



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 1849380 B

(45) 授权公告日 2011. 04. 27

(21) 申请号 200480026093. X

(51) Int. Cl.

(22) 申请日 2004. 09. 10

G07D 335/04 (2006. 01)

(30) 优先权数据

(56) 对比文件

321520/2003 2003. 09. 12 JP

JP 2003-7467 A, 2003. 01. 10, 说明书第

337306/2003 2003. 09. 29 JP

0009、0122 段.

US 20030168656 A1, 2003. 09. 11, 说明书第

(85) PCT申请进入国家阶段日

189-190 段, 第 22 页 化合物组 (39).

2006. 03. 10

审查员 李婉婷

(86) PCT申请的申请数据

PCT/JP2004/013589 2004. 09. 10

(87) PCT申请的公布数据

W02005/026289 JA 2005. 03. 24

(73) 专利权人 住友化学株式会社

地址 日本国东京都

(72) 发明人 关根千津 秋野喜彦 三上智司

(74) 专利代理机构 中科专利商标代理有限责任
公司 11021

代理人 柳春琦

权利要求书 2 页 说明书 71 页

(54) 发明名称

发光材料及使用其的发光器件

(57) 摘要

一种发光材料,其包含 (A) 在主链中含有芳环的共轭聚合物和 (B) 在三重态受激态发光的化合物,其特征在于在聚合物 (A) 中,各自通过计算化学方法计算的自由能级和处于基态的最低的空轨道 (LUMO) 能级之间的能量差为 1. 3eV 或更高,或用实验方法测量的自由能级和处于基态的最低的空轨道 (LUMO) 能级之间的能量差为 2. 2eV 或更高,并且该材料满足下面的条件 (1), 条件 (1): $ET_A - ES_{A0} > ET_B - ES_{B0}$, 其中 ES_{A0} 是聚合物 (A) 处于基态的能量; ET_A 是聚合物 (A) 处于最低的受激三重态的能量; ES_{B0} 是化合物 (B) 处于基态的能量; 且 ET_B 是化合物 (B) 处于最低的受激三重态的能量。

1. 一种发光材料,其包含在主链中含有芳环的共轭聚合物化合物 A 和显示由三重态受激态发光的化合物 B,其中在聚合物化合物 A 中,通过计算化学方法计算的自由能级和处于基态的最低的空轨道能级之间的能量差为不低于 1.3eV,或用实验方法测量的自由能级和处于基态的最低的空轨道能级之间的能量差为不低于 2.2eV,并且或者满足下面条件 1,或满足下面条件 2,或它们二者都满足:

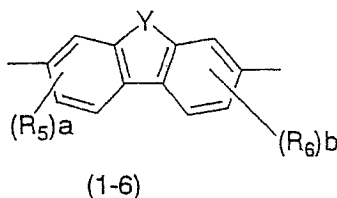
条件 1:聚合物化合物 A 处于基态的能量 ES_{A0} 、聚合物化合物 A 处于最低的受激三重态的能量 ET_A 、化合物 B 处于基态的能量 ES_{B0} 和化合物 B 处于最低的受激三重态的能量 ET_B 满足关系 Eq1:

$$ET_A - ES_{A0} > ET_B - ES_{B0} \quad (\text{Eq1})$$

条件 2:聚合物化合物 A 的荧光强度 PL_A 与显示由三重态受激态发光的化合物 B 的荧光强度 PL_B 的比率 PL_A/PL_B 为 0.8 或更小,

并且聚合物化合物 (A) 通过计算化学方法计算的处于最低的受激三重态的能量 ET_A 为不低于 2.82eV,

其中聚合物化合物 (A) 含有下面的通式 (1-6) 的重复单元:



其中, R_5 和 R_6 各自独立地表示 C 1-20 烷氧基; a 和 b 各自独立地表示 0 至 3 的整数; 当 R_5 和 R_6 各自存在多个时,它们任选地相同或不同; Y 表示 O 或 S。

2. 根据权利要求 1 的发光材料,其中聚合物化合物 (A) 通过计算化学方法计算的处于最低的受激三重态的能量 ET_A 和化合物 (B) 处于最低的受激三重态的能量 ET_B 之间的能量差 ET_{AB} ,和聚合物化合物 (A) 处于基态的最高已占轨道能量 EH_A 和化合物 (B) 处于基态的最高已占轨道能量 EH_B 之间的能量差 EH_{AB} 满足关系 Eq2:

$$ET_{AB} \geq EH_{AB} \quad (\text{Eq2}).$$

3. 根据权利要求 1 或 2 所述的发光材料,其中聚合物化合物 A 通过计算化学方法计算的处于最低的受激单重态的能量 ES_{A1} 和化合物 B 处于最低的受激单重态的能量 ES_{B1} 之间的能量差 ES_{AB1} ,和聚合物化合物 A 处于基态的最高已占轨道能量 EH_A 和化合物 B 处于基态的最高已占轨道能量 EH_B 之间的能量差 EH_{AB} 满足关系 Eq3:

$$ES_{AB1} \geq EH_{AB} \quad (\text{Eq3}).$$

4. 根据权利要求 1 至 3 任何一项的发光材料,其中其 EL 发光峰波长为 550nm 或更短。

5. 根据权利要求 1 至 4 任何一项的发光材料,其还包含至少一种选自空穴输送材料、电子输送材料和发光材料中的材料。

6. 一种油墨组合物,其包含根据权利要求 1 至 5 任何一项的发光材料。

7. 根据权利要求 6 的油墨组合物,其中在 25℃ 的粘度为 1 至 100mPa · s。

8. 一种聚合物发光器件,其在由阳极和阴极组成的电极之间具有一种含有根据权利要求 1 至 5 任何一项的发光材料的层。

9. 一种发光薄膜,其包含根据权利要求 1 至 5 任何一项的发光材料。

10. 一种导电薄膜,其包含根据权利要求 1 至 5 任何一项的发光材料。
11. 一种有机半导体薄膜,其包含根据权利要求 1 至 5 任何一项的发光材料。
12. 一种聚合物发光器件,其在由阳极和阴极组成的电极之间具有有机层,其中所述的有机层含有根据权利要求 1 至 5 任何一项的发光材料。
13. 根据权利要求 12 的聚合物发光器件,其中所述的有机层是发光层。
14. 根据权利要求 13 的聚合物发光器件,其中所述的发光层还含有空穴输送材料、电子输送材料或发光材料。
15. 一种片状光源,其使用根据权利要求 12 至 14 任何一项的聚合物发光器件。
16. 一种分段显示器,其使用根据权利要求 13 和 14 任何一项的聚合物发光器件。
17. 一种点矩阵显示器,其使用根据权利要求 12 至 14 任何一项的聚合物发光器件。
18. 一种液晶显示器,其使用根据权利要求 12 至 14 任何一项的聚合物发光器件作为背光。
19. 一种照明设备,其使用根据权利要求 12 至 14 任何一项的聚合物发光器件。

发光材料及使用其的发光器件

技术领域

[0001] 本发明涉及一种发光材料和一种聚合物发光器件。

背景技术

[0002] 在发光层中使用显示由三重态受激态发光的化合物（以下，有时称作三重态发光化合物）器件是已知的，所述的化合物作为在发光器件的发光层中使用的发光材料。

[0003] 当将三重态发光化合物用于发光层中时，通常作为组合物使用发光材料，其除了含有该化合物外，还含有基质。已知的是，可以适宜地将非共轭聚合物如聚乙烯吡啶用作基质（例如，日本专利申请公开（JP-A）2002-50483）

[0004] 共轭聚合物的载流子迁移程度高，并且在将其用作基质时，预期驱动电压低，但是，据说共轭聚合物不适宜用作基质，通常是因为其最低受激三重态能量小（例如，JP-A 2002-241455）。实际上，例如，由共轭聚合物聚芴和三重态发光聚合物组成的发光材料（APPLIED PHYSICS LETTERS, 80, 13, 2308 (2002)）的发光效率极低。

发明内容

[0005] 本发明的一个目的在于提供一种包含共轭聚合物和三重态化合物的发光材料，其在用于发光器件的发光层时使该器件具有优异的发光效率等。

[0006] 即，本发明提供一种发光材料，其包含在主链中含有芳环的共轭聚合物化合物（A）和显示由三重态受激态发光的化合物（B），其中在聚合物化合物（A）中，通过计算化学方法计算的自由能级和处于基态的最低的空轨道（LUMO）能级之间的能量差为 1.3eV 或更高，或用实验方法测量的自由能级和处于基态的最低的空轨道（LUMO）能级之间的能量差为 2.2eV 或更高，并且或者满足下面（条件 1），或满足下面（条件 2），或它们二者都满足：（条件 1）：聚合物化合物（A）处于基态的能量（ ES_{A0} ）、聚合物化合物（A）处于最低的受激三重态的能量（ ET_A ）、化合物（B）处于基态的能量（ ES_{B0} ）和化合物（B）处于最低的受激三重态的能量（ ET_B ）满足关系（Eq1）：

[0007] $ET_A - ES_{A0} > ET_B - ES_{B0}$ (Eq1)

[0008] （条件 2）：聚合物化合物（A）的荧光强度（ PL_A ）与显示由三重态受激态发光的化合物（B）的荧光强度（ PL_B ）的比率 PL_A/PL_B 为 0.8 或更小。

[0009] 实施本发明的最佳方式

[0010] 本发明的发光材料是包含在主链中含有芳环的共轭聚合物化合物（A）和显示由三重态受激态发光的化合物（B）。

[0011] 要求在本发明的发光材料中使用的共轭聚合物化合物（A）：通过计算化学方法计算的自由能级和处于基态的最低的空轨道（LUMO）能级之间的能量差为 1.3eV 或更高，或用实验方法测量的最低的空轨道（LUMO）的能量为 2.2eV 或更高。

[0012] 认为基质所履行的任务在于注入和输送电荷，并且作为电子注入容易性指示的自由能级和处于基态的 LUMO 之间的能量差对驱动电压和发光效率施加影响。

[0013] 例如,当用实验方法测量共轭聚合物化合物(A)处于基态的LUMO能量(自由能级和处于基态的LUMO能级之间的能量差)时,它可以通过循环伏安法来测量。即,在电极上形成作为测量对象的发光材料的薄膜,并且测量衰减波,可以从其第一幅衰减波的电位获得处于基态的LUMO。

[0014] 要求本发明的发光材料或者满足下面(条件1),或满足下面(条件2),或它们二者都满足:

[0015] (条件1):聚合物化合物(A)处于基态的能量(ES_{A0})、聚合物化合物(A)处于最低的受激三重态的能量(ET_A)、化合物(B)处于基态的能量(ES_{B0})和化合物(B)处于最低的受激三重态的能量(ET_B)满足关系(Eq1):

$$[0016] \quad ET_A - ES_{A0} > ET_B - ES_{B0} \quad (Eq1)$$

[0017] (条件2):聚合物化合物(A)的荧光强度(PL_A)与显示由三重态受激态发光的化合物(B)的荧光强度(PL_B)的比率 PL_A/PL_B 为0.8或更小。

[0018] 优选本发明的发光材料(条件1)和(条件2)都满足。

[0019] 在(条件1)($ET_A - ES_{A0}, ET_B - ES_{B0}$,按此顺序)的(Eq1)中,对于确定共轭聚合物化合物(A)和显示由三重态受激态发光的化合物(B)的基态和处于最低的受激三重态之间的能量差,有现存的测量方法,但是,在本发明中,通常是通过计算化学方法来确定该差,因为在化合物(B)的上述能量差和用作基质的共轭聚合物(A)的上述能量差之间相对值的相关性对于获得更高的发光效率是重要的。

[0020] 在(条件2)中,共轭聚合物化合物(A)和显示由三重态受激态发光的化合物(B)的荧光强度可以由商购的荧光和磷光测量仪器等来测量。

[0021] 可以由下面的方法得到样品,将作为测量对象的发光材料溶解于有机溶剂中,并且由旋涂法在石英基材上形成该溶液的薄膜。

[0022] 用于测量荧光强度的激发光波长通常选自这样的波长范围,其中共轭聚合物化合物(A)的吸收光谱和显示由三重态受激态发光的化合物(B)的吸收光谱重叠,并且它在各个吸收光谱峰中靠近较长的峰波长。

[0023] 本发明的发光材料包括这样一种发光材料,其包含在主链中含有芳环的共轭聚合物化合物(A)和显示由三重态受激态发光的化合物(B),其中聚合物化合物(A)处于基态的能量(ES_{A0})、聚合物化合物(A)处于最低的受激三重态的能量(ET_A)、化合物(B)处于基态的能量(ES_{B0})和化合物(B)处于最低的受激三重态的能量(ET_B)满足关系(Eq1):

$$[0024] \quad ET_A - ES_{A0} > ET_B - ES_{B0} \quad (Eq1)$$

[0025] 并且通过计算化学方法计算的自由能级和LUMO之间的能量差为1.3eV或更高;和这样一种发光材料,其包含在主链中含有芳环的共轭聚合物化合物(A)和显示由三重态受激态发光的化合物(B),其中聚合物化合物(A)的荧光强度(PL_A)与显示由三重态受激态发光的化合物(B)的荧光强度(PL_B)的比率 PL_A/PL_B 为0.8或更小,并且用实验方法测量的自由能级和最低的空轨道LUMO之间的能量差为2.2eV或更高。

[0026] 在本发明的发光材料中,为了获得更高的发光效率,优选的是满足下面条件的那些:聚合物化合物(A)处于最低的受激三重态的能量 ET_A 和化合物(B)处于最低的受激三重态的能量 ET_B 之间的能量差 ET_{AB} ,和聚合物化合物(A)处于基态的最高的已占轨道(HOMO)能量 EH_A 和化合物(B)处于基态的HOMO能量 EH_B 之间的能量差 EH_{AB} 满足关系(Eq2):

[0027] $ET_{AB} \geq EH_{AB}$ (Eq2) ;

[0028] [0028] 和满足下面条件的那些 : 聚合物化合物 (A) 处于最低的受激单重态能级的 ES_{A1} 和化合物 (B) 处于最低的受激单重态能级的 ES_{B1} 满足关系 (Eq3) :

[0029] $ES_{A1} \geq ES_{B1}$ (Eq3)。

[0030] 此外, 优选聚合物化合物 (A) 处于最低的受激三重态能级的能量 ET_A 为 2.6eV 或更高, 并且 EL 发光峰波长为 550nm 或更短, 以获得更高的发光效率。

[0031] 对聚合物化合物 (A) 和显示由三重态受激态发光的化合物 (B) 的混合比例没有特别限制, 因为它根据将要合并的聚合物化合物的种类及将优选的性质而变化, 但是, 当聚合物化合物 (A) 的量为 100 重量份时, 它通常为 0.01 至 80 重量份, 优选为 0.1 至 60 重量份。

[0032] 至于用于获得自由能级和 LUMO 之间的能量差的算术化学方法, 已知的是基于半实验方法和非实验方法的分子轨道方法、密度函数方法等。例如, 为了测量激发能, 可以使用 Hartree-Fock (HF) 方法或密度函数方法。通常, 使用量子化学计算程序 Gaussian 98, 来计算三重态发光化合物和共轭聚合物化合物的基态和最低的受激三重态之间的能量差 (以下, 称作最低的受激三重态能量), 基态和最低的受激单重态之间的能量差 (以下, 称作最低的受激单重态能量), 处于基态的 HOMO 能级和处于基态的 LUMO 能级。

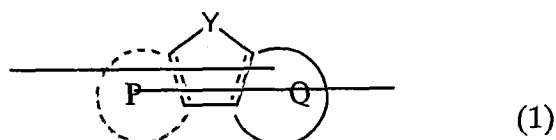
[0033] 对于单体 ($n = 1$)、二聚体 ($n = 2$) 和三聚体 ($n = 3$), 计算共轭聚合物化合物的最低的受激三重态能量、最低的受激单重态能量、处于基态的 HOMO 能级和处于基态的 LUMO 能级, 并且对于共轭聚合物激发能的计算, 使用这样的方法, 其中将 $n = 1$ 至 3 的结果转换为 $1/n$ 函数 $E(1/n)$ (其中, E 表示所得到的激发能, 如最低的受激单重态能量、最低的受激三重态能量等), 并且线性外推至 $n = 0$ 。例如, 当在共轭聚合物的重复单元中含有链长度较长的侧链时, 可以将作为计算对象的化学结构简化为在侧链部分的最小单元 (例如, 当载有作为侧链的辛基时, 将该侧链按甲基进行计算)。对于共聚物中的 HOMO、LUMO、单重态激发能和三重态激发能, 通过使用与上面所述的均聚物的情况下相同的计算方法。

[0034] 描述在本发明的发光材料中含有的在主链含有芳环的共轭聚合物化合物 (A)。

[0035] 该共轭聚合物化合物是这样一种分子, 其中长重复地连接三键和单键, 如在例如 “Yuki EL no hanashi” (Katsumi Yoshino, Nikkan KogyoShimbun), p. 23 中所述的, 并且在本发明中所使用的共轭聚合物化合物 (A) 是这样的, 其中在主链中含有芳环, 并且通过计算化学方法计算的自由能级和处于基态的 LUMO 之间的能量差为 1.3eV 或更高, 或用实验方法测量的最低的空轨道 (LUMO) 的能量为 2.2eV 或更高。

[0036] 在共轭聚合物化合物 (A) 中, 考虑到发光效率, 优选具有由下式 (1) 表示的重复单元的那些 :

[0037]



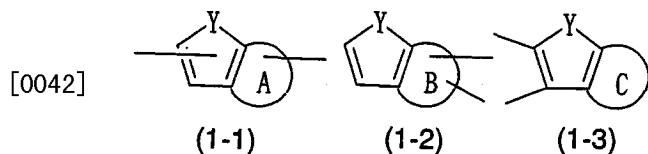
[0038] (其中, 环 P 和环 Q 各自独立地表示芳族环, 但是环 P 可以存在或不存在。当环 P 存在时, 两个连接键分别在环 P 和 / 或环 Q 上, 并且当环 P 不存在时, 两个连接键分别在含 Y 的 5 元环上和 / 或在环 Q 上。芳族环和 / 或含 Y 的 5 元环可以含有选自下列的取代基 : 烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基

烯基、芳基炔基、氨基、取代的氨基、甲硅烷基、取代的甲硅烷基、卤素原子、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、酸亚胺基、一价杂环基、羧基、取代的羧基和氰基。Y 表示 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-Si(R_1)(R_2)-$ 、 $-P(R_3)-$ 或 $-PR_4(=O)-$ 。R₁、R₂、R₃ 和 R₄ 各自独立地表示烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烯基、芳基炔基、氨基、取代的氨基、甲硅烷基、取代的甲硅烷基、甲硅烷氧基、取代的甲硅烷氧基、一价杂环基或卤素原子。

[0039] 至于上式 (1) 中的芳族环, 示例的是: 芳族烃环, 如苯环、萘环、蒽环、并四苯环、并五苯环、茈环和菲环; 杂芳环, 如吡啶环、联吡啶环、菲咯啉环、喹啉环、异喹啉环、噻吩环、呋喃环和吡咯环。

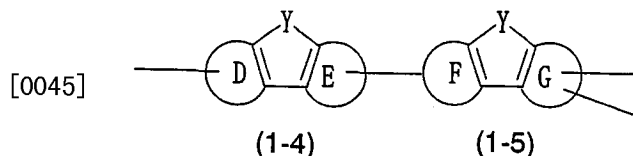
[0040] 至于由上式 (1) 表示的结构, 示例的是:

[0041] 由下式 (1-1)、(1-2) 或 (1-3) 表示的结构:



[0043] (其中, 环 A、环 B 和环 C 各自独立地表示芳族环。式 (1-1)、(1-2) 和 (1-3) 分别可以含有选自下组的取代基: 烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烯基、芳基炔基、氨基、取代的氨基、甲硅烷基、取代的甲硅烷基、卤素原子、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、酸亚胺基、一价杂环基、羧基、取代的羧基和氰基。Y 表示如上所述相同的含义),

[0044] 由下式 (1-4) 或 (1-5) 表示的结构:



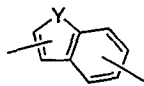
[0046] (其中, 环 D、环 E、环 F 和环 G 各自独立地表示芳族环, 其可以分别含有选自下组的取代基: 烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烯基、芳基炔基、氨基、取代的氨基、甲硅烷基、取代的甲硅烷基、卤素原子、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、酸亚胺基、一价杂环基、羧基、取代的羧基和氰基。Y 表示如上所述相同的含义), 并且优选由下式 (1-4) 或 (1-5) 表示的结构。

[0047] 考虑到高发光效率, 优选 Y 为硫原子或氧原子。

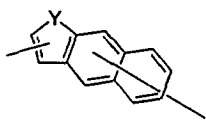
[0048] 至于在上式 (1-1)、(1-2)、(1-3)、(1-4) 和 (1-5) 中的芳环, 示例的是: 芳族烃环, 如苯环、萘环、蒽环、并四苯环、并五苯环、茈环和菲环; 杂芳环, 如吡啶环、联吡啶环、菲咯啉环、喹啉环、异喹啉环、噻吩环、呋喃环和吡咯环。

[0049] 作为未取代结构所示的式 (1-1) 的具体实例包括下列:

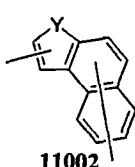
[0050]



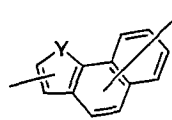
11000



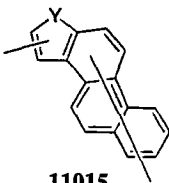
11001



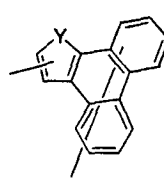
11002



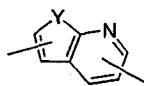
11003



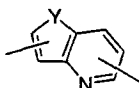
11015



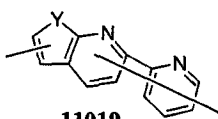
11016



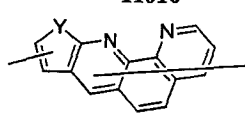
11017



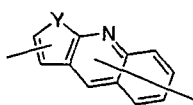
11018



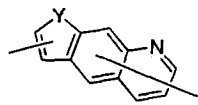
11019



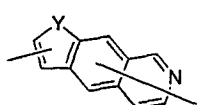
11020



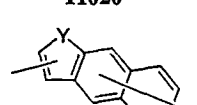
11021



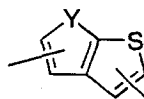
11022



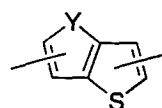
11023



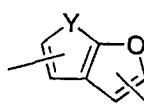
11024



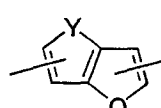
11025



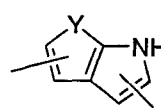
11026



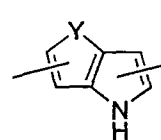
11027



11028



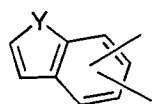
11029



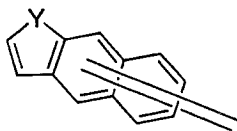
11030

[0051] 作为未取代结构所示的式(1-2)的具体实例包括下列：

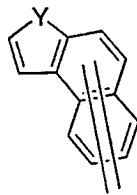
[0052]



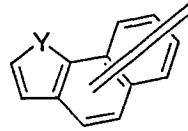
12000



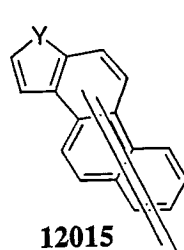
12001



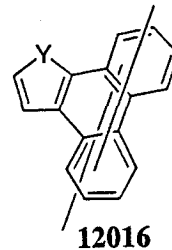
12002



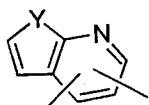
12003



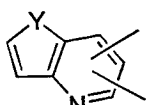
12015



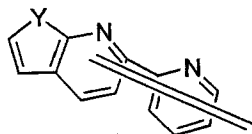
12016



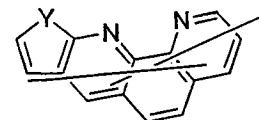
12017



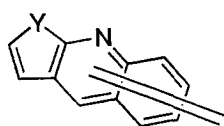
12018



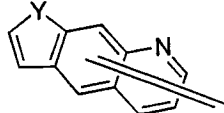
12019



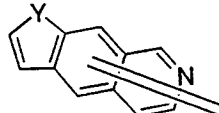
12020



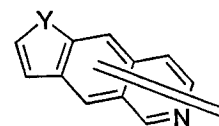
12021



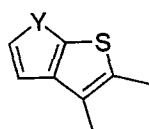
12022



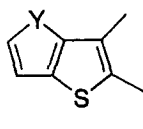
12023



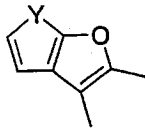
12024



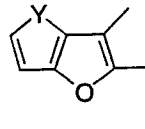
12025



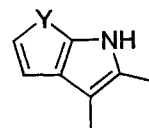
12026



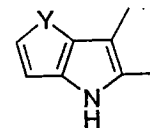
12027



12028



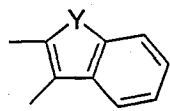
12029



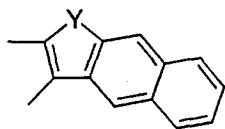
12030

[0053] 作为未取代结构所示的式(1-3)的具体实例包括下列：

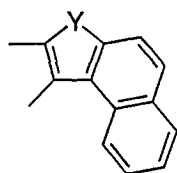
[0054]



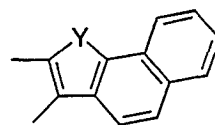
13000



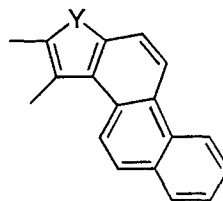
13001



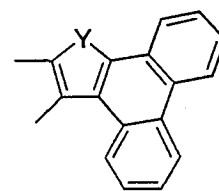
13002



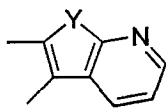
13003



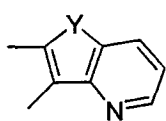
13015



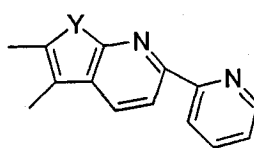
13016



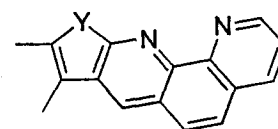
13017



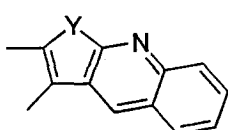
13018



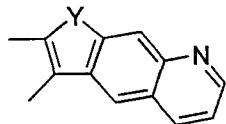
13019



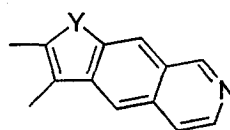
13020



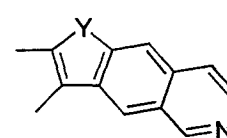
13021



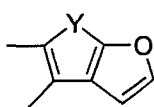
13022



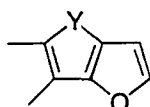
13023



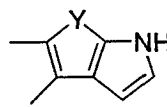
13024



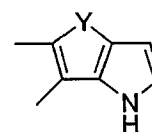
13025



13026



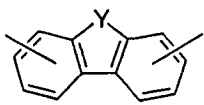
13027



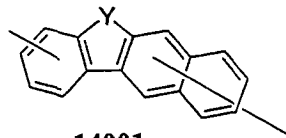
13028

[0055] 作为未取代结构所示的式(1-4)的具体实例包括下列：

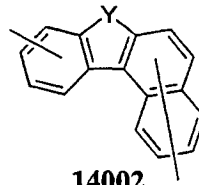
[0056]



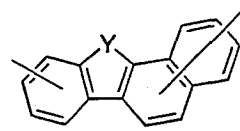
14000



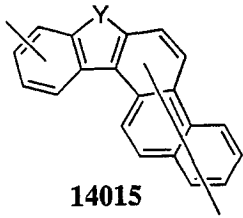
14001



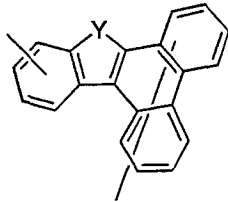
14002



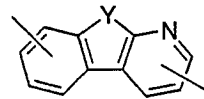
14003



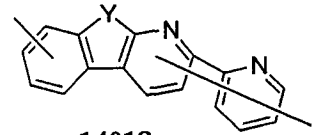
14015



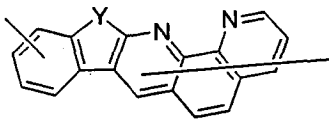
14016



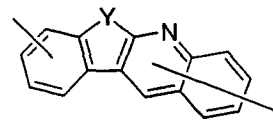
14017



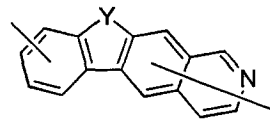
14018



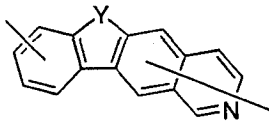
14019



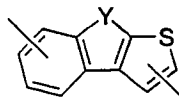
14020



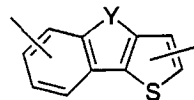
14021



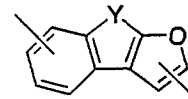
14022



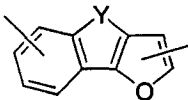
14023



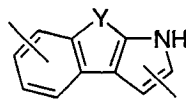
14024



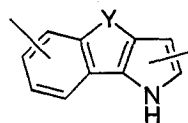
14025



14026

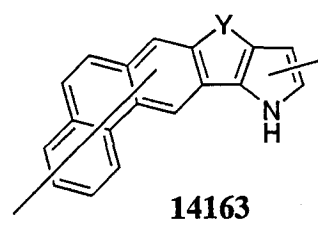
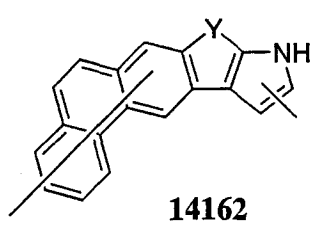
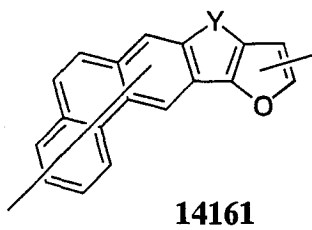
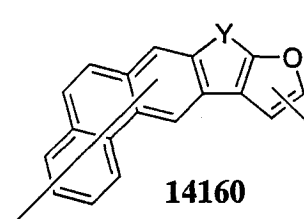
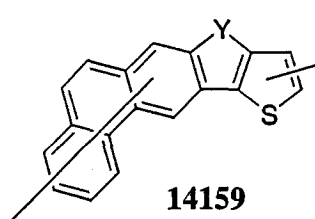
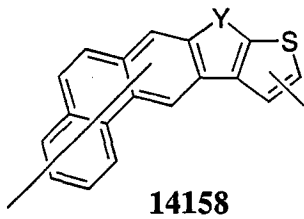
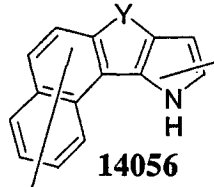
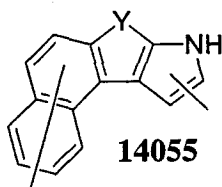
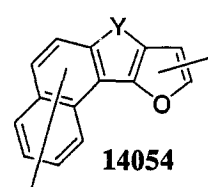
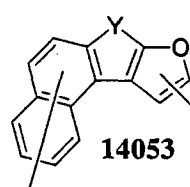
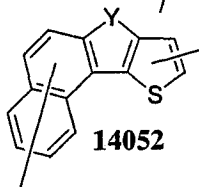
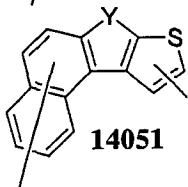
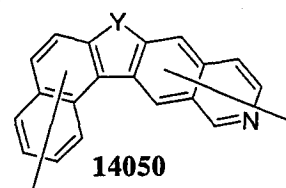
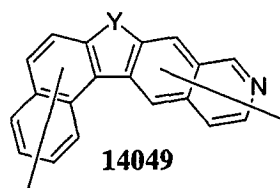
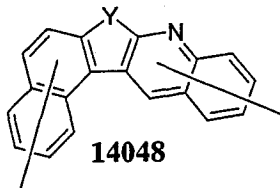
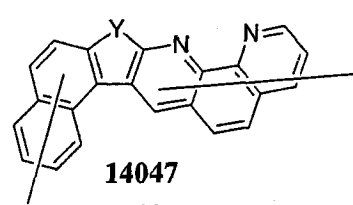
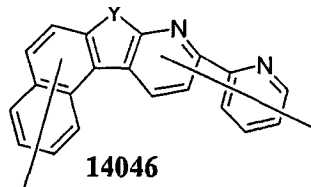
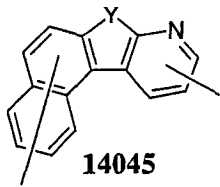


14027

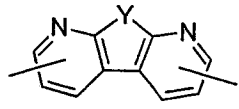


14028

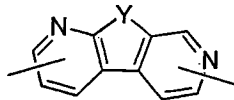
[0057]



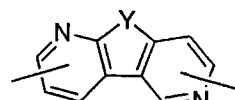
[0058]



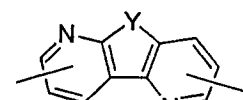
14164



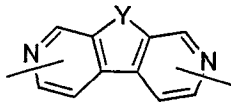
14165



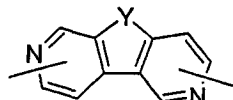
14166



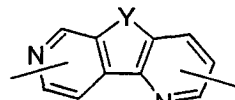
14167



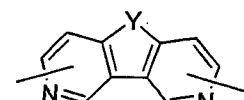
14168



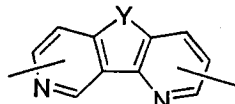
14169



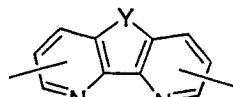
14170



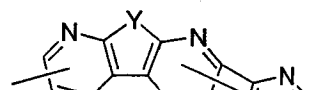
14171



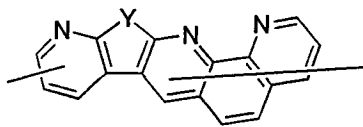
14172



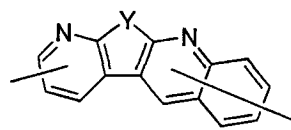
14173



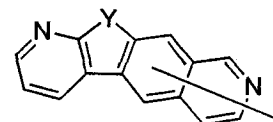
14174



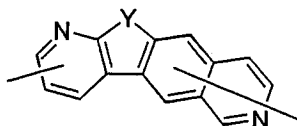
14175



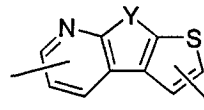
14176



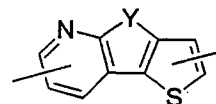
14177



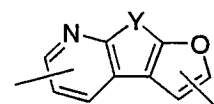
14178



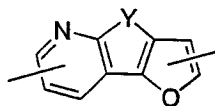
14179



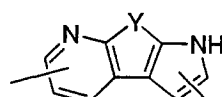
14180



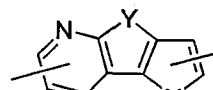
14181



14181

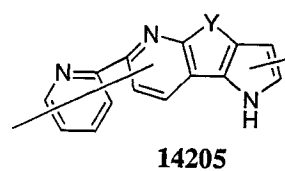
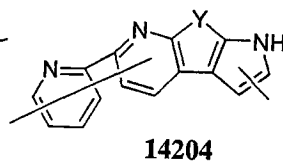
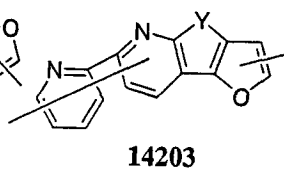
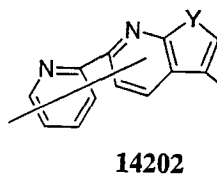
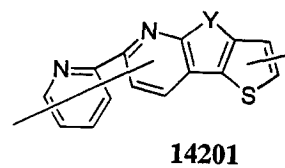
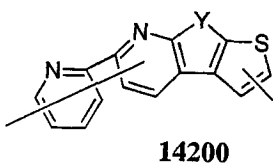
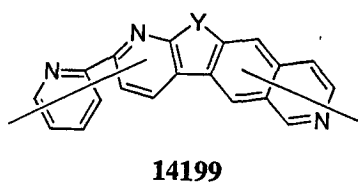
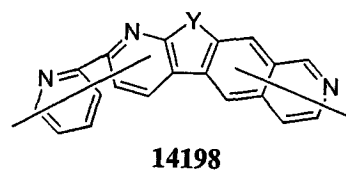
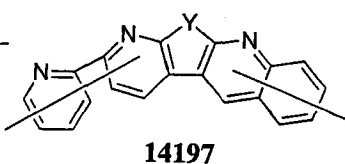
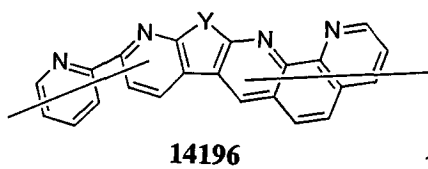
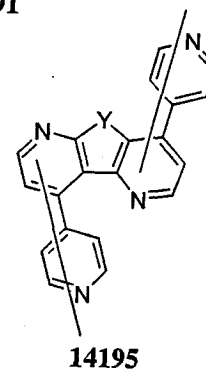
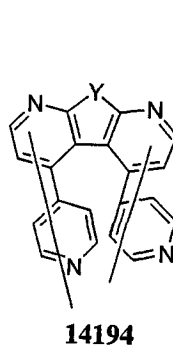
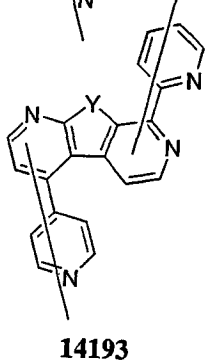
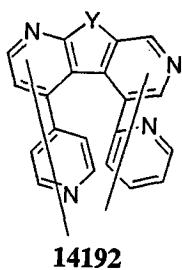
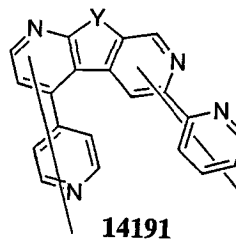
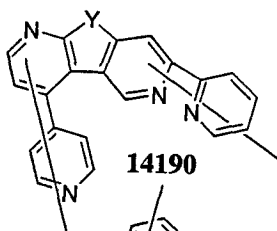
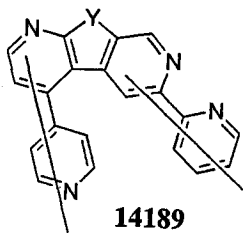
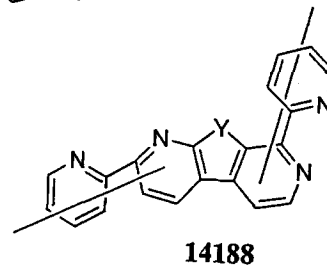
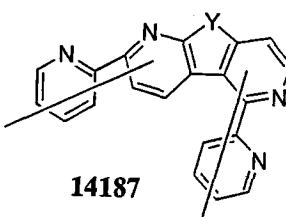
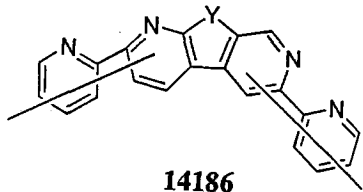
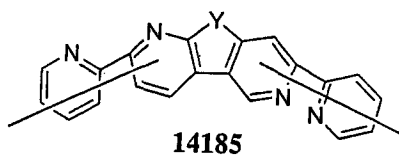
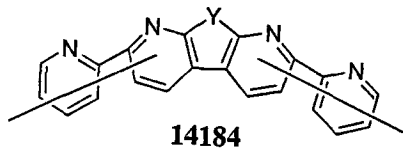


14182

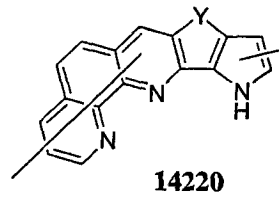
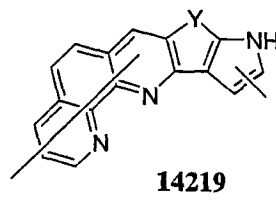
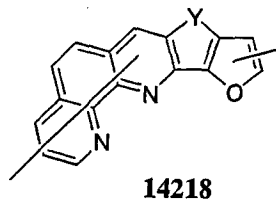
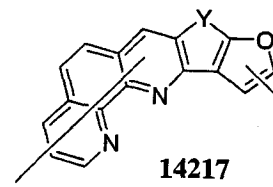
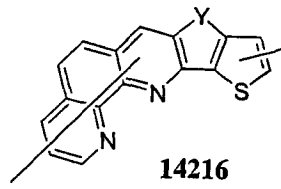
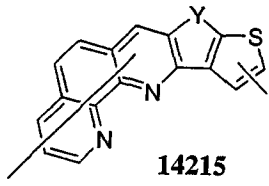
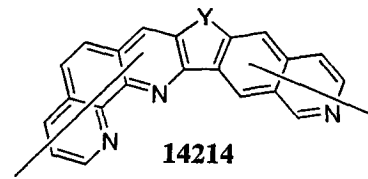
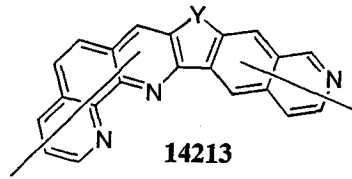
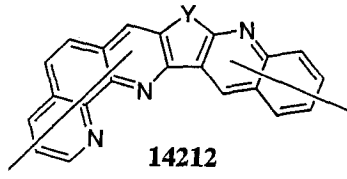
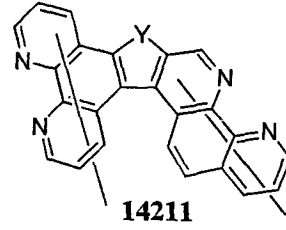
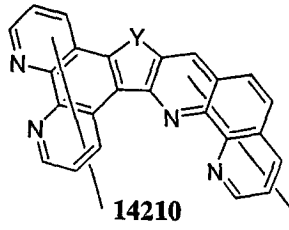
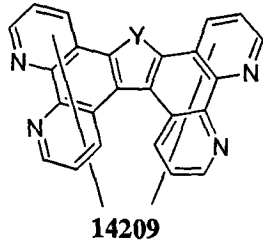
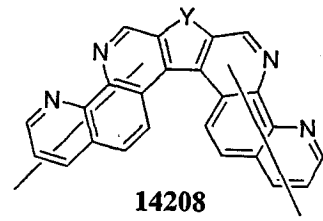
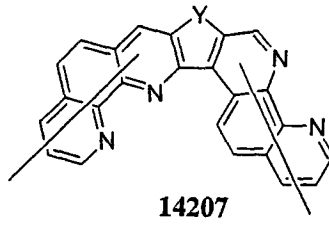
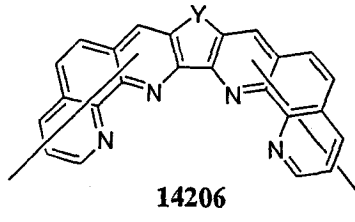


14183

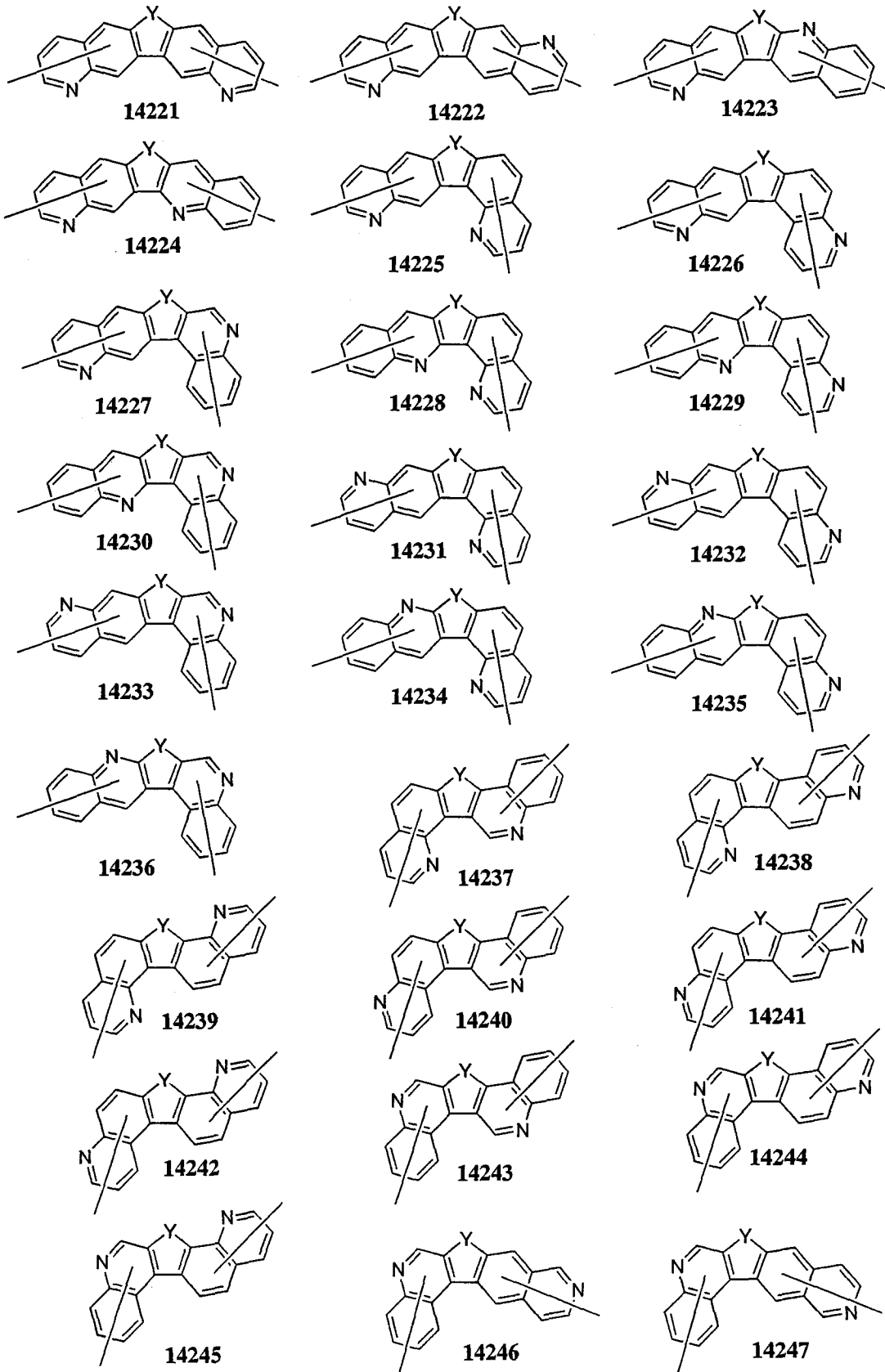
[0059]



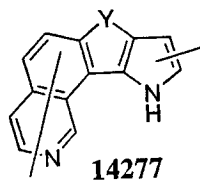
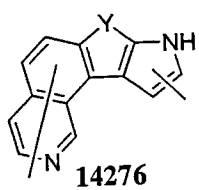
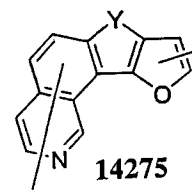
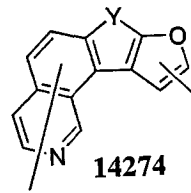
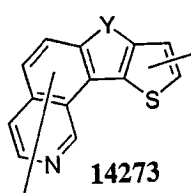
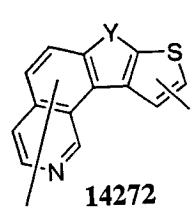
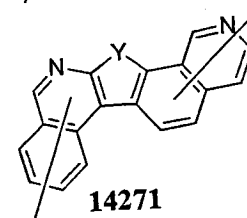
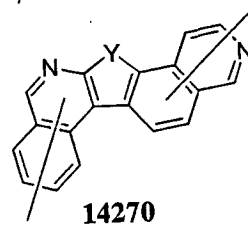
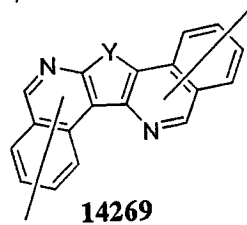
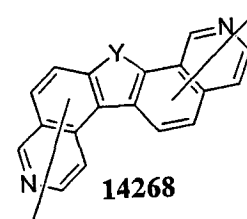
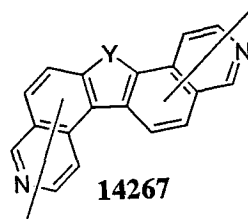
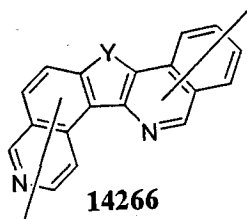
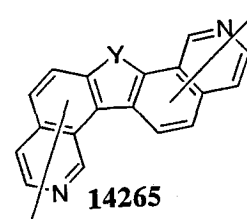
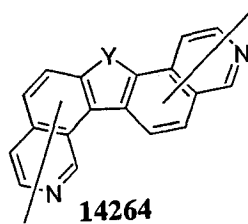
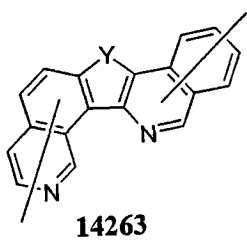
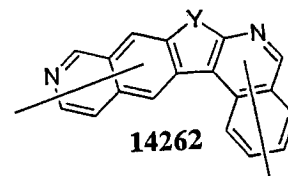
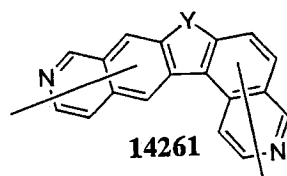
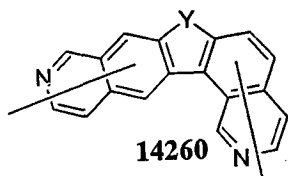
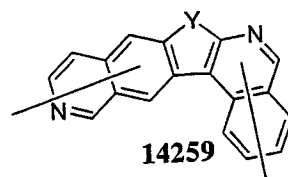
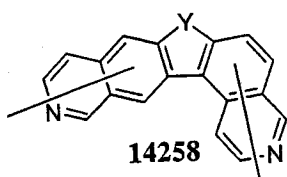
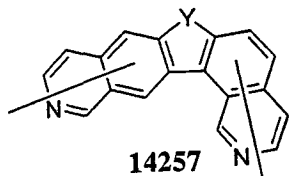
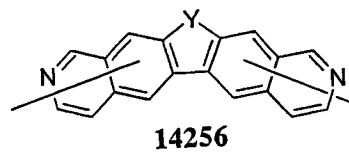
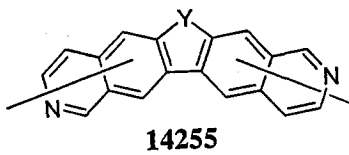
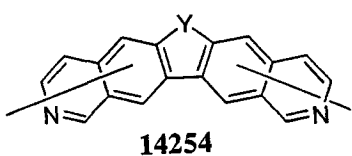
[0060]



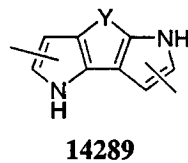
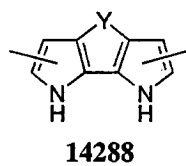
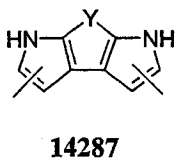
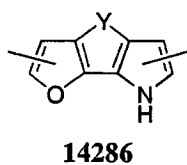
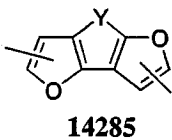
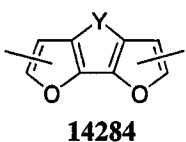
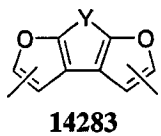
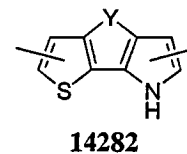
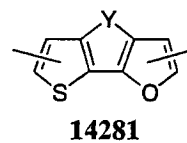
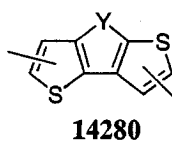
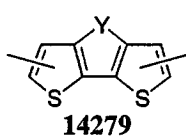
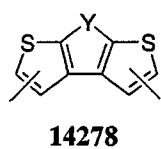
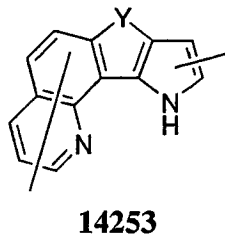
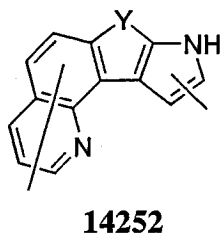
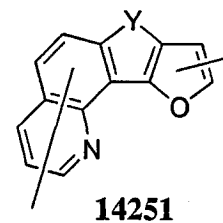
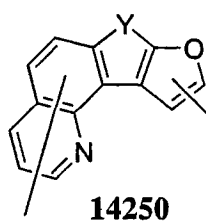
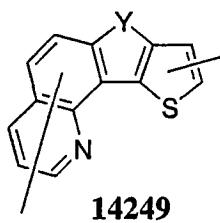
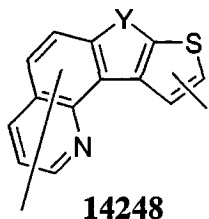
[0061]



[0062]

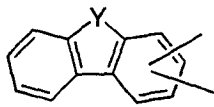


[0063]

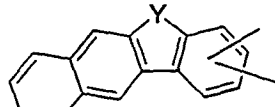


[0064] 作为未取代结构所示的式(1-5)的具体实例包括下列：

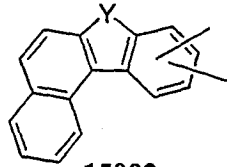
[0065]



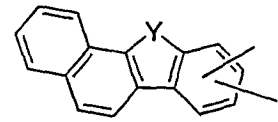
15000



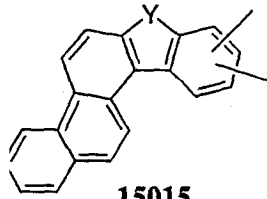
15001



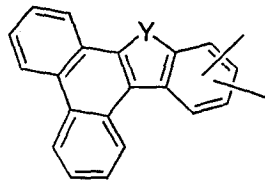
15002



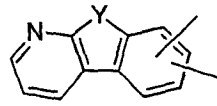
15003



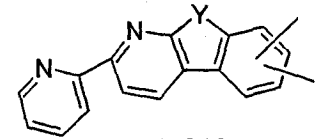
15015



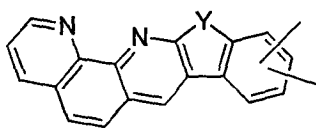
15016



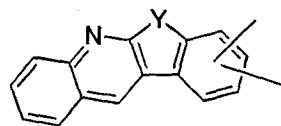
15017



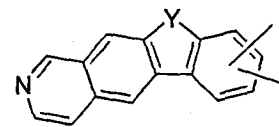
15018



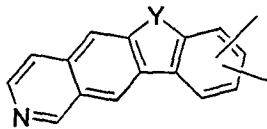
15019



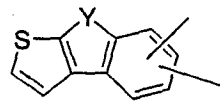
15020



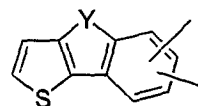
15021



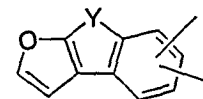
15022



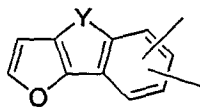
15023



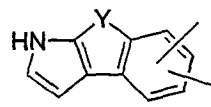
15024



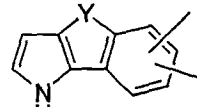
15025



15026

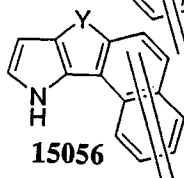
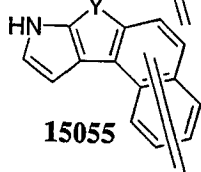
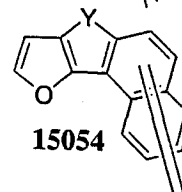
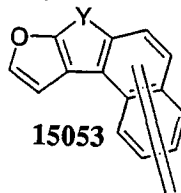
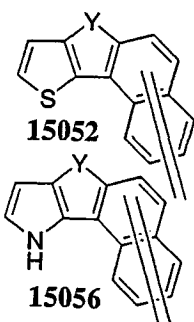
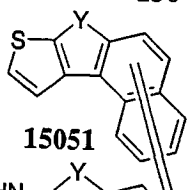
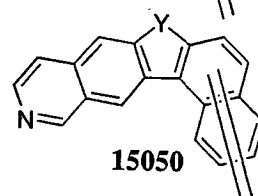
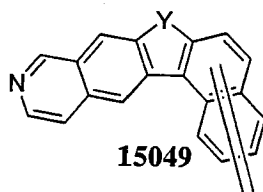
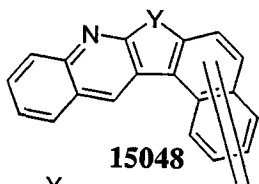
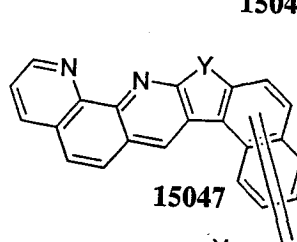
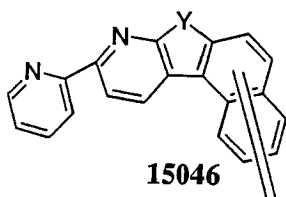
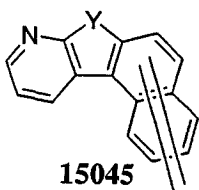
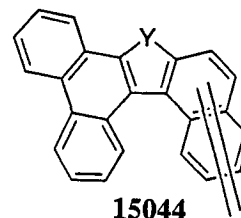
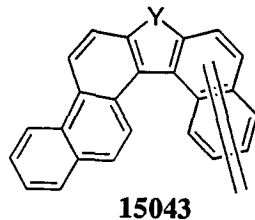
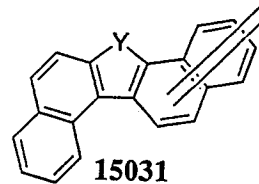
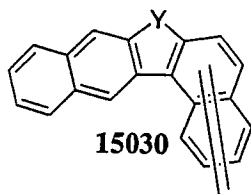
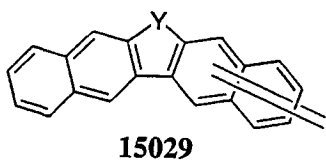


15027

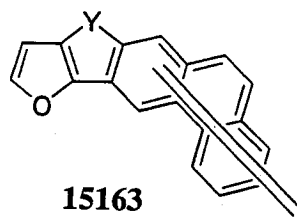
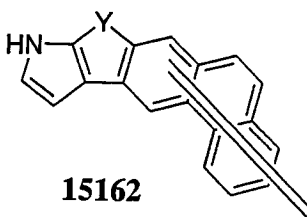
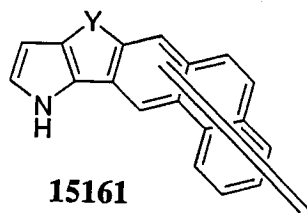
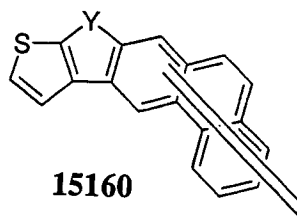
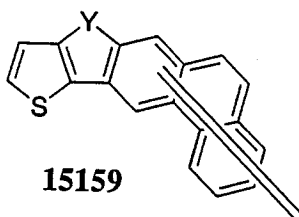
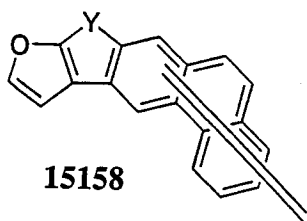


15028

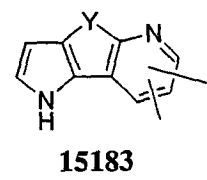
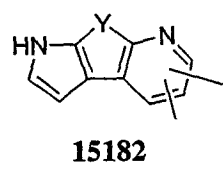
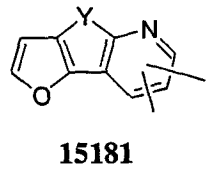
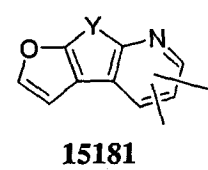
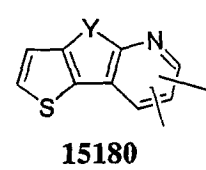
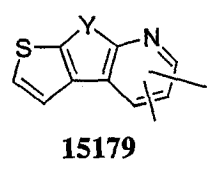
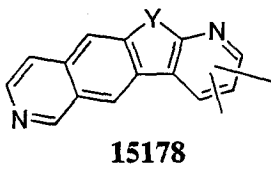
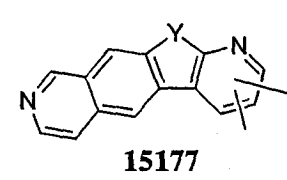
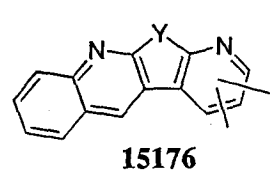
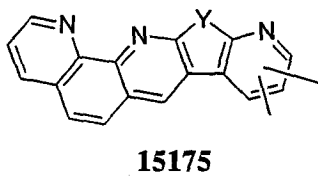
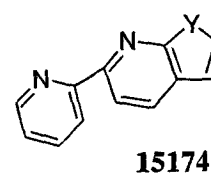
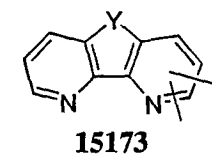
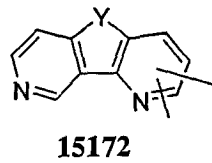
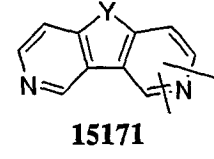
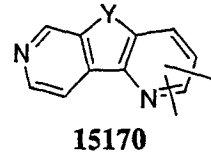
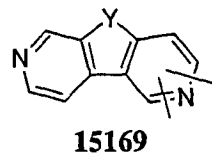
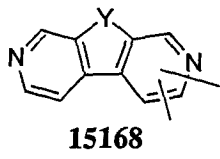
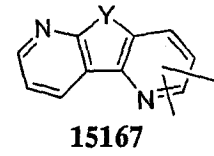
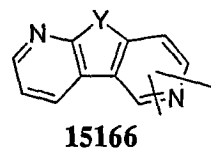
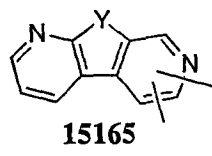
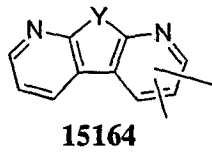
[0066]



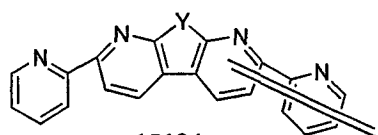
[0067]



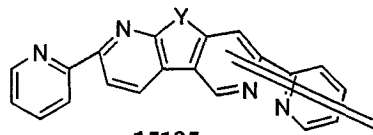
[0068]



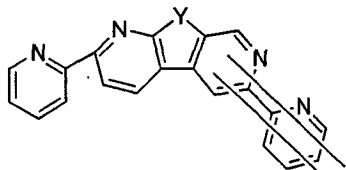
[0069]



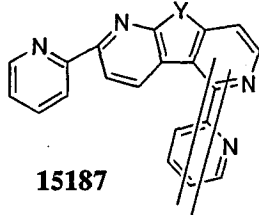
15184



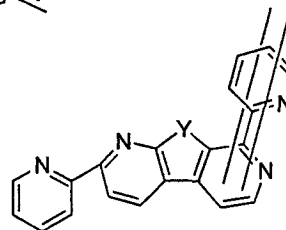
15185



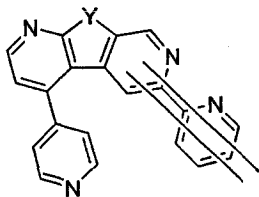
15186



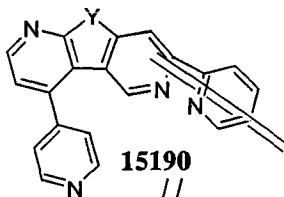
15187



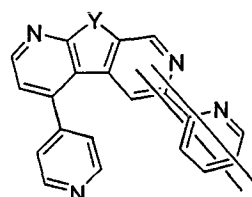
15188



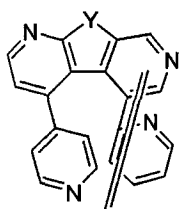
15189



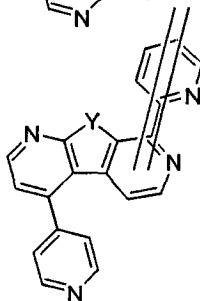
15190



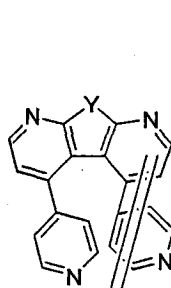
15191



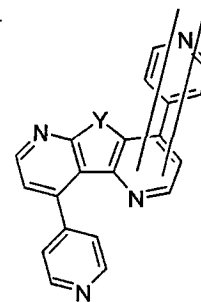
15192



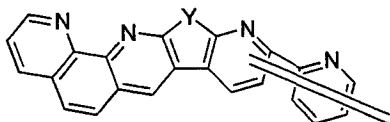
15193



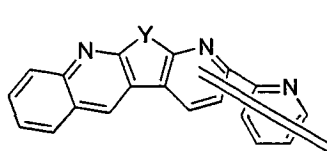
15194



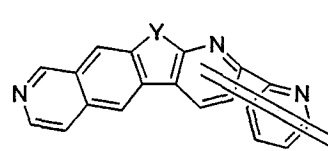
15195



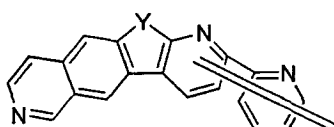
15196



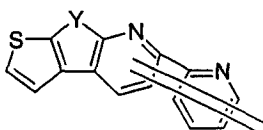
15197



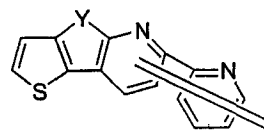
15198



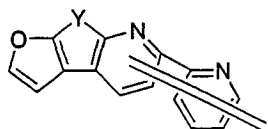
15199



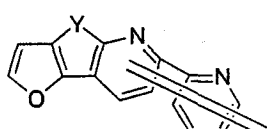
15200



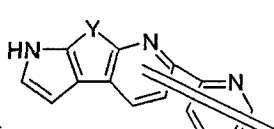
15201



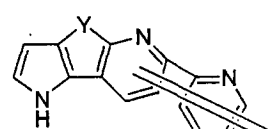
15202



15203

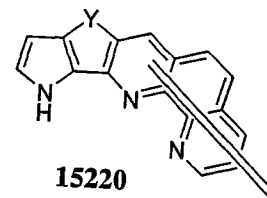
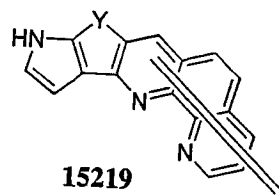
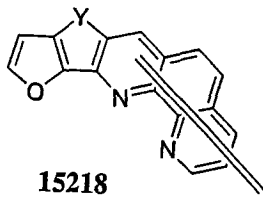
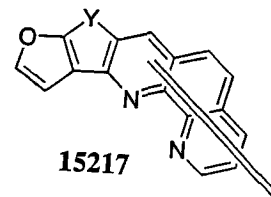
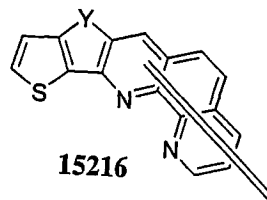
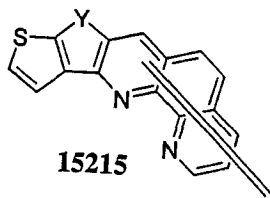
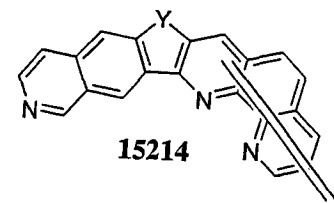
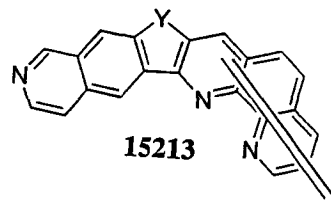
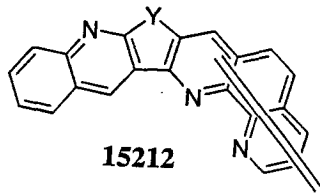
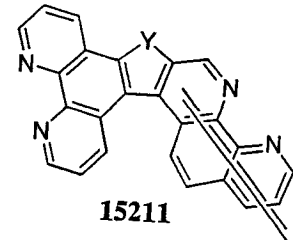
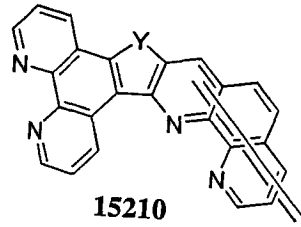
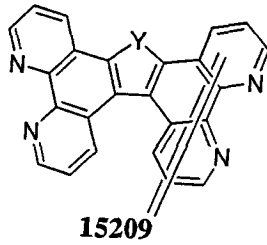
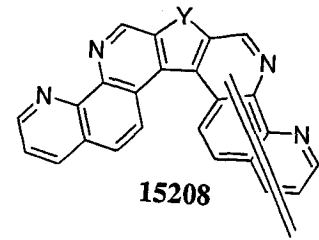
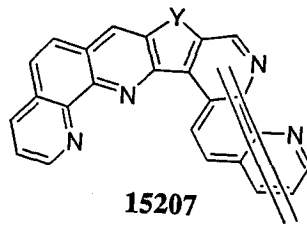
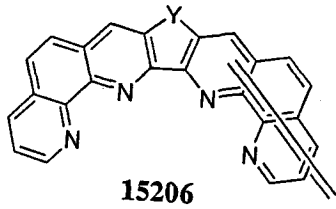


15204

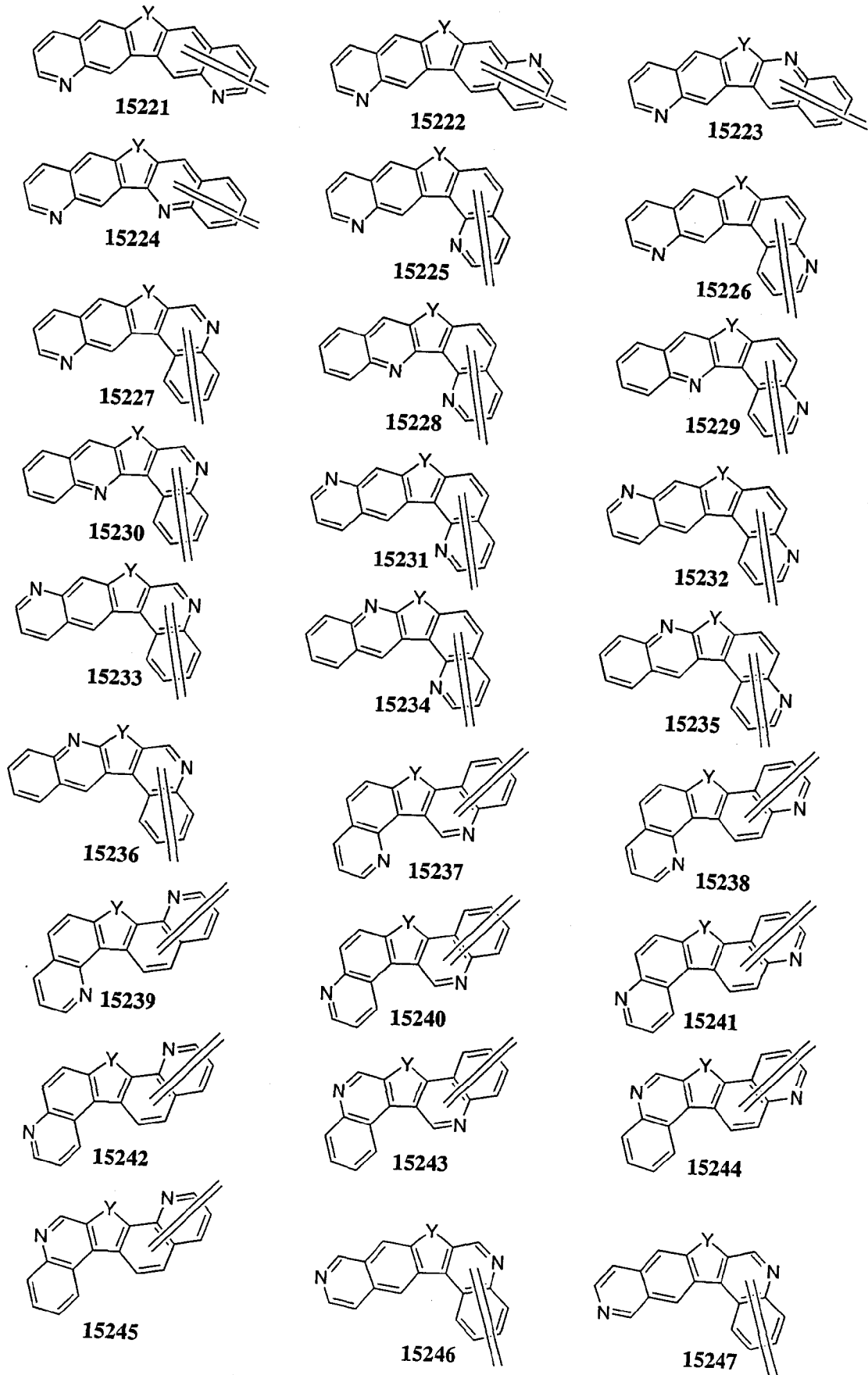


15205

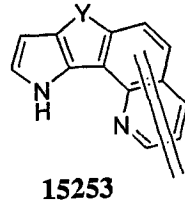
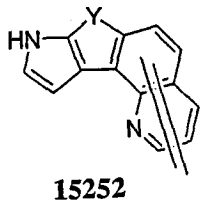
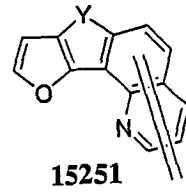
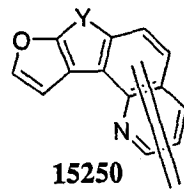
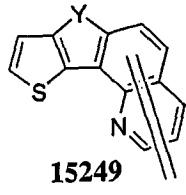
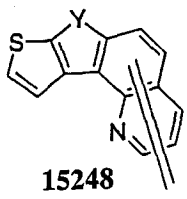
[0070]



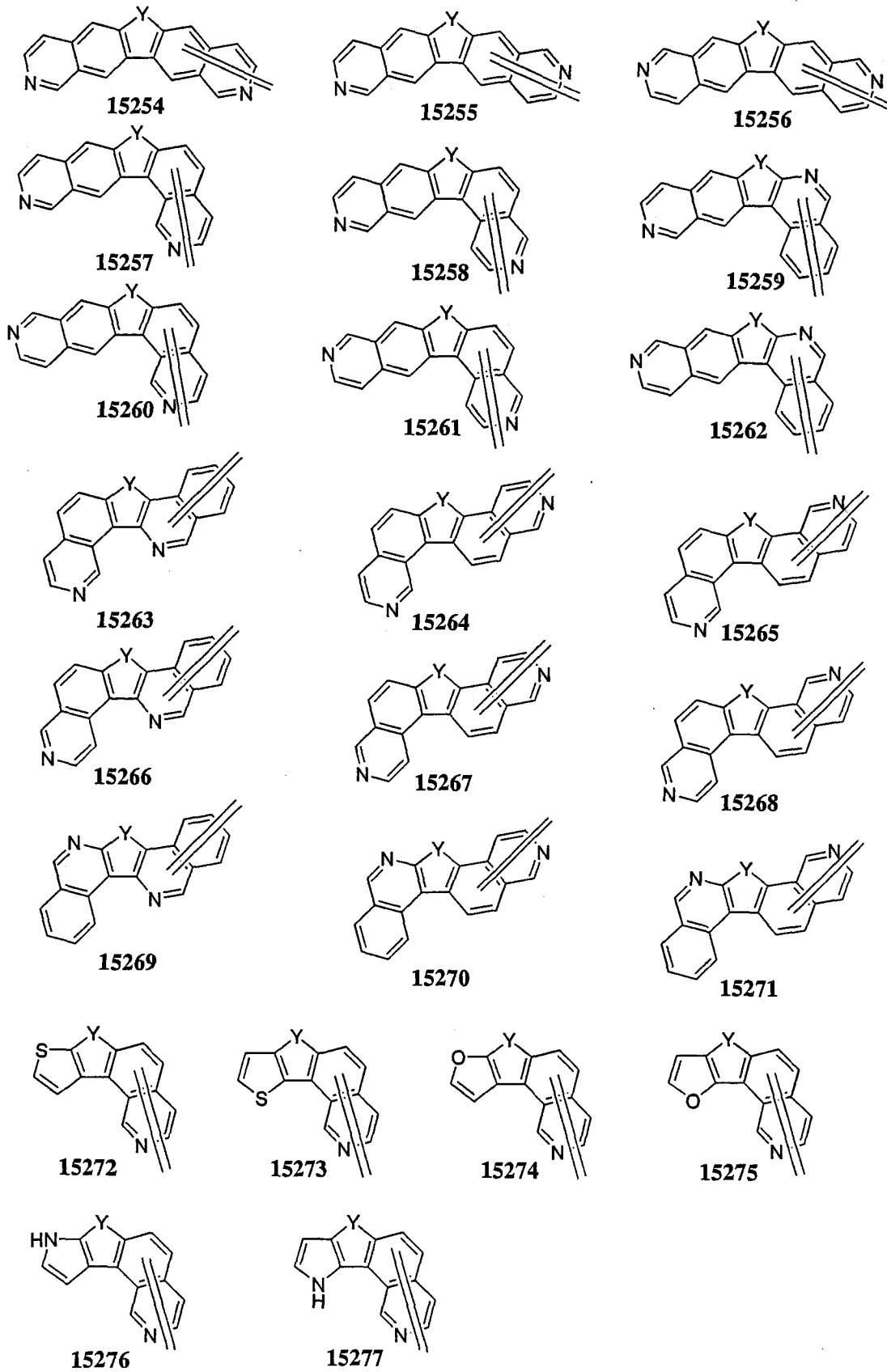
[0071]



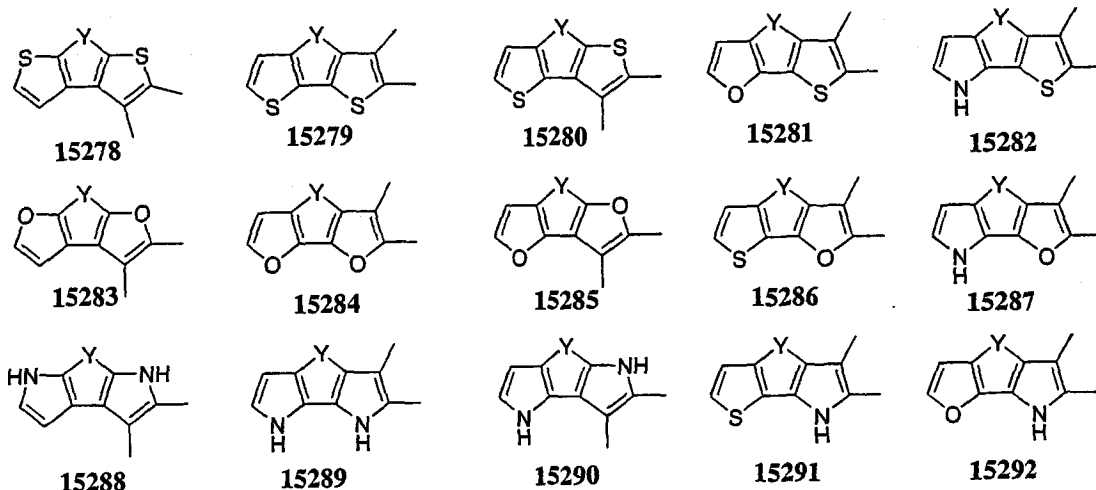
[0072]



[0073]

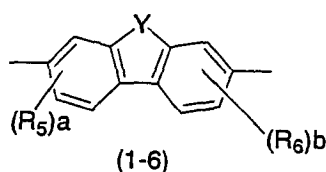


[0074]



[0075] 上式 (1) 中, 优选 (1-4) 和 (1-5), 并且更优选由下式 (1-6) 表示的结构:

[0076]

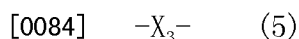
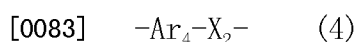
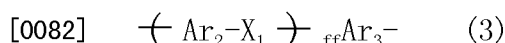
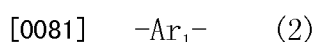


[0077] (其中, R_5 和 R_6 各自独立地表示烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烯基、芳基炔基、氨基、取代的氨基、甲硅烷基、取代的甲硅烷基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、酸亚胺基、一价杂环基、羧基或取代的羧基。a 和 b 各自独立地表示 0 至 3 的整数。当 R_5 和 R_6 存在多个时, 它们可以相同或不同。Y 表示如上所述相同的含义)。

[0078] 在式 (1-6) 中, 优选 Y 为 O 或 S。

[0079] 考虑到在溶剂中的溶解度, 优选 a+b 为 1 或更大。

[0080] 本发明的发光材料中使用的聚合物化合物可以还含有下式 (2)、(3)、(4) 或 (5) 的重复单元:



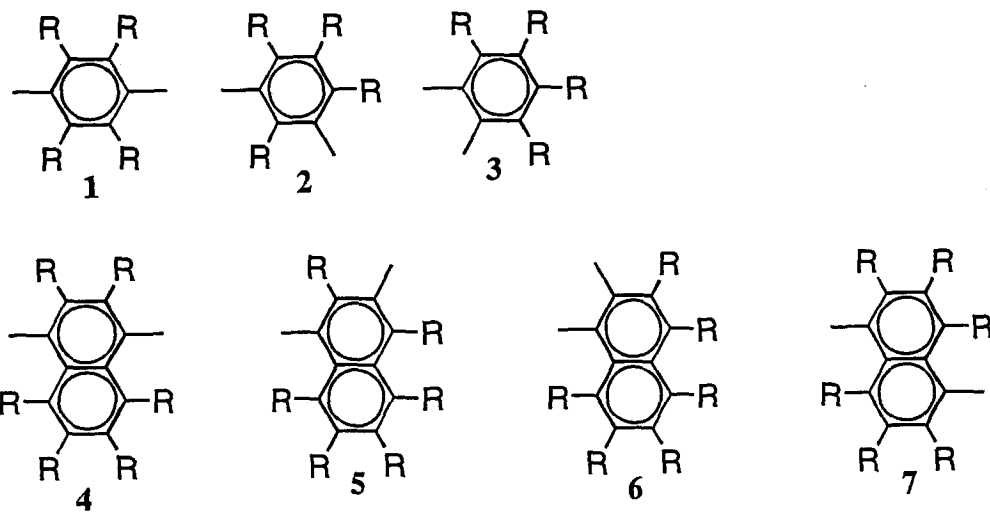
[0085] (其中, Ar_1 、 Ar_2 、 Ar_3 和 Ar_4 各自独立地表示亚芳基、二价杂环基, 或具有金属配位结构的二价基团。 X_1 、 X_2 和 X_3 各自独立地表示 $-CR_{15} = CR_{16}-$ 、 $-C \equiv C-$ 、 $-N(R_{17})-$ 或 $-(SiR_{18}R_{19})_m-$ 。 R_{15} 和 R_{16} 各自独立地表示氢原子、烷基、芳基、一价杂环基、羧基、取代的羧基或氰基。 R_{17} 、 R_{18} 和 R_{19} 各自独立地表示氢原子、烷基、芳基、一价杂环基、芳基烷基或取代的氨基。 ff 表示 1 或 2。 m 表示 1 至 12 的整数。当分别存在多个 R_{15} 、 R_{16} 、 R_{17} 、 R_{18} 和 R_{19} 时, 它们可以相同或不同)。

[0086] 亚芳基是其中去除芳族烃的两个氢原子的原子团, 并且通常, 碳原子数为约 6 至 60, 优选为 6 至 20。芳族烃包括含有稠环、独立的苯环或通过基团如直接键或亚乙烯基连接的两个或多个稠环的那些。

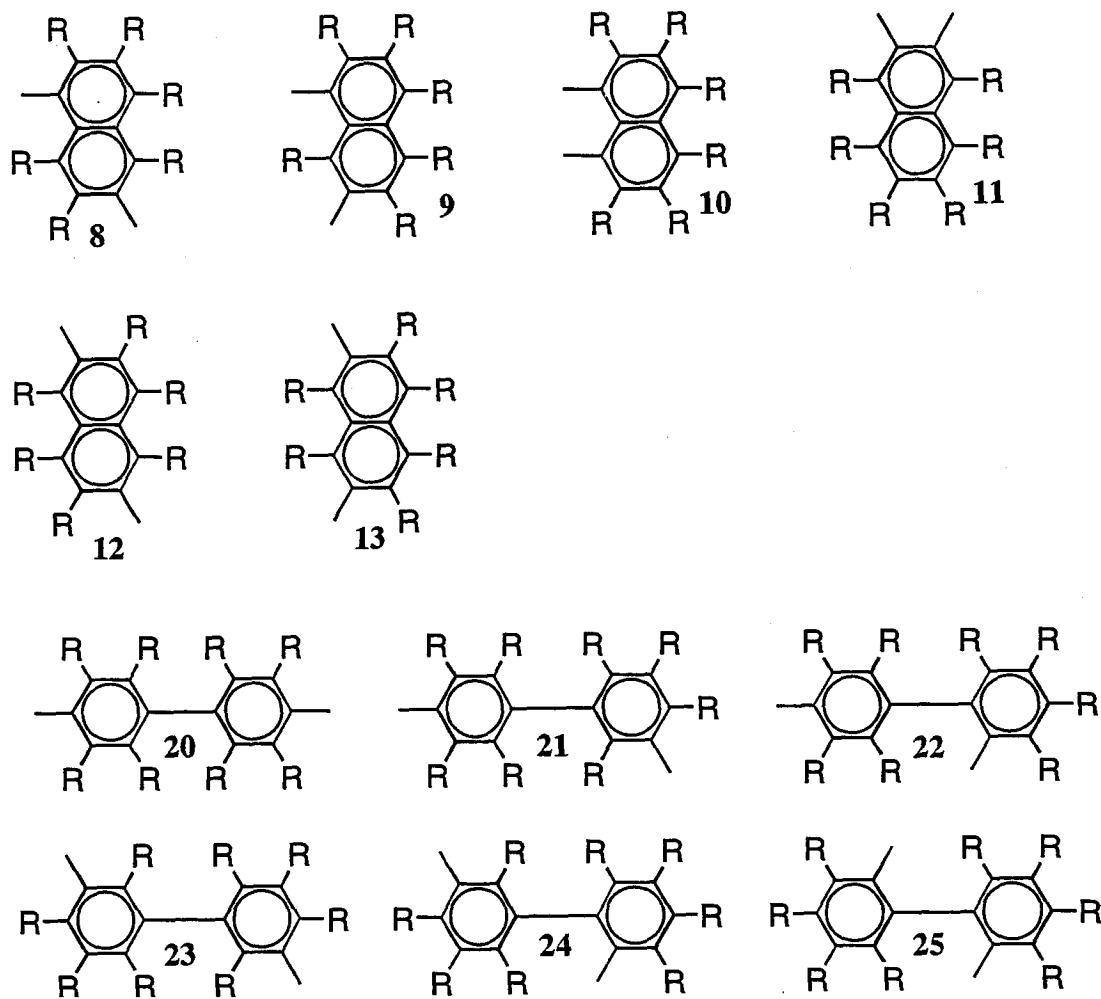
[0087] 亚芳基的实例包括亚苯基 (例如, 下式 1-3)、萘二基 (下式 4-13)、亚蒽基 (下

式 14-19)、亚联苯基 (下式 20-25)、三联苯-二基 (下式 26-28)、稠环化合物基团 (下式 29-35)、芴-二基 (下式 36-38)、1,2-二苯乙烯-二基 (下式 A-D)、二 (1,2-二苯乙烯)-二基 (下式 E、F) 等。它们中, 优选亚苯基、亚联苯基和 1,2-二苯乙烯-二基。

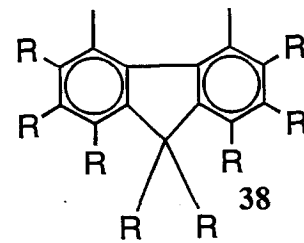
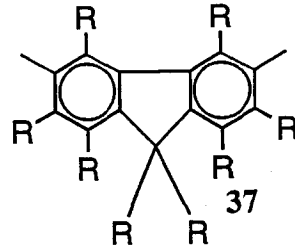
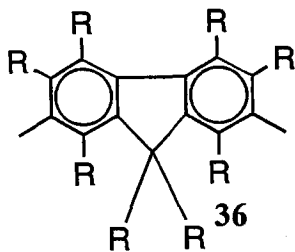
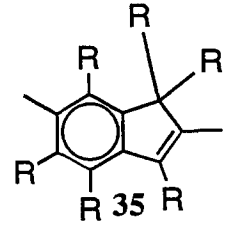
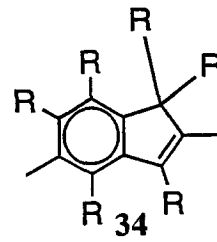
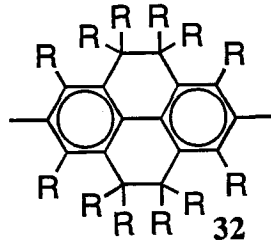
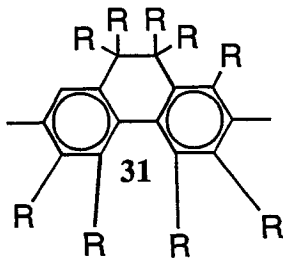
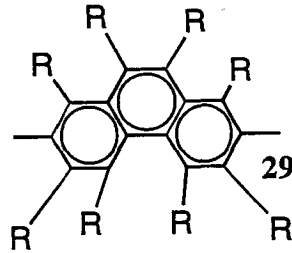
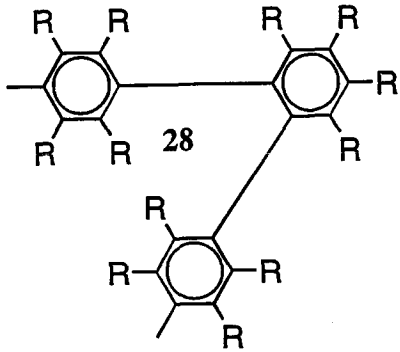
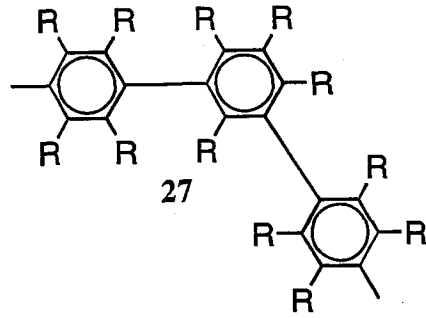
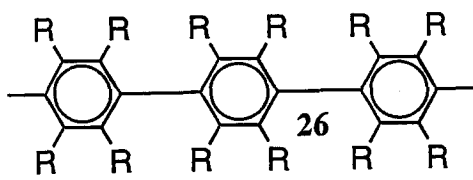
[0088]



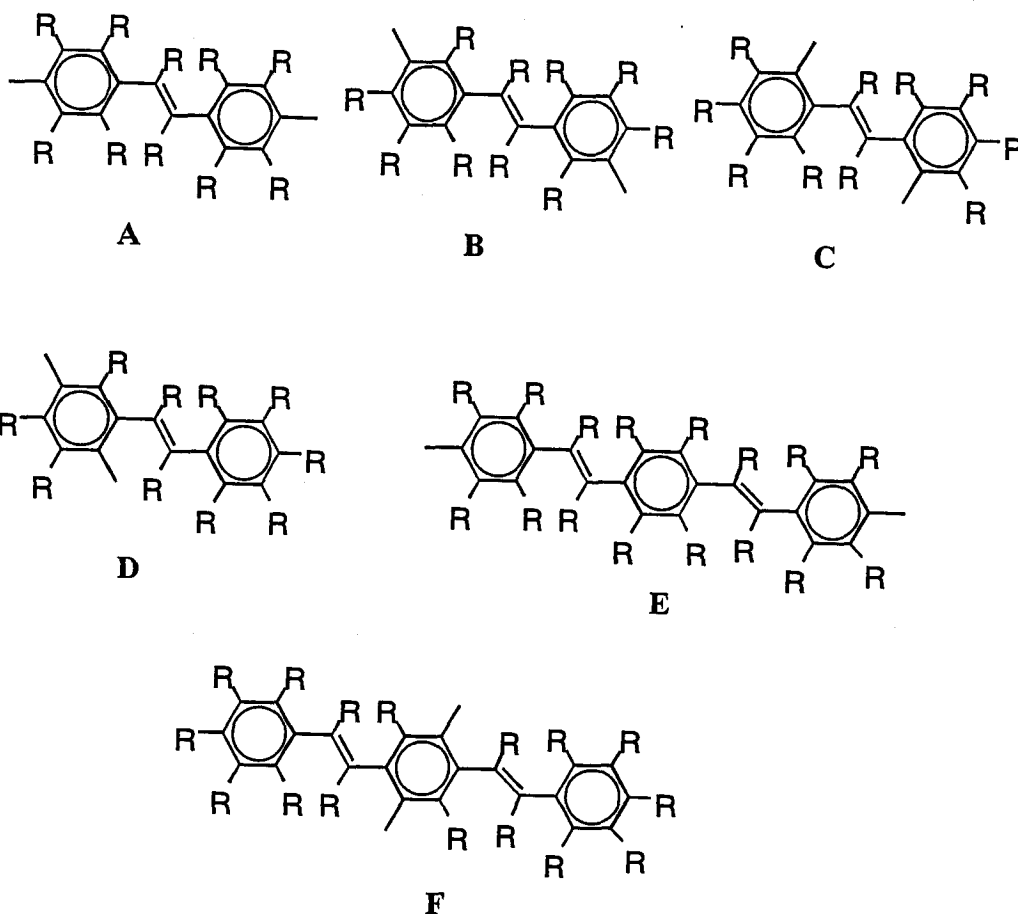
[0089]



[0090]



[0091]



[0092] 二价杂环基是指其中从杂环化合物去除两个氢原子的原子团,并且碳原子数通常为约 3 至 60。

[0093] 杂环化合物是指具有环状结构的有机化合物,其中在环状结构中含有至少一个杂原子如氧、硫、氮、磷、硼等作为不同于碳原子的元素。

[0094] 二价杂环基的实例包括下列:

[0095] 含有氮作为杂原子的二价杂环基:吡啶-二基(下式 39-44)、二氮杂亚苯基(下式 45-48)、喹啉二基(下式 49-63)、喹喔啉二基(下式 64-68)、吲哚二基(下式 69-72)、联吡啶二基(下式 73-75)、菲咯啉二基(下式 76-78)等;

[0096] 具有含硅、氮、硒等作为杂原子的芴结构的基团(下式 79-93);

[0097] 含硅、氮、硫、硒等作为杂原子的 5 元杂环基(下式 94-98);

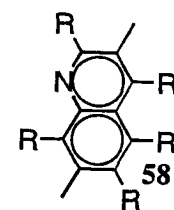
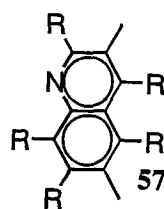
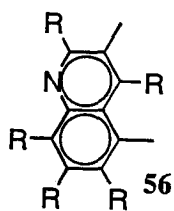
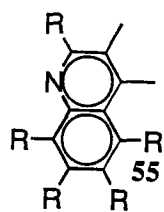
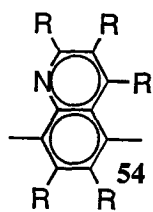
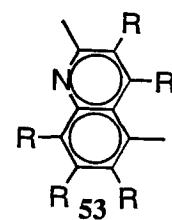
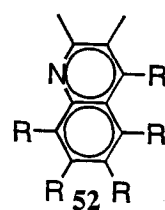
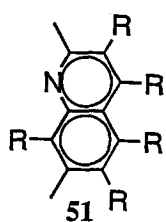
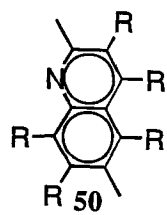
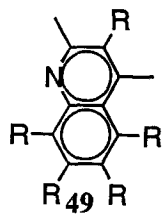
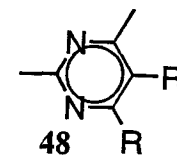
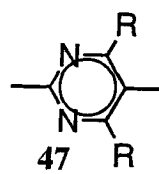
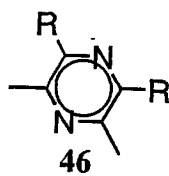
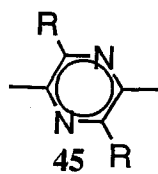
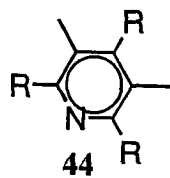
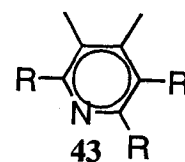
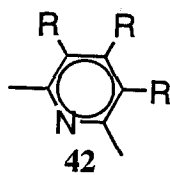
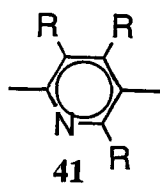
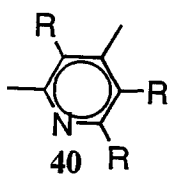
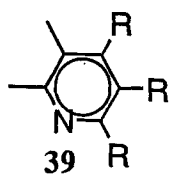
[0098] 含硅、氮、硒等作为杂原子的稠合 5 元杂环基(下式 99-110);

[0099] 含硅、氮、硫、硒等作为杂原子的 5 元杂环基,其在杂原子的位置处连接形成二聚体或低聚体(下式 111-112);

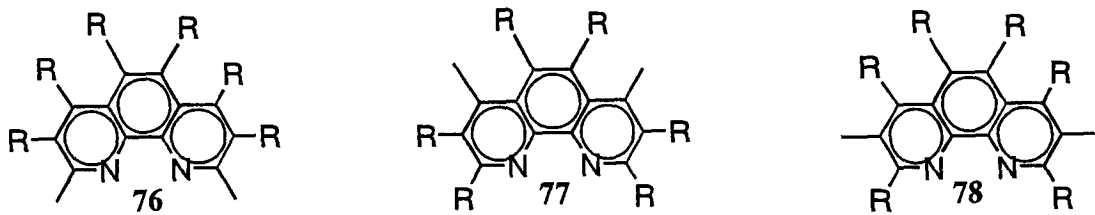
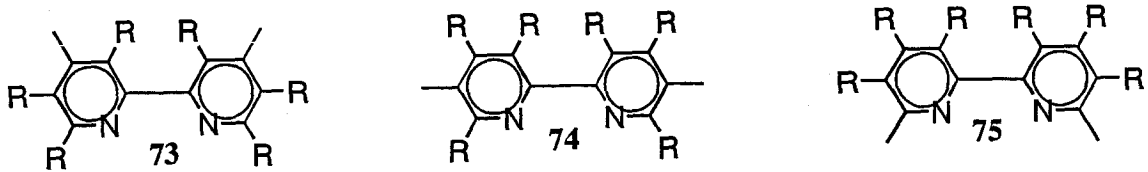
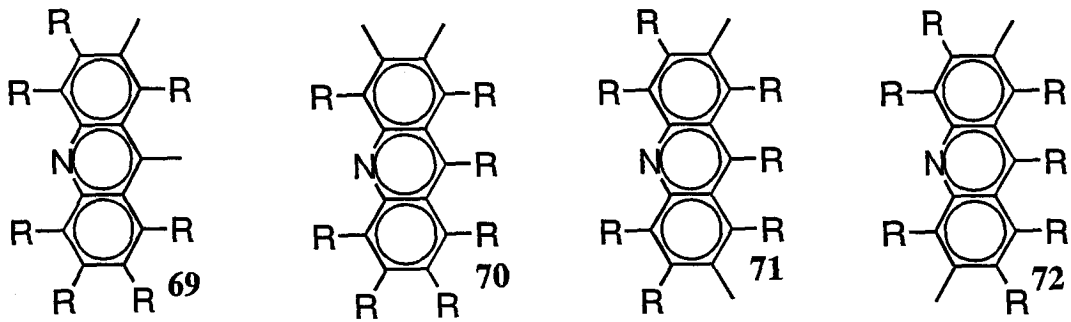
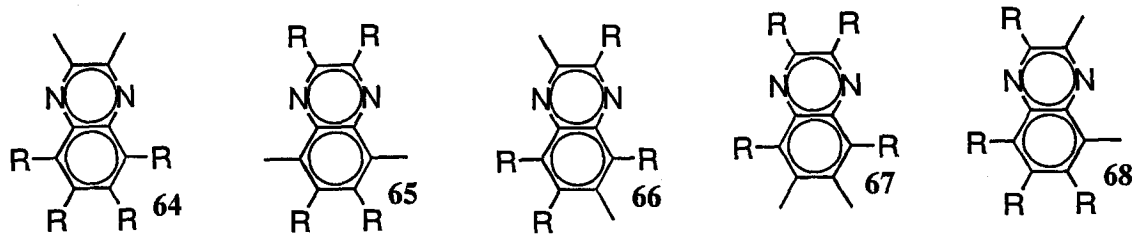
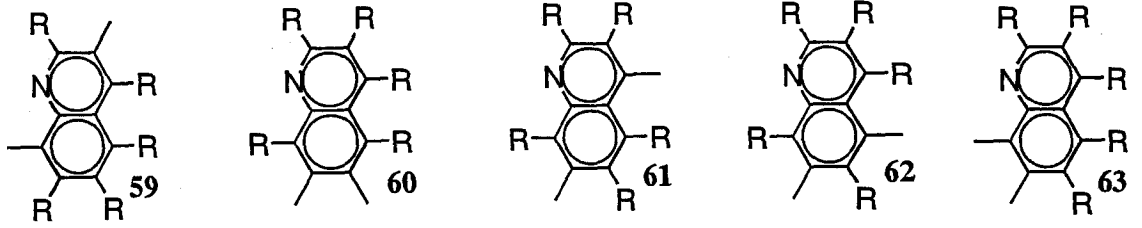
[0100] 含硅、氮、硫、硒作为杂原子的 5 元杂环基,其在杂原子的位置处与苯基连接(下式 113-119);和

[0101] 含氮、氧、硫作为杂原子的 5 元杂环基组,在所述杂环基组上,苯基、呋喃基或噻吩基被取代(下式 120-125);

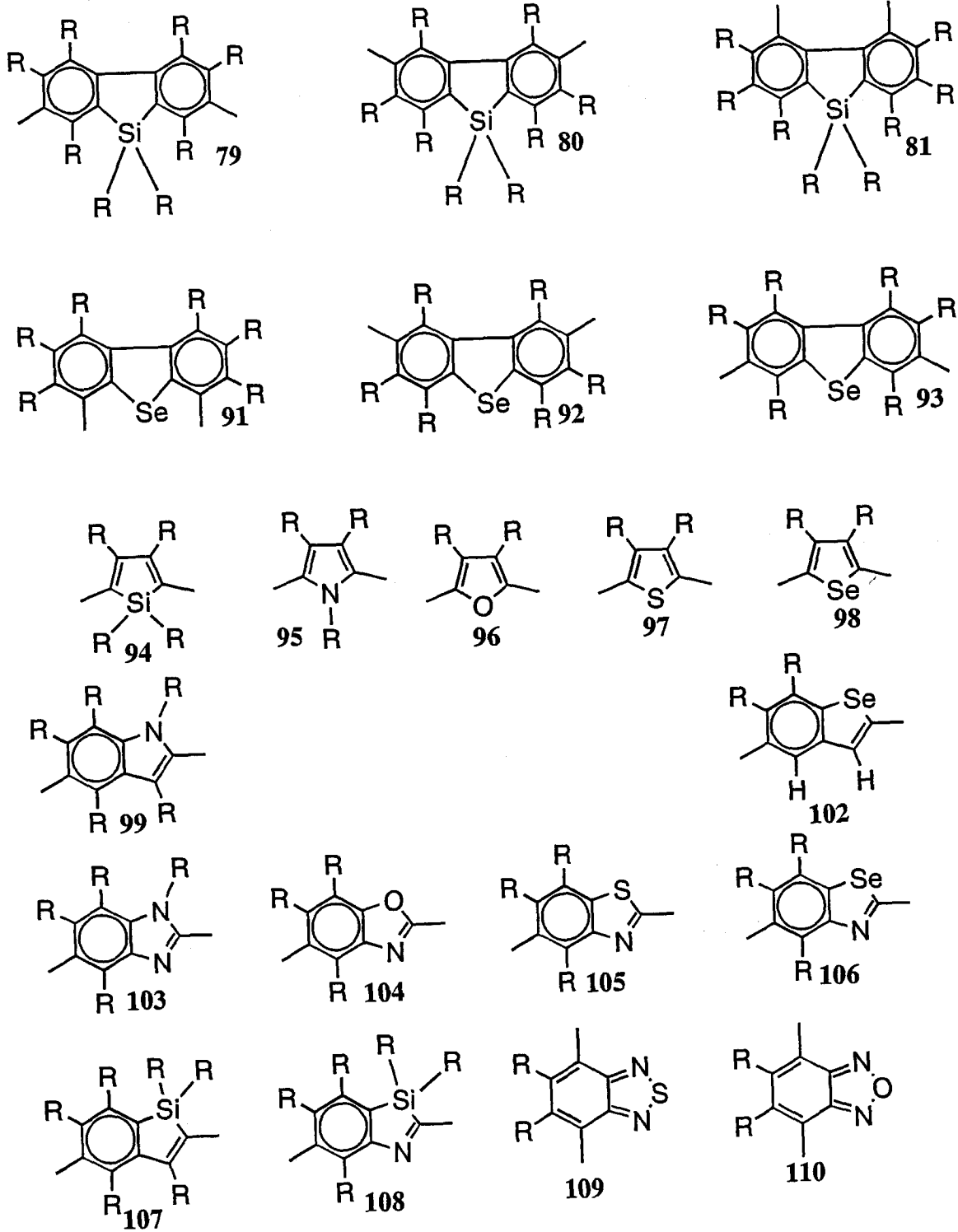
[0102]



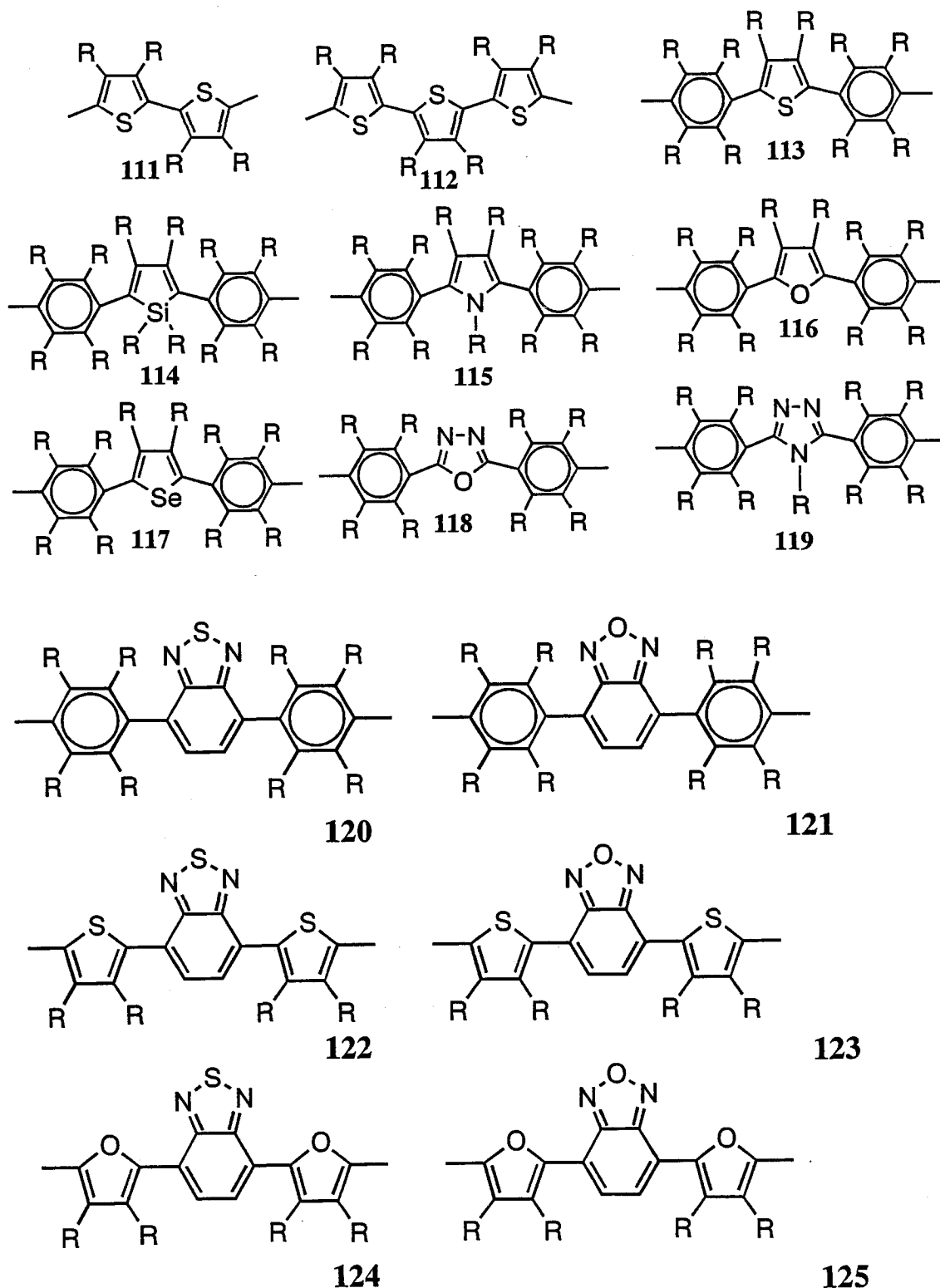
[0103]



[0104]



[0105]



[0106] 上式 1-125 的实例中, R 各自独立地表示氢原子、烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烯基、芳基炔基、氨基、取代的氨基、甲硅烷基、取代的甲硅烷基、卤素原子 (例如, 氯、溴、碘)、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、酸亚胺基、一价杂环基、羧基、取代的羧基或氰基。在式 1-125 的基团中含有的碳原子可以被氮原子、氧原子或硫原子取代, 并且氢原子可以被氟原子取代。

[0107] 在上式 (1) 至 (12)、(1-1) 至 (1-10), 和上面的实例中的烷基、烷氧基、烷硫基、芳

基、芳氧基、芳硫基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烯基、芳基炔基、取代的氨基、取代的甲硅烷基、卤素原子、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、酸亚胺基、一价杂环基、羧基和取代的羧基,表示如上所述相同的含义。

[0108] 烷基可以是直链、支链或环状烷基中的任何一种。碳原子数通常约为 1 至 20,优选为 3 至 20,并且其具体实例包括甲基、乙基、丙基、异丙基、丁基、异丁基、叔丁基、戊基、己基、环己基、庚基、辛基、2-乙基己基、壬基、癸基、3,7-二甲基辛基、十二烷基、三氟甲基、五氟乙基、全氟丁基、全氟己基、全氟辛基等;并且优选戊基、己基、辛基、2-乙基己基、癸基和 3,7-二甲基辛基。

[0109] 烷氧基可以是直链、支链或环状烷氧基中的任何一种。碳原子数通常约为 1 至 20,优选为 3 至 20,并且其具体实例包括甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、丁氧基、异丁氧基、叔丁氧基、戊氧基、己氧基、环己氧基、庚氧基、辛氧基、2-乙基己氧基、壬氧基、癸氧基、3,7-二甲基辛氧基、十二烷氧基、三氟甲氧基、五氟乙氧基、全氟丁氧基、全氟己氧基、全氟辛氧基、甲氧基甲基氧基、2-甲氧基乙基氧基等;并且优选戊氧基、己氧基、辛氧基、2-乙基己氧基、癸氧基和 3,7-二甲基辛氧基。

[0110] 烷硫基可以是直链、支链或环状烷硫基中的任何一种。碳原子数通常约为 1 至 20,优选为 3 至 20,并且其具体实例包括甲硫基、乙硫基、丙硫基、异丙硫基、丁硫基、异丁硫基、叔丁硫基、戊硫基、己硫基、环己硫基、庚硫基、辛硫基、2-乙基己硫基、壬硫基、癸硫基、3,7-二甲基辛硫基、十二烷硫基、三氟甲硫基等;并且优选戊硫基、己硫基、辛硫基、2-乙基己硫基、癸硫基和 3,7-二甲基辛硫基。

[0111] 芳基通常含有约 6 至 60 个碳原子,优选为 7 至 48 个碳原子,并且其具体实例包括苯基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基 (C_1-C_{12} 表示 1 至 12 个碳原子数,以下相同)、 C_1-C_{12} 烷基苯基、1-萘基、2-萘基、1-蒎基、2-蒎基、9-蒎基、五氟苯基等,且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯基和 C_1-C_{12} 烷基苯基。芳基是指其中从芳族烃中去除一个氢原子的原子团。芳族烃包括含有稠环、独立的苯环或通过基团如直接键或亚乙烯基连接的两个或多个稠环的那些。

[0112] C_1-C_{12} 烷氧基苯基的具体实例包括甲氧基苯基、乙氧基苯基、丙氧基苯基、异丙氧基苯基、丁氧基苯基、异丁氧基苯基、叔丁氧基苯基、戊氧基苯基、己氧基苯基、环己氧基苯基、庚氧基苯基、辛氧基苯基、2-乙基己氧基苯基、壬氧基苯基、癸氧基苯基、3,7-二甲基辛氧基苯基、十二烷氧基苯基等。

[0113] C_1-C_{12} 烷基苯基的具体实例包括甲基苯基、乙基苯基、二甲基苯基、丙基苯基、2,4,6-三甲基苯基、甲基乙基苯基、异丙基苯基、丁基苯基、异丁基苯基、叔丁基苯基、戊基苯基、异戊基苯基、己基苯基、庚基苯基、辛基苯基、壬基苯基、癸基苯基、十二烷基苯基等。

[0114] 芳氧基的碳原子数通常约为 6 至 60,优选为 7 至 48,并且其具体实例包括苯氧基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯氧基、 C_1-C_{12} 烷基苯氧基、1-萘氧基、2-萘氧基、五氟苯氧基等;且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯氧基和 C_1-C_{12} 烷基苯氧基。

[0115] C_1-C_{12} 烷氧基苯氧基的具体实例包括甲氧基苯氧基、乙氧基苯氧基、丙氧基苯氧基、异丙氧基苯氧基、丁氧基苯氧基、异丁氧基苯氧基、叔丁氧基苯氧基、戊氧基苯氧基、己氧基苯氧基、环己氧基苯氧基、庚氧基苯氧基、辛氧基苯氧基、2-乙基己氧基苯氧基、壬氧基苯氧基、癸氧基苯氧基、3,7-二甲基辛氧基苯氧基、十二烷氧基苯氧基等。

[0116] C_1-C_{12} 烷基苯氧基的具体实例包括甲基苯氧基、乙基苯氧基、二甲基苯氧基、丙基

苯氧基、1,3,5-三甲基苯氧基、甲基乙基苯氧基、异丙基苯氧基、丁基苯氧基、异丁基苯氧基、叔丁基苯氧基、戊基苯氧基、异戊基苯氧基、己基苯氧基、庚基苯氧基、辛基苯氧基、壬基苯氧基、癸基苯氧基、十二烷基苯氧基等。

[0117] 芳硫基的碳原子数通常约为 6 至 60, 优选为 7 至 48, 并且其具体实例包括苯硫基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯硫基、 C_1-C_{12} 烷基苯硫基、1-萘硫基、2-萘硫基、五氟苯硫基等; 且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯硫基和 C_1-C_{12} 烷基苯硫基。

[0118] 芳基烷基的碳原子数通常约为 7 至 60, 优选为 7 至 48, 并且其具体实例包括苯基- C_1-C_{12} 烷基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷基、 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷基、1-萘基- C_1-C_{12} 烷基、2-萘基- C_1-C_{12} 烷基等; 且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷基和 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷基。

[0119] 芳基烷氧基的碳原子数通常约为 7 至 60, 优选为 7 至 48, 并且其具体实例包括: 苯基- C_1-C_{12} 烷氧基, 如苯基甲氧基、苯基乙氧基、苯基丁氧基、苯基戊氧基、苯基己氧基、苯基庚氧基和苯基辛氧基; C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷氧基、 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷氧基、1-萘基- C_1-C_{12} 烷氧基、2-萘基- C_1-C_{12} 烷氧基等; 且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷氧基和 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷氧基。

[0120] 芳基烷硫基的碳原子数通常约为 7 至 60, 优选为 7 至 48, 并且其具体实例包括苯基- C_1-C_{12} 烷硫基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷硫基、 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷硫基、1-萘基- C_1-C_{12} 烷硫基、2-萘基- C_1-C_{12} 烷硫基等; 且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷硫基和 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷硫基。

[0121] 芳基烯基的碳原子数通常约为 7 至 60, 优选为 7 至 48, 并且其具体实例包括: 苯基- C_2-C_{12} 烯基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_2-C_{12} 烯基、 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_2-C_{12} 烯基、1-萘基- C_2-C_{12} 烯基、2-萘基- C_2-C_{12} 烯基等; 且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_2-C_{12} 烯基和 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_2-C_{12} 烯基。

[0122] 芳基炔基的碳原子数通常约为 7 至 60, 优选为 7 至 48, 并且其具体实例包括: 苯基- C_2-C_{12} 炔基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_2-C_{12} 炔基、 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_2-C_{12} 炔基、1-萘基- C_2-C_{12} 炔基、2-萘基- C_2-C_{12} 炔基等; 且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_2-C_{12} 炔基和 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_2-C_{12} 炔基。

[0123] 取代的氨基是指被 1 个或 2 个选自烷基、芳基、芳基烷基或一价杂环基中的基团取代的氨基, 且所述的烷基、芳基、芳基烷基或一价杂环基可以有取代基。取代的氨基通常含有约 1 至 60 个碳原子, 优选 2 至 48 个碳原子, 其中不包括所述取代基的碳原子数。

[0124] 其具体实例包括: 甲基氨基、二甲基氨基、乙基氨基、二乙基氨基、丙基氨基、二丙基氨基、异丙基氨基、二异丙基氨基、丁基氨基、异丁基氨基、叔丁基氨基、戊基氨基、己基氨基、环己基氨基、庚基氨基、辛基氨基、2-乙基己基氨基、壬基氨基、癸基氨基、3,7-二甲基辛基氨基、十二烷基氨基、环戊基氨基、二环戊基氨基、环己基氨基、二环己基氨基、吡咯烷基、哌啶基、二(三氟甲基)氨基、苯基氨基、二苯基氨基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基氨基、二(C_1-C_{12} 烷氧基苯基)氨基、二(C_1-C_{12} 烷基苯基)氨基、1-萘基氨基、2-萘基氨基、五氟苯基氨基、吡啶基氨基、哒嗪基氨基、嘧啶基氨基、吡唑基氨基(pyrazylamino group)、三唑基氨基(triazylaminogroup)、苯基- C_1-C_{12} 烷基氨基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷基氨基、 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷基氨基、二(C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷基)氨基、二(C_1-C_{12} 烷

基苯基 $-C_1-C_{12}$ 烷基) 氨基、1-萘基 $-C_1-C_{12}$ 烷基氨基、2-萘基 $-C_1-C_{12}$ 烷基氨基等。

[0125] 取代的甲硅烷基是指被 1 个、2 个或 3 个选自烷基、芳基、芳基烷基或一价杂环基中的基团取代的甲硅烷基。取代的甲硅烷基通常含有约 1 至 60 个碳原子, 优选 3 至 48 个碳原子。所述的烷基、芳基、芳基烷基或一价杂环基可以有取代基。

[0126] 取代的甲硅烷基的具体实例包括: 三甲基甲硅烷基、三乙基甲硅烷基、三丙基甲硅烷基、三异丙基甲硅烷基、二甲基-异丙基甲硅烷基、二乙基-异丙基甲硅烷基、叔丁基甲硅烷基二甲基甲硅烷基、戊基二甲基甲硅烷基、己基二甲基甲硅烷基、庚基二甲基甲硅烷基、辛基二甲基甲硅烷基、2-乙基己基-二甲基甲硅烷基、壬基二甲基甲硅烷基、癸基二甲基甲硅烷基、3,7-二甲基辛基-二甲基甲硅烷基、十二烷基二甲基甲硅烷基、苯基 $-C_1-C_{12}$ 烷基甲硅烷基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基 $-C_1-C_{12}$ 烷基甲硅烷基、 C_1-C_{12} 烷基苯基 $-C_1-C_{12}$ 烷基甲硅烷基、1-萘基 $-C_1-C_{12}$ 烷基甲硅烷基、2-萘基 $-C_1-C_{12}$ 烷基甲硅烷基、苯基 $-C_1-C_{12}$ 烷基二甲基甲硅烷基、三苯基甲硅烷基、三-对-二甲苯基甲硅烷基、三苄基甲硅烷基、二苯基甲基甲硅烷基、叔丁基二苯基甲硅烷基、二甲基苯基甲硅烷基等。

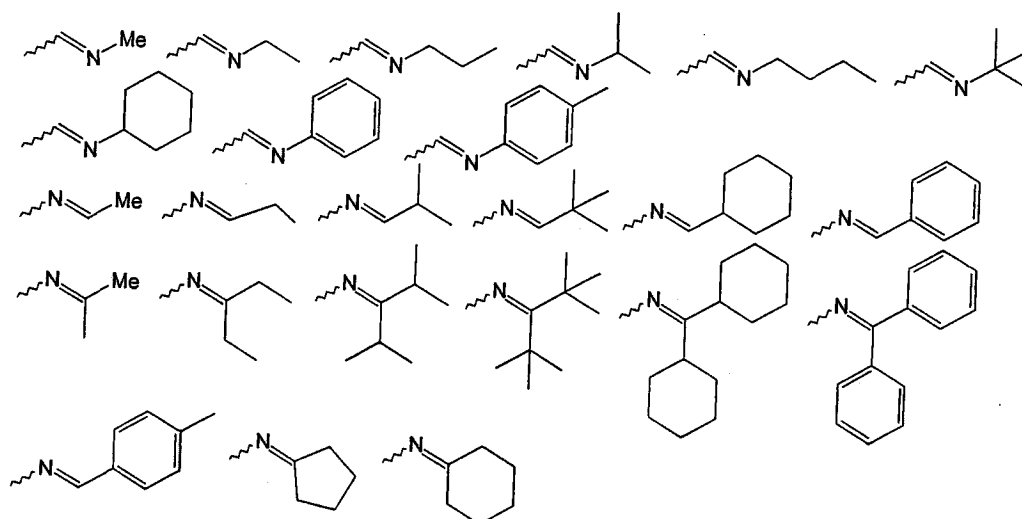
[0127] 至于卤素原子, 示例的是氟原子、氯原子、溴原子和碘原子。

[0128] 酰基通常含有约 2 至 20 个碳原子, 优选 2 至 18 个碳原子, 并且其具体实例包括乙酰基、丙酰基、丁酰基、异丁酰基、新戊酰基、苯甲酰基、三氟乙酰基、五氟苯甲酰基等。

[0129] 酰氧基通常含有约 2 至 20 个碳原子, 优选 2 至 18 个碳原子, 并且其具体实例包括乙酰氧基、丙酰氧基、丁酰氧基、异丁酰氧基、新戊酰氧基、苯甲酰氧基、三氟乙酰氧基、五氟苯甲酰氧基等。

[0130] 亚胺残基是其中从亚胺化合物(在分子中含有 $-N=C-$ 的有机化合物。其实例包括醛亚胺、酮亚胺和 N 上的氢原子被烷基等取代的化合物)中去除氢原子的残基, 并且通常含有约 2 至 20 个碳原子, 优选 2 至 18 个碳原子。至于具体实例, 示例的是由下面结构式表示的基团:

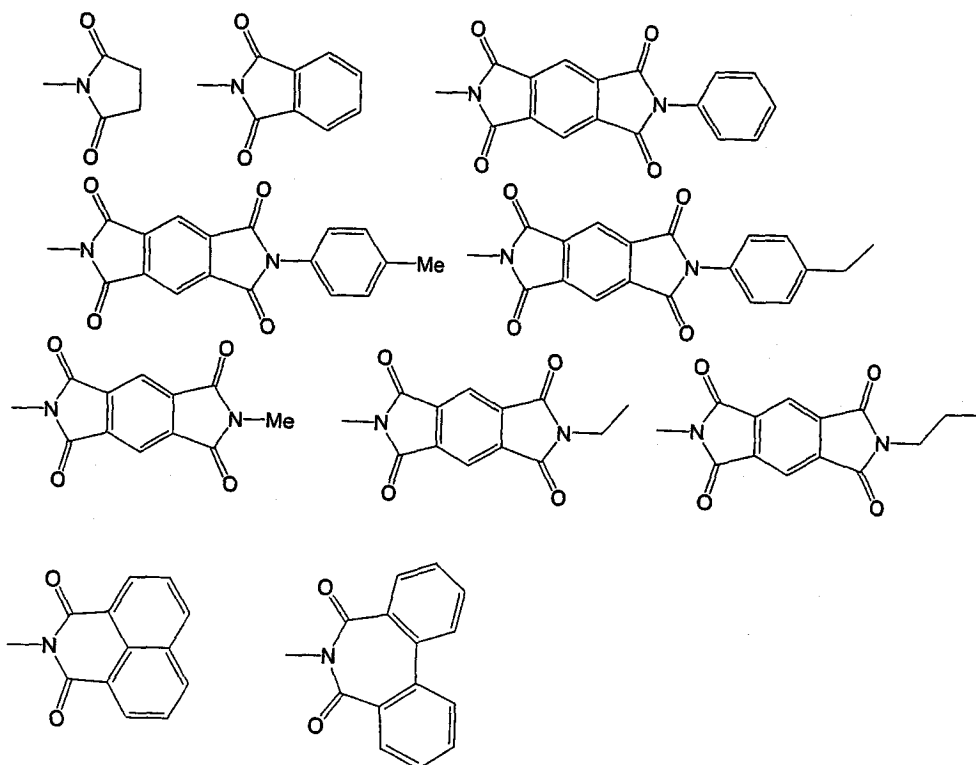
[0131]



[0132] 酰胺基通常含有约 2 至 20 个碳原子, 优选 2 至 18 个碳原子, 并且其具体实例包括甲酰胺基、乙酰胺基、丙酰胺基、丁酰胺基、苯甲酰胺基、三氟乙酰胺基、五氟苯甲酰胺基、二甲酰胺基、二乙酰胺基、二丙酰胺基、二丁酰胺基、二苯甲酰胺基、二(三氟乙)酰胺基、二(五氟苯)甲酰胺基等。

[0133] 酸亚胺基的实例包括其中与氮原子连接的氢原子被去除的残基,并通常含有约 2 至 60 个碳原子,优选含有 2 至 48 个碳原子。至于酸亚胺基的具体实例,示例的是下面的基团:

[0134]



[0135] 一价杂环基是指其中从杂环化合物中去除氢原子的原子团,且碳原子数通常约为 4 至 60,优选为 4 至 20。杂环基的碳原子数中不包括取代基的碳原子数。杂环化合物是指具有环状结构的有机化合物,其中在环状结构中含有至少一个杂原子如氧、硫、氮、磷、硼等作为不同于碳原子的元素。其具体实例包括噻吩基、 C_1 - C_{12} 烷基噻吩基、吡咯基、呋喃基、吡啶基、 C_1 - C_{12} 烷基吡啶基、哌啶基、喹啉基、异喹啉基等;且优选噻吩基、 C_1 - C_{12} 烷基噻吩基、吡啶基和 C_1 - C_{12} 烷基吡啶基。

[0136] 取代的羧基是指被烷基、芳基、芳基烷基或一价杂环基取代的羧基,并且通常含有约 2 至 60 个碳原子,优选 2 至 48 个碳原子。其具体实例包括甲氧基羰基、乙氧基羰基、丙氧基羰基、异丙氧基羰基、丁氧基羰基、异丁氧基羰基、叔丁氧基羰基、戊氧基羰基、己氧基羰基、环己氧基羰基、庚氧基羰基、辛氧基羰基、2-乙基己氧基羰基、壬氧基羰基、癸氧基羰基、3,7-二甲基辛氧基羰基、十二烷氧基羰基、三氟甲氧基羰基、五氟乙氧基羰基、全氟丁氧基羰基、全氟己氧基羰基、全氟辛氧基羰基、苯氧基羰基、萘氧基羰基、吡啶氧基羰基等。所述烷基、芳基、芳基烷基或一价杂环基可以含有取代基。取代的羧基的碳原子数中不包括所述取代基的碳原子数。

[0137] 在上面所述中,在含有烷基的基团中,它们可以是直链、支链或烷状烷基中的任何一种,或者可以是它们的组合。在不是直链的情况下,示例的是异戊基、2-乙基己基、3,7-二甲基辛基、环己基、4- C_1 - C_{12} 烷基环己基等。此外,两个烷基链的末端可以连接形成环。此外,烷基的部分甲基和亚甲基可以被含有杂原子的基团代替,或者被一个或多个氟原子取代的甲基或亚甲基所代替。至于杂原子,示例的是氧原子、硫原子、氮原子等。

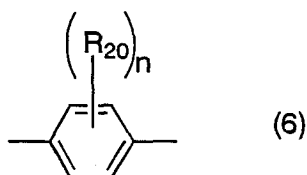
[0138] 此外,在取代基的实例中,当芳基或杂环基被包括在它们的部分中时,它们可以含有一个或多个取代基。

[0139] 为了改善在溶剂中的溶解性,优选 Ar_1 、 Ar_2 、 Ar_3 和 Ar_4 含有取代基,并且它们的一个或多个包括具有环状或长链的烷基或烷氧基。其实例包括:环戊基、环己基、戊基、异戊基、己基、辛基、2-乙基己基、癸基、3,7-二甲基辛基、戊氧基、异戊氧基、己氧基、辛氧基、2-乙基己氧基、癸氧基和3,7-二甲基辛氧基。

[0140] 两个取代基可以连接形成环。此外,烷基的部分碳原子可以被含有杂原子的基团所取代,且杂原子的实例包括:氧原子、硫原子、氮原子等。

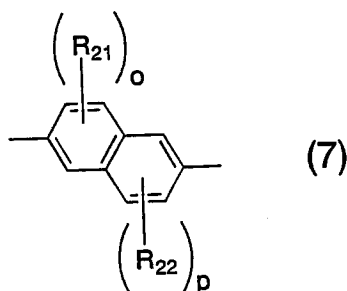
[0141] 由上式(2)表示的重复单元的实例包括由下式(6)、(7)、(8)、(9)、(10)和(11)表示的重复单元:

[0142]



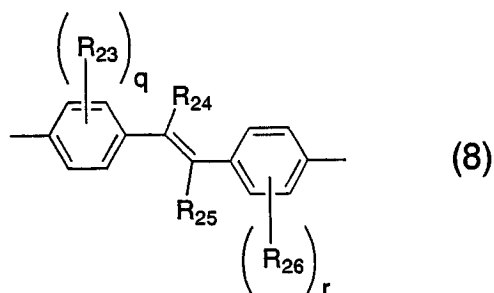
[0143] (其中, R_{20} 表示烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烯基、芳基炔基、氨基、取代的氨基、甲硅烷基、取代的甲硅烷基、卤素原子、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、酸亚胺基、一价杂环基、羧基、取代的羧基或氰基。 n 表示0至4的整数。当 R_{20} 存在多个时,它们可以相同或不同)。

[0144]



[0145] (其中, R_{21} 和 R_{22} 各自独立地表示烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烯基、芳基炔基、氨基、取代的氨基、甲硅烷基、取代的甲硅烷基、卤素原子、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、酸亚胺基、一价杂环基、羧基、取代的羧基或氰基。 o 和 p 各自独立地表示0至3的整数。当 R_{21} 和 R_{22} 存在多个时,它们可以相同或不同)。

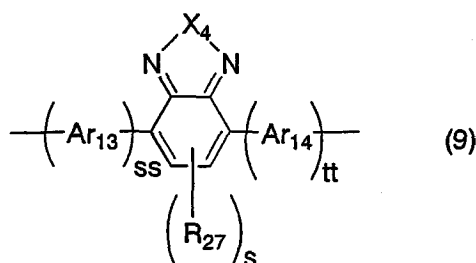
[0146]



[0147] (其中, R_{23} 和 R_{26} 各自独立地表示烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳

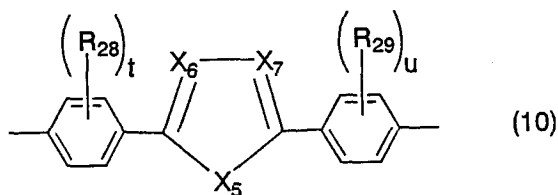
基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烯基、芳基炔基、氨基、取代的氨基、甲硅烷基、取代的甲硅烷基、卤素原子、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、酸亚胺基、一价杂环基、羧基、取代的羧基或氰基。q 和 r 各自独立地表示 0 至 4 的整数。R₂₄ 和 R₂₅ 各自独立地表示氢原子、烷基、芳基、一价杂环基、羧基、取代的羧基或氰基。当 R₂₃ 和 R₂₆ 存在多个时，它们可以相同或不同)。

[0148]



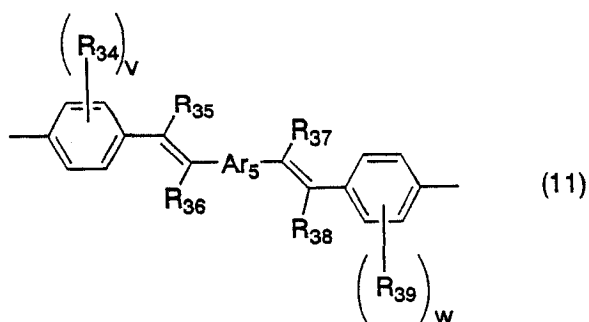
[0149] (其中, R₂₇ 表示烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烯基、芳基炔基、氨基、取代的氨基、甲硅烷基、取代的甲硅烷基、卤素原子、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、酸亚胺基、一价杂环基、羧基、取代的羧基或氰基。s 表示 0 至 2 的整数; Ar₁₃ 和 Ar₁₄ 各自独立地表示亚芳基、二价杂环基, 或具有金属配位结构的二价基团。ss 和 tt 各自独立地表示 0 或 1。X₄ 表示 O、S、SO、SO₂、Se 或 Te。当存在多个 R₂₇ 时, 它们可以相同或不同);

[0150]



[0151] (其中, R₂₈ 和 R₂₉ 各自独立地表示烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烯基、芳基炔基、氨基、取代的氨基、甲硅烷基、取代的甲硅烷基、卤素原子、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、酸亚胺基、一价杂环基、羧基、取代的羧基或氰基。t 和 u 各自独立地表示 0 至 4 的整数。X₅ 表示 O、S、SO₂、Se、Te、N-R₃₀ 或 SiR₃₁R₃₂。X₆ 和 X₇ 各自独立地表示 N 或 C-R₃₃。R₃₀、R₃₁、R₃₂ 和 R₃₃ 各自独立地表示氢原子、烷基、芳基、芳基烷基或一价杂环基。当 R₂₈、R₂₉ 和 R₃₃ 存在多个时, 它们可以相同或不同)。

[0152]

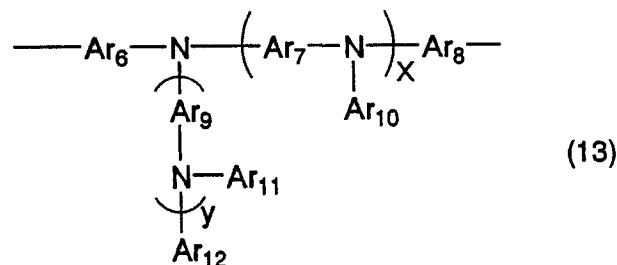


[0153] (其中, R₃₄ 和 R₃₉ 各自独立地表示烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烯基、芳基炔基、氨基、取代的氨基、甲硅烷基、取代的甲硅烷基、卤素原子、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、酸亚胺基、一价杂环基、羧基、取代

的羧基或氰基。 v 和 w 各自独立地表示 0 至 4 的整数； R_{35} 、 R_{36} 、 R_{37} 和 R_{38} 各自独立地表示氢原子、烷基、芳基、一价杂环基、羧基、取代的羧基或氰基。 Ar_5 表示亚芳基、二价杂环基，或具有金属配位结构的二价基团。当 R_{34} 和 R_{39} 存在多个时，它们可以相同或不同。

[0154] 由上式 (3) 表示的重复单元的实例包括由下式 (13) 表示的重复单元：

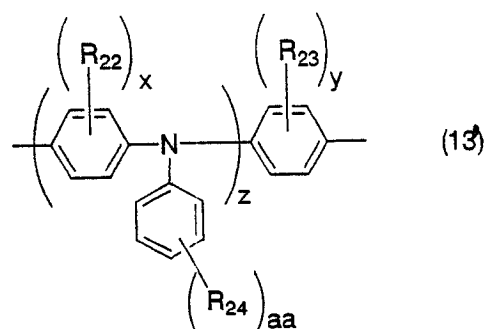
[0155]



[0156] (其中, Ar_6 、 Ar_7 、 Ar_8 和 Ar_9 各自独立地表示亚芳基或二价杂环基。 Ar_{10} 、 Ar_{11} 和 Ar_{12} 各自独立地表示芳基或一价杂环基。 Ar_6 、 Ar_7 、 Ar_8 、 Ar_9 和 Ar_{10} 可以含有取代基。 x 和 y 各自独立地表示 0 或 1 且 $0 \leq x+y \leq 1$)。

[0157] 在由上式 (2) 至 (5) 表示的结构中, 优选由下式 (13') 表示的重复单元：

[0158]



[0159] (其中, R_{22} 、 R_{23} 和 R_{24} 各自独立地表示烷基、烷氧基、烷硫基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烯基、芳基炔基、氨基、取代的氨基、甲硅烷基、取代的甲硅烷基、卤素原子、酰基、酰氧基、亚氨基、酰胺基、酸亚胺基、一价杂环基、羧基、取代的羧基或氰基。 x 和 y 各自独立地表示 0-4 的整数。 z 表示 1-2 的整数。 aa 表示 0 至 5 的整数)。

[0160] 至于上式 (13') 中的 R_{24} , 优选烷基、烷氧基、芳基、芳氧基、芳基烷基、芳基烷氧基和取代的氨基。至于取代的氨基, 优选二芳基氨基, 且更优选二苯基氨基。

[0161] 在上述中, 优选上式 (1-6) 与上式 (5)、(7)、(8) 或 (11) 的组合, 并且更优选上式 (1-6) 与上式 (8) 或 (11) 的组合。

[0162] 在由上式 (1-6) 表示的结构中, 优选 Y 为 S 原子或 O 原子。

[0163] 此外, 用于本发明的聚合物化合物的端基也可以用稳定基团保护, 因为如果聚合活性基团保持原样, 在制成器件时存在发光性能和使用寿命降低的可能性。优选具有延续到主链的共轭结构的共轭键的那些, 并且示例的是通过碳-碳键与芳基或杂环化合物基连接的结构。具体地, 示例的是如在 JP-A-9-45478 中的化学式 1 所述的取代基。

[0164] 用于本发明的聚合物化合物还可以是无规、嵌段或接枝共聚物, 或具有其中间结

构的聚合物,例如,具有嵌段性能的无规共聚物。考虑到得到具有高荧光量子产额的聚合物化合物,相对于完全的无规共聚物而言,优选具有嵌段性能的无规共聚物和嵌段或接枝共聚物。此外,还可以包括具有支化主链和超过三个端基的聚合物,和树枝状聚合物(dendrimer)。

[0165] 至于用于本发明的聚合物化合物,优选聚苯乙烯折算的数均分子量为 10^3 - 10^8 ,更优选为 10^4 - 10^7 。

[0166] 至于用于发光材料的聚合物化合物的制备方法,根据需要,将具有多个聚合活性基团的单体溶解在有机溶剂中,并且可以使用碱或适宜的催化剂,在有机溶剂的沸点和熔点之间的温度反应。

[0167] 例如,可以使用的已知方法描述于:Organic Reactions, Volume 14, page 270-490, John Wiley & Sons, Inc., 1965; Organic Syntheses, Collective Volume VI, page 407-411, John Wiley & Sons, Inc., 1988; Chemical Review (Chem. Rev.), Volume 95, page 2457 (1995); Journal of Organometallic Chemistry (J. Organomet. Chem.), Volume 576, page 147 (1999); 和 Macromolecular Chemistry, Macromolecular Symposium (Makromol. Chem, Macromol. Symp.), Volume 12th, page 229 (1987) 中。

[0168] 在用于本发明组合物的聚合物化合物的制备方法中,可以将已知的缩合反应用作进行缩聚反应的方法。至于缩聚的方法,在产生双键的情况下,例如,示例的是描述于 JP-A-5-202355 中的方法。

[0169] 即,示例的是:含有甲酰基的化合物和含有磷-甲基的化合物,或含有甲酰基和磷-甲基的化合物通过 Wittig 反应而聚合;含有乙烯基的化合物和含有卤素原子的化合物通过 Heck 反应而聚合;含有两个或多个单卤化甲基的化合物通过脱去卤化氢方法而聚合;含有两个或多个铈-甲基的化合物通过铈盐分解方法而缩聚;含有甲酰基的化合物和含有氰基的化合物通过 Knoevenagel 反应而聚合;和含有两个或多个甲酰基的化合物通过 McMurry 反应而聚合。

[0170] 在本发明的聚合物化合物通过缩聚而在主链中含有三键时,例如,可以使用 Heck 反应。

[0171] 在既不产生双键也不产生三键的情况下,示例的是:由相应的单体通过 Suzuki 偶合反应的聚合方法;通过格利雅反应的聚合方法;通过 Ni(0) 配合物的聚合方法;使用氧化剂例如 FeCl_3 等而聚合的方法;电化学氧化聚合的方法;和通过分解具有适宜离去基团的中间聚合物的方法。

[0172] 在它们当中,优选通过 Wittig 反应而聚合;通过 Heck 反应而聚合;通过 Knoevenagel 反应而聚合;通过 Suzuki 偶联反应而聚合的方法;通过格利雅反应而聚合方法;通过镍-零价配合物而聚合的方法,因为容易控制结构。

[0173] 当在用于本发明的聚合物化合物的原料单体中的活性取代基是卤素原子、烷基磺酸酯基、芳基磺酸酯基或芳基烷基磺酸酯基时,优选通过在镍-零价配合物的存在下缩聚的制备方法。

[0174] 至于原料化合物,示例的是:二卤化化合物、双(烷基磺酸酯)化合物、双(芳基磺酸酯)化合物、双(芳基烷基磺酸酯)化合物,或卤素-烷基磺酸酯化合物、卤素-芳基磺酸酯化合物、卤素-芳基烷基磺酸酯化合物、烷基磺酸酯-芳基磺酸酯化合物、烷基磺酸

酯-芳基烷基磺酸酯化合物。

[0175] 此外,当在用于本发明的聚合物化合物的原料单体中的活性取代基是卤素原子、烷基磺酸酯基、芳基磺酸酯基、芳基烷基磺酸酯基、硼酸基或硼酸酯基时,优选卤素原子、烷基磺酸酯基、芳基磺酸酯基和芳基烷基磺酸酯基的总摩尔与硼酸基和硼酸酯基之和的比率基本上为 1(通常在 0.7 至 1.2 的范围内),并且其制备方法是使用镍催化剂或钯催化剂的缩聚。

[0176] 原料化合物组合的具体实例包括:二卤化化合物、双(烷基磺酸酯)化合物、双(芳基磺酸酯)化合物或双(芳基烷基磺酸酯)化合物,与二硼酸化合物或二硼酸酯化合物的组合。

[0177] 此外,示例的是卤素-硼酸化合物、卤素-硼酸酯化合物、烷基磺酸酯-硼酸化合物、烷基磺酸酯-硼酸酯化合物、芳基磺酸酯-硼酸化合物、芳基磺酸酯-硼酸酯化合物、芳基烷基磺酸酯-硼酸化合物或芳基烷基磺酸酯-硼酸酯化合物。

[0178] 优选对使用的有机溶剂充分地进行脱氧处理,并且反应在惰性气氛下进行,通常是为了抑制副反应,尽管处理根据所使用的化合物和反应而不同。此外,优选同样地进行脱水处理。但是,在有水的两相体系的反应如 Suzuki 偶合反应的情况下,这是不适用的。

[0179] 为了反应,加入碱或适宜的催化剂。这可以根据所采用的反应而选择。优选碱或催化剂可以溶解于反应所使用的溶剂中。将碱或催化剂混合的方法的实例包括:在氩气、氮气等的惰性气氛下,搅拌下慢慢地向反应溶液中加入碱或催化剂的溶液的方法;或相反地,慢慢地向碱或催化剂的溶液中加入反应溶液的方法。

[0180] 当将本发明的聚合物化合物用于聚合物 LED 时,其纯度对发光性能产生影响,因而,优选在聚合之前通过诸如蒸馏、升华纯化、重结晶等之类的方法纯化单体。此外,优选在聚合后进行纯化处理,例如再沉淀纯化、色谱分离等。

[0181] 接着,将解释用于本发明组合物的显示由三重态受激态发光的化合物(三重态发光化合物)。显示由三重态受激态发光的化合物包括:其中观察到磷光发光的配合物,以及除了观察到磷光发光还观察到荧光发光的配合物。

[0182] 在三重态发光化合物中,至于配位化合物(三重态发光配位化合物),示例的是金属配位配合物,其已经由前者用作低分子量 EL 发光材料。

[0183] 这些由例如:Nature, (1998)395,151;Appl. Phys. Lett. (1999),75(1),4;Proc. SPIE-Int. Soc. Opt. Eng. (2001),4105(Organic Light-Emitting Materials and Devices IV,119;J. Am. Chem. Soc., (2001),123,4304;Appl. Phys. Lett., (1997),71(18),2596;Syn. Met., (1998).94(1),103;Syn. Met., (1999),99(2),1361;Adv. Mater., (1999),11(10),852 等所公开。

[0184] 发射三重态光的配合物的中心金属通常是原子数为 50 或更大的原子,并且是对该配位化合物显示自旋轨道相互作用并且具有在单重态和三重态之间进行系统间跨越的可能性的金属。

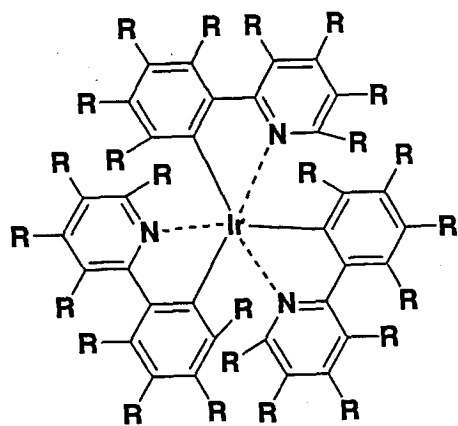
[0185] 至于发射三重态光的配合物的中心金属,例如,示例的是铯、铷、铟、铊、铋、铂、金和铊,如镧系,铽、铪、镨、钆、镱等,优选铷、铂、金和铊,特别优选铷、铂和金,且最优选铷。

[0186] 至于三重态发光配位化合物的配体,示例的是例如 8-羟基喹啉及其衍生物、苯并喹啉醇及其衍生物、2-苯基-吡啶及其衍生物、2-苯基-苯并噻唑及其衍生物、2-苯基-苯

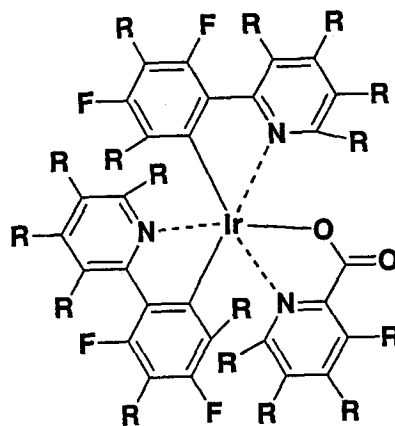
并噻唑及其衍生物、卟啉及其衍生物等。

[0187] 三重态发光配位化合物的实例包括下列：

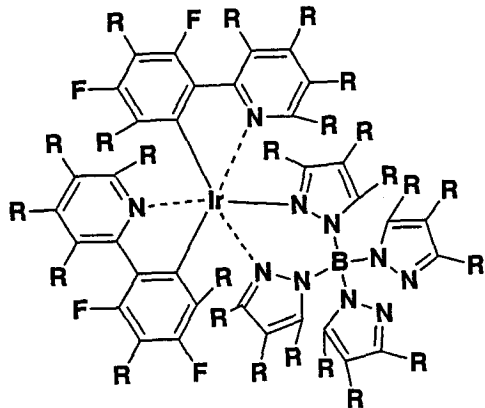
[0188]



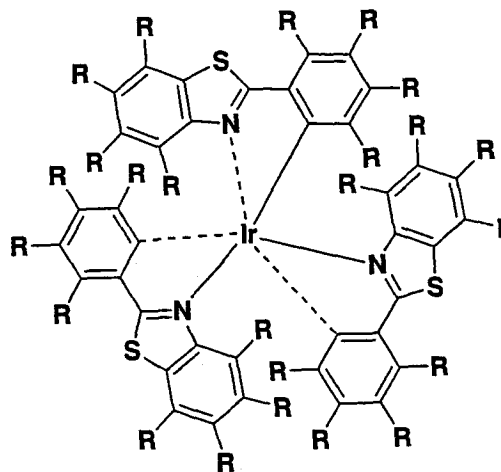
(PL-1)



(PL-2)

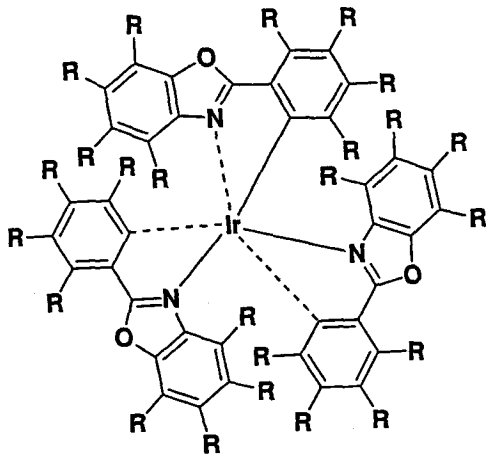


(PL-3)

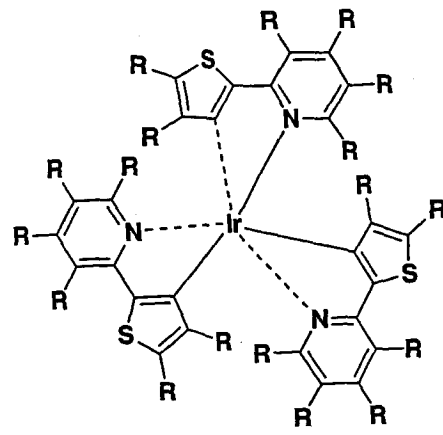


(PL-4)

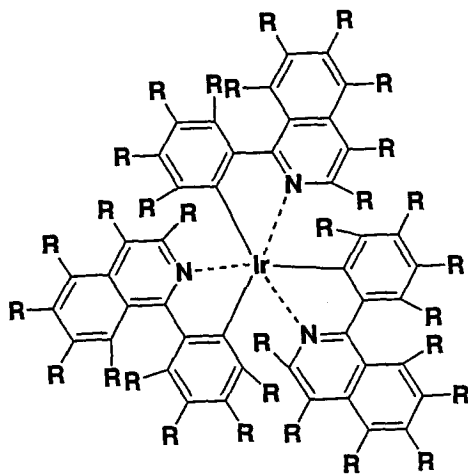
[0189]



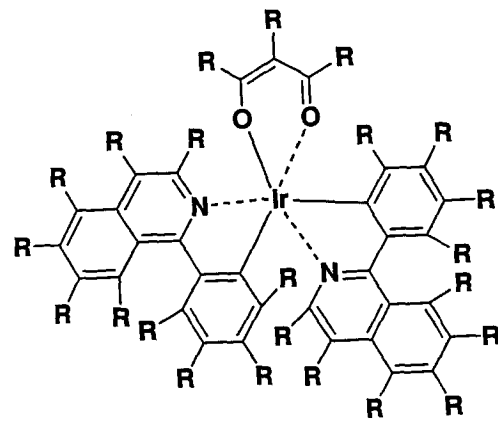
(PL-5)



(PL-6)

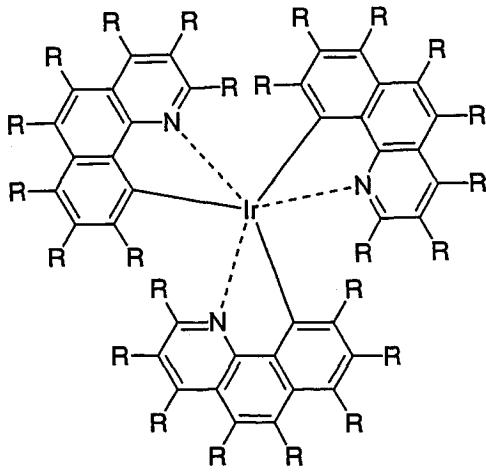


(PL-7)

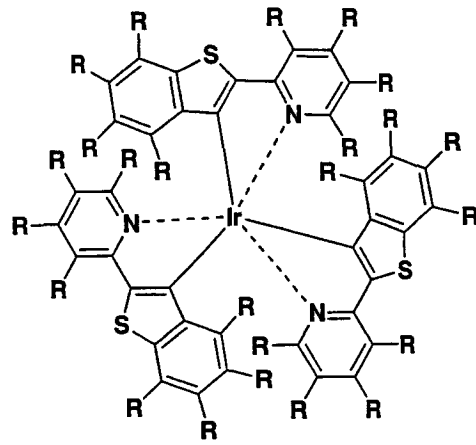


(PL-8)

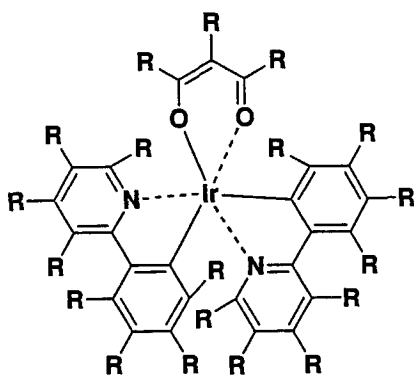
[0190]



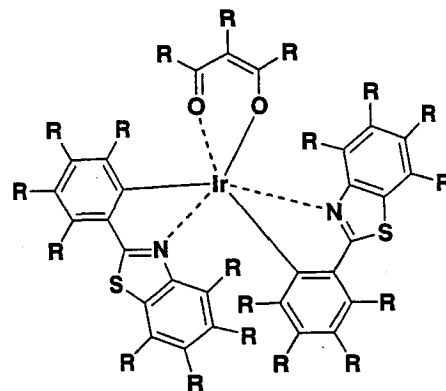
(PL-9)



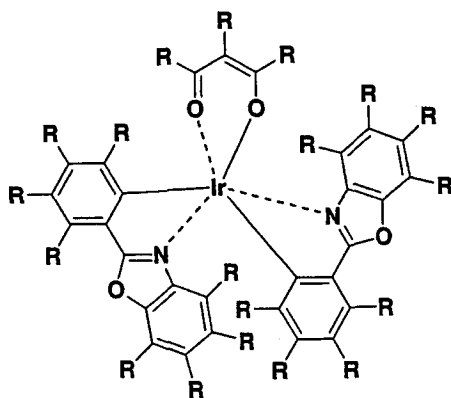
(PL-10)



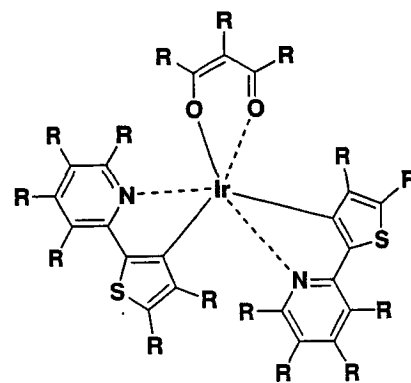
(PL-11)



(PL-12)

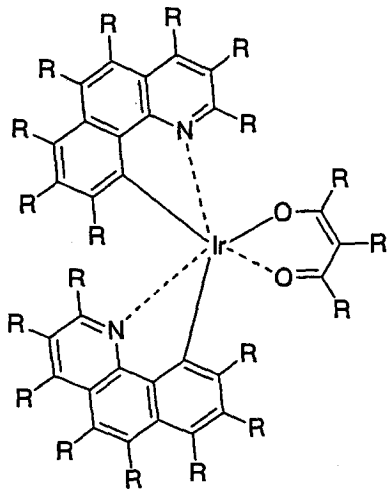


(PL-13)

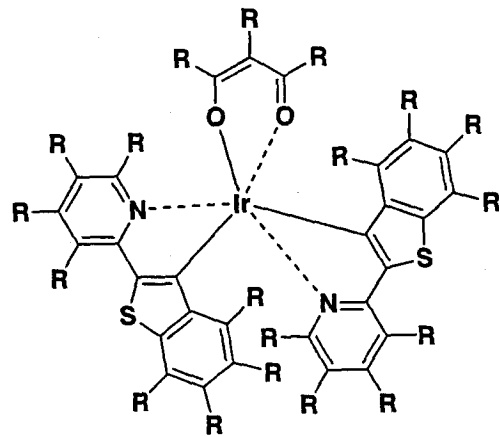


(PL-14)

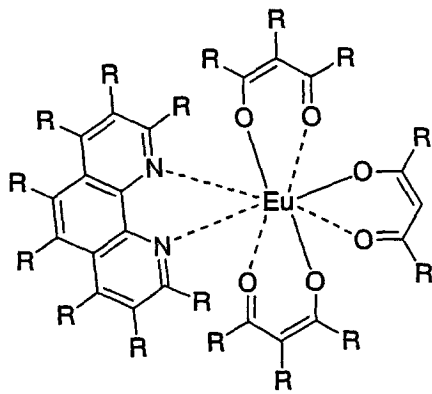
[0191]



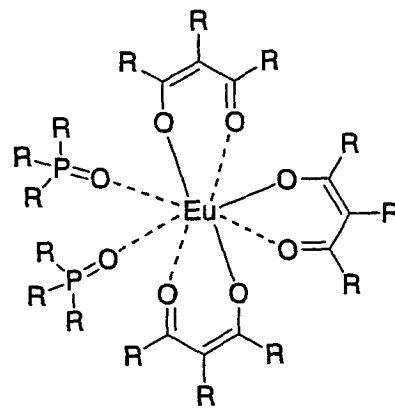
(PL-15)



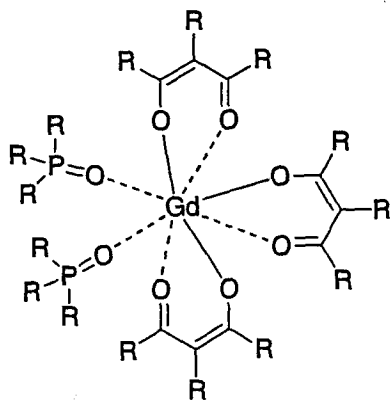
(PL-16)



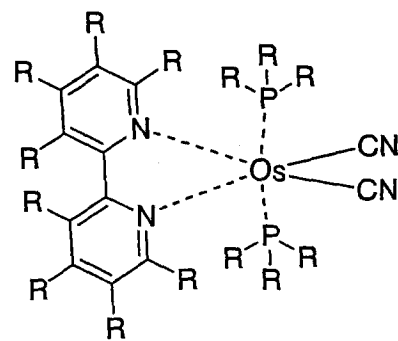
(PL-17)



(PL-18)

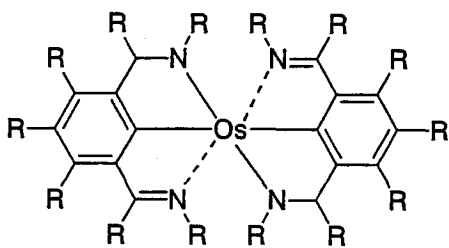


(PL-19)

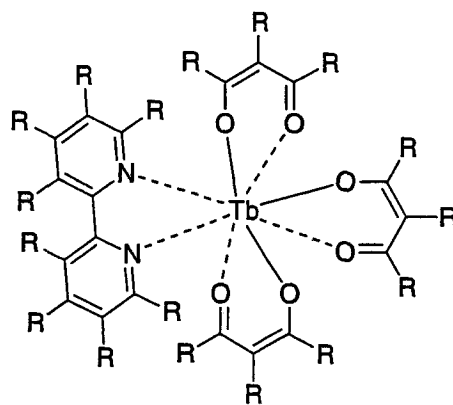


(PL-20)

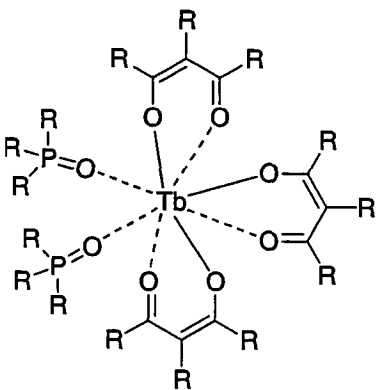
[0192]



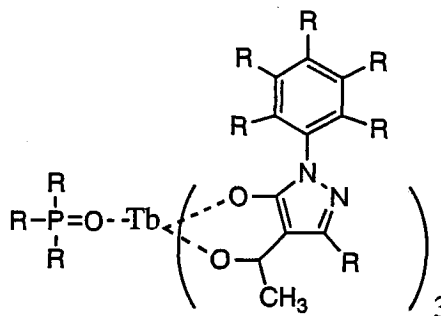
(PL-21)



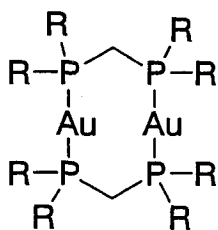
(PL-22)



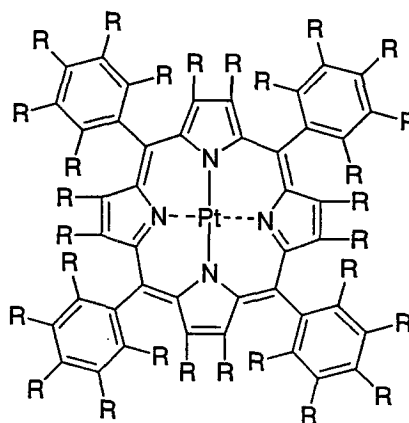
(PL-23)



(PL-24)

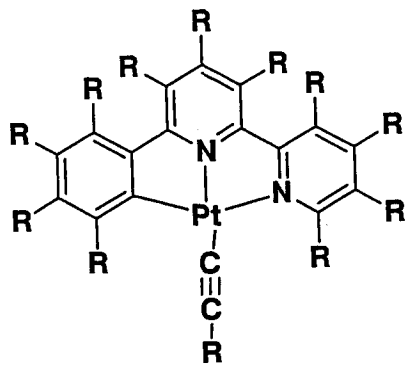


(PL-25)

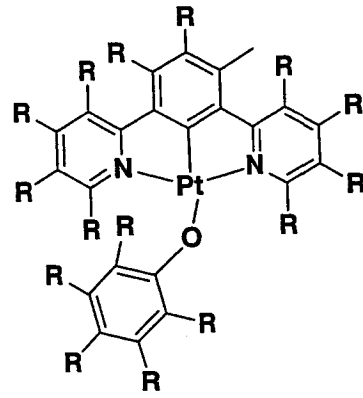


(PL-26)

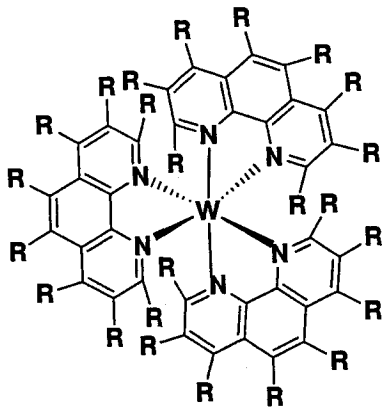
[0193]



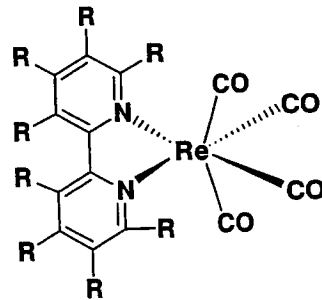
(PL-27)



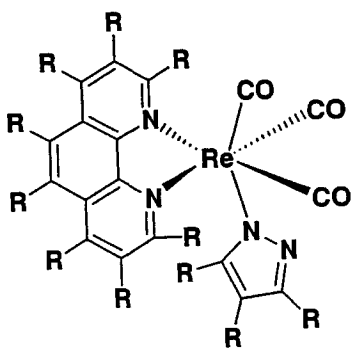
(PL-28)



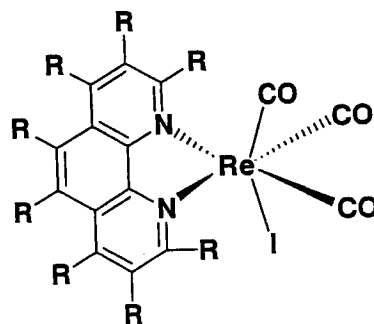
(PL-29)



(PL-30)

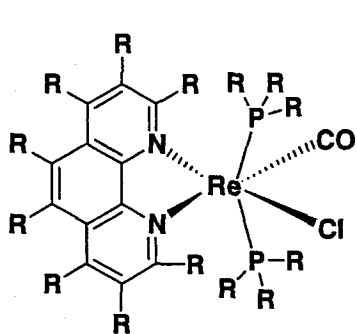


(PL-31)

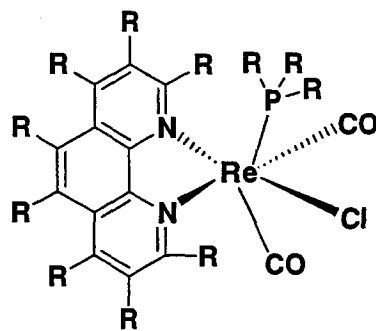


(PL-32)

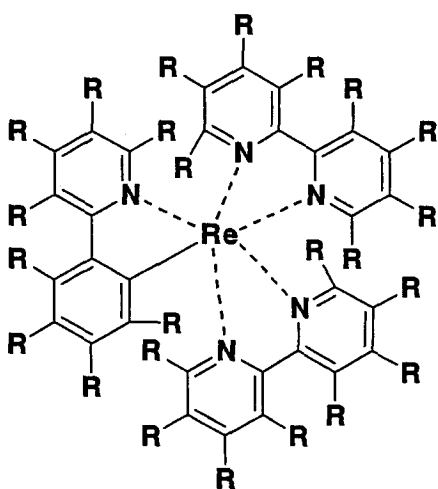
[0194]



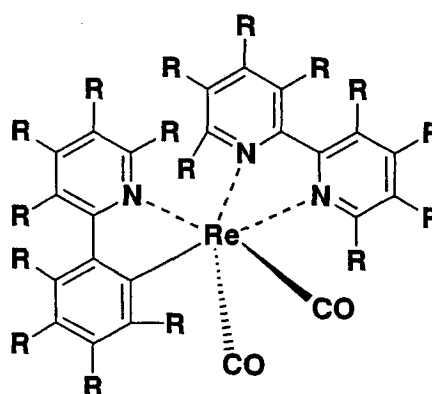
(PL-33)



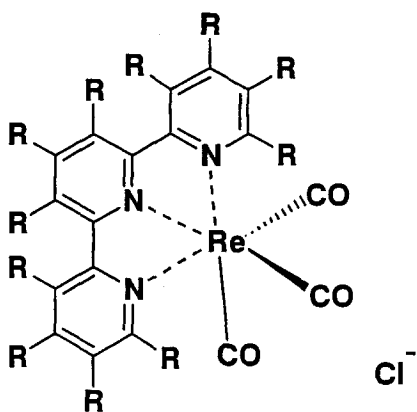
(PL-34)



(PL-35)



(PL-36)



(PL-37)

[0195] 其中, R 各自独立地表示选自下列的基团: 氢原子、烷基、烷氧基、烷硫基、烷基甲基硅烷基、烷基氨基、芳基、芳氧基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烯基、芳基炔基、芳基氨基、一价杂环基和氰基。为了改善在溶剂中的溶解性, 优选烷基和烷氧基, 并且优选包含取代基的重复单元具有很少对称的形式。

[0196] 至于三重态发光配位化合物, 更详细地, 示例的是下式 (15) 的结构:

[0197] $(H)_o-M-(K)_m$ (15)

[0198] 其中, K 表示:含有与一个或多个选自氮原子、氧原子、碳原子、硫原子和磷原子的 M 连接的原子的配体;卤素原子;或氢原子。此外, o 表示 0-5 的整数, m 表示 1-5 的整数。

[0199] 至于含有与一个或多个选自氮原子、氧原子、碳原子、硫原子和磷原子的 M 连接的原子的配体, 示例的是烷基、烷氧基、酰氧基、烷硫基、烷基氨基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基氨基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烷基氨基、磺酸酯基、氰基、杂环配体、羰基化合物、醚、胺、亚胺、膦、亚磷酸酯和硫醚。该配体与 M 的键可以是配价键或共价键。而且, 它可以是它们组合而成的多齿配体。

[0200] 烷基可以是直链、支链或环状烷基中的任何一种, 并且可以含有取代基。碳原子数通常为约 1 至 20。其具体实例包括甲基、乙基、丙基、异丙基、丁基、异丁基、叔丁基、戊基、己基、环己基、庚基、辛基、2-乙基己基、壬基、癸基、3,7-二甲基辛基、十二烷基、三氟甲基、五氟乙基、全氟丁基、全氟己基、全氟辛基等; 并且优选戊基、己基、辛基、2-乙基己基、癸基和 3,7-二甲基辛基。

[0201] 烷氧基可以是直链、支链或环状烷氧基中的任何一种, 并且可以含有取代基。碳原子数通常约为 1 至 20。其具体实例包括甲氧基、乙氧基、丙氧基、异丙氧基、丁氧基、异丁氧基、叔丁氧基、戊氧基、己氧基、环己氧基、庚氧基、辛氧基、2-乙基己氧基、壬氧基、癸氧基、3,7-二甲基辛氧基、十二烷氧基、三氟甲氧基、五氟乙氧基、全氟丁氧基、全氟己氧基、全氟辛氧基、甲氧基甲基氧基、2-甲氧基乙基氧基等; 并且优选戊氧基、己氧基、辛氧基、2-乙基己氧基、癸氧基和 3,7-二甲基辛氧基。

[0202] 酰氧基通常含有约 2 至 20 个碳原子, 并且其具体实例包括乙酰氧基、三氟乙酰氧基、丙酰氧基和苯甲酰氧基。至于磺氧基, 示例的是: 苯磺氧基、对甲苯磺氧基、甲烷磺氧基、乙烷磺氧基和三氟甲烷磺氧基。

[0203] 烷硫基可以是直链、支链或环状烷硫基中的任何一种, 并且可以含有取代基。碳原子数通常约为 1 至 20。其具体实例包括甲硫基、乙硫基、丙硫基和异丙硫基、丁硫基、异丁硫基、叔丁硫基、戊硫基、己硫基、环己硫基、庚硫基、辛硫基、2-乙基己硫基、壬硫基、癸硫基、3,7-二甲基辛硫基、十二烷硫基、三氟甲硫基等; 并且优选戊硫基、己硫基、辛硫基、2-乙基己硫基、癸硫基和 3,7-二甲基辛硫基。

[0204] 烷基氨基可以是直链、支链或环状烷基氨基中的任何一种, 并且可以是一烷基氨基或二烷基氨基。碳原子数通常约为 1 至 40。其具体实例包括: 甲基氨基、二甲基氨基、乙基氨基、二乙基氨基、丙基氨基、二丙基氨基、异丙基氨基、二异丙基氨基、丁基氨基、异丁基氨基、叔丁基氨基、戊基氨基、己基氨基、环己基氨基、庚基氨基、辛基氨基、2-乙基己基氨基、壬基氨基、癸基氨基、3,7-二甲基辛基氨基、十二烷基氨基、环戊基氨基、二环戊基氨基、环己基氨基、二环己基氨基、吡咯烷基、哌啶基、二(三氟甲基)氨基等; 且优选戊基氨基、己基氨基、辛基氨基、2-乙基己基氨基、癸基氨基和 3,7-二甲基辛基氨基。

[0205] 芳基可以含有取代基, 并且碳原子数通常为约 3 至 60, 且其具体实例包括苯基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基 (C_1-C_{12} 表示 1 至 12 个碳原子数。以下相同)、 C_1-C_{12} 烷基苯基、1-萘基、2-萘基、五氟苯基、吡啶基、哒嗪基、嘧啶基、吡嗪基、三嗪基等; 且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯基和 C_1-C_{12} 烷基苯基。

[0206] 芳氧基可以在芳族环上含有取代基, 并且碳原子数通常为约 3 至 60。其具体实例

包括苯氧基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯氧基、 C_1-C_{12} 烷基苯氧基、1- 萘氧基、2- 萘氧基、五氟苯氧基、吡啶基氧基、哒嗪基氧基、嘧啶基氧基、吡嗪基氧基、三嗪基氧基等；且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯氧基和 C_1-C_{12} 烷基苯氧基。

[0207] 芳硫基可以在芳族环上含有取代基，并且碳原子数通常为约 3 至 60。其具体实例包括苯硫基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯硫基、 C_1-C_{12} 烷基苯硫基、1- 萘硫基、2- 萘硫基、五氟苯硫基、吡啶基硫基、哒嗪基硫基、嘧啶基硫基、吡嗪基硫基、三嗪基硫基等；且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯硫基和 C_1-C_{12} 烷基苯硫基。

[0208] 芳基氨基可以在芳族环上含有取代基，并且碳原子数通常为约 3 至 60。其具体实例包括苯基氨基、二苯基氨基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基氨基、二 (C_1-C_{12} 烷氧基苯基) 氨基、二 (C_1-C_{12} 烷基苯基) 氨基、1- 萘基氨基、2- 萘基氨基、五氟苯基氨基、吡啶基氨基、哒嗪基氨基、嘧啶基氨基、吡嗪基氨基、三嗪基氨基等；且优选 C_1-C_{12} 烷基苯基氨基和二 (C_1-C_{12} 烷基苯基) 氨基。

[0209] 芳基烷基可以在芳族环上含有取代基，并且碳原子数通常为约 7 至 60。其具体实例包括苯基- C_1-C_{12} 烷基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷基、 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷基、1- 萘基- C_1-C_{12} 烷基、2- 萘基- C_1-C_{12} 烷基等；且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷基和 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷基。

[0210] 芳基烷氧基可以在芳族环上含有取代基，并且碳原子数通常为约 7 至 60。其具体实例包括苯基- C_1-C_{12} 烷氧基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷氧基、 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷氧基、1- 萘基- C_1-C_{12} 烷氧基、2- 萘基- C_1-C_{12} 烷氧基等；且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷氧基和 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷氧基。

[0211] 芳基烷硫基可以在芳族环上含有取代基，并且碳原子数通常为约 7 至 60。其具体实例包括苯基- C_1-C_{12} 烷硫基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷硫基、 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷硫基、1- 萘基- C_1-C_{12} 烷硫基、2- 萘基- C_1-C_{12} 烷硫基等；且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷硫基和 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷硫基。

[0212] 芳基烷基氨基通常具有约 7 至 60 个碳原子，且其具体实例包括苯基- C_1-C_{12} 烷基氨基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷基氨基、 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷基氨基、二 (C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷基) 氨基、二 (C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷基) 氨基、1- 萘基- C_1-C_{12} 烷基氨基、2- 萘基- C_1-C_{12} 烷基氨基等；且优选 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷基氨基和二 (C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷基) 氨基。

[0213] 磺酸酯基的实例包括：苯磺酸酯基、对- 甲苯磺酸酯基、甲磺酸酯基、乙磺酸酯基和三氟甲磺酸酯基。

[0214] 杂环配体是通过连接杂环如吡啶环、吡咯环、噁吩环、噁唑环、呋喃环和苯环而构成的配体。其具体实例包括：苯基吡啶、2-(对苯基苯基) 吡啶、7- 溴苯并 [h] 喹啉、2-(4- 噁吩-2- 基) 吡啶、2-(4- 苯基噁吩-2- 基) 吡啶、2- 苯基苯并噁唑、2-(对苯基苯基) 苯并噁唑、2- 苯基苯并噁唑、2-(对苯基苯基) 苯并噁唑、2-(苯并噁吩-2- 基) 吡啶、1, 10- 菲咯啉、2, 3, 7, 8, 12, 13, 17, 18- 八乙基-21H, 23H- 卟啉等。它可以是配价键，也可以是共价键。

[0215] 至于羰基化合物，示例的是具有通过氧原子与 M 形成配价键的那些，且其实例包括：酮，如一氧化碳和丙酮，二苯甲酮；和二酮，如乙酰丙酮，和二氢茚并 (acenaphtho) 醌。

[0216] 至于醚，示例的是具有通过氧原子与 M 形成配价键的那些，且其实例包括：二甲基

醚、二乙基醚、四氢呋喃、1,2-二甲氧基乙烷等。

[0217] 至于胺, 示例的是通过氮原子与 M 形成配价键的那些, 且其实例包括: 一元胺, 如三甲胺、三乙胺、三丁胺、三苯胺、三苯胺、二甲基苯基胺和甲基二苯基胺; 和二胺, 如 1,1,2,2-四甲基乙二胺, 1,1,2,2-四苯基乙二胺、1,1,2,2-四甲基-邻-苯二胺。

[0218] 至于亚胺, 示例的是通过氮原子与 M 形成配价键的那些, 且其实例包括: 一元亚胺, 如苯亚甲基苯胺、苯亚甲基苄胺和苯亚甲基甲胺; 和二亚胺, 如二苯亚甲基乙二胺、二苯亚甲基-邻-苯二胺和 2,3-二(苯胺基)丁烷。

[0219] 至于膦, 示例的是通过磷原子与 M 形成配价键的那些, 且其实例包括: 三苯膦、二苯基膦基乙烷和二苯基膦基丙烷。至于亚磷酸酯, 示例的是通过磷原子与 M 形成配价键的那些, 且其实例包括: 三甲基亚磷酸酯、三乙基亚磷酸酯和三苯基亚磷酸酯。

[0220] 至于硫醚, 示例的是通过硫原子与 M 形成配价键的那些, 且其实例包括: 二甲基硫醚、二乙基硫醚、二苯基硫醚和茴香硫醚。

[0221] M 代表金属原子, 其原子数为 50 或以上, 并且具有通过自旋轨道相互作用在该配合物中的单重态和三重态之间进行系统间跨越的可能性。

[0222] 至于多齿配体, 其是烷基、烷氧基、酰氧基、烷硫基、烷基氨基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基氨基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烷基氨基、磺酸酯基、氰基、杂环配体、羰基化合物、醚、胺、亚胺、膦、亚磷酸酯和硫醚的组合, 示例的是丙酮化物, 如乙酰丙酮化物, 二苯并甲基化物和噻吩甲酰三氟丙酮化物。

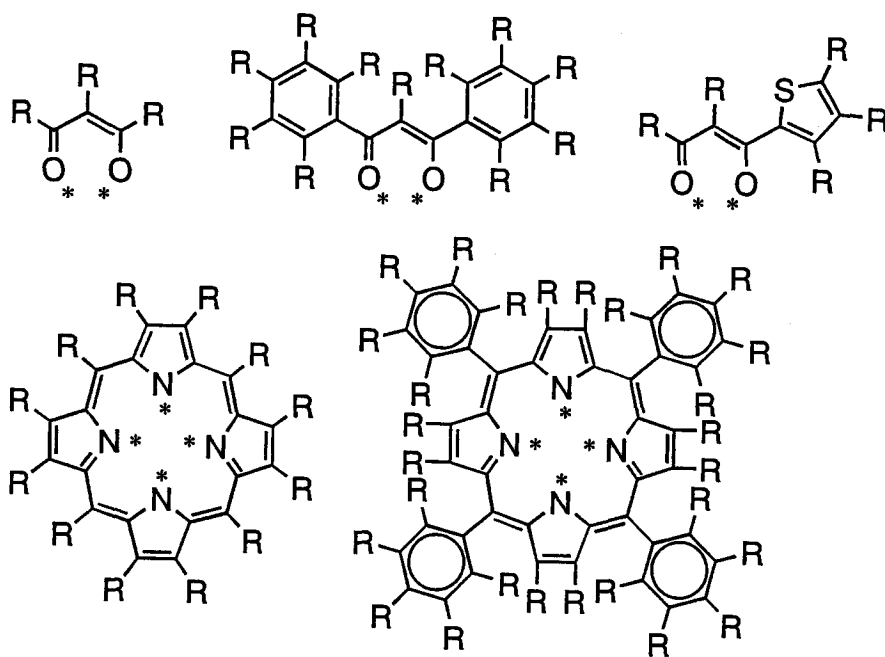
[0223] M 表示的原子的实例包括: 铈原子、镱原子、铟原子、铂原子、金原子、镧原子、铈原子、镨原子、钕原子、钐原子、铈原子、钆原子、铈原子、钐原子、铈原子、镧原子、铈原子、镧原子、铈原子和镧原子等; 优选铈原子、镱原子、铟原子、铂原子、金原子、钐原子、铈原子、钐原子、铈原子和镧原子等; 考虑到发光效率, 更优选铈原子、铂原子、金原子和钐原子。

[0224] H, 作为与 M 连接的原子, 表示含有一个或多个选自氮原子、氧原子、碳原子、硫原子和磷原子中的原子的配体。

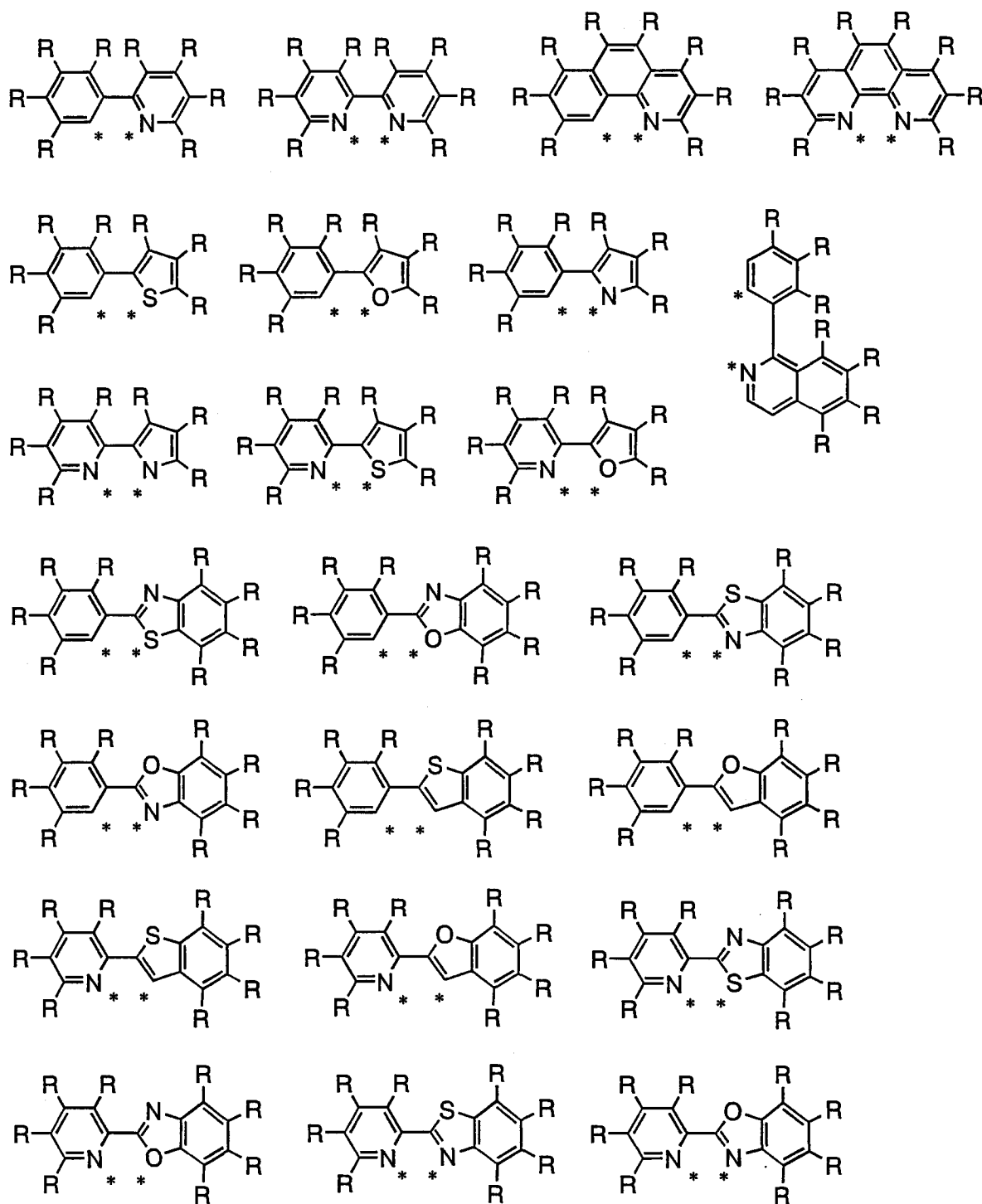
[0225] 至于与 M 连接的原子, 含有一个或多个选自氮原子、氧原子、碳原子、硫原子和磷原子中的原子的配体与关于 K 所示例的那些相同。

[0226] 至于 H, 示例的是下列。其中, * 表示与 M 连接的原子。

[0227]



[0228]



[0229] 其中，R各自独立地表示氢原子、卤素原子、烷基、烷氧基、烷硫基、烷基氨基、烷基甲硅烷基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基氨基、芳基甲硅烷基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烷基氨基、芳基烷基甲硅烷基、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、芳基烯基、芳基炔基、氰基或一价杂环基。R可以相互连接形成环。为了改善在溶剂中的溶解性，优选至少一个R含有长链烷基。

[0230] 烷基、烷氧基、酰氧基、烷硫基、烷基氨基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基氨基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基和芳基烷基氨基的具体实例与上面所述的Y的那些相同。

[0231] 至于卤素原子，示例的是氟、氯、溴和碘。

[0232] 烷基甲硅烷基可以是直链、支链或环状烷基甲硅烷基中的任何一种,并且碳原子数通常为约 1 至 60。其具体实例包括:三甲基甲硅烷基、三乙基甲硅烷基、三丙基甲硅烷基、三异丙基甲硅烷基、二甲基-异丙基甲硅烷基、二乙基-异丙基甲硅烷基、叔丁基甲硅烷基二甲基甲硅烷基、戊基二甲基甲硅烷基、己基二甲基甲硅烷基、庚基二甲基甲硅烷基、辛基二甲基甲硅烷基、2-乙基己基-二甲基甲硅烷基、壬基二甲基甲硅烷基、癸基二甲基甲硅烷基、3,7-二甲基辛基二甲基甲硅烷基、十二烷基二甲基甲硅烷基等;并且优选戊基二甲基甲硅烷基、己基二甲基甲硅烷基、辛基二甲基甲硅烷基、2-乙基己基-二甲基甲硅烷基、癸基二甲基甲硅烷基和 3,7-二甲基辛基二甲基甲硅烷基。

[0233] 芳基甲硅烷基可以在芳族环上含有取代基,碳原子数通常为约 3 至 60,且其具体实例包括:三苯基甲硅烷基、三-对二甲苯基甲硅烷基、三苄基甲硅烷基、二苯基甲基甲硅烷基、叔丁基二苯基甲硅烷基、二甲基苯基甲硅烷基等。

[0234] 芳基烷基甲硅烷基通常具有约 7 至 60 个碳原子。其具体实例包括:苯基- C_1-C_{12} 烷基甲硅烷基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷基甲硅烷基、 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷基甲硅烷基、1-萘基- C_1-C_{12} 基甲硅烷基、2-萘基- C_1-C_{12} 烷基甲硅烷基、苯基- C_1-C_{12} 烷基二甲基甲硅烷基等;并且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烷基甲硅烷基和 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烷基甲硅烷基。

[0235] 酰基通常含有约 2 至 20 个碳原子。其具体实例包括乙酰基、丙酰基、丁酰基、异丁酰基、新戊酰基、苯甲酰基、三氟乙酰基、五氟苯甲酰基等。

[0236] 酰氧基通常含有约 2 至 20 个碳原子。其具体实例包括乙酰氧基、丙酰氧基、丁酰氧基、异丁酰氧基、新戊酰氧基、苯甲酰氧基、三氟乙酰氧基、五氟苯甲酰氧基等。

[0237] 亚胺残基的定义及具体实例与上面所述的那些相同。

[0238] 酰胺基通常含有约 2 至 20 个碳原子,并且其具体实例包括甲酰胺基、乙酰胺基、丙酰胺基、丁酰胺基、苯甲酰胺基、三氟乙酰胺基、五氟苯甲酰胺基、二甲酰胺基、二乙酰胺基、二丙酰胺基、二丁酰胺基、二苯甲酰胺基、二(三氟乙酰胺基)、二(五氟苯甲酰胺基)、琥珀酰亚胺基、邻苯二甲酰亚胺基等。

[0239] 芳基烯基通常含有约 7 至 60 个碳原子,其具体实例包括苯基- C_1-C_{12} 烯基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烯基、 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烯基、1-萘基- C_1-C_{12} 烯基、2-萘基- C_1-C_{12} 烯基等;并且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 烯基和 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 烯基。

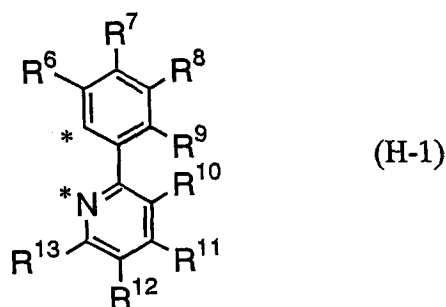
[0240] 芳基炔基通常含有约 7 至 60 个碳原子,其具体实例包括苯基- C_1-C_{12} 炔基、 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 炔基、 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 炔基、1-萘基- C_1-C_{12} 炔基、2-萘基- C_1-C_{12} 炔基等;并且优选 C_1-C_{12} 烷氧基苯基- C_1-C_{12} 炔基和 C_1-C_{12} 烷基苯基- C_1-C_{12} 炔基。

[0241] 一价杂环基是指其中从杂环化合物中去除氢原子的原子团,并且通常含有约 4 至 60 个碳原子。其具体实例包括噻吩基、 C_1-C_{12} 烷基噻吩基、吡啶基、吡咯基(pyrryl group)、咪喃基、 C_1-C_{12} 烷基吡啶基等;并且优选噻吩基、 C_1-C_{12} 烷基噻吩基、吡啶基和 C_1-C_{12} 烷基吡啶基。

[0242] 考虑到化合物的稳定性,优选 H 通过至少一个氮原子或碳原子与 M 结合,并且更优选 H 在多齿位与 M 结合。

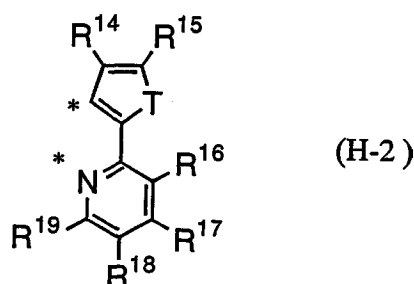
[0243] 更优选 H 由下式 (H-1)、(H-2)、(H-3) 或 (H-4) 表示:

[0244]



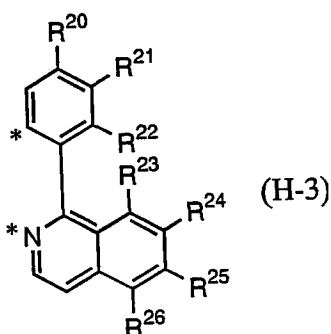
[0245] (其中, R^6 - R^{13} 各自独立地表示氢原子、卤素原子、烷基、烷氧基、烷硫基、烷基氨基、烷基甲硅烷基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基氨基、芳基甲硅烷基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烷基氨基、芳基烷基甲硅烷基、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、芳基烯基、芳基炔基、氰基和一价杂环基, 且 * 表示与 M 的结合位置)。

[0246]

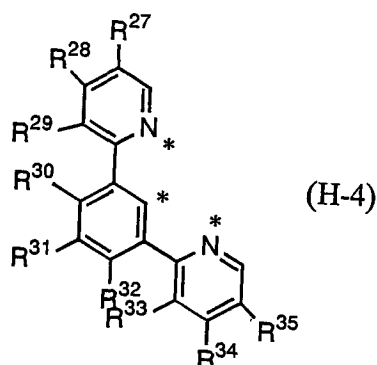


[0247] (其中, T 表示氧原子或硫原子。 R^{14} - R^{19} 各自独立地表示氢原子、卤素原子、烷基、烷氧基、烷硫基、烷基氨基、烷基甲硅烷基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基氨基、芳基甲硅烷基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烷基氨基、芳基烷基甲硅烷基、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、芳基烯基、芳基炔基和氰基, 且 * 表示与 M 的结合位置)。

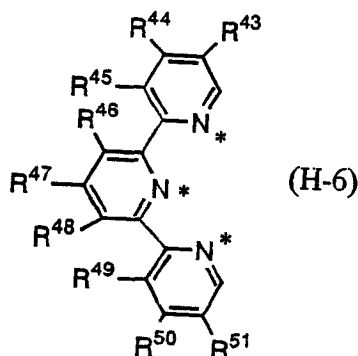
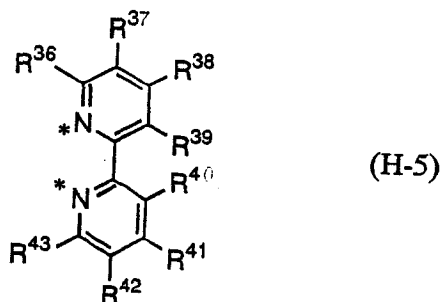
[0248]



[0249]



[0250]



[0251] (其中, R^{20} - R^{51} 各自独立地表示氢原子、卤素原子、烷基、烷氧基、烷硫基、烷基氨基、烷基甲硅烷基、芳基、芳氧基、芳硫基、芳基氨基、芳基甲硅烷基、芳基烷基、芳基烷氧基、芳基烷硫基、芳基烷基氨基、芳基烷基甲硅烷基、酰基、酰氧基、亚胺残基、酰胺基、芳基烯基、芳基炔基、氰基, 且 * 表示与 M 的结合位置)。

[0252] 本发明中发光材料中的三重态发光化合物 (B) 的量基于 100 重量份的聚合物化合物通常为 0.01-80 重量份, 优选为 0.1-60 重量份, 尽管该量没有限制, 因为它取决于所组合的聚合物化合物的种类以及将最优化的特性。

[0253] 本发明的发光材料可以是在主链中包含芳环的共轭聚合物化合物, 并且所述的聚合物化合物具有衍生自在分子中显示由三重激发态发光的化合物 (B) 的结构。

[0254] 本发明的的发光材料还可以包含至少一种选自空穴输送材料、电子输送材料和发光材料中的材料。本发明还涉及一种发光薄膜, 其包含如上所述的发光材料。本发明还涉及一种导电薄膜, 其包含如上所述的发光材料。本发明还涉及一种有机半导体薄膜, 其包含如上所述的发光材料。

[0255] 本发明还涉及一种聚合物发光器件, 其在由阳极和阴极组成的电极之间具有有机层, 其中所述的有机层含有本发明的发光材料, 优选地所述的有机层是发光层。

[0256] 接着, 将解释本发明的聚合物发光器件 (聚合物 LED)。其特征在于, 在阳极和阴极组成的电极之间具有含本发明的发光材料的层。

[0257] 优选含本发明的发光材料的层是发光层。

[0258] 本发明还涉及一种聚合物发光器件, 其中所述的发光层还可以含有空穴输送材料、电子输送材料或发光材料。

[0259] 此外, 本发明的聚合物 LED 包括: 在阴极和发光层之间具有电子输送层的聚合物 LED; 在阳极和发光层之间具有空穴输送层的聚合物 LED; 和在阴极和发光层之间具有电子输送层, 并且在阳极和发光层之间具有空穴输送层的聚合物 LED。

[0260] 此外,示例的是:其中在上述电极的至少一个与邻近该电极的发光层之间安置含导电聚合物的层的聚合物 LED;和其中在上述电极的至少一个与邻近该电极的发光层之间安置平均膜厚度为 2nm 或以下的缓冲层的聚合物 LED。

[0261] 具体地,示例的是下面的结构 a) 至 d):

[0262] a) 阳极 / 发光层 / 阴极

[0263] b) 阳极 / 空穴输送层 / 发光层 / 阴极

[0264] c) 阳极 / 发光层 / 电子输送层 / 阴极

[0265] d) 阳极 / 空穴输送层 / 发光层 / 电子输送层 / 阴极

[0266] (其中,“/”是指相邻的层的层叠。以下,相同)

[0267] 这里,发光层是具有发射光的功能的层,空穴输送层是具有输送空穴功能的层,电子输送层是具有输送电子功能的层。这里,电子输送层和空穴输送层总称为电荷输送层。

[0268] 还可以各自独立地使用两层或更多层的发光层、空穴输送层和电子输送层。

[0269] 通常,有时特别称邻近电极安置的电荷输送层为电荷注入层(空穴注入层、电子注入层),所述的电荷输送层具有改善自电极的电荷注入效率的功能和具有减少器件的驱动电压的效果。

[0270] 为了提高与电极的粘合力和改善来自电极的电荷注入,还可以在邻近电极处提供上述电荷注入层或厚度为 2nm 或以下的绝缘层,此外,为了提高界面的粘合力、防止混合等,还可以将薄缓冲层插入到电荷输送层和发光层的界面中。

[0271] 在考虑器件的发光率和使用寿命的同时,可以适当应用所层压的层的顺序和数量以及每层的厚度。

[0272] 在本发明中,至于所提供的具有电荷注入层(电子注入层、空穴注入层)的聚合物 LED,列出的是具有在邻近阴极提供的电荷注入层的聚合物 LED 和具有在邻近阳极提供的电荷注入层的聚合物 LED。

[0273] 例如,特别示例的是下面的结构 e) 至 p):

[0274] e) 阳极 / 电荷注入层 / 发光层 / 阴极

[0275] f) 阳极 / 发光层 / 电荷注入层 / 阴极

[0276] g) 阳极 / 电荷注入层 / 发光层 / 电荷注入层 / 阴极

[0277] h) 阳极 / 电荷注入层 / 空穴输送层 / 发光层 / 阴极

[0278] i) 阳极 / 空穴输送层 / 发光层 / 电荷注入层 / 阴极

[0279] j) 阳极 / 电荷注入层 / 空穴输送层 / 发光层 / 电荷注入层 / 阴极

[0280] k) 阳极 / 电荷注入层 / 发光层 / 电子输送层 / 阴极

[0281] l) 阳极 / 发光层 / 电子输送层 / 电荷注入层 / 阴极

[0282] m) 阳极 / 电荷注入层 / 发光层 / 电子输送层 / 电荷注入层 / 阴极

[0283] n) 阳极 / 电荷注入层 / 空穴输送层 / 发光层 / 电子输送层 / 阴极

[0284] o) 阳极 / 空穴输送层 / 发光层 / 电子输送层 / 电荷注入层 / 阴极

[0285] p) 阳极 / 电荷注入层 / 空穴输送层 / 发光层 / 电子输送层 / 电荷注入层 / 阴极

[0286] 至于电荷注入层的具体实例,示例的是包含导电聚合物的层,安置在阳极和空穴输送层之间并且包含电离电位在阳极材料电离电位和空穴输送层所含空穴输送材料电离电位之间的材料的层,安置在阴极和电子输送层之间并且包含具有电子亲合性在阴极材料

电子亲合性和电子输送层所含电子输送材料电子亲合性之间的材料的层,等。

[0287] 当上述电荷注入层是包含导电聚合物的层时,优选导电聚合物的电导率为 10^{-5} S/cm 或更高和 10^3 S/cm 或更低,并且为了降低发光像素之间的泄漏电流,更优选为 10^{-5} S/cm 或更高和 10^2 S/cm 或更低,进一步优选为 10^{-5} S/cm 或更高和 10^1 S/cm 或更低。

[0288] 通常,为了提供电导率为 10^{-5} S/cm 或更高和 10^3 S/cm 或更低的导电聚合物,向导电聚合物中掺杂适宜量的离子。

[0289] 至于掺杂离子的种类,在空穴注入层中使用阴离子而在电子注入层中使用阳离子。至于阴离子的实例,示例的是聚苯乙烯磺酸根离子、烷基苯磺酸根离子、樟脑磺酸根离子等,并且至于阳离子的实例,示例的是锂离子、钠离子、钾离子、四丁基铵离子等。

[0290] 电荷注入层的厚度为例如 1nm 至 100nm,优选为 2nm 至 50nm。

[0291] 考虑到电极材料与邻近层的关系,可以适当选择在电荷注入层中使用的材料,示例的是导电聚合物,例如聚苯胺及其衍生物、聚噻吩及其衍生物、聚吡咯及其衍生物、聚(亚苯基亚乙烯基)及其衍生物、聚(亚噻吩基亚乙烯基)及其衍生物、聚喹啉及其衍生物、聚喹啉及其衍生物、在其主链或侧链中包含芳族胺结构的聚合物等,以及金属酞菁(铜酞菁等),碳等。

[0292] 厚度为 2nm 或更低的绝缘层具有使电荷注入容易的功能。至于上述的绝缘层的材料,列出的是金属氟化物、金属氧化物、有机绝缘材料等。至于具有厚度为 2nm 或更低的绝缘层的聚合物 LED,列出的是具有在邻近阴极提供的厚度为 2nm 或更低的绝缘层的聚合物 LED,和具有在邻近阳极提供的厚度为 2nm 或更低的绝缘层的聚合物 LED。

[0293] 具体地,例如,列出的是下面结构 q) 至 ab) :

[0294] q) 阳极 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 发光层 / 阴极

[0295] r) 阳极 / 发光层 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 阴极

[0296] s) 阳极 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 发光层 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 阴极

[0297] t) 阳极 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 空穴输送层 / 发光层 / 阴极

[0298] u) 阳极 / 空穴输送层 / 发光层 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 阴极

[0299] v) 阳极 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 空穴输送层 / 发光层 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 阴极

[0300] w) 阳极 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 发光层 / 电子输送层 / 阴极

[0301] x) 阳极 / 发光层 / 电子输送层 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 阴极

[0302] y) 阳极 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 发光层 / 电子输送层 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 阴极

[0303] z) 阳极 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 空穴输送层 / 发光层 / 电子输送层 / 阴极

[0304] aa) 阳极 / 空穴输送层 / 发光层 / 电子输送层 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 阴极

[0305] ab) 阳极 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 空穴输送层 / 发光层 / 电子输送层 / 厚度为 2nm 或更低的绝缘层 / 阴极

[0306] 空穴防止层是具有输送电子并且限制由阳极输送的空穴的功能的层,该层是在发光层的阴极侧上的界面处制备的,并且是由电离电位大于发光层的材料组成的,所述的材

料例如浴铜灵、8-羟基喹啉或其衍生物的金属配合物。

[0307] 空穴防止层的膜厚度为例如 1nm 至 100nm, 优选为 2nm 至 50nm。

[0308] 具体地, 例如, 列出的是下面结构的 ac) 至 an) :

[0309] ac) 阳极 / 电荷注入层 / 发光层 / 空穴防止层 / 阴极

[0310] ad) 阳极 / 发光层 / 空穴防止层 / 电荷注入层 / 阴极

[0311] ae) 阳极 / 电荷注入层 / 发光层 / 空穴防止层 / 电荷注入层 / 阴极

[0312] af) 阳极 / 电荷注入层 / 空穴输送层 / 发光层 / 空穴防止层 / 阴极

[0313] ag) 阳极 / 空穴输送层 / 发光层 / 空穴防止层 / 电荷注入层 / 阴极

[0314] ah) 阳极 / 电荷注入层 / 空穴输送层 / 发光层 / 空穴防止层 / 电荷注入层 / 阴极

[0315] ai) 阳极 / 电荷注入层 / 发光层 / 空穴防止层 / 电荷输送层 / 阴极

[0316] aj) 阳极 / 发光层 / 空穴防止层 / 电子输送层 / 电荷注入层 / 阴极

[0317] ak) 阳极 / 电荷注入层 / 发光层 / 空穴防止层 / 电子输送层 / 电荷注入层 / 阴极

[0318] al) 阳极 / 电荷注入层 / 空穴输送层 / 发光层 / 空穴防止层 / 电荷输送层 / 阴极

[0319] am) 阳极 / 空穴输送层 / 发光层 / 空穴防止层 / 电子输送层 / 电荷注入层 / 阴极

[0320] an) 阳极 / 电荷注入层 / 空穴输送层 / 发光层 / 空穴防止层 / 电子输送层 / 电荷注入层 / 阴极

[0321] 在制备聚合物 LED 时, 当通过使用本发明的这种配合物组合物或聚合物配位化合物由溶液形成膜时, 在涂布这种溶液后, 只需要通过干燥去除溶剂, 并且即使在电荷输送材料和发光材料混合的情况下, 也可以采用相同的方法, 从而导致生产中极大的优点。至于由溶液形成膜的方法, 可以使用涂布方法, 例如旋转涂布方法、浇铸方法、微型凹版印刷涂布方法、凹版印刷涂布方法、棒涂法、辊涂法、线棒涂布方法、浸渍涂布方法、喷射涂布方法、丝网印刷方法、苯胺印刷方法、胶印印刷方法、喷墨印刷方法等。

[0322] 至于发光层的厚度, 最佳值根据使用的材料而不同, 并且可以适当选择使得驱动电压和发光效率变为最佳值。例如, 它为 1nm 至 1 μ m, 优选为 2nm 至 500nm, 进一步优选为 5nm 至 200nm。

[0323] 在本发明的聚合物 LED 中, 在发光层中还可以混合不同于本发明的发光材料或发光材料聚合物配位化合物的发光材料。此外, 在本发明的聚合物 LED 中, 还可以用包含本发明上面所述的发光材料的发光层层压包含与上面所述发光材料不同的发光材料的发光层。

[0324] 至于发光材料, 可以使用已知的材料。在低分子量的化合物中, 可以使用例如萘衍生物、蒽或其衍生物、茈或其衍生物; 染料例如聚次甲基染料、咕吨染料、香豆素染料、花青染料; 8-羟基喹啉或其衍生物、芳族胺、四苯基环戊烷或其衍生物、或四苯基丁二烯或其衍生物的金属配合物等。

[0325] 具体而言, 例如, 可以使用已知的化合物, 例如 JP-A 57-51781、59-194393 等所述的那些。

[0326] 当本发明的聚合物 LED 具有空穴输送层时, 至于使用的空穴输送材料, 示例的是聚乙烯咪唑或其衍生物、聚硅烷或其衍生物、在侧链或主链中含有芳族胺的聚硅氧烷衍生物、吡啶衍生物、芳胺衍生物、1,2-二苯乙烯衍生物、三苯基二胺衍生物、聚苯胺或其衍生物、聚噻吩或其衍生物、聚吡咯或其衍生物、聚(对-亚苯基亚乙烯基)或其衍生物、聚(2,5-亚噻吩基亚乙烯基)或其衍生物等。

[0327] 空穴输送材料的具体实例包括在 JP-A 63-70257、63-175860、2-135359、2-135361、2-209988、3-37992 和 3-152184 中所述的那些。

[0328] 在它们当中,至于空穴输送层中使用的空穴输送材料,优选聚合物空穴输送材料,例如聚乙烯咪唑或其衍生物、聚硅烷或其衍生物、在侧链或主链中含有芳族胺化合物基团的聚硅氧烷衍生物、聚苯胺或其衍生物、聚噻吩或其衍生物、聚(对-亚苯基亚乙烯基)或其衍生物、聚(2,5-亚噻吩基亚乙烯基)或其衍生物等,并且进一步优选为聚乙烯咪唑或其衍生物、聚硅烷或其衍生物和在侧链或主链中含有芳族胺化合物基团的聚硅氧烷衍生物。在低分子量的空穴输送材料的情况下,优选在聚合物粘合剂中分散使用。

[0329] 例如,通过由乙烯基单体的阳离子聚合或自由基聚合,得到聚乙烯咪唑或其衍生物。

[0330] 至于聚硅烷或其衍生物,示例的是描述于 Chem. Rev., 89, 1359 (1989) 和 GB 2300196 公布的说明书中所述的化合物,等。至于合成,可以使用在它们中描述的方法,并且特别可以适宜地使用 Kipping 方法。

[0331] 至于聚硅氧烷或其衍生物,示例的是具有上述的在侧链或主链中含有上述低分子量空穴输送材料的结构的那些,因为硅氧烷骨架结构的空穴输送性能差。特别地,示例的是在侧链或主链中具有芳族胺的那些,所述的芳族胺具有空穴输送性能。

[0332] 不限制形成空穴输送层的方法,并且在低分子量空穴输送层的情况下,示例的是其中由含有聚合物粘合剂的混合溶液形成层的方法。在聚合物空穴输送层的情况下,示例的是其中由溶液形成层的方法。

[0333] 不特别限制用于由溶液形成膜的溶剂,只要它可以溶解空穴输送材料。至于溶剂,示例的是氯溶剂例如氯仿、二氯甲烷、二氯乙烷等,醚溶剂例如四氢呋喃等,芳族烃溶剂例如甲苯、二甲苯等,酮溶剂例如丙酮、甲基乙基酮等,和酯溶剂例如乙酸乙酯、丁酸乙酯、乙基溶纤剂乙酸酯等。

[0334] 至于由溶液形成膜的方法,可以使用由溶液的涂布方法例如旋转涂布方法、浇铸方法、微型凹版印刷涂布方法、凹版印刷涂布方法、棒涂法、辊涂法、线棒涂布方法、浸渍涂布方法、喷射涂布方法、丝网印刷方法、苯胺印刷方法、胶印印刷方法、喷墨印刷方法等。

[0335] 本发明还涉及一种油墨组合物,其包含本发明的发光材料,优选地,其中在 25℃ 的粘度为 1 至 100mPa·s。

[0336] 优选不严重干扰电荷输送的混和的聚合物粘合剂,并且适宜使用对可见光没有强吸收的混合的聚合物粘合剂。至于这种聚合物粘合剂,示例的是聚碳酸酯、聚丙烯酸酯、聚(丙烯酸甲酯)、聚(甲基丙烯酸甲酯)、聚苯乙烯、聚(氯乙烯)、聚硅氧烷等。

[0337] 至于空穴输送层的厚度,最佳值根据使用的材料而不同,和可以适当选择使得驱动电压和发光效率变为最佳值,并且必须的是至少不产生针孔的厚度,太厚的厚度是不优选的,因为器件的驱动电压提高。因此,空穴输送层的厚度为例如 1nm 至 1 μm,优选为 2nm 至 500nm,进一步优选为 5nm 至 200nm。

[0338] 当本发明的聚合物 LED 具有电子输送层时,使用已知的化合物作为电子输送材料,示例的是噻二唑衍生物、蒽醌二甲烷 (anthraquinodimethane) 或其衍生物、苯醌或其衍生物、萘醌或其衍生物、蒽醌或其衍生物、四氰基蒽醌二甲烷或其衍生物、芴酮衍生物、二苯基二氰基乙烯或其衍生物、二苯酚合喹啉 (diphenoquinoline) 衍生物,或 8-羟基喹啉或

其衍生物、聚喹啉及其衍生物、聚喹啉及其衍生物、聚芴或其衍生物的金属配合物等。

[0339] 具体地, 示例的是在 JP-A 63-70257、63-175860、2-135359、2-135361、2-209988、3-37992 和 3-152184 中所述的那些。

[0340] 在它们当中, 优选噁二唑衍生物、苯醌或其衍生物、蒽醌或其衍生物, 或 8- 羟基喹啉或其衍生物、聚喹啉及其衍生物、聚喹啉及其衍生物、聚芴或其衍生物的金属配合物等, 并且进一步优选为 2-(4- 联苯基)-5-(4- 叔丁基苯基)-1,3,4- 噁二唑、苯醌、蒽醌、三(8- 羟基喹啉) 铝和聚喹啉。

[0341] 不特别限制形成电子输送层的方法, 并且分别地, 在低分子量电子输送材料的情况下, 示例的是由粉末的气相沉积的方法或由溶液或熔化状态形成膜的方法, 并且在聚合物电子输送材料的情况下, 示例的是由溶液或熔化状态形成膜的方法。

[0342] 不特别限制用于由溶液形成膜的溶剂, 只要它可以溶解电子输送材料和 / 或聚合物粘合剂。至于溶剂, 示例的是氯溶剂例如氯仿、二氯甲烷、二氯乙烷等, 醚溶剂例如四氢呋喃等, 芳族烃溶剂例如甲苯、二甲苯等, 酮溶剂例如丙酮、甲基乙基酮等, 酯溶剂例如乙酸乙酯、乙酸丁酯、乙基溶纤剂乙酸酯等。

[0343] 至于由溶液或熔化状态形成膜的方法, 可以使用涂布方法例如旋转涂布方法、浇铸方法、微型凹版印刷涂布方法、凹版印刷涂布方法、棒涂法、辊涂法、线棒涂布方法、浸渍涂布方法、喷射涂布方法、丝网印刷涂布方法、苯胺印刷方法、胶印印刷方法、喷墨印刷方法等。

[0344] 优选要混和的聚合物粘合剂不严重干扰电荷输送性能, 并且适宜使用的要混和的聚合物粘合剂对可见光没有强吸收。至于这种聚合物粘合剂, 示例的是聚(N- 乙基喹啉)、聚苯胺或其衍生物、聚噻吩或其衍生物、聚(对- 亚苯基亚乙烯基) 或其衍生物、聚(2, 5- 亚噻吩基亚乙烯基) 或其衍生物、聚碳酸酯、聚丙烯酸酯、聚(丙烯酸甲酯)、聚(甲基丙烯酸甲酯)、聚 苯乙烯、聚(氯乙烯)、聚硅氧烷等。

[0345] 至于电子输送层的厚度, 最佳值根据使用的材料而不同, 并且可以适当选择使得驱动电压和发光效率变为最佳值, 必须的是至少不产生针孔的厚度, 并且太厚的厚度是不优选的, 因为器件的驱动电压提高。因此, 电子输送层的厚度为例如 1nm 至 1 μ m, 优选为 2nm 至 500nm, 进一步优选为 5nm 至 200nm。

[0346] 优选形成本发明聚合物 LED 的衬底可以是在形成电极和有机材料层中不变化的衬底, 示例的是玻璃、塑料、聚合物膜、硅衬底等。在不透明衬底的情况下, 优选相对的电极是透明的或半透明的。

[0347] 通常, 由阳极和阴极组成的电极中的至少一个是透明的或半透明的。优选阳极是透明的或半透明的。

[0348] 至于这种阳极的材料, 使用的是导电金属氧化膜、半透明金属薄膜等。具体地, 使用的是氧化铟、氧化锌、氧化锡及其组合物, 即, 铟 / 锡 / 氧化物 (ITO), 和通过使用由铟 / 锌 / 氧化物组成的导电玻璃制成的膜 (NESA 等) 等, 和金、铂、银、铜等。在它们当中, 优选 ITO、铟 / 锌 / 氧化物、氧化锡。至于制造方法, 使用的是真空气相沉积方法、溅射方法、离子电镀方法、电镀方法等。至于阳极, 还可以使用有机透明导电膜, 例如聚苯胺或其衍生物、聚噻吩或其衍生物等。

[0349] 在考虑光的透射和导电率的同时, 可以适当选择阳极的厚度, 例如为 10nm 至

10 μm , 优选为 20nm 至 1 μm , 进一步优选为 50nm 至 500nm。

[0350] 此外, 为了电荷注入容易, 可以在阳极上提供包含酞菁衍生物导电聚合物、碳等的层, 或平均膜厚度为 2nm 或更低的包含金属氧化物、金属氟化物、有机绝缘材料等的层等。

[0351] 至于本发明聚合物 LED 中使用的阴极材料, 优选具有更低功函的材料。例如, 使用金属, 例如锂、钠、钾、铷、铯、铍、镁、钙、锶、钡、铝、钪、钒、锌、钇、铟、铊、铋、镉、镱等, 或包含它们中的两种或多种的合金, 或包含它们中的一种或多种与金、银、铂、铜、锰、钛、钴、镍、钨和锡的一种或多种的合金, 石墨或石墨夹层化合物等。合金的实例包括镁 - 银合金、镁 - 铟合金、镁 - 铝合金、铟 - 银合金、锂 - 铝合金、锂 - 镁合金、锂 - 铟合金、钙 - 铝合金等。阴极可以形成为两层或多层的层压结构。

[0352] 在考虑光的透射和导电率的同时, 可以适当选择阴极的厚度, 例如为 10nm 至 10 μm , 优选为 20nm 至 1 μm , 更优选为 50nm 至 500nm。

[0353] 至于制造阴极的方法, 使用的是真空气相沉积方法、溅射方法, 和其中在热和压力等下粘合金属薄膜的层压方法。此外, 在阴极和有机层之间还可以提供包含导电聚合物的层, 或平均膜厚度为 2nm 或更低的包含金属氧化物、金属氟化物、有机绝缘材料等的层, 并且在制造阴极后, 还可以提供保护聚合物 LED 的保护层。为了长期稳定使用聚合物 LED, 优选提供保护层和 / 或保护盖以保护器件, 目的在于防止从外面的破坏。

[0354] 至于保护层, 可以使用聚合化合物、金属氧化物、金属氟化物、金属硼酸盐等。至于保护盖, 可以使用玻璃片、塑料片, 其表面已经进行低渗水性处理等, 并且适当使用其中由密封用的热固性树脂或光固化树脂将盖与器件衬底粘贴在一起的方法。如果使用隔板保持空间, 容易防止器件受到损坏。如果在该空间密封了内部气体例如氮和氩, 可以防止阴极的氧化, 此外, 通过在上述空间放置干燥剂例如氧化钡等, 可以容易地抑制由在生产过程中粘附的湿气导致的器件破坏。在它们当中, 优选采用一种或多种方法。

[0355] 本发明的聚合物 LED 可以用于平板光源、分段显示器、点矩阵显示器和液晶显示器作为背光, 等。

[0356] 为了使用本发明的聚合物 LED 得到平面形式的发光, 可以适当以平面形式放置阳极和阴极, 使得它们相互层压。此外, 为了得到图案形式的发光, 一种方法是在上述的平面光发光器件上放置具有图案形式的窗口的掩模, 一种方法是在非发光部分中形成有机层以得到提供基本不发光的非常厚的厚度, 一种方法是以图案形式形成阳极或阴极中的任何一种, 或它们中的两种。通过由这些方法中的任何一种形成图案和通过放置一些电极, 使得可以独立开 / 关, 得到分段型显示器件, 其可以显示数字、字母、简单标记等。此外, 为了形成点矩阵显示器, 将阳极和阴极制成条状形式并且放置使得它们直角交叉可能是有利的。通过其中分开放置多种发出不同颜色的光的聚合化合物的方法, 或其中使用滤色镜或发光转换滤光器的方法, 得到区域彩色 (area color) 显示器和多彩色显示器。点矩阵显示器可以通过被动驱动, 或通过 TFT 组合的主动驱动等来驱动。可以使用这些显示器件作为计算机、电视机、便携终端、手提电话、汽车导航、摄影机的取景器等显示器。

[0357] 此外, 上述的平面形式的发光器件是薄自发光器件, 并且可以适当地用作液晶显示器的背光用的平光源, 或用作发光的平光源。此外, 如果使用挠性板, 它还可以用作弯曲的光源或显示器。

[0358] 以下, 为了详细地解释本发明, 参考所示的实施例, 但是本发明不受这些实施例的

限制。

[0359] 聚苯乙烯换算的数均分子量是通过凝胶渗透色谱法 (GPC ;HLC-8220GPC, 由 TOSOH 制造, 或 SCL-10A, 由 Shimadzu 制造) 使用四氢呋喃或氯仿作为溶剂而得到的。

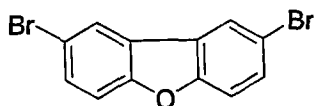
[0360] 柱子 :两根 TOSOH TSKgel SuperHM-H+TSKgel SuperH2000 (4.6mmI. d. ×15cm)

[0361] 检测器 :使用的是 RI (SHIMADZU RID-10A)。

[0362] 合成实施例 1-5 :聚合物化合物 1-1 的合成

[0363] 合成实施例 1 (化合物 A 的合成)

[0364]



[0365] 化合物 A

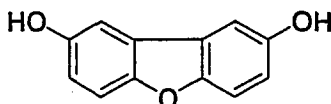
[0366] 在惰性气氛下, 将苯并呋喃 (23.2g, 137.9mmol) 和乙酸 (232g) 加入至 1L 的三颈烧瓶中, 在室温下搅拌溶解, 然后将温度升高至 75°C。在温度升高后, 通过逐滴加入用乙酸 (54g) 稀释的溴 (92.6g, 579.3mmol) 来制备溶液。在滴加完成后, 将混合物搅拌 3 小时, 同时保持该温度, 并使其冷却。在通过 TLC 证实原料消失后, 通过加入硫代硫酸钠的水溶液而使反应终止, 并且将混合物在室温搅拌 1 小时。搅拌后, 进行过滤, 以分离滤饼, 滤饼再用硫代硫酸钠溶液和水洗涤, 然后干燥。将得到的粗产物从己烷中重结晶, 得到所需要的产物 (产量 :21.8g, 收率 :49%)。

[0367] $^1\text{H-NMR}$ (300MHz/ CDCl_3) :

[0368] d 7.44 (d, 2H), 7.57 (d, 2H), 8.03 (s, 2H)

[0369] 合成实施例 2 (化合物 B 的合成)

[0370]



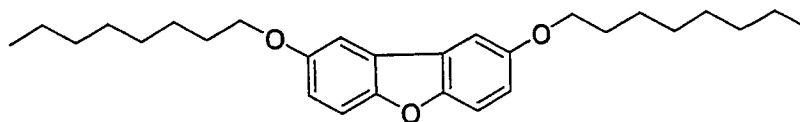
[0371] 化合物 B

[0372] 在惰性气氛下, 将化合物 A (16.6g, 50.9mmol) 和四氢呋喃 (293g) 加入至 500ml 的四颈烧瓶中, 并且冷却至 -78°C。滴加正丁基锂 (80ml < 1.6mol 己烷溶液 >, 127.3mmol), 然后将混合物搅拌 1 小时, 同时保持该温度。将该反应溶液滴加至通过将三甲氧基硼酸 (31.7g, 305.5mmol) 和四氢呋喃 (250ml) 加入至 1000ml 四颈烧瓶中并且冷却至 -78°C 而制备的溶液中。在滴加完成后, 将温度慢慢地返回至室温, 在室温下搅拌混合物 2 小时, 然后通过 TLC 证实原料消失。将反应完成的物质倾倒入 2000ml 烧杯中装入的浓硫酸 (30g) 和水 (600ml) 中, 并且完成反应。加入甲苯 (300ml), 萃取有机层, 再加入水洗涤。蒸馏掉溶剂, 然后将 8g 的溶剂和乙酸乙酯 (160ml) 放置入 300ml 的四颈烧瓶中, 然后加入 30% 过氧化氢水溶液 (7.09g), 并且在 40°C 搅拌混合物 2 小时。将反应溶液倒入至 1000ml 烧杯中的硫酸亚铁 (II) 铵 (71g) 和水 (500ml) 的水溶液中。搅拌混合物, 然后萃取有机层, 并且用水洗涤。除去溶剂, 得到 6.72g 的粗化合物 B。

[0373] MS 光谱 : M^+ 200.0

[0374] 合成实施例 3 (化合物 C 的合成)

[0375]



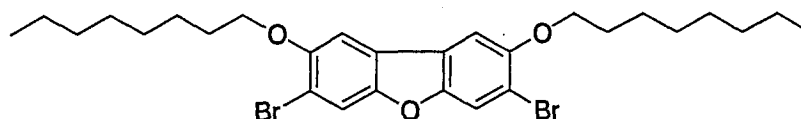
[0376] 化合物 C

[0377] 在惰性气氛下,向 200ml 的四颈烧瓶中,加入由与合成实施例 2 相同的方法合成的化合物 B(2.28g, 11.4mmol) 和 N,N-二甲基甲酰胺 (23g), 并且在室温下搅拌混合物使其溶解, 然后加入碳酸钾 (9.45g, 68.3mmol), 并且将混合物加热至 60°C。在温度升高后, 滴加通过用 N,N-二甲基甲酰胺 (11g) 稀释正辛基溴 (6.60g, 34.2mmol) 而制备的溶液。在滴加完成后, 将混合物加热至 60°C, 并且将混合物搅拌 2 小时, 同时保持该温度, 由 TLC 证实原料消失。加入水 (20ml), 使反应完成, 然后, 加入甲苯 (20ml), 萃取有机层并且用水洗涤两次。在用无水硫酸钠干燥后, 蒸馏掉溶剂。通过由硅胶柱纯化所得到的粗产物, 得到所需要的物质 (产量: 1.84g, 收率: 38%)。

[0378] MS 光谱: M^+ 425.3

[0379] 合成实施例 4 (化合物 D 的合成)

[0380]



[0381] 化合物 D

[0382] 在惰性气氛下,向 500ml 的四颈烧瓶中,加入由与合成实施例 3 相同的方法合成的化合物 C(7.50g, 17.7mmol) 和 N,N-二甲基甲酰胺, 并且室温下搅拌混合物使其溶解, 然后在冰浴中冷却。在冷却后, 滴加通过用 N,N-二甲基甲酰胺 (225ml) 稀释 N-溴代琥珀酰亚胺 (6.38g, 35.9mmol) 而制备的溶液。在滴加完成后, 将混合物在冰水中冷却 1 小时, 在室温下保持 18.5 小时, 并且加热至 40°C, 然后搅拌 6.5 小时, 同时保持该温度。由液相色谱证实原料消失。除去溶剂, 并且加入甲苯 (75ml) 以溶解, 然后用水洗涤有机层三次。在由无水硫酸钠干燥后, 蒸馏掉溶剂。通过由硅胶柱和制备液相色谱纯化约一半量的所得到的粗产物, 得到所需要的物质 (量: 0.326g)。

[0383] $^1\text{H-NMR}$ (300MHz/ CDCl_3):

[0384] d 0.90 (t, 6H), 1.26-1.95 (m, 24H), 4.11 (t, 4H), 7.34 (s, 2H), 7.74 (s, 2H)

[0385] MS 谱: M^+ 582.1

[0386] 合成实施例 5 < 聚合物化合物 1-1 的合成 >

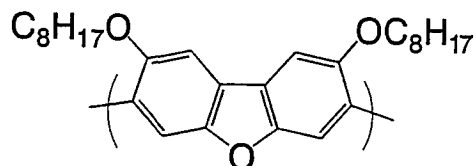
[0387] 将 6.26g 的化合物 D 和 4.7g 的 2,2'-联吡啶加入至反应容器中, 然后用氮气对反应体系中的气氛换气。向其中加入 350g 预先通过氩气鼓泡脱气的四氢呋喃 (THF) (无水溶剂)。然后, 向此混合溶液中加入 8.3g 双 (1,5-环辛二烯) 镍 (0) $[\text{Ni}(\text{COD})_2]$, 在室温下搅拌混合物 10 分钟, 然后在 60°C 反应 3 小时。该反应是在氮气气氛中进行的。

[0388] 反应后, 将该溶液冷却, 然后, 向其中加入 25% 的氨溶液 40ml / 甲醇 200ml / 离子交换水 200ml 的混合溶液, 并且搅拌混合物约 1 小时。然后, 通过过滤收集产生的沉积物。在减压下干燥沉积物, 然后溶解于 600g 甲苯中。过滤该溶液以除去不溶性材料, 然后将该溶液通过填充有氧化铝的柱子而纯化。接着, 用 1N 的盐酸洗涤该溶液。在液体分离后, 用约

3%的氨溶液洗涤甲苯相。在液体分离后,用离子交换水洗涤甲苯相。在液体分离后,收集甲苯溶液。接着,将甲醇倾倒入该甲苯溶液中,同时搅拌,从而导致再沉淀和纯化。收集产生的沉积物,然后用甲醇洗涤该沉积物。在减压下干燥沉积物,得到 2.6g 的聚合物。该聚合物的聚苯乙烯折算的数均分子量 M_n 为 1.1×10^5 , 并且聚苯乙烯折算的重均分子量 M_w 为 2.7×10^5 。

[0389] 聚合物化合物 1-1 基本上由下面的重复单元构成的均聚物

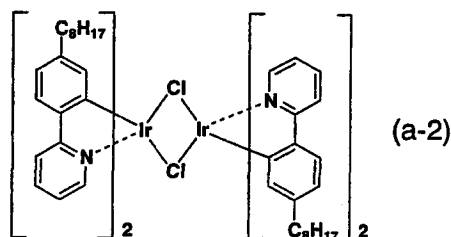
[0390]



[0391] 实施例 6 (铱配合物 A 的合成)

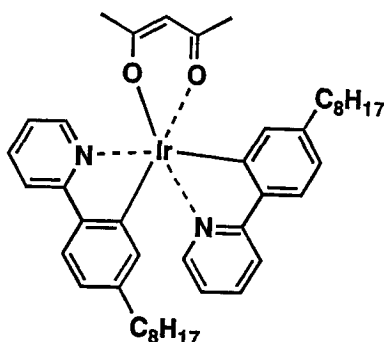
[0392] 用氩气吹扫 300ml 的四颈烧瓶,然后,向该烧瓶中,加入 760mg (1.0mmol) 下面的化合物 (a-2)、400mg (4.0mmol) 乙酰丙酮和 505mg (4.0mmol) 三乙胺,并且向其中加入 50ml 脱水甲醇。将混合物在 80°C 的浴中回流 9 小时,然后,使其冷却,并且浓缩和干燥,然后,通过使用甲苯作为溶剂的硅胶柱色谱纯化,并且蒸馏掉溶剂,得到 603g 的铱配合物 A。

[0393]



[0394] 铱配合物 A

[0395]



[0396] $^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 300MHz) δ 8.47 (2H, d), 7.78 (2H, d), 7.68 (2H, dd), 7.42 (2H, d), 7.08 (2H, dd), 6.61 (2H, d), 6.02 (2H, s), 5.19 (1H, s), 2.26 (4H, t), 1.78 (6H, s), 1.12-1.36 (24H, m), 0.87 (6H, t)。

[0397] MS (ESI- 正, KCl 加入 m/z : 824.39 ($[\text{M}+\text{K}]^+$)

[0398] 实施例 1

[0399] 制备 1.5 重量%的混合物的甲苯溶液,所述的混合物是通过以 5 重量%的量将上述铱配合物 A 加入至上述聚合物化合物 1-1 中而制备的。

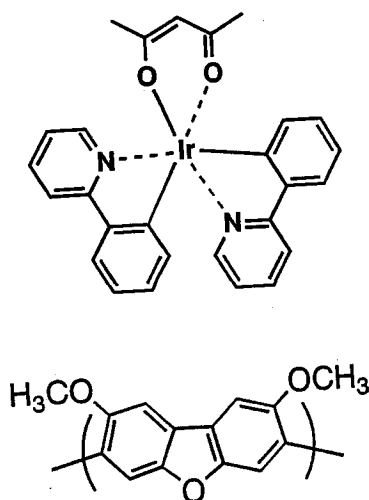
[0400] 在通过溅射方法在其上形成有厚度为 150nm 的 ITO 膜的玻璃衬底上,使用聚 (亚

乙二氧基噻吩)/聚苯乙烯磺酸的溶液(由 Bayer 制造的 BaytronP),由旋转涂布形成厚度为 50nm 的膜,并且将该膜在电热板上于 200°C 干燥 10 分钟。接着,通过使用上面所制备的氯仿溶液在 1000rpm 的旋转速度下旋转涂布形成膜。该膜的厚度为约 100nm。此外,将其在减压下于 80°C 干燥 1 小时,然后气相沉积约 4nm 厚度的 LiF 作为阴极缓冲层,并且气相沉积约 5nm 厚度的钙,然后气相沉积约 80nm 厚度的铝各自作为阴极,制造 EL 器件。在真空度达到 1×10^{-4} 帕或更低后,开始金属的气相沉积。通过向得到的器件施加电压,得到在 520nm 处具有峰值的 EL 发光。该器件在约 13V 下显示的发光为 $100\text{cd}/\text{m}^2$ 。最大发光效率为 $3.5\text{cd}/\text{A}$ 。

[0401] 聚合物化合物 1-1 和铱配合物 A 通过计算化学方法计算的最低的受激三重态能量分别为 2.82eV 和 2.70eV。聚合物化合物 1-1 的自由能级和处于基态的 LUMO 能级之间的差值为 1.76eV。

[0402] 作为计算对象的化学结构是:

[0403]



[0404] 并且由在本发明的详述中所述的方法来进行计算。

[0405] 具体地,至于铱配合物 A 和聚合物化合物 1-1,由 Hatree-Fock (HF) 方法来优化结构。在该程序中,将 1an12dz 用于在铱配合物 A 中含有的铱,并且将 6-31g* 用于铱配合物 A 中的其它原子和聚合物化合物 1-1,作为基础函数。此外,对于优化的结构,就结构优化使用相同的基础,在 b3p86 能级下,由随时间变化的密度函数 (TDDFT) 方法来计算最低的受激单重态能量、最低的受激三重态能量、HOMO 值和 LUMO 值。如下所述预先形成已对其进行计算的化学结构的如上所述的简化的有效性。

[0406] 通过使用上面所述的基础函数 6-31g*,假定在聚合物化合物 1-1 中,由作为侧链的 OCH_3 、 OC_3H_7 、 OC_5H_{11} 和 OC_8H_{17} 代替侧链 OC_8H_{17} ,由 HF 方法的计算而获得的处于基态的 HOMO 值、处于基态的 LUMO 值、最低的受激单重态能量和最低的受激三重态能量如下所述:

[0407] 表 1

[0408]

| | OC1H3 | OC3H7 | OC5H11 | OC8H17 |
|------------------|-------|-------|--------|--------|
| HOMO (eV) | -6.15 | -6.10 | -6.10 | -6.07 |
| LUMO (eV) | -1.44 | -1.39 | -1.38 | -1.37 |
| 最低的受激单重态 能量 (eV) | 4.17 | 4.16 | 4.16 | 4.16 |

| 最低的受激三重态 能量 (eV) | 3.20 | 3.19 | 3.19 | 3.19 |
|------------------|------|------|------|------|
|------------------|------|------|------|------|

[0409] 由此,通过由上面所述的计算方法的计算,认为 HOMO 值、LUMO 值、最低的受激单重态能量和最低的受激三重态能量对侧链长度的依赖性小。因此,对于聚合物化合物 1-1,将作为计算对象的化学结构的侧链简化为 OCH_3 并且进行计算。

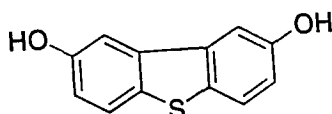
[0410] 合成实施例 7-12:聚合物化合物 1-2 的合成

[0411] 这里,聚苯乙烯换算的数均分子量是通过凝胶渗透色谱法 (GPC:HLC-8220GPC,由 TOSOH 公司制造,或 SCL-10A,由 Shimadzu 制造) 使用四氢呋喃作为溶剂而测量的。

[0412] 柱子:TOSOH TSKgel Super HM H(两根)+TSKgel Super H2000(4.6mm I. d. \times 15cm)。检测器:RI (SHIMADZU RID-10A)。移动相使用氯仿或四氢呋喃 (THF)。

[0413] 合成实施例 7(化合物 E 的合成)

[0414]



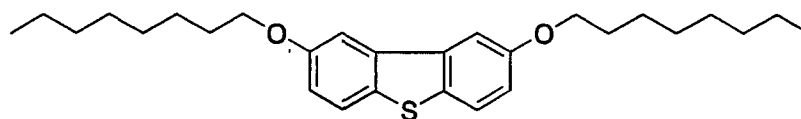
[0415] 化合物 E

[0416] 在惰性气氛下,向四颈烧瓶中,加入 7g 2,8-二溴二苯并噻吩和 280ml THP,在室温下搅拌使其溶解,然后将溶液冷却至 -78°C 。然后,滴加 29ml 正丁基锂 (1.6mol 己烷溶液)。滴加完成后,将混合物搅拌 2 小时,同时保持该温度,并且滴加 13g 三甲氧基硼酸。在滴加完成后,使温度慢慢地回到室温。在室温下搅拌 3 小时后,由 TLC 证实原料消失。加入 100ml 5% 硫酸以终止反应,并且将混合物在室温下搅拌 12 小时。向其中加入水并且洗涤反应混合物,并且分离有机层。用乙酸乙酯置换溶剂,然后加入 5ml 30% 的过氧化氢水溶液,并且将混合物于 40°C 搅拌 5 小时。然后,分离有机层,并且用 10% 硫酸亚铁 (II) 铵水溶液洗涤,然后干燥,蒸馏掉溶剂,获得 4.43g 褐色固体。由 LC-MS 测量表明,生成了副产物如二聚体,化合物 E 的纯度为 77% (基于 LC)。

[0417] MS (APCI (-)): (M-H)⁻ 215

[0418] 合成实施例 8(化合物 F 的合成)

[0419]



[0420] 化合物 F

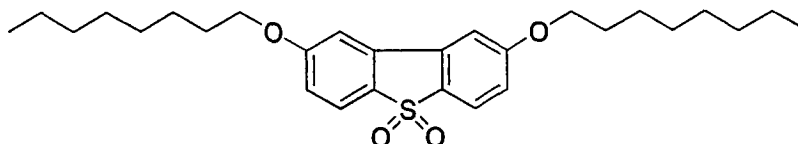
[0421] 在惰性气氛下,向 200ml 的三颈烧瓶中,加入 4.43g 的化合物 E、25.1g 的正辛基溴和 12.5g (23.5mmol) 的碳酸钾,并且加入 50ml 的甲基异丁基酮作为溶剂,并且将混合物于 125°C 加热回流 6 小时。在反应完成后,蒸馏掉溶剂,向其中加入氯仿和水,分离有机层,再用水洗涤两次。在用无水硫酸钠干燥后,进行通过硅胶柱 (展开溶剂:甲苯/环己烷=1/10) 的纯化,得到 8.49g 化合物 F (基于 LC:97%,收率:94%)。

[0422] ¹H-NMR (300MHz/ CDCl_3):

[0423] d 0.91 (t, 6H), 1.31-1.90 (m, 24H), 4.08 (t, 4H), 7.07 (ss, 2H), 7.55 (d, 2H), 7.68 (d, 2H)

[0424] 合成实施例 9(化合物 G 的合成)

[0425]



[0426] 化合物 G

[0427] 向 100ml 的三颈烧瓶中,加入 6.67g 的化合物 F 和 40ml 的乙酸,并且在油浴中将混合物加热至 140°C 的浴温。然后,通过冷却管加入 13ml 30% 的过氧化氢水溶液,强力搅拌混合物 1 小时,然后倾倒入 180ml 的冷水中以完成反应。用氯仿萃取,干燥,随后蒸馏掉溶剂,得到 6.96g 化合物 G (基于 LC :90%, 收率 :97%)。

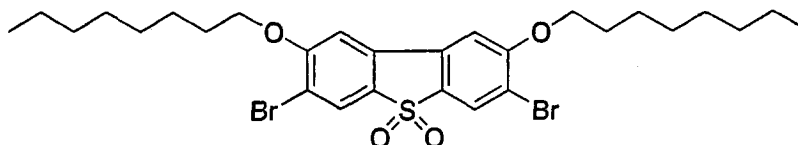
[0428] $^1\text{H-NMR}$ (300MHz/ CDCl_3) :

[0429] d 0.90 (t, 6H), 1.26-1.87 (m, 24H), 4.06 (t, 4H), 7.19 (dd, 2H), 7.69 (d, 2H), 7.84 (d, 2H)

[0430] MS (APCI (+)) : (M+H)⁺473

[0431] 合成实施例 10 (化合物 H 的合成)

[0432]



[0433] 化合物 H

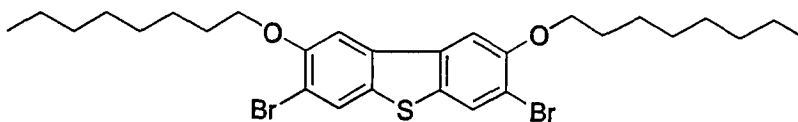
[0434] 在惰性气氛下,向 200ml 的四颈烧瓶中,加入 3.96g 的化合物 G 和 15ml 的乙酸 / 氯仿 = 1 : 1 的混合溶液,并且在 70°C 搅拌混合物溶解。加入硫代硫酸钠水溶液以除去未反应的溴,并且加入氯仿和水,分离有机层并且干燥。蒸馏掉溶剂,进行通过硅胶柱 (展开溶剂 :氯仿 / 己烷 = 1/4) 的纯化,得到 4.46g 化合物 H (基于 LC :98%, 收率 :84%)。

[0435] $^1\text{H-NMR}$ (300MHz/ CDCl_3) :

[0436] d 0.95 (t, 6H), 1.30-1.99 (m, 24H), 4.19 (t, 4H), 7.04 (s, 2H), 7.89 (s, 2H) MS (FD⁺) M⁺630

[0437] 合成实施例 11 (化合物 J 的合成)

[0438]



[0439] 化合物 J

[0440] 在惰性气氛下,向 200ml 的四颈烧瓶中,加入 3.9g 的化合物 H 和 50ml 的二乙基醚,并且将混合物加热至 40°C 且搅拌。将 1.17g 氢化铝锂分批加入,并且反应 5 小时。通过分批加入水,过量的氢化铝锂分解,并且进行用 5.8ml 36% 盐酸的洗涤。加入氯仿和水,并且分离有机层且干燥。进行通过硅胶柱 (展开溶剂 :氯仿 / 己烷 = 1/5) 的纯化,得到 1.8g 的化合物 J (基于 LC :99%, 收率 :49%)。

[0441] $^1\text{H-NMR}$ (300MHz/ CDCl_3) :

[0442] d 0.90 (t, 6H), 1.26-1.97 (m, 24H), 4.15 (t, 4H), 7.45 (s, 2H), 7.94 (s, 2H)

[0443] MS(FD+)M⁺598

[0444] 根据 MS(APCI(+)) 方法, 在 615 和 598 处检测到峰。

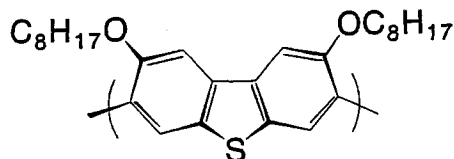
[0445] 合成实施例 12(聚合物化合物 1-2 的合成)

[0446] 将 400mg 化合物 J 和 180mg 2,2'-联吡啶溶解于 20ml 无水四氢呋喃中, 然后在氮气气氛下, 向此溶液中加入 320mg 双(1,5-环辛二烯)镍(0) {Ni(COD)₂}, 将混合物加热至 60°C, 并且反应 3 小时。反应后, 将该反应溶液冷却至室温, 并且滴加入 25% 氨溶液 10ml/ 甲醇 120ml/ 离子交换水 50ml 的混合溶液中, 搅拌混合物 30 分钟, 然后过滤沉淀的沉积物, 并且在减压下干燥 2 小时, 溶解于 30ml 甲苯中。加入 30ml 1N 盐酸, 并且搅拌混合物 3 小时, 然后除去水层, 并且将 30ml 4% 的氨溶液加入至有机层中, 并且搅拌混合物 3 小时, 然后除去水层。将有机层滴加至 150ml 甲醇中, 搅拌混合物 30 分钟, 过滤沉淀的沉积物, 并且在减压下干燥 2 小时, 然后溶解于 30ml 甲苯中。然后, 通过氧化铝柱(氧化铝量: 20g) 进行纯化, 将收集的甲苯溶液滴加至 100ml 甲醇中, 搅拌混合物 30 分钟, 以沉淀沉积物。过滤沉淀的沉积物, 并且在减压下干燥 2 小时, 得到的聚合物化合物 1-2 的产量为 120mg。

[0447] 聚合物化合物 1-2 的聚苯乙烯折算的数均分子量 $M_n = 1.3 \times 10^5$, 并且聚苯乙烯折算的重均分子量 $M_w = 2.8 \times 10^5$ 。

[0448] 聚合物化合物 1-2 基本上由下面的重复单元组成的均聚物:

[0449]



[0450] 实施例 2

[0451] 制备 0.8 重量% 的混合物的氯仿溶液, 所述的混合物是通过以 5 重量% 的量将铱配合物 A 加入至上述聚合物化合物 1-2 中而制备的, 并且以与实施例 1 中相同的方式制备器件。在膜形成中的旋转涂布器的旋转次数为 2400rpm, 并且膜厚度为约 84nm。

[0452] 通过向得到的器件施加电压, 得到在 520nm 处具有峰值的 EL 发光。该器件在约 11V 下显示的发光为 100cd/m²。最大发光效率为 2.7cd/A。

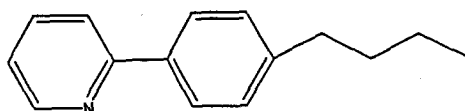
[0453] 聚合物化合物 1-2 与铱配合物 A 的荧光强度比为 0.16。荧光是使用 PR(由 JOBINYVON-SPEX 制造) 进行测量的, 并且将在 350nm 或更小处显示亮线的紫外灯用作激发光源。

[0454] 合成实施例 13

[0455] 如下所述合成铱配合物 B

[0456] 1) 配体 1 的合成

[0457]



[0458] 在氩气气氛下, 装入 4.74g(30mmol) 的 2-溴吡啶、4.81g(27mmol) 的 4-丁基苯基硼酸、5.18g(37.5mmol) 碳酸钾、18ml 离子交换水和 20ml 脱水甲苯, 并且进行氩气鼓泡。装入 0.17g(0.15mmol) 的 Pd(PPh₃)₄, 再进行氩气鼓泡。进行加热回流 7 小时, 将混合物冷却

至室温,然后将反应物加入至 50ml 离子交换水中,并且用甲苯萃取、用饱和盐水洗涤、用无水芒硝干燥有机层并且浓缩,得到 6.30g 的粗产品。进行通过硅胶柱(展开溶剂:氯仿/己烷=1/4-1/6)的纯化,得到 4.20g 所要的物质(收率:66.2%)。

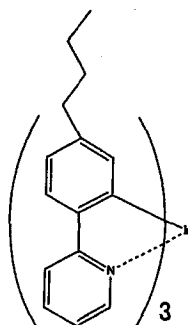
[0459] $^1\text{H-NMR}$ (300MHz/ CDCl_3):

[0460] d 0.94(t,3H),1.36-1.43(m,24H),1.58-1.69(m,2H),2.66(t,2H)7.16-7.21(m,1H),7.25-7.30(m,2H),7.68-7.75(m,2H),7.90-7.92(m,2H),8.67(d,1H)

[0461] MS(APCI(+)): $(\text{M}+\text{H})^+212$

[0462] 2) 铱配合物 B 的合成

[0463]



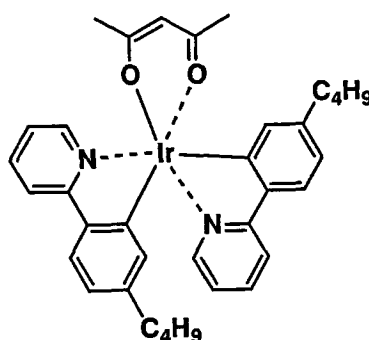
[0464] 在氩气氛下,于 130°C 加热 30ml 甘油,并且进行氩气鼓泡。装入 4.23g(20mmol) 的配体 1、2.45g(5mmol) $\text{Ir}(\text{acac})_3$ 和 10ml 的 2-乙氧基乙醇(由分子筛脱水的),并且于 180°C 加热混合物。使它们反应 47 小时,并且冷却至室温,然后将反应物加入至 300ml 的 1N HCl 中,过滤沉积的黄色粉末,得到 4.75g 的粗产品。由硅胶柱(洗脱剂:甲苯)的纯化,得到 0.72g 所要的物质(产率:16.4%)。

[0465] $^1\text{H-NMR}$ (300MHz/ CDCl_3):

[0466] d 0.84(t,9H),1.18-1.30(m,6H),1.41-1.50(m,6H),2.28-2.43(m,6H),6.69(bs,3H),6.71(bs,6H),6.77-6.81(m,3H),7.47-7.54(m,9H),7.78(bd,3H)

[0467] MS(APCI(+)): $(\text{M}+\text{H})^+824$

[0468]



[0469] 铱配合物 B

[0470] 实施例 3

[0471] 制备 2.0 重量%的混合物的甲苯溶液,所述的混合物是通过以 5 重量%的量将上述铱配合物 B 加入至上述聚合物化合物 1-1 中而制备的,并且以与实施例 1 中相同的方式制备器件。在膜形成中的旋转涂布器的旋转次数为 700rpm,并且膜厚度为约 87nm。

[0472] 通过向得到的器件施加电压,得到在 516nm 处具有峰值的 EL 发光。该器件在约

9V 下显示的发光为 $100\text{cd}/\text{m}^2$ 。最大发光效率为 $6.0\text{cd}/\text{A}$ 。

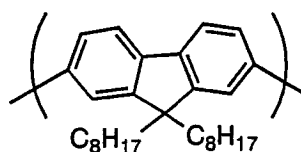
[0473] 聚合物化合物 1-1 和铱配合物 B 计算的最低受激三重态能量分别为 2.82eV 和 2.70eV 。作为计算对象的化合物与实施例 1 中的相同。

[0474] 比较例 1

[0475] 制备 0.6 重量%的混合物的氯仿溶液,所述的混合物是通过以 5 重量%的量将铱配合物 A 加入至聚合物化合物 R1 (聚苯乙烯折算的数均分子量 $M_n = 8.0 \times 10^4$, 并且聚苯乙烯折算的重均分子量 M_w 为 3.0×10^5) 中而制备的,并且以与实施例 1 中相同的方式制备器件。在膜形成中的旋转涂布器的旋转次数为 2600rpm,并且膜厚度为约 90nm。通过向得到的器件施加电压,得到在 508nm 处具有峰值的 EL 发光,但是,该器件的最大发光效率低至 $0.12\text{cd}/\text{A}$ 。

[0476] 聚合物化合物 R1 基本上由下面的重复单元组成的均聚物:

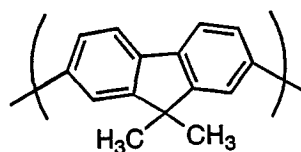
[0477]



[0478] 聚合物化合物 R1 以与实施例 1 中相同的方式计算的最低受激三重态能量为 2.55eV , 小于铱配合物 A 的计算值 2.76eV 。

[0479] 作为计算对象的化学结构是:

[0480]



[0481] 因为与实施例 1 中相同的构思。

[0482] 以与实施例 2 中相同的方式计算的聚合物化合物 R1 与铱配合物 A 的荧光强度比率为 26.7。

[0483] 由 US 6512083 中所述的方法来合成聚合物化合物 R1。

[0484] 合成实施例 14

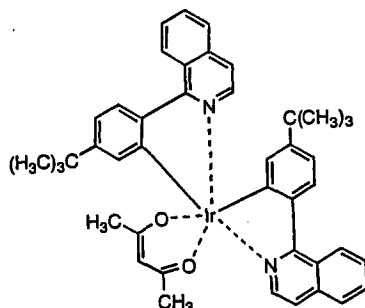
[0485] 如下所述合成铱配合物 C。

[0486] 实施例 4

[0487] 制备 1.2 重量%的混合物的甲苯溶液,所述的混合物是通过以 5 重量%的量将上述铱配合物 C 加入至上述聚合物化合物 1-1 中而制备的,并且以与实施例 1 中相同的方式制备器件。在膜形成中的旋转涂布器的旋转次数为 1000rpm,并且膜厚度为约 80nm。

[0488] 铱配合物 C

[0489]

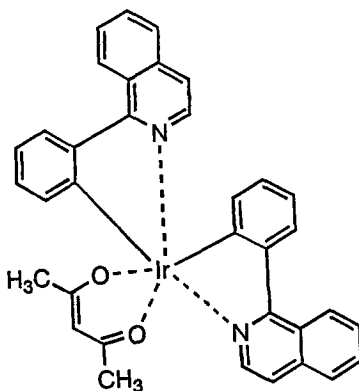


[0490] 通过向得到的器件施加电压,得到在 625nm 处具有峰值的 EL 发光。该器件在约 11V 的电压下显示的发光为 100cd/m²。最大发光效率为 2.3cd/A。

[0491] 聚合物化合物 1-1 和铱配合物 C 计算的最低受激三重态能量分别为 2.82eV 和 2.26eV。铱配合物 C 的最低受激三重态能量是以用于实施例 1 中的铱配合物 A 的相同方式作为下面的未取代体计算的。

[0492] WO 03-040256A2 中所述的方法来合成铱配合物 C。

[0493]



[0494] 工业适用性

[0495] 在发光层中使用本发明的发光材料的发光器件具有优异的发光效率。因此,本发明的发光材料可以适宜地用于聚合物 LED 等的发光材料,并且可以用作聚合物发光器件、使用其的有机 EL 器件等的材料。