	16
$Ir(L_9)(L_{142}\text{-}L_{142}\text{-}Link_3)$	$V = 194592106$	449	455	0.165	0.253	70
$Ir(L_9)(L_{142}\text{-}L_{142}\text{-}Link_4)$	$V = 279359670$	449	455	0.165	0.253	70
$Ir(L_9)(L_{146}\text{-}L_{146}\text{-}Link_4)$	$V = 280070506$	450	455	0.161	0.235	73
$Ir(L_1\text{-}L_1\text{-}L_1\text{-}Link_{22})$	$W = 2293522393$	456	460	0.165	0.222	56
$Ir(L_{146})(L_{442}\text{-}L_{442}\text{-}Link_9)$	$V = 756510327$	454	460	0.164	0.262	83
$Ir(L_3\text{-}L_3\text{-}L_3\text{-}Link_{22})$	$W = 2293980319$	459	464	0.177	0.274	44
$Ir(L_9)(L_{150}\text{-}L_{150}\text{-}Link_3)$	$V = 196013778$	450	458	0.180	0.307	56
$Ir(L_{146})(L_3\text{-}L_3\text{-}Link_3)$	$V = 169890692$	450	458	0.172	0.253	47
$Ir(L_3)(L_{150}\text{-}L_{150}\text{-}Link_3)$	$V = 196013772$	468	486	0.192	0.331	55
$Ir(L_{128})(L_{146}\text{-}L_{146}\text{-}Link_4)$	$V = 280070625$	447	454	0.163	0.234	59
$Ir(L_{131})(L_{146}\text{-}L_{146}\text{-}Link_4)$	$V = 280070628$	449	456			83
$Ir(L_{30})(L_{139}\text{-}L_{139}\text{-}Link_3)$	$V = 194059000$	449	457	0.175	0.264	62
$Ir(L_{146})(L_{146}\text{-}L_3\text{-}Link_3)$	$V = 169943745$	447	456	0.173	0.229	46
$Ir(L_5)(L_{146}\text{-}L_3\text{-}Link_3)$	$V = 169943604$	452	458	0.166	0.244	54
$Ir(L_{103})(L_{146}\text{-}L_{146}\text{-}Link_4)$	$V = 280070600$	451	462	0.192	0.257	67
$Ir(L_{92})(L_{146}\text{-}L_8\text{-}Link_3)$	$V = 280070589$	448	457	0.162	0.24	68
$Ir(L_{30})(L_{146}\text{-}L_8\text{-}Link_3)$	$V = 170830319$	454	460	0.164	0.281	80
比较化合物 1	*n/a*	448	456	0.162	0.237	55

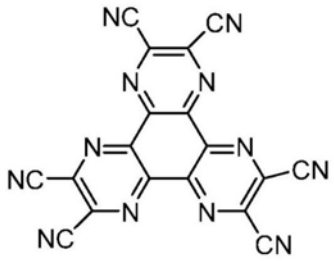
[0668] [a]发射光谱的λ_{max}在2-Me-THF中测量。

[0669] 实验装置数据:实验中所使用的OLED在预涂布有薄层电阻为15-Ω/sq的氧化铟锡(ITO)层的玻璃衬底上生长。在任何有机层沉积或涂布之前,衬底用溶剂去除油污且接着在100毫托下在50W下用氧等离子体处理1.5分钟且用UV臭氧处理5分钟。

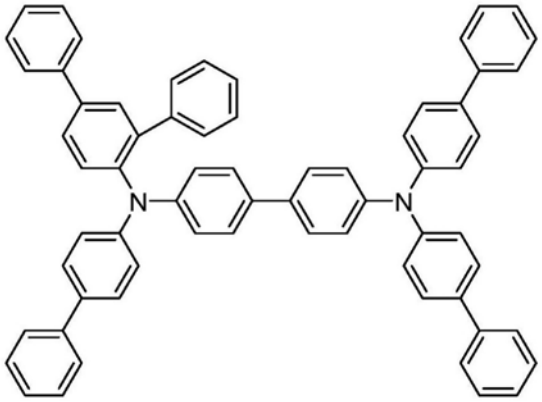
[0670] 表2中的装置是通过热蒸发在高真空(<10^{-6}托)中制造。阳极电极是750 Å的氧化铟锡(ITO)。实例装置具有依序由以下组成的有机层:ITO表面、100 Å厚的化合物1(HIL)、250 Å化合物2的层(HTL)、300 Å以15%掺杂有本发明化合物的化合物3(EML)、50 Å化合物4(BL)、300 Å化合物5(ETL)、由10 Å化合物7或5 ÅLiF构成的EIL,继而1,000 ÅAl(阴极)。在制造之后,在氮气手套箱(<1ppm的H_2O和O_2)中将所有装置立即用经环氧树脂密封的玻璃盖包封,且将吸湿剂并入到包装内部。掺杂百分比是以体积百分比计。

[0671] 下文提供以上装置结构中使用的化合物的化学结构:

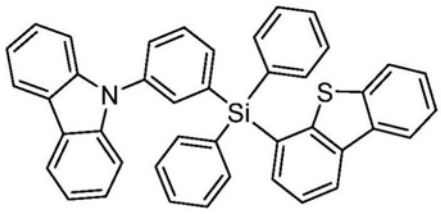
[0672]



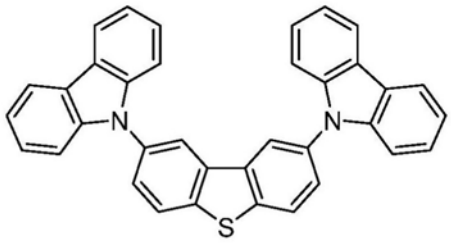
化合物1 、



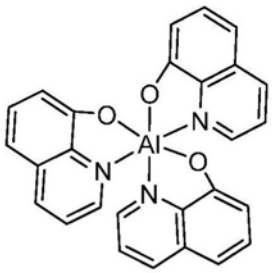
化合物2 、



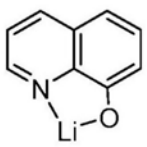
化合物3 、



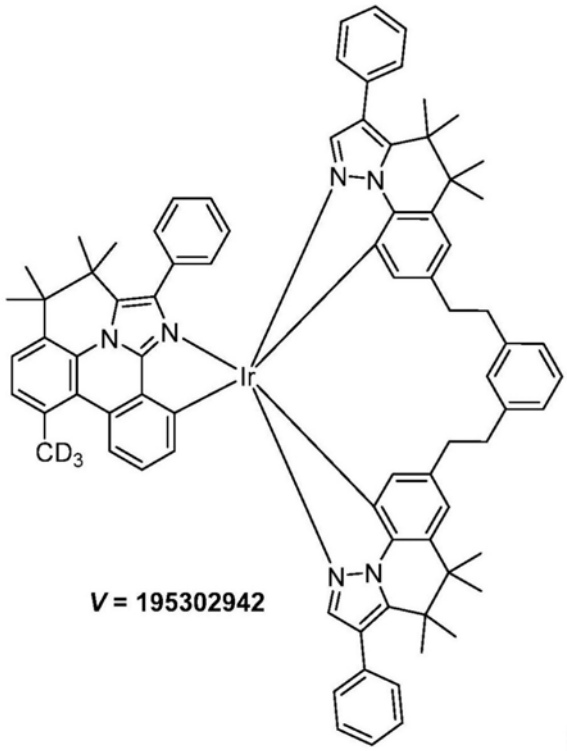
化合物4 、



化合物5 、

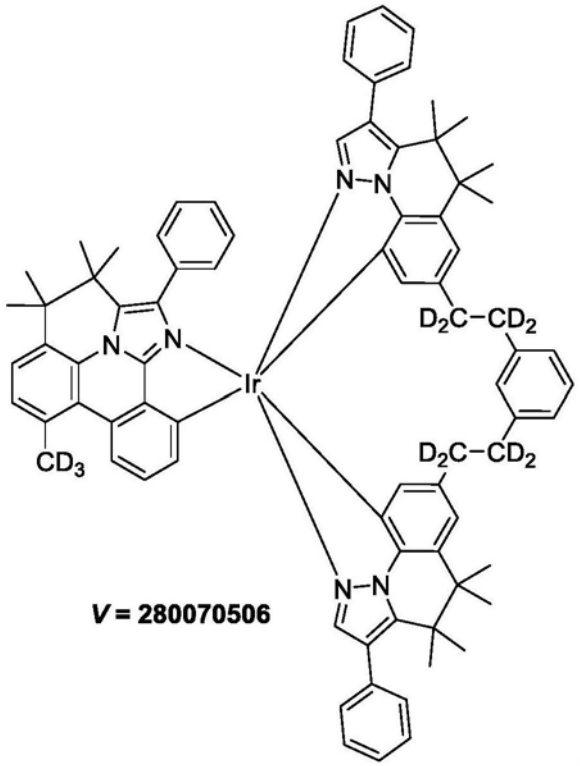


化合物6 、



V = 195302942

和

[0673] 

。

[0674] 表2:装置结构

[0675]

			EML			BL	ETL	EIL	1931 CIE			
装置	HIL	HTL	300Å			BL	ETL	EIL	x	y	λ max	FWHM
	100Å	250Å	主体	发射体	[%]	50Å	300Å				[nm]	[nm]
装置 1	化合物 1	化合物 2	化合物 3	**比较化合物 1**	15	化合物 4	化合物 5	LiF 5Å	0.148	0.212	458	54
装置 2	化合物 1	化合物 2	化合物 3	*V* = 195302942	15	化合物 4	化合物 5	化合物 6-10Å	0.147	0.211	458	53
装置 3	化合物 1	化合物 2	化合物 3	*V* = 280070506	15	化合物 4	化合物 5	化合物 6-10Å	0.147	0.220	458	55

[0676] 表3:装置结果

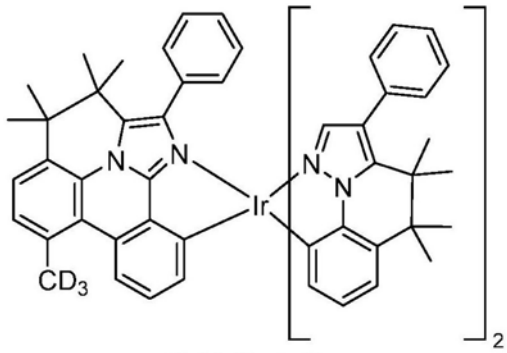
[0677]

	在 10mA/cm²下				在 1K 尼特(nit)下
装置[a]	电压[b]	LE[b]	EQE[b]	PE[b]	计算值*[b]
--	[V]	[cd/A]	[%]	[lm/W]	80%
装置 1	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
装置 2	0.93	1.01	1.00	1.08	1.06
装置 3	0.97	1.10	1.10	1.14	1.42

[0678] [a]此表的装置结构列于表2中。

[0679] [b]所有值相对于比较化合物1的值报道。

[0680] 下文提供比较化合物1的化学结构：

[0681] 

比较化合物1 。

[0682] 如表1中的数据指示,发射波长(λ_{max})和光致发光量子产率(PLQY)均可通过结构变异实现显著变化。改变菲啶咪唑部分自身的内部束带(A)可在室温溶液中引起7nmλ_{max}偏移(V＝280070506对比V＝280070600)。假设此源于Si-Si束带与C-C束带相比的尺寸,因为较小C-C束带减小N-Ir相互作用,导致三重态的配体特征更大,且因此能量发射更高,不过其伴随着PLQY减小。

[0683] 表1中PLQY值的差异也直接说明了将双齿部分栓系在一起的益处。可以在比较化合物1(PLQY＝55%)和V＝280070506(PLQY＝73%)之间进行最直接的比较,其中引入底部栓系导致20%的增加而不显著影响任何其它光物理学性质。表1还表明,在相同的磷光配体(L_9)存在下,通过顶部(V＝744070560)或底部(V＝192992725)键联部分栓系支持配体可产生类似的PLQY值(分别是48%和44%)。这两个观察结果都支持这样的假设,即将三-双齿Ir(III)络合物中的两个或更多个配体栓系在一起可以引起热可接近的分子振动模式的减轻,其在三重激发态中充当非辐射弛豫途径。在此专利中呈现的分子中可能存在许多这样的振动,但很明显,通过多种不同的束带化学作用的栓系可以产生有益的光物理学性质。

[0684] 在合成上述络合物中使用高齿合度配体的另一个益处是相对容易纯化。由于所需材料和金属化反应的副产物具有相似的化学性质,因此三-二齿比较实例1的纯化非常困难。这又需要冗长且低效的分离技术,这使得材料的按比例扩大不切实际。然而,在将两个或三个双齿部分键联在一起时,所得反应混合物的纯化大大简化,因为具有不希望的组成的中性铱络合物主要是低聚的或含有未结合的杂环基团,使得通过标准硅胶色谱法除去它们并不重要。

[0685] 表3中的装置结果还表明在上述结构中使用聚-双齿配体的电致发光益处,因为与纯双齿类似物比较化合物1相比,络合物V＝195302942表现出中度(6%)的电致发光寿命增加。这表明,正如所料,将双齿部分中的至少两个栓系在一起对整个铱络合物的总体稳定性具有可测量的影响。在四齿配体本身中使用的栓系的氘化时也观察到电致发光寿命的增加(Link 4对比Link 3);因此,引起化合物V＝195302942和V＝280070506之间的寿命增加42%。这种增加被认为在动力学上稳定了苯甲基位点,这可能是电子激发重复过程中化学降解的位点。寿命增加表明苯甲基质子或氘核去除的过程代表了至少一种发射体降解模式的限速转化,并且可以通过在配体之间适当使用连接基团来减轻。

[0686] 应理解,本文所述的各种实施例仅借助于实例,并且并不意图限制本发明的范围。举例来说,可以在不背离本发明的精神的情况下用其它材料和结构取代本文所述的许多材料和结构。如所要求的本发明因此可以包括本文所述的具体实例和优选实施例的变化形式,如所属领域的技术人员将显而易见。应理解,关于本发明为何起作用的各种理论并不意

图是限制性的。

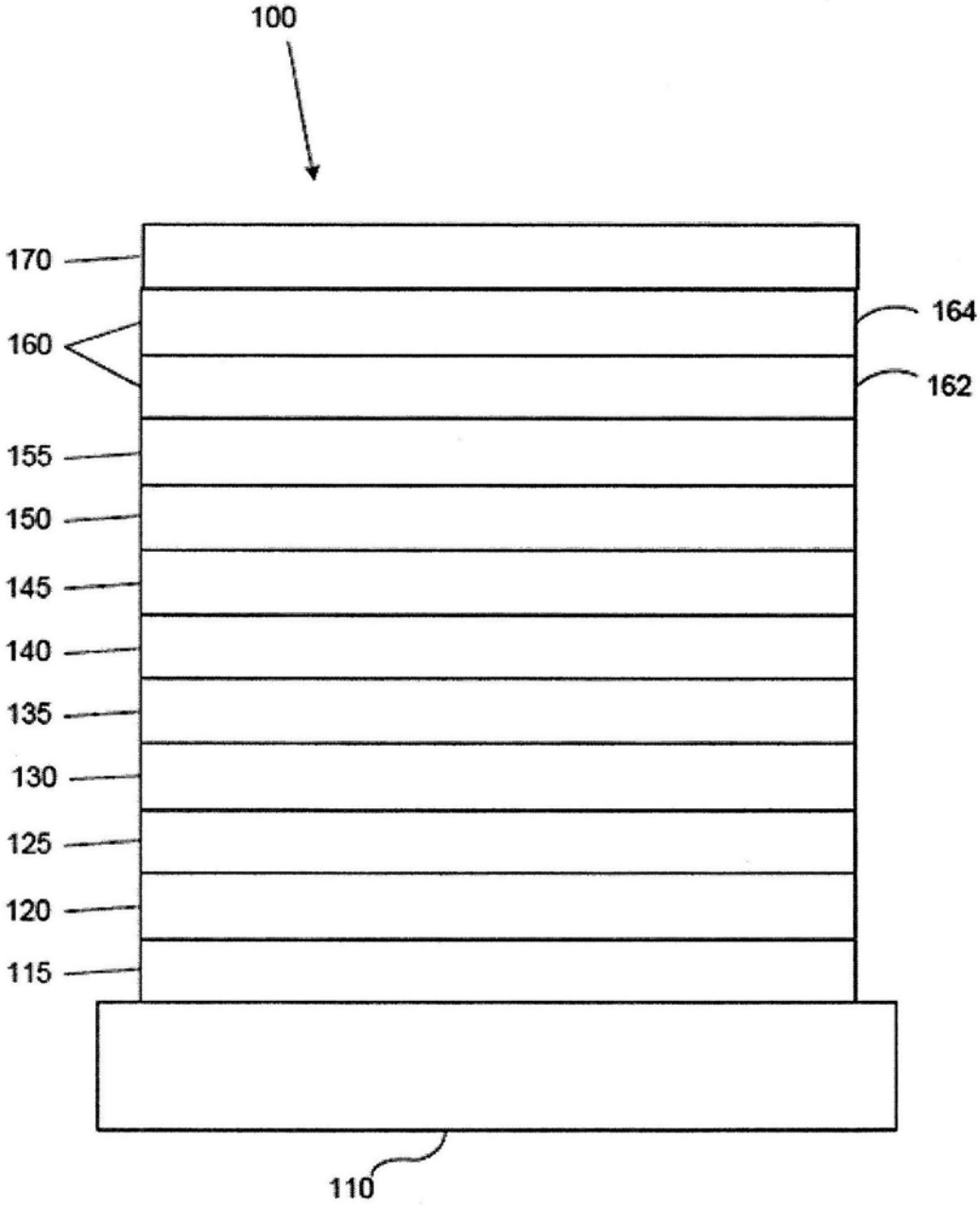


图1

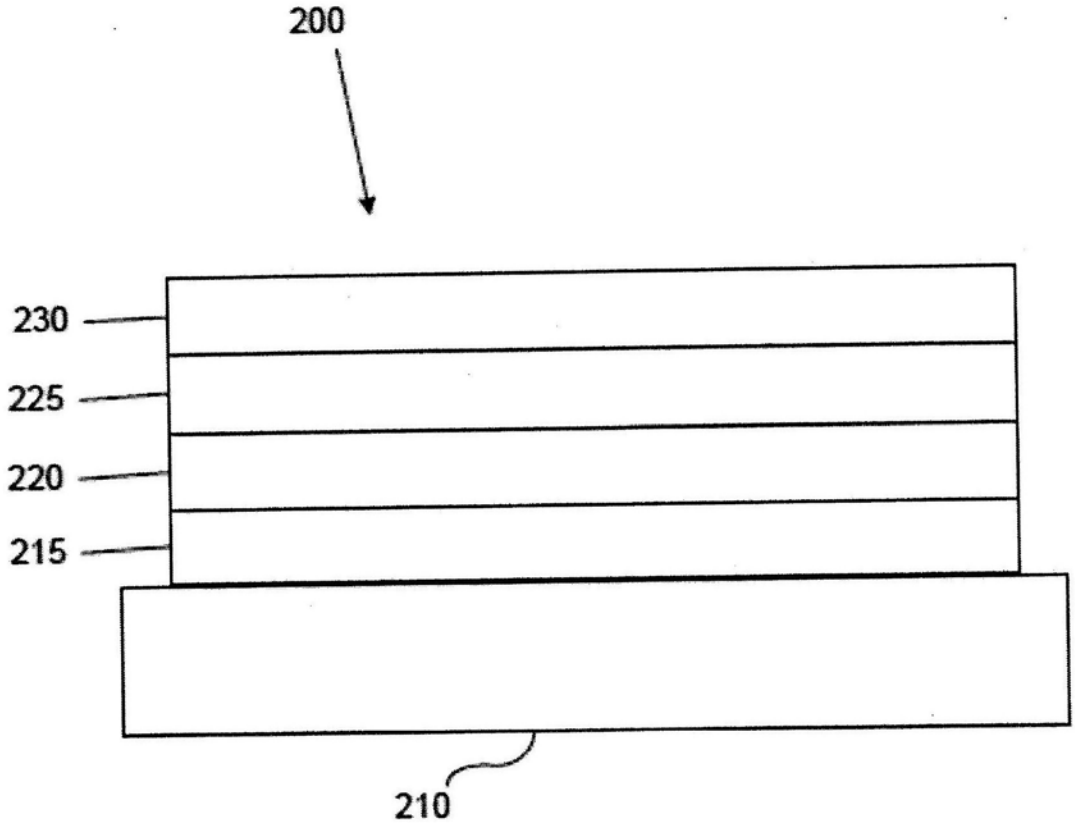


图2