



(19) 中華民國智慧財產局

(12) 發明說明書公告本

(11) 證書號數：TW I577673 B

(45) 公告日：中華民國 106 (2017) 年 04 月 11 日

- (21) 申請案號：099108414 (22) 申請日：中華民國 99 (2010) 年 03 月 22 日
- (51) Int. Cl. :            *C07D405/14 (2006.01)*            *C07D409/14 (2006.01)*  
                               *C07D401/14 (2006.01)*            *C09K11/06 (2006.01)*  
                               *H05B33/14 (2006.01)*            *H01L51/50 (2006.01)*  
                               *C07F15/00 (2006.01)*            *C07D333/76 (2006.01)*
- (30) 優先權：2009/03/23            美國            61/162,476  
                               2010/03/19            美國            12/727,615
- (71) 申請人：環球展覽公司 (美國) UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION (US)  
                               美國
- (72) 發明人：夏傳軍 XIA, CHUANJUN (CN)；鄺志遠 KWONG, RAYMOND (US)；拉挪克 蘇  
                               曼 LAYEK, SUMAN (IN)
- (74) 代理人：陳長文
- (56) 參考文獻：  
                               US 2006/0287498A1
- 審查人員：官速貞
- 申請專利範圍項數：36 項            圖式數：3            共 128 頁

## (54) 名稱

異配位基銱錯合物

HETEROLEPTIC IRIDIUM COMPLEXES

## (57) 摘要

本發明提供一種包括異配位基銱錯合物之新穎化合物。該等化合物具有特定配體組合，其包含單一吡啶基二苯并基取代之配體。該等化合物尤其可作為發射摻雜物，用於有機發光器件中，以改進器件之效率、壽命及製造。

Novel compounds comprising heteroleptic iridium complexes are provided. The compounds have a particular combination of ligands which includes a single pyridyl dibenzo-substituted ligand. The compounds may be used in organic light emitting devices, particularly as emitting dopants, to provide devices having improved efficiency, lifetime, and manufacturing.

指定代表圖：

符號簡單說明：  
(無元件符號說明)

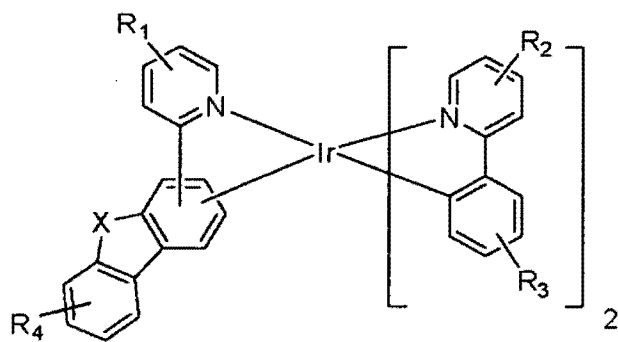
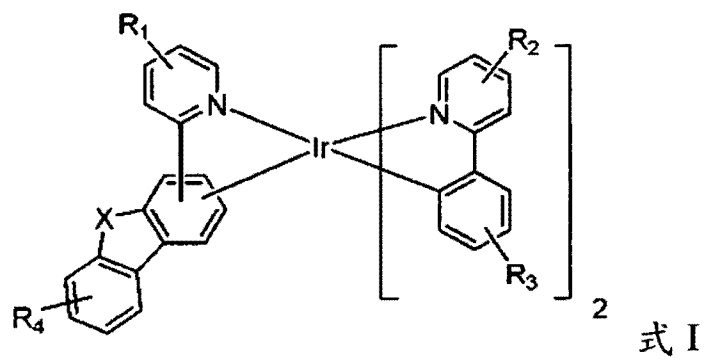


圖3

特徵化學式：



## 公告本

## 發明專利說明書

(本說明書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號：99108419

※申請日：99.3.22

※IPC 分類：C07D 405/14 (2010.01)

C07D 401/14 (2010.01)

C07D 408/14 (2010.01)

CoPK 11/06 (2010.01)

H05B 33/14 (2010.01)

H01L 51/50 (2010.01)

C07F 15/60 (2010.01)

C07D 333/16 (2010.01)

C07D 333/16 (2010.01)

### 一、發明名稱：(中文/英文)

異配位基銱錯合物

HETEROLEPTIC IRIDIUM COMPLEXES

### 二、中文發明摘要：

本發明提供一種包括異配位基銱錯合物之新穎化合物。

該等化合物具有特定配體組合，其包含單一吡啶基二苯并基取代之配體。該等化合物尤其可作為發射摻雜物，用於有機發光器件中，以改進器件之效率、壽命及製造。

### 三、英文發明摘要：

Novel compounds comprising heteroleptic iridium complexes are provided. The compounds have a particular combination of ligands which includes a single pyridyl dibenzo-substituted ligand. The compounds may be used in organic light emitting devices, particularly as emitting dopants, to provide devices having improved efficiency, lifetime, and manufacturing.

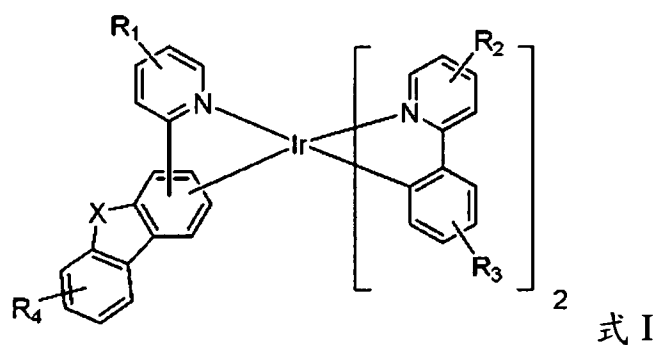
## 四、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：第 ( 3 ) 圖。

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

(無元件符號說明)

## 五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：



式 I

## 六、發明說明：

### 【發明所屬之技術領域】

本發明係關於可有利地用於有機發光器件中之新穎有機錯合物。更具體而言，本發明係關於含有吡啶基二苯并基取代配體之新穎異配位基銻錯合物及含有該等化合物之器件。

本申請案主張2009年3月23日提出申請之美國臨時申請案第61/162,476號之優先權，其揭示內容之全部內容皆以引用方式明確地併入本文中。

所主張之發明係由以下大學協會共同研究協定各方中之一方或多方來完成：密歇根大學校董會(Regents of the University of Michigan)、普林斯頓大學(Princeton University)、南加州大學(The University of Southern California)、及Universal Display公司；或代表其權益；及/或係與其共同完成。該協定在完成所主張發明之日及之前有效，且完成所主張發明之活動在該協定範圍內。

### 【先前技術】

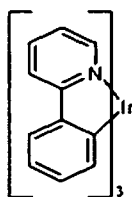
多種原因使得使用有機材料之光電子器件變得越來越理想。用於製造該等器件之許多材料價格相對較低廉，故有機光電子器件較無機器件具有成本優勢之潛力。此外，有機材料之固有性質(例如其撓性)可使其極適用於特定應用中，例如在撓性基板上之製造。有機光電子器件之實例包含有機發光器件(OLED)、有機光電電晶體、有機光伏打電池、及有機光檢測器。對於OLED，有機材料可具有優

於習用材料之性能優勢。舉例而言，有機發射層之發光波長通常可容易地使用適當摻雜物進行調節。

OLED使用在器件兩端施加電壓時可發光之薄有機膜。在諸如平板顯示器、照明、及背光等應用中，使用OLED正變成越來越令人感興趣之技術。若干OLED材料及構造闡述於美國專利第5,844,363號、第6,303,238號、及第5,707,745號中，該等專利之全部內容皆以引用方式併入本文中。

磷光發射分子之一種應用係全色顯示器。此一顯示器之工業標準要求像素適於發射特定顏色(稱作「飽和」顏色)。特定而言，該等標準要求飽和之紅色、綠色及藍色像素。可使用業內熟知之CIE坐標量測顏色。

綠色發射分子之一實例係叁(2-苯基吡啶)銱(表示為Ir(ppy)<sub>3</sub>)，其具有以下結構：



在此處及本文隨後之圖式中，將自氮至金屬(此處為Ir)之配位鍵繪示成直線。

本文所用術語「有機物」包含可用於製造有機光電子器件之聚合材料以及小分子有機材料。「小分子」係指任一不為聚合物之有機材料，且「小分子」可實際上相當大。在某些情形下，小分子可包含重複單元。舉例而言，使用

長鏈烷基作為取代基不能將分子排除在「小分子」類別外。小分子亦可納入聚合物中，例如作為聚合物骨架上之側基或作為骨架之一部分。小分子亦可用作樹枝狀聚合物之核心部分，樹枝狀聚合物係由構築於核心部分上之一系列化學殼層構成。樹枝狀聚合物之核心部分可為螢光或磷光小分子發射體。樹枝狀聚合物可係「小分子」，且據信當前用於OLED領域中之所有樹枝狀聚合物皆係小分子。

本文所用之「頂部」意指距基板最遠之地方，而「底部」意指最靠近基板之地方。當第一層闡述為「佈置於」第二層之上時，則該第一層遠離基板佈置。除非指明該第一層與該第二層「接觸」，否則在該第一與第二層間可能具有其他層。舉例而言，陰極可闡述為「佈置於」陽極之上，即使其間具有各種有機層。

本文所用之「溶液可處理之」意指能於液體介質中溶解、分散或傳送及/或自液體介質沈積，該液體介質呈溶液或懸浮液形式。

當認為配體直接有助於發射材料之光活性性質時，該配體可稱為具有「光活性」。當認為配體並不有助於發射材料之光活性性質但可改變光活性配體之性質時，該配體可稱作「輔助配體」。

如本文所用且如熟習此項技術者通常所理解，若第一「最高佔據分子軌道」(HOMO)或「最低未佔據分子軌道」(LUMO)能級距真空能級更近，則該第一能級「大於」或「高於」第二HOMO或LUMO能級。由於電離電位

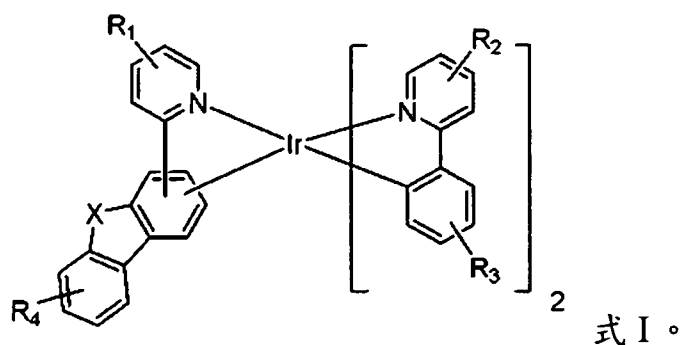
(IP)量測為相對於真空能級之負能量，故較高HOMO能級對應於具有較小絕對值之IP(不太負之IP)。類似地，較高LUMO能級對應於具有較小絕對值之電子親和力(EA)(不太負之EA)。在真空能級位於頂部之習用能級圖上，材料之LUMO能級高於同一材料之HOMO能級。「較高」之HOMO或LUMO能級看來較「較低」之HOMO或LUMO能級更接近此一圖之頂部。

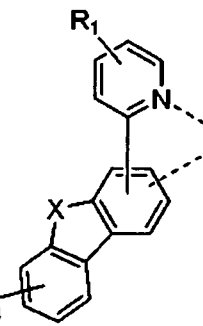
如本文所用且如熟習此項技術者通常所理解，若第一功函數具有較高絕對值，則該第一功函數「大於」或「高於」第二功函數。由於功函數通常量測為相對於真空能級之負數，故此意味著若功函數「越高」則負值越大。在真空能級位於頂部之習用能級圖上，「較高」功函數繪示為沿向下方向遠離真空能級。因此，HOMO及LUMO能級之定義遵循不同於功函數之慣例。

關於OLED、及上述定義之更詳細內容可參見美國專利第7,279,704號，其全部內容皆以引用方式併入本文中。

### 【發明內容】

本發明提供新穎磷光發射化合物。該等化合物包括具有下式之異配位基銥錯合物：





該化合物包括具有式 II 結構  $R_4$  之配體。X 選自由 NR、O、S、BR、及 Se 組成之群。R 選自氫及烷基。較佳地，R 具有 4 個或更少碳原子。R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub> 及 R<sub>4</sub> 可代表單、二、三或四取代。R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub> 及 R<sub>4</sub> 中之每一者皆獨立地選自由氫、烷基及芳基組成之群。較佳地，式 I 之 R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub> 及 / 或 R<sub>4</sub> 位置中之烷基具有 4 個或更少碳原子 (例如，甲基、乙基、丙基、丁基、及異丁基)。較佳地，R<sub>1</sub> 及 R<sub>4</sub> 獨立地係氫或具有 4 個或更少碳原子之烷基；更佳地，R<sub>1</sub> 及 R<sub>4</sub> 獨立地係氫或甲基。較佳地，R<sub>2</sub> 及 R<sub>3</sub> 獨立地係氫或具有 4 個或更少碳原子之烷基；更佳地，R<sub>2</sub> 及 R<sub>3</sub> 獨立地係氫或甲基；最佳地，R<sub>2</sub> 及 R<sub>3</sub> 係氫。

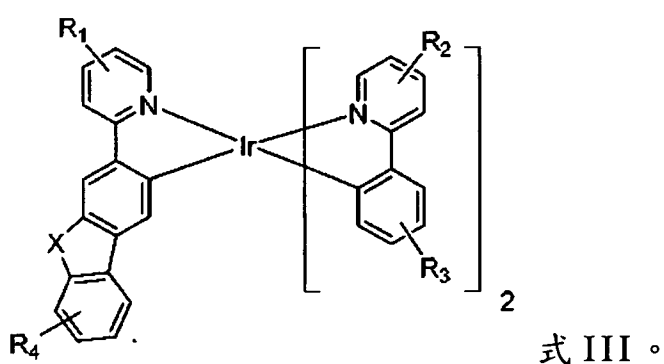
較佳地，R<sub>1</sub> 及 R<sub>4</sub> 獨立地係氫、具有 4 個或更少碳原子之烷基或在環中具有 6 個或更少原子之芳基；更佳地，R<sub>1</sub> 及 R<sub>4</sub> 獨立地係氫、甲基或苯基。較佳地，R<sub>2</sub> 及 R<sub>3</sub> 獨立地係氫、具有 4 個或更少碳原子之烷基或在環中具有 6 個或更少原子之芳基；更佳地，R<sub>2</sub> 及 R<sub>3</sub> 獨立地係氫、甲基或苯基；最佳地，R<sub>2</sub> 及 R<sub>3</sub> 係氫。

在一態樣中，提供 R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、及 R<sub>4</sub> 獨立地選自由氫及具有 4 個或更少碳原子之烷基組成之群的化合物。在另一態樣中，提供 R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、及 R<sub>4</sub> 獨立地選自由氫及甲基組成之群的化合物。在又一態樣中，提供 R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、及 R<sub>4</sub>

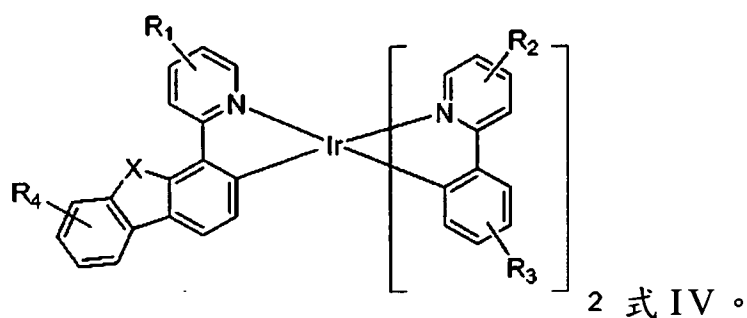
係氫之化合物。

在另一態樣中，提供  $R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_3$ 、及  $R_4$  獨立地選自由氫、具有 4 個或更少碳原子之烷基及在環中具有 6 個或更少原子之芳基組成之群的化合物。在另一態樣中，提供  $R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_3$ 、及  $R_4$  獨立地選自由氫、甲基及苯基組成之群的化合物。在又一態樣中，提供  $R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_3$ 、及  $R_4$  係氫之化合物。

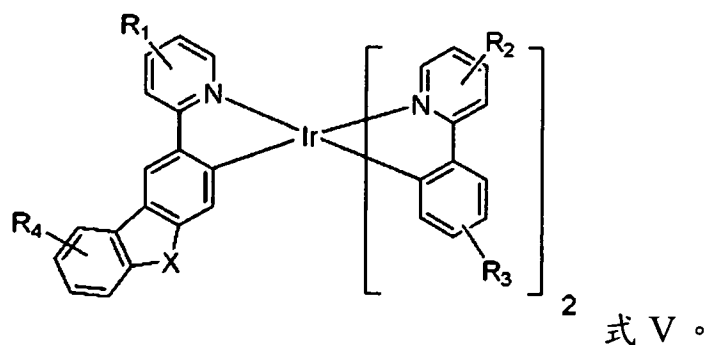
亦提供特定之異配位基銱錯合物。在一態樣中，提供具有下式之異配位基銱錯合物：



在另一態樣中，提供具有下式之異配位基銱錯合物：



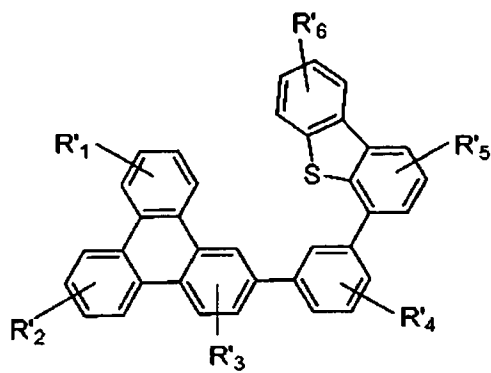
在又一態樣中，提供具有下式之異配位基銱錯合物：



提供包含化合物 1-36 之異配位基銱錯合物之特定實例。特定而言，提供 X 係 O (亦即，吡啶基二苯并咪喃) 之異配位基化合物，例如，化合物 1-12。此外，提供 X 係 S (亦即，吡啶基二苯并噻吩) 之異配位基化合物，例如，化合物 13-24。另外，提供 X 係 NR (亦即，吡啶基咪唑) 之異配位基化合物，例如，化合物 25-36。

提供包含化合物 37-108 之異配位基銱錯合物之其他特定實例。特定而言，提供 X 係 O 之異配位基化合物，例如，化合物 37-60。此外，提供 X 係 S 之異配位基化合物，例如，化合物 61-84。另外，提供 X 係 NR 之異配位基化合物，例如，化合物 85-108。

此外，亦提供有機發光器件。該器件具有陽極、陰極、及佈置於該陽極與該陰極之間之有機層，其中該有機層包括具有式 I 之化合物。特定而言，該器件之有機層可包括選自化合物 1-36 之化合物。該有機層可進一步包括主體材料。較佳地，主體材料含有聯伸三苯部分及二苯并噻吩部分。更佳地，該主體材料具有下式：



。R'<sub>1</sub>、R'<sub>2</sub>、R'<sub>3</sub>、R'<sub>4</sub>、R'<sub>5</sub>、及R'<sub>6</sub>

可代表單、二、三、或四取代。R'<sub>1</sub>、R'<sub>2</sub>、R'<sub>3</sub>、R'<sub>4</sub>、R'<sub>5</sub>、及R'<sub>6</sub>獨立地選自由氫、烷基、及芳基組成之群。

器件之有機層可包括選自由化合物1-108組成之群之化合物。特定而言，器件之有機層亦可包括選自化合物37-108之化合物。

亦提供包括器件之消費產品。該器件含有陽極、陰極及佈置於該陽極與該陰極之間之有機層，其中該有機層進一步包括具有式I之化合物。

### 【實施方式】

通常，OLED包括至少一個佈置於陽極與陰極間且與其電連接之有機層。在施加電流時，陽極將電洞注入有機層，且陰極將電子注入有機層。所注入之電洞及電子各自朝向帶相反電荷之電極遷移。當電子及電洞位於同一分子上時，形成「激子」，亦即具有激發態之定域電子-電洞對。在該激子經由光電發射機制弛豫時，可發射光。在某些情形下，激子可位於受激準分子或激態錯合物上。亦可存在非輻射機制(例如熱弛豫)，但通常認為其不理想。

OLED起初使用可自其單重態發光(「螢光」)之發射分子，如(例如)美國專利第4,769,292號中所揭示，該案之全

部內容皆以引用方式併入本文中。螢光發射通常在小於10毫微秒之時間範圍內發生。

最近，已展示具有可自三重態發光(「磷光」)之發射材料的OLED。Baldo等人，「Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices」，Nature，第395卷，151-154，1998(「Baldo-I」)；及Baldo等人，「Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence」，Appl. Phys. Lett.，第75卷，第3期，4-6(1999)(「Baldo-II」)，其全部內容皆以引用方式併入本文中。磷光更詳細地闡述於美國專利第7,279,704號之第5-6欄中，其以引用方式併入本文中。

圖1展示有機發光器件100。該等圖示不一定按比例繪製。器件100可包含基板110、陽極115、電洞注入層120、電洞傳送層125、電子阻擋層130、發射層135、電洞阻擋層140、電子傳送層145、電子注入層150、保護層155及陰極160。陰極160係具有第一導電層162及第二導電層164之複合陰極。器件100可藉由按順序沈積所述各層來製造。該等不同層之性質及功能，及材料實例更詳細地闡述於美國專利第7,279,704號之第6-10欄中，其以引用方式併入本文中。

提供該等層中之每一層之更多實例。舉例而言，撓性及透明基板-陽極組合揭示於美國專利第5,844,363號中，其全部內容皆以引用方式併入本文中。p-摻雜型電洞傳送層

之實例係依50:1之莫耳比率摻雜F<sub>4</sub>-TCNQ之m-MTDATA，如美國專利申請公開案第2003-0230980號中所揭示，該案之全部內容皆以引用方式併入本文中。發射材料及主體材料之實例揭示於頒予Thompson等人之美國專利第6,303,238號中，該案之全部內容皆以引用方式併入本文中。n-摻雜型電子傳送層之實例係依1:1之莫耳比率摻雜Li之Bphen，如美國專利申請公開案第2003/0230980號中所揭示，其全部內容皆以引用方式併入本文中。美國專利第5,703,436號及第5,707,745號(其全部內容皆以引用方式併入本文中)揭示多種陰極實例，包括具有薄金屬層(例如Mg:Ag)以及上覆透明、導電、濺鍍沈積之ITO層的複合陰極。阻擋層之理論及用途更詳細地闡述於美國專利第6,097,147號及美國專利申請公開案第2003/0230980號中，其全部內容皆以引用方式併入本文中。注入層之實例提供於美國專利申請公開案第2004/0174116號中，其全部內容皆以引用方式併入本文中。保護層之闡述可參見美國專利申請公開案第2004/0174116號，其全部內容皆以引用方式併入本文中。

圖2展示倒置OLED 200。該器件包含基板210、陰極215、發射層220、電洞傳送層225、及陽極230。器件200可藉由按順序沈積所述各層來製造。由於最常用之OLED構造具有佈置於陽極上之陰極，而器件200具有佈置於陽極230下之陰極215，故器件200可稱作「倒置」OLED。與彼等針對器件100所述者相似之材料可用於器件200之相應

層中。圖2提供一個如何自器件100之結構省略某些層之實例。

以非限制性實例形式提供圖1及2中所繪示之簡單分層結構，且應理解，本發明之實施例可結合眾多種其他結構使用。所闡述之特定材料及結構實際上具有例示性，且可使用其他材料及結構。藉由以不同方式組合所述各層可達成功能性OLED，或基於設計、性能及成本因素，可完全省略多個層。亦可包含未具體闡述之其他層。可使用不同於彼等具體闡述材料之其他材料。儘管本文所提供之許多實例闡述各層包括單一材料，但應理解，可使用各材料之組合(例如主體材料與摻雜物之混合物)或更通常可使用混合物。而且，該等層可具有各種子層。本文中提供給各層之名稱並不意欲具有嚴格限制意義。舉例而言，在器件200中，電洞傳送層225傳送電洞並將電洞注入發射層220中，且其可闡述為電洞傳送層或電洞注入層。在一實施例中，OLED可闡述為具有佈置於陰極與陽極之間之「有機層」。此有機層可包括單一層，或可進一步包括如(例如)針對圖1及2所述之不同有機材料之多個層。

亦可使用未具體闡述之結構及材料，例如由聚合物材料構成之OLED(PLED)，例如揭示於頒予Friend等人之美國專利第5,247,190號中者，該案之全部內容皆以引用方式併入本文中。在另一實例中，可使用具有單一有機層之OLED。可堆疊OLED，例如在頒予Forrest等人之美國專利第5,707,745號中所述者，該案之全部內容皆以引用方式併

入本文中。OLED結構可不同於圖1及2中所示之簡單分層結構。舉例而言，基板可包含成角度之反射表面以改進輸出耦合，例如頒予Forrest等人之美國專利第6,091,195號中所述之臺面結構、及/或頒予Bulovic等人之美國專利第5,834,893號中所述之凹坑結構，該等專利之全部內容皆以引用方式併入本文中。

除非另有說明，否則各實施例之任一層皆可藉由任一適宜方法來沈積。對於有機層而言，較佳方法包含熱蒸發、噴墨(例如在美國專利第6,013,982號及第6,087,196號中所述者，該等專利之全部內容皆以引用方式併入本文中)、有機氣相沈積(OVPD)(例如頒予Forrest等人之美國專利第6,337,102號中所述者，該案之全部內容皆以引用方式併入本文中)及藉由有機蒸氣噴射印刷(OVJP)沈積(例如闡述於美國專利申請案第10/233,470號中者，該案之全部內容皆以引用方式併入本文中)。其他適宜沈積方法包含旋轉塗佈及其他基於溶液之方法。基於溶液之方法較佳地在氮氣或惰性氣氛下實施。對於其他層而言，較佳方法包含熱蒸發。較佳圖案化方法包含經由遮罩沈積、冷鐳(例如闡述於美國專利第6,294,398號及第6,468,819號中者，該等專利之全部內容皆以引用方式併入本文中)及與某些沈積方法(例如噴墨及OVJD)相關之圖案化方法。亦可使用其他方法。欲沈積之材料可經修飾以使其適合特定沈積方法。舉例而言，在小分子中可使用諸如烷基及芳基等具支鏈或無支鏈且較佳含有至少3個碳之取代基以增強其進行溶液處

理之能力。可使用具有20個碳或更多碳之取代基，且3-20個碳係較佳範圍。具有不對稱結構之材料可具有較彼等具有對稱結構者更佳之溶液處理能力，此乃因不對稱材料可具有較低之重結晶傾向。可使用樹枝狀聚合物取代基來增強小分子經受溶液處理之能力。

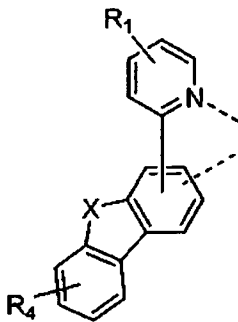
根據本發明實施例所製得之器件可納入眾多種消費產品中，其包含平板顯示器、電腦監視器、電視、廣告牌、內部或外部照明燈及/或信號燈、抬頭顯示器、全透明顯示器、撓性顯示器、雷射印刷機、電話、行動電話、個人數位助理(PDA)、膝上型電腦、數位照相機、便攜式攝錄影機、取景器、微顯示器、車輛、大面積牆壁、影院或露天大型運動場顯示屏、或招牌。可使用各種控制機制來控制根據本發明製得之器件，包含被動矩陣及主動矩陣。許多器件意欲用於使人感覺舒適之溫度範圍內，例如18攝氏度至30攝氏度，且更佳為室溫下(20-25攝氏度)。

本文所述之材料及結構可應用於除OLED外之器件中。舉例而言，其他光電器件(例如有機太陽能電池及有機光檢測器)可採用該等材料及結構。更通常而言，有機器件(例如有機電晶體)可採用該等材料及結構。

術語鹵基、鹵素、烷基、環烷基、烯基、炔基、芳烷基、雜環基、芳基、芳族基團、及雜芳基已為業內所習知，且定義於美國專利第7,279,704號之第31-32欄中，該案件以引用方式併入本文中。

本發明提供新穎化合物，該等化合物包括異配位基銻錯

合物(示於圖3中)。特定而言，錯合物具有兩個苯基吡啶配



體及一個具有式II結構之配體。具有結構式II之配體係由吡啶連接至二苯并呋喃、二苯并噻吩、咔唑、二苯并硼雜環戊二烯(dibenzoborole)、或二苯并硒吩來組成(本文中亦稱作「經吡啶基二苯并基取代」)。該等化合物可有利地在有機發光器件中用作發射層中之發射摻雜物。

已報導含有兩個或三個吡啶基二苯并呋喃、吡啶基二苯并噻吩、吡啶基咔唑、及吡啶基芴配體之銥錯合物。藉由使用二苯并呋喃、二苯并噻吩、咔唑、及芴基團代替參(2-苯基吡啶)銥中之苯基，可顯著影響所得錯合物之HOMO-LUMO能級、光物理性質、及電子性質。已藉由使用具有各種吡啶基二苯并基取代配體之不同組合之錯合物(亦即，雙錯合物及參錯合物)來達成自綠色至紅色之各種發射顏色。然而，現有錯合物可能具有實際限制。舉例而言，具有該等類型配體(例如，吡啶基二苯并呋喃、吡啶基二苯并噻吩、或吡啶基咔唑)中兩者或三者之銥錯合物具有高分子量，此通常導致昇華溫度較高。在某些情形下，該等錯合物可因分子量增加而變得不可昇華。舉例而言，參(2-(二苯并[b,d]呋喃-4-基)吡啶)銥(III)在試圖昇華

時分解。此外，包括吡啶基芴配體之習知化合物可具有較低之穩定性。芴基團(例如，C=O及CRR')破壞了配體結構內之共軛，從而導致穩定電子之能力降低。因此，業內期望具有吡啶基二苯并基取代配體(例如，二苯并呋喃、二苯并噻吩、咔唑、二苯并硼雜環戊二烯、及二苯并硒吩)之有益性質及相對低昇華溫度之化合物。

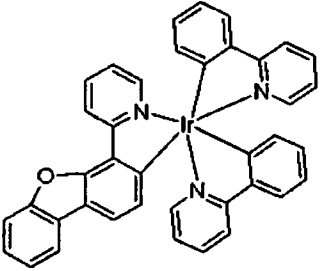
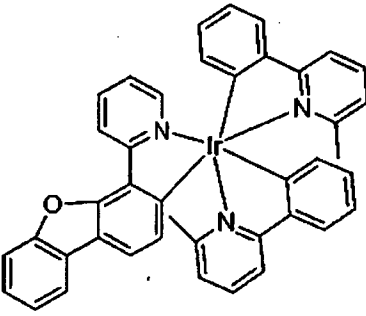
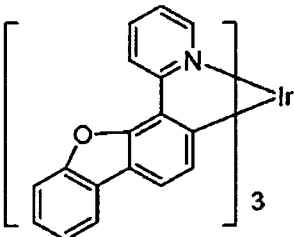
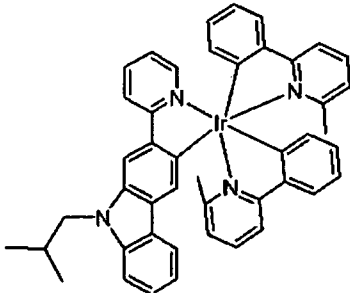
此外，具有兩個或三個式II配體的銥錯合物具有高分子量及較強之分子間作用，此通常導致昇華溫度較高。在某些情形下，該等錯合物可因分子量增加及分子間作用較強而變得不可昇華。

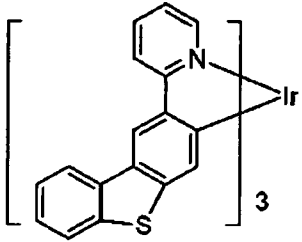
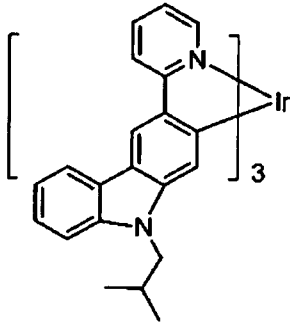
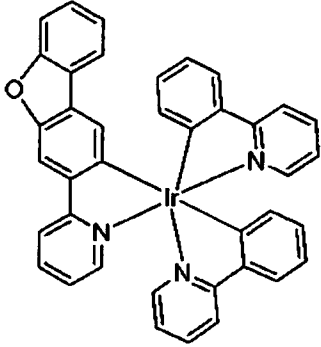
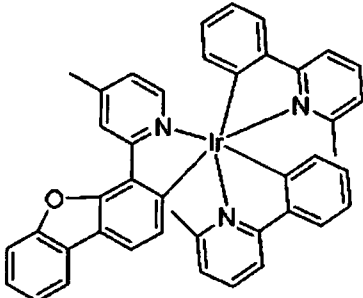
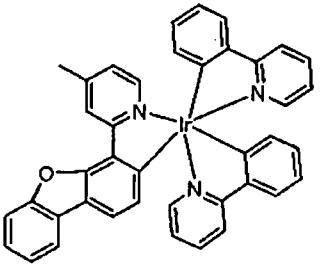
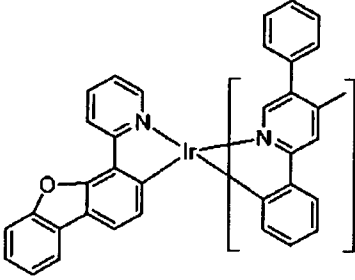
本文提供新穎異配位基銥錯合物。該等錯合物含有具有結構式II之吡啶基二苯并基取代配體。特定而言，新穎異配位基錯合物包含單一吡啶基二苯并基取代配體(其中該配體含有O、S、N、Se、或B(亦即，該配體係吡啶基二苯并呋喃、吡啶基二苯并噻吩、吡啶基咔唑、吡啶基二苯并硒吩、或吡啶基二苯并硼雜環戊二烯))及兩個苯基吡啶配體。由於本文所揭示之異配位基化合物中具有特定配體組合，故該等化合物可提供改進之光化學及電性質以及改進之器件製造。特定而言，若本文所提供錯合物僅含有一個具有式II之二苯并基取代吡啶配體，則其可能具有較低昇華溫度(與分子量較低及/或分子間作用較弱有關)。此外，該等化合物保留與吡啶基二苯并基取代配體有關之所有益處，例如改進之穩定性、效率、及窄線寬。因此，該等化合物可用於提供改進之有機發光器件及包括該等器件之改

進之商業產品。特定而言，該等化合物尤其可用於紅色及綠色磷光有機發光器件(PHOLED)。

如前文所述，含有式II配體之雙銦錯合物或銦錯合物可因錯合物之昇華溫度較高而在實際使用中受限。然而，本發明化合物具有可改進器件製造之較低昇華溫度。表1提供本文所提供之若干化合物及相應雙錯合物或銦錯合物之昇華溫度。舉例而言，化合物1具有243°C之昇華溫度，而相應銦錯合物不能昇華。此外，包括三個吡啶基二苯并基取代配體之其他銦錯合物(亦即，包括吡啶基二苯并噻吩之銦錯合物)不能昇華。因此，與先前報導之雙化合物及銦化合物相比，本文所提供之化合物可改進器件製造。

表1

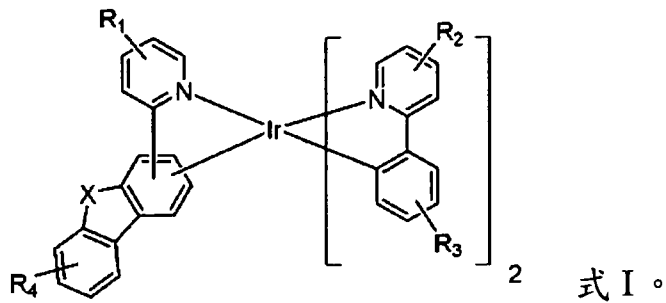
化合物	昇華溫度 (°C)	化合物	昇華溫度 (°C)
 化合物1	243	 化合物4	218
 不能昇華	不能昇華	 化合物29	230

	不能昇華		290
 <p>化合物2</p>	232	 <p>化合物10</p>	240
 <p>化合物7</p>	256	 <p>化合物37</p>	224

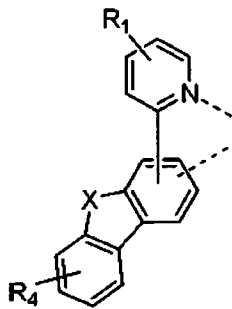
通常，預計二苯并基取代吡啶配體具有低於苯基吡啶配體為低之三線態能量，且因此預計二苯并基取代吡啶配體可控制化合物之發射性質。因此，可使用二苯并基取代吡啶配體之修飾形式來調節化合物之發射性質。本文所揭示之化合物含有二苯并基取代吡啶配體，其含有雜原子(例如，O、S、或NR)且視需要進一步在R<sub>1</sub>及R<sub>4</sub>位置經化學基團取代。由此，可藉由選擇特定雜原子及/或改變存在於二苯并基取代吡啶配體上之取代基來調節化合物之發射性質。

之 1

本文所述之化合物包括具有下式之異配位基銱錯合物：



具有式 I 之化合物的特徵包含包括具有式 II 結構



之一個配體及可進一步經取代之兩個苯基吡啶配體，其中所有配體皆配位至 Ir。

X 選自由 NR、O、S、BR、及 Se 組成之群。R 選自氫及烷基。R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub> 及 R<sub>4</sub> 可代表單、二、三、或四取代；且 R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub> 及 R<sub>4</sub> 之每一者皆獨立地選自由氫、具有 4 個或更少碳原子之烷基、及芳基組成之群。

在另一態樣中，R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、及 R<sub>4</sub> 獨立地選自由氫、具有 4 個或更少碳原子之烷基、及在環中具有 6 個或更少原子之芳基組成之群。

本文所用術語「芳基」係指包括碳原子或雜原子且未稠合至苯基吡啶配體之苯環(亦即，芳基係非稠合芳基)上的芳基。本文所用術語「芳基」涵蓋單環基團及多環系統。多環可具有兩個或更多個環，其中兩個碳係由兩個鄰接環所共有(該等環係「稠合」的)，其中至少一個環係芳環，

例如，其他環可係環烷基、環烯基、芳基、雜環及/或雜芳基。此外，芳基可視需要經一或多個選自鹵基、CN、CO<sub>2</sub>R、C(O)R、NR<sub>2</sub>、環胺基、NO<sub>2</sub>、及OR之取代基取代。「芳基」亦涵蓋雜芳基，例如可包含一至三個雜原子之單環雜芳基，例如，吡咯、呋喃、噻吩、咪唑、噁唑、噻唑、三唑、吡唑、吡啶、吡嗪及嘧啶、及諸如此類。此包含具有兩個或更多個環之多環雜芳族系統，其中兩個原子係由兩個鄰接環所共有(該等環係「稠合」的)，其中至少一個環係雜芳環，例如，其他環可係環烷基、環烯基、芳基、雜環及/或雜芳基。此外，雜芳基可視需要經一或多個選自鹵基、CN、CO<sub>2</sub>R、C(O)R、NR<sub>2</sub>、環胺基、NO<sub>2</sub>、及OR之取代基取代。舉例而言，R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>及/或R<sub>4</sub>可係並不用於苯基吡啶之苯環之芳基(包含雜芳基)。

本文所用術語「烷基」涵蓋直鏈及具支鏈之烷基基團二者。實例包含甲基、乙基、丙基、異丙基、丁基、異丁基、第三丁基、及諸如此類。此外，烷基可視需要經一或多個選自鹵基、CN、CO<sub>2</sub>R、C(O)R、NR<sub>2</sub>、環胺基、NO<sub>2</sub>、及OR之取代基取代，其中每一R皆獨立地選自H、烷基、烯基、炔基、芳烷基、芳基及雜芳基。較佳地，為使化合物可昇華及/或為降低昇華溫度，式I之R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>及/或R<sub>4</sub>位置中之烷基具有4個或更少碳原子(例如，甲基、乙基、丙基、丁基、及異丁基)。

通常，本文所提供之化合物與先前報導之化合物相比具有相對低之昇華溫度。由此，該等新穎化合物尤其提供關

於改進器件製造之有益性質。另外，據信，具有式I且其中 $R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_3$ 及 $R_4$ 係選自較小取代基之異配位基化合物可尤其有益。較小取代基包含(例如)氫或烷基。特定而言，據信，其中取代基 $R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_3$ 及/或 $R_4$ 係選自較小取代基之化合物可具有甚至更低之昇華溫度，藉此進一步改進製造同時維持由具有結構式II之配體所提供之期望性質(例如，改進之穩定性及壽命)。

通常，所提供具有式I之化合物具有使得 $R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_3$ 及 $R_4$ 係獨立地選自由氫、烷基、及芳基組成之群的取代基。較佳地，任一烷基具有4個或更少碳原子。為將分子量降至最低且藉此降低昇華溫度，較佳使用具有結構式II且配體上取代基較小之化合物。較佳地， $R_1$ 及 $R_4$ 獨立地選自由氫及具有4個或更少碳原子之烷基組成之群；更佳地， $R_1$ 及 $R_4$ 獨立地選自由氫及甲基組成之群。

出於類似原因，化合物中苯基吡啶配體上之取代基較佳較小。此外，據信苯基吡啶配體對錯合物之發射的貢獻較小。另外，錯合物含有兩個苯基吡啶配體，因此在苯基吡啶配體上存在之取代基在錯合物總分子量中所佔比例較大。至少出於該等原因，較佳地， $R_2$ 及 $R_3$ 獨立地選自由氫及具有4個或更少碳原子之烷基；更佳地， $R_2$ 及 $R_3$ 獨立地選自由氫及甲基；最佳地， $R_2$ 及 $R_3$ 係氫。

具有可降低分子間作用之烷基及芳基取代之化合物亦較佳。

在另一態樣中，較佳地， $R_2$ 及 $R_3$ 獨立地選自由氫、且具有4

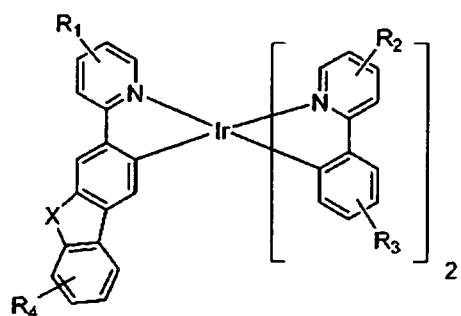
個或更少碳原子之烷基及在環中具有6個或更少原子之芳基；更佳地， $R_2$ 及 $R_3$ 獨立地選自氫、甲基及苯基；最佳地， $R_2$ 及 $R_3$ 係氫。

較佳使用錯合物總分子量較低之化合物以降低昇華溫度並改進器件製造。為達成此目標，較佳使用所有取代基皆相對較小之化合物。在一態樣中，較佳地， $R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_3$ 及 $R_4$ 獨立地選自由氫及具有4個或更少碳原子之烷基組成之群；更佳地， $R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_3$ 及 $R_4$ 獨立地選自由氫及甲基組成之群；最佳地， $R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_3$ 及 $R_4$ 係氫。

在另一態樣中，較佳地 $R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_3$ 及 $R_4$ 獨立地選自由氫、具有4個或更少碳原子之烷基及在環中具有6個或更少原子之芳基組成之群；更佳地， $R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_3$ 及 $R_4$ 獨立地選自由氫、甲基及苯基組成之群；最佳地， $R_1$ 、 $R_2$ 、 $R_3$ 及 $R_4$ 係氫。

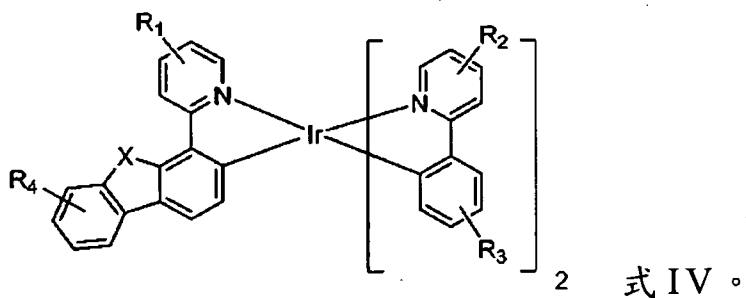
如上所述，X亦可係BR。較佳地，R具有4個或更少碳原子。出於與前文所述彼等原因類似之原因，經取代配體之咪唑部分上之較小烷基(亦即，具有4個或更少碳原子之烷基)可能會降低錯合物之昇華溫度並由此改進器件製造。

亦提供特定之異配位基銻錯合物。在一態樣中，提供具有下式之異配位基銻錯合物：

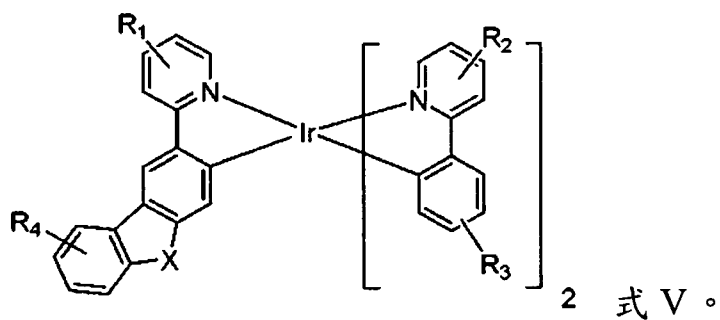


式 III。

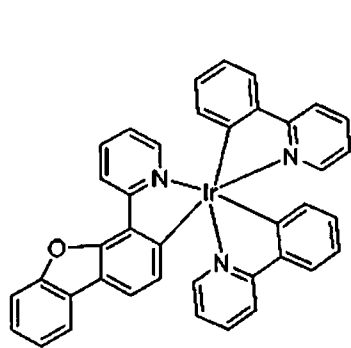
在另一態樣中，提供具有下式之異配位基銱錯合物：



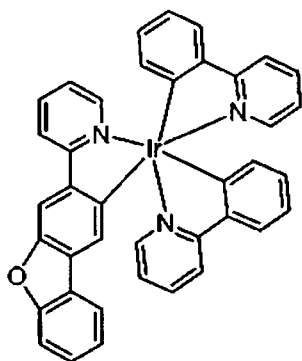
在又一態樣中，提供具有下式之異配位基銱錯合物：



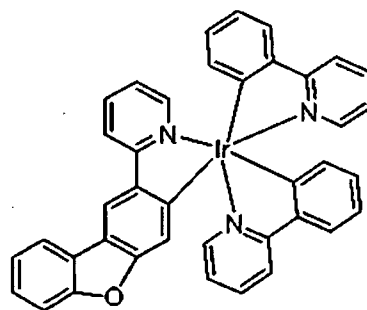
提供異配位基銱錯合物之特定實例，且包含選自由以下組成之群之化合物：



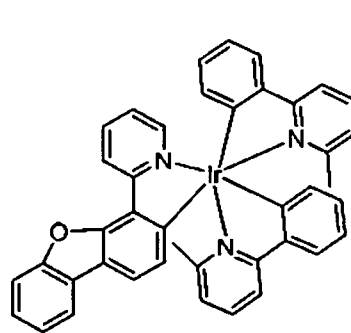
化合物 1



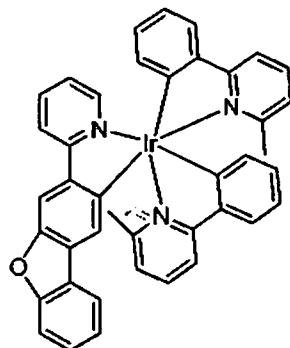
化合物 2



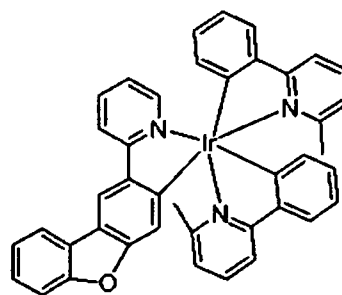
化合物 3



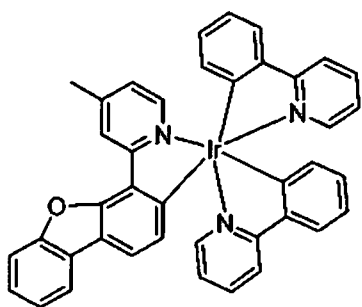
化合物 4



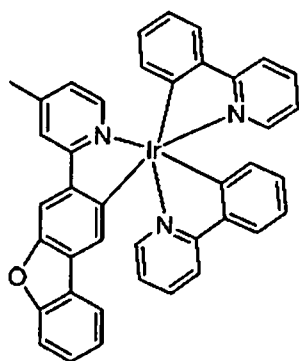
化合物 5



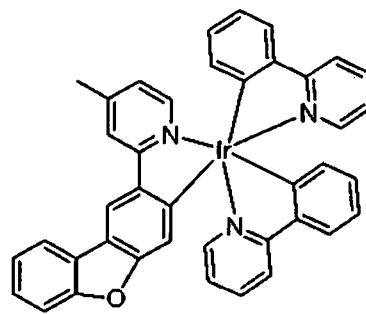
化合物 6



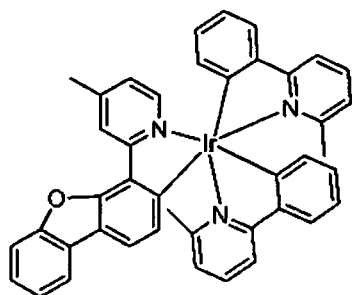
化合物 7



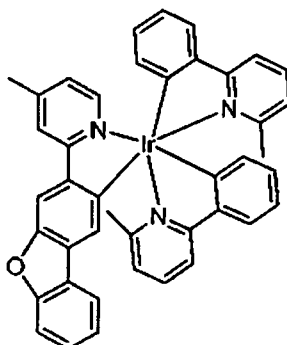
化合物 8



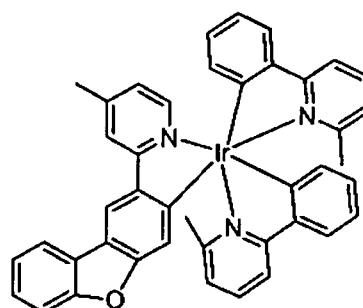
化合物 9



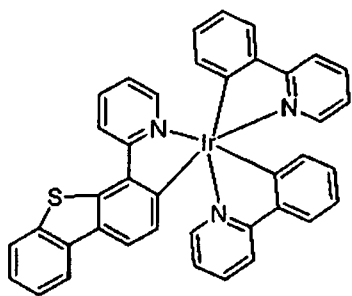
化合物 10



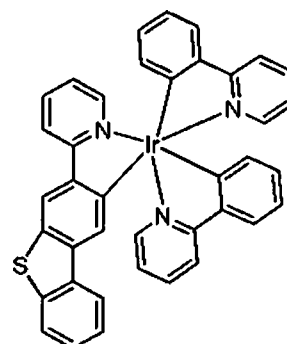
化合物 11



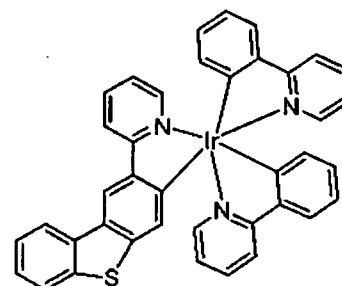
化合物 12



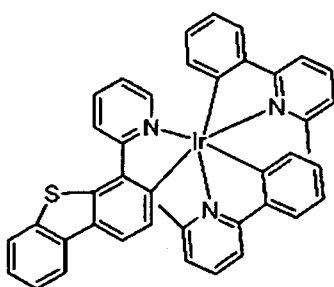
化合物 13



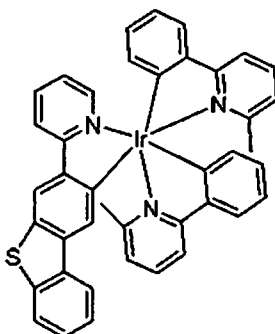
化合物 14



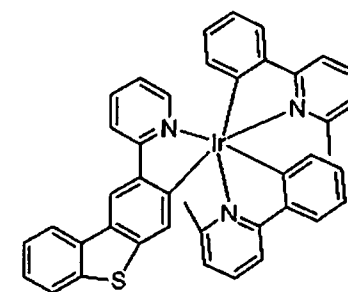
化合物 15



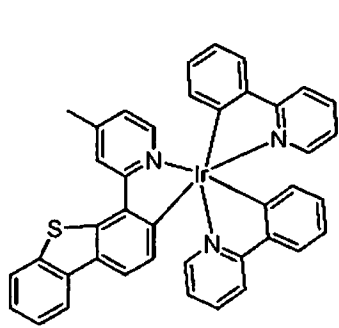
化合物 16



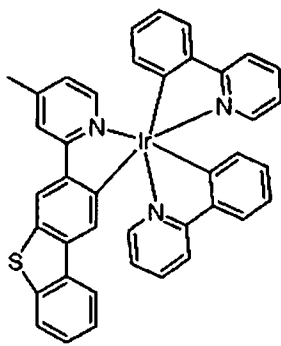
化合物 17



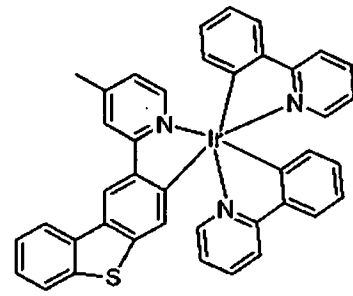
化合物 18



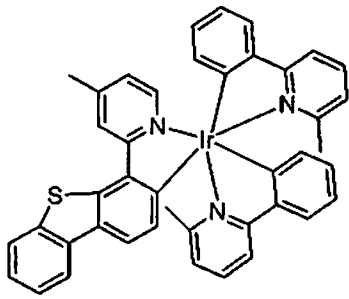
化合物 19



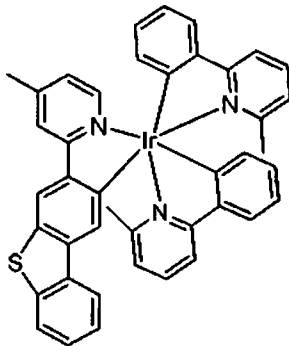
化合物 20



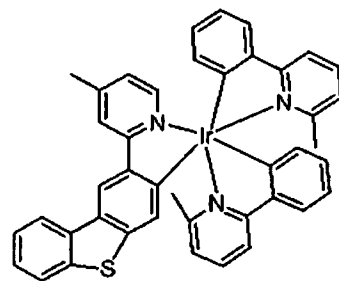
化合物 21



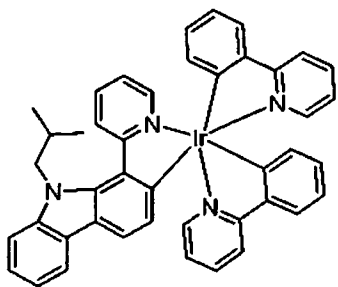
化合物 22



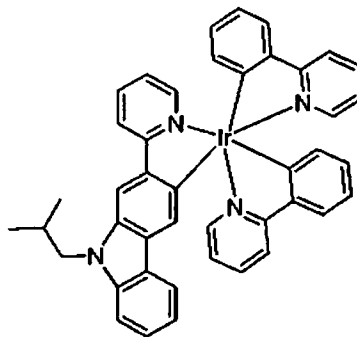
化合物 23



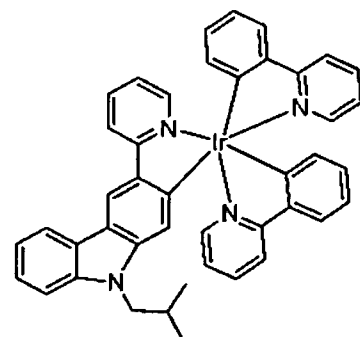
化合物 24



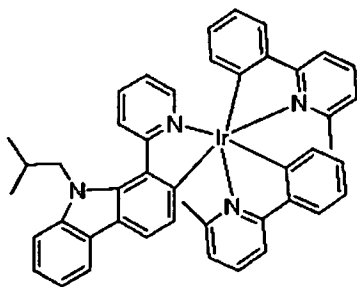
化合物 25



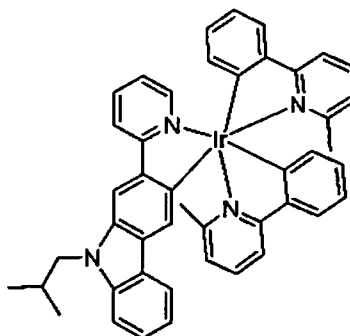
化合物 26



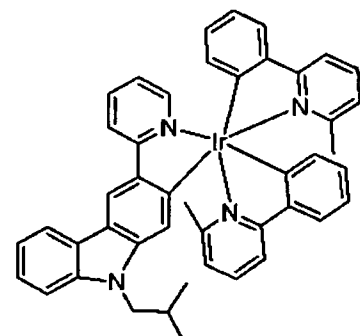
化合物 27



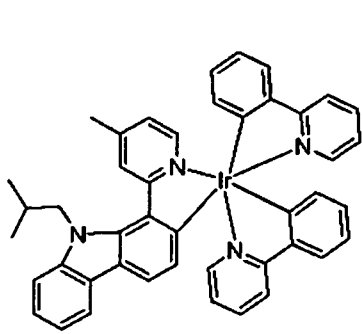
化合物 28



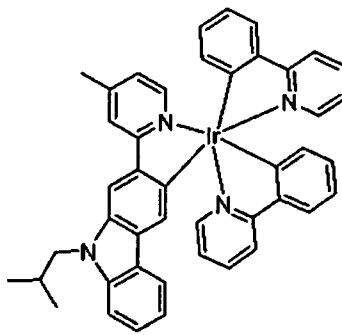
化合物 29



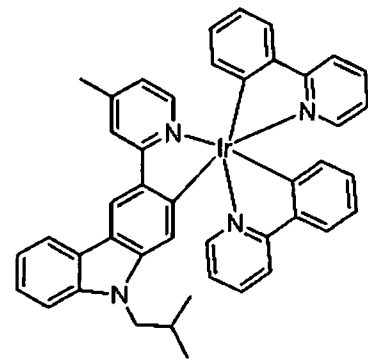
化合物 30



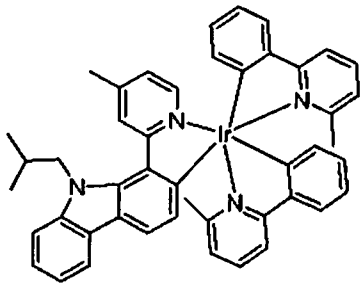
化合物 31



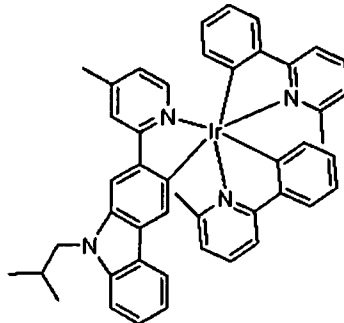
化合物 32



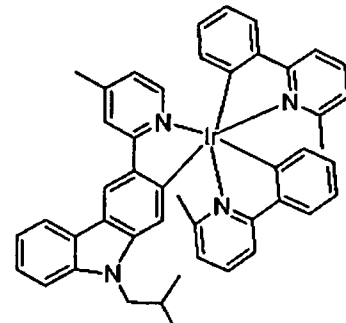
化合物 33



化合物 34

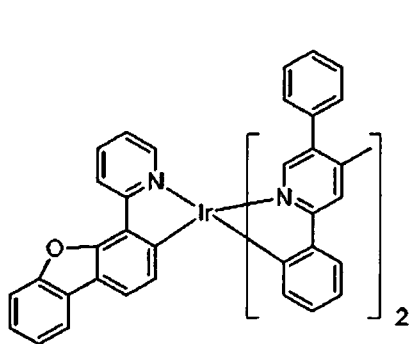


化合物 35

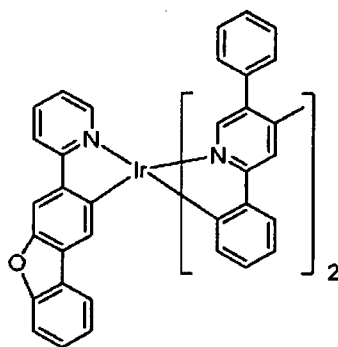


化合物 36

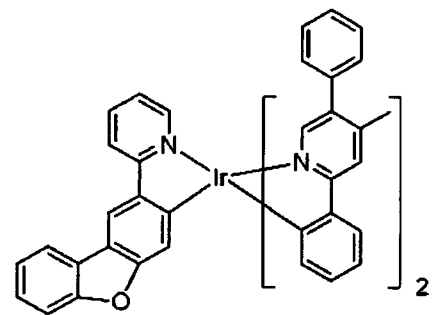
提供異配位基銥錯合物之其他特定實例，且包含選自由以下組成之群之化合物：



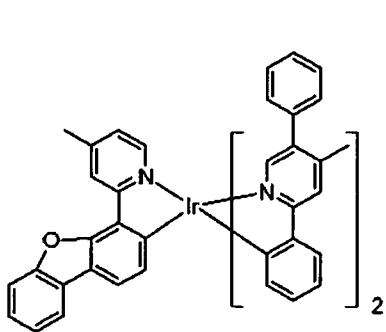
化合物 37



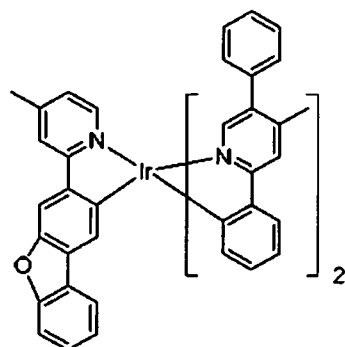
化合物 38



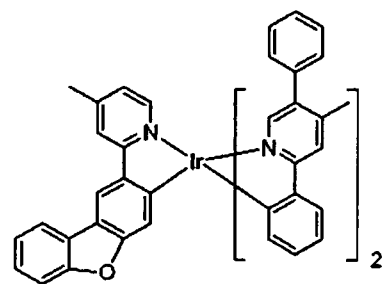
化合物 39



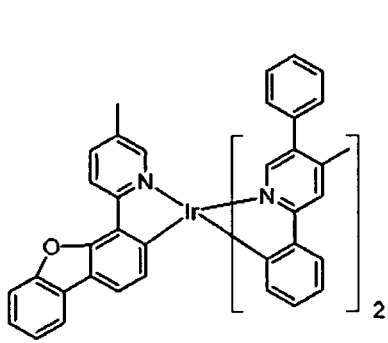
化合物 40



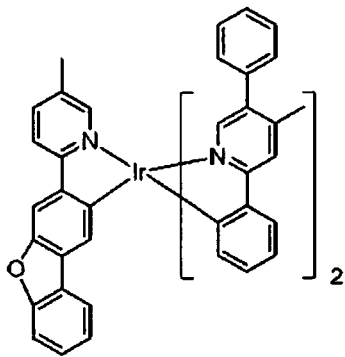
化合物 41



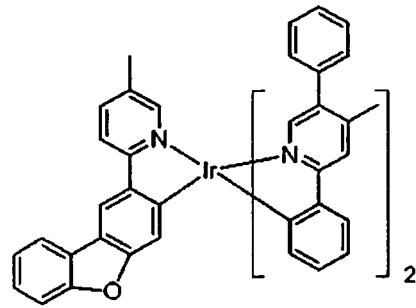
化合物 42



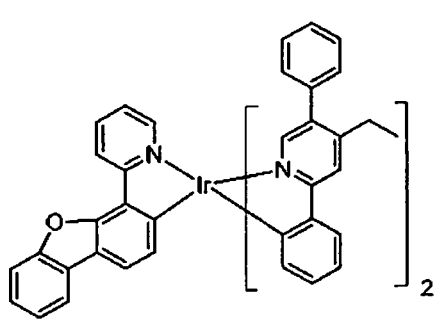
化合物 43



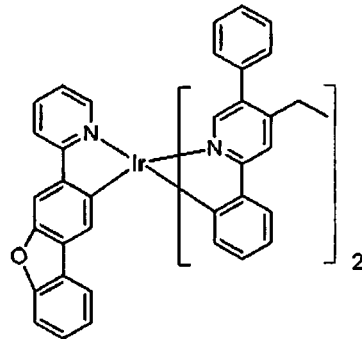
化合物 44



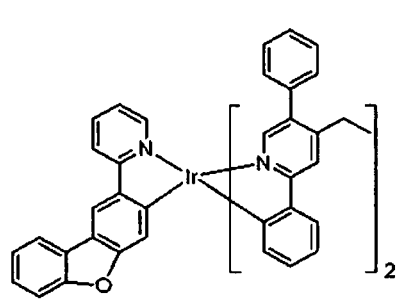
化合物 45



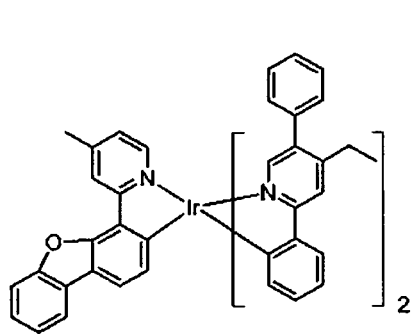
化合物 46



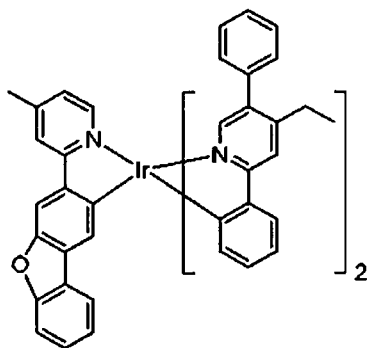
化合物 47



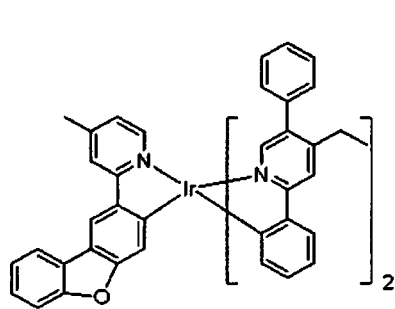
化合物 48



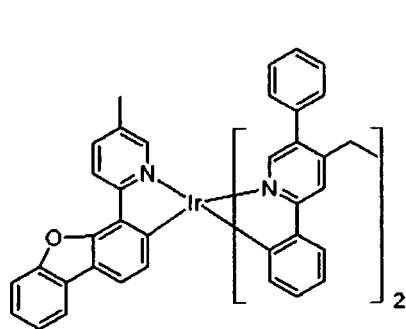
化合物 49



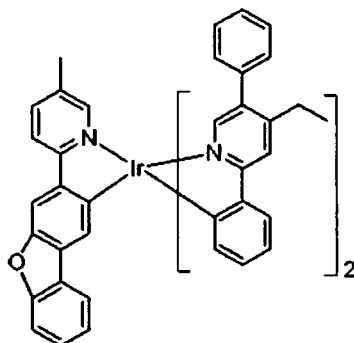
化合物 50



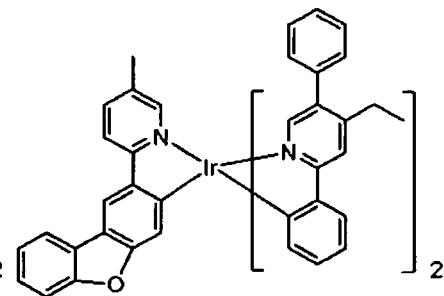
化合物 51



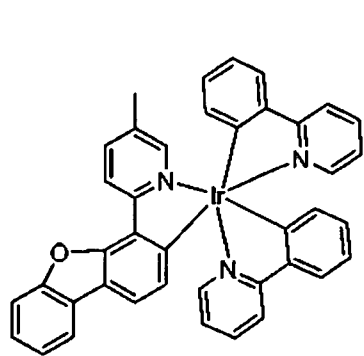
化合物 52



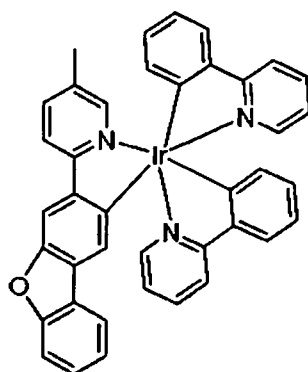
化合物 53



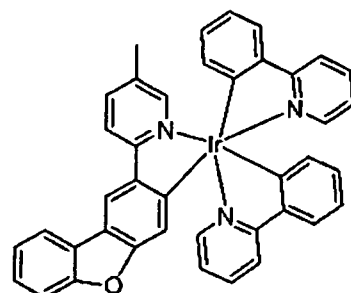
化合物 54



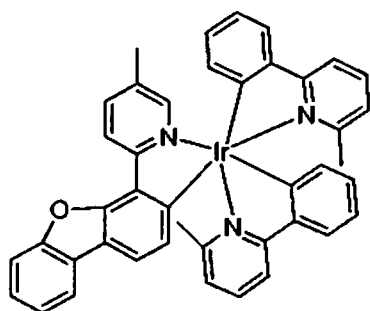
化合物 55



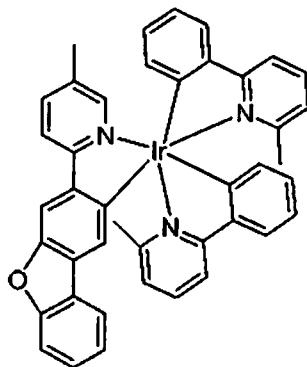
化合物 56



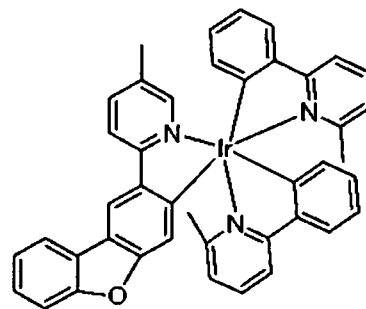
化合物 57



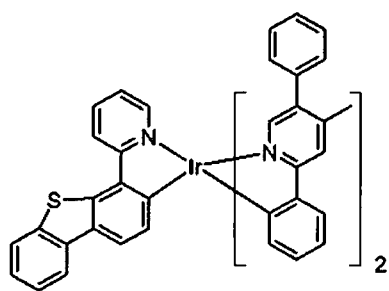
化合物 58



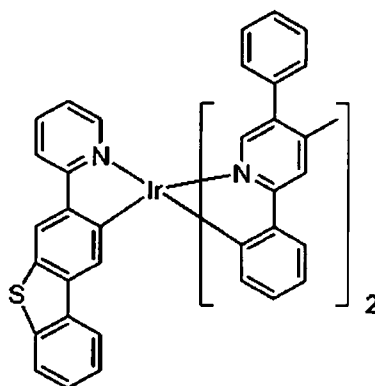
化合物 59



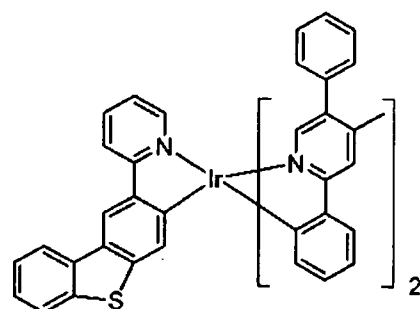
化合物 60



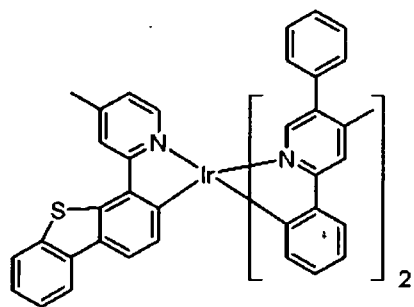
化合物 61



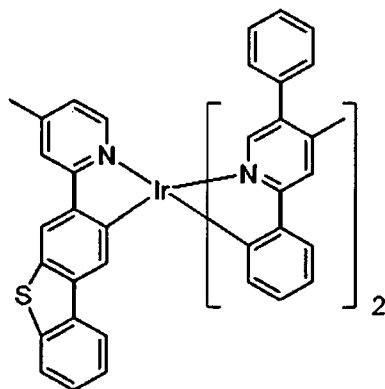
化合物 62



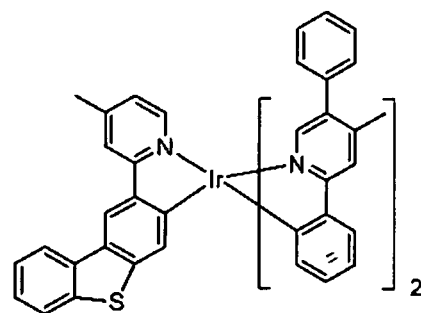
化合物 63



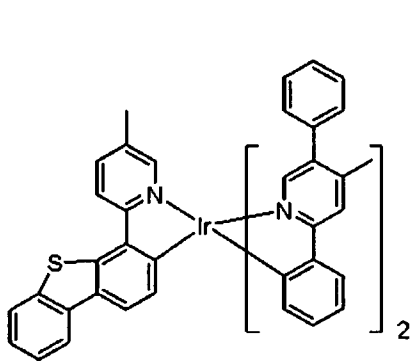
化合物 64



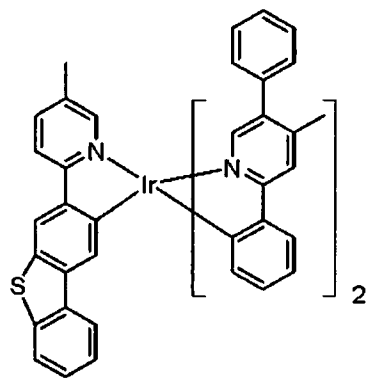
化合物 65



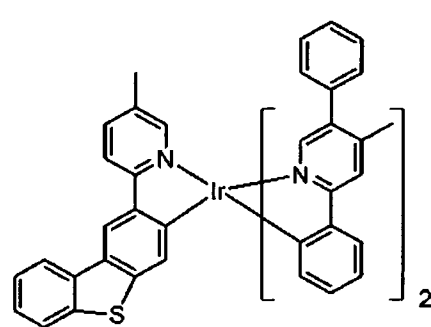
化合物 66



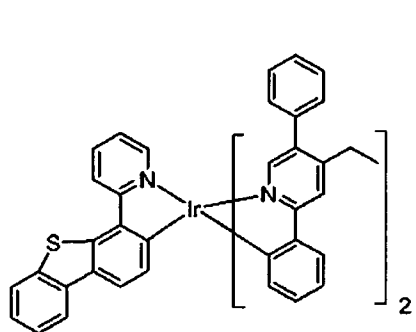
化合物 67



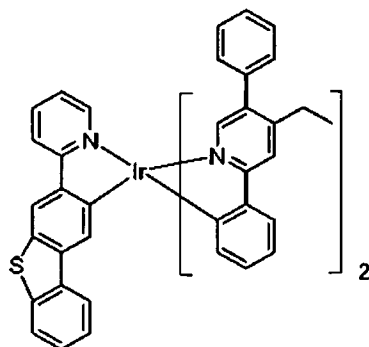
化合物 68



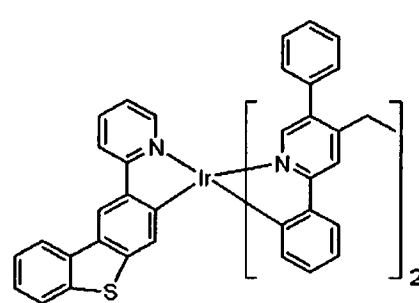
化合物 69



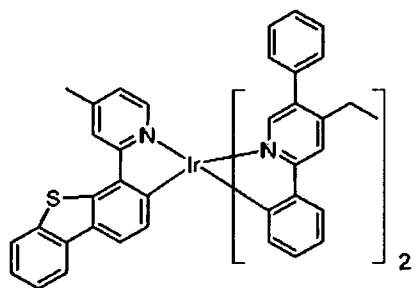
化合物 70



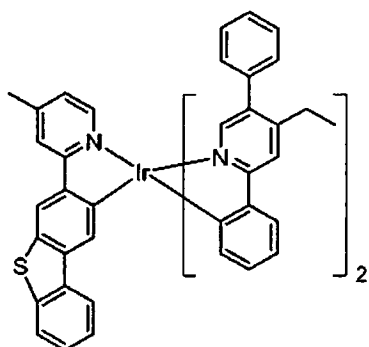
化合物 71



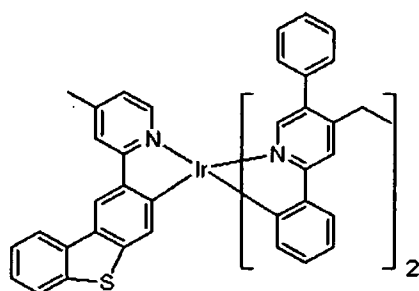
化合物 72



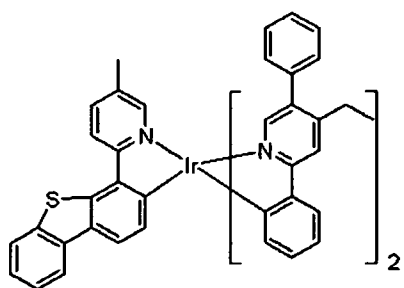
化合物 73



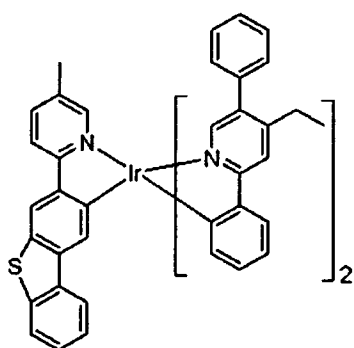
化合物 74



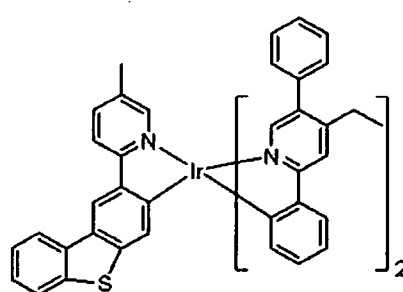
化合物 75



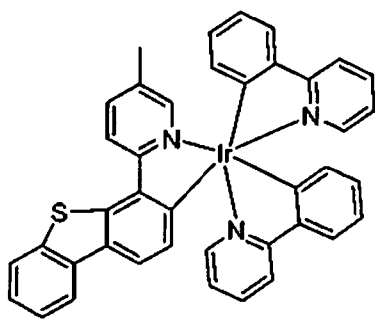
化合物 76



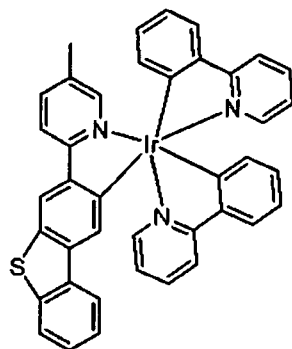
化合物 77



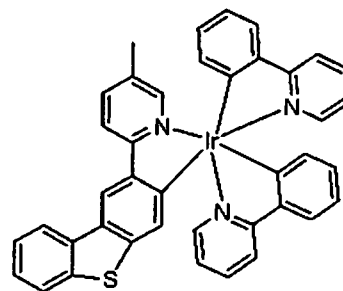
化合物 78



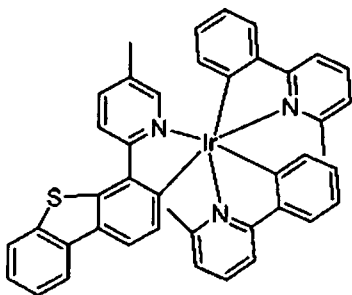
化合物 79



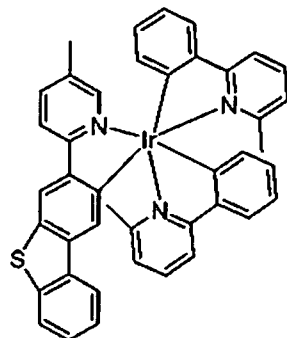
化合物 80



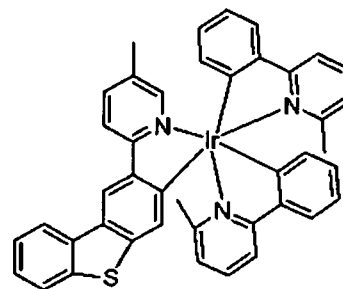
化合物 81



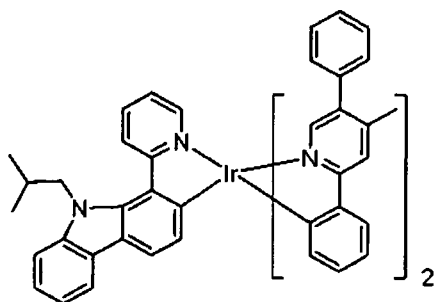
化合物 82



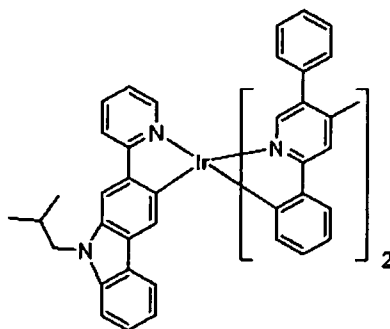
化合物 83



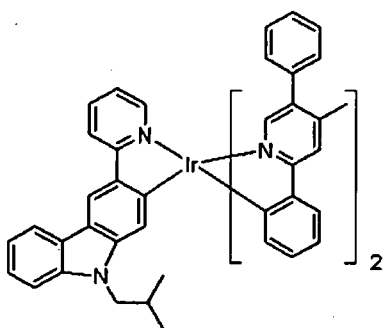
化合物 84



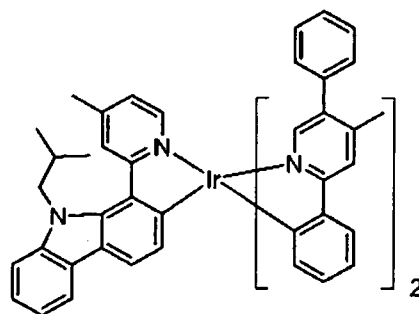
化合物 85



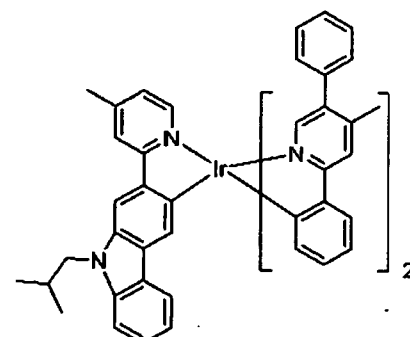
化合物 86



化合物 87

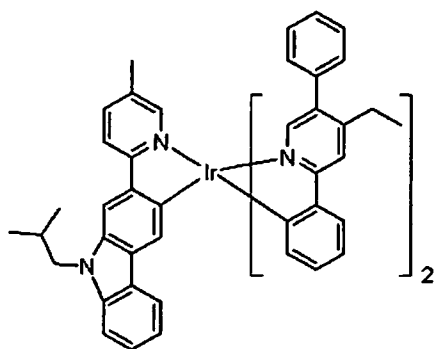


化合物 88

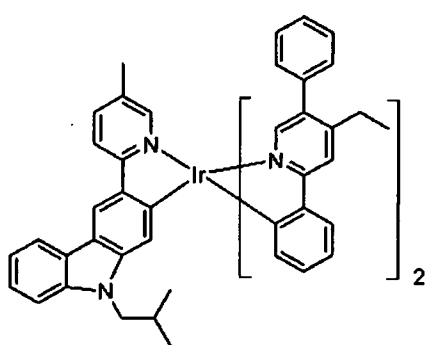


化合物 89

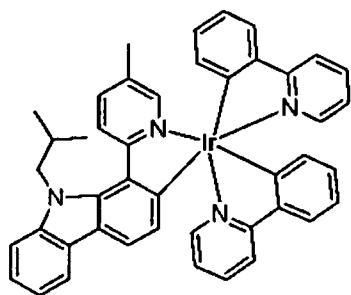




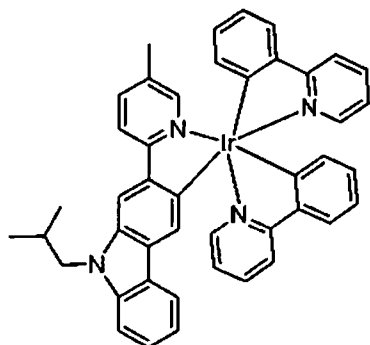
化合物 101



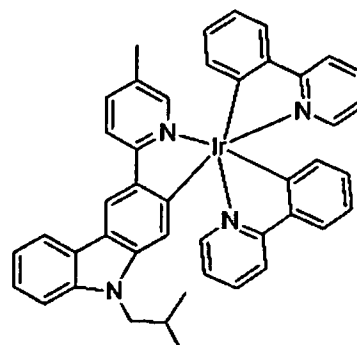
化合物 102



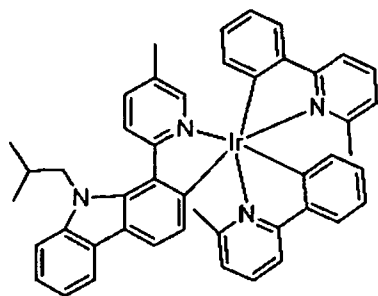
化合物 103



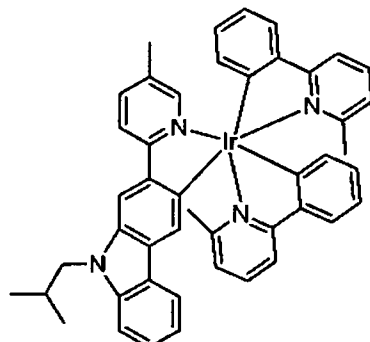
化合物 104



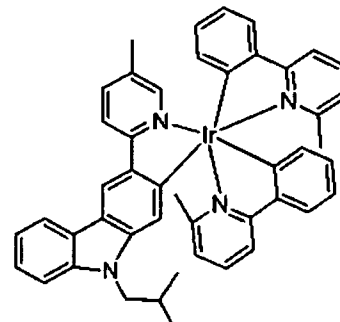
化合物 105



化合物 106



化合物 107



化合物 108

異配位基銦化合物可選自由化合物1-化合物108組成之群。

具有式I且X選自O、S及NR之化合物可尤其有利。不受限於理論，可以認為，包括二苯并咪喃、二苯并噻吩或吡啶部分(亦即，X係O、S、或NR)之配體的芳香性提供電子離域作用，此可產生改進之化合物穩定性及改進之器件。

另外，據信，X係O之化合物相對於X係S或NR之化合物可

更佳。在許多情形下，含有二苯并咪喃之化合物及包括該等化合物之器件顯示尤其理想之性質。

在一態樣中，提供X係O之化合物。X係O之實例性化合物包含但不限於化合物1-12。X係O之化合物至少因可產生具有期望性質之器件而尤佳。舉例而言，該等化合物可提供具有改進之效率及長壽命之器件。此外，該等化合物之較低昇華溫度亦可改進該等期望器件之製造。

提供X係O之其他實例性化合物且其包含(不限於)化合物37-60。化合物1-12及37-60可改進器件之效率、壽命、及製造。

在另一態樣中，提供X係S之化合物。X係S之實例性化合物包含但不限於化合物13-24。含有吡啶基二苯并咪喃配體之該等化合物亦可用於顯示良好性質之器件中。舉例而言，X係S之化合物可改進器件之穩定性及製造。

提供X係S之其他實例性化合物且其包含(不限於)化合物61-84。化合物13-24及61-84可改進器件之穩定性及製造。

在又一態樣中，提供X係NR之化合物。X係NR之實例性化合物包含但不限於化合物25-36。含有吡啶基咪唑配體之該等化合物亦可用於提供具有良好性質(例如改進之效率)之器件。

提供X係NR之其他實例性化合物且其包含(不限於)化合物85-108。化合物26-36及85-108可改進器件之效率。

此外，亦提供有機發光器件。該器件包括陽極、陰極、及佈置於該陽極與該陰極之間之有機層，其中該有機層包

陰



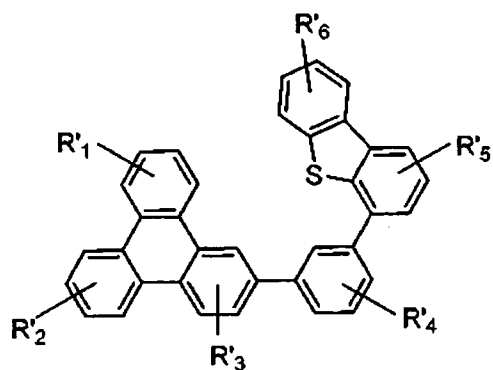
括具有式I之化合物。X係選自由NR、O、S、BR、及Se組成之群。R係選自由氫及烷基。較佳地，R具有4個或更少碳原子。R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>及R<sub>4</sub>可代表單、二、三、或四取代。R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>及R<sub>4</sub>之每一者皆獨立地選自由氫、具有4個或更少碳原子之烷基、及芳基組成之群。較佳地，R<sub>2</sub>及R<sub>3</sub>係獨立地選自由氫及具有4個或更少碳原子之烷基組成之群。經描述對式I化合物為較佳之雜原子及取代基之選擇對用於包含具有式I化合物之器件中亦較佳。該等選擇包含針對X、R、R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>及R<sub>3</sub>及R<sub>4</sub>所述之彼等。

在另一態樣中，R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>及R<sub>4</sub>之每一者皆獨立地選自由氫、具有4個或更少碳原子之烷基、及在環中具有6個或更少原子之芳基組成之群。較佳地，R<sub>2</sub>及R<sub>3</sub>係獨立地選自由氫、具有4個或更少碳原子之烷基及在環中具有6個或更少原子之芳基組成之群。

特定而言，提供所用化合物係選自由化合物1-36組成之群之器件。

此外，提供含有選自由化合物37-108組成之群之化合物之器件。另外，提供可含有選自由化合物1-108組成之群之化合物之器件。

在一態樣中，有機層係發射層且具有式I之化合物係發射摻雜物。該有機層可進一步包括主體材料。較佳地，主體材料包括聯伸三苯部分及二苯并噻吩部分。更佳地，該主體材料具有下式：



。R'<sub>1</sub>、R'<sub>2</sub>、R'<sub>3</sub>、R'<sub>4</sub>、R'<sub>5</sub>、及R'<sub>6</sub>

可代表單、二、三、或四取代。R'<sub>1</sub>、R'<sub>2</sub>、R'<sub>3</sub>、R'<sub>4</sub>、R'<sub>5</sub>、及R'<sub>6</sub>之每一者皆獨立地選自由氫、烷基、及芳基組成之群。

如上所述，本文所提供之異配位基化合物可有利地用於有機發光器件中以提供具有期望性質(例如改進之壽命、穩定性及製造)之器件。

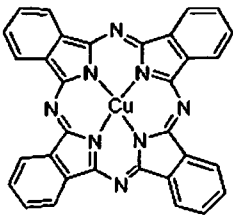
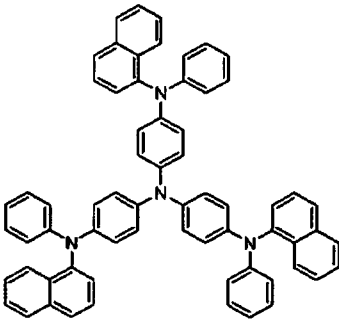
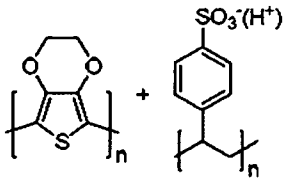
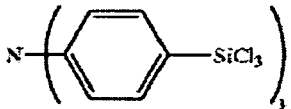
亦提供包括器件之消費產品。該器件進一步包括陽極、陰極、及有機層。該有機層進一步包括具有式I之異配位基銦錯合物。

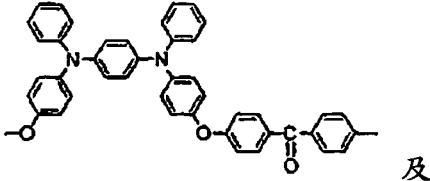
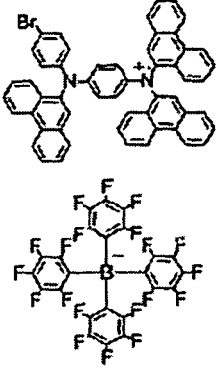
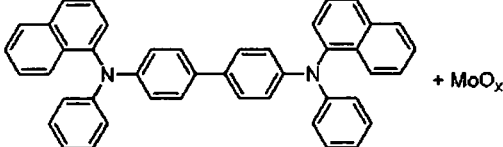
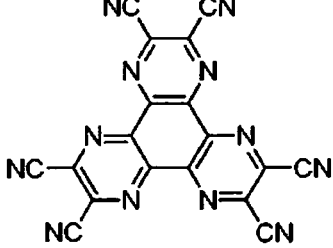
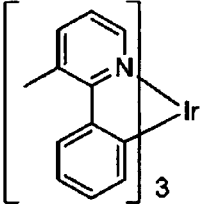
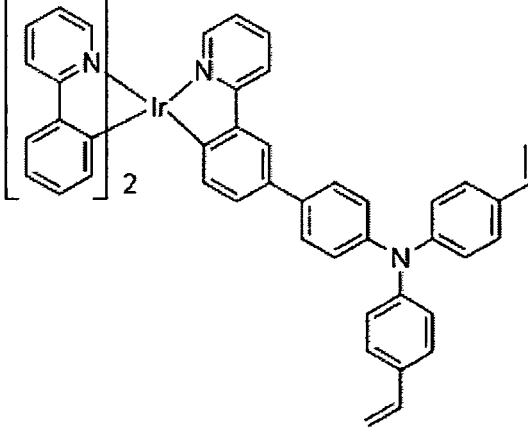
本文所述用於有機發光器件中特定層之材料可與眾多種存在於該器件中之其他材料組合使用。舉例而言，本文所揭示之發射摻雜物可與眾多種主體材料、傳送層、阻擋層、注入層、電極及可存在之其他層組合使用。下文所述或所提及之材料係可與本文所揭示化合物組合使用之材料之非限制性實例，且熟習此項技術者可容易地查閱文獻來識別可組合使用之其他材料。

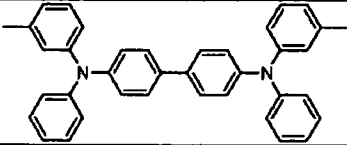
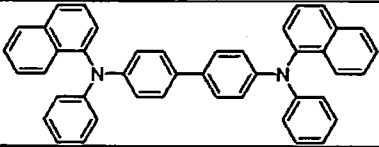
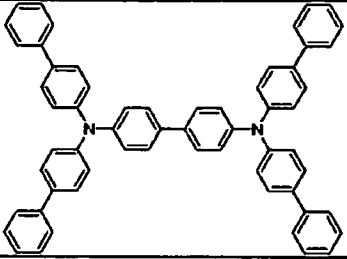
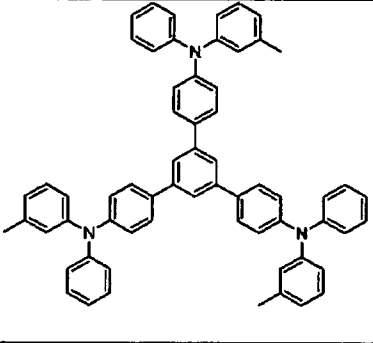
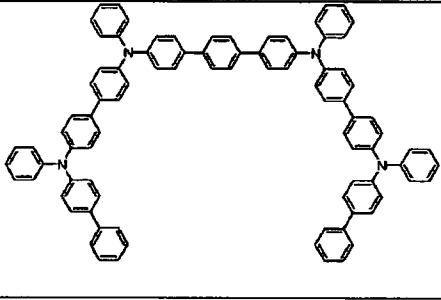
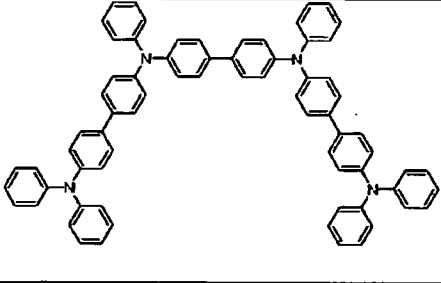
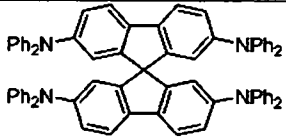
除本文所揭示材料以外及/或與該等材料組合，在OLED中亦可使用許多電洞注入材料、電洞傳送材料、主體材料、摻雜物材料、激子/電洞阻擋層材料、電子傳送材料

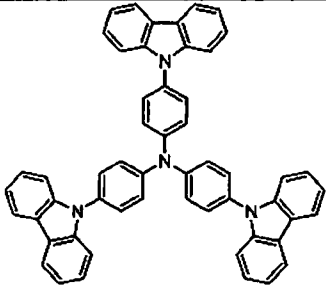
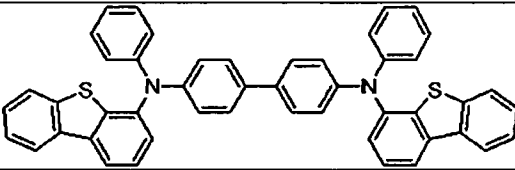
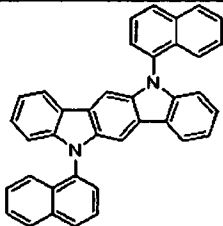
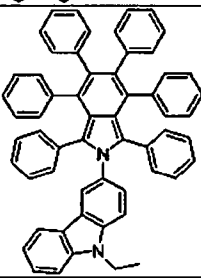
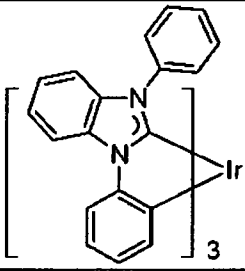
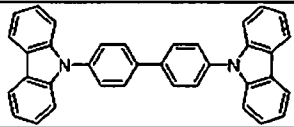
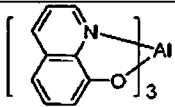
及電子注入材料。可與本文所揭示材料組合用於OLED中之材料之非限制性實例列示於下表2中。表2列示非限制性材料種類、用於各類材料之化合物之非限制性實例及揭示該等材料之參考文獻。

表 2

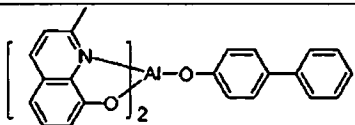
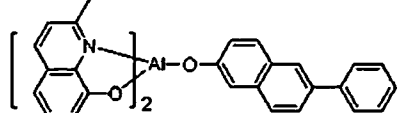
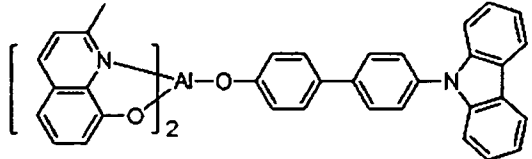
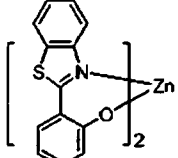
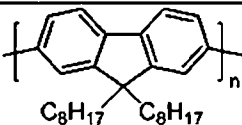
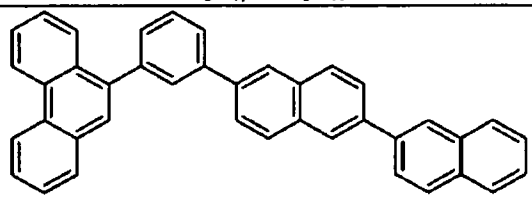
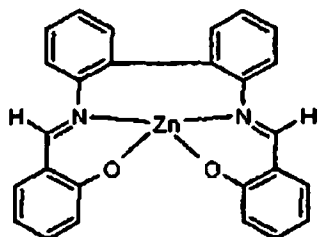
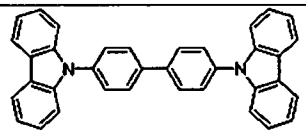
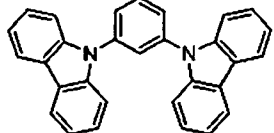
材料	材料實例	出版物
電洞注入材料		
酞菁及卟啉化合物		Appl. Phys. Lett. 69, 2160(1996)
星形三芳胺(starburst triarylamine)		J. Lumin. 72-74, 985(1997)
CF <sub>x</sub> 氟代烴聚合物	$\left[ \text{CH}_x\text{F}_y \right]_n$	Appl. Phys. Lett. 78, 673(2001)
導電聚合物(例如, PEDOT:PSS, 聚苯胺、聚噻吩)		Synth. Met. 87, 171 (1997) WO2007002683
膦酸及矽烷SAM		US20030162053

<p>具有導電摻雜物之三芳胺或聚噻吩聚合物</p>		<p>EA01725079A1</p>
		
<p>與諸如鉬及鎢氧化物等金屬氧化物錯合之芳胺</p>		<p>SID Symposium Digest, 37, 923(2006) WO2009018009</p>
<p>p-型半導體有機錯合物</p>		<p>US20020158242</p>
<p>金屬有機金屬錯合物</p>		<p>US20060240279</p>
<p>可交聯化合物</p>		<p>US20080220265</p>
<p>電洞傳送材料</p>		

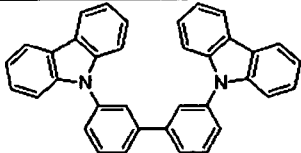
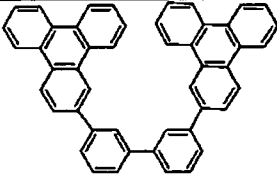
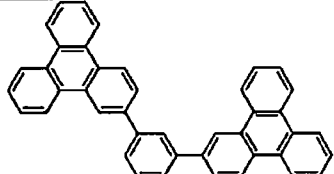
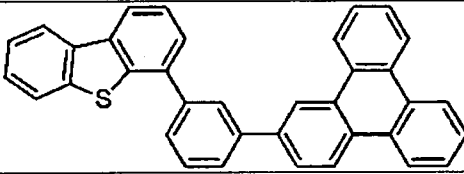
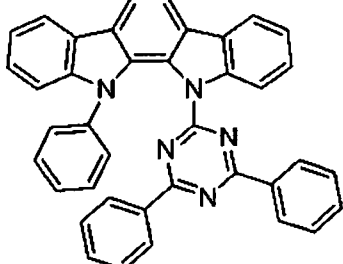
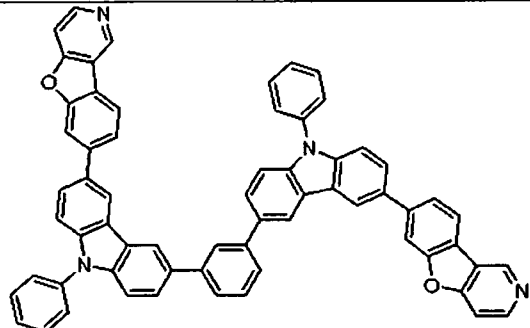
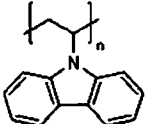
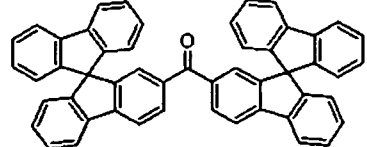
<p>三芳胺(例如, TPD、<math>\alpha</math>-NPD)</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)</p>
		<p>US5061569</p>
		<p>EP650955</p>
		<p>J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)</p>
		<p>Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)</p>
		<p>Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)</p>
	<p>在螺芴核心上之三芳胺</p>	

<p>芳胺吡啶化合物</p>		<p>Adv. Mater. 6, 677 (1994), US20080124572</p>
<p>具有(二)苯并噻吩/(二)苯并呋喃之三芳胺</p>		<p>US20070278938, US20080106190</p>
<p>吲哚吡啶</p>		<p>Synth. Met. 111, 421 (2000)</p>
<p>異吲哚化合物</p>		<p>Chem. Mater. 15, 3148 (2003)</p>
<p>金屬碳烯錯合物</p>		<p>US20080018221</p>
<p>磷光 OLED 主體材料</p>		
<p>紅色主體材料</p>		
<p>芳基吡啶</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)</p>
<p>金屬 8-羥基喹啉酸鹽(例如, Alq<sub>3</sub>、BAIq)</p>		<p>Nature 395, 151 (1998)</p>

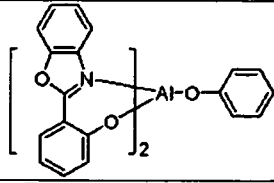
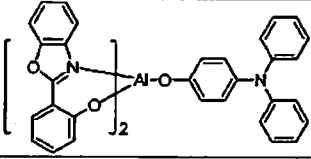
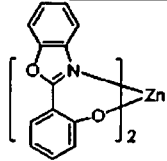
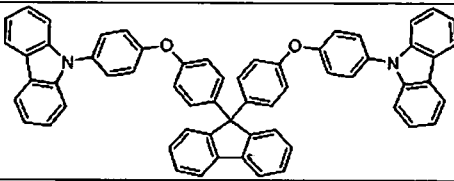
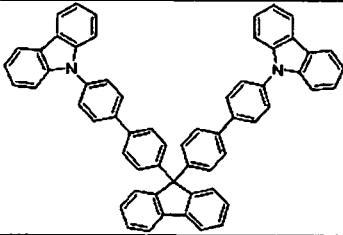
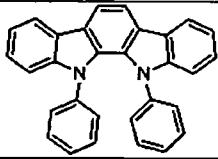
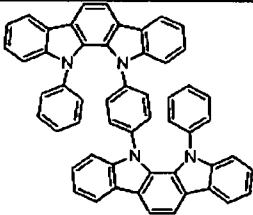
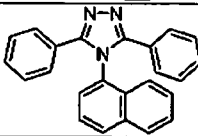
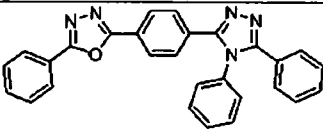


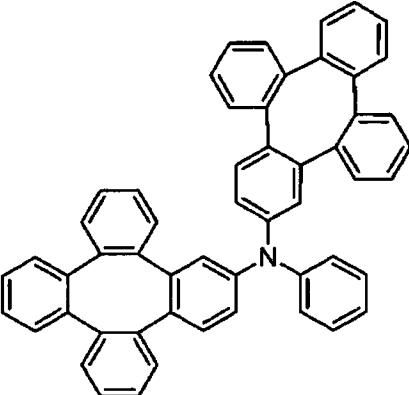
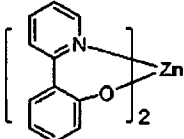
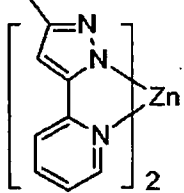
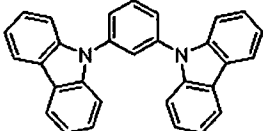
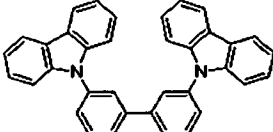
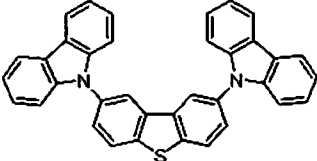
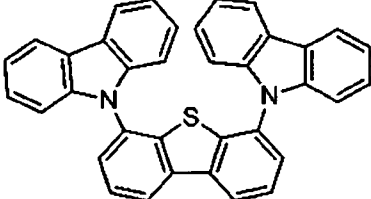
		US20060202194
		WO2005014551
		WO2006072002
金屬苯氧基苯并噻唑 化合物		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
共軛寡聚物及聚合物 (例如, 聚芴)		Org. Electron. 1, 15 (2000)
芳族稠合環		WO2009066779, WO2009066778, WO2009063833, US20090045731, US20090045730, WO2009008311, US20090008605, US20090009065
鋅錯合物		WO2009062578
綠色主體材料		
芳基噁唑		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US20030175553

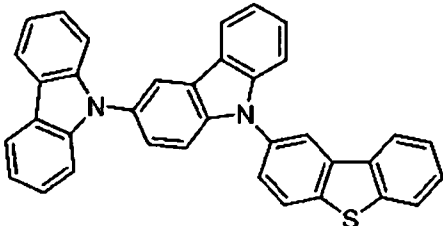
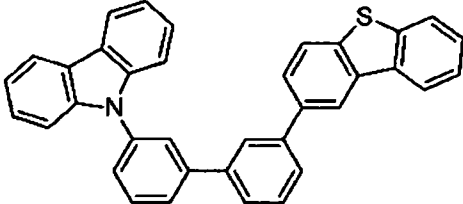
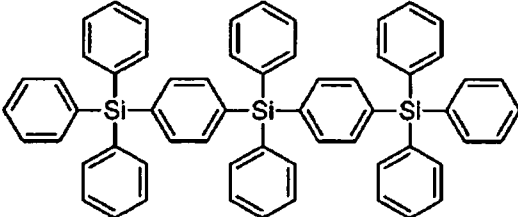
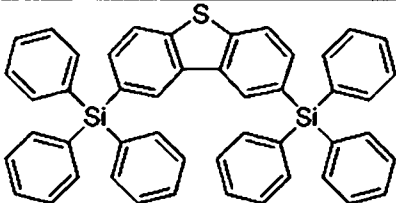
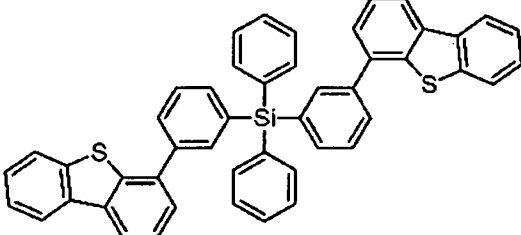
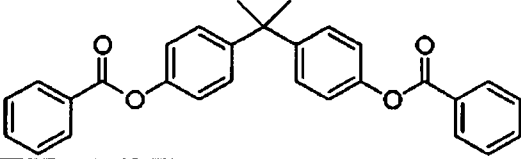
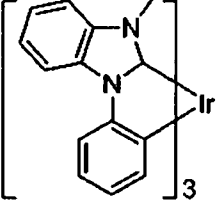
等

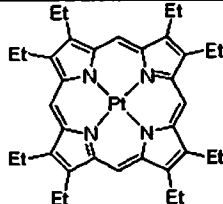
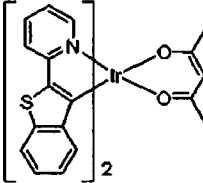
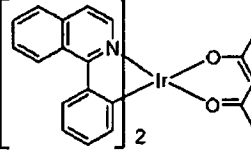
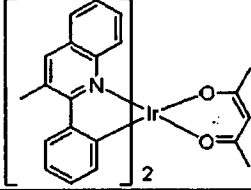
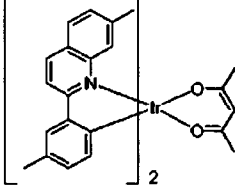
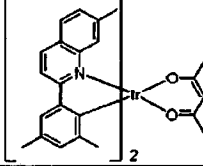
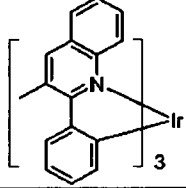
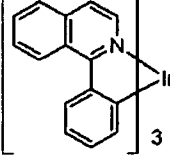
		WO2001039234
芳基聯伸三苯化合物		US20060280965
		US20060280965
		WO2009021126
供體受體型分子		WO2008056746
氮雜-吡啶/DBT/DBF		JP2008074939
聚合物(例如, PVK)		Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)
螺芴化合物		WO2004093207

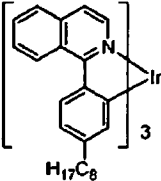
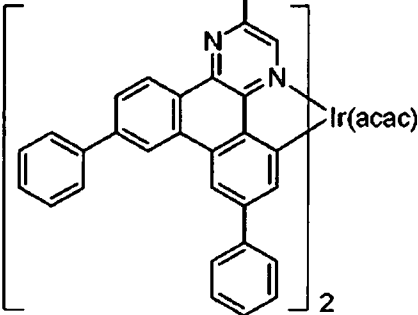
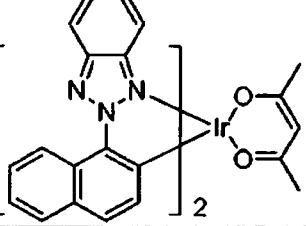
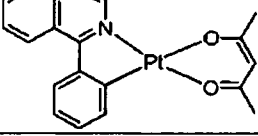
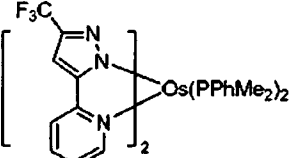
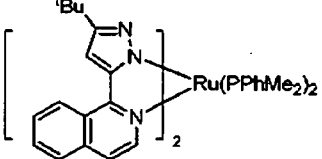
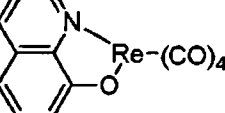
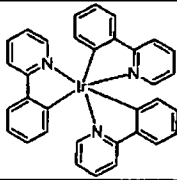


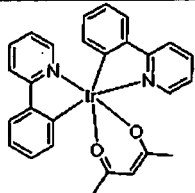
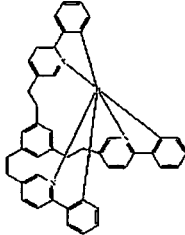
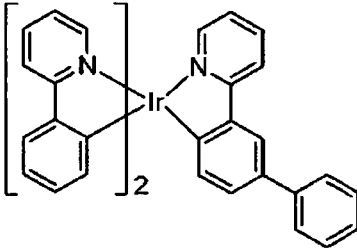
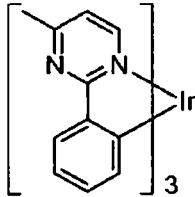
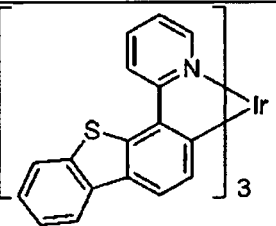
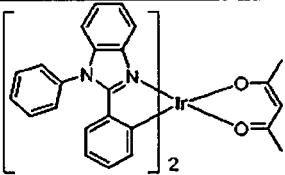
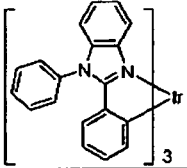
<p>金屬苯氧基苯并噁唑 化合物</p>		<p>WO2005089025</p>
		<p>WO2006132173</p>
		<p>JP200511610</p>
<p>螺芬-吡啶化合物</p>		<p>JP2007254297</p>
		<p>JP2007254297</p>
<p>吡啶吡啶</p>		<p>WO2007063796</p>
		<p>WO2007063754</p>
<p>5-員環缺電子雜環(例 如，三唑、噁二唑)</p>		<p>J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)</p>
		<p>WO2004107822</p>

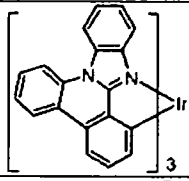
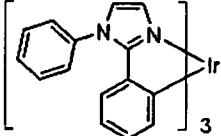
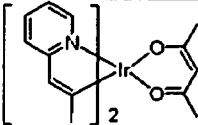
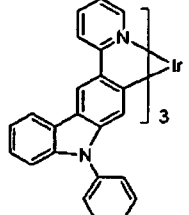
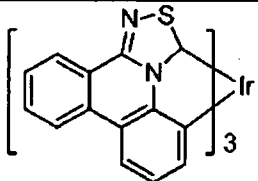
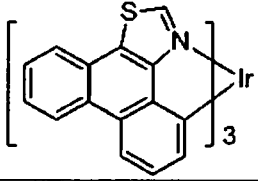
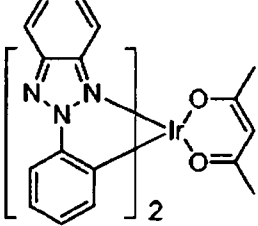
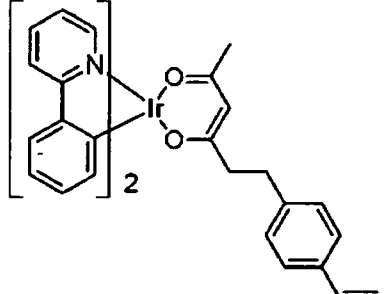
<p>四伸苯基錯合物</p>		<p>US20050112407</p>
<p>金屬苯氧基吡啶化合物</p>		<p>WO2005030900</p>
<p>金屬配位錯合物(例如，具有 N^N 配體之 Zn、Al)</p>		<p>US20040137268, US20040137267</p>
<p>藍色主體材料</p>		
<p>芳基吡啶</p>		<p>Appl. Phys. Lett, 82, 2422 (2003)</p>
		<p>US20070190359</p>
<p>二苯并噻吩/二苯并呋喃-吡啶化合物</p>		<p>WO2006114966, US20090167162</p>
		<p>US20090167162</p>

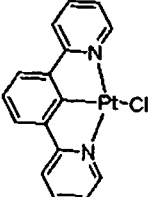
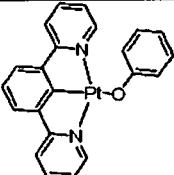
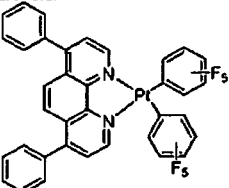
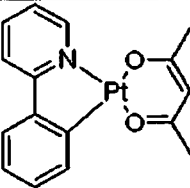
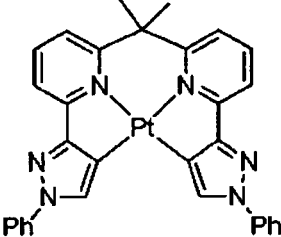
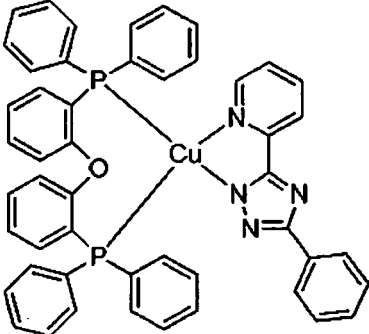
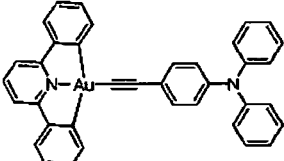
		WO2009086028
		US20090030202, US20090017330
矽芳基化合物		US20050238919
		WO2009003898
矽/鍺芳基化合物		EP2034538A
芳基苯甲醯基酯		WO2006100298
高三重態金屬有機金屬錯合物		US7154114
磷光摻雜物		
紅色摻雜物		

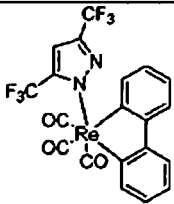
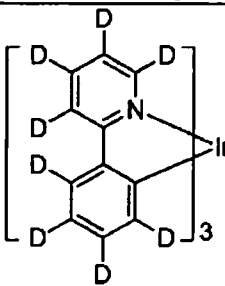
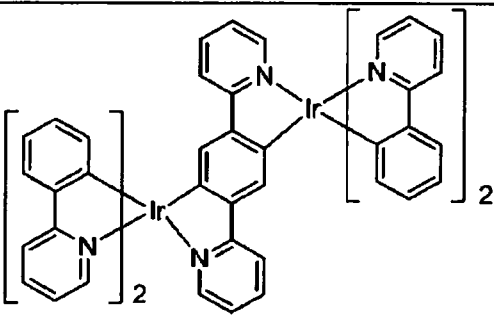
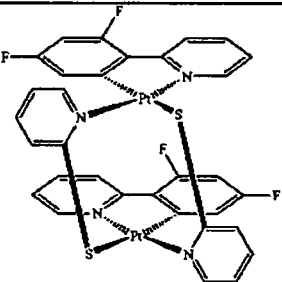
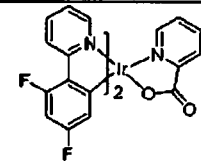
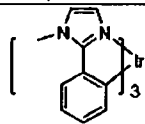
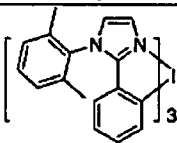
<p>重金屬卟啉(例如， PtOEP)</p>		<p>Nature 395, 151 (1998)</p>
<p>銱(III)有機金屬錯合物</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)</p>
		<p>US2006835469</p>
		<p>US2006835469</p>
		<p>US20060202194</p>
		<p>US20060202194</p>
		<p>US20070087321</p>
		<p>US20070087321</p>

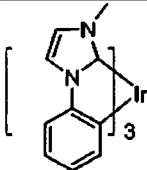
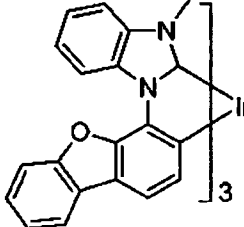
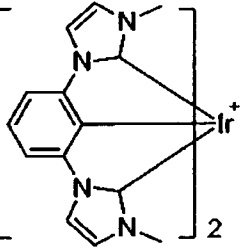
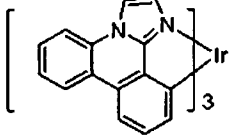
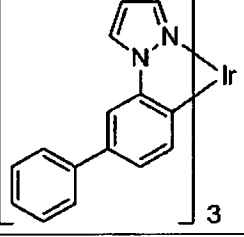
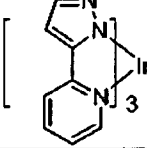
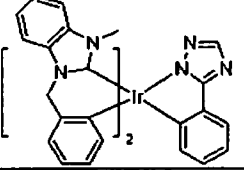
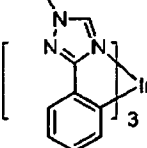
	 <p style="text-align: center;"><math>\text{H}_{17}\text{C}_8</math></p>	Adv. Mater. 19, 739 (2007)
	 <p style="text-align: right;"><math>\text{Ir}(\text{acac})</math></p>	WO2009100991
		WO2008101842
鉑(II)有機金屬錯合物		WO2003040257
鐵(III)錯合物	 <p style="text-align: center;"><math>\text{Os}(\text{PPhMe}_2)_2</math></p>	Chem. Mater. 17, 3532 (2005)
鈦(II)錯合物	 <p style="text-align: center;"><math>\text{Ru}(\text{PPhMe}_2)_2</math></p>	Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
銠(I)、(II)、及(III)錯 合物	 <p style="text-align: center;"><math>\text{Re}-(\text{CO})_4</math></p>	US20050244673
綠色摻雜物		
鈱(III)有機金屬錯合物		Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)

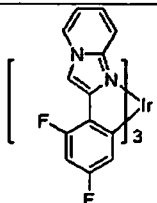
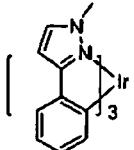
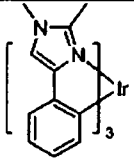
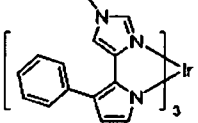
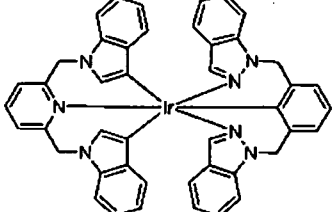
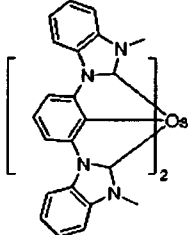
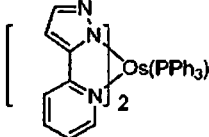
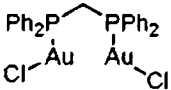
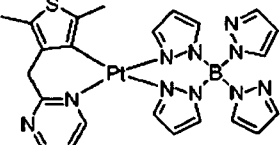
及其衍生物		
		US20020034656
		US7332232
		US20090108737
		US20090039776
		US6921915
		US6687266
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)

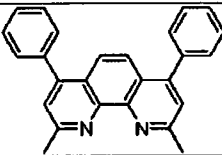
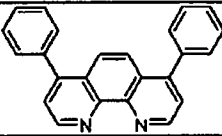
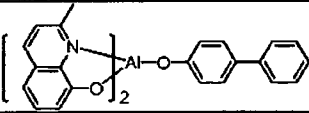
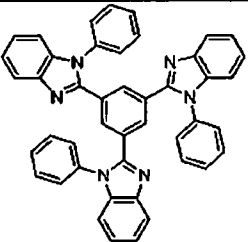
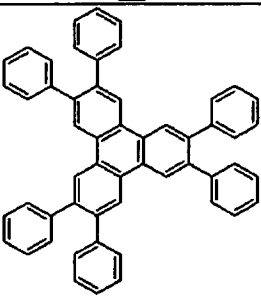
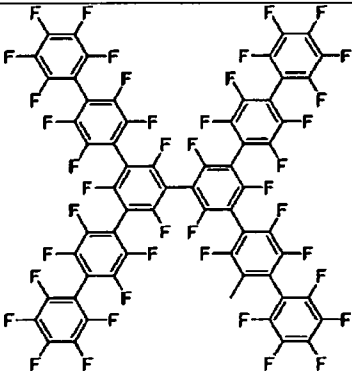
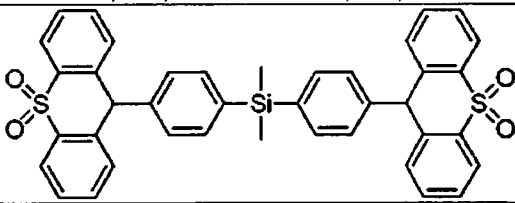
		US20070190359
		US 20060008670 JP2007123392
		Adv. Mater. 16, 2003 (2004)
		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
		WO2009050290
		US20090165846
		US20080015355
聚合金屬有機金屬化合物之單體		US7250226, US7396598

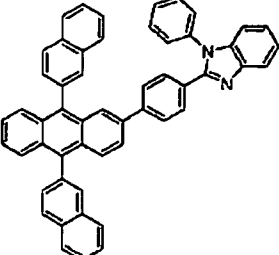
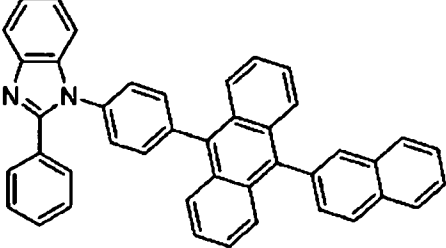
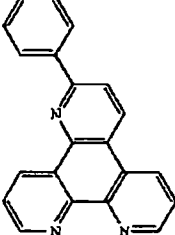
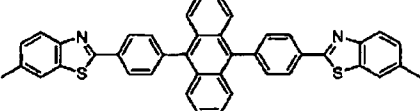
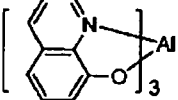
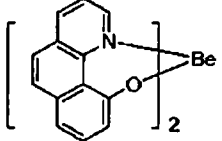
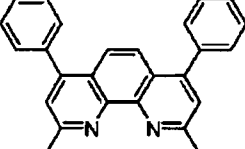
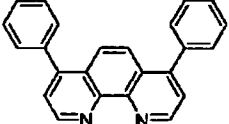
Pt(II)有機金屬錯合物，包含多齒配體		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
		WO2002015645
		US20060263635
Cu 錯合物		WO2009000673
金錯合物		Chem. Commun. 2906 (2005)

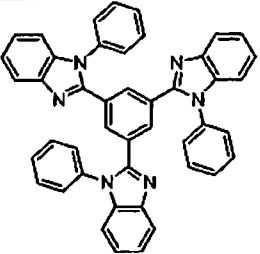
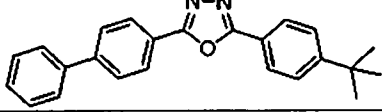
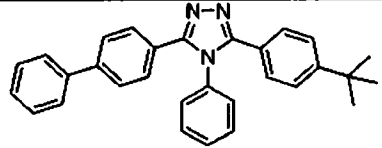
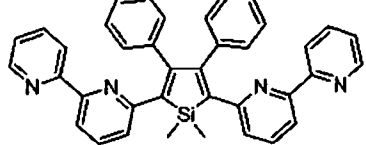
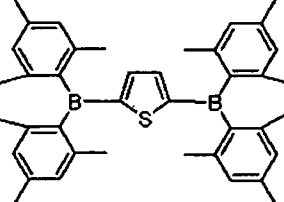
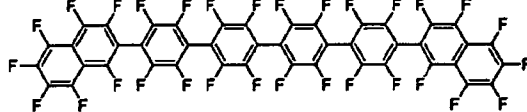

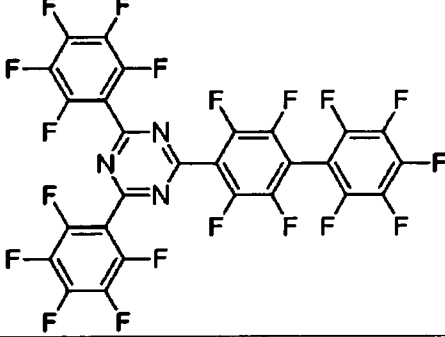
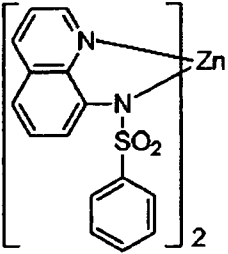
<p>銻(III)錯合物</p>		<p>Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)</p>
<p>氘化有機金屬錯合物</p>		<p>US20030138657</p>
<p>具有兩個或更多個金屬中心之有機金屬錯合物</p>		<p>US20030152802</p>
<p>藍色摻雜物</p>		<p>US7090928</p>
<p>銻(III)有機金屬錯合物</p>		<p>WO2002002714</p>
	<p>WO2006009024</p>	
	<p>US20060251923</p>	

		US7393599, WO2006056418, US20050260441, WO2005019373
		US7534505
		US7445855
		US20070190359, US20080297033
		US7338722
		US20020134984
		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)
		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)

		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)
		WO2005123873
		WO2005123873
		WO2007004380
		WO2006082742
鐵(II)錯合物		US7279704
		Organometallics 23, 3745 (2004)
金錯合物		Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)
鉑(II)錯合物		WO2006098120, WO2006103874
激子/電洞阻擋層材料		

浴銅靈(bathocuprine) 化合物(例如, BCP、 BPhen)		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
金屬 8-羥基喹啉酸鹽 (例如, BAlq)		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
5-員環缺電子雜環, 例 如三唑、噁二唑、咪 唑、苯并咪唑		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
聯伸三苯化合物		US20050025993
氟化芳族化合物		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)
吩噻嗪-S-氧化物		WO2008132085
電子傳送材料		

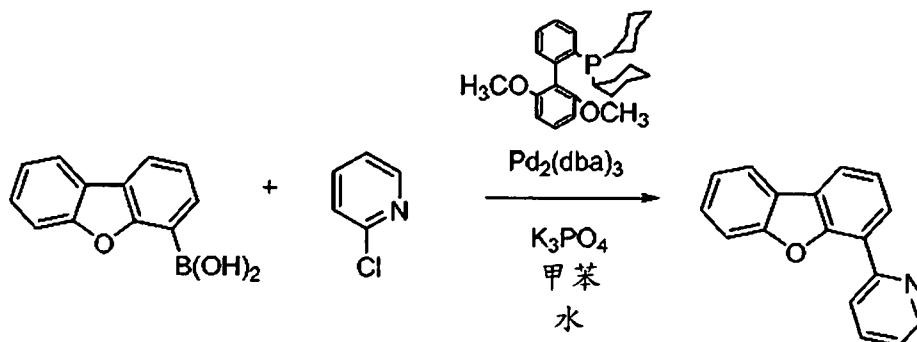
蔥-苯并咪唑化合物		WO2003060956
		US20090179554
氮雜聯伸三苯衍生物		US20090115316
蔥-苯并噻唑化合物		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
金屬 8-羥基喹啉酸鹽(例如, Alq <sub>3</sub> 、Zrq <sub>4</sub> )		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987) US7230107
金屬羥基苯并喹啉酸鹽		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
浴銅靈化合物, 例如 BCP、BPhen 等		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)

5-員環缺電子雜環(例如三唑、噁二唑、咪唑、苯并咪唑)		Appl. Phys. Lett. 74, 865 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)
		Jpn. J. Apply. Phys. 32, L917 (1993)
矽羅化合物		Org. Electron. 4, 113 (2003)
芳基硼烷化合物		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714 (1998)
氟化芳族化合物		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)
富勒烯(例如, C60)		US20090101870
三嗪錯合物		US20040036077
Zn(N^N)錯合物		US6528187

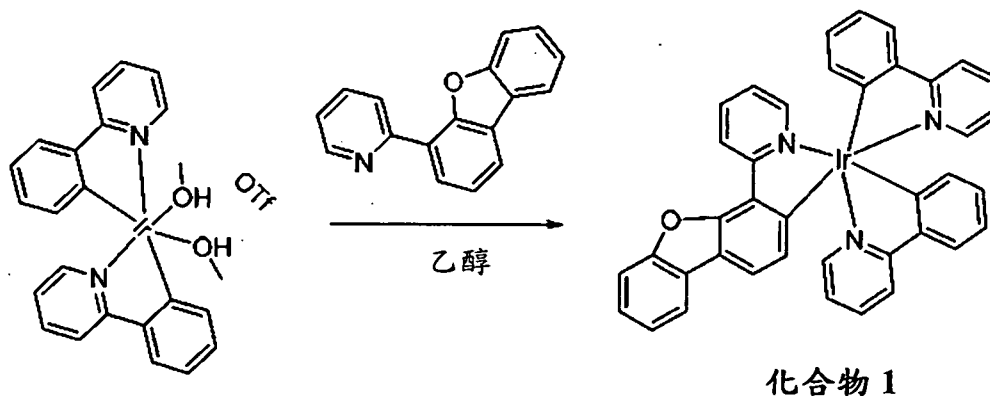
## 實驗

## 化合物實例

## 實例 1. 化合物 1 之合成

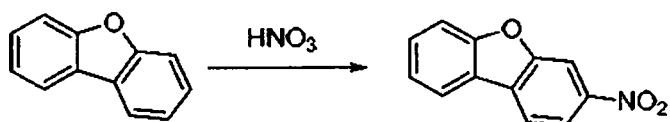


2-(二苯并[b,d]呔喃-4-基)吡啶之合成。在 100 mL 甲苯及 10 mL 水中混合 4-二苯并呔喃硼酸 (5.0 g, 23.6 mmol)、2-氯吡啶 (2.2 g, 20 mmol)、二環己基(2',6'-二甲氧基聯苯-2-基)膦 (S-Phos) (0.36 g, 0.8 mmol)、及磷酸鉀 (11.4 g, 50 mmol)。將氮氣直接鼓泡至混合物中持續 30 分鐘。接下來，添加  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$  (0.18 g, 0.2 mmol) 且在氮氣下將混合物加熱至回流保持 8 h。冷卻混合物且分離有機層。使用鹽水洗滌有機層，藉由硫酸鎂乾燥，過濾，且蒸發以得到殘餘物。藉由管柱層析使用二氯甲烷洗脫來純化殘餘物。純化後獲得 4.5 g 期望產物。

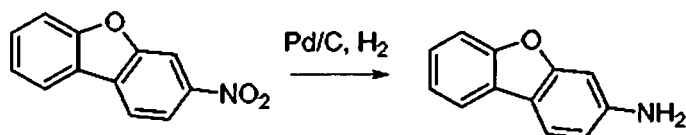


化合物1之合成。在50 mL乙醇中混合三氟甲磺酸銨前體(0.97 g, 1.4 mmol)及2-(二苯并[b,d]呋喃-4-基)吡啶(1.0 g, 4.08 mmol)。將混合物在回流及氮氣下加熱24 h。在回流期間形成沉澱物。經由矽藻土床過濾反應混合物。使用甲醇及己烷洗滌產物。將固體溶於二氯甲烷中且藉由管柱使用1:1之二氯甲烷及己烷進行純化。在管柱純化後獲得0.9 g純產物。(HPLC純度：99.9%)

### 實例2. 化合物2之合成

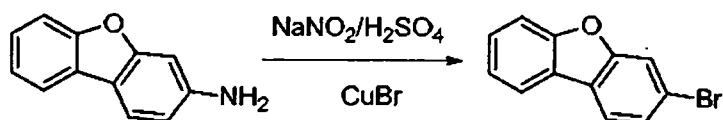


3-硝基二苯并呋喃之合成。在室溫下向存於250 mL圓底燒瓶中之80 mL三氟乙酸中添加二苯并呋喃(7.06 g, 42 mmol)並劇烈攪拌以溶解內容物。然後在冰上冷卻溶液且將存於20 mL三氟乙酸中之1.2當量的70% HNO<sub>3</sub>(4.54 g, 50.40 mmol)緩緩傾倒至經攪拌溶液中。攪拌30分鐘後，將燒瓶內容物傾倒至150 mL冰-水中並再攪拌15分鐘。然後過濾出灰白色沉澱物且最後使用2 M NaOH及水洗滌。然後自1.5 L沸騰乙醇中將濕材料重結晶為淺黃色晶體形式。分離出7.2 g產物。

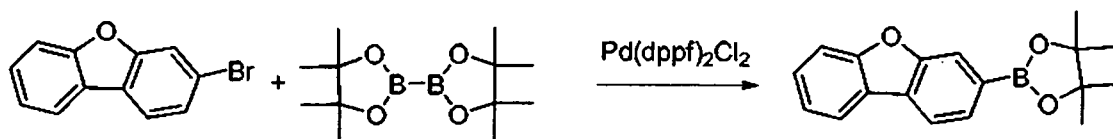


3-氨基二苯并呋喃之合成。將3-硝基二苯并呋喃(6.2 g, 29.08 mmol)溶於360 mL乙酸乙酯中且藉由使氮氣通過溶

液來脫氣5分鐘。向溶液中添加500 mg Pd/C且在60 psi壓力下對內容物實施氫化。使反應進行至氫化裝置中之壓力穩定在60 psi下並保持15分鐘。然後經由小砂藻土墊過濾反應內容物且獲得灰白色產物。(5.3 g, 28.9 mmol)

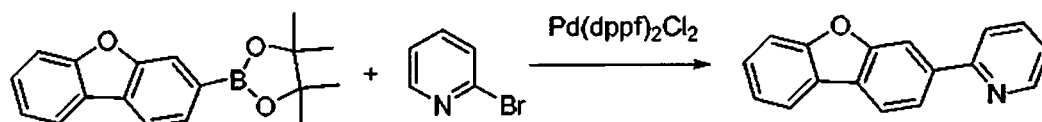


3-溴二苯并呋喃之合成。將NaNO<sub>2</sub>(2.21 g, 32.05 mmol)溶於存於保持在0°C下之錐形瓶中之20 mL濃H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>中。然後將存於最小體積冰乙酸中之2-胺基二苯并呋喃(5.3 g, 28.9 mmol)溶液緩緩添加至燒瓶中，以使溫度不會升至5-8°C以上，且將混合物在0°C下再攪拌1.5 h。向經攪拌混合物中添加100 mL乙醚且立即沉降出相應重氮鹽之沉澱物。立即過濾出褐色重氮鹽並轉移至含有存於150 mL 48% HBr中之CuBr(6.25 g, 43.5 mmol)之燒瓶中。然後將燒瓶置於維持於64°C之水浴中並攪拌2 h。冷卻至室溫後，過濾出深色反應內容物並使用水洗滌沉澱物兩次。然後藉由矽膠管柱使用5-10% DCM/己烷對分離之固體實施快速層析以得到4.79 g最終化合物。

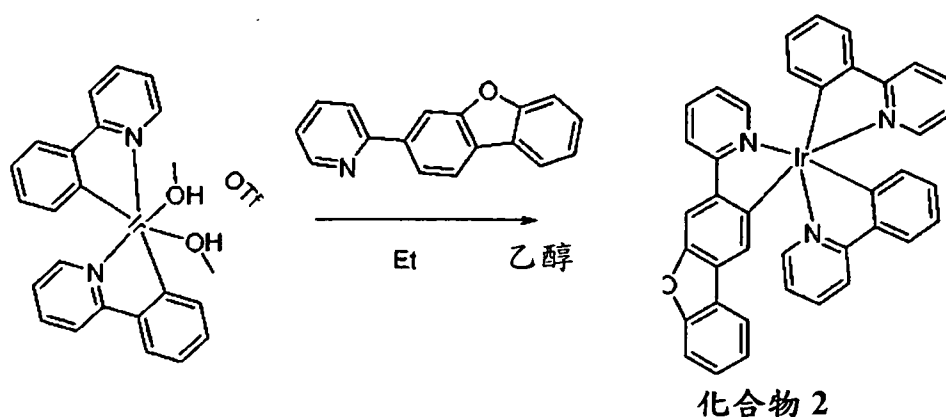


2-(二苯并[b,d]呋喃-3-基)-4,4,5,5-四甲基-1,3,2-二氧硼啶之合成。將3-溴二苯并呋喃(4.79 g, 19.39 mmol)、雙戊醯二硼(6.4 g, 25.2 mmol)、KOAc(7.61 g, 77.54 mmol)添

加至存於圓底燒瓶中之100 mL二噁烷中。在氮氣鼓泡下將內容物脫氣30分鐘且向反應混合物中添加Pd(dppf)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>(158 mg, 0.019 mmol)。再次脫氣10分鐘後，將反應混合物加熱至80°C並攪拌過夜。然後將反應燒瓶冷卻至室溫並經由矽藻土墊過濾。然後將深褐色溶液在鹽水與乙酸乙酯之間分配。收集有機層，藉由無水Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>乾燥且在真空下蒸發多餘溶劑。然後將褐色固體固體上樣於矽膠管柱中且迅速使用5%乙酸乙酯/己烷/0.005%三乙胺進行快速層析以得到5.08 g最終產物。

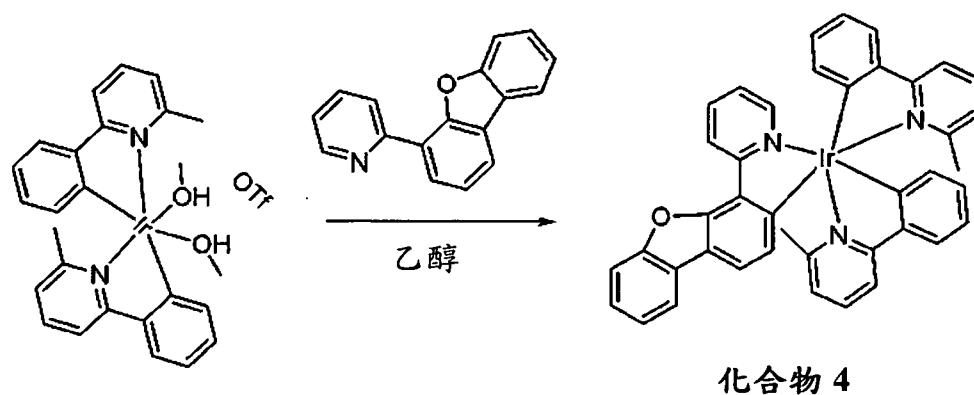


2-(二苯并呋喃-3-基)吡啶之合成。將二苯并呋喃硼酸酯(5.85 g, 20 mmol)、2-溴吡啶(2.93 mL, 30 mmol)、30 mL 2 M Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(60 mmol)在存於500 mL 3-頸圓底燒瓶中之200 mL 甲苯/乙醇(1:1)中製成漿液並在氮氣鼓泡下脫氣30分鐘。向漿液中添加Pd(dppf)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>(160 mg, 0.2 mmol)並再次繼續脫氣10分鐘。然後將反應內容物回流過夜。將反應內容物冷卻至室溫並經由小矽藻土墊過濾。然後將褐色兩相溶液在鹽水與乙酸乙酯之間分配。藉由無水Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>乾燥有機層且在真空下去除多餘溶劑。將來自上一步驟之殘餘物固體上樣於矽膠管柱中並使用5-8%乙酸乙酯/己烷洗脫以得到4.3 g最終產物。



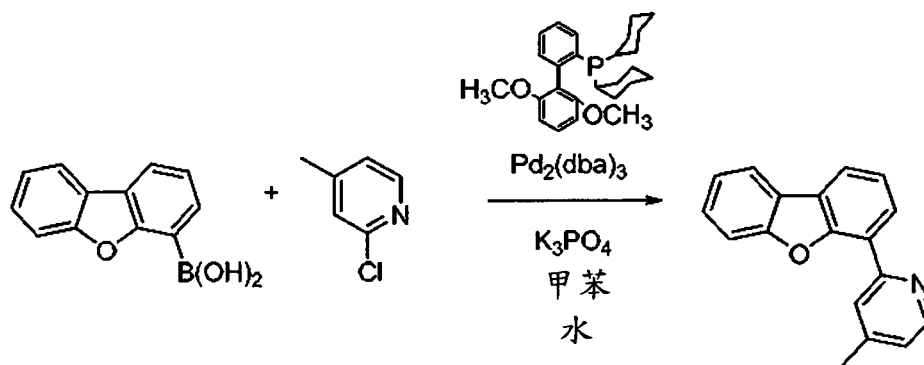
化合物 2 之合成。將三氟甲磺酸銦前體 (2.8 g, 3.9 mmol)、2-(二苯并呋喃-3-基)吡啶 (4 g, 16.3 mmol) 在 100 mL 乙醇中回流過夜。過濾出亮黃色沉澱物，乾燥並固體上樣於矽膠管柱中。使用 3:2 DCM/己烷洗脫，然後分離出 210 mg 最終化合物。

### 實例 3. 化合物 4 之合成

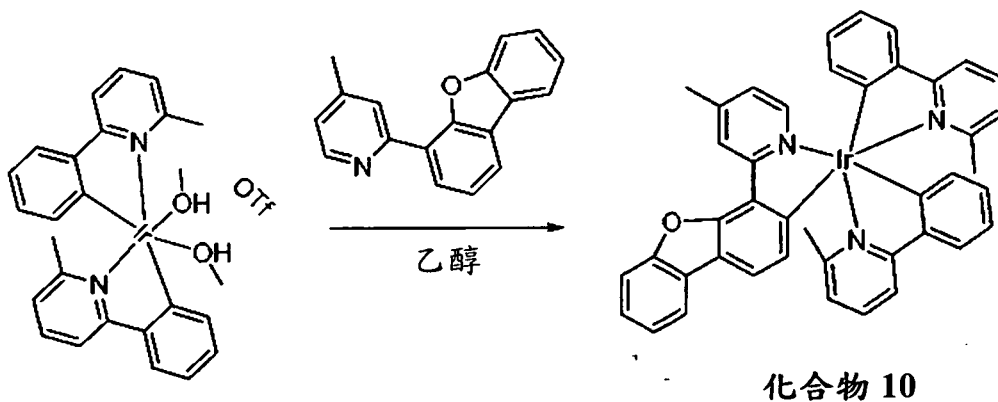


化合物 4 之合成。在 50 mL 乙醇中混合三氟甲磺酸銦前體 (1.6 g, 2.2 mmol) 及 2-(二苯并 [b,d] 呋喃-4-基) 吡啶 (1.6 g, 6.5 mmol)。將混合物在回流及氮氣下加熱 24 h。在回流期間形成沉澱物。經由矽藻土床過濾反應混合物。使用甲醇及己烷洗滌產物。將固體溶於二氯甲烷中且藉由管柱使用 1:1 之二氯甲烷及己烷進行純化。在管柱純化後獲得 1.4 g 純產物。

## 實例 4. 化合物 10 之合成



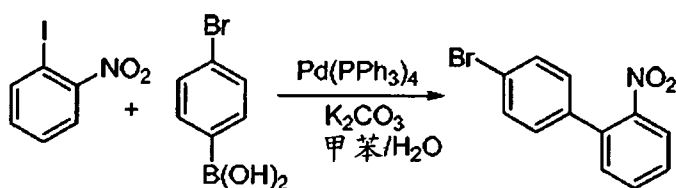
4-甲基-2-(二苯并[b,d]呋喃-4-基)吡啶之合成。在 100 mL 甲苯及 10 mL 水中混合 4-二苯并呋喃硼酸 (5.0 g, 23.6 mmol)、2-氯-4-甲基吡啶 (2.6 g, 20 mmol)、二環己基(2',6'-二甲氧基聯苯-2-基)膦(S-Phos)(0.36 g, 0.8 mmol)、及磷酸鉀(11.4 g, 50 mmol)。將氮氣直接鼓泡至混合物中持續 30 分鐘。接下來，添加  $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$  (0.18 g, 0.2 mmol) 且在氮氣下將混合物加熱至回流保持 8 h。冷卻混合物且分離有機層。使用鹽水洗滌有機層，藉由硫酸鎂乾燥，過濾，且蒸發以得到殘餘物。藉由管柱層析使用二氯甲烷洗脫來純化殘餘物。在純化後獲得 4.7 g 期望產物。



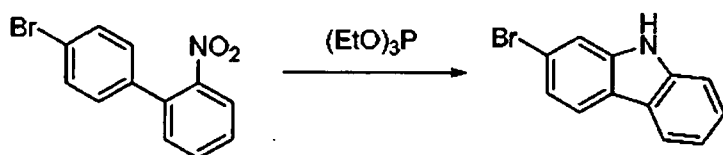
化合物 10 之合成。在 60 mL 乙醇中混合三氟甲磺酸銦前體 (2.0 g, 2.7 mmol) 及 4-甲基-2-(二苯并[b,d]呋喃-4-基)吡

啉 (2.1 g, 8.1 mmol)。將混合物在回流及氮氣下加熱 24 h。在回流期間形成沉澱物。經由矽藻土床過濾反應混合物。使用甲醇及己烷洗滌產物。將固體溶於二氯甲烷中且藉由管柱使用 1:1 之二氯甲烷及己烷進行純化。在管柱純化後獲得 1.6 g 純產物。

#### 實例 5. 化合物 29 之合成

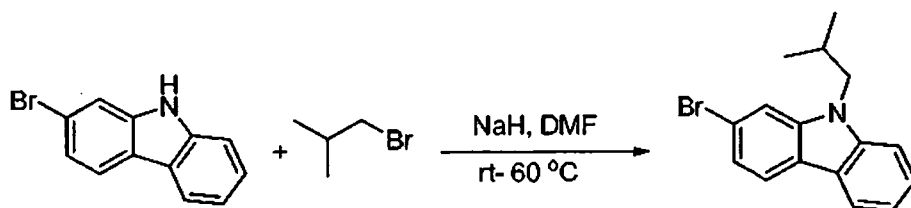


4'-溴-2-硝基聯苯之合成。將鄰碘硝基苯 (9.42 g, 37.84 mmol)、4-溴苯硼酸 (7.6 g, 37.84 mmol)、碳酸鉀 (21 g, 151.36 mmol) 添加至 190 mL DME/水 (3:2) 溶液中並脫氣 30 分鐘。在氮氣下向漿液中添加 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (437 mg, 0.38 mmol) 且將漿液再次脫氣 5 分鐘。在氮氣下將反應液回流 6 h。經由矽藻土墊過濾燒瓶內容物並在乙酸乙酯與鹽水之間分配。藉由無水 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 乾燥有機相並在真空下蒸發。藉由矽膠使用 5% 乙酸乙酯/己烷對粗製黃色油狀物進行快速層析。分離最終化合物，其為無色油狀物 (9.8 g, 35.4 mmol)。

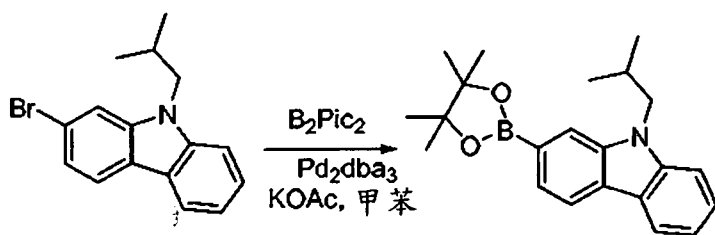


2-溴-9H-吡唑之合成。使用 30 mL 亞磷酸三乙酯將 4'-溴-2-硝基聯苯 (9.8 g, 35.4 mmol) 回流過夜。將溶液冷卻至室

溫後，向其中緩緩添加 40 mL 6(N) HCl 並加熱至 80°C 且保持 3 h。用濃 NaOH 不完全中和酸性溶液，且使用固體 Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 來中和剩餘酸性溶液。使用乙酸乙酯 (500 mL) 萃取渾濁溶液三次。在真空下蒸發合併之有機層且在矽膠 (15%-30% 乙酸乙酯/己烷) 上對粗製物進行快速層析。分離得到 4.1 g 最終化合物，其為灰白色固體。

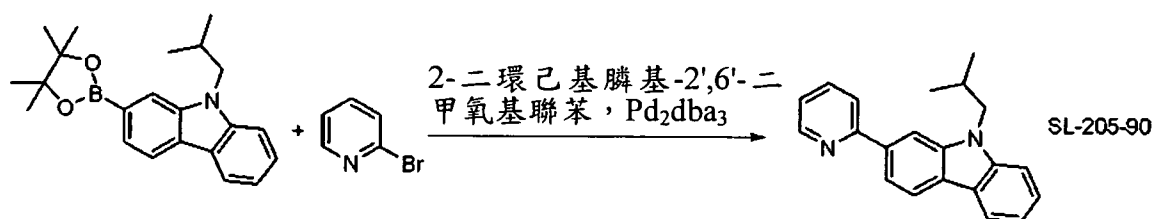


2-溴-9-異丁基-9H-吡啶之合成。將 2-溴-9H-吡啶 (4.1 g, 16.74 mmol) 溶於 DMF 中。向經攪拌溶液中分 3 批緩緩添加 NaH (1.8 g, 75.5 mmol)。向經攪拌漿液中添加異丁基溴 (4.8 mL, 43.2 mmol) 且在靜置 20 分鐘後升溫至 60°C 保持 4 h。將反應混合物冷卻至室溫且藉由逐滴添加飽和 NH<sub>4</sub>Cl 溶液來小心地終止反應。然後將內容物在鹽水與乙酸乙酯之間分配。藉由無水 Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 乾燥有機層並在真空下蒸發。藉由矽膠使用 10% 乙酸乙酯/己烷對粗製產物進行快速層析。分離得到最終之白色固體產物 (4.45 g, 14.8 mmol)。



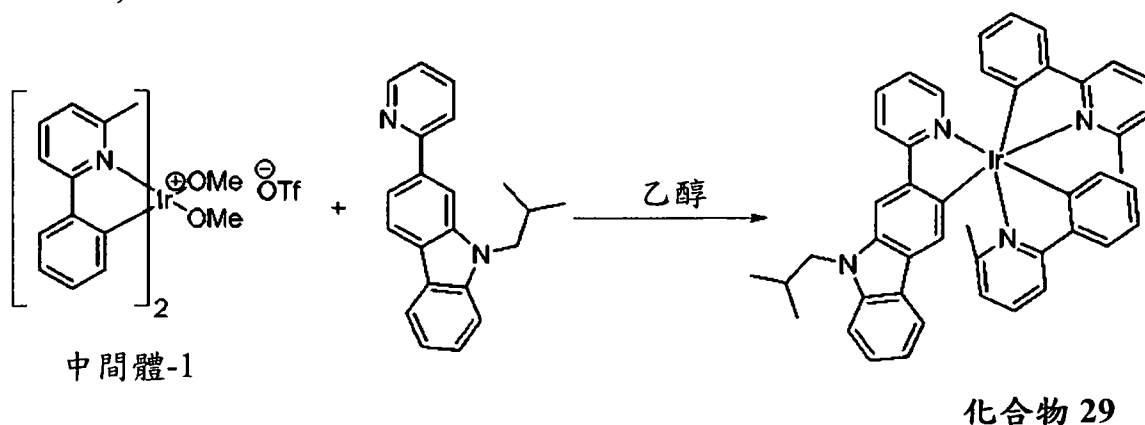
9-異丁基-2-頻哪醇硼-9H-吡啶之合成。將 2-溴-9-異丁基-9H-吡啶 (4.45 g, 14.78 mmol)、雙聯頻哪醇硼酸酯 (4.7

g, 18.5 mmol)、乙酸鉀(5.8 g, 59.1 mmol)置於75 mL無水甲苯中並脫氣30分鐘。在氮氣下向漿液中添加Pd<sub>2</sub>dba<sub>3</sub>(362 mg, 0.443 mmol)且將漿液再次脫氣5分鐘。過夜回流後,冷卻反應內容物並經由矽藻土墊過濾。將甲苯溶液在水與乙酸乙酯之間分配。藉由無水Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>乾燥有機層並在真空下蒸發溶劑。在矽膠中使用10%乙酸乙酯/己烷對固體粗製物進行快速層析。在133°C下對分離之固體實施Kugelrohr蒸餾以去除痕量之雙聯頻哪醇硼酸酯。分離得到最終之灰白色固體產物(4.77 g, 13.7 mmol)。



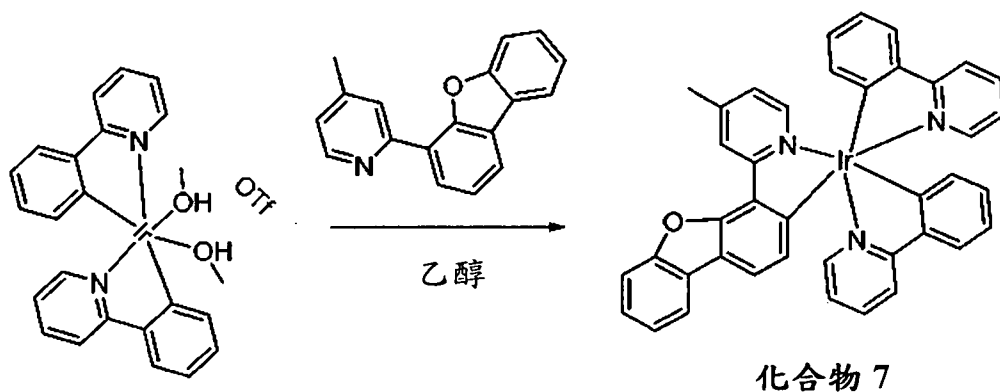
9-異丁基-2-(吡啶-2-基)-9H-喹啉之合成。將9-異丁基-2-頻哪醇硼-9H-喹啉(1.45 g, 4 mmol)、2-溴吡啶(760 mg, 4.8 mmol)、2-二環己基膦基-2',6'-二甲氧基聯苯(67 mg, 0.16 mmol)、K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O(3.68 g, 16 mmol)添加至40 mL甲苯與水的9:1混合物中。將內容物脫氣30分鐘,隨後添加Pd<sub>2</sub>dba<sub>3</sub>(37 mg, 0.04 mmol)並再次脫氣5分鐘。在過夜回流後,將反應內容物冷卻至室溫並經由矽藻土墊過濾。將濾液在水與乙酸乙酯之間分配。分離有機層,藉由無水Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>乾燥並在真空下蒸發。然後藉由矽膠使用10%-30%乙酸乙酯/己烷對粗製物進行快速層析以去除初去硼化產物。分離得到最終之白色固體化合物(620 mg, 2.1

mmol)。



化合物 29 之合成。將來自前一步驟之咪唑配體 (620 mg, 2.1 mmol) 溶於乙醇中且在氮氣下向其中添加中間體-1。然後將溶液回流過夜。過濾出深橙色沉澱物並藉由矽膠使用 50% DCM/己烷實施快速層析。然後將分離產物昇華以得到 310 mg 99.7% 純產物。

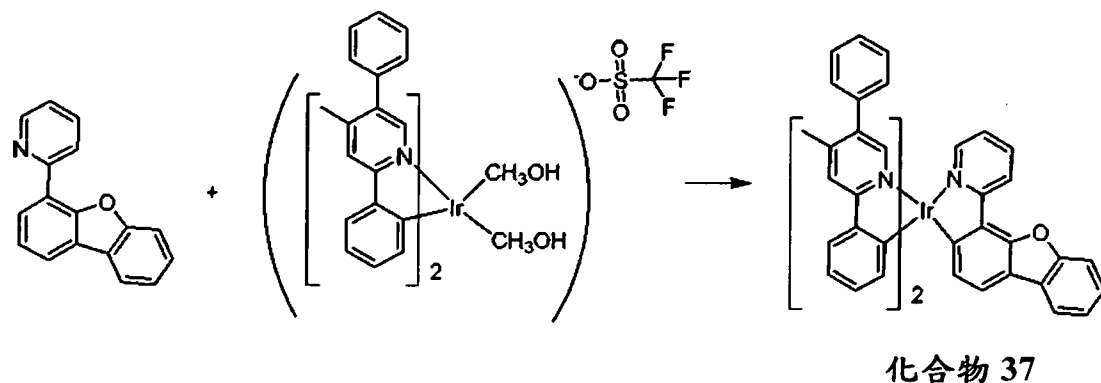
#### 實例 6. 化合物 7 之合成



化合物 7 之合成。在 60 mL 乙醇中混合三氟甲磺酸銦前體 (2.0 g, 2.7 mmol) 及 4-甲基-2-(2-(二苯并[b,d]呋喃-4-基)吡啶) (2.1 g, 8.1 mmol)。將混合物在回流及氮氣下加熱 24 h。在回流期間形成沉澱物。經由矽藻土床過濾反應混合物。使用甲醇及己烷洗滌產物。將固體溶於二氯甲烷中且藉由管柱使用 1:1 之二氯甲烷及己烷進行純化。在管柱純化後

獲得 1.0 g 純產物。

### 實例 7. 化合物 37 之合成



化合物 37 之合成。將 2-(二苯并 [b,d] 咪喃 -4-基)吡啶 (5.0 g, 20.39 mmol) 及三氟甲磺酸銦 (5.0 g, 5.59 mmol) 置於具有 100 mL 乙醇及甲醇之 1:1 溶液的 250 mL 圓底燒瓶中。將反應混合物回流 24 h。獲得亮黃色沉澱物。將反應液冷卻至室溫並使用乙醇稀釋。添加矽藻土且經由矽膠塞過濾反應混合物。使用乙醇洗滌矽膠塞 (2×50 mL) 隨後使用己烷洗滌 (2×50 mL)。使用二氯甲烷將殘留於矽膠塞上之產物洗脫至潔淨收集瓶中。在真空下去除二氯甲烷且用二氯甲烷與異丙醇之組合使產物重結晶。過濾黃色固體，依次使用甲醇及己烷洗滌以得到亮黃色結晶產物。藉由依次用甲苯及乙腈重結晶來進一步純化產物以得到 1.94 g (產率為 37.5%) 產物 (藉由 HPLC 獲知，純度為 99.5%)。

### 器件實例

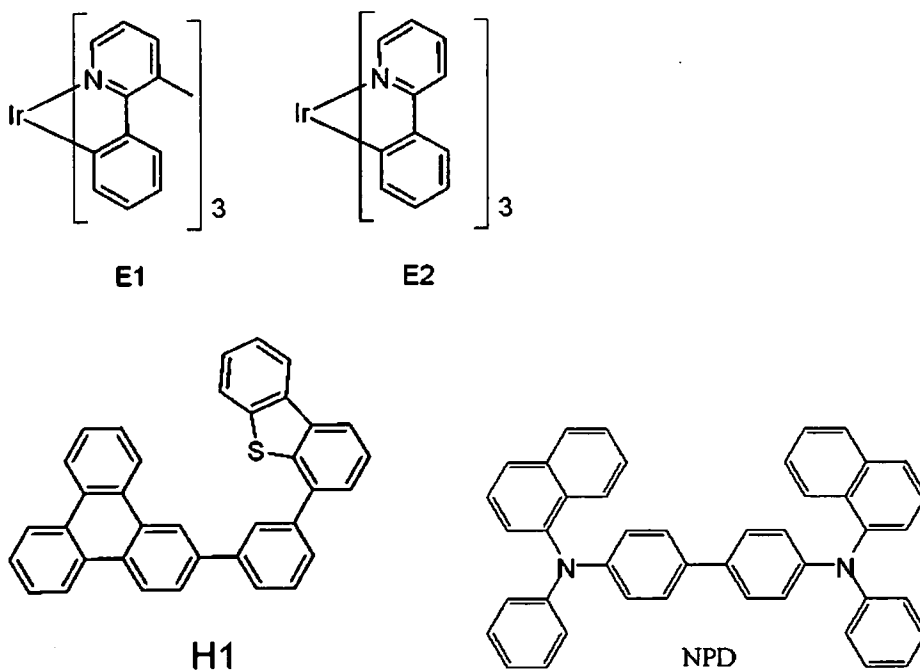
所有實例性器件皆由高真空 ( $<10^{-7}$  托) 熱蒸發製得。陽極電極係 800 Å 氧化銦錫 (ITO)。陰極係由 10 Å LiF 以及 1000 Å Al 組成。製造後立即在氮氣手套箱 ( $<1$  ppm  $H_2O$  及

O<sub>2</sub>)中使用經環氧樹脂密封之玻璃蓋封裝所有器件，且在包裝內納入水分吸收劑。

提供使用本發明化合物(化合物1、2、4、7、10或29)作為發射摻雜物且使用H1作為主體材料之特定器件。器件實例1-11之有機堆疊依次由以下組成：ITO表面、作為電洞注入層(HIL)之100Å E1、作為電洞傳送層(HTL)之300Å 4,4'-雙-[N-(1-萘基)-N-苯基胺基]聯苯( $\alpha$ -NPD)、作為發射層(EML)之摻雜有7%或10%本發明化合物(即Ir磷光化合物)之300Å H1、作為阻擋層(BL)中50Å H1及作為ETL1之400Å Alq<sub>3</sub>(參-8-羥基喹啉鋁)。

以與器件實例類似之方法來製造對比實例1及2，只是分別使用E1及E2作為發射摻雜物。

本文所用之下列化合物具有下列結構：



器件結構及器件數據匯總於下表3及表4中。表3展示器

件結構，且表4展示器件之相應量測結果。Ex.係實例之縮寫。

表3

實例	HIL	HTL	主體材料	A %	BL	ETL
實例1	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物1 7%	H1 50Å	Alq 400Å
實例2	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物1 10%	H1 50Å	Alq 400Å
實例3	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物2 7%	H1 50Å	Alq 400Å
實例4	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物2 10%	H1 50Å	Alq 400Å
實例5	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物4 7%	H1 50Å	Alq 400Å
實例6	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物4 10%	H1 50Å	Alq 400Å
實例7	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物7 7%	H1 50Å	Alq 400Å
實例8	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物7 10%	H1 50Å	Alq 400Å
實例9	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物10 7%	H1 50Å	Alq 400Å
實例10	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物10 10%	H1 50Å	Alq 400Å
實例11	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物29 10%	H1 50Å	Alq 400Å
對比實例1	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物E1 7%	H1 50Å	Alq 400Å
對比實例2	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物E2 7%	H1 50Å	Alq 400Å

表 4

實例	$\lambda$ max, nm	CIE		在1000尼特下				在40mA/cm <sup>2</sup> 下	
		X	Y	V (V)	LE (cd/ A)	EQE (%)	PE (lm/W)	Lo, 尼特	RT <sub>80%</sub> , h
實例1	532	0.354	0.616	6.1	60.1	15.9	31	17,382	180
實例2	530	0.367	0.607	6.5	43.2	11.5	21	13,559	170
實例3	527	0.355	0.612	6.2	51.7	13.9	26.1	14,565	210
實例4	528	0.361	0.609	6	44.4	11.9	23.3	13,618	360
實例5	528	0.348	0.620	5.7	68.7	18.1	37.7	19,338	98
實例6	528	0.356	0.616	5.2	70.1	18.5	42.4	21,199	96
實例7	522	0.326	0.630	5.6	68.2	18.4	38.6	18,431	120
實例8	524	0.336	0.623	5.2	58.2	15.7	35.0	17,606	200
實例9	522	0.320	0.634	5.4	70.7	19	41.4	19,996	75
實例10	522	0.327	0.631	5	71.1	19.1	44.9	21,703	58
實例11	576	0.538	0.459	5.6	50.6	19	28.1	14,228	800
對比實例1	527	0.344	0.614	6.4	56.7	15.6	27.6	15,436	155
對比實例2	519	0.321	0.621	6	45.1	12.6	23.6	13,835	196

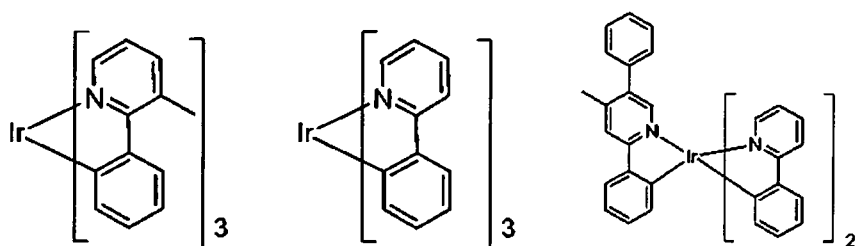
自器件實例1-11可以發現，使用本發明化合物作為綠色磷光器件中之發射摻雜物可提供高器件效率及較長壽命。特定而言，含有化合物1、2、7及29之器件的壽命RT<sub>80%</sub>(定義為在室溫及40 mA/cm<sup>2</sup>之恆定電流密度下自初始亮度L<sub>0</sub>衰減至其值之80%的時間)明顯高於針對使用工業標準發射摻雜物Ir(ppy)<sub>3</sub>之對比實例2所量測者。此外，器件實例1中之化合物1達成高器件效率(亦即，在1000 cd/m<sup>2</sup>下LE為60 cd/A)，此表明包括單取代吡啶基配體(例如，吡



啉基二苯并吡喃)之本發明化合物具有足以有效發射綠色電致磷光之三重態能量。

其他器件結構及器件數據匯總於下文中。器件結構及器件數據匯總於下表5及表6中。表5展示器件結構，且表6展示器件之相應量測結果。Ex.係實例之縮寫。

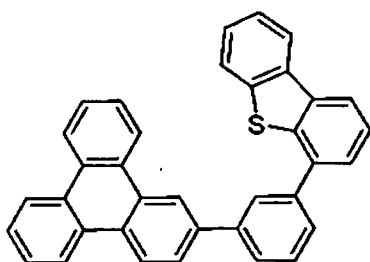
本文所用之下列化合物具有下列結構：



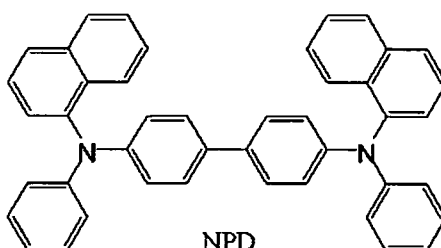
E1

E2

E3



H1



NPD

H2係以NS60之名購自Nippon Steel公司(NSCC), Tokyo, Japan之化合物。

表 5

實例	HIL	HTL	主體材料	A %	BL	ETL
實例12	E1 100Å	NPD 300Å	H2	化合物1 10%	H2 100Å	Alq 400Å
實例13	E1 100Å	NPD 300Å	H2	化合物2 7%	H2 100Å	Alq 400Å
實例14	E1 100Å	NPD 300Å	H2	化合物2 10%	H2 100Å	Alq 400Å
實例15	E1 100Å	NPD 300Å	H2	化合物4 10%	H2 100Å	Alq 400Å
實例16	E1 100Å	NPD 300Å	H2	化合物7 10%	H2 100Å	Alq 400Å
實例17	E1 100Å	NPD 300Å	H2	化合物10 10%	H2 100Å	Alq 400Å
實例18	E1 100Å	NPD 300Å	H2	化合物29 10%	H2 100Å	Alq 400Å
實例19	E3 100Å	NPD 300Å	H1	化合物37 7%	H1 100Å	Alq 400Å
實例20	E3 100Å	NPD 300Å	H1	化合物37 10%	H1 100Å	Alq 400Å
實例21	E3 100Å	NPD 300Å	H2	化合物37 10%	H2 100Å	Alq 400Å



表 6

實例	$\lambda$ max, nm	CIE		在1000尼特下				在40mA/cm <sup>2</sup> 下	
		X	Y	V (V)	LE (cd/ A)	EQE (%)	PE (lm/W)	Lo, 尼特	RT <sub>80%</sub> , h
實例12	530	0.361	0.612	4.1	78.6	20.9	60.0	24,069	220
實例13	526	0.354	0.615	4.7	48.9	13.1	33.0	14,002	210
實例14	527	0.349	0.620	4.9	49.8	13.3	31.6	14,510	190
實例15	528	0.363	0.612	5.1	67.8	18	42.1	21,146	116
實例16	522	0.334	0.626	4.8	65.9	17.8	43.1	20,136	170
實例17	522	0.333	0.627	5.7	62.1	16.7	34.0	18,581	98
實例18	576	0.542	0.455	6.4	36.2	13.9	17.9	10,835	740
實例19	532	0.386	0.593	5.6	67.8	18.5	37.9	21,426	98
實例20	532	0.386	0.593	5.7	67.7	18.5	37.5	21,050	103
實例21	532	0.380	0.598	6.5	54.8	14.8	26.7	16,798	315

自器件實例 12-21 可以發現，使用本發明化合物作為綠色磷光器件中之發射摻雜物可提供具有高效率及長壽命之器件。特定而言，含有化合物 29 及 37 之器件的壽命 RT<sub>80%</sub> (定義為在室溫及 40 mA/cm<sup>2</sup> 之恆定電流密度下自初始亮度 L<sub>0</sub> 衰減至其值之 80% 的時間) 明顯高於針對對比實例所量測之彼等結果。特定而言，具有化合物 29 之器件實例 18 及具有化合物 37 之器件實例 21 的 RT<sub>80%</sub> 量測值分別為 740 h 及 315 h。實例 12 中所示之在 H2 中具有化合物 1 之器件具有格外高的效率 78.6 cd/A 及長壽命。令人意外的是，化合物 1 在 H2 中之效果極佳。此外，器件實例 12、15、17、19、及 20 中之化合物 1、4、7、29、及 37 分別達成高器件

效率(亦即，LE在1000 cd/m<sup>2</sup>下大於60 cd/A)，此表明包括單取代吡啶基配體(例如，吡啶基二苯并呋喃)之本發明化合物具有足以有效發射綠色電致磷光之三重態能量。

上述數據表明，本文所提供之異配位基銻錯合物可係用於磷光OLED之優異發射摻雜物，其可使得器件具有改進之效率及較長壽命且亦可具有改進之製造。

應理解，本文所述之各實施例僅用於舉例說明，且其並不意欲限制本發明範圍。舉例而言，許多本文所述之材料及結構可由其他材料及結構代替，此並不背離本發明精神。因此，所主張之本發明可包含本文所述之特定實例及較佳實施例之變型，此應為熟習此項技術者所明瞭。應理解，關於本發明為何可行之各種理論並不意欲具有限制性。

### 【圖式簡單說明】

圖1展示有機發光器件。

圖2展示不具有單獨電子傳送層之倒置有機發光器件。

圖3展示異配位基銻錯合物。

### 【主要元件符號說明】

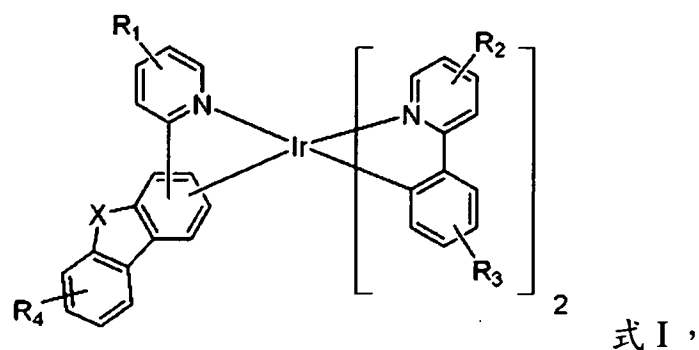
100	有機發光器件
110	基板
115	陽極
120	電洞注入層
125	電洞傳送層
130	電子阻擋層



135	發射層
140	電洞阻擋層
145	電子傳送層
150	電子注入層
155	保護層
160	陰極
162	第一導電層
164	第二導電層
200	倒置 OLED
210	基板
215	陰極
220	發射層
225	電洞傳送層
230	陽極

## 七、申請專利範圍：

1. 一種化合物，其包括具有下式之異配位基銥錯合物，



其中 X 係選自由 NR、O、S、BR、及 Se 組成之群；

其中 R 係選自由氫及烷基；

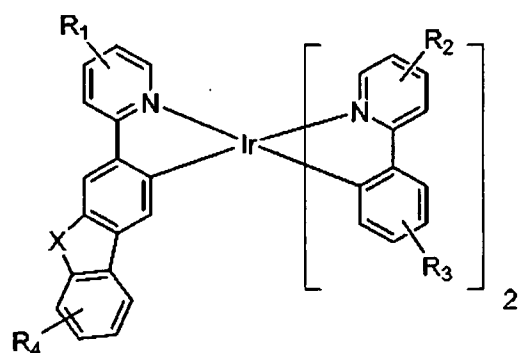
其中 R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub> 及 R<sub>4</sub> 可代表單、二、三或四取代；且

其中 R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub> 及 R<sub>4</sub> 之每一者係獨立地選自由氫、烷基及芳基組成之群。

2. 如請求項 1 之化合物，其中 R<sub>1</sub> 及 R<sub>4</sub> 係獨立地選自由氫及具有 4 個或更少碳原子之烷基組成之群。
3. 如請求項 1 之化合物，其中 R<sub>1</sub> 及 R<sub>4</sub> 係獨立地選自由氫及甲基組成之群。
4. 如請求項 1 之化合物，其中 R<sub>2</sub> 及 R<sub>3</sub> 係獨立地選自由氫、具有 4 個或更少碳原子之烷基及在環中具有 6 個或更少原子之芳基組成之群。
5. 如請求項 1 之化合物，其中 R<sub>2</sub> 及 R<sub>3</sub> 係獨立地選自由氫、甲基及苯基組成之群。
6. 如請求項 1 之化合物，其中 R<sub>2</sub> 與 R<sub>3</sub> 係氫。
7. 如請求項 1 之化合物，其中 R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、及 R<sub>4</sub> 係獨立地選自由氫、具有 4 個或更少碳原子之烷基及在環中具有 6 個或 4 個。

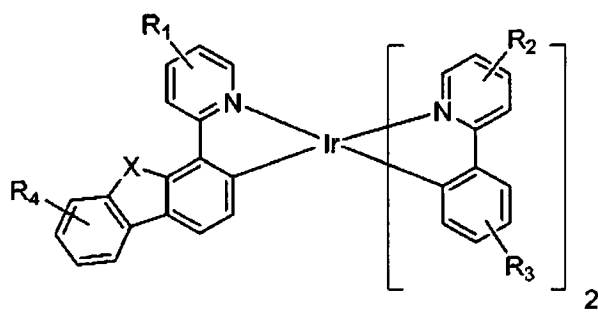
個或更少原子之芳基組成之群。

8. 如請求項1之化合物，其中R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、及R<sub>4</sub>係獨立地選自由氫、甲基及苯基組成之群。
9. 如請求項1之化合物，其中R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub>、及R<sub>4</sub>係氫。
10. 如請求項1之化合物，其中R具有4個或更少碳原子。
11. 如請求項1之化合物，其中該化合物具有下式：



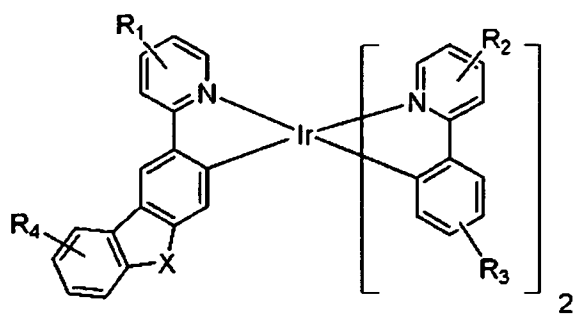
式 III。

12. 如請求項1之化合物，其中該化合物具有下式：



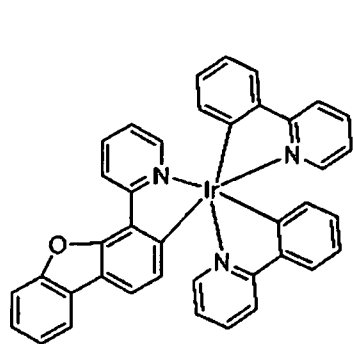
式 IV。

13. 如請求項1之化合物，其中該化合物具有下式：

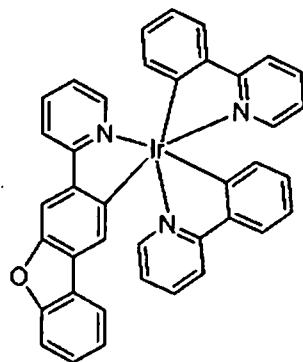


式 V。

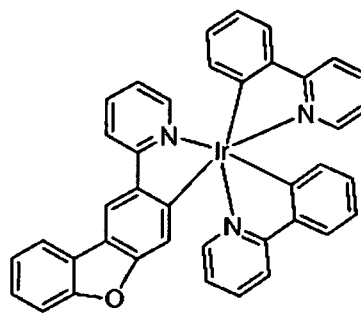
14. 如請求項1之化合物，其中該化合物係選自由下列組成之群：



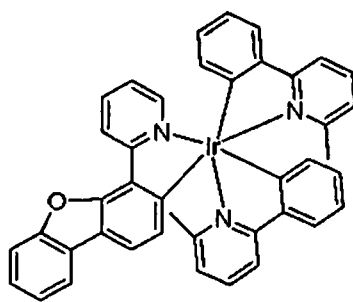
化合物 1



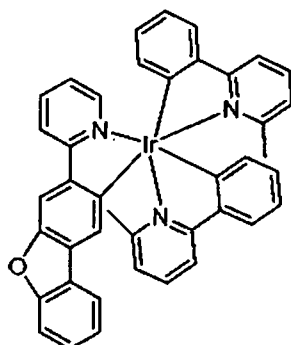
化合物 2



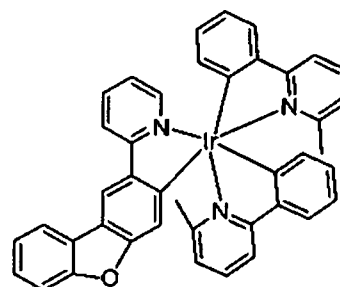
化合物 3



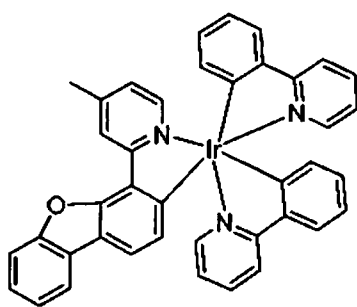
化合物 4



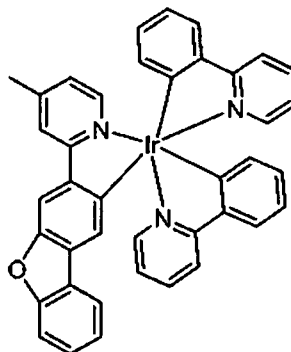
化合物 5



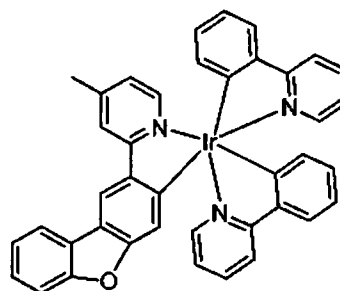
化合物 6



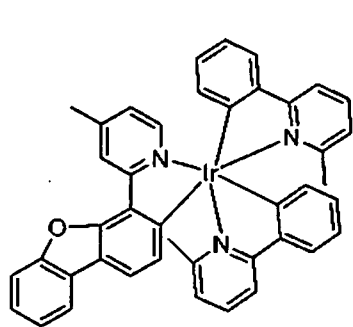
化合物 7



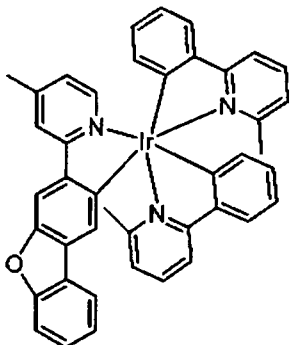
化合物 8



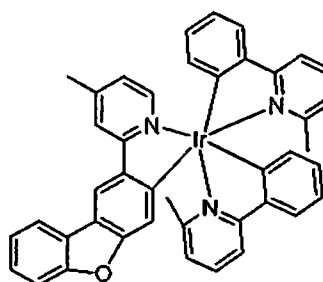
化合物 9



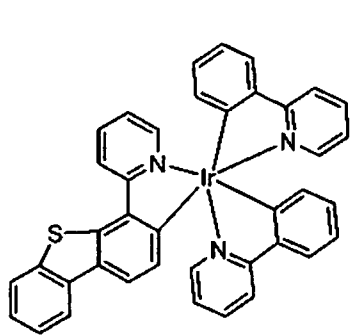
化合物 10



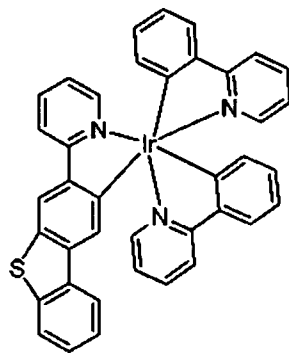
化合物 11



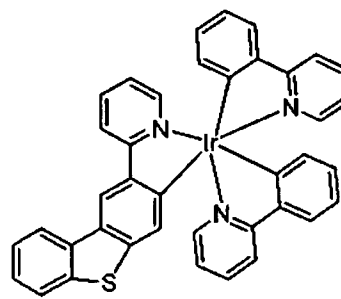
化合物 12



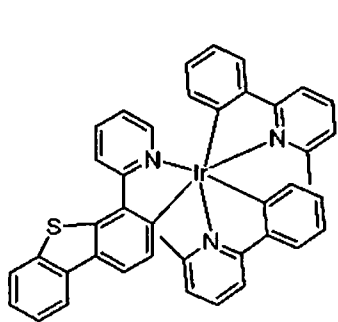
化合物 13



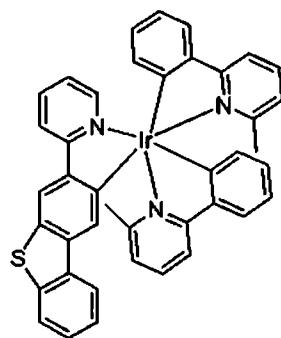
化合物 14



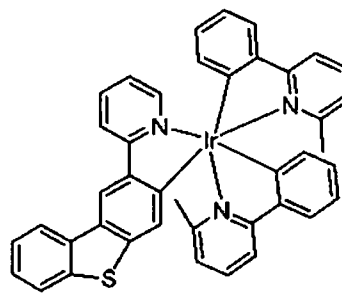
化合物 15



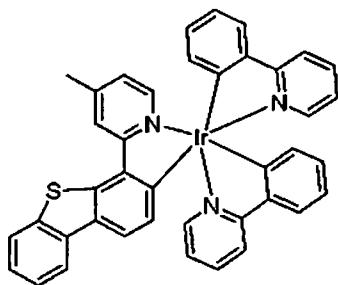
化合物 16



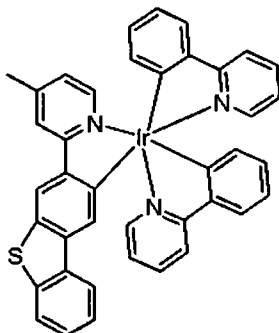
化合物 17



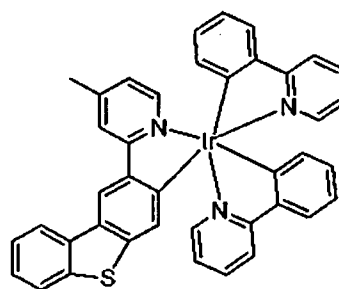
化合物 18



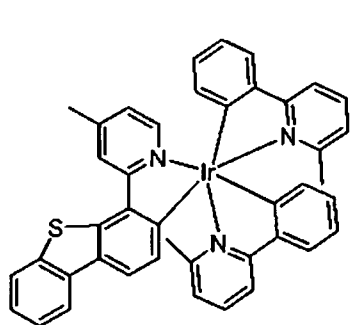
化合物 19



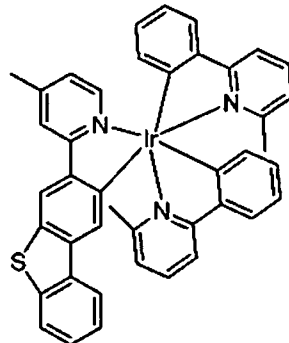
化合物 20



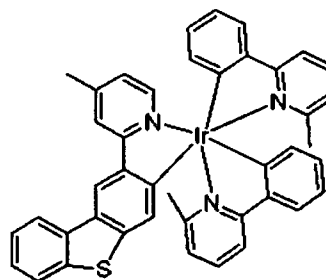
化合物 21



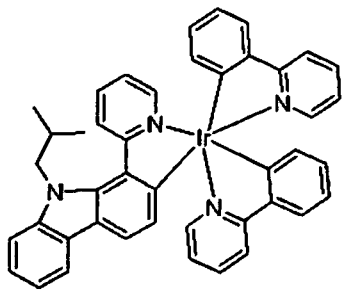
化合物 22



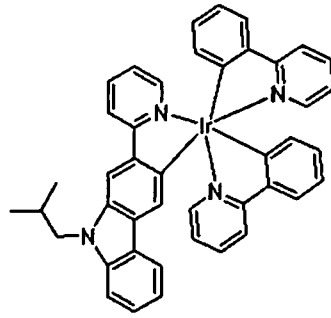
化合物 23



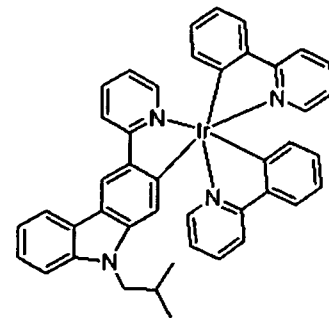
化合物 24



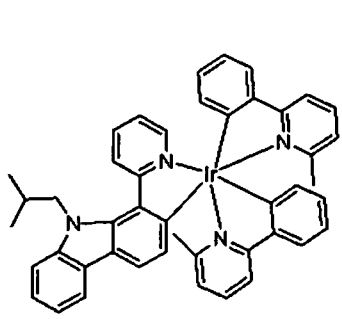
化合物 25



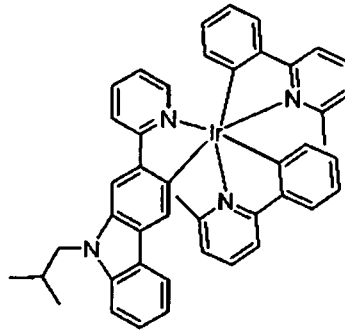
化合物 26



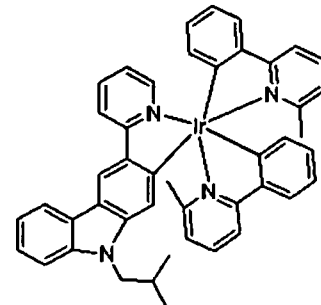
化合物 27



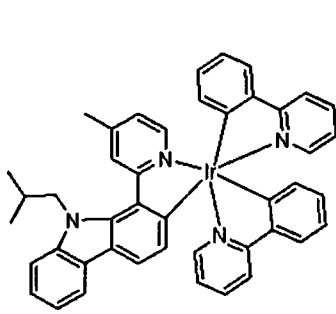
化合物 28



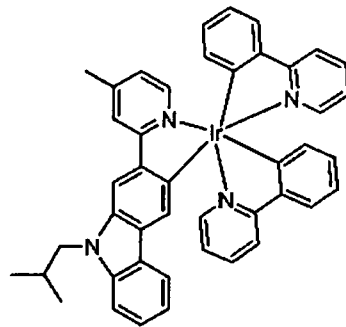
化合物 29



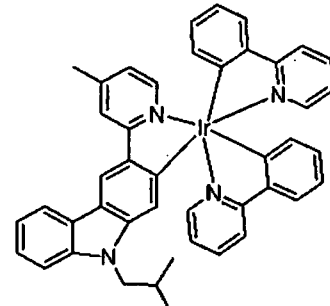
化合物 30



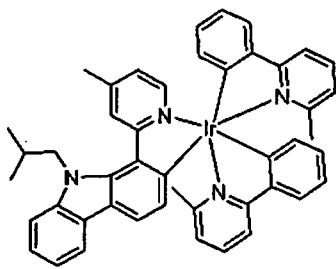
化合物 31



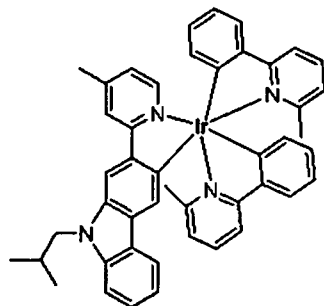
化合物 32



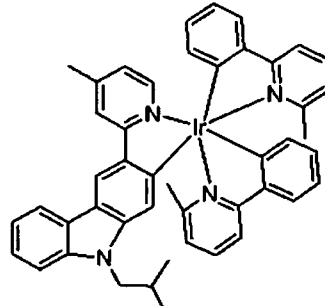
化合物 33



化合物 34

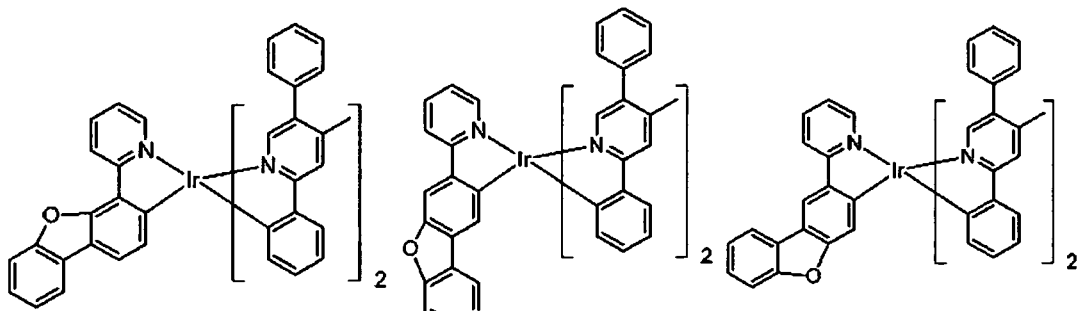


化合物 35



化合物 36

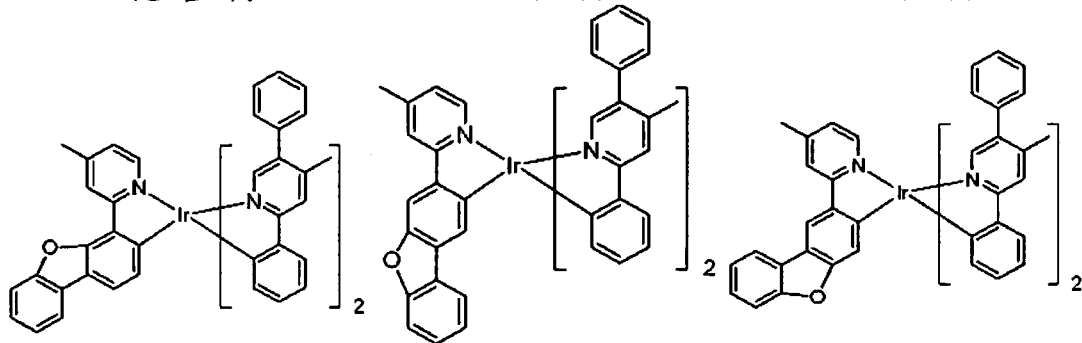
15. 如請求項1之化合物，其中該化合物係選自由下列組成之群：



化合物 37

化合物 38

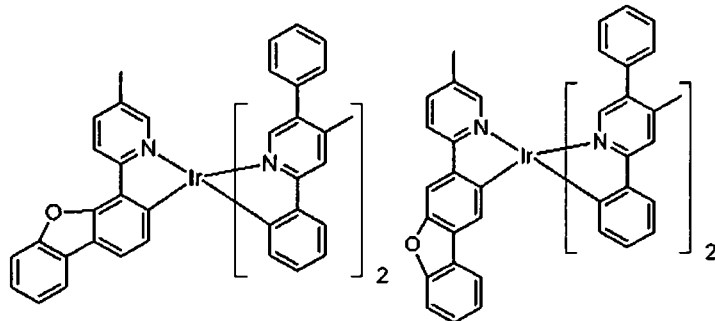
化合物 39



化合物 40

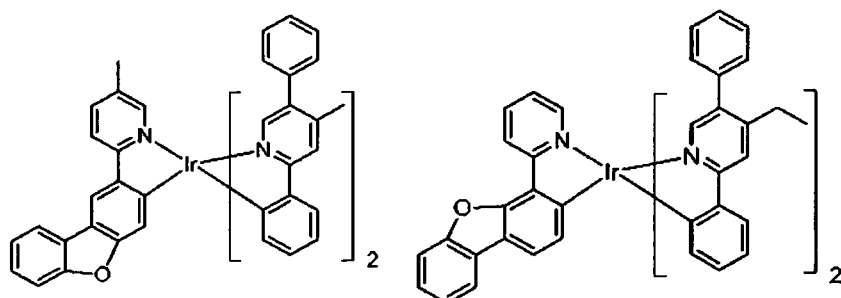
化合物 41

化合物 42



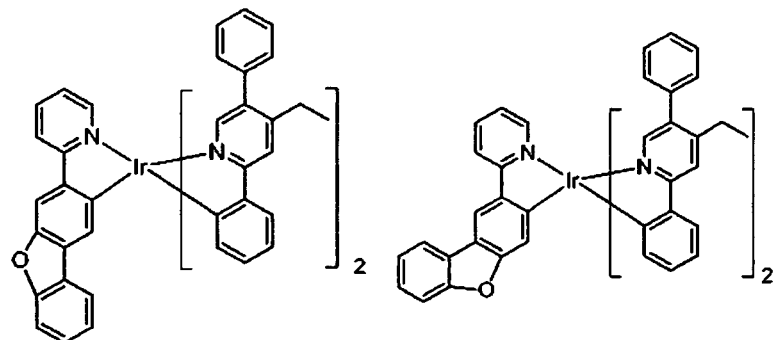
化合物 43

化合物 44



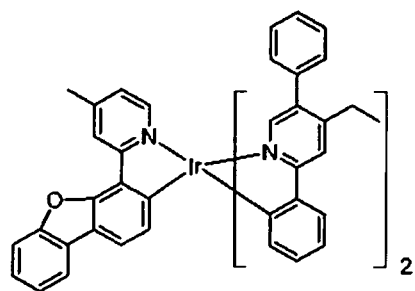
化合物 45

化合物 46

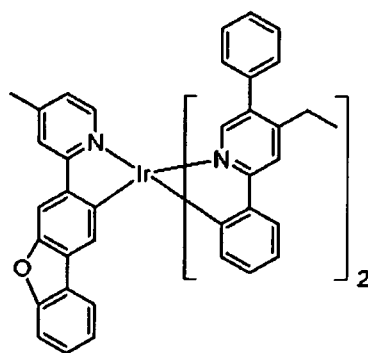


化合物 47

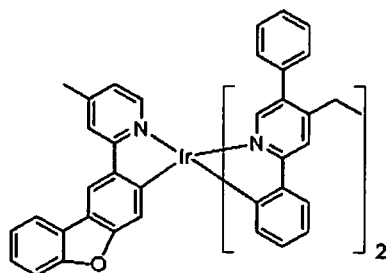
化合物 48



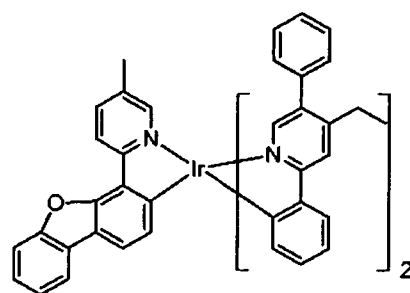
化合物 49



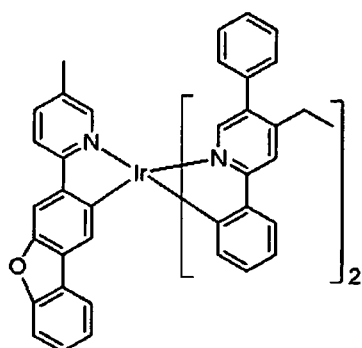
化合物 50



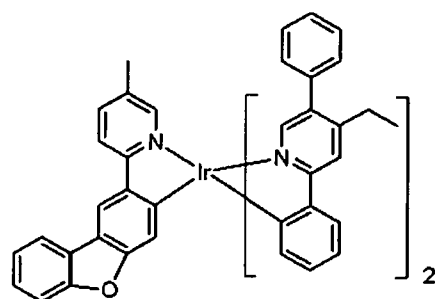
化合物 51



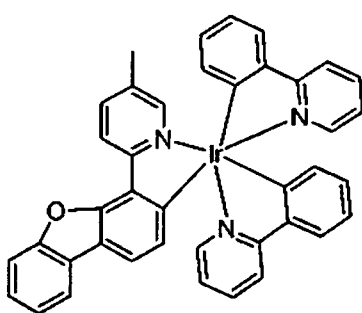
化合物 52



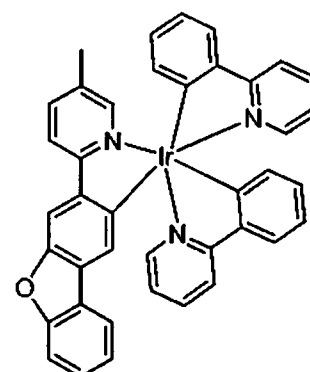
化合物 53



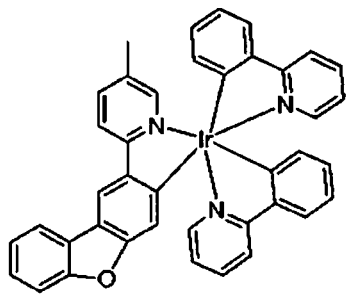
化合物 54



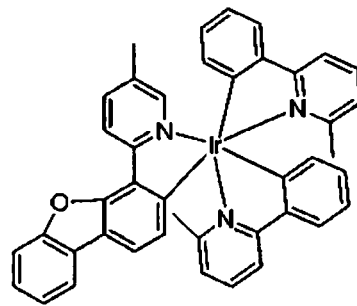
化合物 55



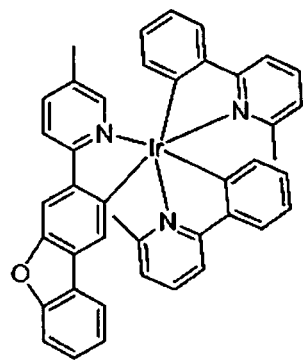
化合物 56



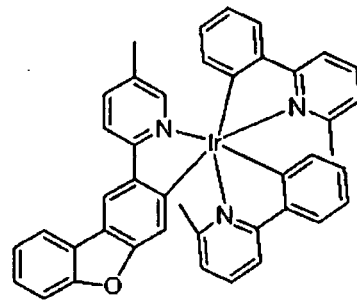
化合物 57



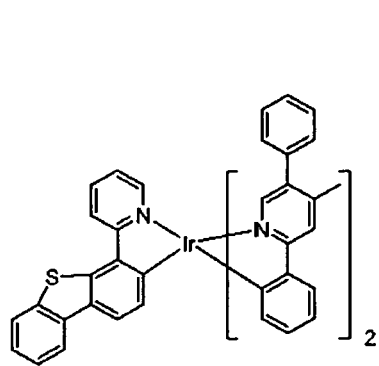
化合物 58



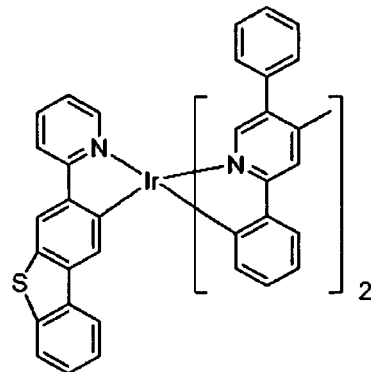
化合物 59



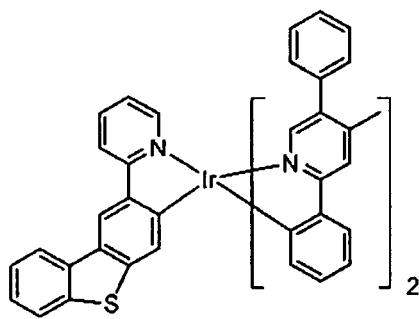
化合物 60



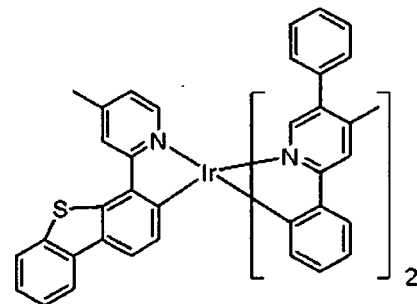
化合物 61



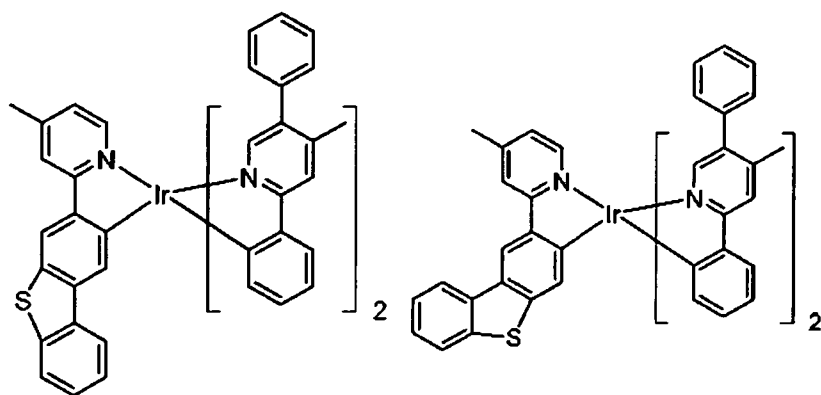
化合物 62



化合物 63

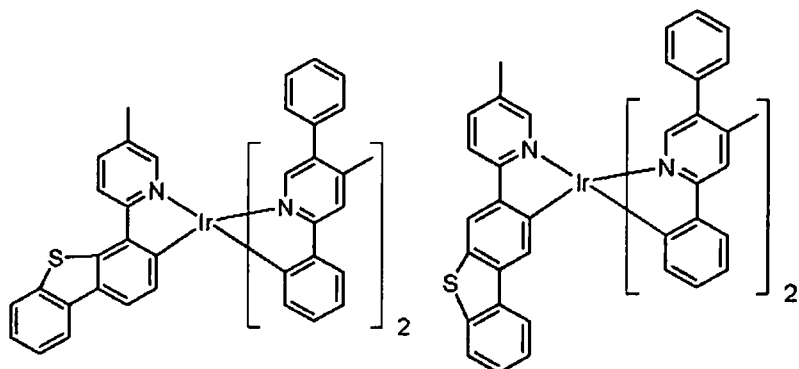


化合物 64



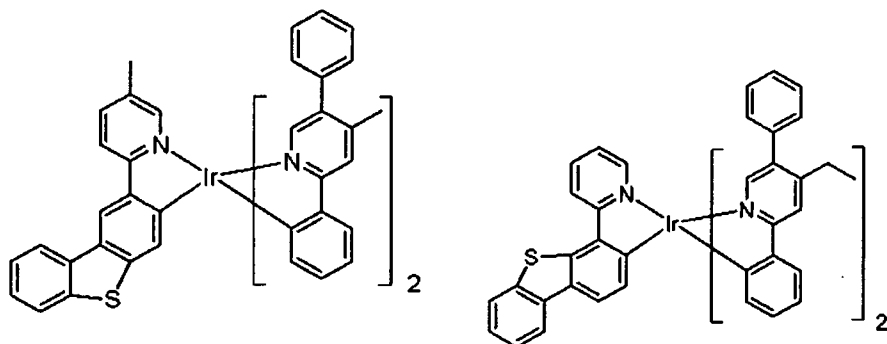
化合物 65

化合物 66



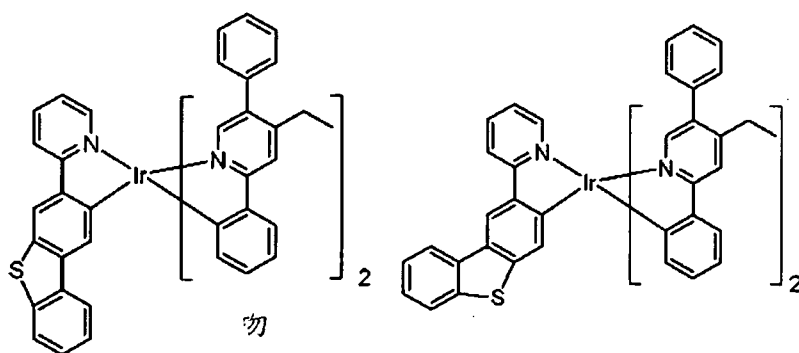
化合物 67

化合物 68



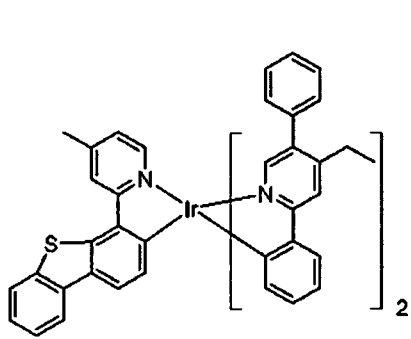
化合物 69

化合物 70

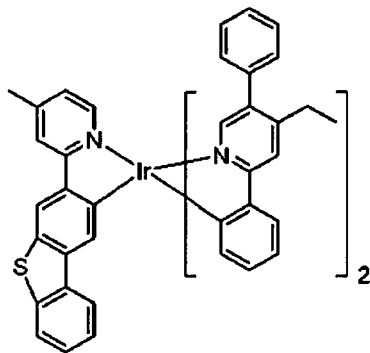


化合物 71

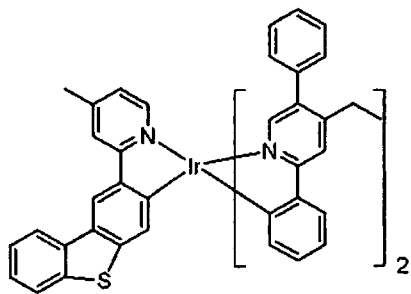
化合物 72



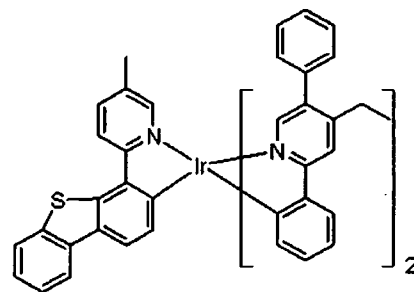
化合物 73



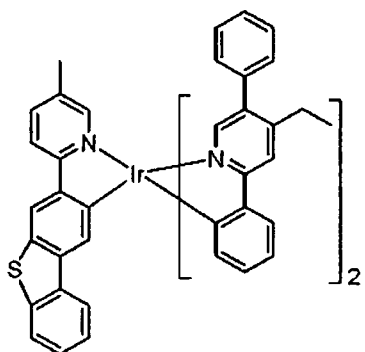
化合物 74



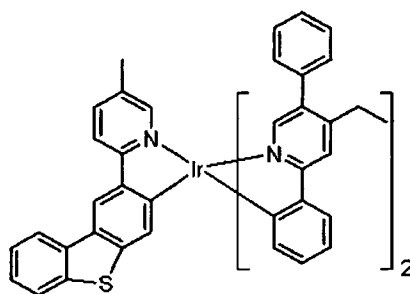
化合物 75



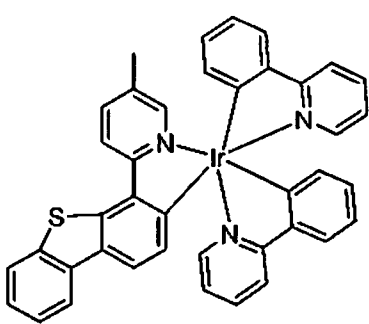
化合物 76



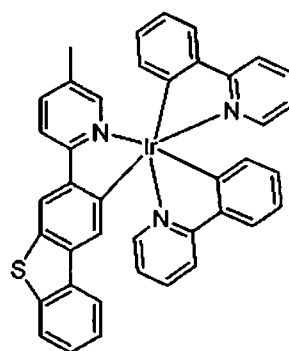
化合物 77



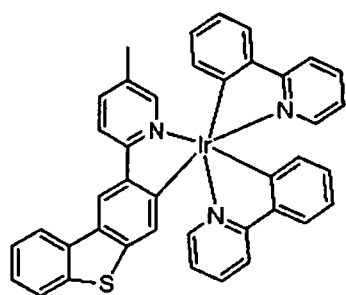
化合物 78



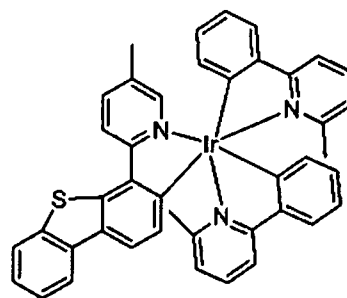
化合物 79



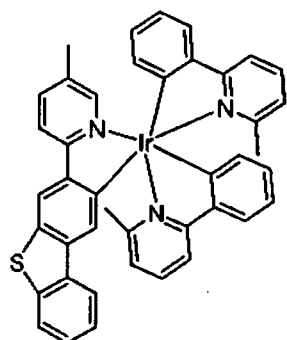
化合物 80



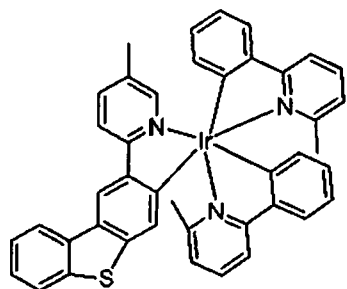
化合物 81



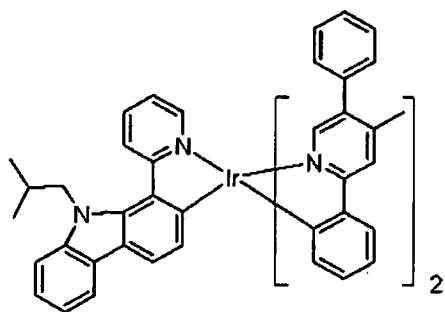
化合物 82



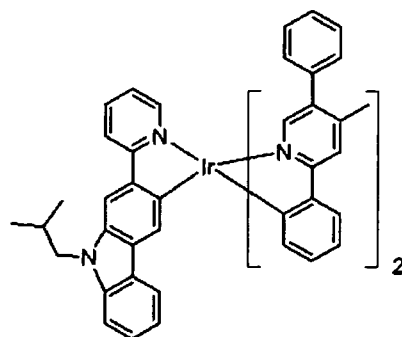
化合物 83



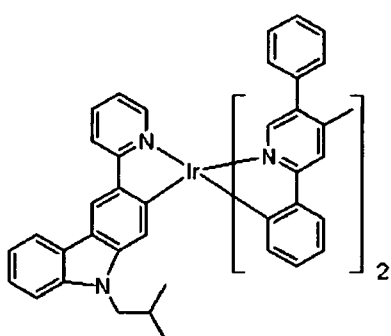
化合物 84



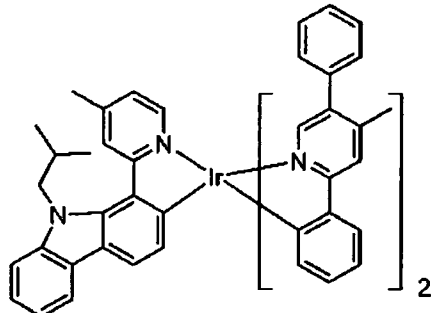
化合物 85



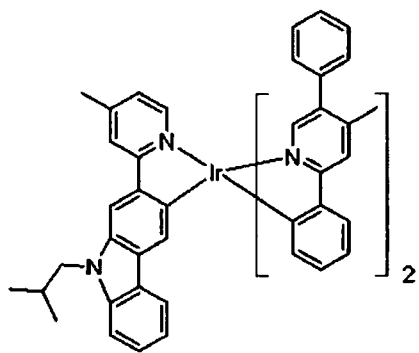
化合物 86



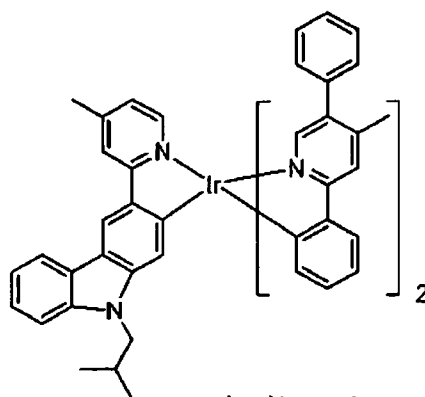
化合物 87



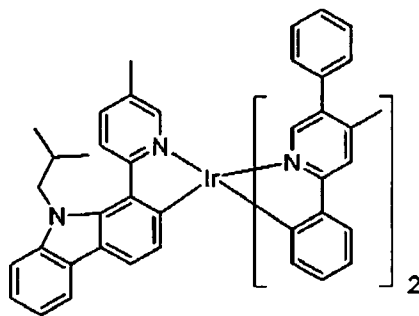
化合物 88



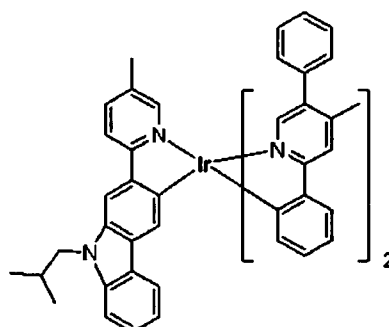
化合物 89



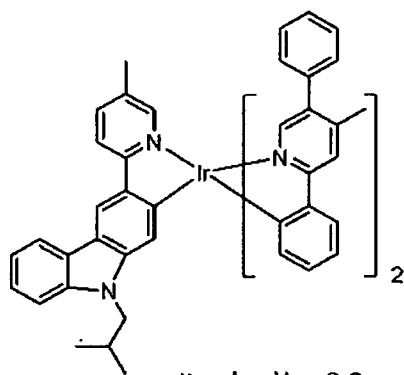
化合物 90



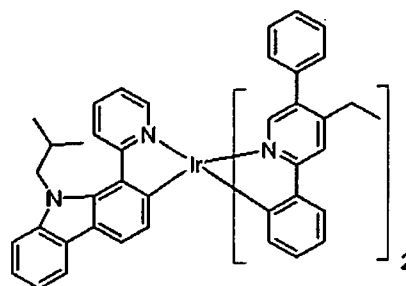
化合物 91



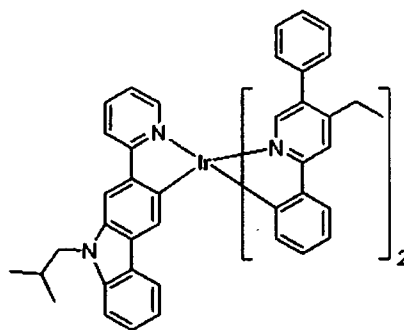
化合物 92



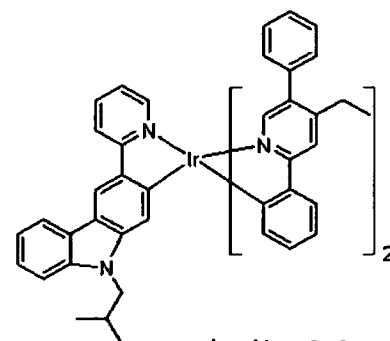
化合物 93



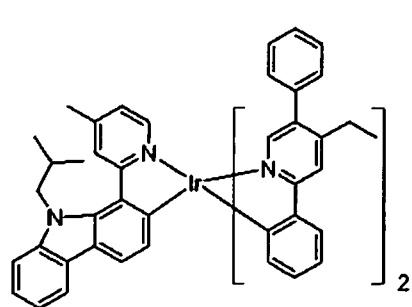
化合物 94



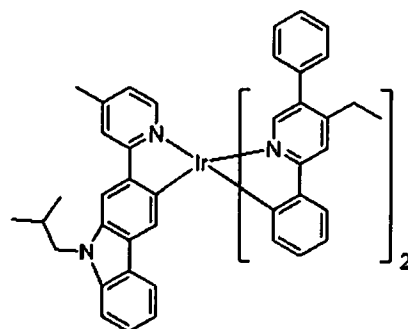
化合物 95



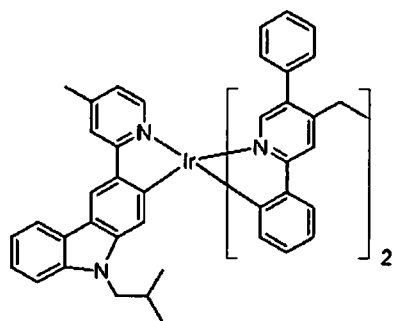
化合物 96



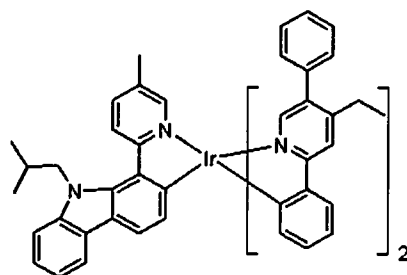
化合物 97



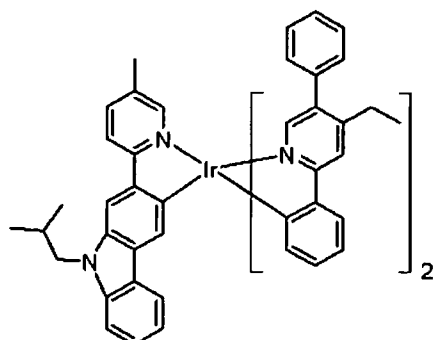
化合物 98



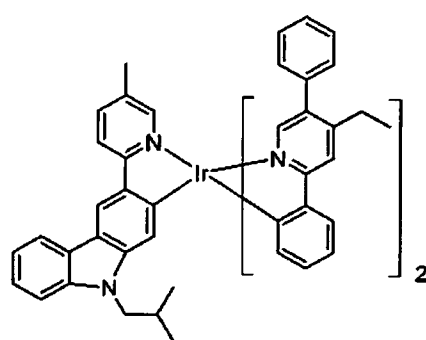
化合物 99



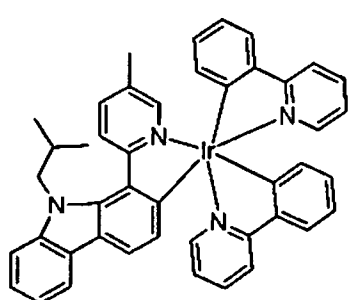
化合物 100



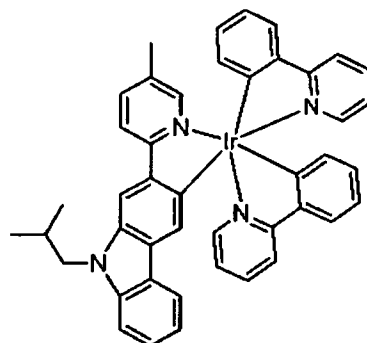
化合物 101



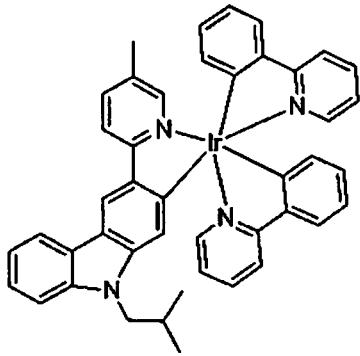
化合物 102



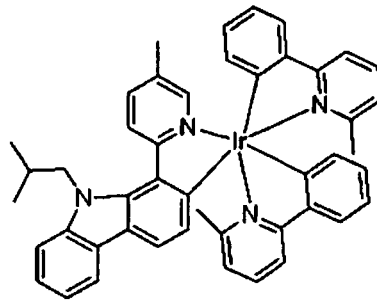
化合物 103



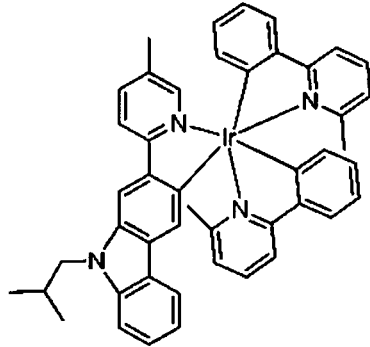
化合物 104



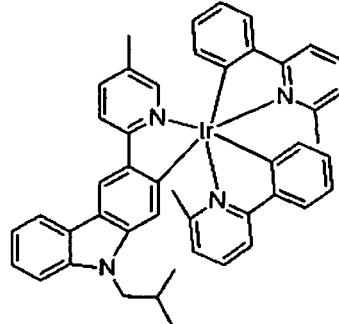
化合物 105



化合物 106



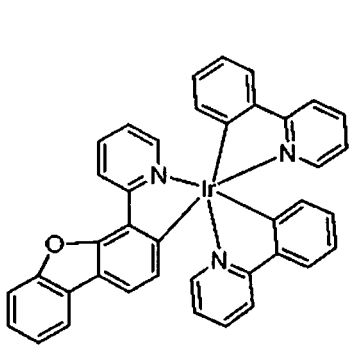
化合物 107



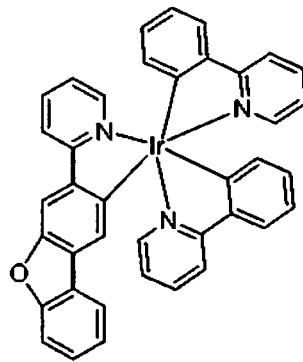
化合物 108

16. 如請求項1之化合物，其中X係O。

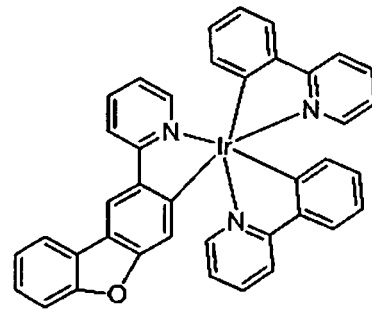
17. 如請求項16之化合物，其中該化合物係選自由下列組成之群：



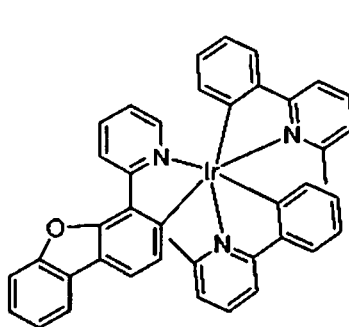
化合物 1



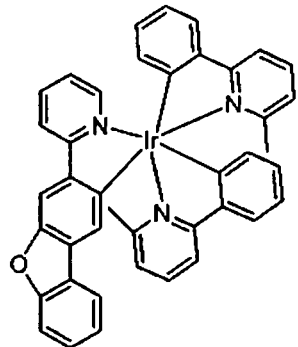
化合物 2



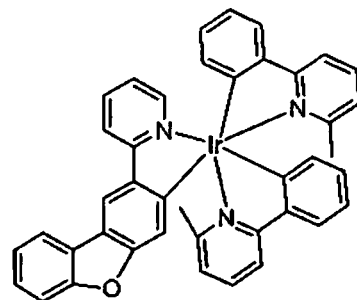
化合物 3



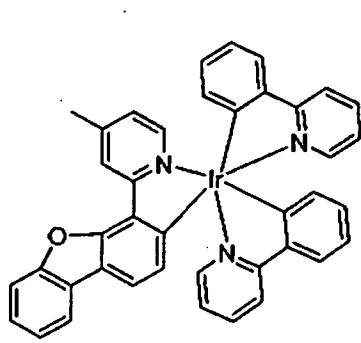
化合物 4



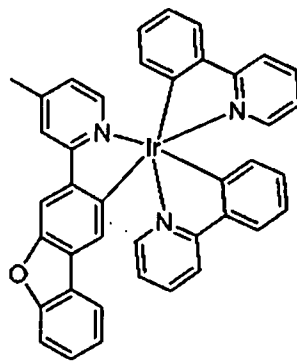
化合物 5



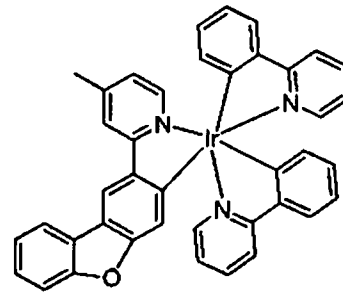
化合物 6



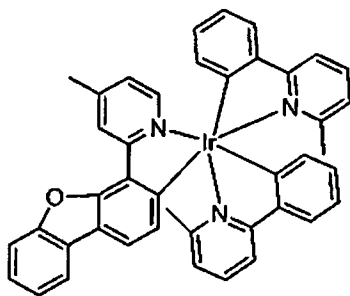
化合物 7



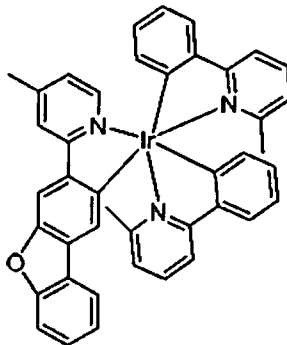
化合物 8



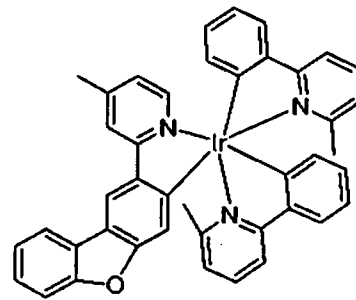
化合物 9



化合物 10

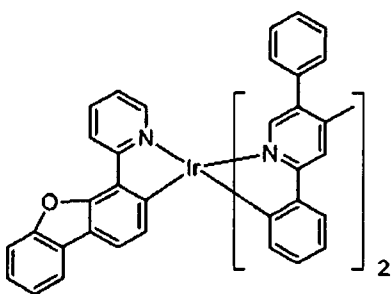


化合物 11

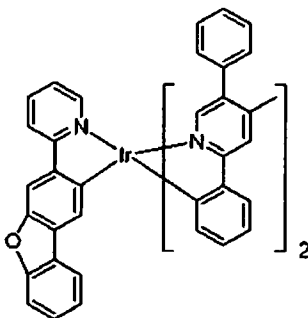


化合物 12

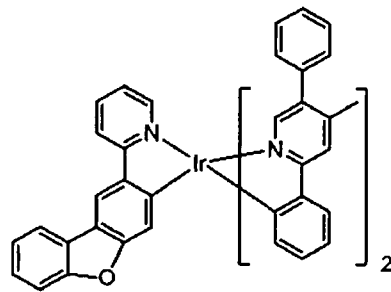
18. 如請求項16之化合物，其中該化合物係選自由下列組成之群：



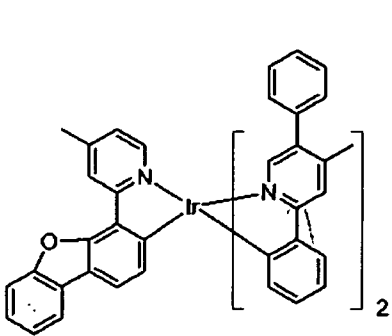
化合物 37



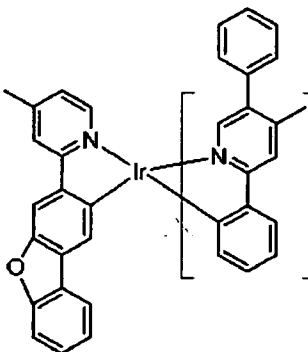
化合物 38



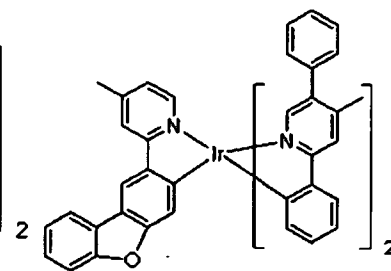
化合物 39



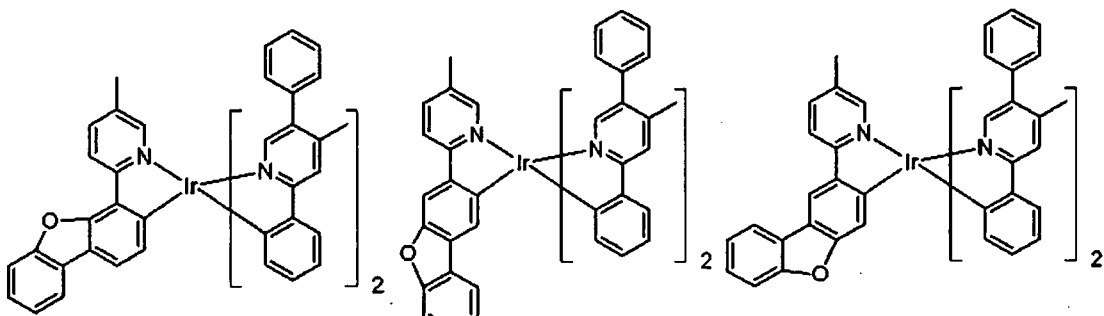
化合物 40



化合物 41



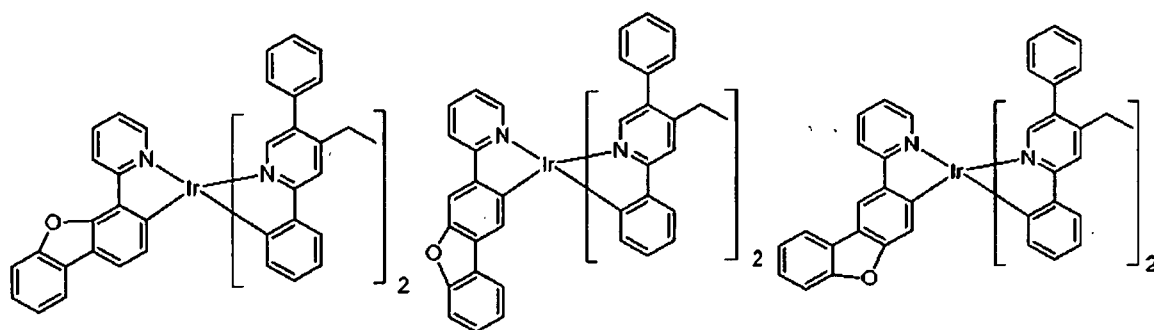
化合物 42



化合物 43

化合物 44

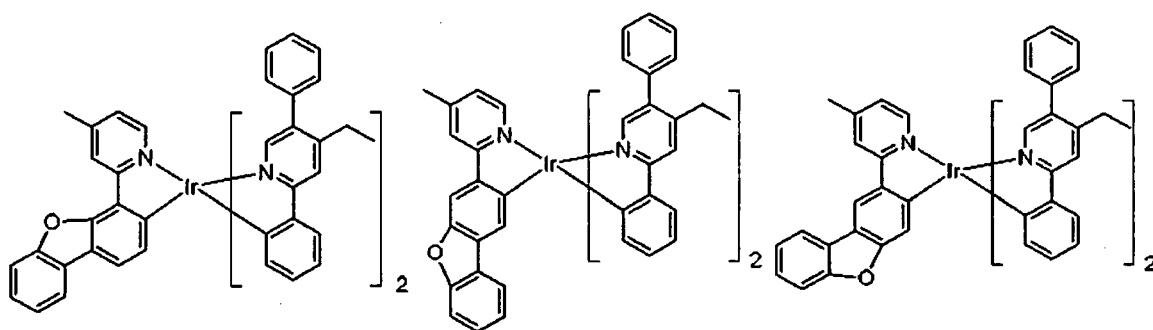
化合物 45



化合物 46

化合物 47

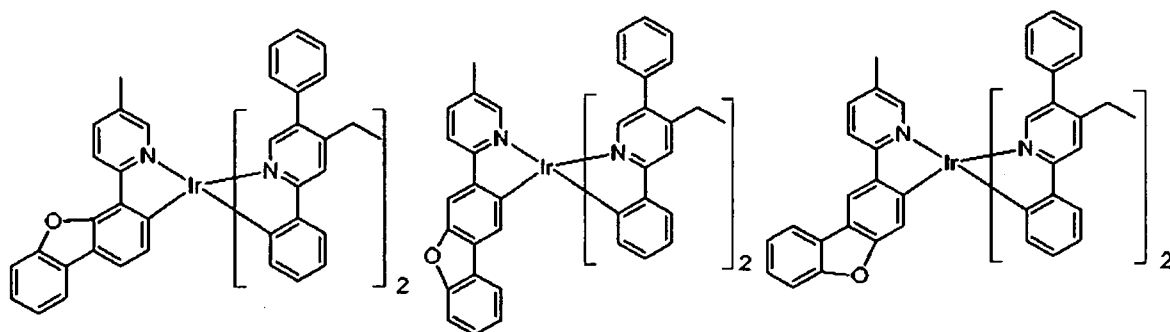
化合物 48



化合物 49

化合物 50

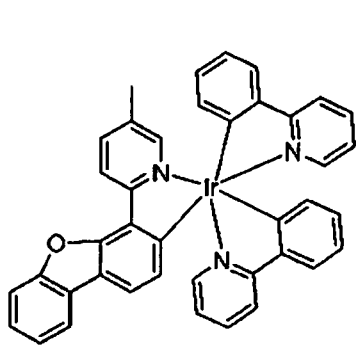
化合物 51



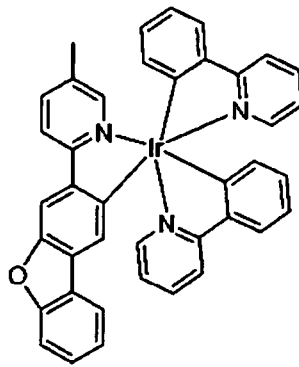
化合物 52

化合物 53

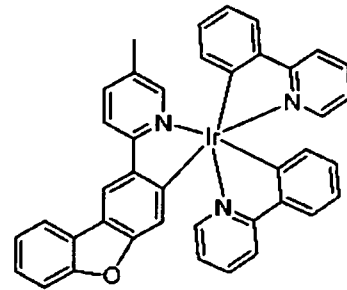
化合物 54



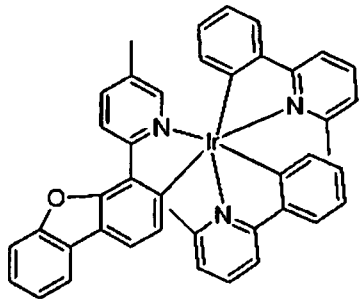
化合物 55



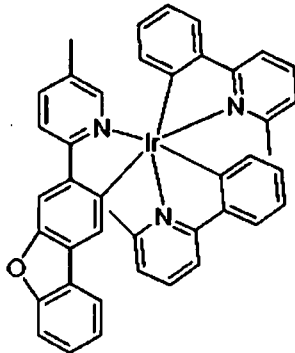
化合物 56



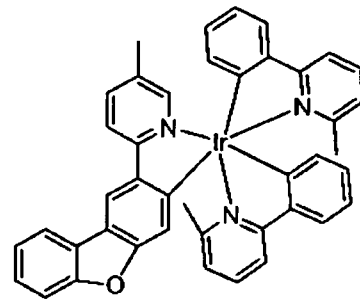
化合物 57



化合物 58

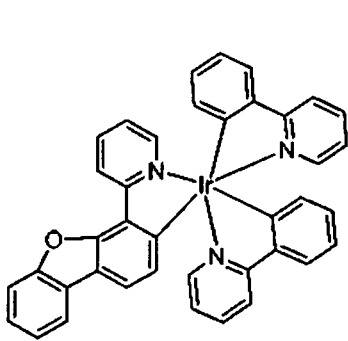


化合物 59

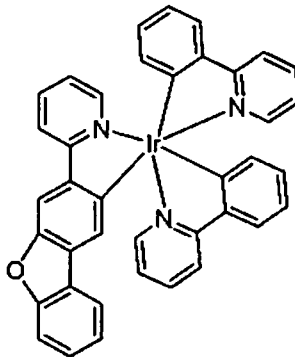


化合物 60

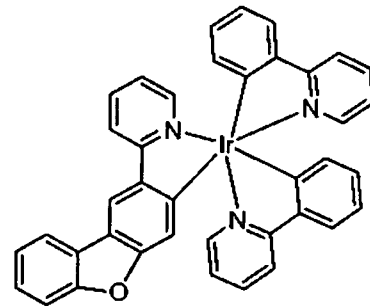
19. 如請求項16之化合物，其中該化合物係選自由下列組成之群：



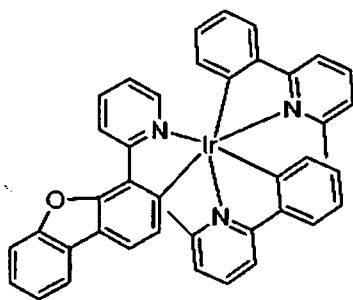
化合物 1



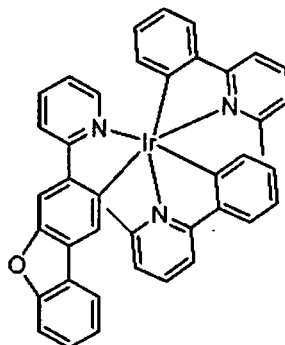
化合物 2



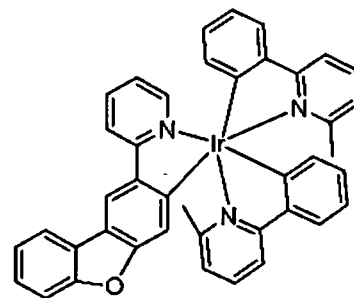
化合物 3



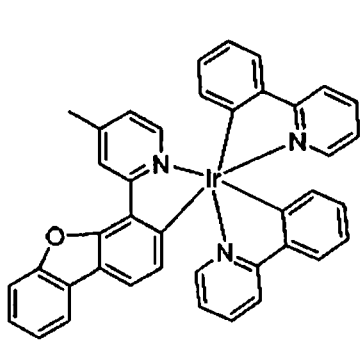
化合物 4



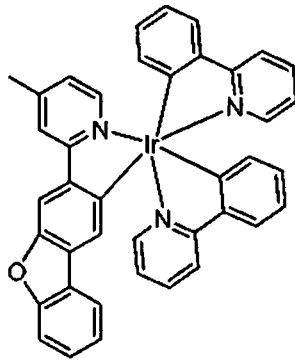
化合物 5



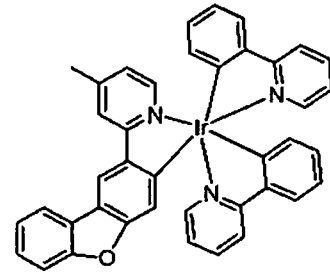
化合物 6



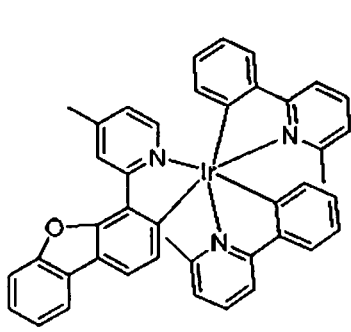
化合物 7



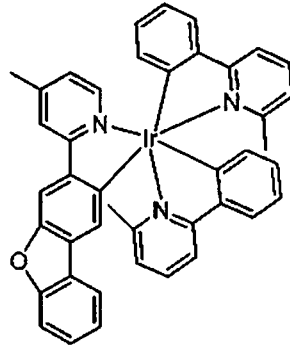
化合物 8



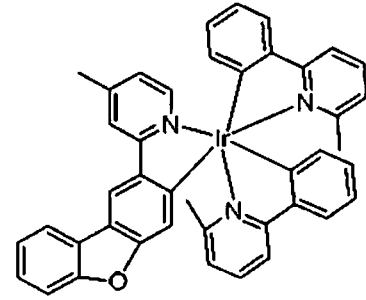
化合物 9



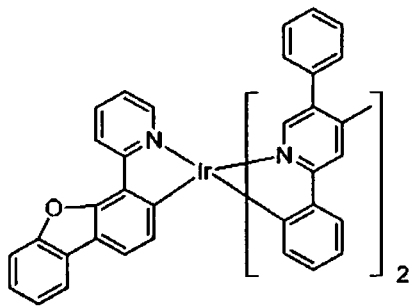
化合物 10



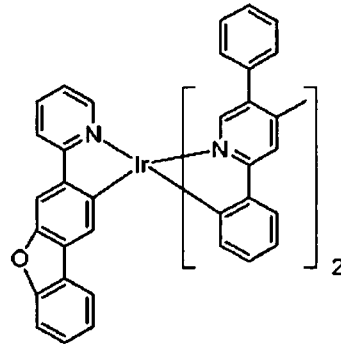
化合物 11



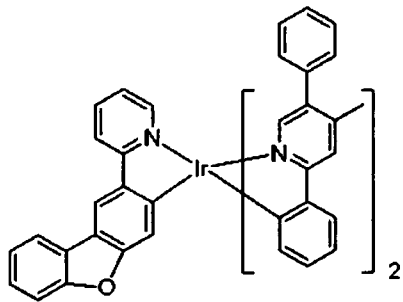
化合物 12



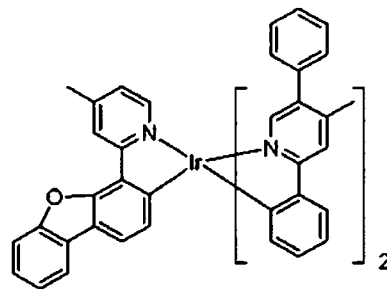
化合物 37



化合物 38

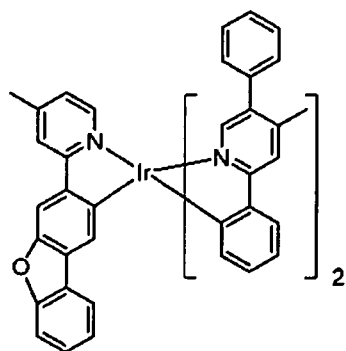


化合物 39

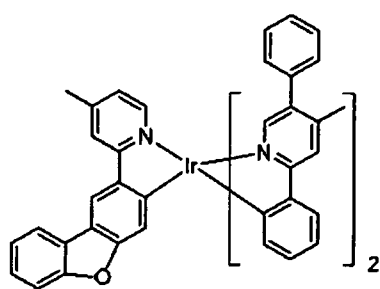


化合物 40

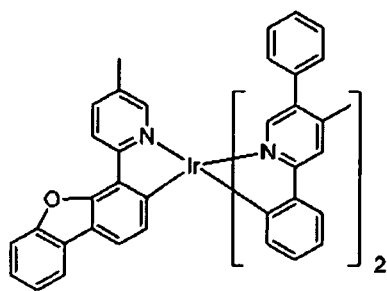




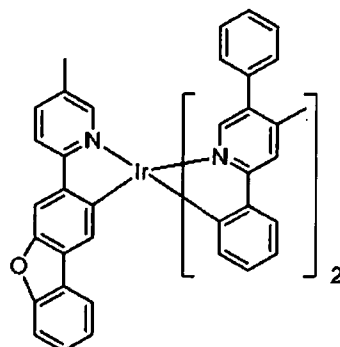
化合物 41



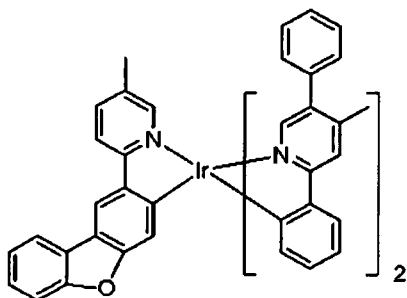
化合物 42



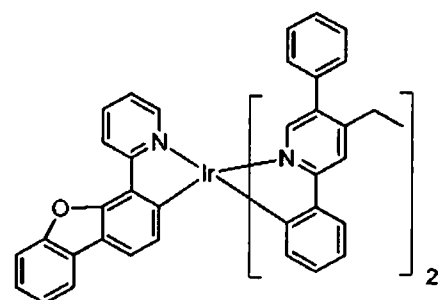
化合物 43



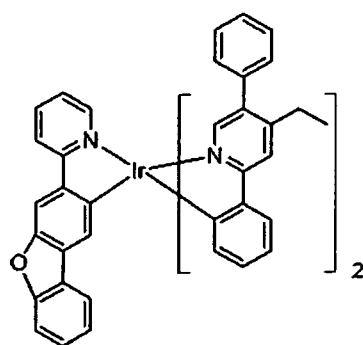
化合物 44



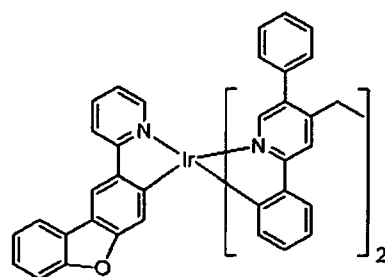
化合物 45



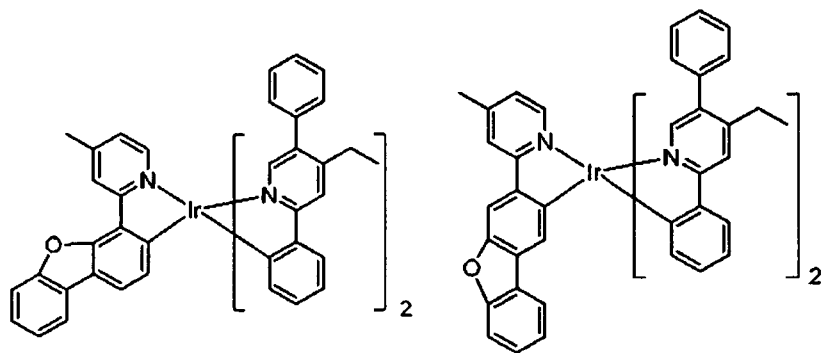
化合物 46



化合物 47

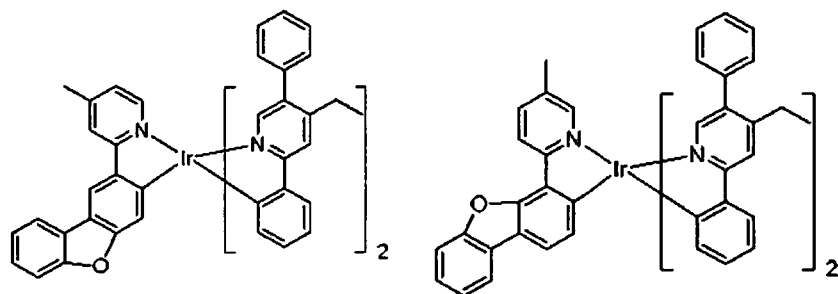


化合物 48



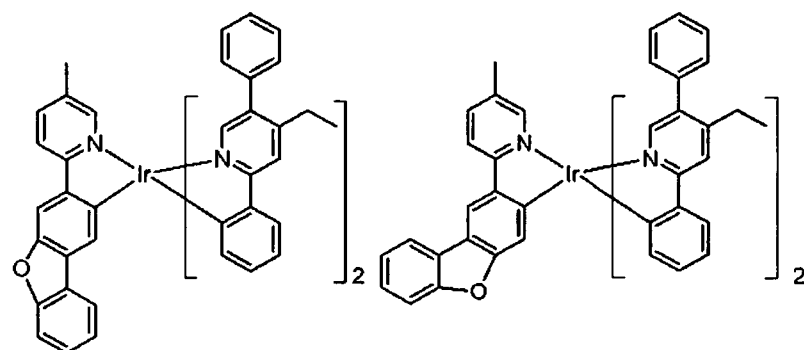
化合物 49

化合物 50



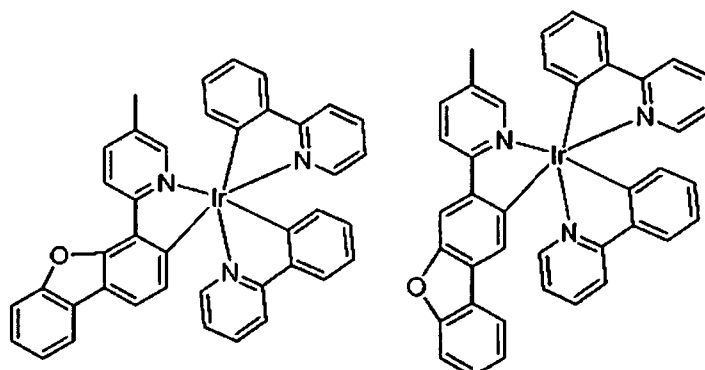
化合物 51

化合物 52



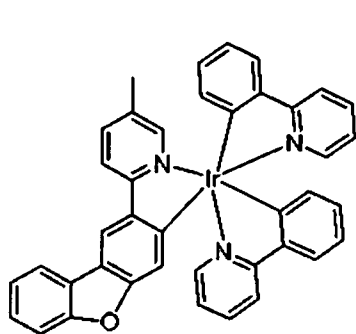
化合物 53

化合物 54

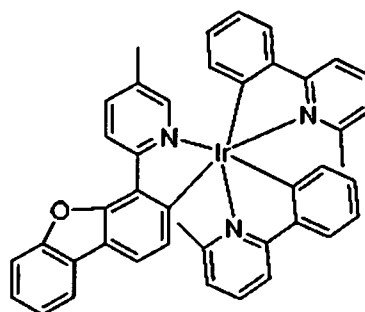


化合物 55

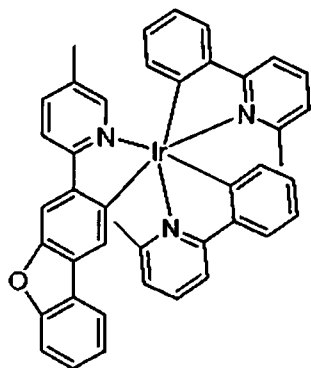
化合物 56



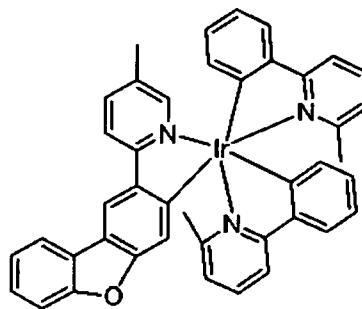
化合物 57



化合物 58



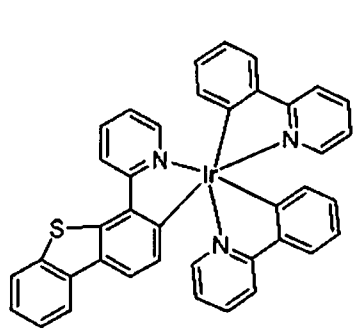
化合物 59



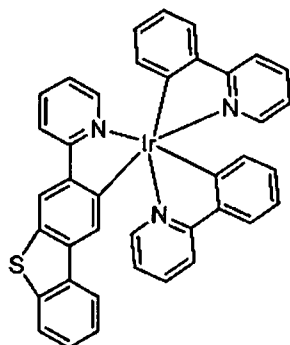
化合物 60

20. 如請求項1之化合物，其中X係S。

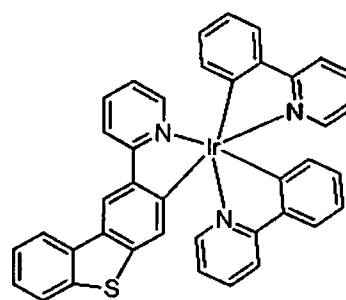
21. 如請求項20之化合物，其中該化合物係選自由下列組成之群：



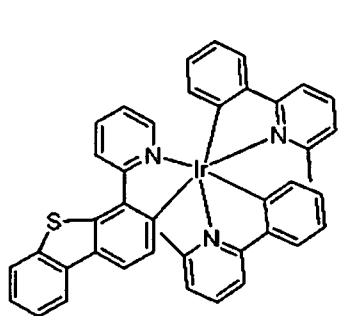
化合物 13



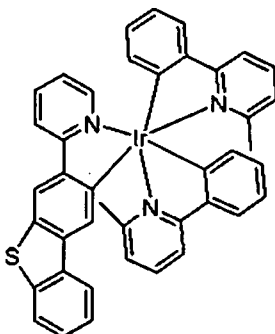
化合物 14



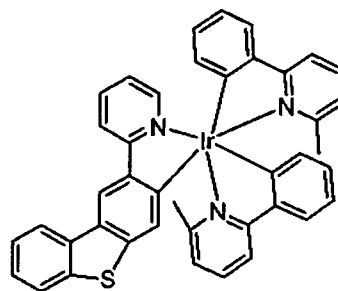
化合物 15



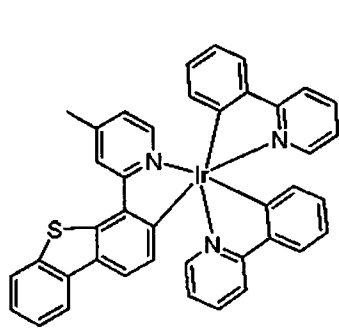
化合物 16



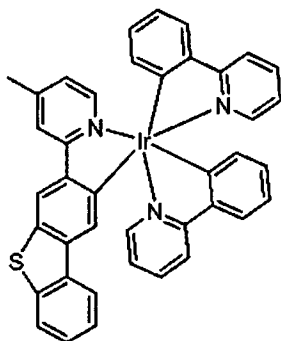
化合物 17



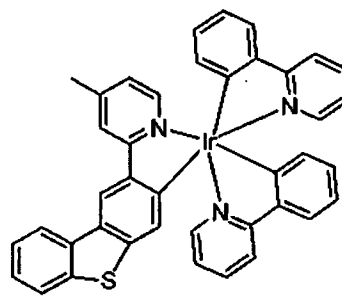
化合物 18



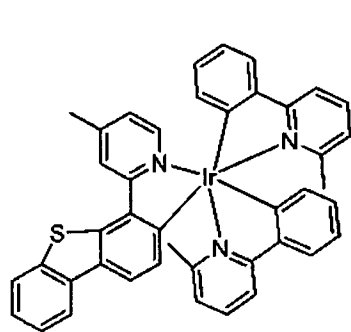
化合物 19



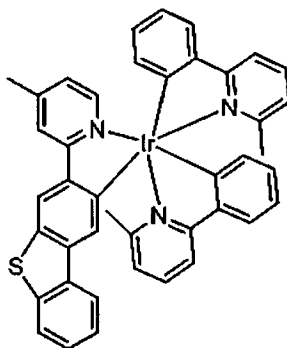
化合物 20



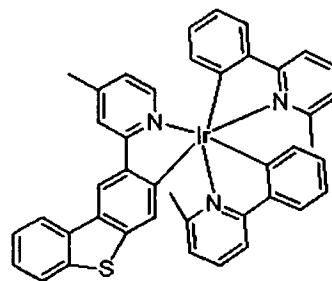
化合物 21



化合物 22

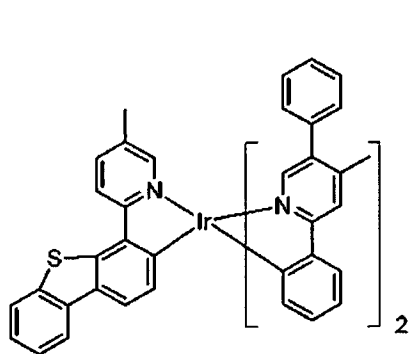


化合物 23

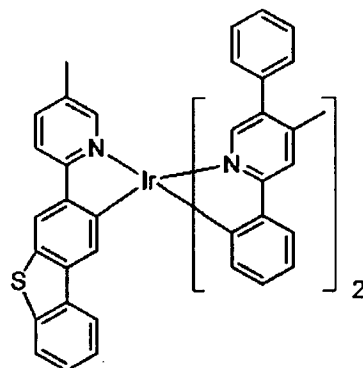


化合物 24

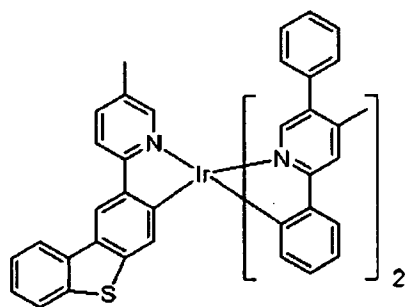
22. 如請求項20之化合物，其中該化合物係選自由下列組成之群：



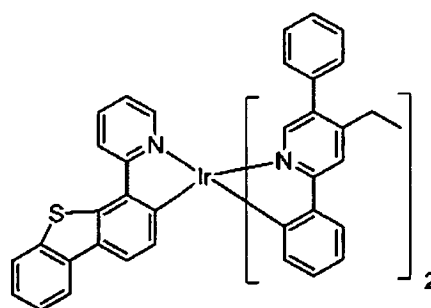
化合物 61



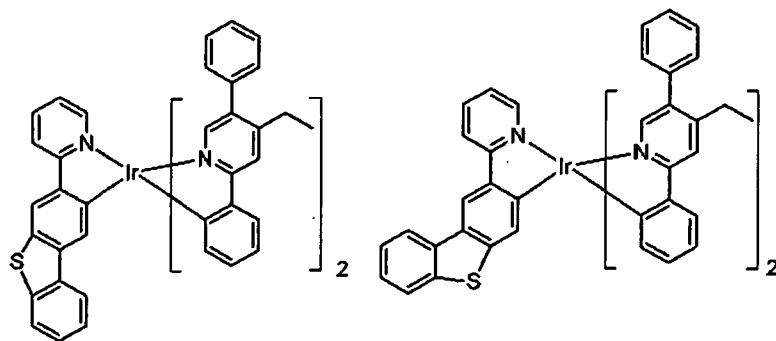
化合物 62



化合物 63

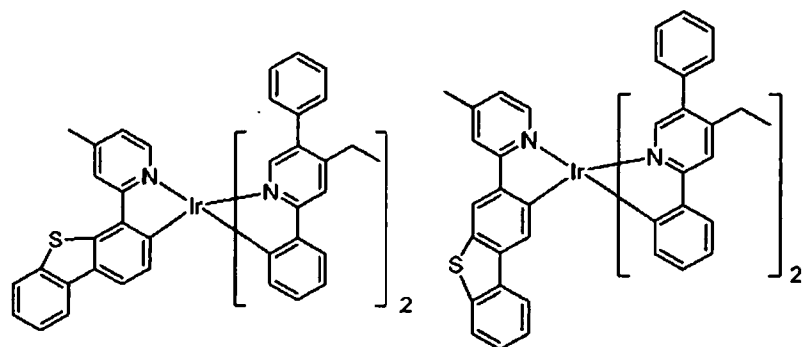


化合物 64



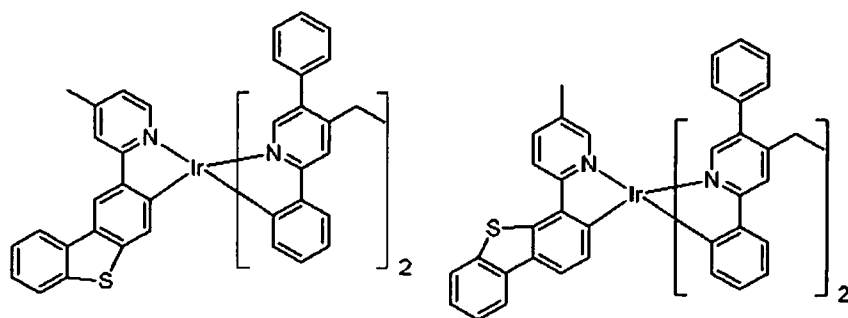
化合物 65

化合物 66



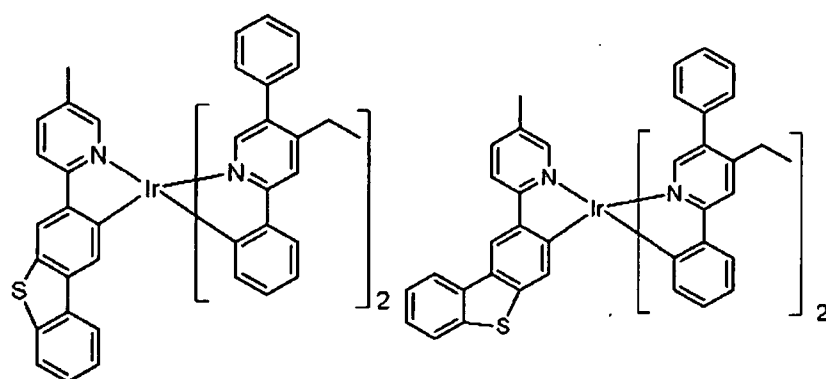
化合物 67

化合物 68



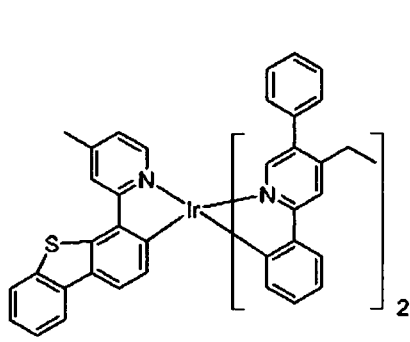
化合物 69

化合物 70

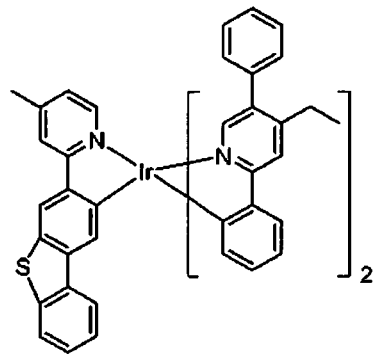


化合物 71

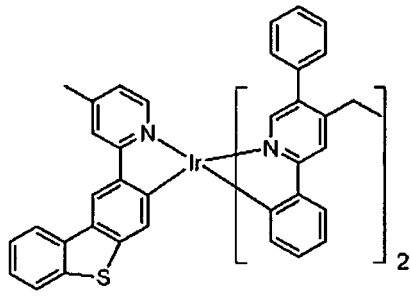
化合物 72



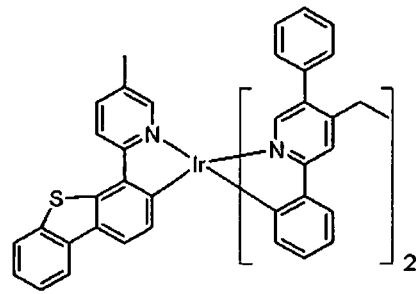
化合物 73



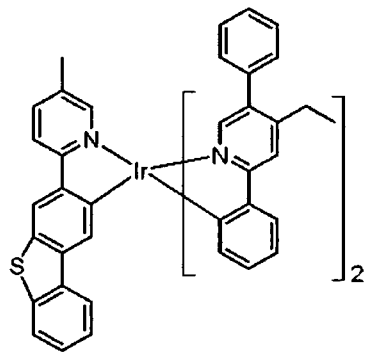
化合物 74



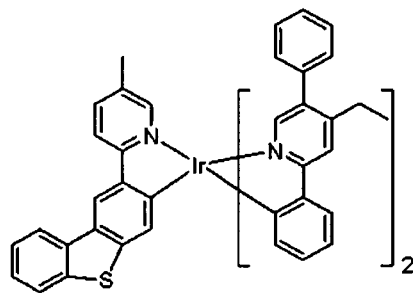
化合物 75



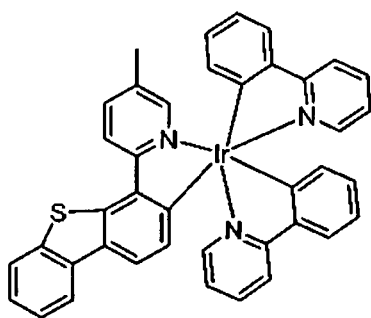
化合物 76



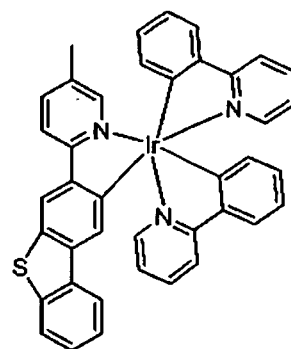
化合物 77



化合物 78

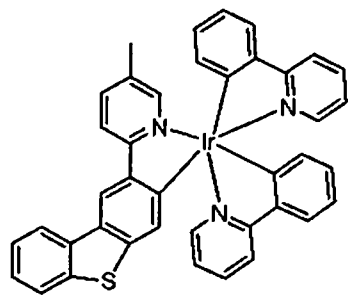


化合物 79

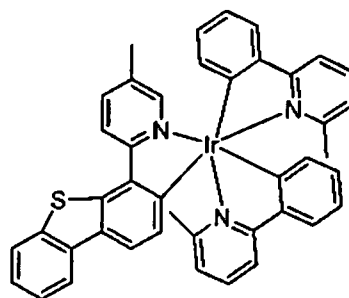


化合物 80

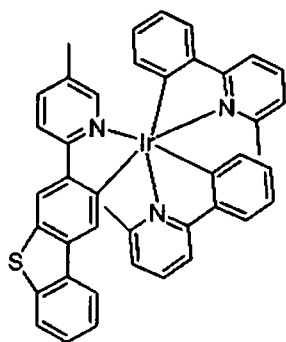




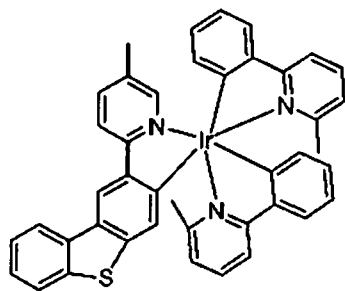
化合物 81



化合物 82

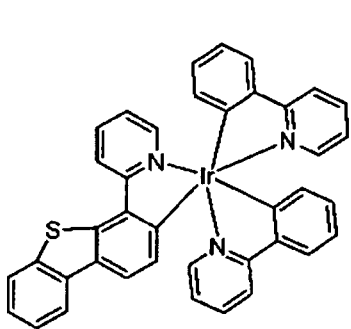


化合物 83

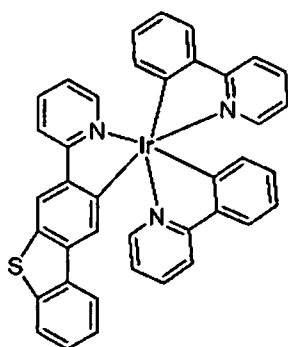


化合物 84

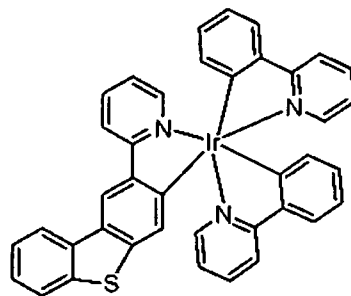
23. 如請求項20之化合物，其中該化合物係選自由下列組成之群：



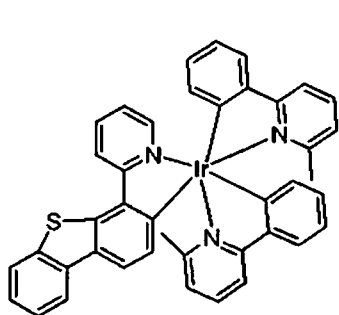
化合物 13



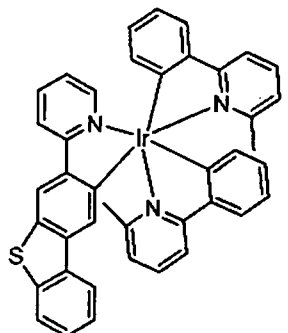
化合物 14



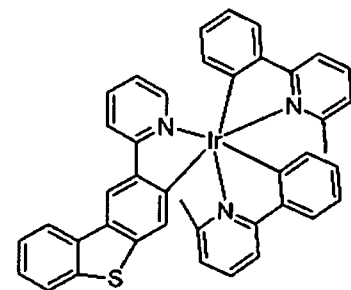
化合物 15



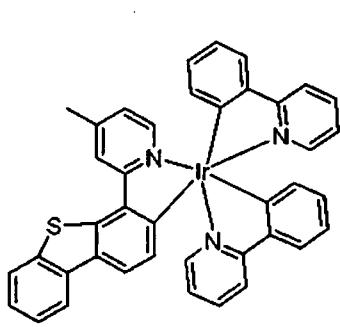
化合物 16



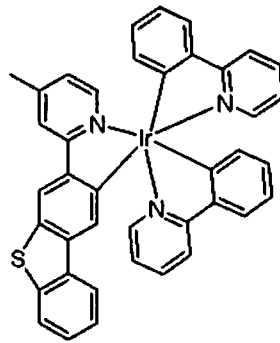
化合物 17



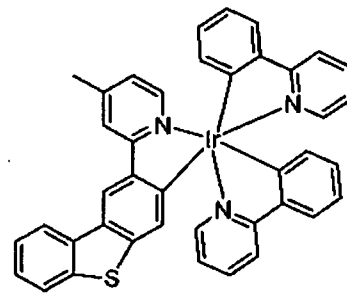
化合物 18



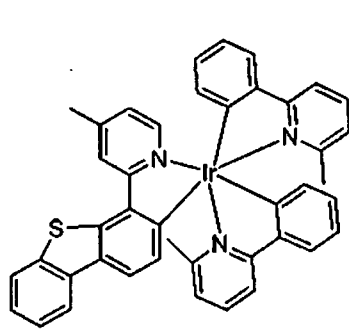
化合物 19



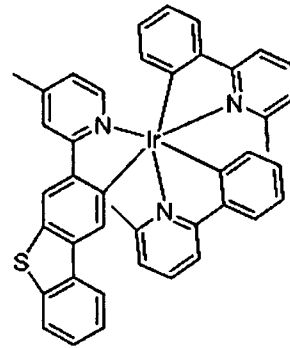
化合物 20



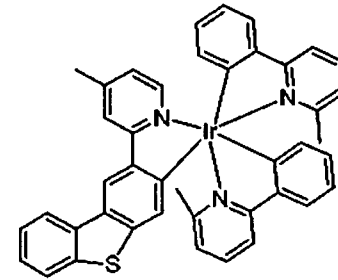
化合物 21



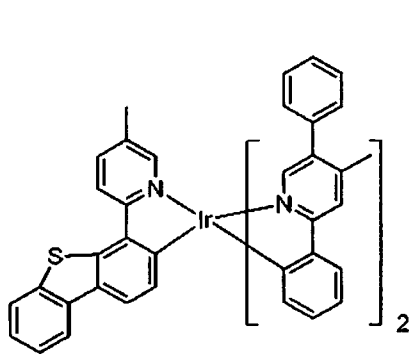
化合物 22



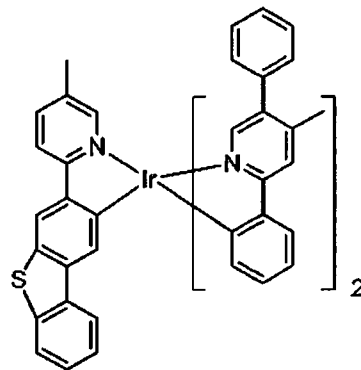
化合物 23



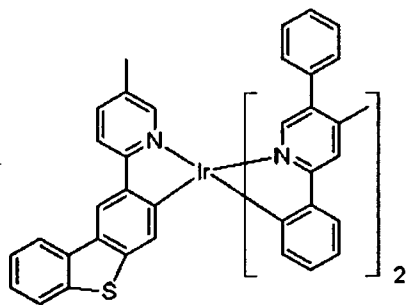
化合物 24



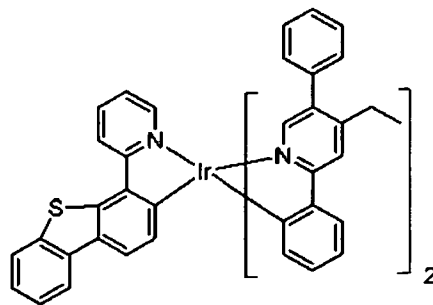
化合物 61



化合物 62

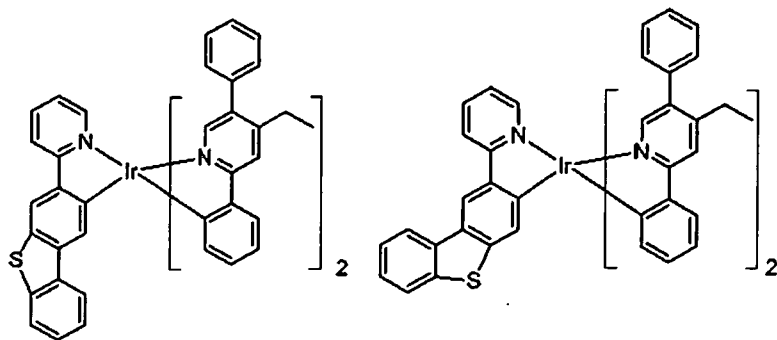


化合物 63



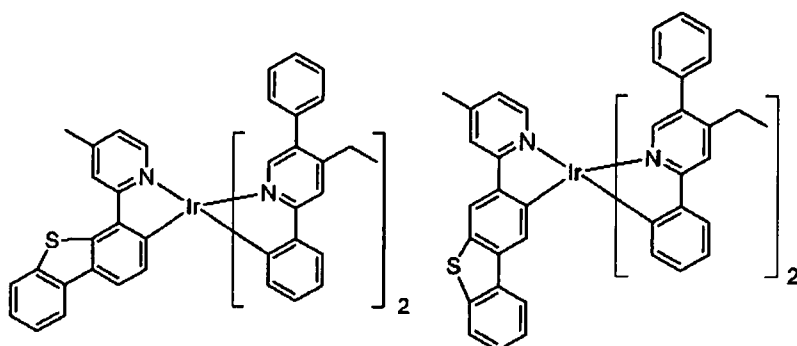
化合物 64





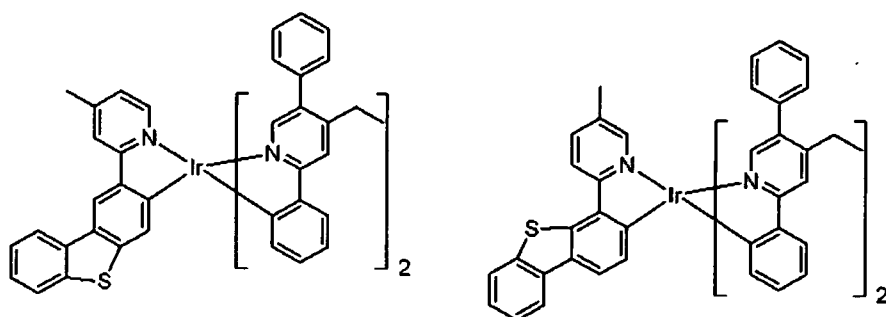
化合物 65

化合物 66



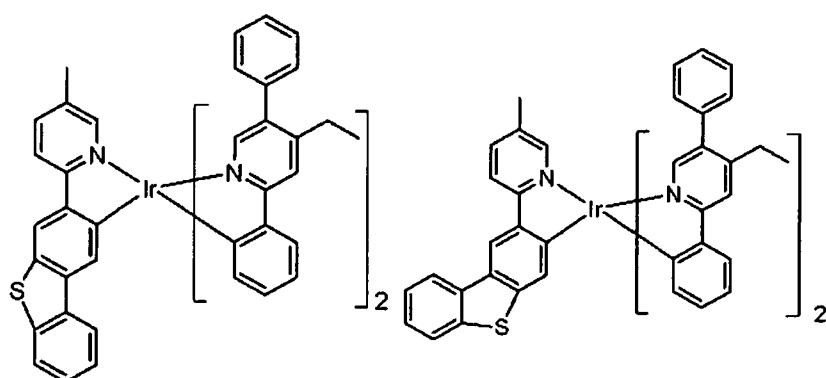
化合物 67

化合物 68



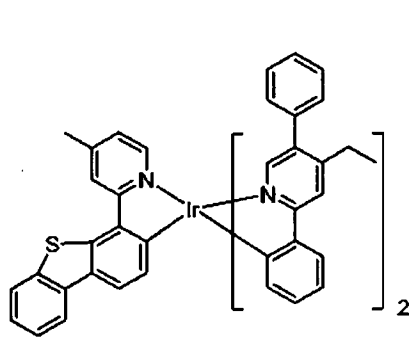
化合物 69

化合物 70

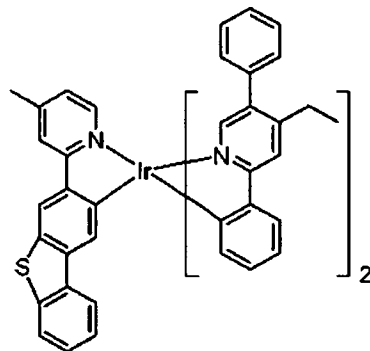


化合物 71

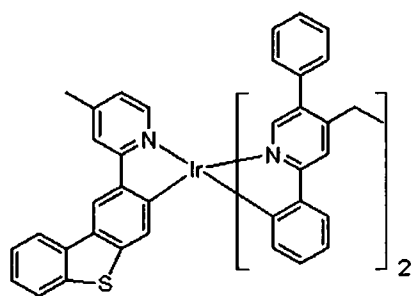
化合物 72



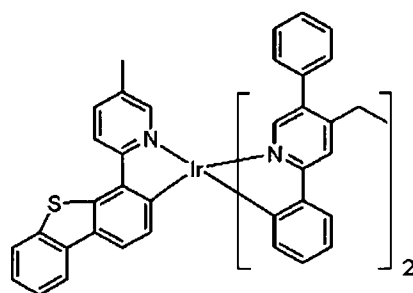
化合物 73



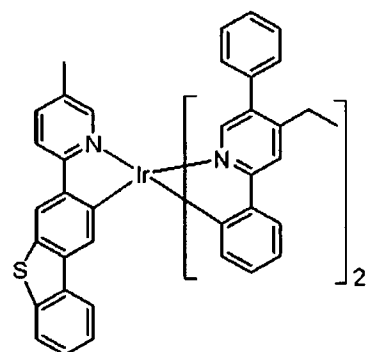
化合物 74



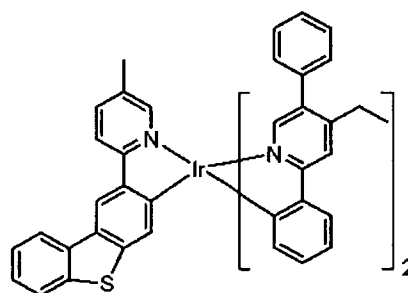
化合物 75



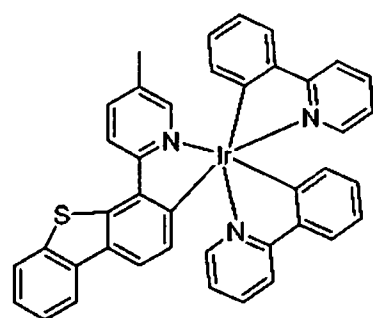
化合物 76



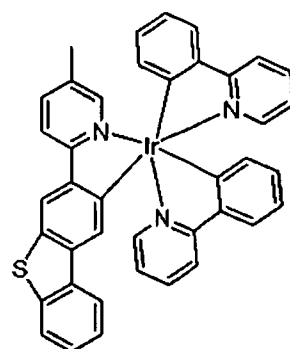
化合物 77



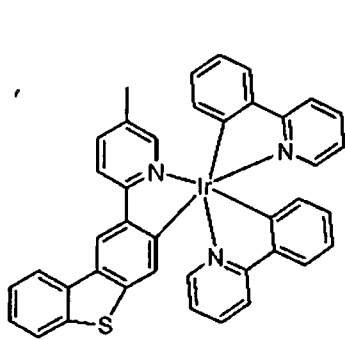
化合物 78



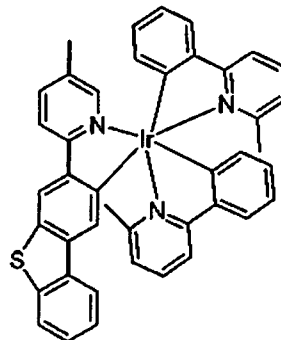
化合物 79



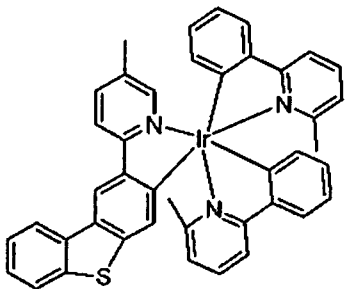
化合物 80



化合物 81



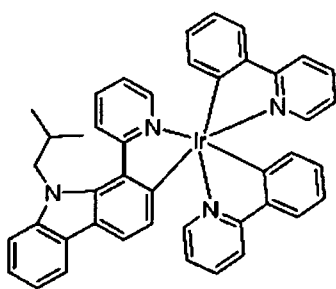
化合物 83



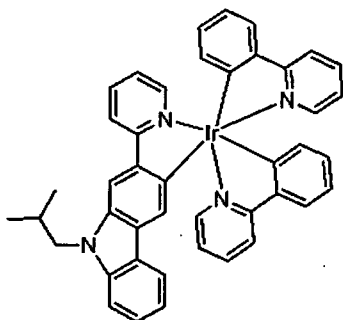
化合物 84

24. 如請求項1之化合物，其中X係NR。

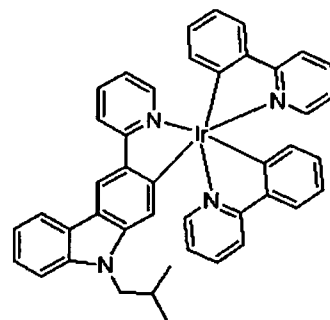
25. 如請求項24之化合物，其中該化合物係選自由下列組成之群：



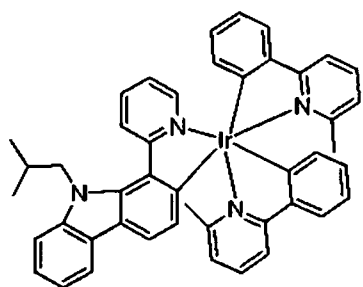
化合物 25



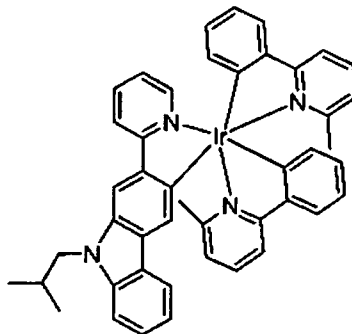
化合物 26



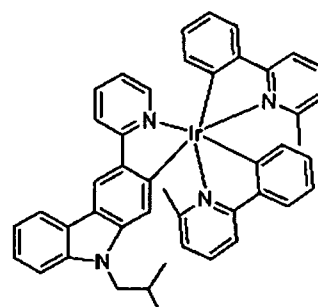
化合物 27



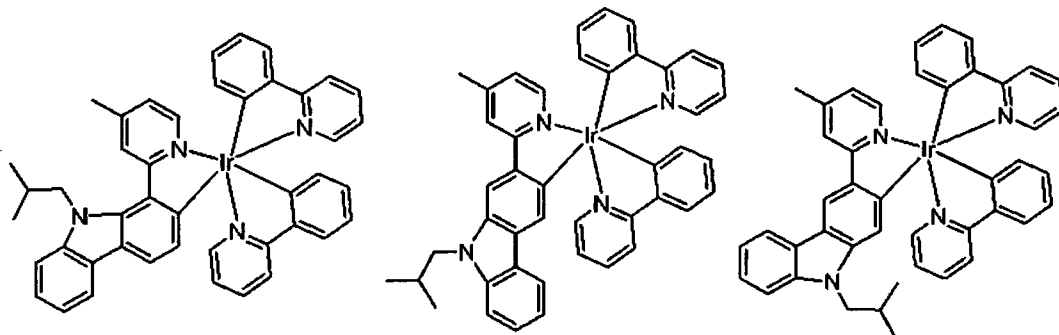
化合物 28



化合物 29



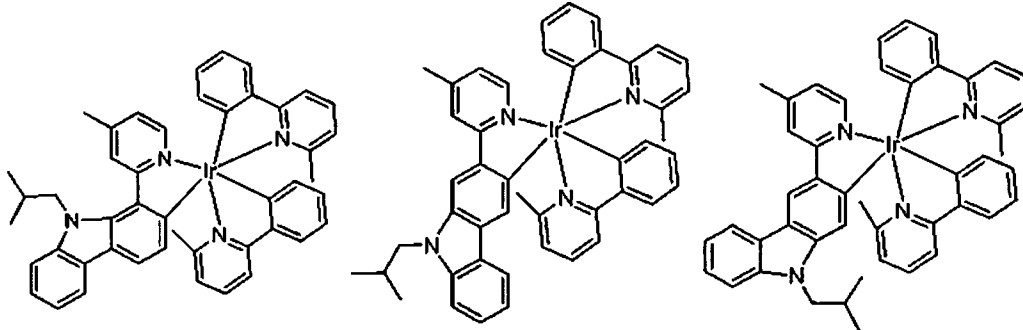
化合物 30



化合物 31

化合物 32

化合物 33

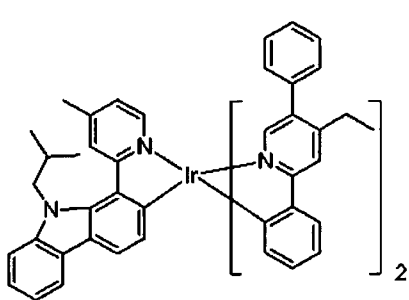


化合物 34

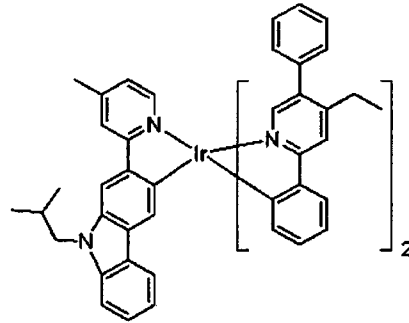
化合物 35

化合物 36

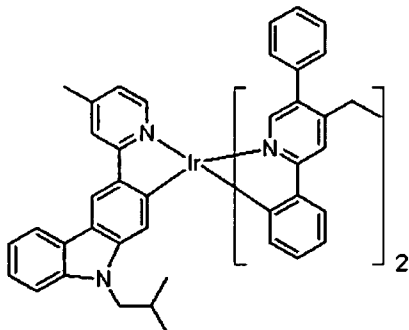
26. 如請求項24之化合物，其中該化合物係選自由下列組成之群：



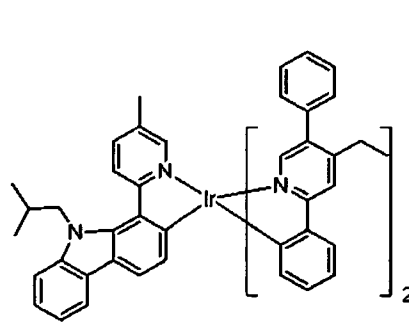
化合物 85



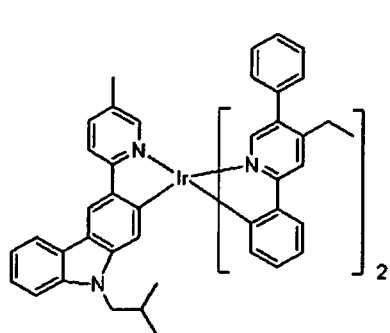
化合物 86



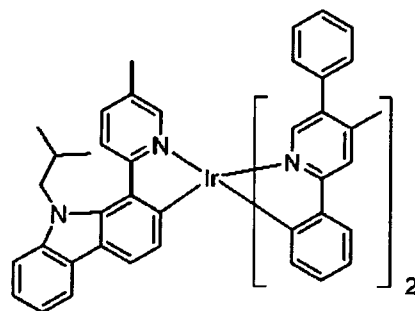
化合物 87



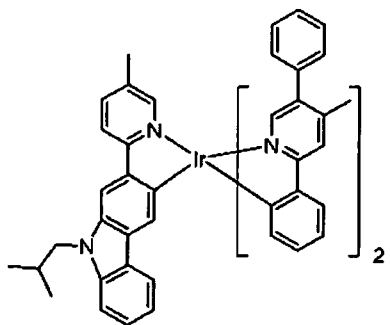
化合物 88



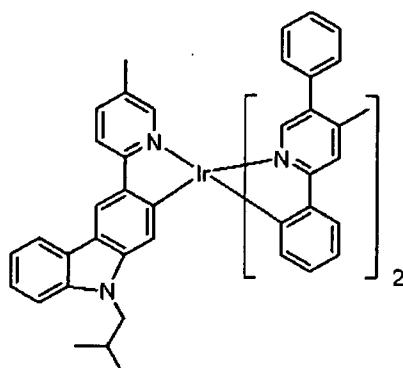
化合物 90



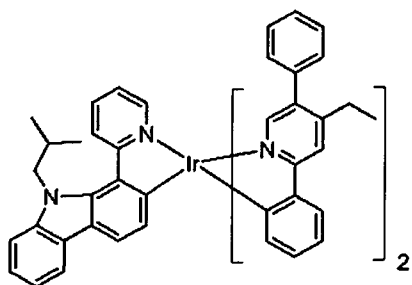
化合物 91



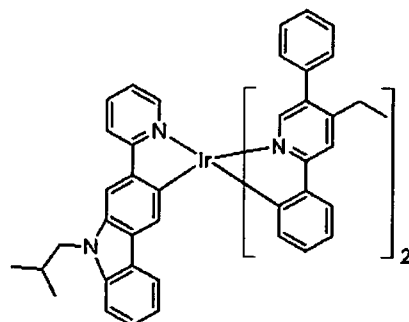
化合物 92



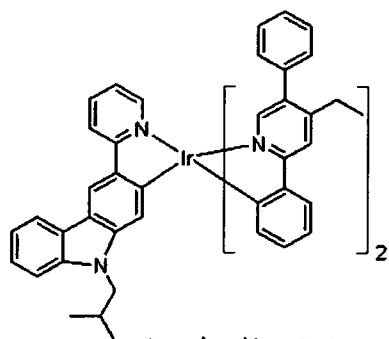
化合物 93



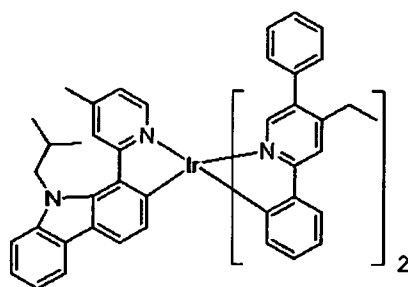
化合物 94



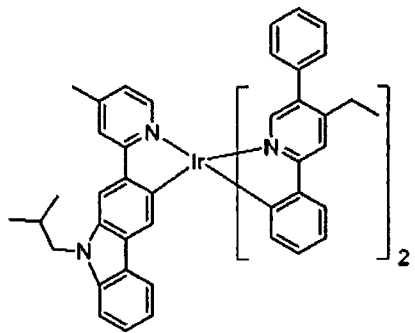
化合物 95



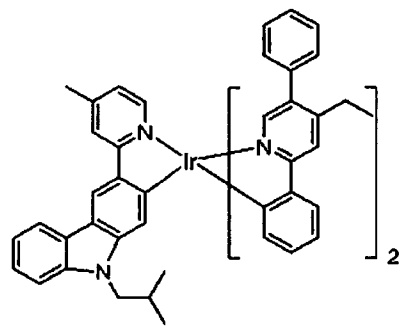
化合物 96



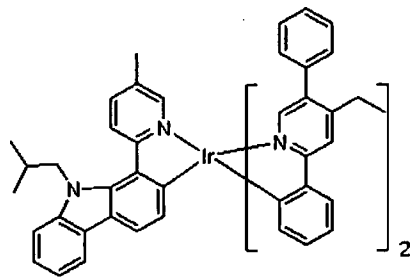
化合物 97



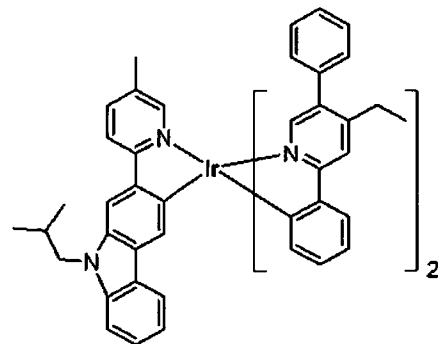
化合物 98



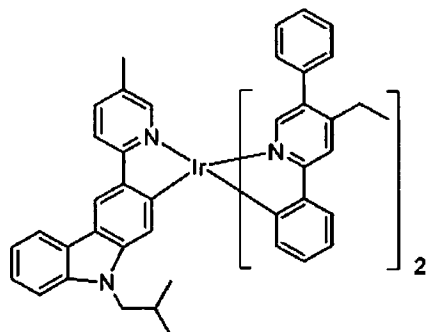
化合物 99



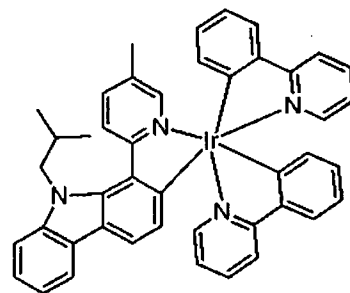
化合物 100



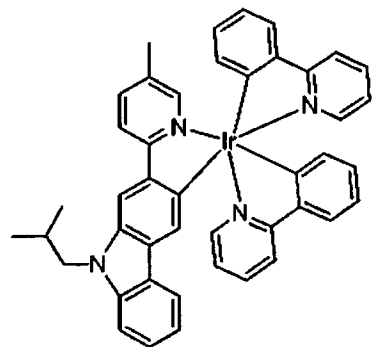
化合物 101



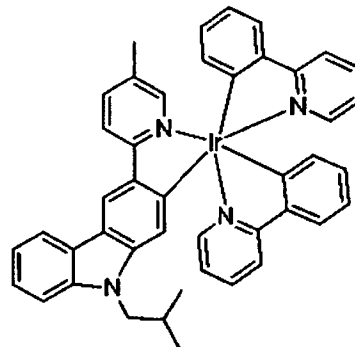
化合物 102



化合物 103

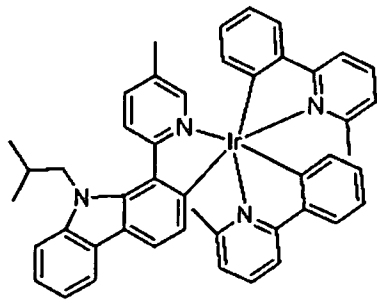


化合物 104

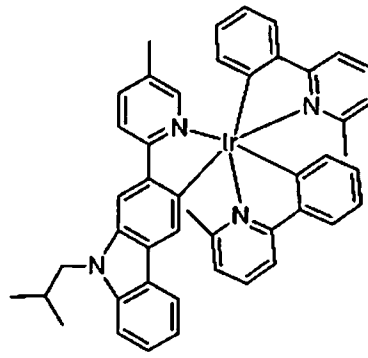


化合物 105

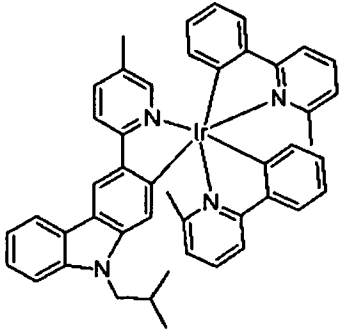




化合物 106

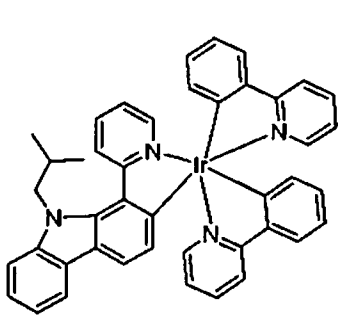


(化合物 107)

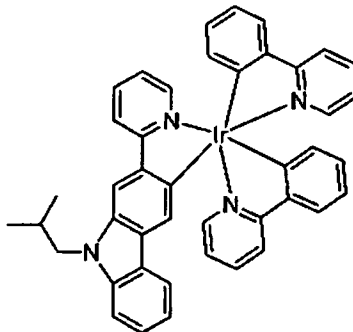


化合物 108

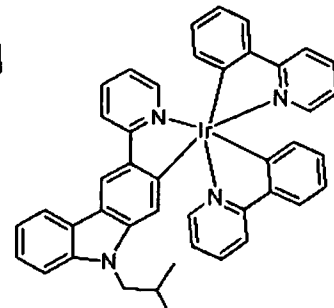
27. 如請求項24之化合物，其中該化合物係選自由下列組成之群：



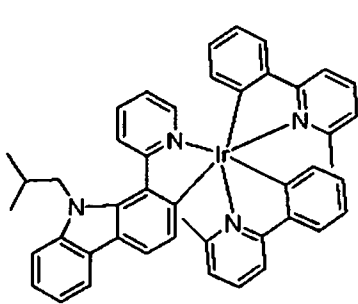
化合物 25



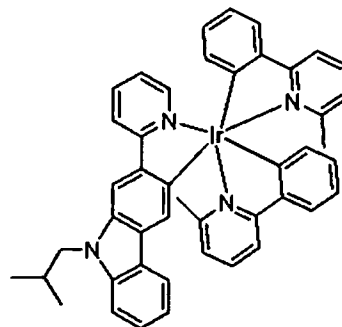
化合物 26



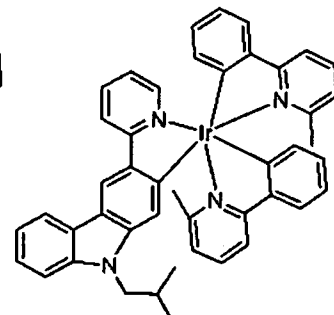
化合物 27



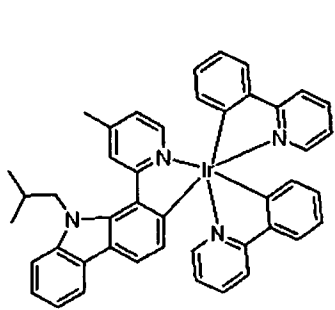
化合物 28



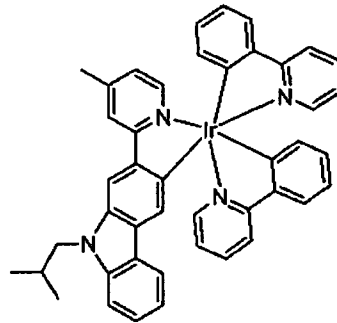
化合物 29



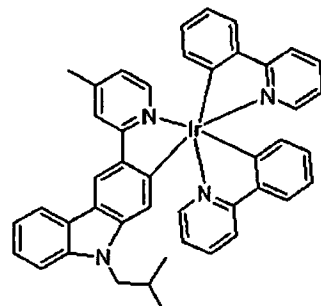
化合物 30



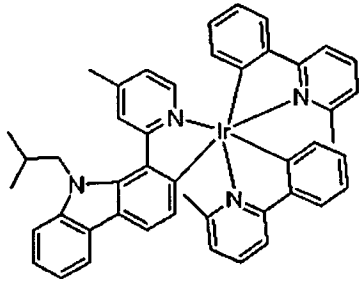
化合物 31



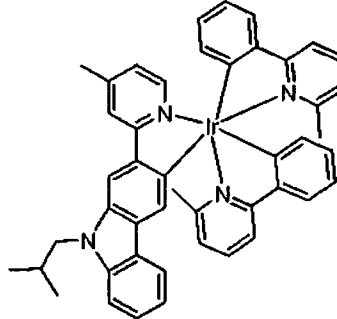
化合物 32



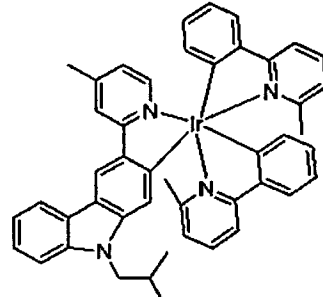
化合物 33



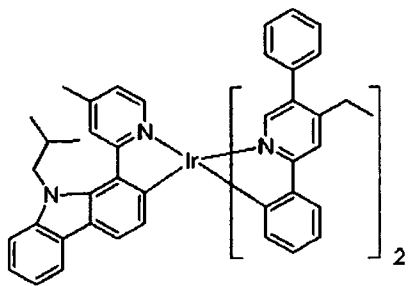
化合物 34



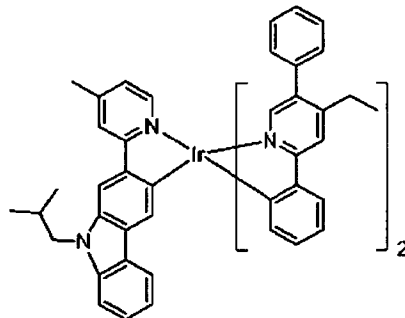
化合物 35



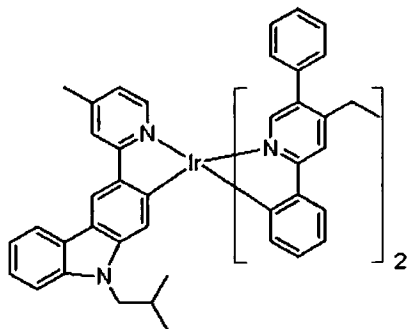
化合物 36



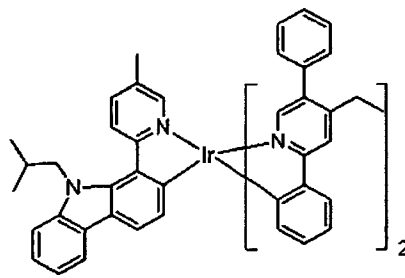
化合物 85



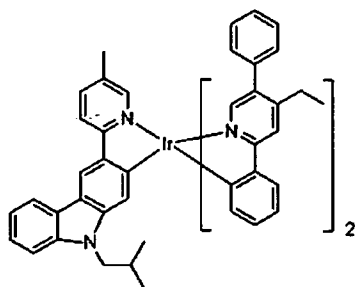
化合物 86



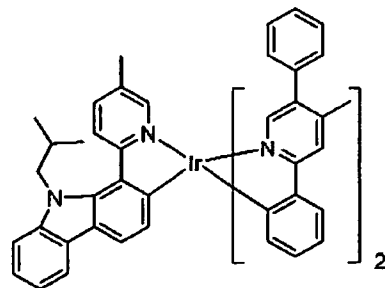
化合物 87



化合物 88



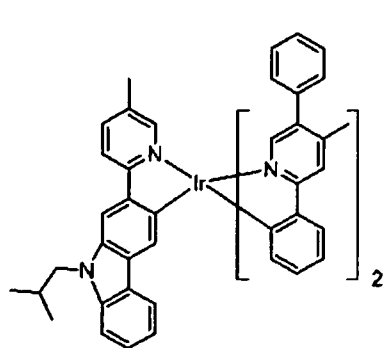
化合物 90



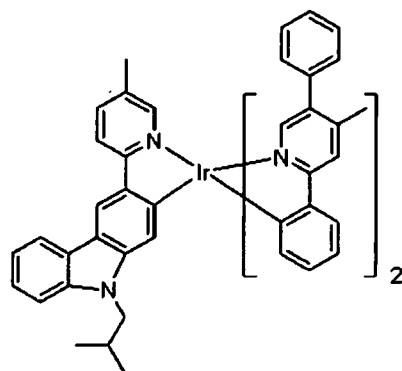
化合物 91

1.

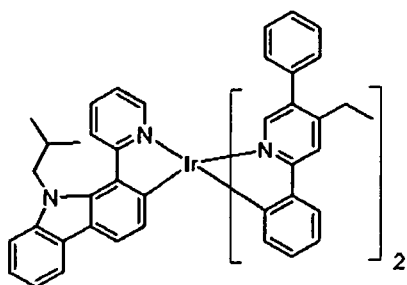




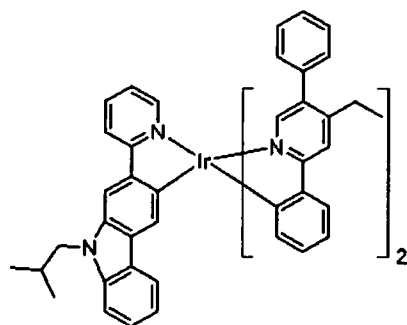
化合物 92



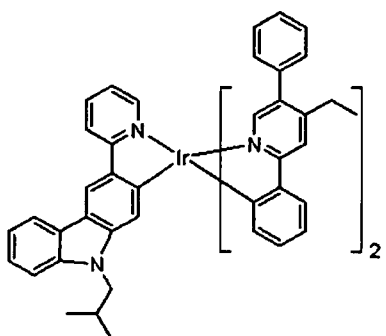
化合物 93



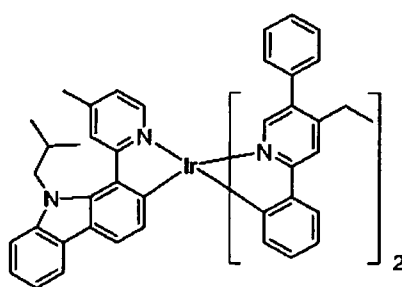
化合物 94



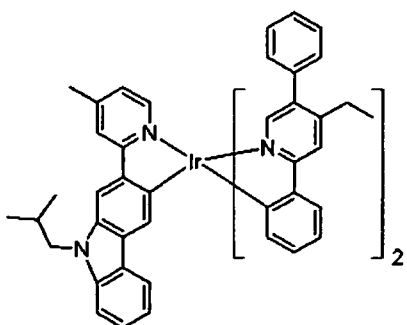
化合物 95



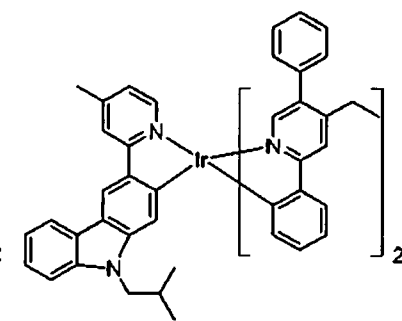
化合物 96



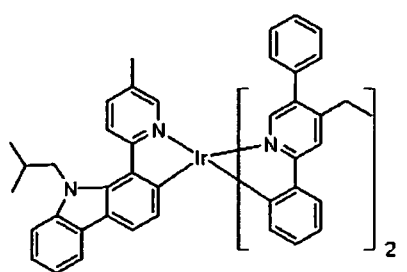
化合物 97



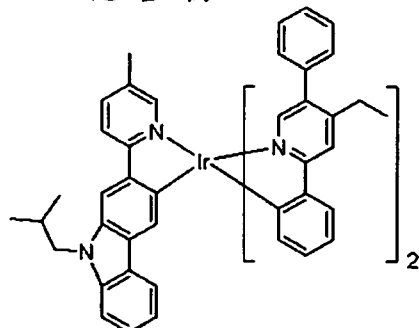
化合物 98



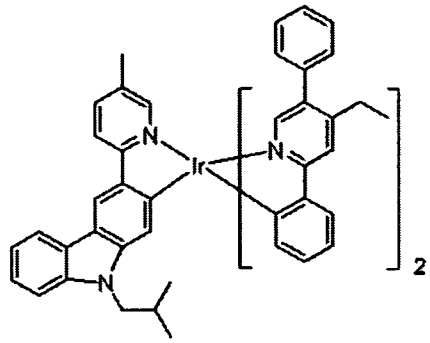
化合物 99



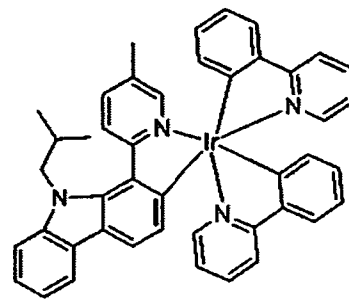
化合物 100



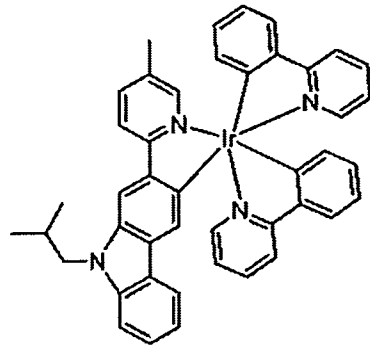
化合物 101



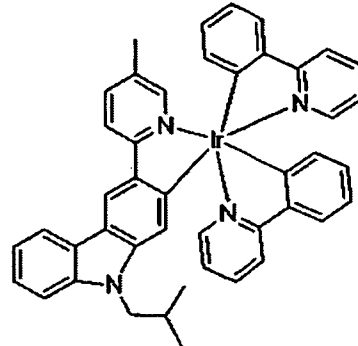
化合物 102



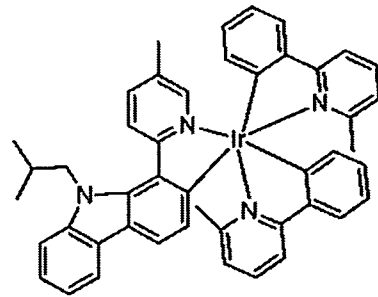
化合物 103



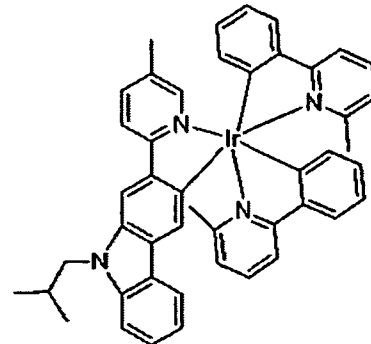
化合物 104



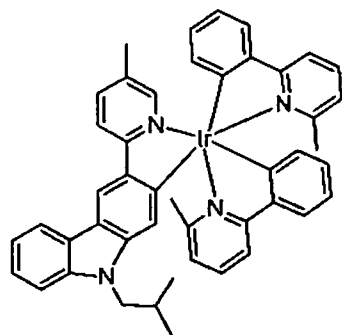
化合物 105



化合物 106



化合物 107



化合物 108

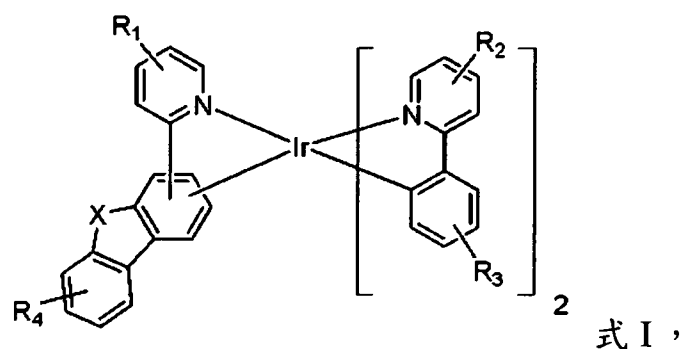
28. 一種包括有機發光器件之第一器件，其進一步包括：

陽極；

陰極；及



有機層，其佈置於該陽極與該陰極之間，該有機層進一步包括含有異配位基銱錯合物之如下式化合物：



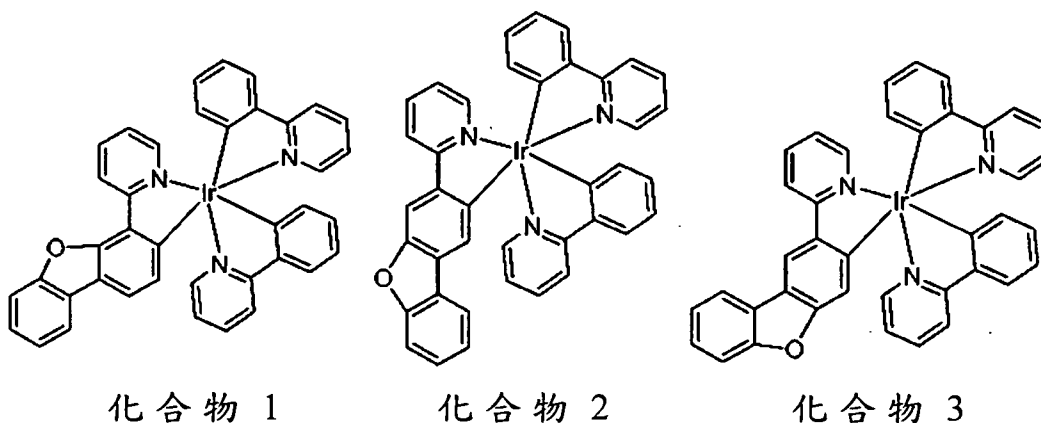
其中 X 係選自由 NR、O、S、BR、及 Se 組成之群；

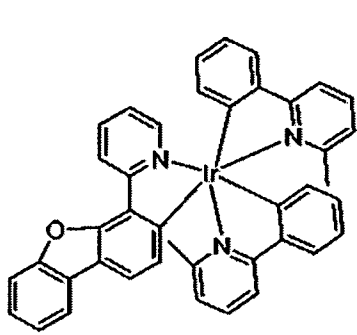
其中 R 係選自氫及烷基；

其中 R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub> 及 R<sub>4</sub> 可代表單、二、三或四取代；

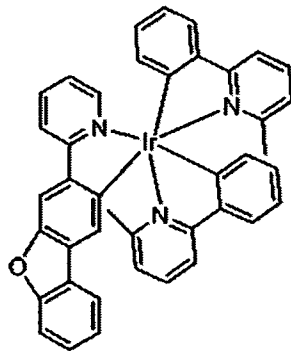
其中 R<sub>1</sub>、R<sub>2</sub>、R<sub>3</sub> 及 R<sub>4</sub> 之每一者係獨立地選自由氫、烷基及芳基組成之群。

29. 如請求項 28 之器件，其中該第一器件係消費產品。
30. 如請求項 28 之器件，其中 R<sub>2</sub> 及 R<sub>3</sub> 係獨立地選自由氫、具有 4 個或更少碳原子之烷基及在環中具有 6 個或更少原子之芳基組成之群。
31. 如請求項 28 之器件，其中該化合物係選自由下列組成之群：

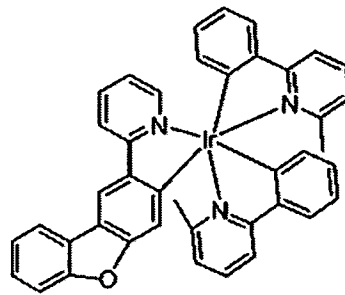




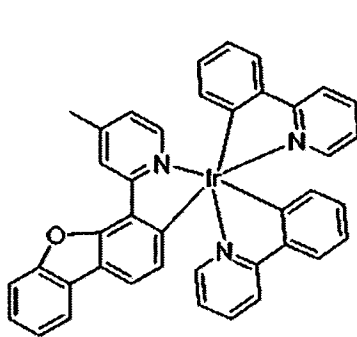
化合物 4



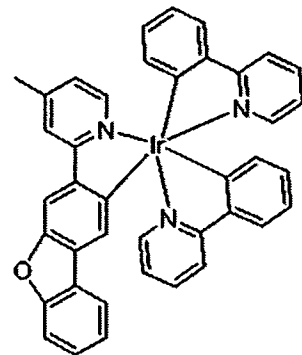
化合物 5



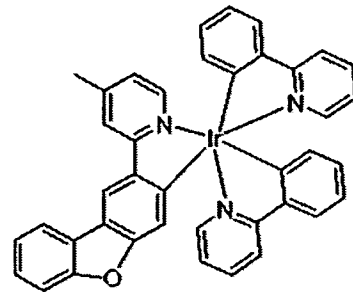
化合物 6



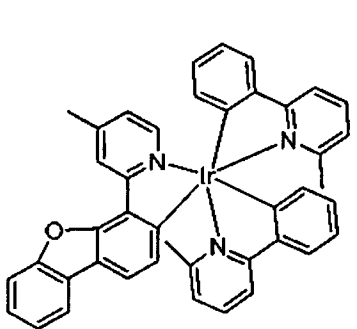
化合物 7



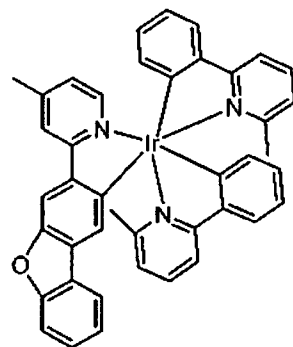
化合物 8



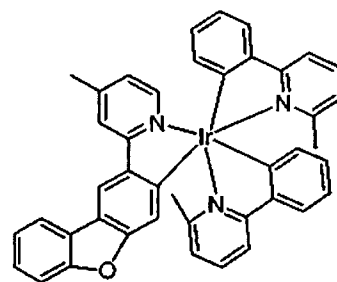
化合物 9



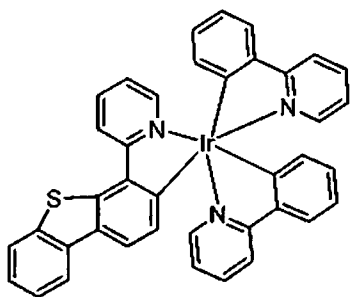
化合物 10



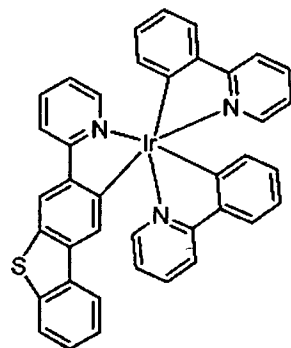
化合物 11



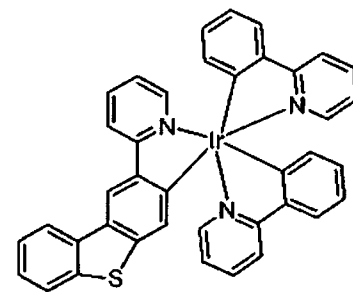
化合物 12



化合物 13

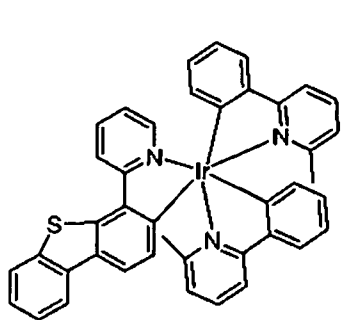


化合物 14

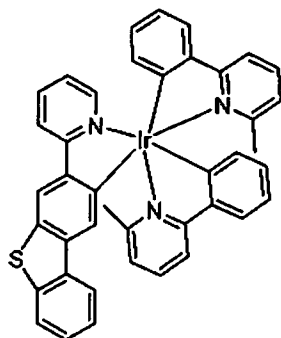


化合物 15

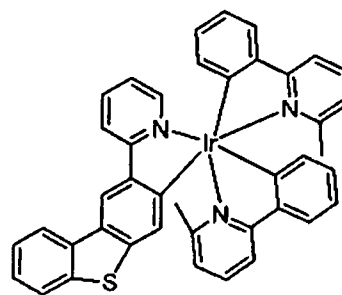




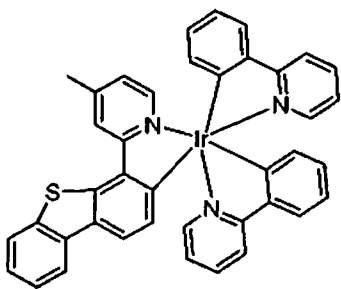
化合物 16



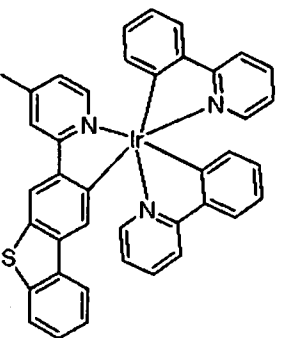
化合物 17



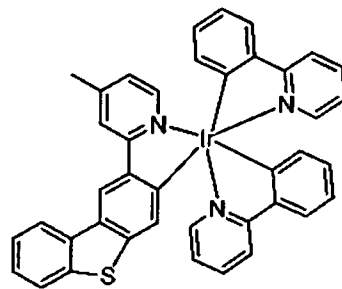
化合物 18



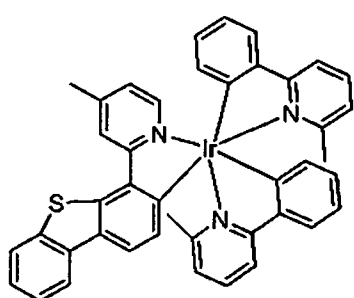
化合物 19



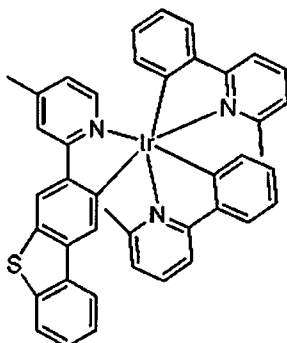
化合物 20



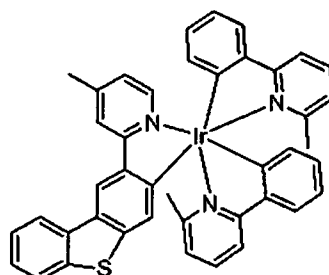
化合物 21



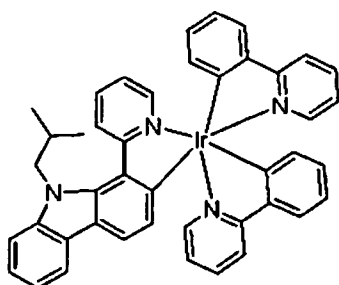
化合物 22



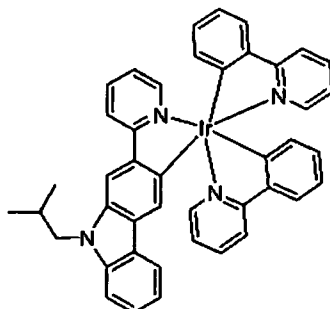
化合物 23



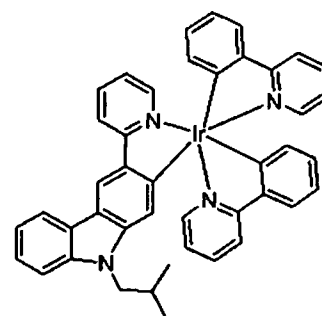
化合物 24



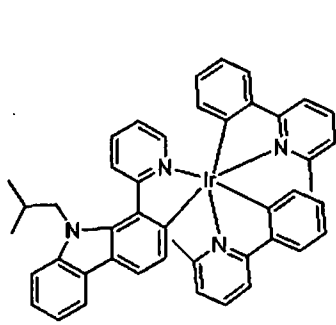
化合物 25



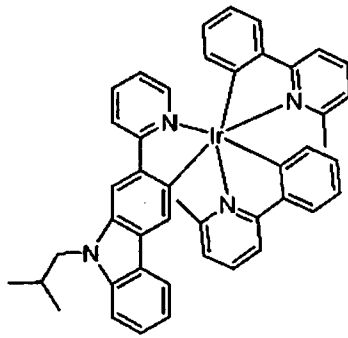
化合物 26



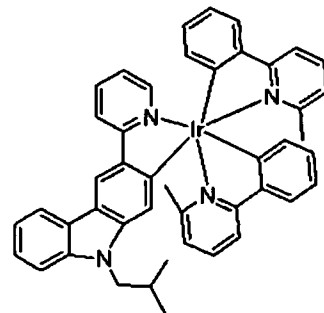
化合物 27



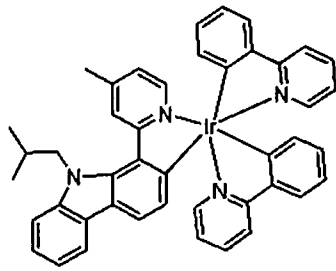
化合物 28



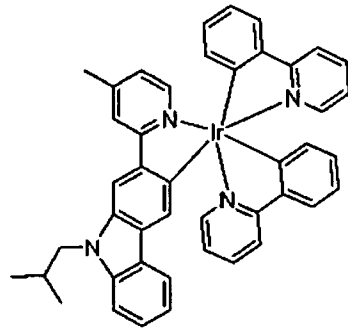
化合物 29



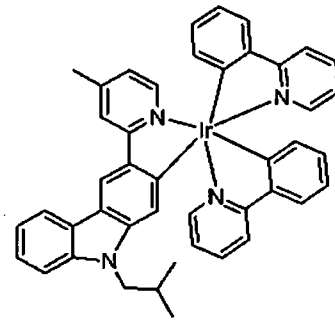
化合物 30



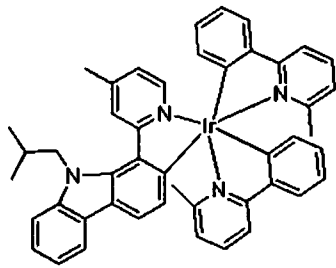
化合物 31



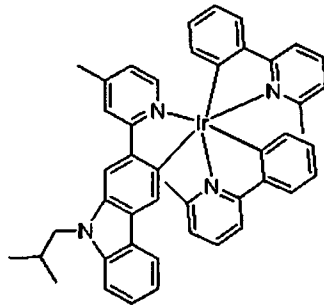
化合物 32



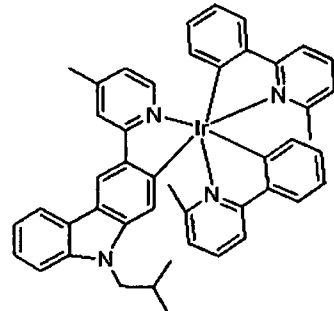
化合物 33



化合物 34

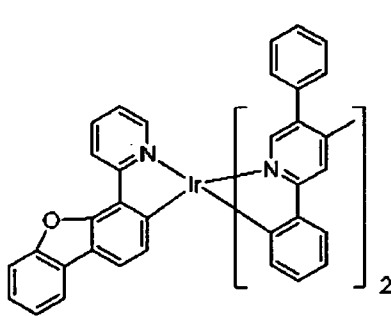


化合物 35

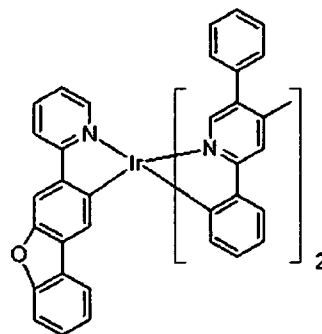


化合物 36

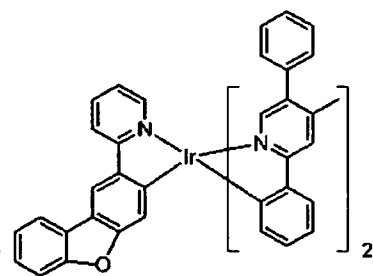
32. 如請求項28之器件，其中該化合物係選自由下列組成之群：



化合物 37



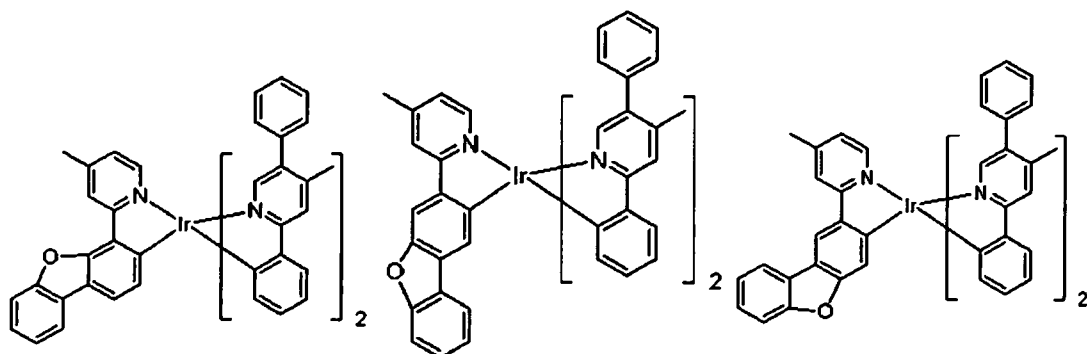
化合物 38



化合物 39

37

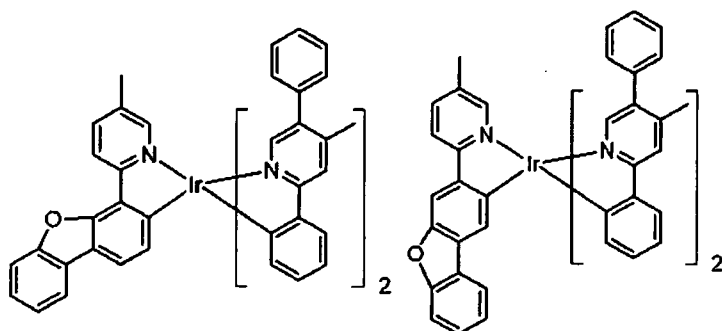




化合物 40

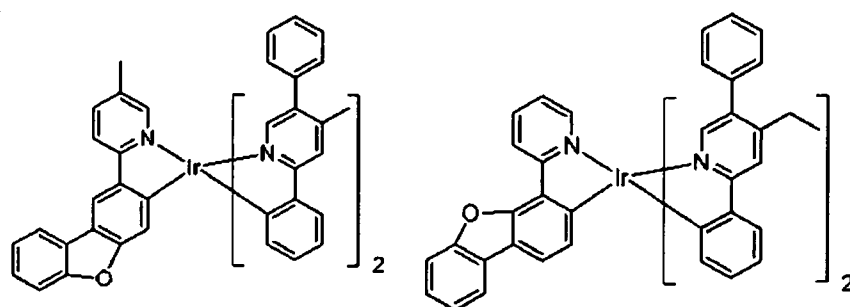
化合物 41

化合物 42



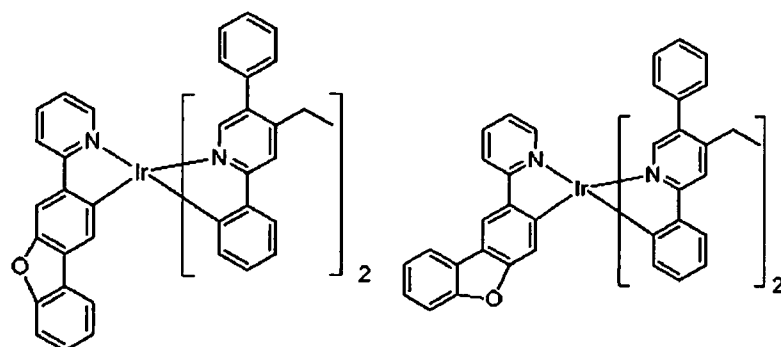
化合物 43

化合物 44



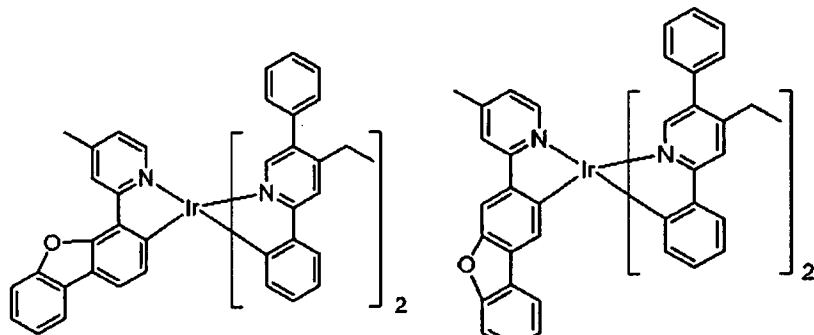
化合物 45

化合物 46



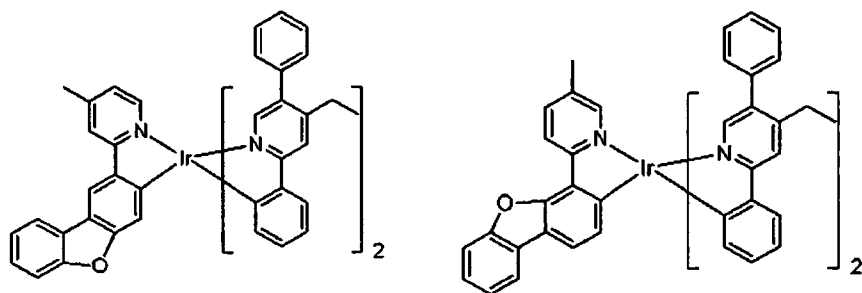
化合物 47

化合物 48



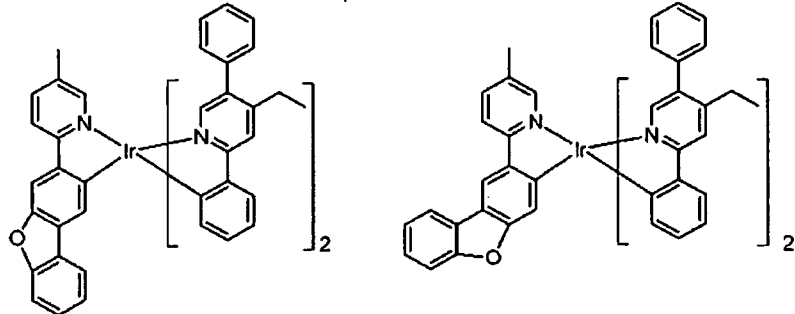
化合物 49

化合物 50



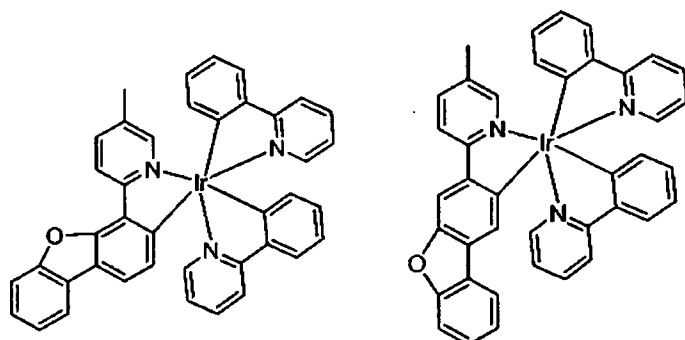
化合物 51

化合物 52



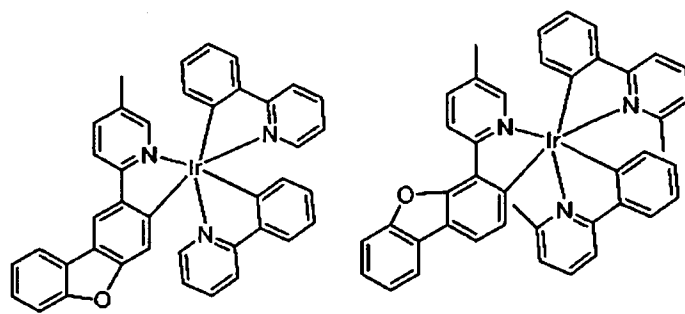
化合物 53

化合物 54



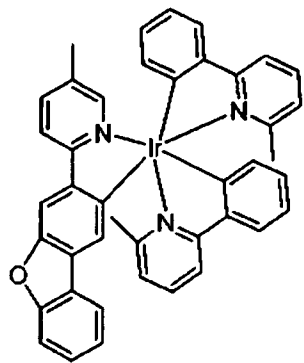
化合物 55

化合物 56

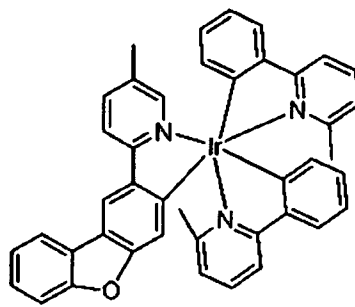


化合物 57

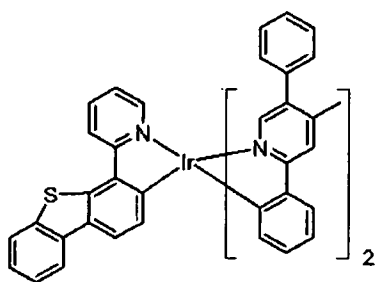
化合物 58



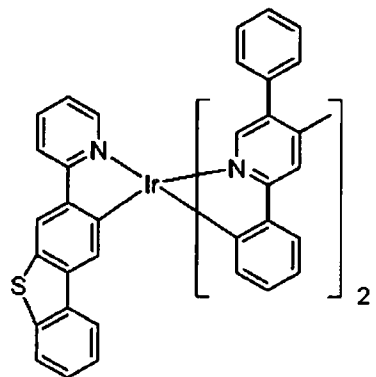
化合物 59



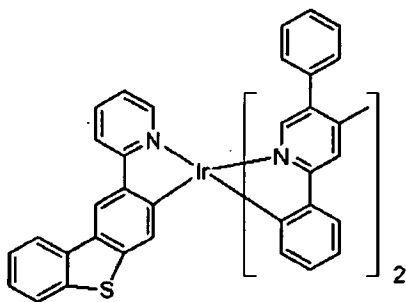
化合物 60



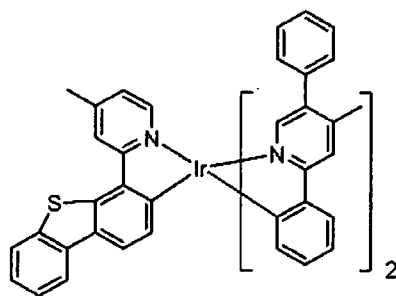
化合物 61



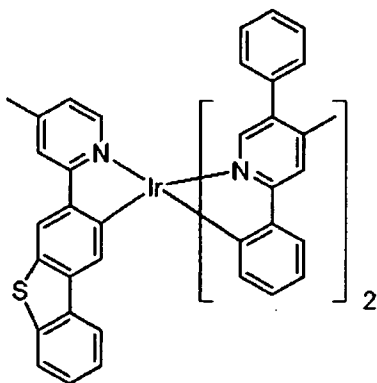
化合物 62



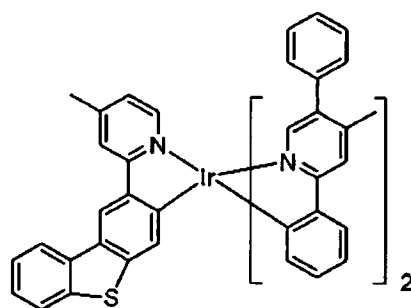
化合物 63



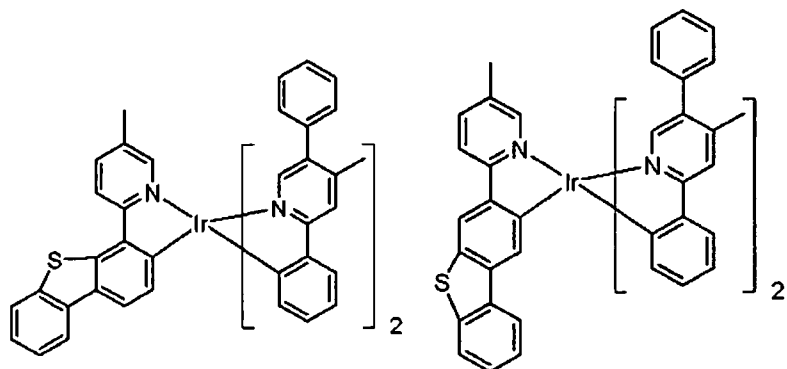
化合物 64



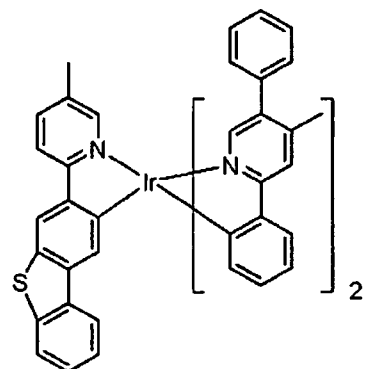
化合物 65



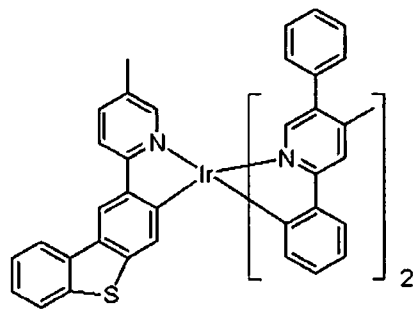
化合物 66



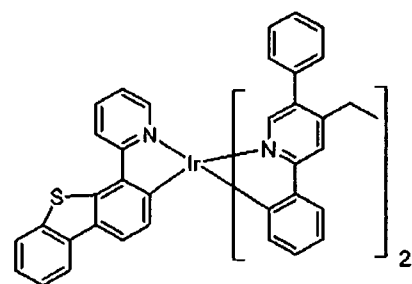
化合物 67



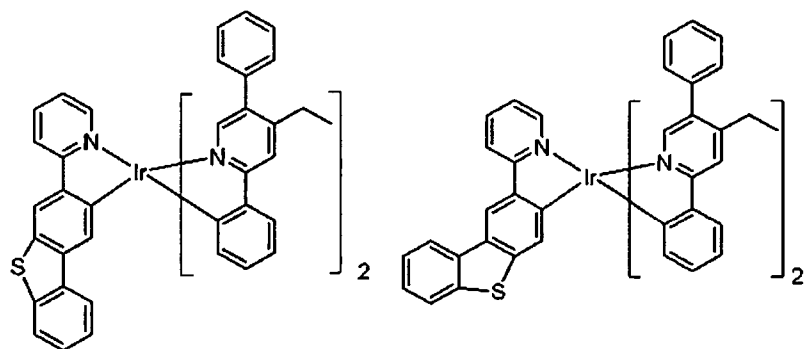
化合物 68



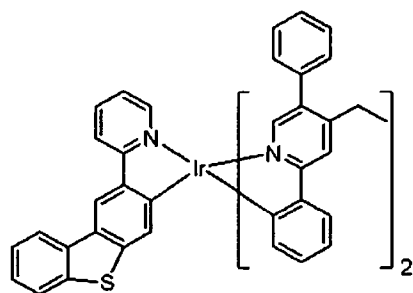
化合物 69



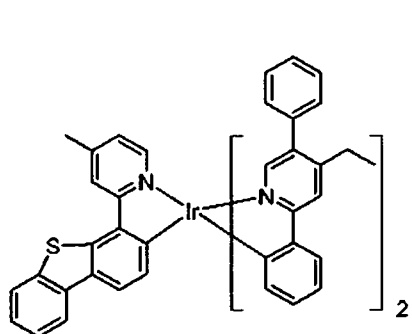
化合物 70



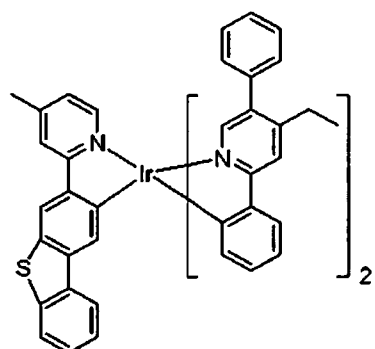
化合物 71



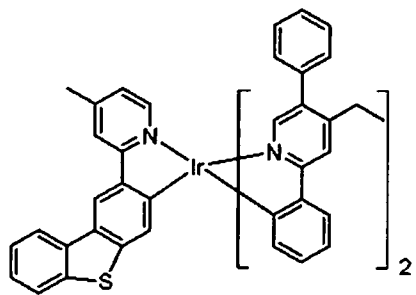
化合物 72



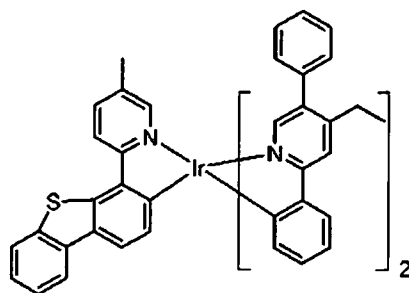
化合物 73



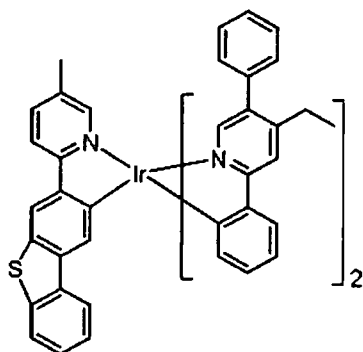
化合物 74



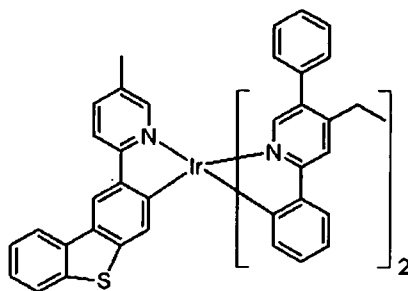
化合物 75



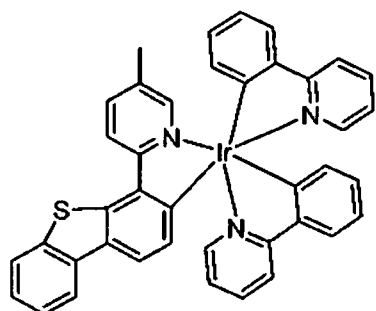
化合物 76



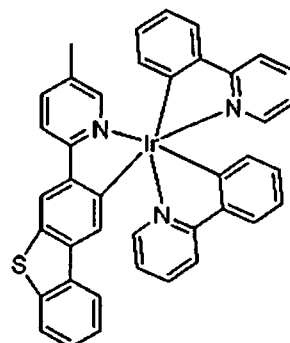
化合物 77



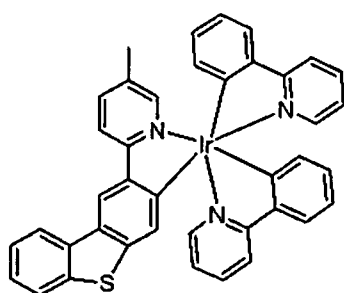
化合物 78



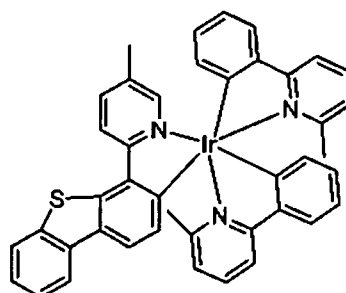
化合物 79



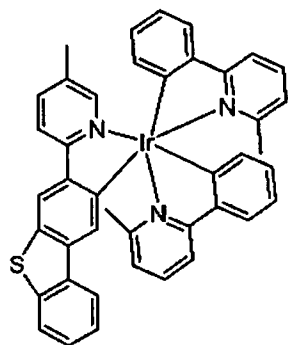
化合物 80



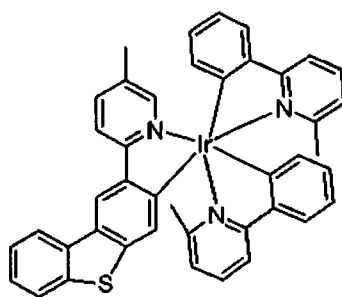
化合物 81



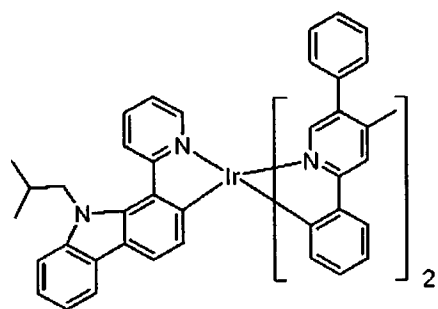
化合物 82



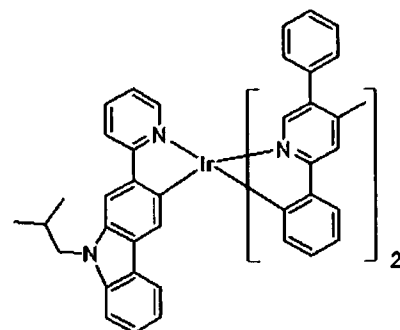
化合物 83



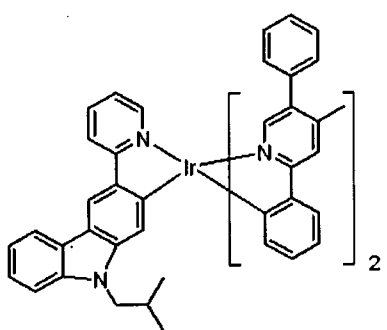
化合物 84



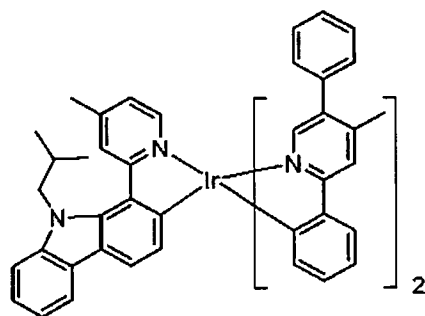
化合物 85



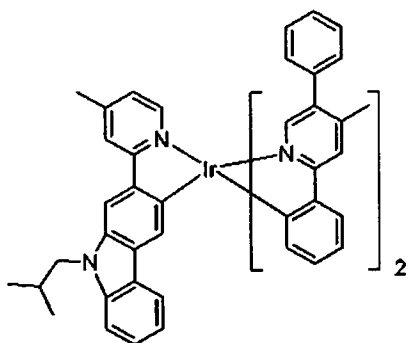
化合物 86



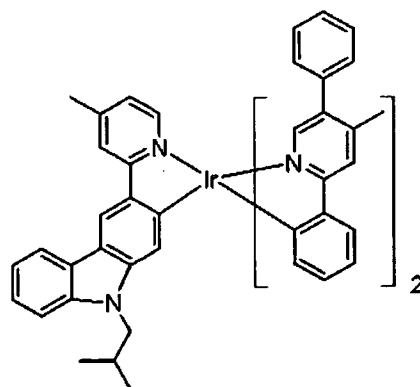
化合物 87



化合物 88

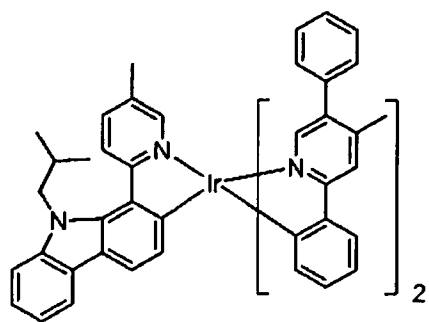


化合物 89

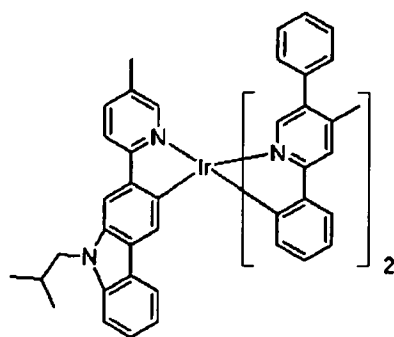


化合物 90

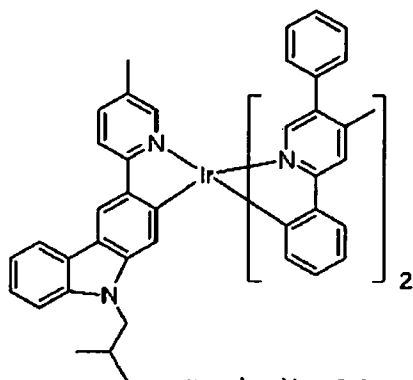




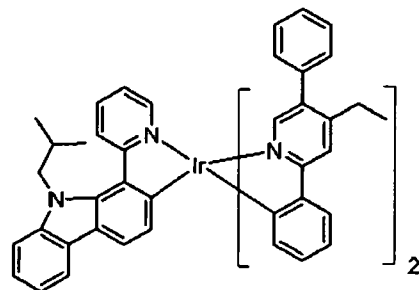
化合物 91



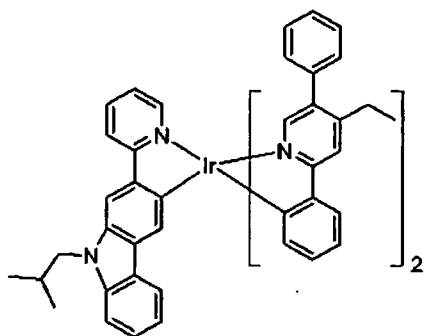
化合物 92



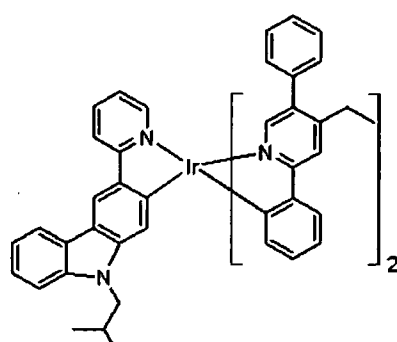
化合物 93



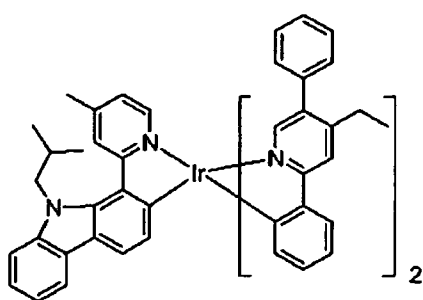
化合物 94



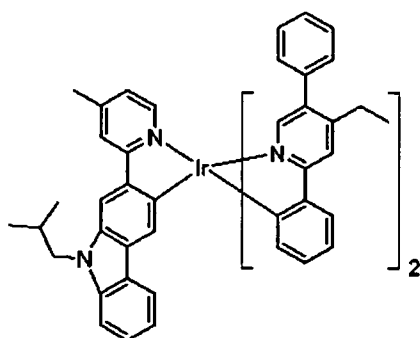
化合物 95



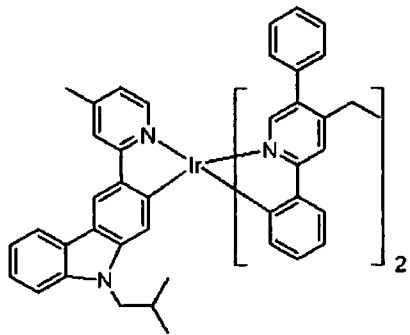
化合物 96



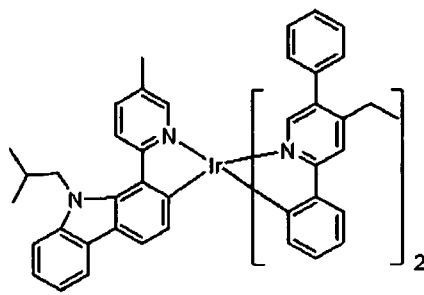
化合物 97



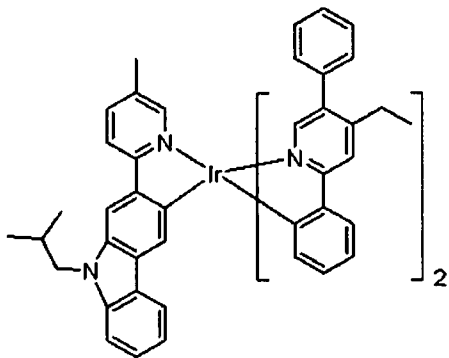
化合物 98



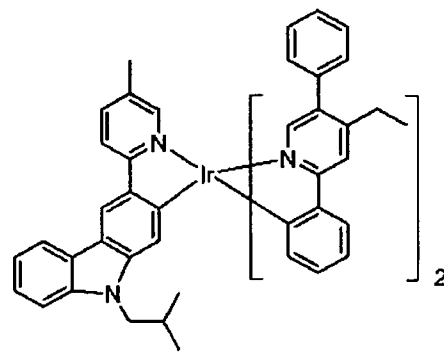
化合物 99



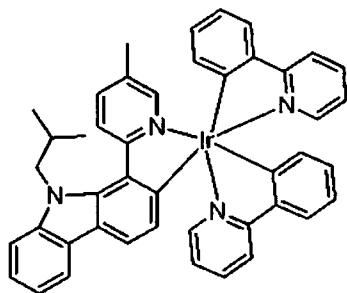
化合物 100



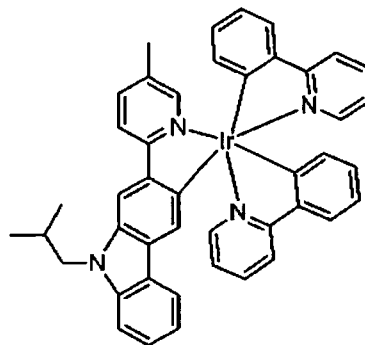
化合物 101



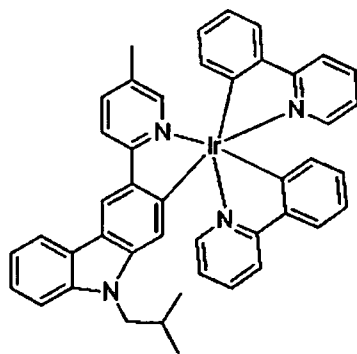
化合物 102



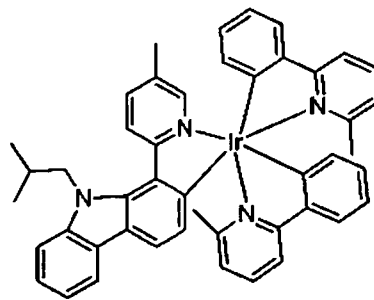
化合物 103



化合物 104

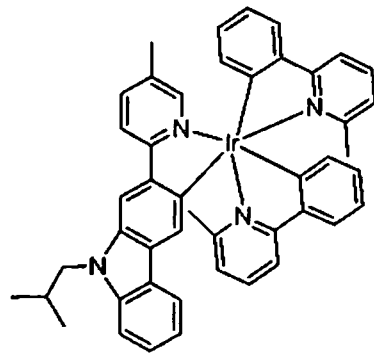


化合物 105

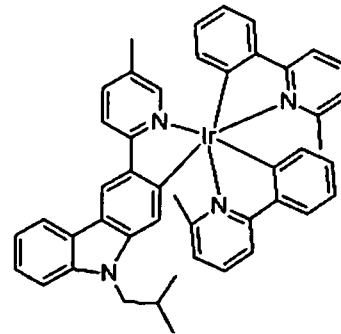


化合物 106



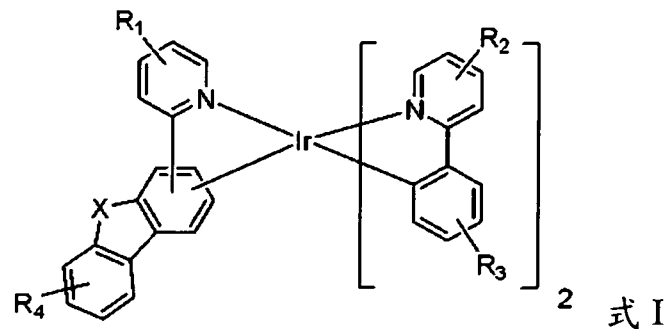


化合物 107



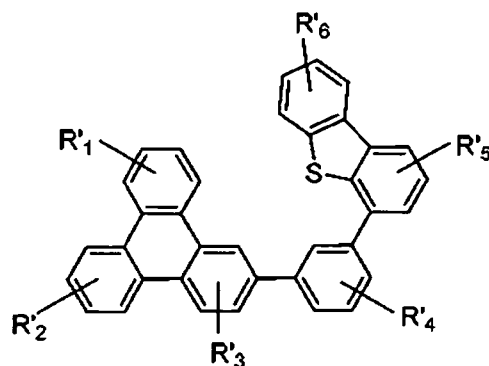
化合物 108

33. 如請求項28之器件，其中該有機層係發射層且如下式之該化合物：



係發射摻雜物。

34. 如請求項28之器件，其中該有機層進一步包括主體材料。
35. 如請求項34之器件，其中該主體材料包括聯伸三苯部分及二苯并噻吩部分。
36. 如請求項35之器件，其中該主體材料具有下式，



其中  $R'_1$ 、 $R'_2$ 、 $R'_3$ 、 $R'_4$ 、 $R'_5$ 、及  $R'_6$  可代表單、二、三、或四取代；且

其中  $R'_1$ 、 $R'_2$ 、 $R'_3$ 、 $R'_4$ 、 $R'_5$ 、及  $R'_6$  之每一者係獨立地選自由氫、烷基、及芳基組成之群。



八、圖式：

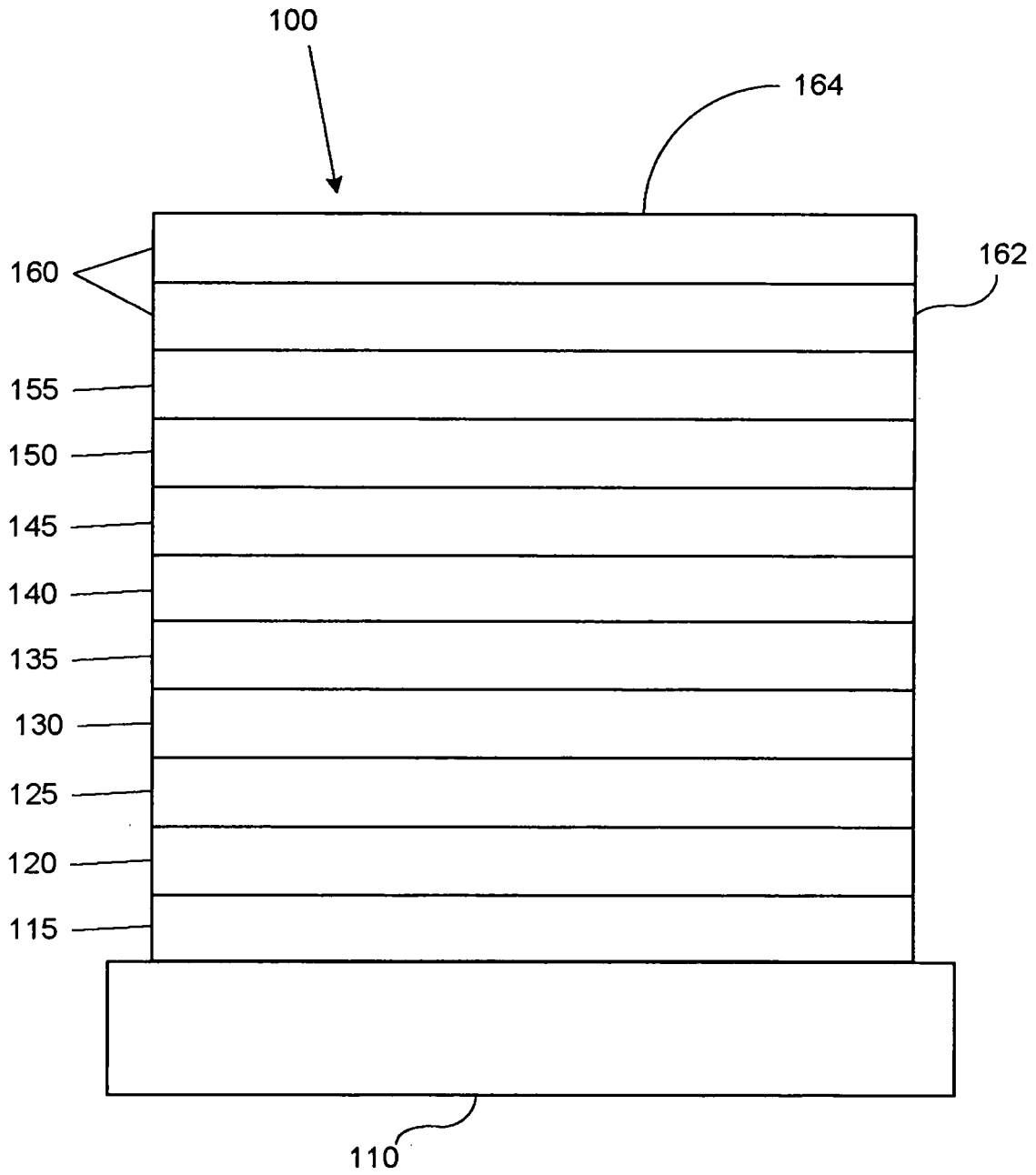


圖 1

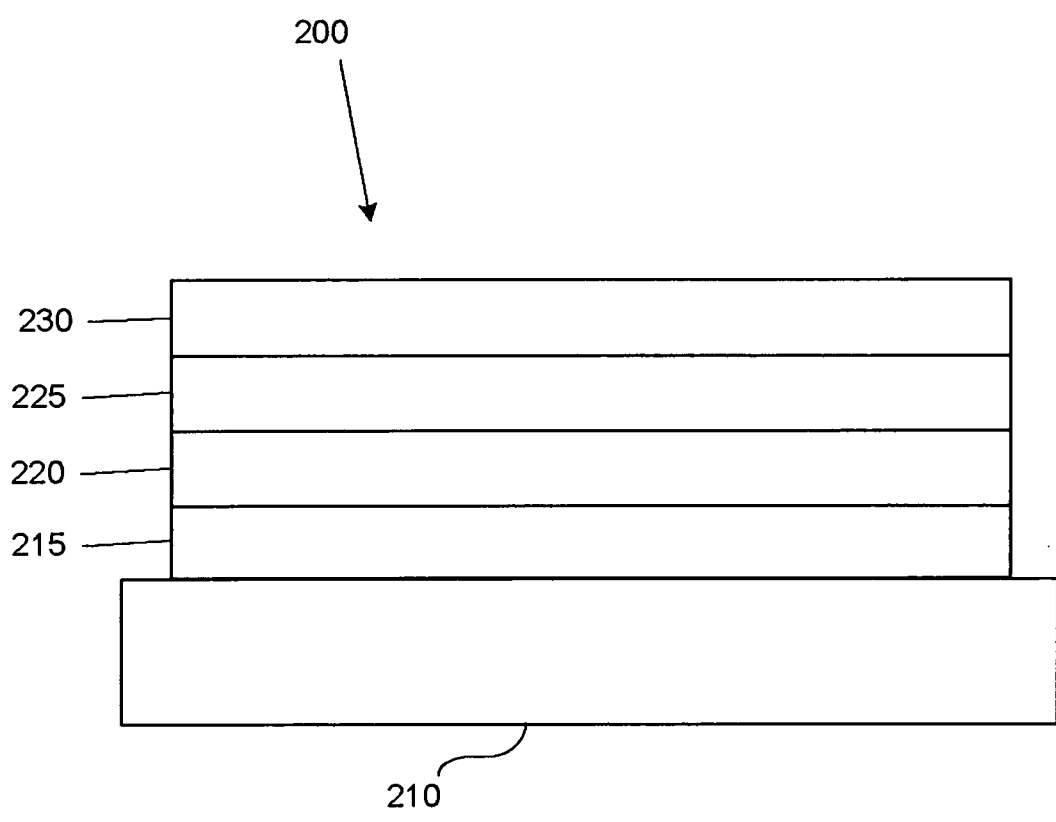


圖 2



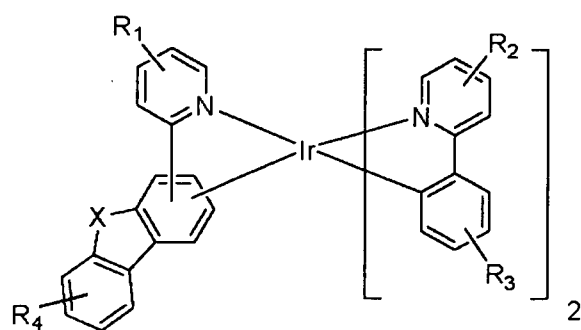


圖3