



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本

(11)公開編號：TW 201728574 A

(43)公開日：中華民國 106 (2017) 年 08 月 16 日

(21)申請案號：105121501

(22)申請日：中華民國 105 (2016) 年 07 月 07 日

(51)Int. Cl.：

*C07D251/24 (2006.01)**C07D239/26 (2006.01)**C09K11/06 (2006.01)**H01L51/50 (2006.01)**H05B33/12 (2006.01)*

(30)優先權：2016/02/04

南韓

10-2016-0014448

(71)申請人：三星 S D I 股份有限公司 (南韓) SAMSUNG SDI CO., LTD. (KR)

南韓

(72)發明人：金炳求 KIM, BYUNGKU (KR)；金亨宣 KIM, HYUNG SUN (KR)；柳銀善 YU, EUN SUN (KR)；李相信 LEE, SANGSHIN (KR)；張洵娜 JANG, YUNA (KR)；張春根 JANG, CHUNKEUN (KR)；鄭成顯 JUNG, SUNG-HYUN (KR)；鄭鎬國 JUNG, HO KUK (KR)

(74)代理人：葉璟宗；鄭婷文；詹富閔

申請實體審查：有 申請專利範圍項數：15 項 圖式數：4 共 97 頁

(54)名稱

有機化合物、有機光電元件、以及顯示元件

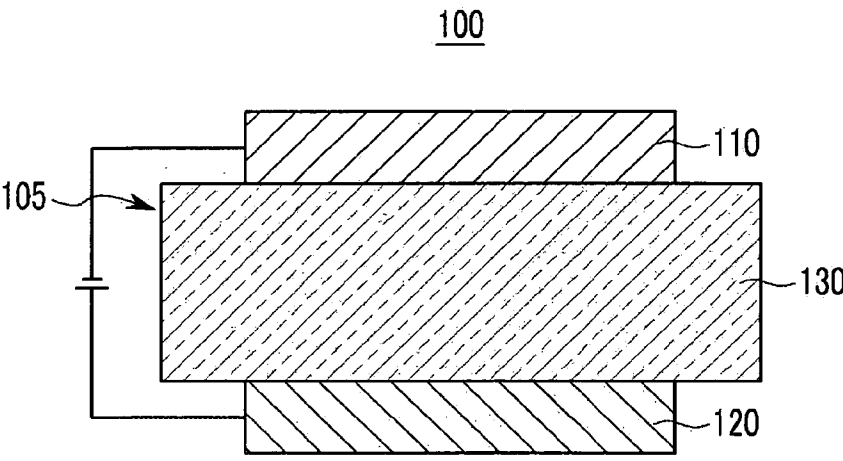
ORGANIC COMPOUND, ORGANIC OPTOELECTRONIC DEVICE, AND DISPLAY DEVICE

(57)摘要

本發明提供一種由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物、有機光電元件以及顯示元件。化學式 1 的詳情定義在說明書中。

A compound for an organic optoelectronic device represented by Chemical Formula 1, an organic optoelectronic device, and a display device are provided. Details of Chemical Formula 1 are defined in the specification.

指定代表圖：



符號簡單說明：

100 . . . 有機發光二極體

105 . . . 有機層

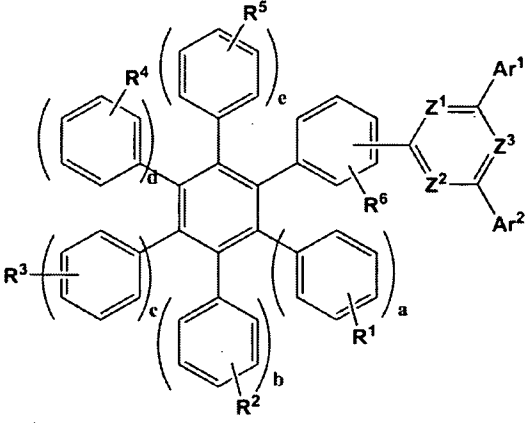
110 . . . 陰極

120 . . . 陽極

130 . . . 發射層

【圖1】

特徵化學式：





申請日: 105. 1. 7

201728574

【發明摘要】

IPC分類: C07D 251/24 (2006.01)

C07D 259/26 (2006.01)

【中文發明名稱】有機化合物、組成物、有機光電元件、以及顯示元件

C09K 11/06 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

H05B 33/12 (2006.01)

【英文發明名稱】ORGANIC COMPOUND, COMPOSITION,

ORGANIC OPTOELECTRONIC DEVICE, AND DISPLAY DEVICE

【中文】本發明提供一種由化學式1表示的有機光電元件用化合物、有機光電元件以及顯示元件。

化學式 1 的詳情定義在說明書中。

【英文】A compound for an organic optoelectronic device represented by Chemical Formula 1, an organic optoelectronic device, and a display device are provided.

Details of Chemical Formula 1 are defined in the specification.

【指定代表圖】圖1。

【代表圖之符號簡單說明】

100：有機發光二極體

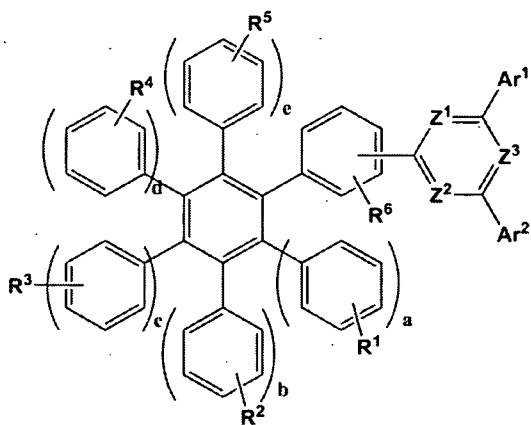
105：有機層

110：陰極

120：陽極

130：發射層

【特徵化學式】



【發明說明書】

【中文發明名稱】有機化合物、組成物、有機光電元件、以及顯示元件

【英文發明名稱】ORGANIC COMPOUND, COMPOSITION,
ORGANIC OPTOELECTRONIC DEVICE, AND DISPLAY DEVICE

【技術領域】

【0001】本發明揭示一種有機光電元件用化合物、有機光電元件以及顯示元件。

【先前技術】

【0002】有機光電元件（organic optoelectronic device）為將電能轉換成光能且反之亦然之元件。

【0003】有機光電元件可根據其驅動原理分類如下。一種為光電元件，其中由光能產生激子，分離成電子及電洞且轉移至不同電極以產生電能，且另一種為發光元件，其中將電壓或電流供應至電極以由電能產生光能。

【0004】有機光電元件的實例可為有機光電式元件（organic photoelectric device）、有機發光二極體、有機太陽電池以及有機光導鼓（organic photo conductor drum）。

【0005】其中，有機發光二極體（organic light emitting diode, OLED）近來已由於對平板顯示器的需求增加而引起關注。有機發光二極體藉

由施加電流至有機發光材料而將電能轉換成光且具有在陽極與陰極之間插入有機層的結構。在本文中，有機層可包括發射層及視需要輔助層，且輔助層可為例如選自電洞注入層、電洞傳輸層、電子阻擋層、電子傳輸層、電子注入層以及電洞阻擋層中的至少一者以用於改良有機發光二極體的效率及穩定性。

【0006】有機發光二極體的效能可受有機層的特徵影響，且其中可主要受有機層有機材料的特徵影響。

【0007】尤其需要開發一種能夠增加電洞及電子遷移率且同時增加電化學穩定性的有機材料，以使得有機發光二極體可應用於大尺寸的平板顯示器。

【發明內容】

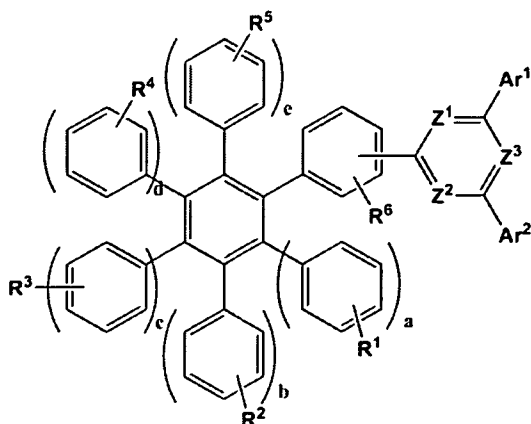
【0008】一實施例提供一種有機光電元件用化合物，所述化合物能夠實現具有高效率及長壽命的有機光電元件。

【0009】另一實施例提供一種有機光電元件，所述有機光電元件包含所述有機光電元件用化合物。

【0010】又一實施例提供一種顯示元件，所述顯示元件包括所述有機光電元件。

【0011】根據一實施例，一種有機光電元件用化合物由化學式 1 表示。

[化學式 1]



【0012】在化學式 1 中，

R¹ 至 R⁵ 獨立地為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C4 烷基或苯基，

Z¹ 至 Z³ 獨立地為 CR^a 或 N，

Z¹ 至 Z³ 中的至少兩者為 N，

R^a 及 R⁶ 為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C12 芳基，

Ar¹ 及 Ar² 獨立地為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C18 芳基，

a、b、c、d 以及 e 獨立地為整數 0 或 1，

4 ≤ a+b+c+d+e ≤ 5，且

所述「經取代」是指至少一個氫經氖、C1 至 C4 烷基或 C6 至 C12 芳基置換。

【0013】根據另一實施例，有機光電元件包括面向彼此的陽極及陰極、在所述陽極與所述陰極之間的至少一個有機層，其中所述有機層包含所述有機光電元件用化合物。

【0014】根據又一實施例，提供一種包括所述有機光電元件的顯示元

件。

【0015】可獲得一種具有高效率及長壽命的有機光電元件。

【圖式簡單說明】

【0016】

圖 1 至圖 4 為顯示根據實施例的有機發光二極體的剖視圖。

【實施方式】

【0017】在下文中詳細闡述本發明的實施例。然而，此等實施例為示例性的，本發明不限於此且本發明由申請專利範圍的範圍所界定。

【0018】在本說明書中，當不另外提供定義時，術語「經取代」是指經氫、鹵素、羥基、胺基、經取代或未經取代的 C1 至 C30 胺基、硝基、經取代或未經取代的 C1 至 C40 矽烷基、C1 至 C30 烷基、C1 至 C10 烷基矽烷基、C6 至 C30 芳基矽烷基、C3 至 C30 環烷基、C3 至 C30 雜環烷基、C6 至 C30 芳基、C6 至 C30 雜芳基、C1 至 C20 烷氧基、氟基、C1 至 C10 三氟烷基（例如三氟甲基）或氰基取代以代替取代基或化合物的至少一個氫。

【0019】在本說明書中，當不另外提供特定定義時，「雜」是指在一種化合物或取代基中包含 1 至 3 個選自由 N、O、S、P 以及 Si 組成的群組中的雜原子且其餘為碳。

【0020】在本說明書中，當不另外提供定義時，「烷基」是指脂族烴基。烷基可為無任何雙鍵或三鍵的「飽和烷基」。

【0021】烷基可為 C1 至 C30 烷基。更具體而言，烷基可為 C1 至 C20 烷基或 C1 至 C10 烷基。舉例而言，C1 至 C4 烷基可在烷基鏈中具有 1 至 4 個碳原子，其可選自甲基、乙基、丙基、異丙基、正丁基、異丁基、第二丁基及第三丁基。

【0022】烷基的特定實例可為甲基、乙基、丙基、異丙基、丁基、異丁基、第三丁基、戊基、己基、環丙基、環丁基、環戊基、環己基等。

【0023】在本說明書中，「芳基」是指包含至少一個烴芳族部分的基團，且

烴芳族部分的所有元素具有形成共軛的 p 軌道，例如苯基、萘基等，

兩個或更多個烴芳族部分可藉由 σ 鍵連接，且可為例如聯苯基、聯三苯基、聯四苯基等，且

兩個或更多個烴芳族部分直接或間接稠合以提供非芳族稠合環。舉例而言，其可為萘基。

【0024】芳基可包含單環、多環或稠合環多環（亦即，共用相鄰碳原子對的環）官能基。

【0025】舉例而言，「雜芳基」可指包含至少一個選自 N、O、S、P 及 Si 的雜原子且其餘為碳的芳基。兩個或更多個雜芳基藉由 σ 鍵直接連接，或當雜芳基包含兩個或更多個環時，所述兩個或更多個環可稠合。當雜芳基為稠合環時，每個環可包含 1 至 3 個雜原子。

【0026】雜芳基的特定實例可為吡啶基、嘧啶基、吡嗪基、噻嗪基、三嗪基、喹啉基、異喹啉基等。

【0027】更具體而言，經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基及/或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基可為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的蒽基、經取代或未經取代的菲基、經取代或未經取代的稠四苯基、經取代或未經取代的芘基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的對聯三苯基、經取代或未經取代的間聯三苯基、經取代或未經取代的屈基、經取代或未經取代的聯伸三苯基、經取代或未經取代的芘基、經取代或未經取代的蒽基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的茛基、經取代或未經取代的呋喃基、經取代或未經取代的噻吩基、經取代或未經取代的吡咯基、經取代或未經取代的吡啶基、經取代或未經取代的咪唑基、經取代或未經取代的三唑基、經取代或未經取代的噁唑基、經取代或未經取代的噻唑基、經取代或未經取代的噁二唑基、經取代或未經取代的噻二唑基、經取代或未經取代的吡啶基、經取代或未經取代的嘧啶基、經取代或未經取代的吡嗪基、經取代或未經取代的三嗪基、經取代或未經取代的苯並呋喃基、經取代或未經取代的苯並噻吩基、經取代或未經取代的苯並咪唑基、經取代或未經取代的吲哚基、經取代或未經取代的喹啉基、經取代或未經取代的異喹啉基、經取代或未經取代的喹唑啉基、經取代或未經取代的喹噁啉基、經取代或未經取代的蔡啶基、經取代或未經取代的苯並噁嗪基、經取代或未經取代的苯並噻嗪基、經取代或未經取代的吡啶基、經取代或未經取代的啡嗪基、經取代或未經取代的啡噻嗪基、經取代或未經取代的啡噁嗪基、經取代或未經取代的二苯並呋喃基、或經取代或未經取代的二苯並噻吩基、或其組合，但不限於此。

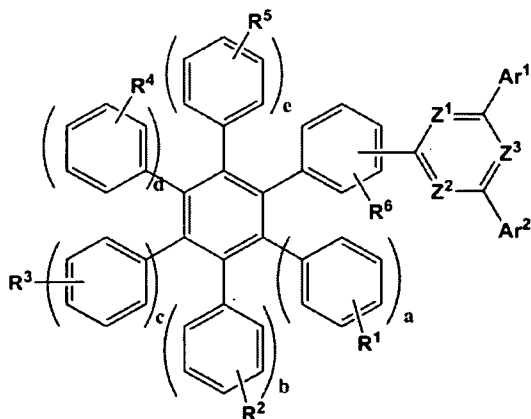
【0028】在本說明書中，電洞特徵是指當施加電場時貢獻出電子以形成電洞的能力，且在陽極中形成的電洞可由於根據最高佔用分子軌道（highest occupied molecular orbital，HOMO）能級的傳導特徵而易於注入發射層中且在發射層中傳輸。

【0029】此外，電子特徵是指當施加電場時接受電子的能力，且在陰極中形成的電子可由於根據最低未佔用分子軌道（lowest unoccupied molecular orbital，LUMO）能級的傳導特徵而易於注入發射層且在發射層中傳輸。

【0030】在下文中，闡述一種根據實施例的有機光電元件用化合物。

【0031】根據實施例的有機光電元件用化合物由化學式 1 表示。

[化學式 1]



【0032】在化學式 1 中，

R¹ 至 R⁵ 獨立地為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C4 烷基或苯基，

Z¹ 至 Z³ 獨立地為 CR^a 或 N，

Z¹ 至 Z³ 中的至少兩者為 N，

R^a 及 R^6 為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C12 芳基，

Ar^1 及 Ar^2 獨立地為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C18 芳基，

a 、 b 、 c 、 d 以及 e 獨立地為整數 0 或 1，

$4 \leq a+b+c+d+e \leq 5$ ，且

「經取代」是指至少一個氫經氖、C1 至 C4 烷基或 C6 至 C12 芳基置換。

【0033】由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物具有經四個或更多個苯基取代的大體積芳族基部分經由苯基連接基團與含氮 6 員環連接的結構。

【0034】含氮 6 員環在元件中發揮使電子易於注入或傳輸的作用，且大體積芳族基部分發揮幫助電洞注入及傳輸或增加化合物的玻璃轉移溫度的作用，抑制分子當中的相互作用且因此增加發光效率且降低化合物相對於分子量的沈積溫度。因此，由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物顯示出當用於形成元件中的膜時，含氮 6 員環的改良填充物具有較大體積芳族基部分相對較扁平的結構，且因此易於電子在元件中的注入及傳輸。因此，由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物可在特別用於形成電子注入輔助層時因改良的電子傳輸特徵而降低元件的驅動電壓且因電子快速注入至發射層中而增加發光效率。另一方面，當化合物與具有改良的電洞注入及傳輸的材料混合形成發射層時，驅動電壓因改良的電子傳輸而降低，且可因藉由大體積芳族基部分減

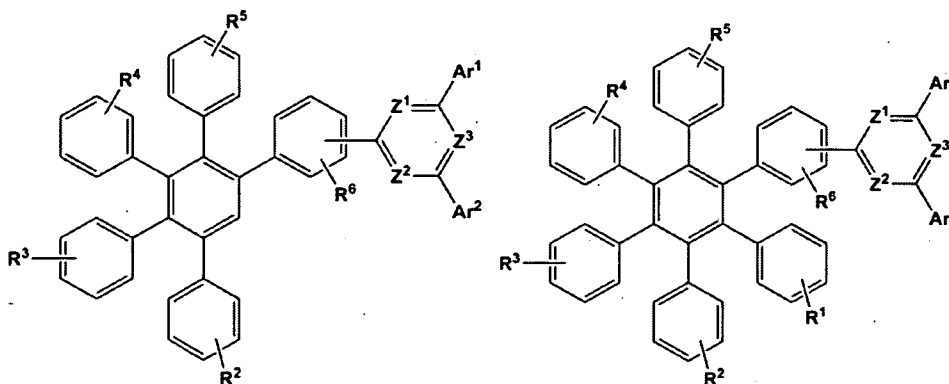
少分子當中的相互作用而獲得改良的發光效率。此外，由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物具有改良的溶解度且因此可有效應用於沈積及溶液方法以及可因大體積芳族基部分的球形結構而降低沈積溫度。

【0035】尤其，經由連接基團與大體積芳族基連接的含氮 6 員環可發揮增加鍵間預旋轉及降低結晶度的作用且亦因大體積芳族基及連接基團而增加分子的溶解度，其可實現溶液方法。

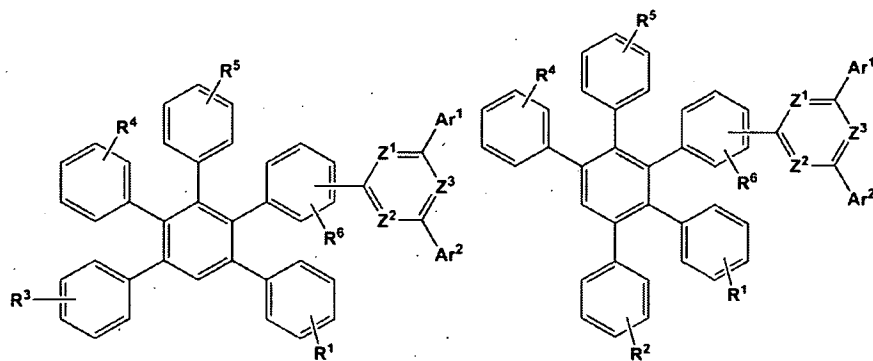
【0036】此外，連接基團藉由苯基固定且因此縮短含氮 6 員環與大體積芳族基之間的距離，因而可獲得更具球形的分子且因此降低沈積溫度並產生改良的耐熱穩定性。

【0037】化學式 1 可根據大體積芳族基部分中苯基的數目而由化學式 1-I 至化學式 1-IV 中的一者表示。

[化學式 1-I] [化學式 1-II]



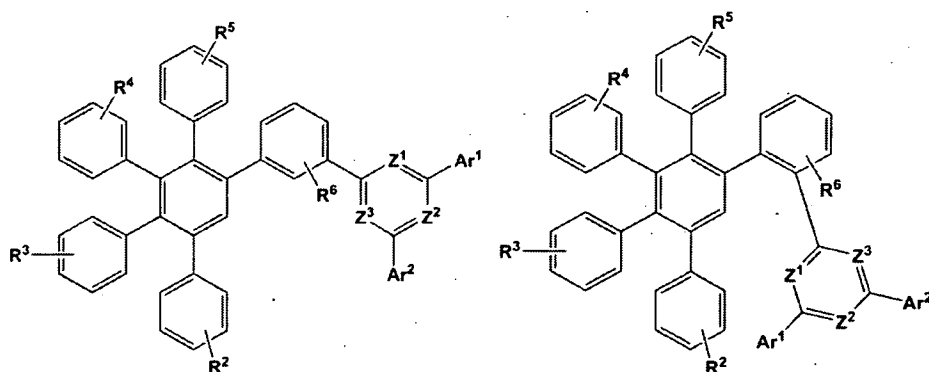
[化學式 1-III] [化學式 1-IV]



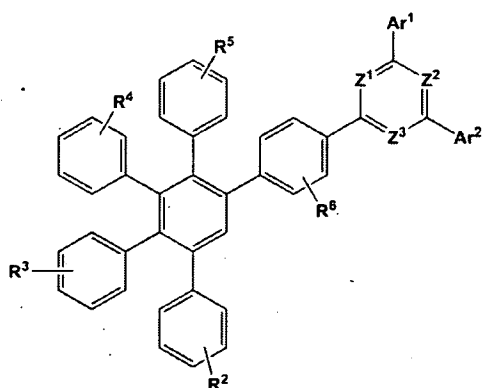
【0038】在化學式 1-I 至化學式 1-IV 中， R^1 至 R^6 、 Z^1 至 Z^3 、 Ar^1 以及 Ar^2 與上文所述相同。

【0039】化學式 1-I 可根據在間位、鄰位或對位連接的連接基團而由化學式 1-Ia、化學式 1-Ib 或化學式 1-Ic 中的一者表示。

[化學式 1-Ia] [化學式 1-Ib]

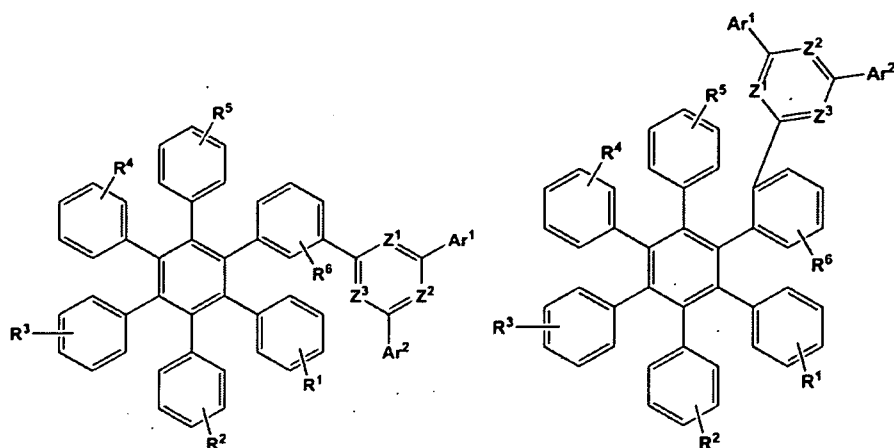


[化學式 1-Ic]

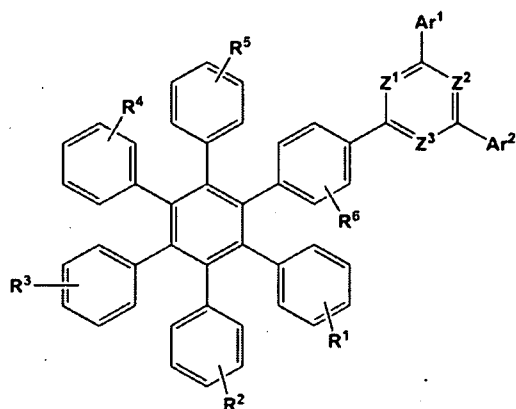


【0040】化學式 1-II 亦可根據在間位、鄰位或對位連接的連接基團而由化學式 1-IIa、化學式 1-IIb 或化學式 1-IIc 中的一者表示。

[化學式 1-IIa] [化學式 1-IIb]



[化學式 1-IIc]



【0041】在本發明的實例中，有機光電元件用化合物可由化學式 1-Ia、化學式 1-Ib、化學式 1-Ic、化學式 1-IIa 或化學式 1-IIc 表示。

【0042】在化學式 1-Ia、化學式 1-Ib、化學式 1-Ic、化學式 1-IIa、化學式 1-IIb 以及化學式 1-IIc 中， R^1 至 R^6 、 Z^1 至 Z^3 、 Ar^1 以及 Ar^2 與上文所述相同。

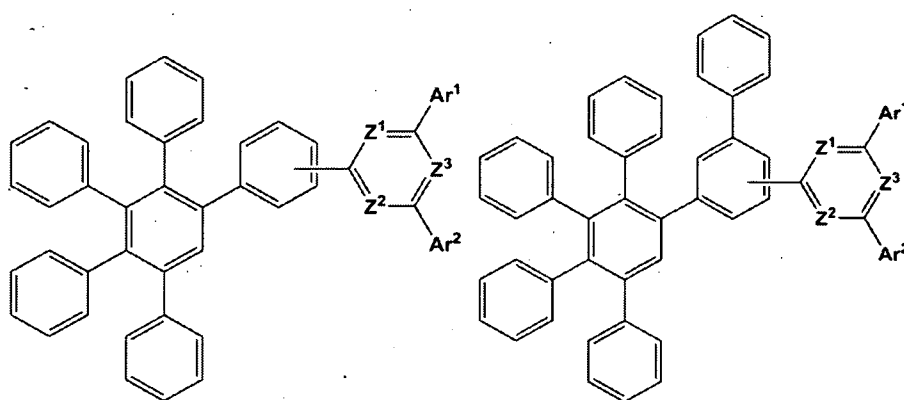
【0043】在本發明的實施例中， R^1 至 R^5 獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C4 烷基或苯基。具體而言， R^1 至 R^5 可為氫、甲基、乙基、丙基、異丙基或苯基，例如 R^1 至 R^5 全部可為氫。

【0044】 R^6 可為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取

代或未經取代的 C6 至 C12 芳基。具體而言， R^6 可為氫或經取代或未經取代的 C6 至 C12 芳基，且更具體而言可為氫、苯基、聯苯基，例如氫或苯基。

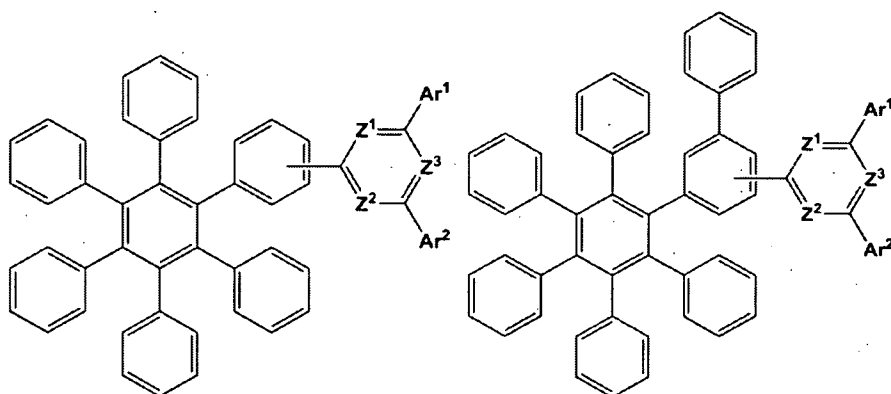
【0045】如更特定的實例，化學式 1-I 可由化學式 1-Id 或化學式 1-Ie 表示，

[化學式 1-Id] [化學式 1-Ie]



且化學式 1-II 可由化學式 1-IIId 或化學式 1-IIe 表示。

[化學式 1-IIId] [化學式 1-IIe]



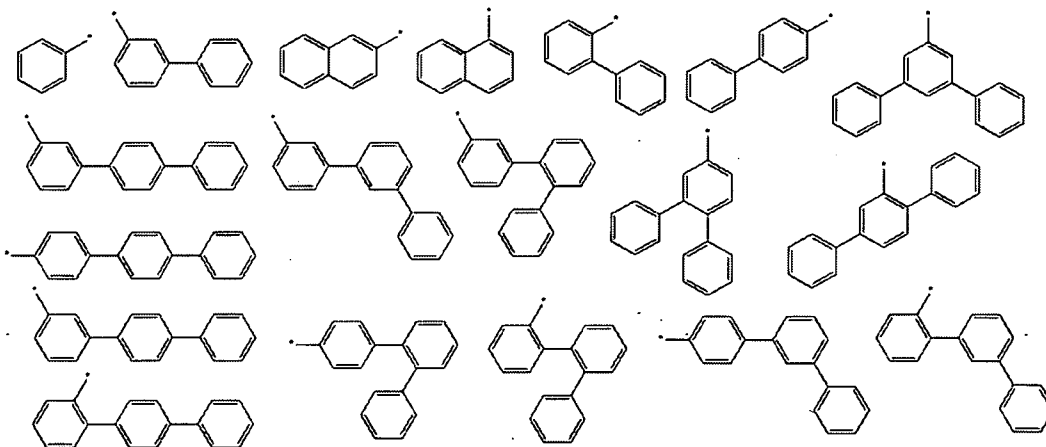
【0046】在本發明的一個實例中，有機光電元件用化合物可由化學式 1-Id、化學式 1-Ie 或化學式 1-IIId 表示。

【0047】在化學式 1-Id、化學式 1-Ie、化學式 1-IIId 以及化學式 1-IIe 中， Z^1 至 Z^3 、 Ar^1 以及 Ar^2 與上文所述相同。

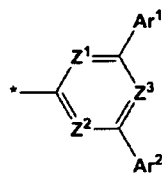
【0048】在本發明的實施例中， Z^1 至 Z^3 中的至少兩者可為 N。舉例而言， Z^1 及 Z^3 可為 N 或 Z^1 及 Z^2 為 N 以提供嘧啶基，且 Z^1 至 Z^3 可為 N 以提供三嗪基。

【0049】在本發明的實施例中， Ar^1 及 Ar^2 可獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C18 芳基。具體而言， Ar^1 及 Ar^2 可獨立地為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的聯三苯基或經取代或未經取代的萘基，例如群組 1 中的取代基中的一者。

[群組 1]

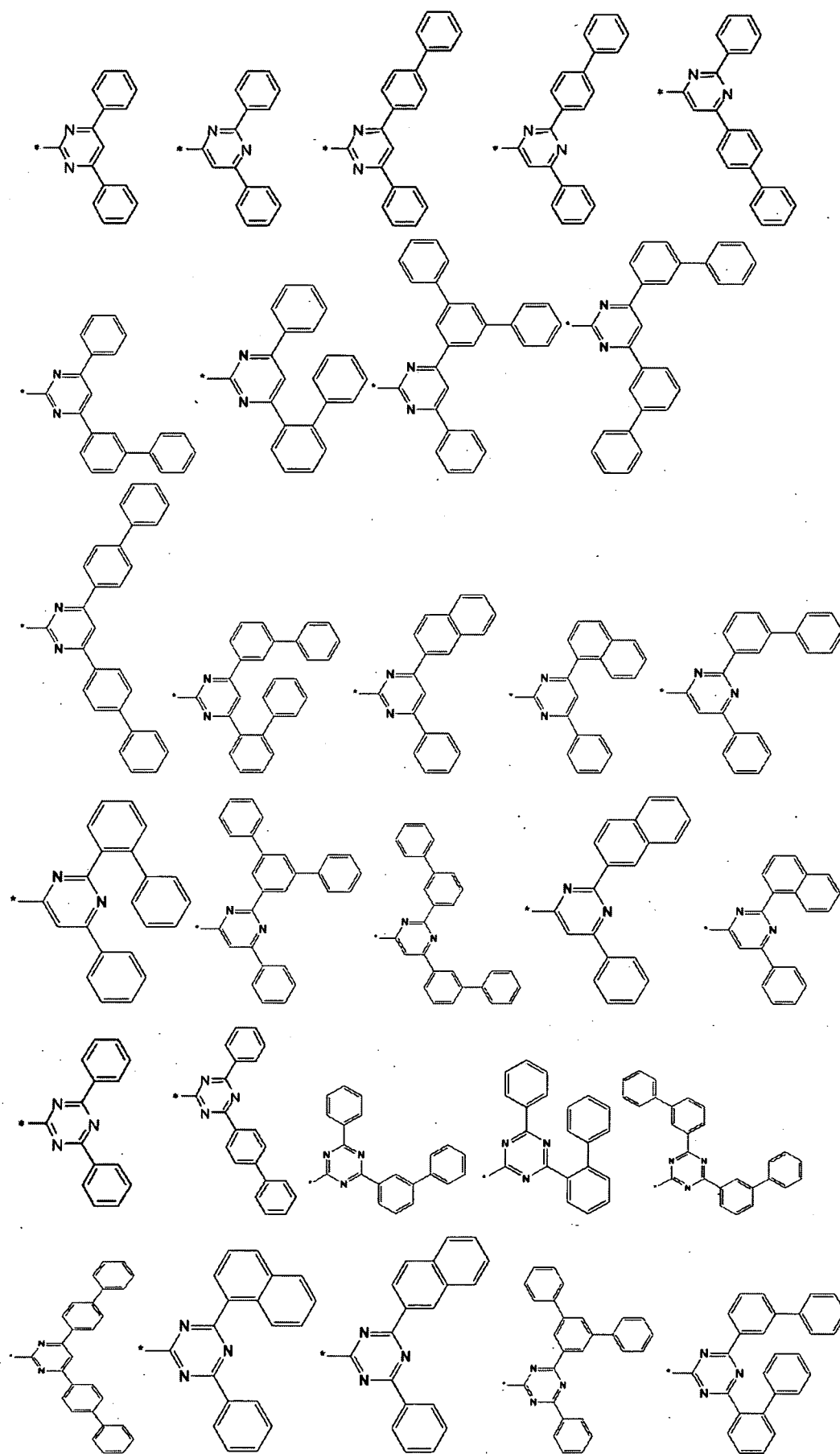


【0050】在群組 1 中，* 為連接點。



【0051】在化學式 1 中， Ar^1 及 Ar^2 的特定實例可選自群組 A 的取代基。

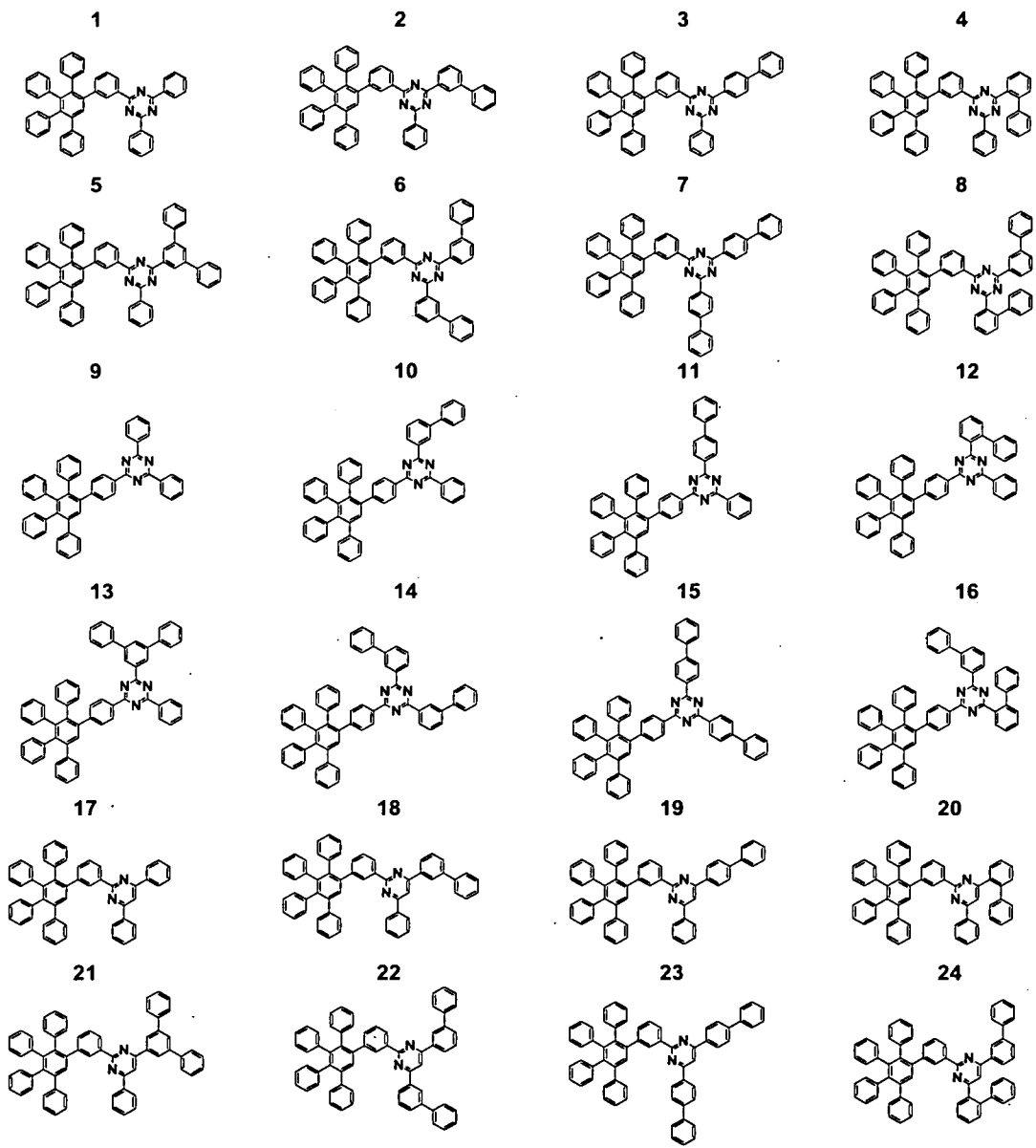
[群組 A]

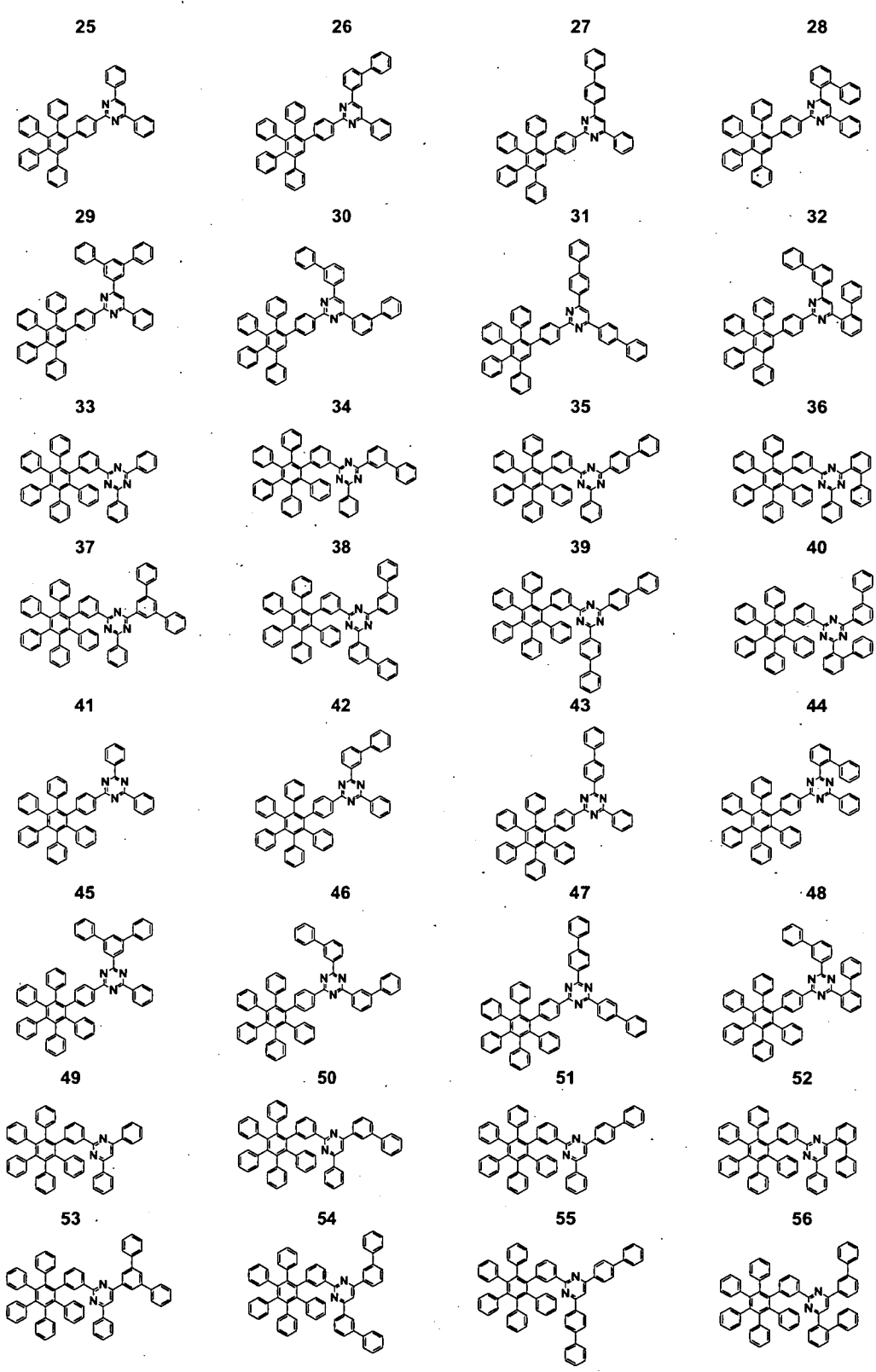


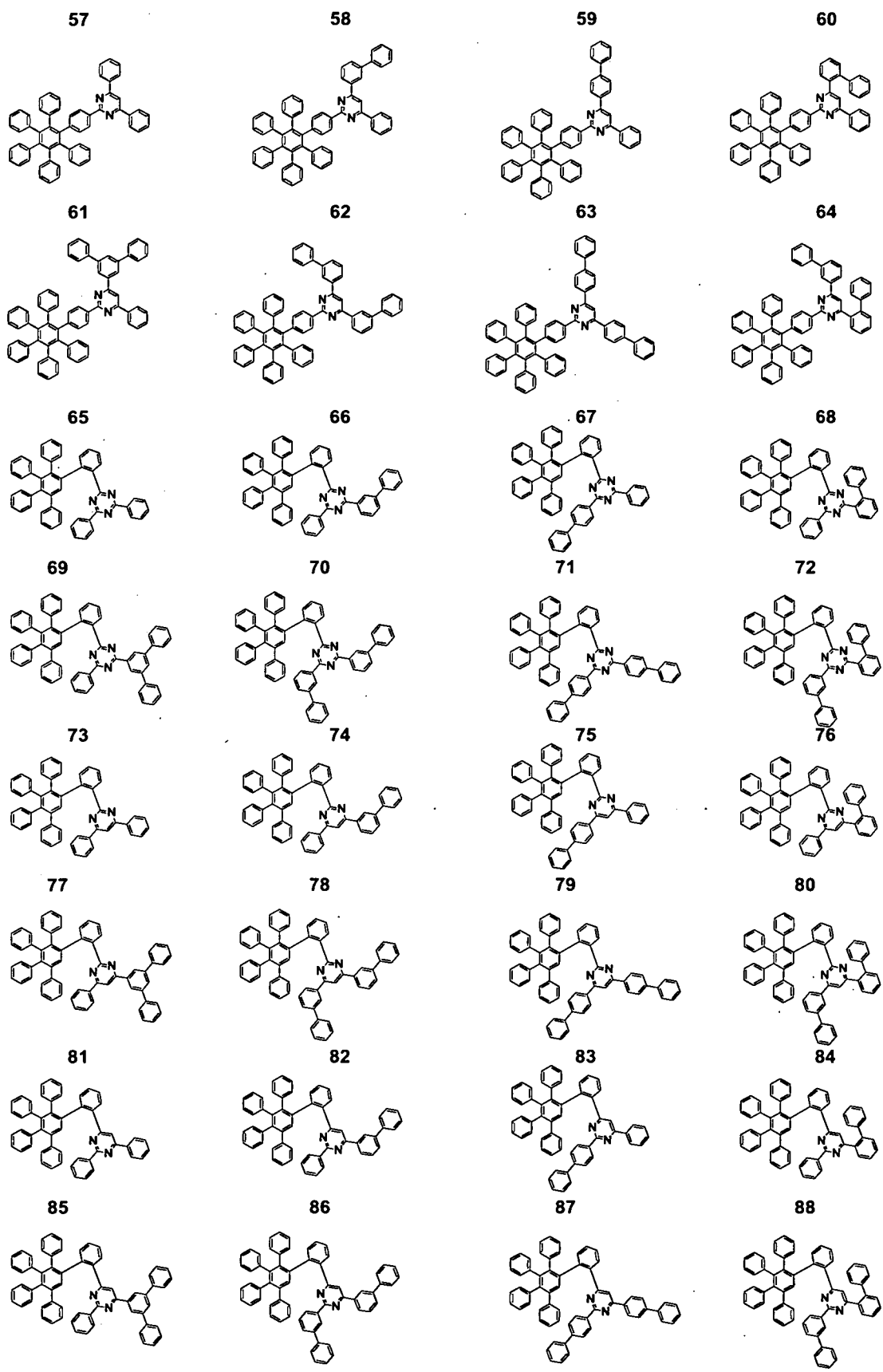
【0052】 在群組 A 中，*為連接點。

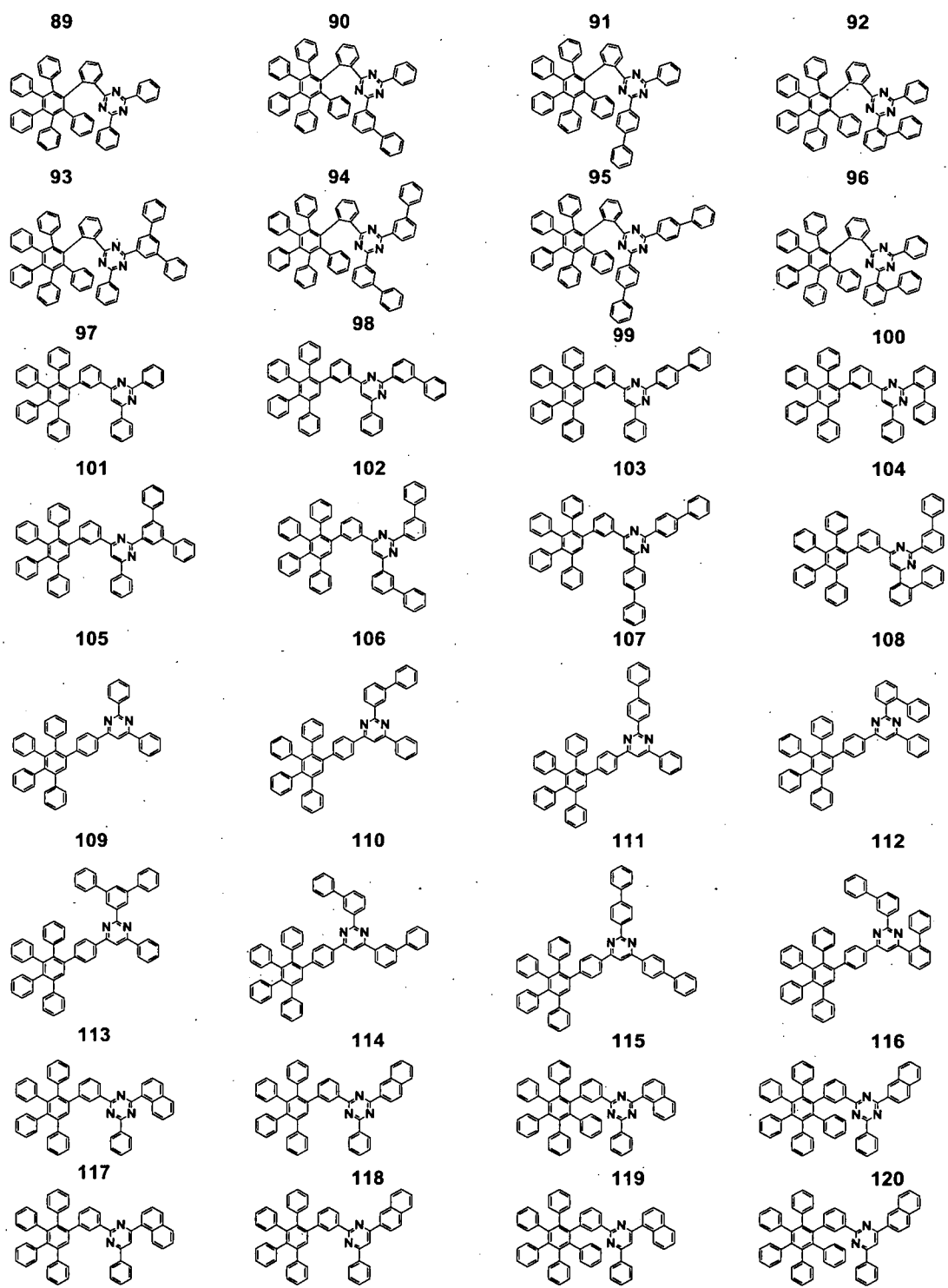
【0053】 有機光電元件用化合物可例如選自群組 2 的化合物，但不限於此。

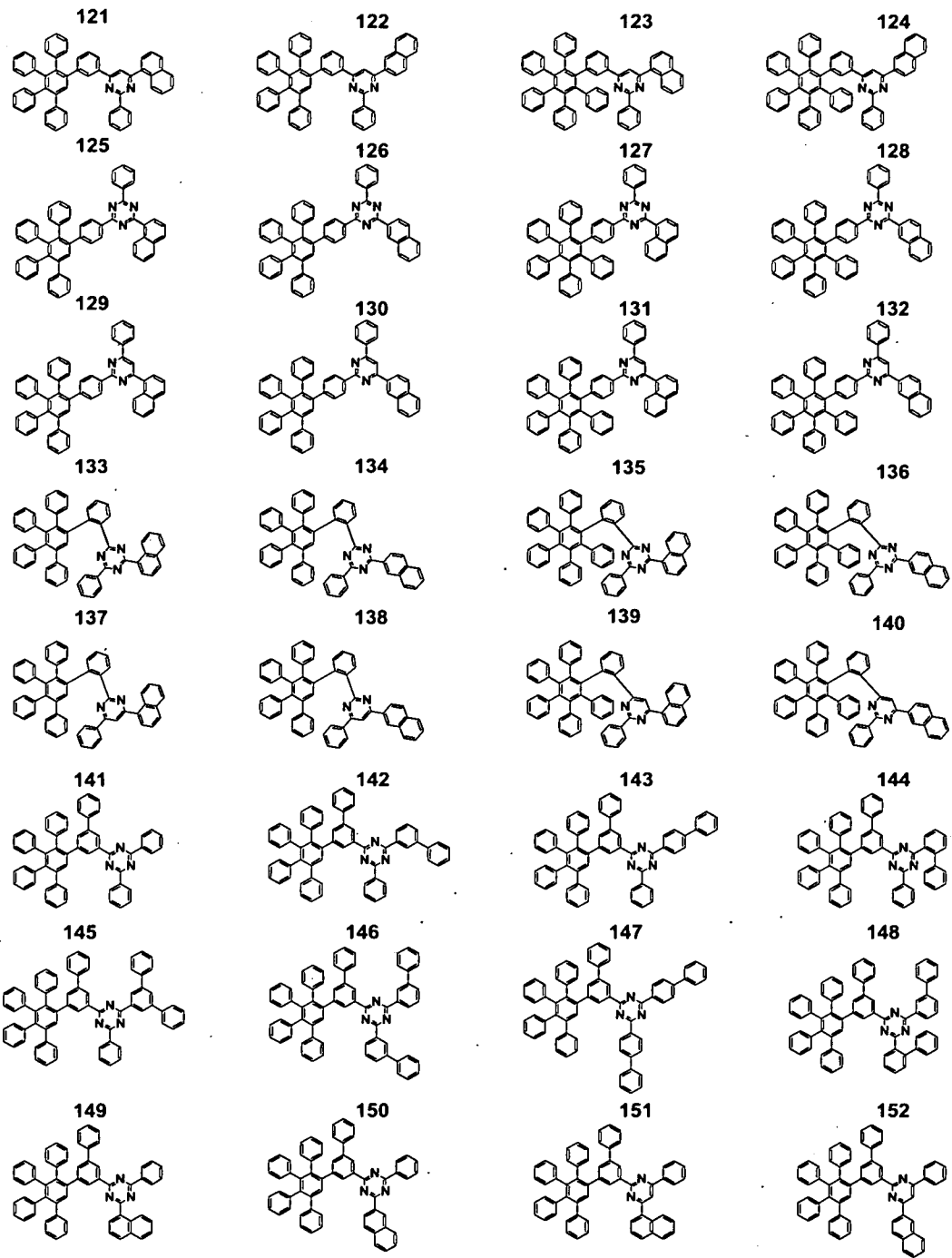
[群組 2]











【0054】在下文中，闡述根據另一實施例的有機光電元件。

【0055】根據另一實施例的有機光電元件包括面向彼此的陽極及陰極以及在陽極與陰極之間的至少一個有機層，且有機層包含所述有機光電元件用化合物。

【0056】更具體而言，有機層可包括發射層、電子傳輸層以及電洞傳

輸層，且電子傳輸層或發射層包含由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物。

【0057】此外，電子傳輸層可更包括鄰近於發射層的電子傳輸輔助層，且有有機光電元件用化合物可包含在電子傳輸輔助層中。

【0058】有機光電元件可藉由包括包含有機光電元件用化合物的有機層而實現低驅動電壓、高效率、高亮度以及長壽命。

【0059】圖 1 至圖 4 為根據本發明的實施例的有機發光二極體 100、200、300 以及 400 的示意性剖視圖。在下文中，參照圖 1，根據本發明的實施例的有機發光二極體的結構及其製造方法如下。

【0060】有機發光二極體 100 具有陰極 110、有機層 130 以及陽極 120 依次堆疊的結構。

【0061】基板可更安置在陰極 110 下或陽極 120 上。基板可為一般有機發光二極體所用的基板且可為具有強機械強度、熱穩定性、透明性、表面光滑度、容易處理以及防水性的玻璃基板或透明塑膠基板。

【0062】陽極 120 可藉由沈積或濺鍍陽極材料於基板上而形成。陽極材料可選自具有高功函數而使得電洞注入容易的材料。陽極 120 可為反射電極、透射反射電極或透射電極。陽極材料可使用氧化銦錫 (indium tin oxide, ITO)、氧化銦鋅 (indium zinc oxide, IZO)、氧化錫 (SnO_2)、氧化鋅 (ZnO) 等。或，其可為金屬，例如鎂 (Mg)、鋁 (Al)、鋁-鋰 (Al-Li)、鈣 (Ca)、鎂-銦 (Mg-In) 或鎂-銀 (Mg-Ag)。

【0063】陽極 120 可具有單層或兩層或更多層的多層式結構。

【0064】有機層 105 安置於陽極 120 上。

【0065】有機層 105 可包括電洞傳輸區；發射層；以及電子傳輸區。
舉例而言，參照圖 2，闡述根據本發明的實施例的有機發光二極體。

【0066】有機層 105 更包括在陽極 120 與發射層 130 之間的電洞輔助層 140。

【0067】參照圖 3，電洞傳輸區可包括至少兩層的電洞輔助層，且在此種情況下，接觸發射層的電洞輔助層定義為電洞傳輸輔助層 33 且接觸陽極的電洞輔助層定義為電洞傳輸層 31。

【0068】電洞傳輸區可包括電洞注入層、電洞傳輸層、電子阻擋層以及緩衝層中的至少一者。

【0069】電洞傳輸區可包括僅電洞注入層或僅電洞傳輸層。或，電洞傳輸區可具有電洞注入層 37/電洞傳輸層 31 或電洞注入層 37/電洞傳輸層 31/電子阻擋層自陽極 120 依次堆疊的結構。

【0070】舉例而言，另外包括電洞注入層 37 及電子注入層 36，且如圖 4 中所示，陽極 120/電洞注入層 37/電洞傳輸層 31/電洞傳輸輔助層 33/發射層 130/電子傳輸輔助層 35/電子傳輸層 34/電子注入層 36/陽極 110 依次堆疊。

【0071】電洞注入層 37 可改良作為陽極的 ITO 與用於電洞傳輸層 31 的有機材料之間的介面特性，且施用於非平坦化 ITO 上且因此使 ITO 表面平坦化。舉例而言，電洞注入層 37 可包括具有在 ITO 的功函數與電洞傳輸層 31 的 HOMO 之間的中位值（尤其合乎需要的電導率）的材料，以便調節作為陽極的 ITO 的功函數與電洞傳輸層 31 的 HOMO

的差值。結合本發明，電洞注入層 37 可包含 N4,N4'-二苯基-N4,N4'-雙(9-苯基-9H-咔唑-3-基)聯苯-4,4'-二胺) (N4,N4'-diphenyl-N4,N4'-bis(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)biphenyl-4,4'-diamine))，但不限於此。此外，電洞注入層 37 可更包含傳統材料，例如銅酞菁 (copper phthalocyanine, CuPc)；芳族胺，例如 N,N'-二萘基-N,N'-苯基-(1,1'-聯苯)-4,4'-二胺 (N,N'-dinaphthyl-N,N'-phenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamine, NPD)、4,4',4''-三[甲基苯基(苯基)胺基]三苯基胺 (4,4',4''-tris[methylphenyl(phenyl)amino] triphenyl amine, m-MTDATA)、4,4',4''-三[1-萘基(苯基)胺基]三苯基胺 (4,4',4''-tris[1-naphthyl(phenyl)amino] triphenyl amine, 1-TNATA)、4,4',4''-三[2-萘基(苯基)胺基]三苯基胺 (4,4',4''-tris[2-naphthyl(phenyl)amino] triphenyl amine, 2-TNATA)、1,3,5-三[N-(4-二苯基胺基苯基)苯基胺基]苯 (1,3,5-tris[N-(4-diphenylaminophenyl)phenylamino] benzene, p-DPA-TDAB) 等；化合物，例如 4,4'-雙[N-[4-{N,N-雙(3-甲基苯基)胺基}苯基]-N-苯基胺基]聯苯 (4,4'-bis[N-[4-{N,N-bis(3-methylphenyl)amino}phenyl]-N-phenylamino]biphenyl, DNTPD)、六氮雜三伸苯基-己腈 (hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile, HAT-CN) 等；聚噻吩衍生物，例如聚(3,4-伸乙二氧基噻吩)-聚(苯乙烯磺酸酯) (poly(3,4-ethylenedioxythiophene)-poly(styrenesulfonate), PEDOT) 作為導電聚合物。電洞注入層 37 可例如以 10 埃至 300 埃的厚度塗佈於作為陽極的 ITO 上。

【0072】當電洞傳輸區包括電洞注入層 37 時，電洞注入層可藉由以下各種方法中的任一者形成於陽極 120 上，例如真空沈積、旋塗、澆鑄、朗繆爾-布羅傑特（Langmuir-Blodgett，LB）方法等。

【0073】當使用真空沈積形成電洞注入層時，真空沈積條件可視用於形成電洞注入層的材料以及待形成的電洞注入層的所需結構及熱特性而改變，且舉例而言，真空沈積可在約 100°C 至約 500°C 的溫度、約 10^{-8} 托至約 10^{-3} 托的壓力以及約 0.01 埃/秒至約 100 埃/秒的沈積速率下進行，但沈積條件不限於此。

【0074】當使用旋塗形成電洞注入層時，塗佈條件可視用於形成電洞注入層的材料以及待形成的電洞注入層的所需結構及熱特性而改變。舉例而言，塗佈速率可在約 2000 轉/分鐘至約 5000 轉/分鐘的範圍內，且在塗佈之後為移除溶劑所進行的熱處理的溫度可在約 80°C 至約 200°C 的範圍內，但塗佈條件不限於此。

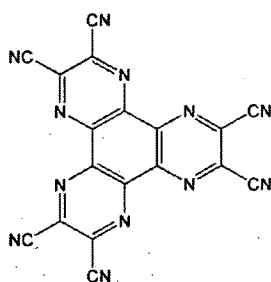
【0075】形成電洞傳輸層及電子阻擋層的條件可基於上述電洞注入層的形成條件來定義。

【0076】電洞傳輸區的厚度可為約 100 埃至約 10000 埃，例如約 100 埃至約 1000 埃。當電洞傳輸區包括電洞注入層及電洞傳輸層時，電洞注入層的厚度可為約 100 埃至約 10,000 埃，例如約 100 埃至約 1000 埃，且電洞傳輸層的厚度可為約 50 埃至約 2,000 埃，例如約 100 埃至約 1500 埃。當電洞傳輸區、電洞注入層（HIL）及電洞傳輸層（HTL）的厚度在此等範圍內時，可在不大幅度增加驅動電壓的情況下獲得令人滿意的電洞傳輸特徵。

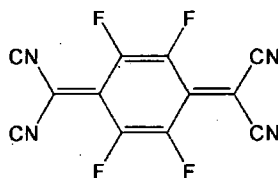
【0077】除如上所述的材料之外，電洞傳輸區可更包含電荷產生材料以改良導電性。電荷產生材料可均勻或非均勻地分散於電洞傳輸區中。

【0078】電荷產生材料可為例如 p-摻雜劑。p-摻雜劑可為奎寧衍生物 (quinine derivative)、金屬氧化物以及含氰基化合物中的一者，但不限於此。p-摻雜劑的非限制性實例為醌衍生物，例如四氰基醌二甲烷 (tetracyanoquinonodimethane, TCNQ)、2,3,5,6-四氟-四氰基-1,4-苯醌二甲烷 (2,3,5,6-tetrafluoro-tetracyano-1,4-benzoquinonodimethane, F4-TCNQ) 等；金屬氧化物，例如氧化鎢、氧化鋇等；以及含氰基化合物，例如以下化合物 HT-D1。

<化合物 HT-D1>



<F4-TCNQ>



【0079】電洞傳輸區可更包括緩衝層。

【0080】緩衝層可根據自發射層發射的光的波長補償光的光學共振距離且因此可增加效率。

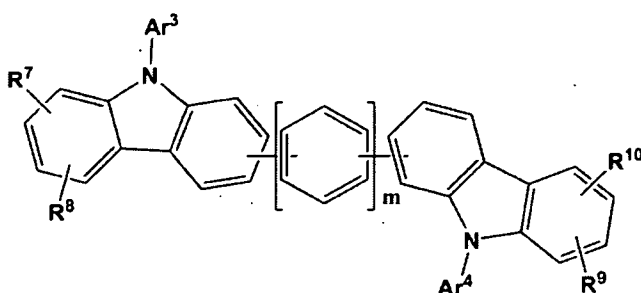
【0081】發射層 (emission layer, EML) 可藉由使用真空沈積、旋塗、澆鑄、LB 方法等形成於電洞傳輸區上。當使用真空沈積或旋塗形成發射層時，沈積及塗佈條件可與形成電洞注入層的所述條件類似，但沈積及塗佈條件仍可視用於形成發射層的材料而改變。

【0082】發射層可包含主體及摻雜劑。

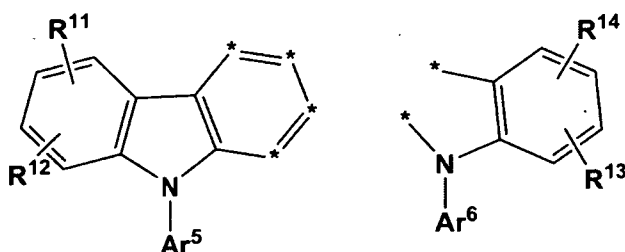
【0083】根據本發明實施例的有機光電元件包含單獨的由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物，或包含由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物作為第一主體及咪唑系化合物作為第二主體。

【0084】咪唑系化合物具體而言可由化學式 2 表示或可由化學式 3 表示的部分與由化學式 4 表示的部分的組合組成。

[化學式 2]



[化學式 3] [化學式 4]



【0085】在化學式 2 至化學式 4 中，

Ar^3 至 Ar^6 獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基，

m 為整數 0 或 1，

化學式 3 的相鄰兩個*與化學式 4 的兩個*組合形成稠合環，且化學式 3 的不形成稠合環的*獨立地為 CR^b ，且

R^b 及 R^7 至 R^{14} 獨立地為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基、C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

【0086】在本發明的一個實例中，在化學式 2 至化學式 4 中，

經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的聯三苯基、經取代或未經取代的聯四苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的聯伸三苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的二苯並呋喃基、經取代或未經取代的二苯並噻吩基、經取代或未經取代的吡啶基、經取代或未經取代的嘧啶基、經取代或未經取代的三嗪基、經取代或未經取代的喹啉基、經取代或未經取代的異喹啉基或經取代或未經取代的喹啉基，

其中在「經取代或未經取代」中，「經取代」是指至少一個氫經氘、C1 至 C10 烷基、C6 至 C18 芳基或 C3 至 C20 雜芳基置換。

【0087】在本發明的一個實例中，在化學式 2 至化學式 4 中，

經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基是指經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的聯三苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的聯伸三苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的二苯並呋喃基、經取代或未經取代的二苯並噻吩基、經取代或未經取代的吡啶基、經取代或未經取代的嘧啶基、經取代或未經取代的三嗪基、經取代或未經取代的喹啉基、經取代或未經取代的異喹啉基或經取代或未經取代的喹啉基，

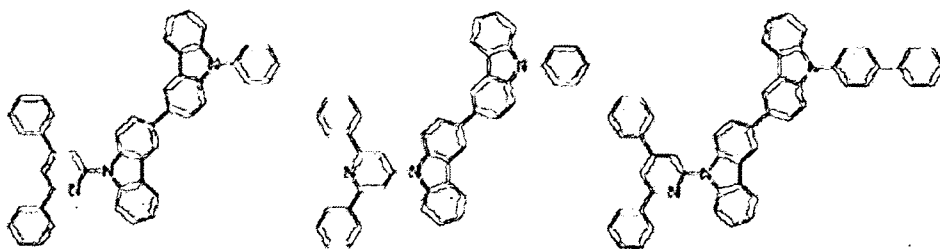
其中在「經取代或未經取代」中，「經取代」是指至少一個氫經氘、C1 至 C4 烷基、C6 至 C12 芳基或 C3 至 C15 雜芳基置換。

【0088】由化學式 2 表示的聯呋唑可例如選自群組 B 的化合物，

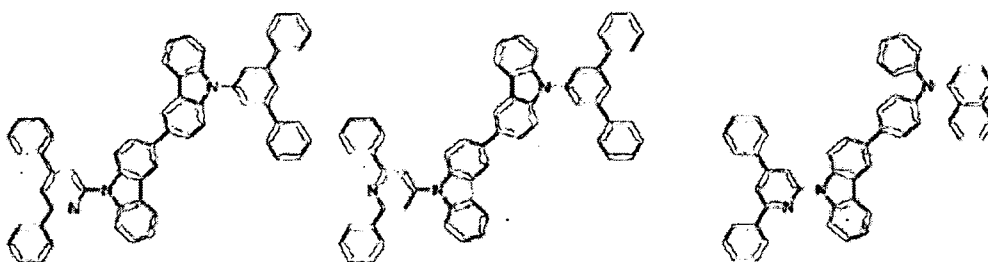
由化學式 3 表示的部分與由化學式 4 表示的部分的組合組成的吡
噪并呋唑（indolocarbazole）可例如選自群組 C 的化合物。

[群組 B]

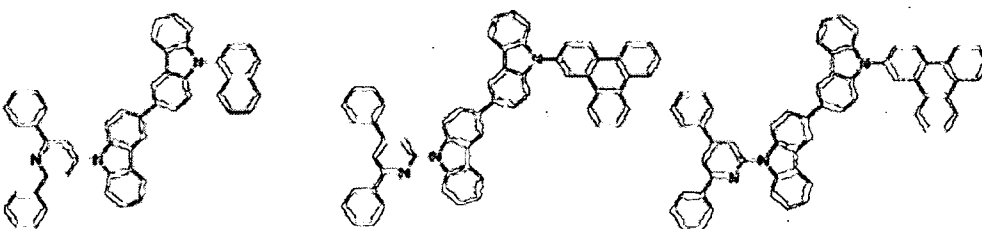
[B-1] [B-2] [B-3]



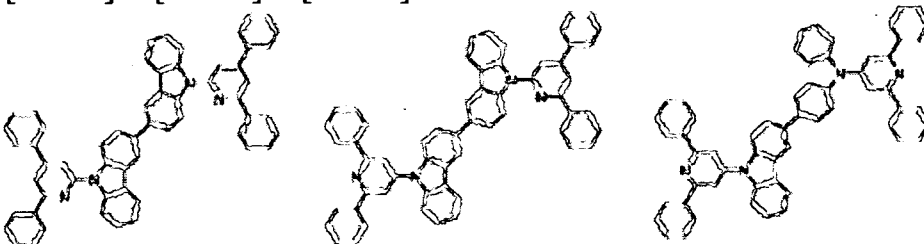
[B-4] [B-5] [B-6]



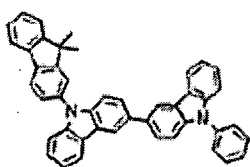
[B-7] [B-8] [B-9]



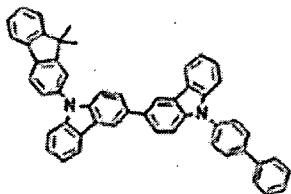
[B-10] [B-11] [B-12]



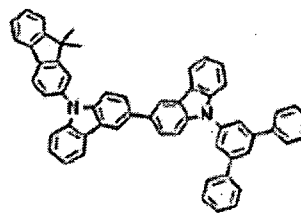
[B-13] [B-14] [B-15]



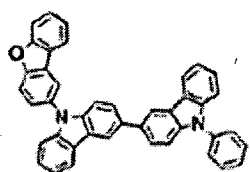
[B-16]



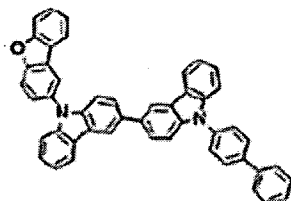
[B-17]



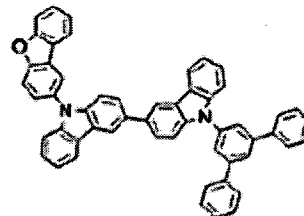
[B-18]



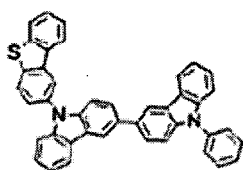
[B-19]



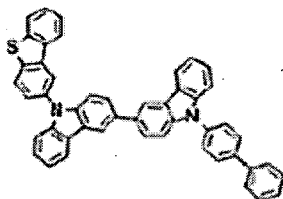
[B-20]



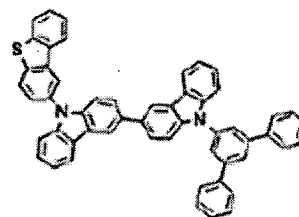
[B-21]



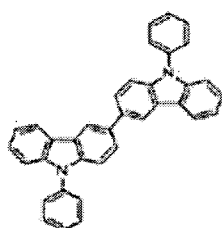
[B-22]



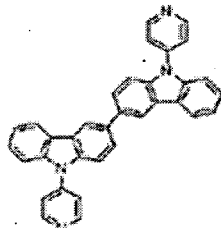
[B-23]



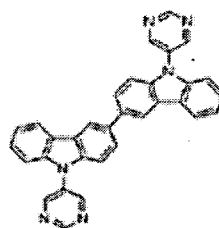
[B-24]



[B-25]

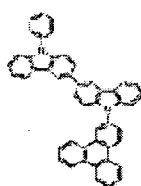


[B-26]

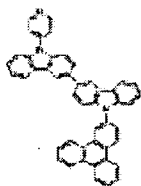


[B-27]

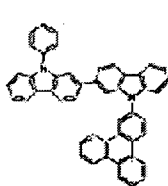
[B-28]



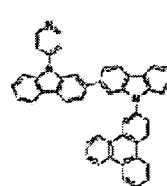
[B-29]



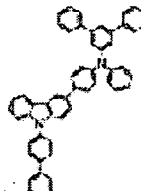
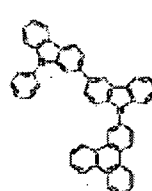
[B-30]



[B-31]

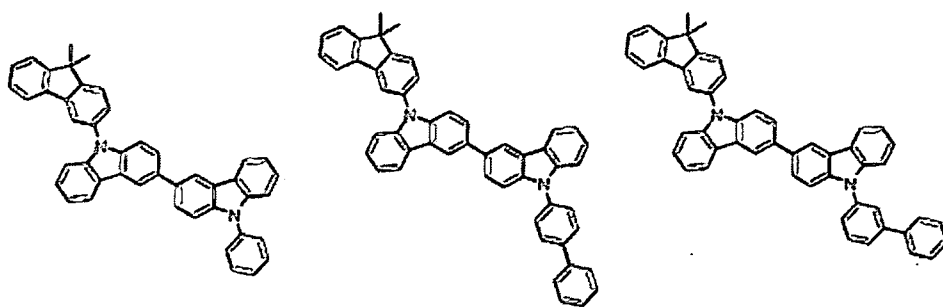


[B-32]

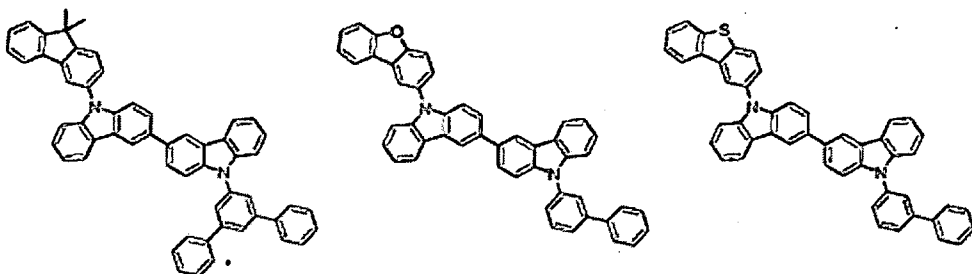


[B-33]

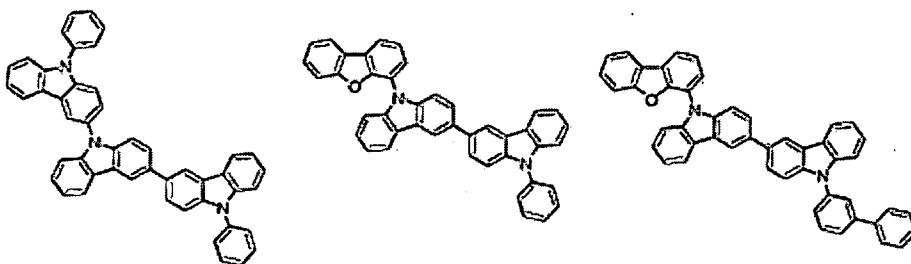
[B-34] [B-35] [B-36]



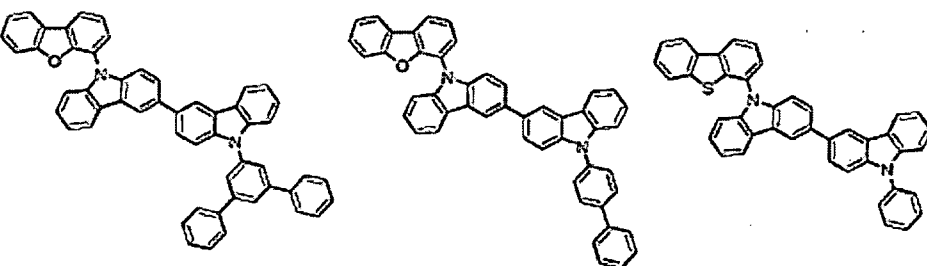
[B-37] [B-38] [B-39]



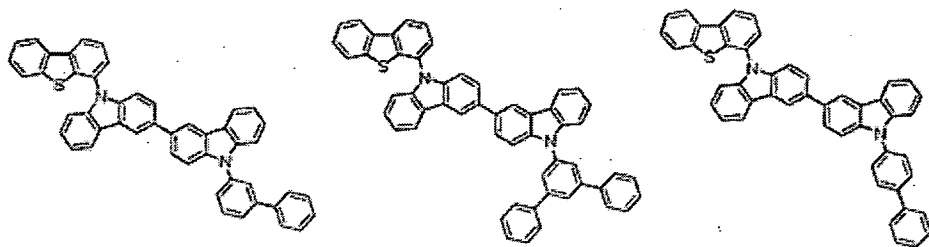
[B-40] [B-41] [B-42]



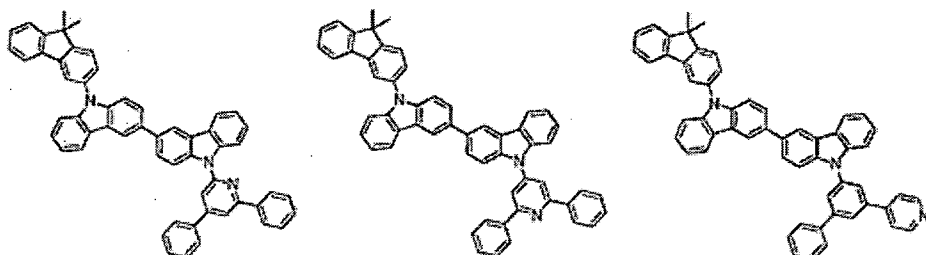
[B-43] [B-44] [B-45]



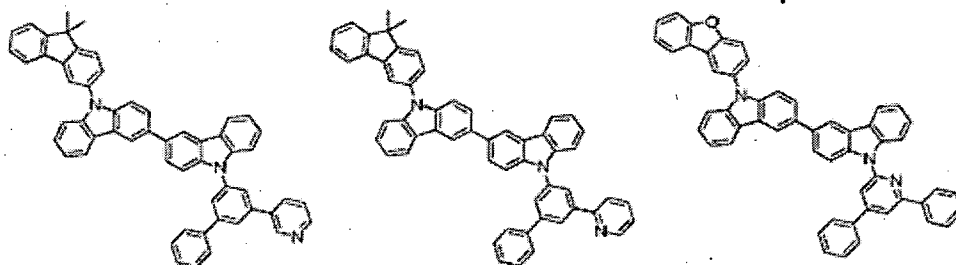
[B-46] [B-47] [B-48]



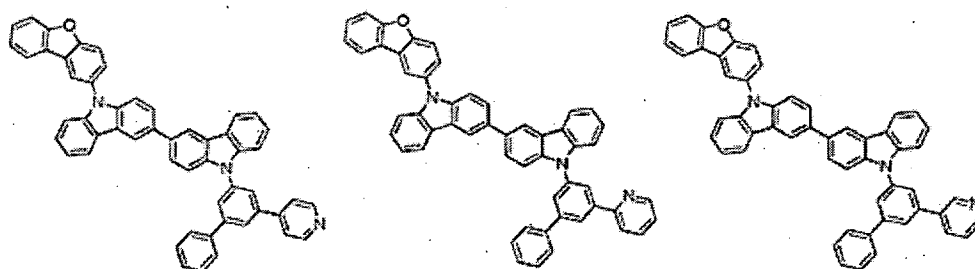
[B-49] [B-50] [B-51]



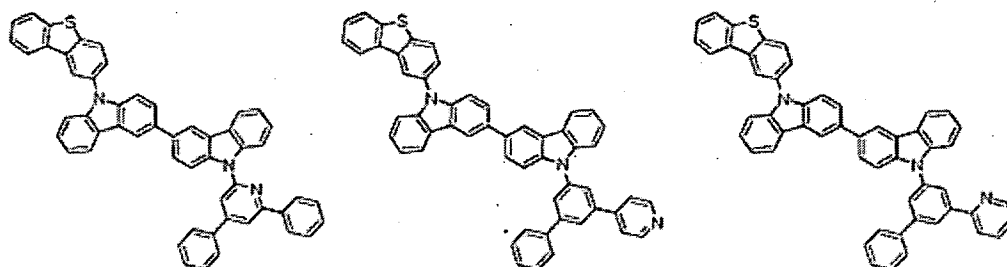
[B-52] [B-53] [B-54]



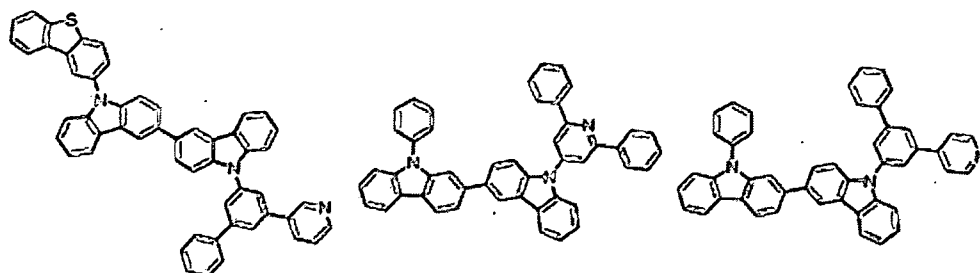
[B-55] [B-56] [B-57]



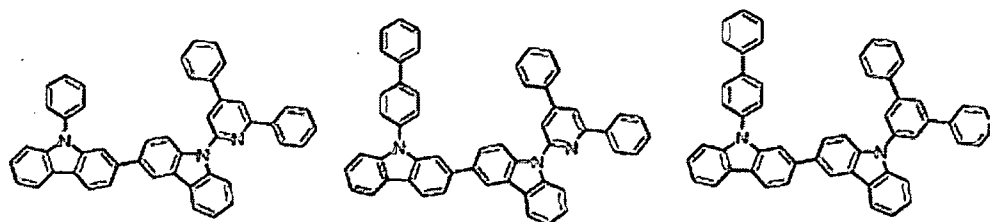
[B-58] [B-59] [B-60]



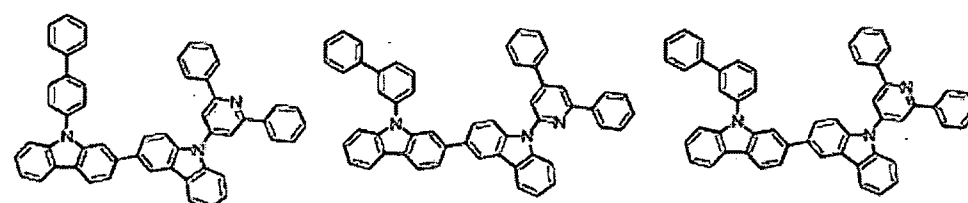
[B-61] [B-62] [B-63]



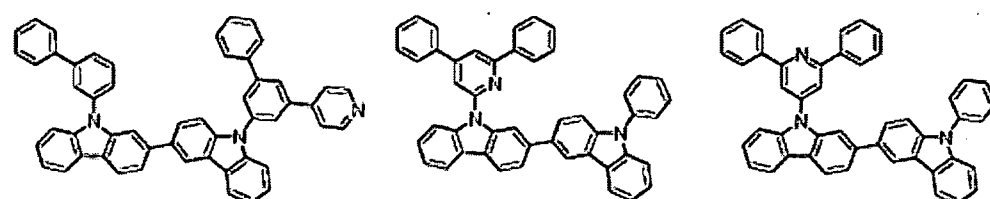
[B-64] [B-65] [B-66]



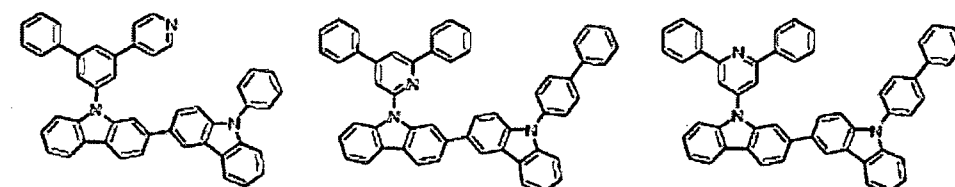
[B-67] [B-68] [B-69]



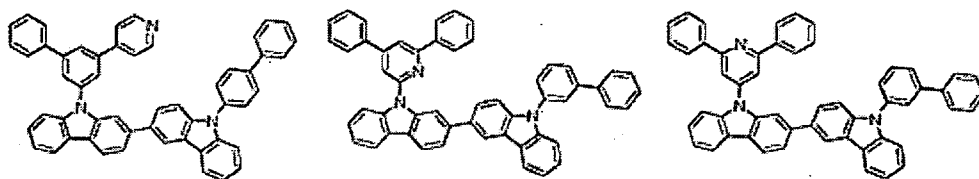
[B-70] [B-71] [B-72]



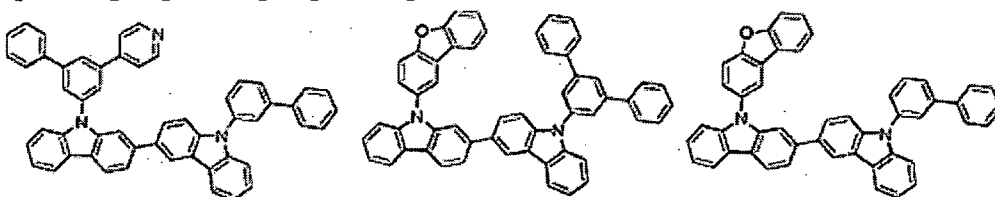
[B-73] [B-74] [B-75]



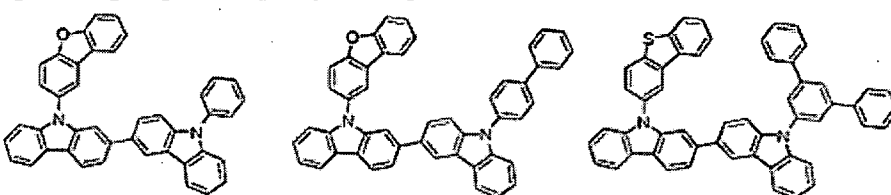
[B-76] [B-77] [B-78]



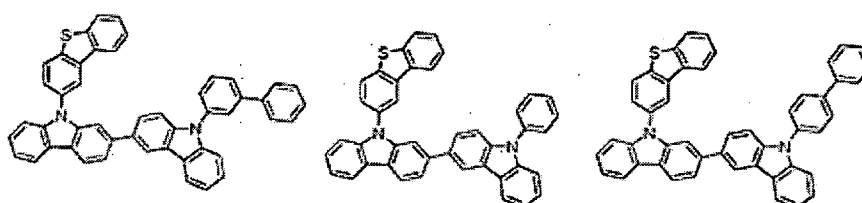
[B-79] [B-80] [B-81]



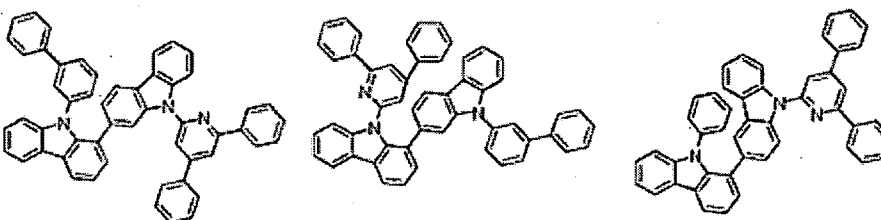
[B-82] [B-83] [B-84]



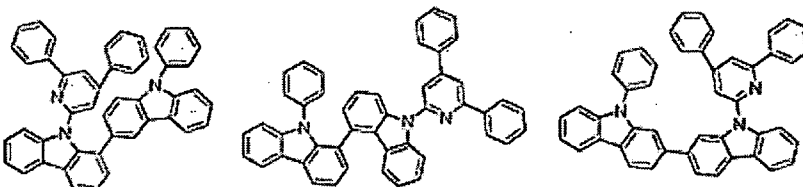
[B-85] [B-86] [B-87]



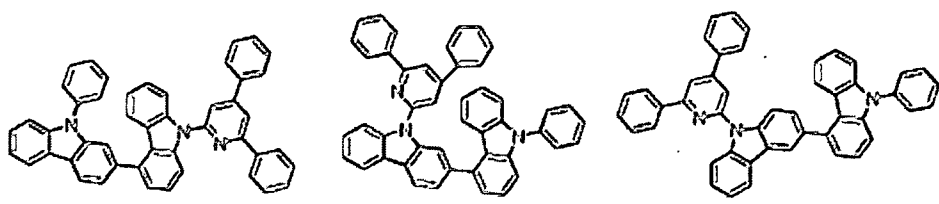
[B-88] [B-89] [B-90]



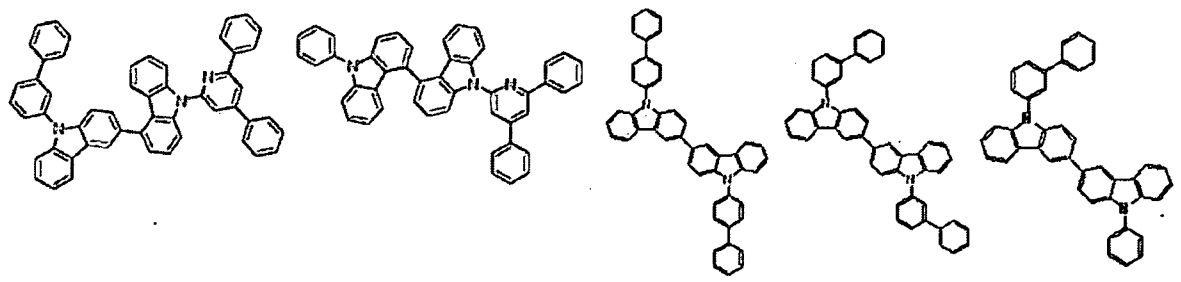
[B-91] [B-92] [B-93]



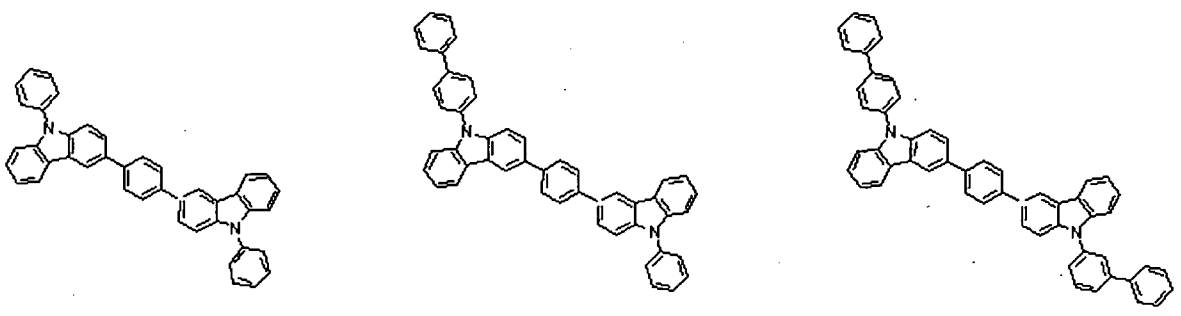
[B-94] [B-95] [B-96]



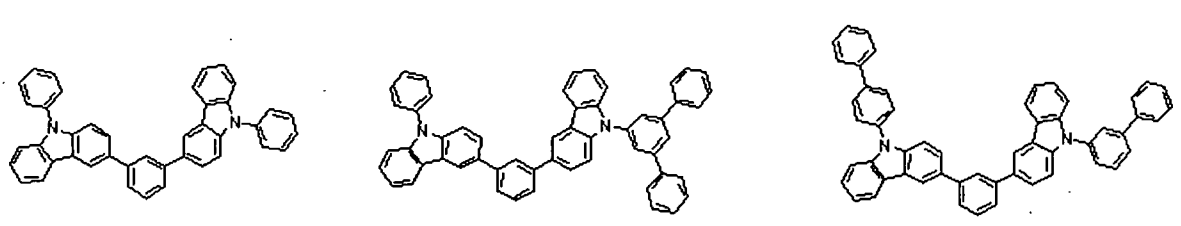
[B-97] [B-98] [B-99] [B-100] [B-101]



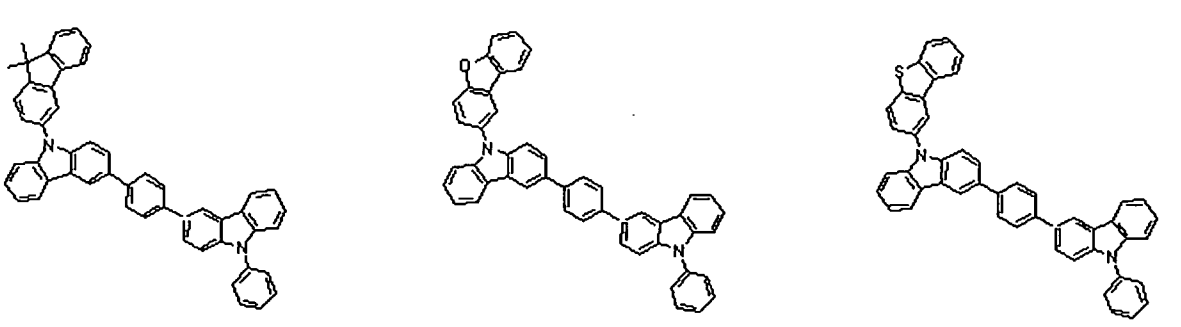
[B-102] [B-103] [B-104]



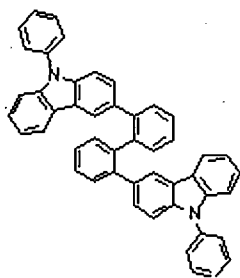
[B-105] [B-106] [B-107]



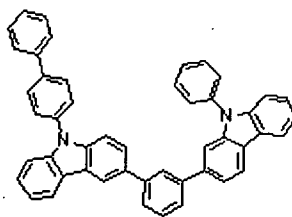
[B-108] [B-109] [B-110]



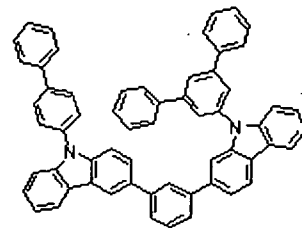
[B-111] [B-112] [B-113]



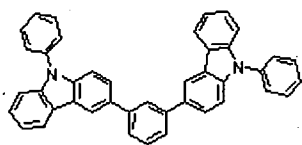
[B-114]



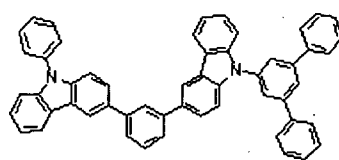
[B-115]



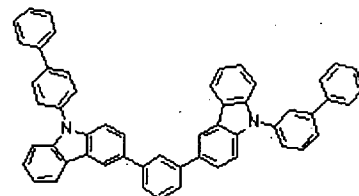
[B-116]



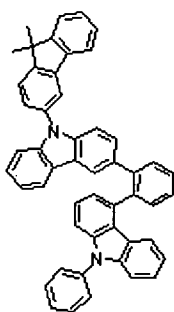
[B-117]



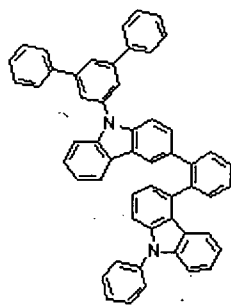
[B-118]



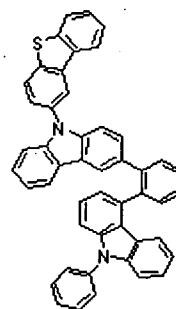
[B-119]



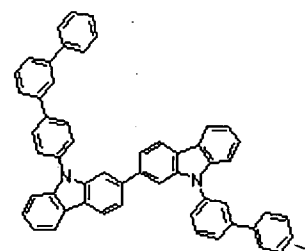
[B-120]



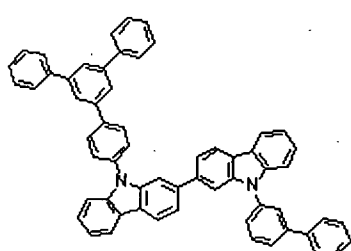
[B-121]



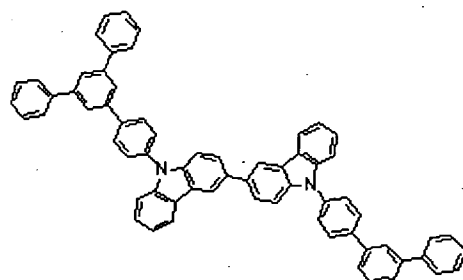
[B-122]



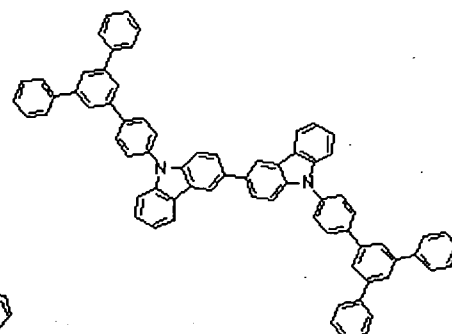
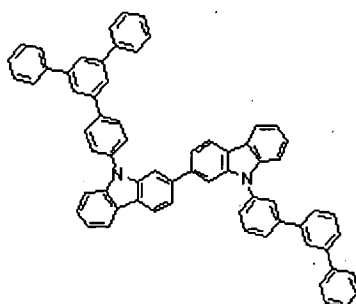
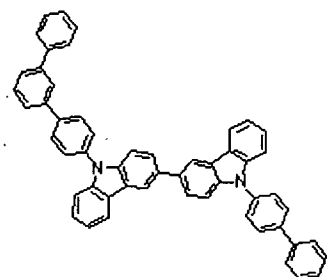
[B-123]



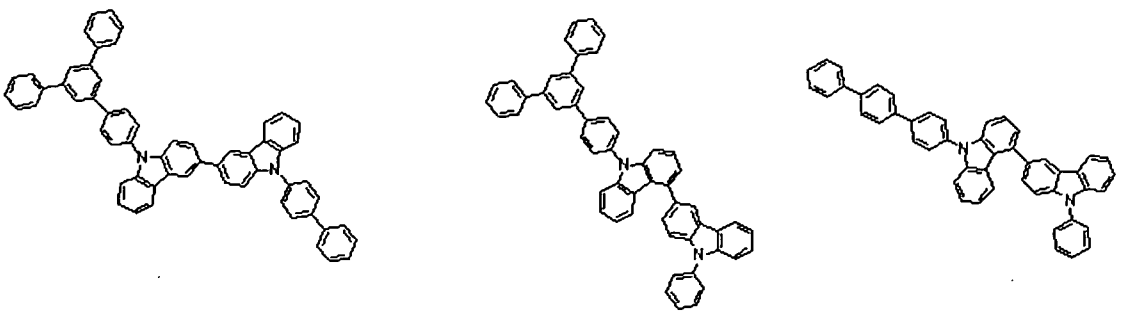
[B-124]



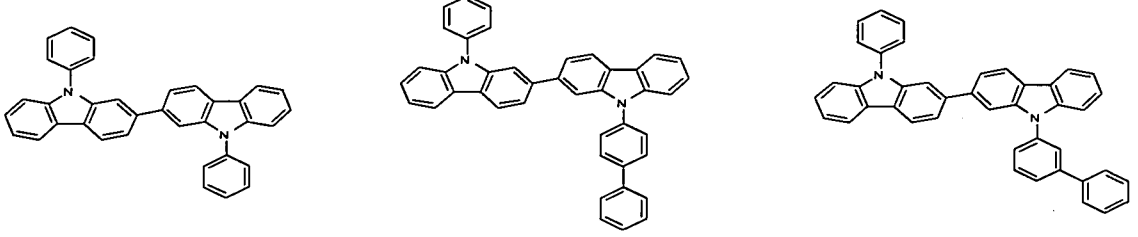
[B-125]



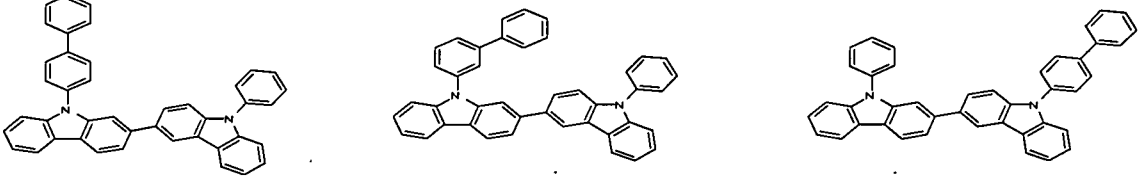
[B-126] [B-127] [B-128]



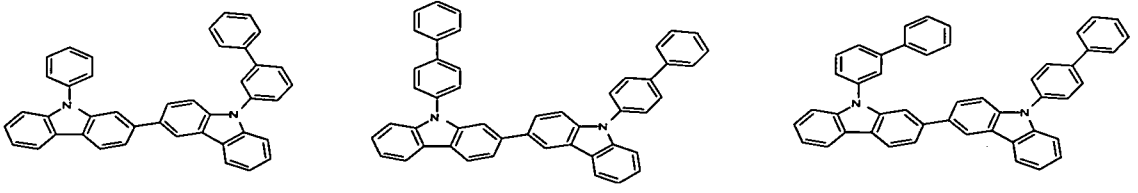
[B-129] [B-130] [B-131]



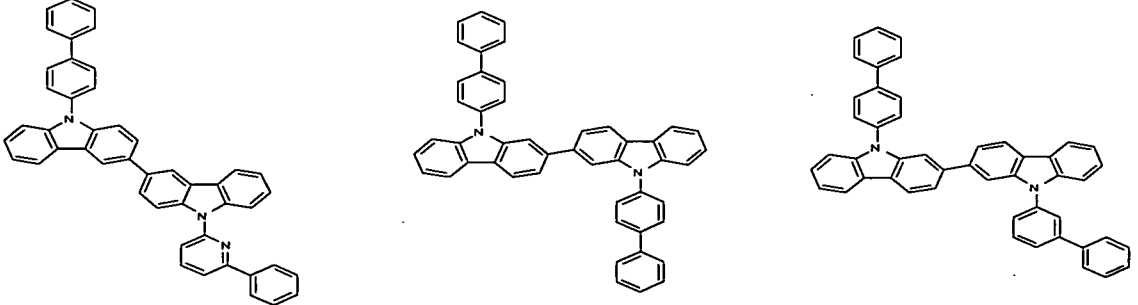
[B-131] [B-133] [B-134]



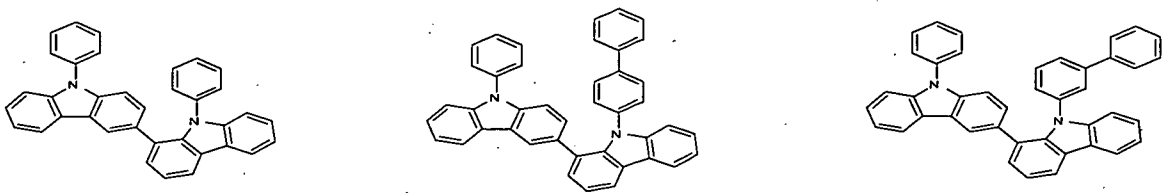
[B-135] [B-136] [B-137]



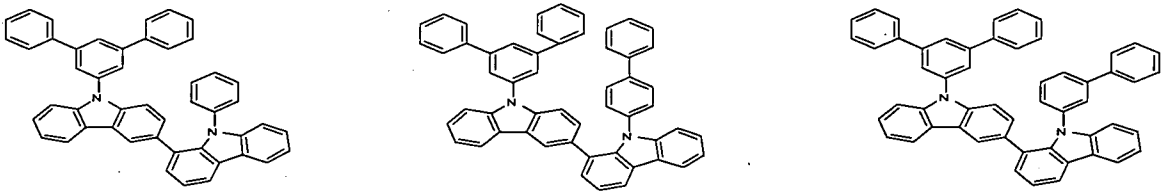
[B-138] [B-139] [B-140]



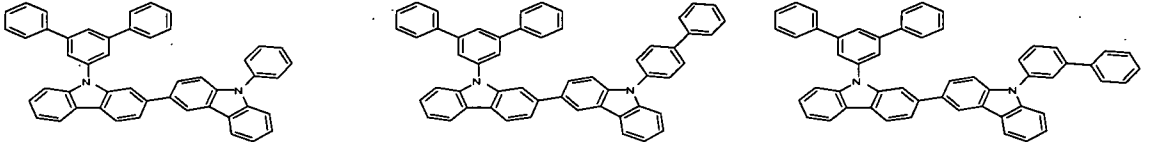
[B-141] [B-142] [B-143]



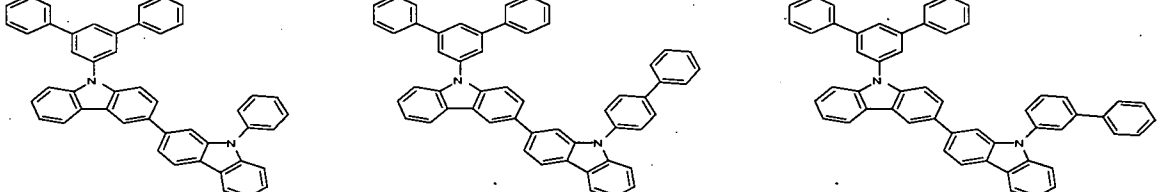
[B-144] [B-145] [B-146]



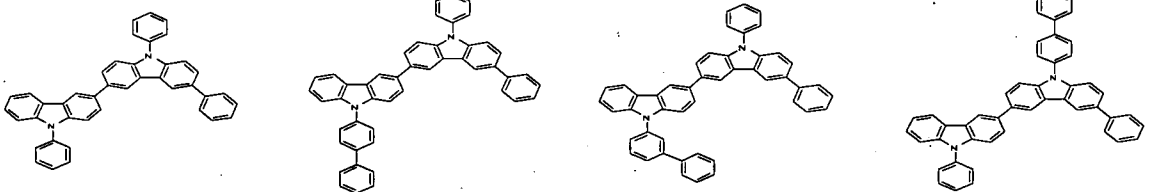
[B-147] [B-148] [B-149]



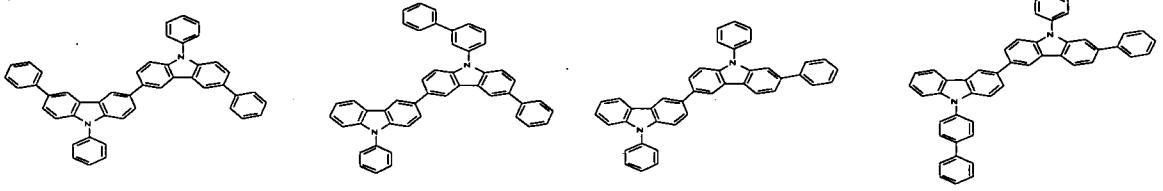
[B-150] [B-151] [B-152]



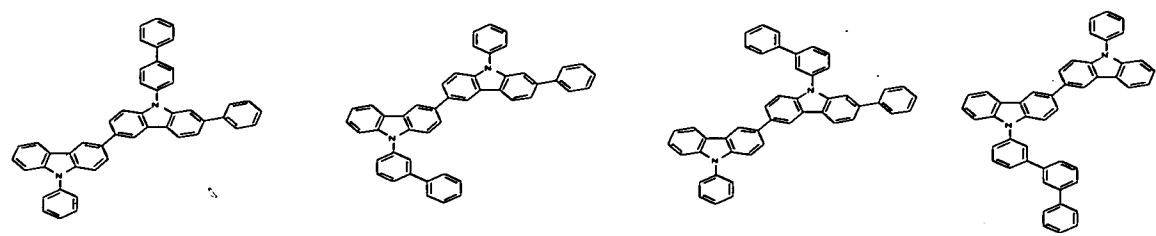
[B-153] [B-154] [B-155] [B-156]



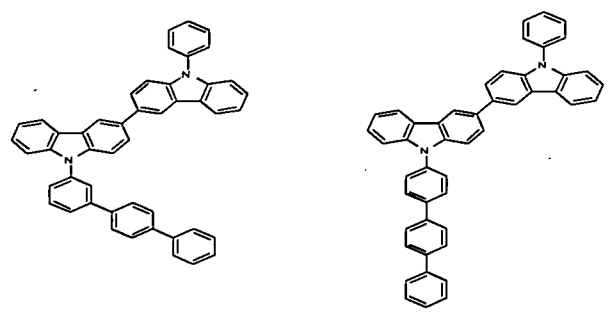
[B-157] [B-158] [B-159] [B-160]



[B-161] [B-162] [B-163] [B-164]

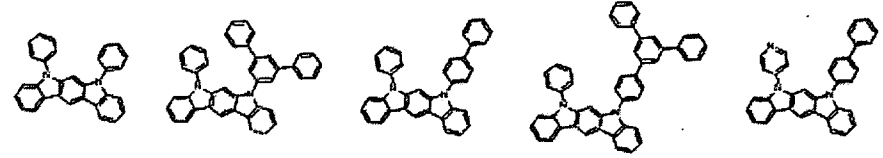


[B-165] [B-166]

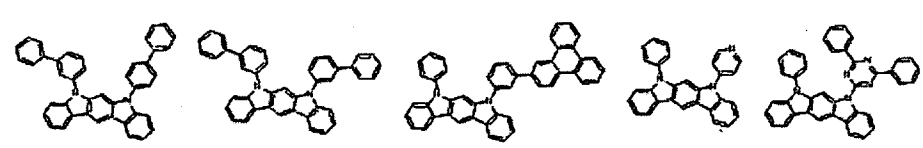


[群組 C]

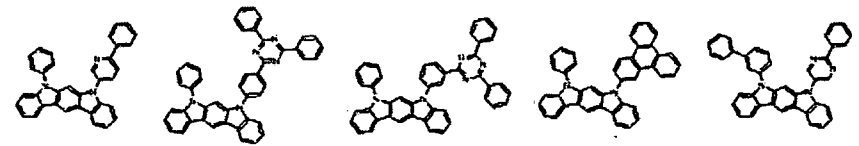
[C-1] [C-2] [C-3] [C-4] [C-5]



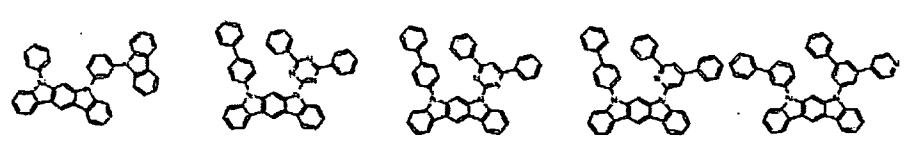
[C-6] [C-7] [C-8] [C-9] [C-10]



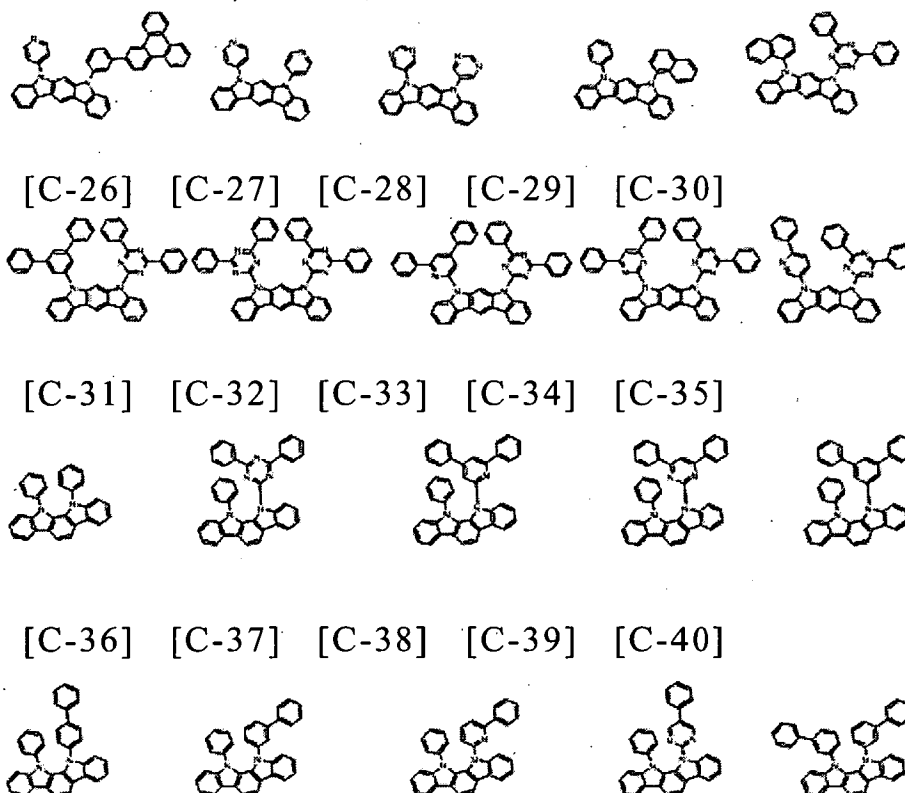
[C-11] [C-12] [C-13] [C-14] [C-15]



[C-16] [C-17] [C-18] [C-19] [C-20]



[C-21] [C-22] [C-23] [C-24] [C-25]



【0089】上述第一主體及第二主體可以各種比率用於製備各種組成物。舉例而言，第一主體及第二主體可以範圍介於 1：99 至 99：1，例如 10：90 至 90：10 的重量比使用。舉例而言，重量比可為 2：8 至 8：2、3：7 至 7：3、4：6 至 6：4 以及 5：5。當第一主體及第二主體滿足所述重量比範圍時，可平衡第一主體的電子傳輸特徵與第二主體的電洞傳輸特徵且因此改良有機發光二極體的亮度效率及壽命。

【0090】舉例而言，組成物可用作有機光電元件的光發射材料。在本文中，光發射材料可為作為主體的有機化合物，且可更包含至少一種摻雜劑。摻雜劑可為紅色、綠色或藍色摻雜劑。

【0091】摻雜劑以少量混合以引起光發射，且可一般為藉由多次激發至三重態或多於三重態而發光的材料，例如金屬錯合物。摻雜劑可為例如無機化合物、有機化合物或有機/無機化合物，且可使用其一或多

個種類。

【0092】摻雜劑可為磷光摻雜劑，且磷光摻雜劑的實例可為包含 Ir、Pt、Os、Ti、Zr、Hf、Eu、Tb、Tm、Fe、Co、Ni、Ru、Rh、Pd 或其組合的有機金屬化合物。磷光摻雜劑可為例如由化學式 Z 表示的化合物，但不限於此。

[化學式 Z]

L_2MX

● 【0093】在化學式 Z 中，M 為金屬，且 L 及 X 為相同或不同的，且為與 M 形成錯合物的配位體。

【0094】M 可為例如 Ir、Pt、Os、Ti、Zr、Hf、Eu、Tb、Tm、Fe、Co、Ni、Ru、Rh、Pd 或其組合，且 L 及 X 可為例如二齒配位體。

【0095】發射層的厚度可為約 100 埃至約 1000 埃，例如約 200 埃至約 600 埃。當發射層的厚度在此等範圍內時，發射層可在不大幅度增加驅動電壓的情況下具有改良的發射特徵。

● 【0096】接著，將電子傳輸區安置於發射層上。

【0097】電子傳輸區可包括電洞阻擋層、電子傳輸層以及電子注入層中的至少一者。

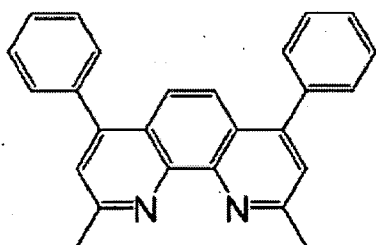
【0098】舉例而言，電子傳輸區可具有電洞阻擋層/電子傳輸層/電子注入層或電子傳輸層/電子注入層的結構，但不限於此。舉例而言，根據本發明實施例的有機發光二極體在電子傳輸區中包括至少兩個電子傳輸層，且在此種情況下，接觸發射層的電子傳輸層定義為電子傳輸輔助層 35。

【0099】電子傳輸層可具有包含兩種或更多種不同材料的單層或多層式結構。

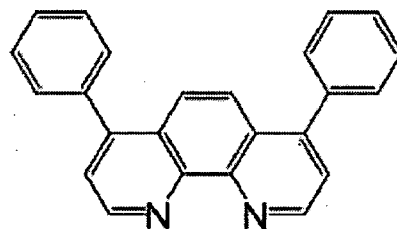
【0100】電子傳輸區可包含由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物。舉例而言，電子傳輸區可包括電子傳輸層，且電子傳輸層可包含由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物。更具體而言，電子傳輸輔助層可包含由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物。

【0101】電子傳輸區的電洞阻擋層、電子傳輸層以及電子注入層的形成條件參照電洞注入層的形成條件。

【0102】當電子傳輸區包括電洞阻擋層時，電洞阻擋層可包含 BCP、Bphen 以及 BAlq 中的至少一者，但不限於此。



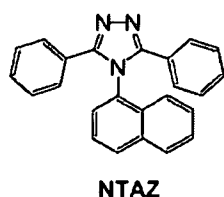
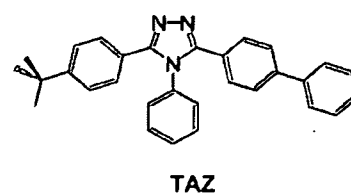
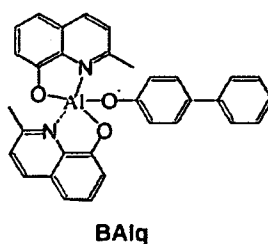
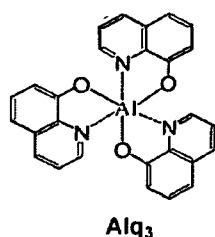
BCP



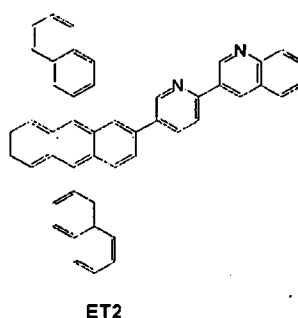
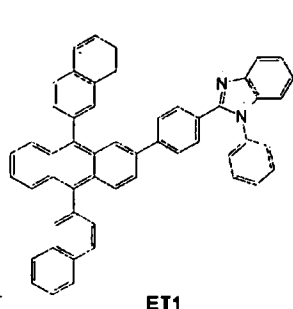
Bphen

【0103】電洞阻擋層的厚度可為約 20 埃至約 1000 埃，例如約 30 埃至約 300 埃。當電洞阻擋層的厚度在此等範圍內時，電洞阻擋層可在不大幅度增加驅動電壓的情況下具有改良的電洞阻擋能力。

【0104】電子傳輸層可更包含 BCP、Bphen 及下列 Alq₃、Balq、TAZ 以及 NTAZ 中的至少一者。



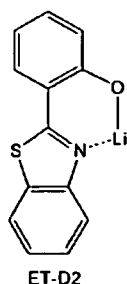
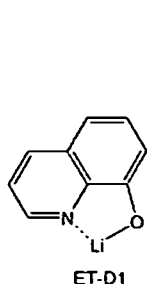
【0105】或，電子傳輸層可包含化合物 ET1 及化合物 ET2 中的至少一者，但不限於此。



【0106】電子傳輸層的厚度可為約 100 埃至約 1000 埃，例如約 150 埃至約 500 埃。當電子傳輸層的厚度在此等範圍內時，電子傳輸層可在不大幅度增加驅動電壓的情況下具有令人滿意的電子傳輸能力。

【0107】電子傳輸層可除上述材料之外更包含含金屬的材料。

【0108】含金屬的材料可包含鋰 (Li) 錯合物。Li 錯合物可包含例如化合物 ET-D1 (喹啉鋰，LiQ) 或化合物 ET-D2。



【0109】此外，電子傳輸區可包括電子注入層（electron injection layer，EIL），其可有助於電子自陽極 110 注入。

【0110】電子注入層 36 安置於電子傳輸層上且可發揮有助於電子自陰極注入且最終改良功率效率的作用，並藉由使用相關技術中所用的任何材料形成而無特別限制，例如 LiF、Liq、NaCl、CsF、Li₂O、BaO 等。

【0111】電子注入層可包含選自 LiF、NaCl、CsF、Li₂O 以及 BaO 中的至少一者。

【0112】EIL 的厚度可為約 1 埃至約 100 埃，或約 3 埃至約 90 埃。當電子注入層的厚度在此等範圍內時，電子注入層可在不大幅度增加驅動電壓的情況下具有令人滿意的電子注入能力。

【0113】陽極 110 安置於有機層 105 上。陽極 110 用材料可為具有低功函數的金屬、合金或導電化合物，或其組合。陽極 110 用材料的特定實例可為鋰（Li）、鎂（Mg）、鋁（Al）、鋁-鋰（Al-Li）、鈣（Ca）、鎂-銦（Mg-In）、鎂-銀（Mg-Ag）等。為了製造頂部發射發光元件，陽極 110 可由例如氧化銦錫（ITO）或氧化銦鋅（IZO）形成作為透射電極。

【0114】上述有機發光二極體可應用於有機發光二極體（OLED）顯示器。

【0115】在下文中參照實例更詳細地說明實施例。然而，本發明參照實例更詳細地說明。

（有機光電元件用化合物的合成）

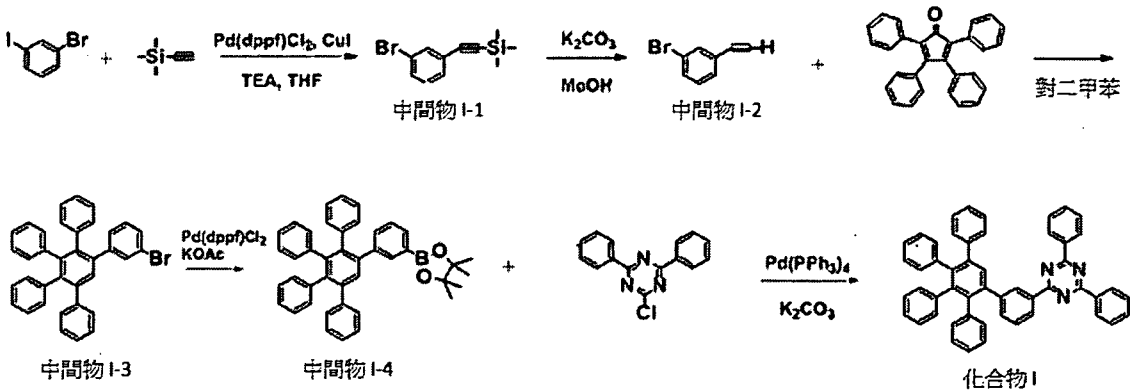
【0116】在下文中，實例及合成例中所用的起始材料及反應物購自西格瑪奧德裏奇公司（Sigma-Aldrich Co. Ltd.）或 TCI 公司，只要不存在特別註釋且可易於合成作為眾所周知的材料即可。

【0117】在以下合成例中，當「使用『B』代替『A』」時，『A』與『B』的量以莫耳當量計為相同的。

【0118】作為本發明的有機光電元件用化合物的特定實例，化學式 1 的化合物藉由以下反應流程合成。

合成例 1：化合物 1 的合成

[反應流程 1]



第一步：中間物 I-1 的合成

【0119】在氮氣氛圍下，將 1-溴-3-碘苯（200.0 克，704.8 毫莫耳）及 (1,1'- 雙（二苯基膦）二茂鐵）二氯鈀 (II)（(1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium (II)）（25.8 克，35.4 毫莫耳）、碘化亞銅（4.04 克，21.2 毫莫耳）、三乙胺（295.6 毫升，2120 毫莫耳）以及四氫呋喃（1700 毫升）置於 3 升圓底燒瓶中。接著，以逐滴方式向其中添加三甲基矽烷基乙炔（107.6 毫升，776.6 毫莫耳），且將混合物在室溫下攪拌 3 小時。過濾反應物，且自其中

移除溶劑。經由管柱層析純化自其中獲得的化合物以獲得中間物 I-1 (166.0 克, 93%)。

第二步：中間物 I-2 的合成

【0120】將中間物 I-1 (166 克, 655.6 毫莫耳) 置於反應器中且溶解於甲醇 (1000 毫升) 中, 並以逐滴方式向其中緩慢添加碳酸鉀 (90.6 克, 655.6 毫莫耳)。攪拌混合物約 30 分鐘且過濾。在移除全部溶劑之後, 將反應物溶解於乙酸乙酯中且用蒸餾水洗滌兩次。接著, 藉由再次移除溶劑獲得中間物 I-2 (116 克, 98%)。

第三步：中間物 I-3 的合成

【0121】將中間物 I-2 (113.0 克, 624.2 毫莫耳) 及四苯基環戊二酮 (120.0 克, 312.1 毫莫耳) 置於且溶解於 700 毫升二甲苯中, 且隨後加熱並回流 3 小時。將反應物傾入甲醇 (2000 毫升) 中以完成反應。接著, 自其中過濾固體以獲得中間物 I-3 (124.1 克, 74%)。

第四步：中間物 I-4 的合成

【0122】在氮氣氛圍下, 將中間物 I-3 (52.0 克, 96.75 毫莫耳) 溶解於二甲基甲醯胺 (dimethyl formamide, DMF, 350 毫升) 中, 向其中添加雙(頻哪醇根基)二硼 (bis(pinacolato)diboron, 29.5 克, 116.1 毫莫耳)、(1,1'-雙(二苯基膦)二茂鐵)二氯鈀(II) ((1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)) (4.74 克, 5.8 毫莫耳) 以及乙酸鉀 (28.5 克, 290.2 毫莫耳), 且將混合物加熱並在 150°C 下回流 24 小時。當反應完成時, 添加水至反應溶液, 且過濾所獲得的混合物並在真空烘箱中乾燥。分離所獲得的殘餘物且經由

管柱層析純化以獲得中間物 I-4 (35 克, 62%)。

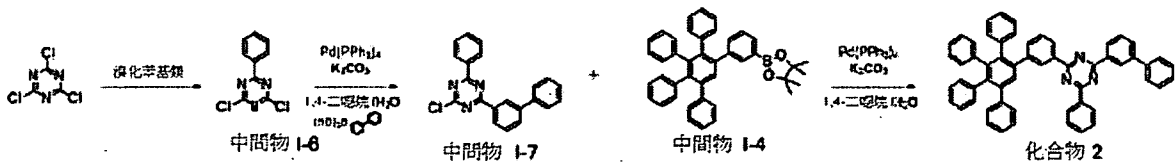
第五步：化合物 1 的合成

【0123】將中間物 I-4 (5.0 克, 8.6 毫莫耳)、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪 (2.8 克, 10.3 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.0 克, 21.4 毫莫耳) 以及四(三苯基磷)鈀(0) (tetrakis(triphenylphosphine) palladium (0)) (0.3 克, 0.3 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至 150 毫升甲醇中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶, 從而獲得化合物 1 (3.78 克, 產率: 64%)。

C₅₁H₃₅N₃ 計算值: C, 88.79; H, 5.11; N, 6.09; 實驗值: C, 88.78; H, 5.10; N, 6.10

合成例 2：化合物 2 的合成

[反應流程 2]



第一步：中間物 I-6 的合成

【0124】將氰尿酸氯 (200.0 克, 1.085 毫莫耳) 及無水 THF (1.4 升) 置於 3 升燒瓶中, 且在 0°C 下以逐滴方式緩慢添加溴化苄基鎂 (3 M, 361.4 毫升)。當反應完成時, 將水傾入反應物中, 攪拌混合物 30 分鐘, 分離其中的有機層, 在藉由使用硫酸鎂自其中移除水分之後濃縮, 且用甲醇及己烷純化以獲得呈白色固體的中間物 I-6 (127.4 克, 產率:

52%)。

第二步：中間物 I-7 的合成

【0125】將中間物 I-6 (60.0 克, 265.4 毫莫耳)、3-聯苯硼酸 (50.0 克, 252.0 毫莫耳)、碳酸鉀 (91.6 克, 660.0 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈾(0) (8.0 克, 9.2 毫莫耳) 置於 2 升圓底燒瓶中的 1,4-二噁烷 (880 毫升) 及水 (440 毫升) 中, 且將混合物加熱並在氮氣流下回流 16 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (3000 升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得中間物 I-7 (63.6 克, 產率: 70%)。

第三步：化合物 2 的合成

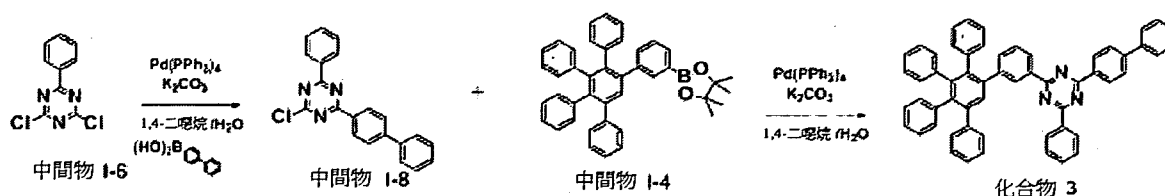
【0126】將中間物 I-7 (3.0 克, 8.7 毫莫耳)、中間物 I-4 (6.1 克, 10.5 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.0 克, 21.8 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈾(0) (0.3 克, 0.3 毫莫耳) 置於 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (150 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後藉由使用甲醇再結晶以獲得化合物 2 (4.13 克, 62% 的產率)。

C₅₇H₃₉N₃ 計算值: C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; 實驗值: C, 89.38;

H, 5.13; N, 5.49

合成例 3：化合物 3 的合成

[反應流程 3]



第一步：中間物 I-8 的合成

【0127】將中間物 I-6（60.0 克，265.4 毫莫耳）、4-聯苯硼酸（50.0 克，252.0 毫莫耳）、碳酸鉀（91.6 克，660.0 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鈀(0)（8.0 克，9.2 毫莫耳）置於 2 升圓底燒瓶中的 1,4-二噁烷（880 毫升）及水（440 毫升）中，且將混合物加熱並在氮氣流下回流 16 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（3000 升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於單氯苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得中間物 I-8（60.2 克，產率：66%）。

第二步：化合物 3 的合成

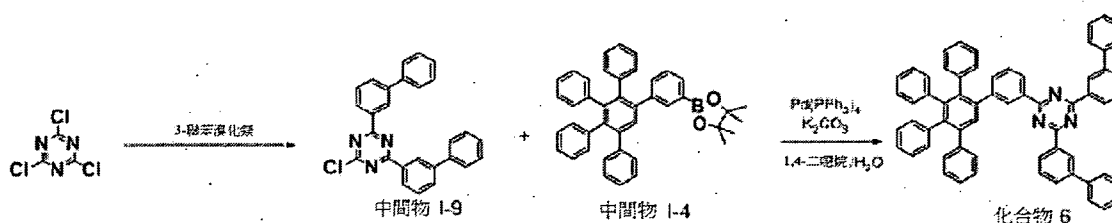
【0128】將中間物 I-8（3.0 克，8.7 毫莫耳）、中間物 I-4（6.1 克，10.5 毫莫耳）、碳酸鉀（3.0 克，21.8 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鈀(0)（0.3 克，0.3 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（30 毫升）及水（15 毫升）中，且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（150 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於單氯苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 3（4.39 克，66%的產率）。

C₅₇H₃₉N₃ 計算值：C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; 實驗值：C, 89.37;

H, 5.13; N, 5.49

合成例 4：化合物 6 的合成

[反應流程 4]



第一步：中間物 I-9 的合成

【0129】將氰尿鹽氯（100.0 克，542.3 毫莫耳）及無水 THF（700 毫升）置於 2 升燒瓶中，且在 0℃ 下以逐滴方式向其中緩慢添加 3-聯苯溴化鎂（3 M，361.4 毫升）。當反應完成時，將水傾入反應溶液中，攪拌混合物 30 分鐘，分離其中的有機層，在用硫酸鎂移除水分之後濃縮，且用甲醇及己烷純化以獲得呈白色固體的中間物 I-9（122.9 克，產率：55%）。

第二步：化合物 6 的合成

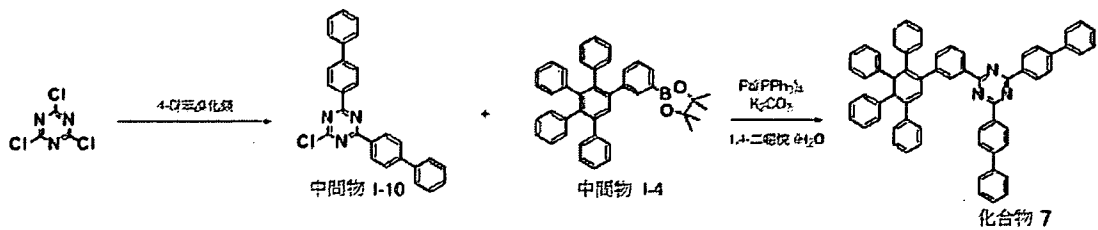
【0130】將中間物 I-9（3.0 克，7.1 毫莫耳）、中間物 I-4（5.0 克，8.6 毫莫耳）、碳酸鉀（2.5 克，17.9 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鉀(0)（0.3 克，0.2 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（20 毫升）及水（10 毫升）中，且將混合物在氮氣流下在 60℃ 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（100 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 6（4.07 克，產率：68%）。

C₆₃H₄₃N₃ 計算值：C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99; 實驗值：C, 89.86;

H, 5.15; N, 4.98

合成例 5：化合物 7 的合成

[反應流程 5]



第一步：中間物 I-10 的合成

【0131】將氰尿酸氯 (100.0 克, 542.3 毫莫耳) 及無水 THF (700 毫升) 置於 2 升燒瓶中, 且在 0°C 下以逐滴方式向其中緩慢添加 4-聯苯
● 溴化鎂 (3 M, 361.4 毫升)。當反應完成時, 將水傾入反應溶液中, 攪拌混合物 30 分鐘, 且分離其中的有機層, 在藉由使用硫酸鎂移除水分之後濃縮, 且用甲醇及己烷純化以獲得呈白色固體的中間物 I-10 (127.4 克, 產率: 57%)。

第二步：化合物 7 的合成

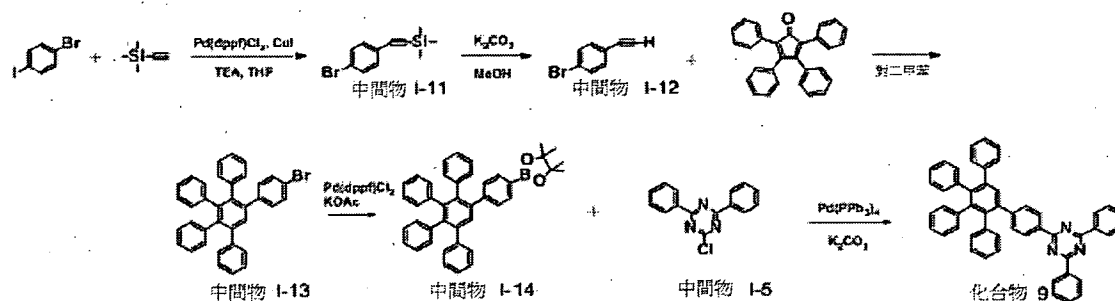
● 【0132】將中間物 I-10 (3.0 克, 7.1 毫莫耳)、中間物 I-4 (5.0 克, 8.6 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.5 克, 17.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.3 克, 0.2 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (20 毫升) 及水 (10 毫升) 中, 且將混合物在氮氣氛圍下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (100 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於二氯苯中, 在移除適量有機溶劑之後經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後用甲醇再結晶以獲得化合物 7 (4.19 克, 產率: 70%)。

C₆₃H₄₃N₃ 計算值: C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99; 實驗值: C, 89.85;

H, 5.16; N, 4.99

合成例 6: 化合物 9 的合成

[反應流程 6]



第一步：中間物 I-11 的合成

【0133】在氮氣氛圍下，將 1-溴-4-碘苯（200.0 克，704.8 毫莫耳）、(1,1'-雙(二苯基膦)二茂鐵)二氯鈾(II)（25.8 克，35.4 毫莫耳）、碘化亞銅（4.04 克，21.2 毫莫耳）、三乙胺（295.6 毫升，2120 毫莫耳）以及四氫呋喃（1700 毫升）置於 3 升圓底燒瓶中。接著，以逐滴方式向其中添加三甲基矽烷基乙炔（107.6 毫升，776.6 毫莫耳），且將混合物在室溫下攪拌 3 小時。過濾反應物，且移除其中的溶劑。經由管柱層析純化所得物以獲得中間物 I-11（155.3 克，產率：87%）。

第二步：中間物 I-12 的合成

【0134】將中間物 I-11（150 克，592.4 毫莫耳）添加至甲醇（1000 毫升）中且溶解於其中，並在反應器中以逐滴方式向其中緩慢添加碳酸鉀（81.6 克，592.4 毫莫耳）。攪拌混合物約 30 分鐘且隨後過濾。在自其中移除全部溶劑之後，將反應物溶解於乙酸乙酯中且溶液用蒸餾水洗滌兩次。接著，移除溶劑以獲得中間物 I-12（103 克，產率：96%）。

第三步：中間物 I-13 的合成

【0135】將中間物 I-12（100.0 克，552.5 毫莫耳）及四苯基環戊二酮（106.2 克，176.2 毫莫耳）放置且溶解於二甲苯（700 毫升）中，且

將溶液加熱並回流 3 小時。將反應物傾入甲醇（2000 毫升）中以完成反應。接著，過濾其中的固體以獲得中間物 I-13（116.0 克，產率：78%）。

第四步：中間物 I-14 的合成

【0136】在氮氣氛圍下，將中間物 I-13（50.0 克，93.02 毫莫耳）溶解於二甲基甲醯胺（DMF，350 毫升）中，向其中添加雙(頻哪醇根基)二硼（28.4 克，111.6 毫莫耳）、(1,1'-雙(二苯基膦)二茂鐵)二氯鈣(II)（4.6 克，5.6 毫莫耳）以及乙酸鉀（27.4 克，279.1 毫莫耳），且將混合物加熱並在 150°C 下回流 24 小時。當反應完成時，添加水至反應溶液，且過濾混合物並隨後在真空烘箱中乾燥。分離所獲得的殘餘物且經由管柱層析純化以獲得中間物 I-14（37 克，產率：68%）。

第五步：化合物 9 的合成

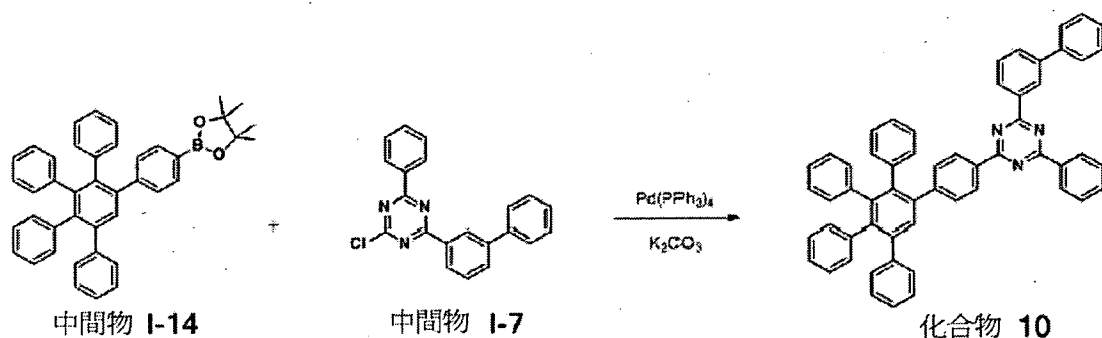
【0137】將中間物 I-14（5.0 克，8.6 毫莫耳）、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（2.8 克，10.3 毫莫耳）、碳酸鉀（3.0 克，21.4 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鈣(0)（0.3 克，0.3 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（30 毫升）及水（15 毫升）中，且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（150 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 9（3.89 克，產率：66%）。

C₅₁H₃₅N₃ 計算值：C, 88.79; H, 5.11; N, 6.09; 實驗值：C, 88.79;

H, 5.11; N, 6.10

合成例 7：化合物 10 的合成

[反應流程 7]



第一步：化合物 10 的合成

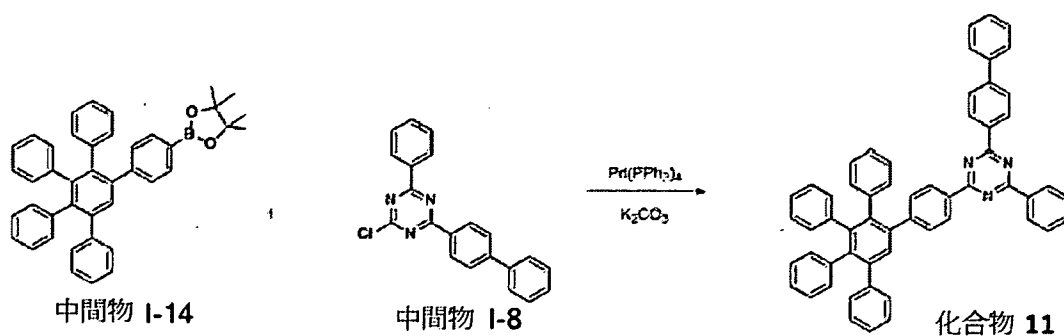
【0138】將 2-氯-4-(聯苯-3-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪 (3.0 克, 8.7 毫莫耳)、中間物 I-14 (6.1 克, 10.5 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.0 克, 21.8 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.3 克, 0.3 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60℃ 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (150 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 10 (4.59 克, 產率: 69%)。

C₅₇H₃₉N₃ 計算值: C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; 實驗值: C, 89.38;

H, 5.13; N, 5.48

合成例 8：化合物 11 的合成

[反應流程 8]



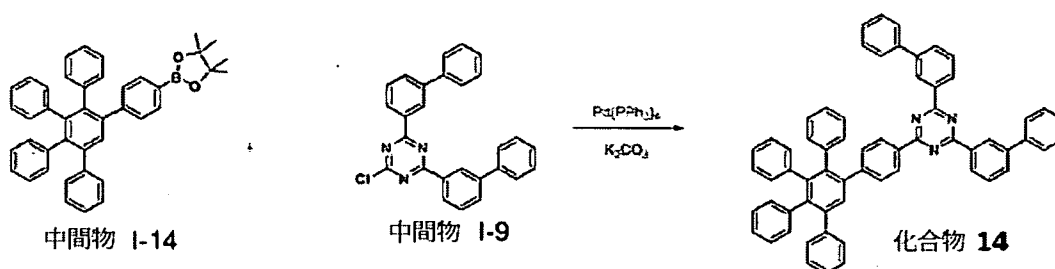
【0139】將 2-氯-4-(聯苯-4-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪 (3.0 克, 8.7 毫莫耳)、中間物 I-14 (6.1 克, 10.5 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.0 克, 21.8 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鉀(0) (0.3 克, 0.3 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將此獲得的混合物添加至甲醇 (150 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於單氯苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 11 (4.06 克, 產率: 61%)。

C₅₇H₃₉N₃ 計算值: C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; 實驗值: C, 89.38;

H, 5.12; N, 5.48

合成例 9: 化合物 14 的合成

[反應流程 9]



【0140】將中間物 I-9 (3.0 克, 7.1 毫莫耳)、中間物 I-14 (5.0 克, 8.6 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.5 克, 17.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鉀(0)

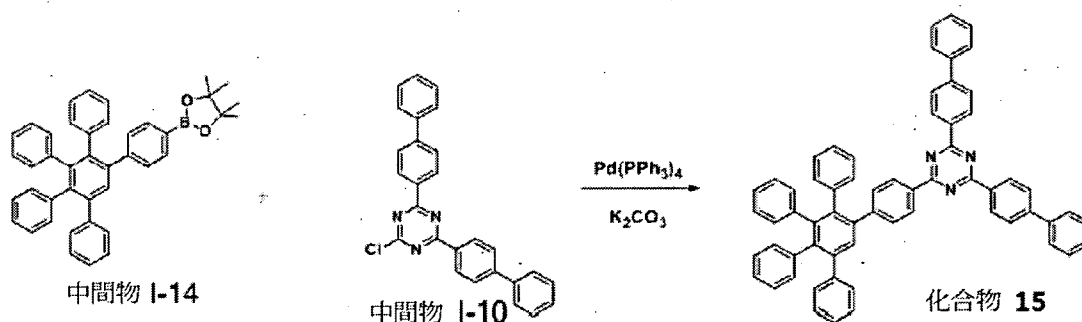
(0.3 克, 0.2 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷(20 毫升) 及水(10 毫升) 中, 且將混合物在氮氣氛圍下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇(100 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 14 (4.19 克, 產率: 70%)。

C₆₃H₄₃N₃ 計算值: C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99; 實驗值: C, 89.84;

H, 5.15; N, 4.99

合成例 10: 化合物 15 的合成

[反應流程 10]



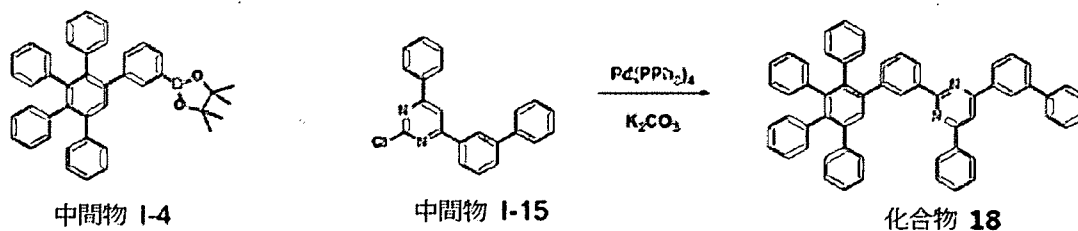
【0141】將中間物 I-10 (3.0 克, 7.1 毫莫耳)、中間物 I-14 (5.0 克, 8.6 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.5 克, 17.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.3 克, 0.2 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷(20 毫升) 及水(10 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇(100 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於二氯苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 15 (4.13 克, 產率: 69%)。

C₆₃H₄₃N₃ 計算值: C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99; 實驗值: C, 89.86;

H, 5.16; N, 4.99

合成例 11：化合物 18 的合成

[反應流程 11]



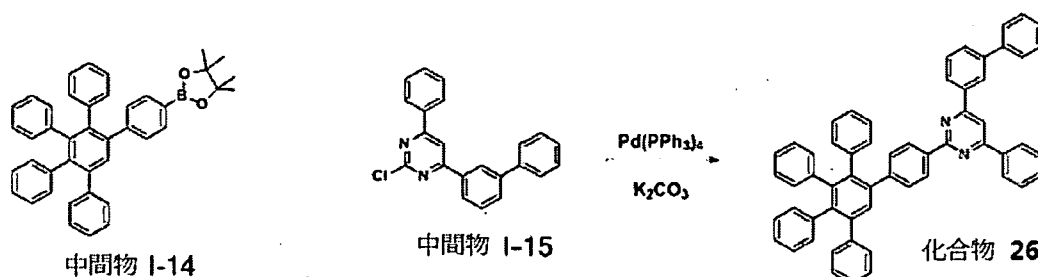
【0142】將中間物 I-4 (5.0 克, 8.6 毫莫耳)、中間物 I-15 (3.5 克, 10.3 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.0 克, 21.4 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.3 克, 0.3 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60℃ 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (100 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 18 (4.39 克, 產率: 67%)。

C₅₈H₄₀N₂ 計算值: C, 91.07; H, 5.27; N, 3.66; 實驗值: C, 91.08;

H, 5.26; N, 3.65

合成例 12：化合物 26 的合成

[反應流程 12]



【0143】將中間物 I-14 (5.0 克, 8.6 毫莫耳)、中間物 I-15 (3.5 克, 10.3 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.0 克, 21.4 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0)

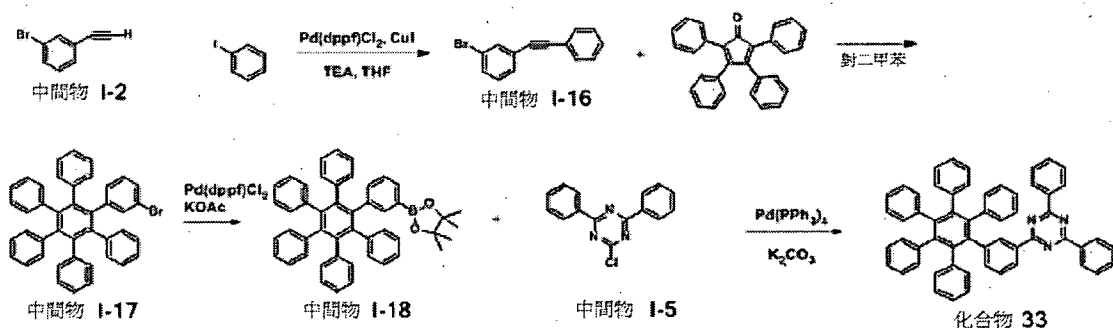
(0.3 克, 0.3 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (100 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 26 (4.19 克, 產率: 64%)。

C₅₈H₄₀N₂ 計算值: C, 91.07; H, 5.27; N, 3.66; 實驗值: C, 91.07;

H, 5.26; N, 3.67

合成例 13: 化合物 33 的合成

[反應流程 13]



第一步: 中間物 I-16 的合成

【0144】中間物 I-16 (100 克, 產率: 79%) 是根據與中間物 I-1 的合成方法相同的方法, 藉由使用中間物 I-2 (100 克, 549.0 毫莫耳) 及碘苯 (120 克, 488.18 毫莫耳) 在氮氣氛圍下獲得。

第二步: 中間物 I-17 的合成

【0145】中間物 I-17 (186 克, 產率: 74%) 是根據與中間物 I-3 的合成方法相同的方法, 藉由使用中間物 I-16 (93.0 克, 514.98 毫莫耳) 及四苯基環戊二酮 (180 克, 468.18 毫莫耳) 在氮氣氛圍下獲得。

第三步: 中間物 I-18 的合成

【0146】中間物 I-18 (72 克，產率：75%) 是根據與中間物 I-4 的合成方法相同的方法，藉由使用中間物 I-17 (90.0 克，146.71 毫莫耳) 在氮氣氛圍下獲得。

第四步：化合物 33 的合成

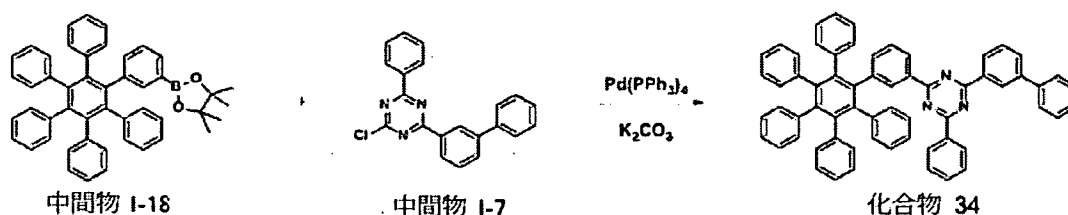
【0147】將中間物 I-18 5.0 克 (7.6 毫莫耳)、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪 (2.4 克，9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克，18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.26 克，0.23 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中，且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (100 毫升) 中，將其中結晶的固體溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 33 (4.18 克，產率：72%)。

C₅₇H₃₉N₃ 計算值：C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49，實驗值：C, 89.37;

H, 5.13; N, 5.48

合成例 14：化合物 34 的合成

[反應流程 14]



【0148】將中間物 I-18 (5.0 克，7.6 毫莫耳)、中間物 I-7 (3.1 克，9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克，18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.26 克，0.23 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中，且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小

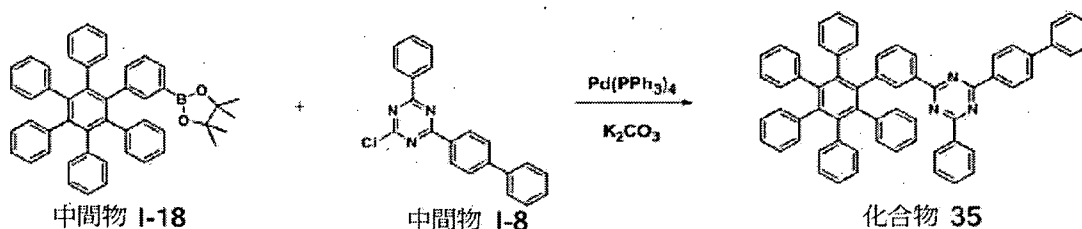
時。將所獲得的混合物添加至甲醇（100 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 34（3.83 克，產率：60%）。

C₆₃H₄₃N₃ 計算值：C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99，實驗值：C, 89.85;

H, 5.15; N, 4.99

合成例 15：化合物 35 的合成

[反應流程 15]



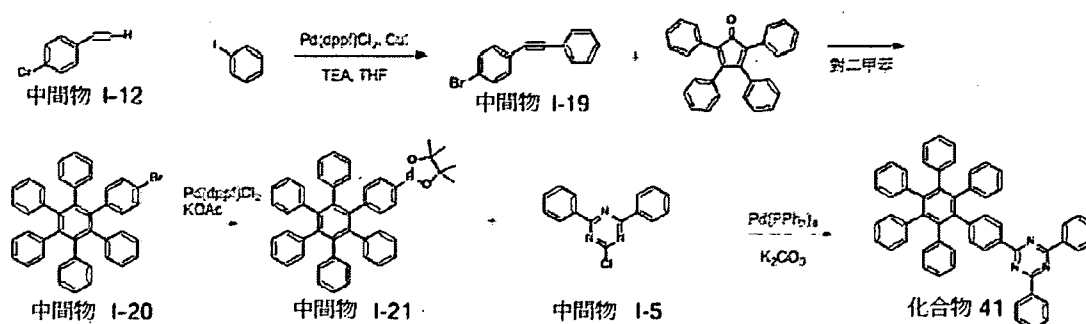
【0149】將中間物 I-18（5.0 克，7.6 毫莫耳）、中間物 I-8（3.1 克，9.1 毫莫耳）、碳酸鉀（2.6 克，18.9 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鈀(0)（0.26 克，0.23 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（30 毫升）及水（15 毫升）中，且將混合物在氮氣流下在 60℃ 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（100 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於單氯苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 35（4.01 克，產率：63%）。

C₆₃H₄₃N₃ 計算值：C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99，實驗值：C, 89.86;

H, 5.15; N, 4.99

合成例 16：化合物 41 的合成

[反應流程 16]



第一步：中間物 I-19 的合成

【0150】中間物 I-19 (102 克，產率：80%) 是根據與中間物 I-1 的合成方法相同的方法，藉由使用中間物 I-12 (100 克，549.0 毫莫耳) 及碘苯 (120 克，488.18 毫莫耳) 在氮氣氛圍下獲得。

第二步：中間物 I-20 的合成

【0151】中間物 I-20 (196 克，產率：78%) 是根據與中間物 I-3 的合成方法相同的方法，藉由使用中間物 I-19 (93.0 克，514.98 毫莫耳) 及四苯基環戊二酮 (180 克，468.18 毫莫耳) 在氮氣氛圍下獲得。

第三步：中間物 I-21 的合成

【0152】中間物 I-21 (78 克，產率：81%) 是根據與中間物 I-4 的合成方法相同的方法，藉由使用中間物 I-20 (90.0 克，146.71 毫莫耳) 在氮氣氛圍下獲得。

第四步：化合物 41 的合成

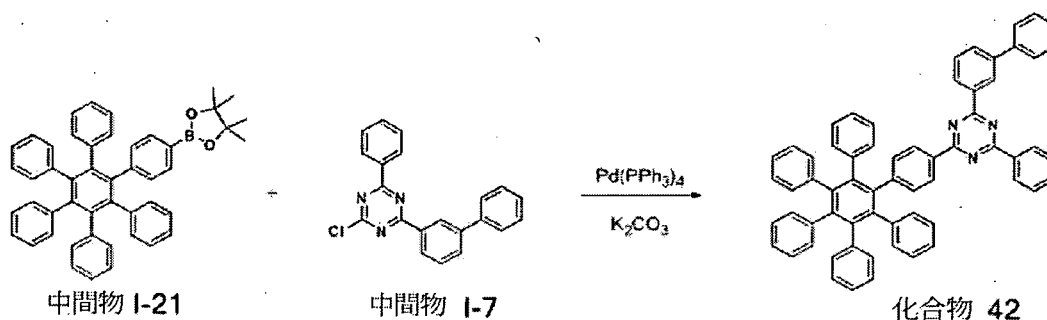
【0153】將中間物 I-21 (5.0 克，7.6 毫莫耳)、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪 (2.4 克，9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克，18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.26 克，0.23 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中，且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (100 毫升) 中，且過

濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 41(3.88 克，產率：67%)。

C₅₇H₃₉N₃ 計算值：C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49，實驗值：C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49

合成例 17：化合物 42 的合成

[反應流程 17]

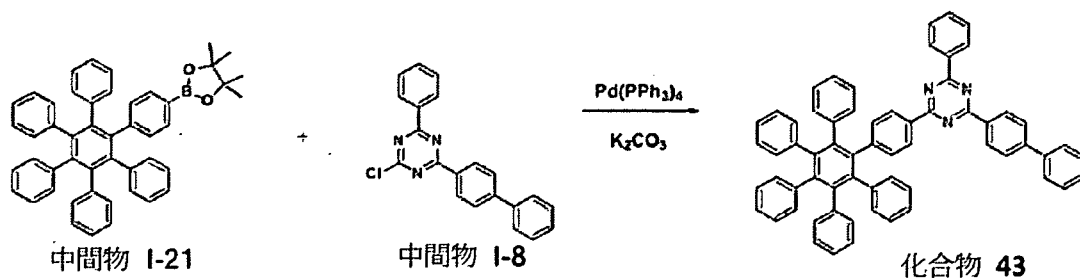


【0154】將中間物 I-21 (5.0 克，7.6 毫莫耳)、中間物 I-7 (3.1 克，9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克，18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.26 克，0.23 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中，且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (100 毫升) 中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 42 (4.08 克，產率：64%)。

C₆₃H₄₃N₃ 計算值：C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99，實驗值：C, 89.86; H, 5.15; N, 4.98

合成例 18：化合物 43 的合成

[反應流程 18]



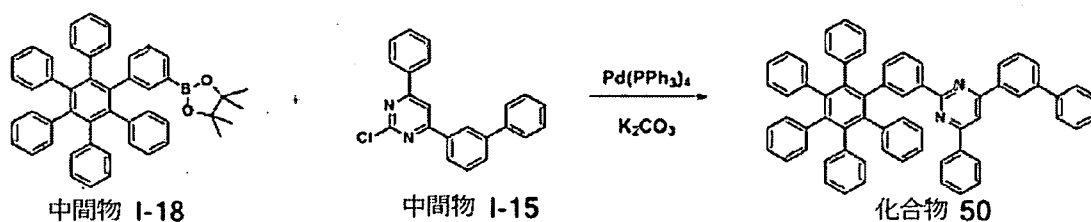
【0155】將中間物 I-21 (5.0 克, 7.6 毫莫耳)、中間物 I-8 (3.1 克, 9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克, 18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.26 克, 0.23 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (100 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於單氯苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 43 (4.26 克, 產率: 67%)。

C₆₃H₄₃N₃ 計算值: C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99, 實驗值: C, 89.86;

H, 5.14; N, 4.99

合成例 19: 化合物 50 的合成

[反應流程 19]



【0156】將中間物 I-18 (5.0 克, 7.6 毫莫耳)、中間物 I-15 (3.1 克, 9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克, 18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.26 克, 0.23 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小

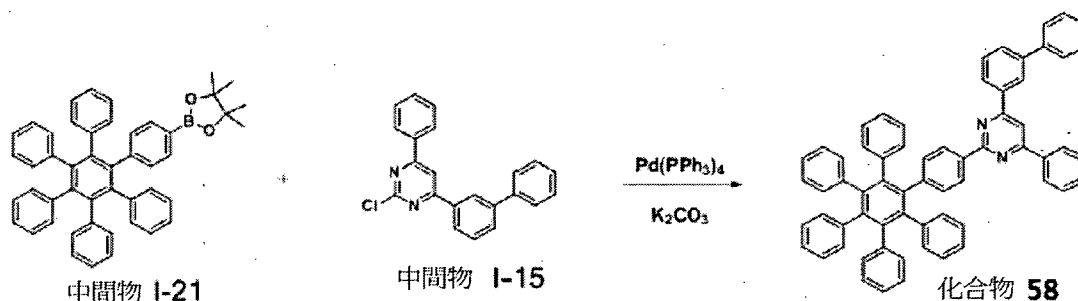
時。將所獲得的混合物添加至甲醇（100 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 50（4.32 克，產率：68%）。

C₆₄H₄₄N₂ 計算值：C, 91.40; H, 5.27; N, 3.33，實驗值：C, 91.40;

H, 5.27; N, 3.32

合成例 20：化合物 58 的合成

[反應流程 20]



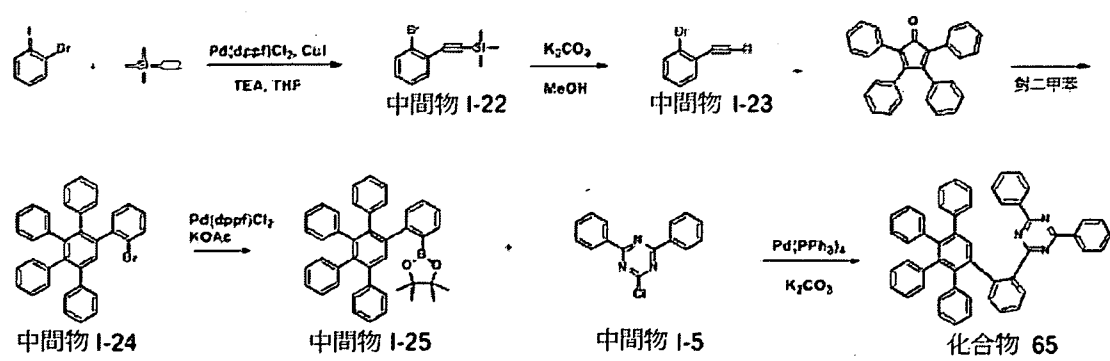
【0157】將中間物 I-21（5.0 克，7.6 毫莫耳）、中間物 I-15（3.1 克，9.1 毫莫耳）、碳酸鉀（2.6 克，18.9 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鈀(0)（0.26 克，0.23 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（30 毫升）及水（15 毫升）中，且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（100 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 58（3.78 克，產率：61%）。

C₆₄H₄₄N₂ 計算值：C, 91.40; H, 5.27; N, 3.33，實驗值：C, 91.39;

H, 5.27; N, 3.32

合成例 21：化合物 65 的合成

[反應流程 21]



第一步：中間物 I-25 的合成

【0158】除使用 1-溴-2-碘苯代替合成例 1 的[反應流程 1]中的 1-溴-3-碘苯作為起始材料以外，根據與中間物 I-4 的合成方法相同的方法獲得中間物 I-25（30.2 克，產率：65%）。

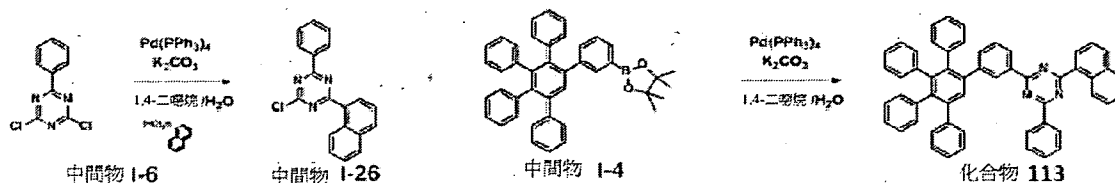
第二步：化合物 65 的合成

【0159】將中間物 I-25（5.0 克，8.6 毫莫耳）、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（2.8 克，10.3 毫莫耳）、碳酸鉀（3.0 克，21.4 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鉀(0)（0.3 克，0.3 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（30 毫升）及水（15 毫升）中，且將混合物在氮氣流下在 60℃ 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（150 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 66（4.06 克，產率：68%）。

C51H35N3 計算值：C, 88.79; H, 5.11; N, 6.09; 實驗值：C, 88.79; H, 5.11; N, 6.10

合成例 22：化合物 113 的合成

[反應流程 22]



第一步：中間物 I-26 的合成

【0160】除使用萘基硼酸代替 3-聯苯硼酸以外，根據與合成例 2 的中間物 I-7 相同的方法獲得中間物 I-26（15.2 克，產率：45%）。

第二步：化合物 113 的合成

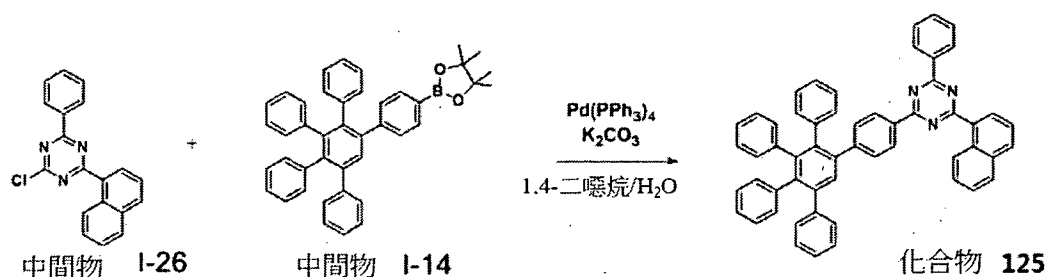
【0161】將中間物 I-26（3.0 克，9.4 毫莫耳）、中間物 I-4（6.6 克，11.3 毫莫耳）、碳酸鉀（3.3 克，23.6 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鈀(0)（0.3 克，0.3 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（30 毫升）及水（15 毫升）中，且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（150 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 113（4.51 克，產率：65%）。

C₅₅H₃₇N₃ 計算值：C, 89.28; H, 5.04; N, 5.68; 實驗值：C, 89.28;

H, 5.03; N, 5.68

合成例 23：化合物 125 的合成

[反應流程 23]



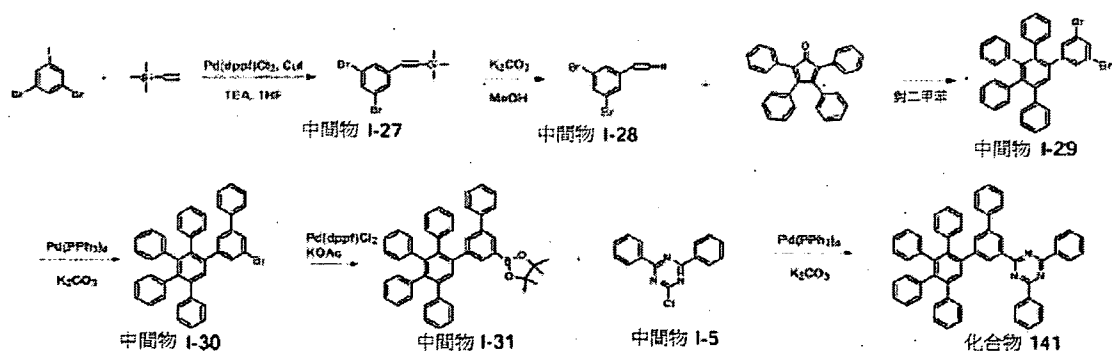
【0162】將中間物 I-26 (3.0 克, 9.4 毫莫耳)、中間物 I-14 (6.6 克, 11.3 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.3 克, 23.6 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.3 克, 0.3 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (150 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 125 (4.67 克, 產率: 66%)。

C₅₅H₃₇N₃ 計算值: C, 89.28; H, 5.04; N, 5.68; 實驗值: C, 89.29;

H, 5.03; N, 5.67

合成例 24: 化合物 141 的合成

[反應流程 24]



第一步: 中間物 I-31 的合成

【0163】除使用 1,3-二溴-5-碘苯代替 1-溴-3-碘苯以外, 根據與中間物 I-4 的合成方法相同的方法獲得中間物 I-31 (48.4 克, 產率: 65%)。

第二步: 化合物 141 的合成

【0164】將中間物 I-31 (5.0 克, 7.6 毫莫耳)、中間物 I-5 (2.4 克, 9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克, 18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0)

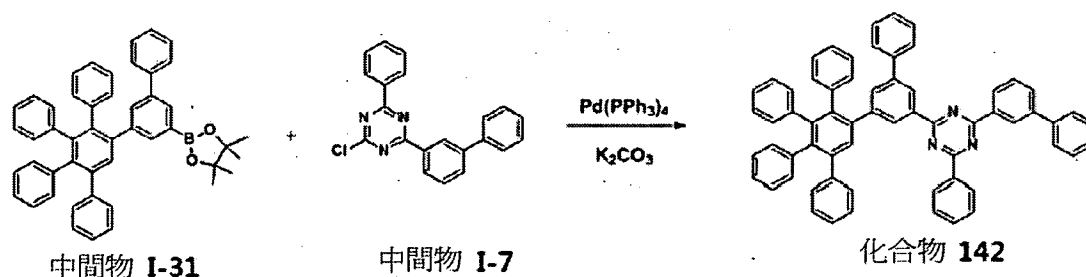
(0.3 克, 0.2 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (150 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 141 (3.99 克, 產率: 69%)。

C₅₇H₃₉N₃ 計算值: C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; 實驗值: C, 89.38;

H, 5.12; N, 5.47

合成例 25: 化合物 142 的合成

[反應流程 25]



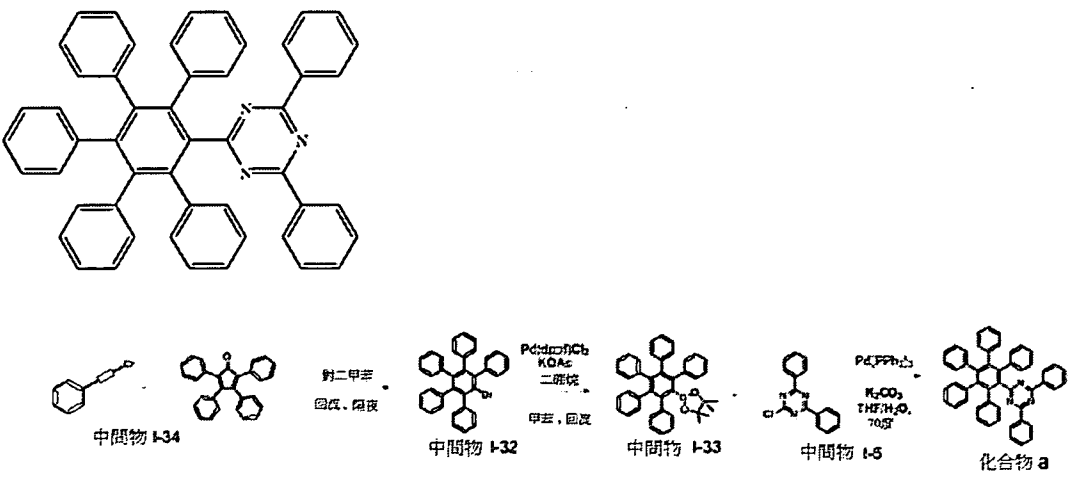
【0165】將中間物 I-31 (5.0 克, 7.6 毫莫耳)、中間物 I-7 (3.1 克, 9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克, 18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.3 克, 0.2 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (150 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 142 (4.22 克, 產率: 66%)。

C₆₃H₄₃N₃ 計算值: C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99; 實驗值: C, 89.86;

H, 5.15; N, 4.99

比較合成例 1

[化合物 a]

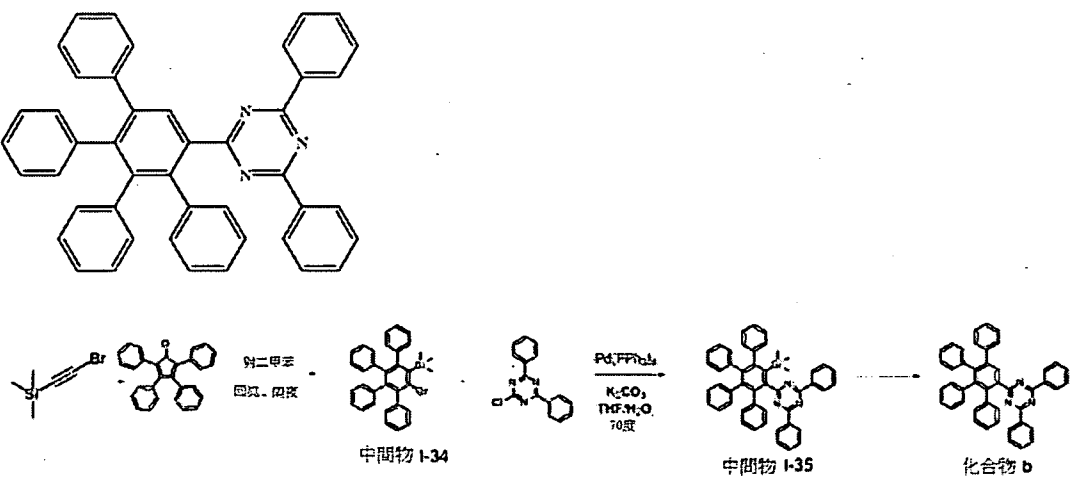


化合物 a 的合成

【0166】除使用中間物 1-34 代替中間物 1-2 以外，根據與合成例 1 的化合物 1 的合成方法相同的方法獲得化合物 a (6.3 克，產率：51%)。

比較合成例 2

[化合物 b]



化合物 b 的合成

【0167】除使用(溴乙炔基)三甲基矽烷代替中間物 1-2 以外，根據與合成例 1 的化合物 1 的合成方法相同的方法獲得化合物 b (3.4 克，產

率：41%）。

（製造有機發光二極體：發射層元件 1）

實例 1

【0168】藉由使用根據合成例 1 的化合物 1 作為主體及 Ir(PPy)₃ 作為摻雜劑來製造有機發光二極體。

【0169】使用 1000 埃厚的 ITO 作為陽極，且使用 1000 埃厚的鋁 (Al) 作為陰極。具體而言，在以下方法中製造有機發光二極體：將具有 15 歐姆/平方公分薄層電阻的 ITO 玻璃基板切割成 50 毫米×50 毫米×0.7 毫米的尺寸，將其分別在丙酮、異丙醇以及純水中超音波清潔 15 分鐘且將其 UV 臭氧清潔 30 分鐘。

【0170】在基板上，藉由在 650×10^{-7} 帕的真空度下以 0.1 奈米/秒至 0.3 奈米/秒的沈積速率沈積 N4,N4'-二(萘-1-基)-N4,N4'-二苯基聯苯-4,4'-二胺 (N4,N4'-di(naphthalen-1-yl)-N4,N4'-diphenylbiphenyl-4,4'-diamine, NPB) (80 奈米) 形成 800 埃厚的電洞傳輸層。隨後，藉由在與上述相同的真空沈積條件下使用根據合成例 1 的化合物 1 形成 300 埃厚的膜作為發射層，且在本文中，同時沈積 Ir(PPy)₃ 作為磷光摻雜劑。在本文中，藉由調節沈積速率以發射層總量的 100 重量%計沈積 10 重量%的量的磷光摻雜劑。

【0171】在發射層上，藉由在與上述相同的真空沈積條件下沈積雙(2-甲基-8-羥基喹啉)-4-(苯基苯酚根基)鋁 (bis(2-methyl-8-quinolinolate)-4-(phenylphenolato)aluminium, BAlq) 形成 50 埃厚的膜作為電洞阻擋層。隨後，藉由在與上述相同的真空沈積條件下沈積

Alq3 形成 200 埃厚的膜作為電子傳輸層。在電子傳輸層上，依序沈積 LiF 及 Al 作為陰極，從而製造有機光電式元件。

【0172】有機光電式元件具有 ITÖ/NPB (80 奈米)/EML (化合物 1 (90 重量%) + Ir(PPy)₃ (10 重量%)，(30 奈米))/Balq (5 奈米)/Alq3 (20 奈米)/LiF (1 奈米)/Al (100 奈米) 的結構。

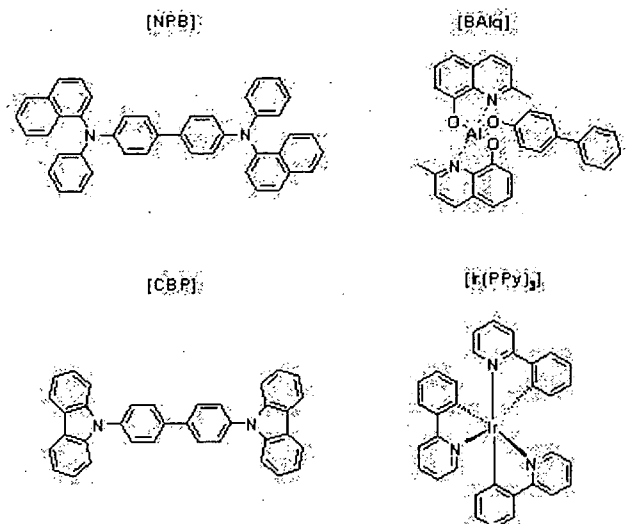
實例 2 至實例 15

【0173】實例 2 至實例 15 的每一有機發光二極體是根據與實例 1 相同的方法，藉由使用根據合成例 2 至合成例 4、合成例 6、合成例 7、合成例 11 至合成例 14、合成例 16、合成例 17、合成例 21、合成例 22 以及合成例 25 的化合物 2、化合物 3、化合物 6、化合物 9、化合物 10、化合物 18、化合物 26、化合物 33、化合物 34、化合物 41、化合物 42、化合物 65、化合物 113 以及化合物 142 代替根據合成例 1 的化合物 1 來製造。

比較例 1 至比較例 3

【0174】比較例 1 至比較例 3 的每一有機發光二極體是根據與實例 1 相同的方法，藉由使用 CBP、化合物 a 或化合物 b 代替根據合成例 1 的化合物 1 來製造。

【0175】用於製造有機發光二極體的 NPB、BAIq、CBP 以及 Ir(PPy)₃ 分別具有以下結構。



評估

【0176】量測根據實例 1 至實例 15 以及比較例 1 至比較例 3 的每一有機發光二極體的電流密度變化、亮度變化以及發光效率。

【0177】具體量測方法如下，且結果顯示於下表 1 中。

(1) 量測視電壓變化而定的電流密度變化

【0178】關於流入單位元件的電流值，使用電流-電壓計（吉時利 (Keithley) 2400）在電壓自 0 伏特增加至 10 伏特時量測所獲得的有機發光二極體，且所量測的電流值除以面積，從而得到結果。

(2) 量測視電壓變化而定的亮度變化

【0179】藉由使用亮度計（美能達 (Minolta) Cs-1000A）在有機發光二極體的電壓自 0 伏特增加至 10 伏特時量測亮度。

(3) 量測發光效率

【0180】藉由使用來自項目 (1) 及項目 (2) 的亮度、電流密度及電壓（伏特）計算相同電流密度（10 毫安/平方公分）下的電流效率（坎德拉/安，cd/A）。

(4) 量測壽命

【0181】壽命是藉由在亮度（坎德拉/平方公尺）維持在 5000 坎德拉/平方公尺時，量測當電流效率（坎德拉/安）降低至 90% 時的時間來獲得。

[表 1]

編號	化合物	驅動電壓 (伏特)	顏色 (EL 顏色)	效率 (坎德拉/安)	90%壽命 (小時) (在 5000 坎德拉/平方公尺下)
實例 1	化合物 1	4.01	綠色	39.2	53
實例 2	化合物 2	3.84	綠色	42.3	54
實例 3	化合物 3	3.81	綠色	41.7	48
實例 4	化合物 6	3.78	綠色	41.0	52
實例 5	化合物 9	3.98	綠色	38.9	42
實例 6	化合物 10	3.82	綠色	41.5	43
實例 7	化合物 18	4.13	綠色	36.2	46
實例 8	化合物 26	4.09	綠色	37.5	47
實例 9	化合物 33	4.02	綠色	39.4	54
實例 10	化合物 34	3.83	綠色	42.3	55
實例 11	化合物 41	3.96	綠色	39.0	51
實例 12	化合物 42	3.81	綠色	41.7	53
實例 13	化合物 65	3.71	綠色	40.2	56
實例 14	化合物 113	4.11	綠色	37.1	40
實例 15	化合物 142	3.82	綠色	42.3	48
比較例 1	CBP	4.29	綠色	31.7	25
比較例 2	化合物 a	4.19	綠色	35.6	36
比較例 3	化合物 b	4.14	綠色	36.1	35

【0182】參照表 1，根據實例 1 至實例 15 的有機發光二極體相較於根據比較例 1 至比較例 3 的有機發光二極體，顯示出改良的壽命特徵以及改良的驅動電壓及效率。如上所述，由於藉由堆疊因大體積取代基而相對平坦的雜環部分使得電子易於注入及傳輸，故驅動電壓降低。相較於根據本發明的化合物，根據比較例的化合物不具有連接基團且

因此顯示出填充相對不足的分子並劣化二極體。相反地，具有鄰位鍵的實例 13 的化合物具有扭結分子結構且因此顯示出堆疊具有 ET 特徵取代基的雜環部分，從而驅動電壓最快。

(製造有機發光二極體：發射層元件 2)

實例 16

【0183】用氧化銦錫 (ITO) 塗佈為 1500 埃厚的薄膜的玻璃基板用蒸餾水進行超音波洗滌。在用蒸餾水洗滌之後，玻璃基板用例如異丙醇、丙酮、甲醇等溶劑進行超音波洗滌且乾燥，隨後移至電漿清潔器，藉由使用氧電漿清潔 10 分鐘，並移至真空沈積器。此獲得的 ITO 透明電極用作陽極，藉由真空沈積化合物 A 而在 ITO 基板上形成 700 埃厚的電洞注入層，且藉由沈積化合物 B 至 50 埃厚及沈積化合物 C 至 1020 埃厚而在注入層上形成電洞傳輸層。在電洞傳輸層上，藉由同時真空沈積根據合成例 2 的化合物 2 及作為第二主體化合物的化合物 B-1 作為主體及真空沈積摻雜量為 10 重量%的三(2-苯基吡啶)銱(III)[Ir(ppy)₃]作為摻雜劑形成 400 埃厚的發射層。在本文中，化合物 1 及化合物 B-1 以 1 : 1 的比率使用。

【0184】隨後，藉由在發射層上同時真空沈積 1 : 1 比率的化合物 D 及 Liq 形成 300 埃厚的電子傳輸層且在電子傳輸層上依序真空沈積 Liq (15 埃) 及 Al (1200 埃) 形成陰極來製造有機發光二極體。

【0185】有機發光二極體具體而言具有以下五個有機薄膜層狀結構。

【0186】ITO/化合物 A (700 埃)/化合物 B (50 埃)/化合物 C (1020 埃)/EML [化合物 1 : B-1 : Ir(ppy)₃=45 重量% : 45 重量% : 10 重量%]

(400 埃) / 化合物 D : Liq (300 埃) / Liq (15 埃) / Al (1200 埃) 的結構。

化合物 A : N4,N4'-二苯基-N4,N4'-雙(9-苯基-9H-咔唑-3-基)聯苯-4,4'-二胺 (N4,N4'-diphenyl-N4,N4'-bis(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)biphenyl-4,4'-diamine)

化合物 B : 1,4,5,8,9,11-六氮雜三伸苯基-六甲腈 (1,4,5,8,9,11-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile, HAT-CN)

化合物 C : N-(聯苯-4-基)-9,9-二甲基-N-(4-(9-苯基-9H-咔唑-3-基)苯基)-9H-芴-2-胺 (N-(biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-N-(4-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)phenyl)-9H-fluoren-2-amine)

化合物 D : 8-(4-(4,6-二(萘-2-基)-1,3,5-三嗪-2-基)苯基)喹啉 (8-(4-(4,6-di(naphthalen-2-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)quinoline)

實例 17

【0187】除使用重量比為 1 : 1 的化合物 2 及化合物 B-31 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 18

【0188】除使用重量比為 1 : 1 的化合物 2 及化合物 B-154 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 19

【0189】除使用重量比為 1 : 1 的化合物 2 及化合物 B-156 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 20

【0190】除使用重量比為 1：1 的化合物 2 及化合物 C-1 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 21

【0191】除使用重量比為 1：1 的化合物 10 及化合物 B-31 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 22

【0192】除使用重量比為 1：1 的化合物 34 及化合物 B-31 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 23

【0193】除使用重量比為 1：1 的化合物 42 及化合物 B-31 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 24

【0194】除使用重量比為 1：1 的化合物 65 及化合物 B-31 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 25

【0195】除使用重量比為 1：1 的化合物 142 及化合物 B-31 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

比較例 4 至比較例 6

【0196】除使用 CBP、化合物 a 或化合物 b 單獨作為主體以外，根據與實例 16 相同的方法製造根據比較例 4 至比較例 6 的每一有機發光二極體。

評估

【0197】量測根據實例 16 至實例 25 以及比較例 4 至比較例 6 的每一有機發光二極體的發光效率及壽命特徵。

【0198】具體量測方法如下，且結果顯示於下表 2 中。

(1) 量測視電壓變化而定的電流密度變化

【0199】關於流入單位元件的電流值，使用電流-電壓計(吉時利 2400)在電壓自 0 伏特增加至 10 伏特時量測所獲得的有機發光二極體，且所量測的電流值除以面積，從而得到結果。

(2) 量測視電壓變化而定的亮度變化

【0200】藉由使用亮度計(美能達 Cs-1000A)在有機發光二極體的電壓自 0 伏特增加至 10 伏特時量測亮度。

(3) 量測發光效率

【0201】藉由使用來自項目(1)及項目(2)的亮度、電流密度及電壓(伏特)計算相同電流密度(10 毫安/平方公分)下的電流效率(坎德拉/安)。

(4) 量測壽命

【0202】壽命是藉由在亮度(坎德拉/平方公尺)維持在 6000 坎德拉/平方公尺時，量測當電流效率(坎德拉/安)降低至 97%時的時間來獲得。

[表 2]

	第一主體	第二主體	第一主體：第二主體	發光效率 (坎德拉/安)	壽命 T 97 (小時)
實例 16	化合物 2	B-1	1 : 1	46.2	65
實例 17	化合物 2	B-31	1 : 1	53.5	71
實例 18	化合物 2	B-154	1 : 1	52.8	68
實例 19	化合物 2	B-156	1 : 1	52.5	67

實例 20	化合物 2	C-1	1 : 1	50.1	62
實例 23	化合物 10	B-31	1 : 1	52.5	70
實例 24	化合物 34	B-31	1 : 1	54.0	72
實例 25	化合物 42	B-31	1 : 1	52.4	69
實例 26	化合物 65	B-31	1 : 1	55.3	60
實例 27	化合物 142	B-31	1 : 1	54.4	69
比較例 4	CBP		-	31.7	25
比較例 5	化合物 a		-	35.6	36
比較例 6	化合物 b		-	36.1	35

【0203】參照表 2，根據實例 16 至實例 25 的有機發光二極體相較於根據比較例 3 至比較例 6 的有機發光二極體，顯示出顯著改良的發光效率及壽命特徵。

（製造有機發光二極體）

實例 26

【0204】用氧化銦錫（ITO）塗佈為 1500 埃厚的薄膜的玻璃基板用蒸餾水洗滌。在用蒸餾水洗滌之後，玻璃基板用例如異丙醇、丙酮、甲醇等溶劑進行超音波洗滌且乾燥，移至電漿清潔器，用氧電漿清潔 10 分鐘，並移至真空沈積器。此獲得的 ITO 透明電極用作陽極，藉由真空沈積化合物 A 而在 ITO 基板上形成 700 埃厚的電洞注入層，且藉由沈積化合物 B 至 50 埃厚及沈積化合物 C 至 1020 埃厚而在注入層上形成電洞傳輸層。接著，藉由真空沈積 BH113 及 BD370（經銷商：SFC 公司（SFC Inc.））作為藍螢光發光主體及摻雜劑濃度為 5 重量%的摻雜劑而在上面形成 200 埃厚的發射層。在發射層上，真空沈積化合物 1 以形成 50 埃厚的電子傳輸輔助層。電子傳輸輔助層可藉由單獨使用由化學式 I 表示的材料或混合所述材料與化合物 B 及化合物 C 來形成。

在電子傳輸輔助層上，藉由以 1：1 的重量比同時真空沈積化合物 D 及 Liq 形成 300 埃厚的電子傳輸層，且在電子傳輸層上，藉由依序真空沈積 Liq 至 15 埃厚及真空沈積 Al 至 1200 埃厚形成陰極，從而製造有機發光二極體。有機發光二極體具有 5 個有機薄膜層的結構且具體而言，ITO/化合物 A（700 埃）/化合物 B（50 埃）/化合物 C（1020 埃）/EML[BH113：BD370=95：5(重量：重量)]（200 埃）/化合物 1（50 埃）/化合物 D：Liq（300 埃）=1：1/Liq（15 埃）/Al（1200 埃）。

化合物 A：N4,N4'-二苯基-N4,N4'-雙(9-苯基-9H-呋唑-3-基)聯苯-4,4'-二胺

化合物 B：1,4,5,8,9,11-六氮雜三伸苯基-六甲腈（HAT-CN）

化合物 C：N-(聯苯-4-基)-9,9-二甲基-N-(4-(9-苯基-9H-呋唑-3-基)苯基)-9H-芴-2-胺

化合物 D：8-(4-(4,6-二(萘-2-基)-1,3,5-三嗪-2-基)苯基)喹啉

實例 27 至實例 40

【0205】除分別使用化合物 2、3、6、9、10、18、26、33、34、41、42、65、113 以及 142 以外，根據與實例 26 相同的方法製造根據實例 27 至實例 40 的每一有機發光二極體。

比較例 7

【0206】除使用化合物 a 以外，根據與實例 26 相同的方法製造有機發光二極體。

比較例 8

【0207】除使用化合物 b 以外，根據與實例 26 相同的方法製造有機

發光二極體。

比較例 9

【0208】除不使用電子傳輸輔助層以外，根據與實例 26 相同的方法製造有機發光二極體。

評估

【0209】量測根據實例 26 至實例 40 以及比較例 7 至比較例 9 的每一有機發光二極體的電流密度變化、亮度變化以及發光效率。

【0210】具體量測方法如下，且結果顯示於表 3 中。

(1) 量測視電壓變化而定的電流密度變化

【0211】關於流入單位元件的電流值，使用電流-電壓計(吉時利 2400)在電壓自 0 伏特增加至 10 伏特時量測所獲得的有機發光二極體，且所量測的電流值除以面積，從而得到結果。

(2) 量測視電壓變化而定的亮度變化

【0212】藉由使用亮度計(美能達 Cs-1000A)在有機發光二極體的電壓自 0 伏特增加至 10 伏特時量測亮度。

(3) 量測發光效率

【0213】藉由使用來自項目(1)及項目(2)的亮度、電流密度及電壓(伏特)計算相同電流密度(10 毫安/平方公分)下的電流效率(坎德拉/安)。

(5) 量測壽命

【0214】根據實例 26 至實例 40 以及比較例 7 至比較例 9 的有機發光二極體的 T97 壽命是在以 750 坎德拉/平方公尺作為初始亮度(坎德拉

/平方公尺)發射光且使用博蘭諾克(Polanonix)壽命量測系統量測其亮度視時間而降低之後，作為當其亮度相對於初始亮度(坎德拉/平方公尺)降低至97%時的時間來量測。

[表 3]

元件	電子傳輸輔助層 (重量比)	發光效率 (坎德拉/安)	色座標 (x, y)	T97 (小時) 在 750 尼特下
實例 26	化合物 1	8.5	(0.132, 0.149)	66
實例 27	化合物 2	8.8	(0.133, 0.148)	69
實例 28	化合物 3	8.5	(0.132, 0.149)	66
實例 29	化合物 6	8.5	(0.132, 0.150)	65
實例 30	化合物 9	8.4	(0.132, 0.149)	65
實例 31	化合物 10	8.6	(0.133, 0.148)	67
實例 32	化合物 18	7.9	(0.132, 0.149)	62
實例 33	化合物 26	7.7	(0.132, 0.159)	61
實例 34	化合物 33	8.3	(0.133, 0.149)	65
實例 35	化合物 34	8.5	(0.133, 0.148)	68
實例 36	化合物 41	8.2	(0.132, 0.149)	64
實例 37	化合物 42	8.5	(0.133, 0.149)	66
實例 38	化合物 65	8.7	(0.132, 0.149)	62
實例 39	化合物 113	8.1	(0.133, 0.148)	63
實例 40	化合物 142	8.8	(0.132, 0.149)	69
比較例 7	化合物 a	7.5	(0.132, 0.149)	58
比較例 8	化合物 b	7.5	(0.132, 0.149)	57
比較例 9	不使用	5.8	(0.135, 0.147)	25

【0215】參照表 3，根據實例 26 至實例 40 的有機發光二極體相較於根據比較例 7 至比較例 9 的有機發光二極體，顯示出同時改良的發光效率及壽命特徵。

【0216】雖然本發明已結合目前視為實用的示例性實施例加以闡述，但應理解，本發明不限於所揭示的實施例，而是相反地意欲涵蓋包含在隨附申請專利範圍的精神和範圍內的各種修改及等效配置。因此，應理解上述實施例為示例性的，而不以任何方式限制本發明。

【符號說明】

【0217】

31：電洞傳輸層

33：電洞傳輸輔助層

34：電子傳輸層

35：電子傳輸輔助層

36：電子注入層

37：電洞注入層

100、200、300、400：有機發光二極體

105：有機層

110：陰極

120：陽極

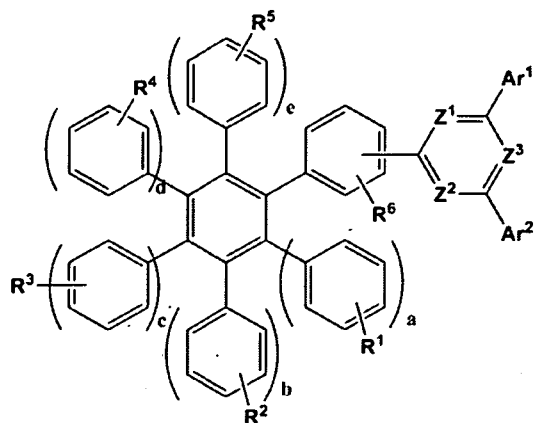
130：發射層

140：電洞輔助層

【發明申請專利範圍】

【第1項】一種有機光電元件用化合物，由化學式1表示：

[化學式 1]



其中，在化學式 1 中，

R¹ 至 R⁵ 獨立地為氫、氬、經取代或未經取代的 C1 至 C4 烷基或苯基，

Z¹ 至 Z³ 獨立地為 CR^a 或 N，

Z¹ 至 Z³ 中的至少兩者為 N，

R^a 及 R⁶ 為氫、氬、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C12 芳基，

Ar¹ 及 Ar² 獨立地為氫、氬、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C18 芳基，

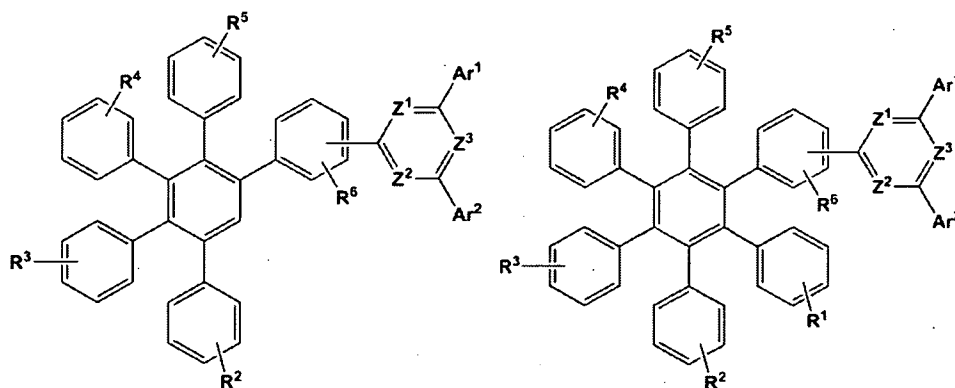
a、b、c、d 以及 e 獨立地為整數 0 或 1，

4 ≤ a+b+c+d+e ≤ 5，且

所述「經取代」是指至少一個氫經氬、C1 至 C4 烷基或 C6 至 C12 芳基置換。

【第2項】如申請專利範圍第1項所述的有機光電元件用化合物，其中所述化學式1由化學式1-I或化學式1-II表示：

[化學式 1-I] [化學式 1-II]



其中，在化學式 1-I 及化學式 1-II 中，

R^1 至 R^5 獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C4 烷基或苯基，

Z^1 至 Z^3 獨立地為 CR^a 或 N，

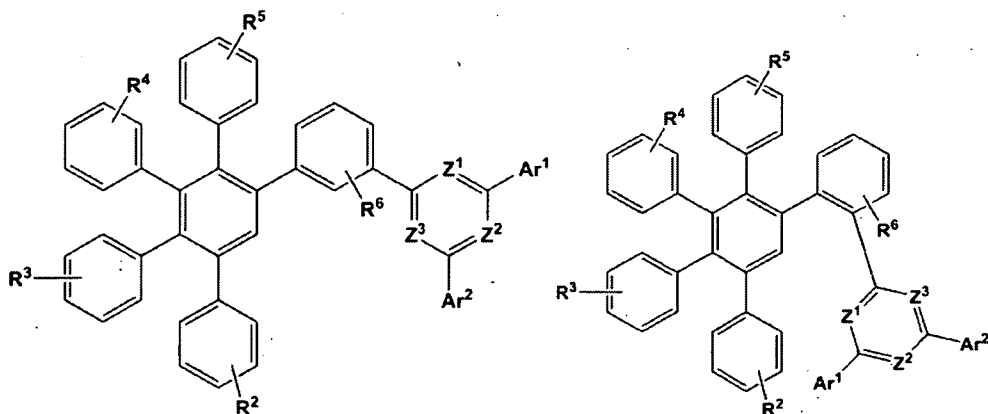
Z^1 至 Z^3 中的至少兩者為 N，

R^a 及 R^6 為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C12 芳基，且

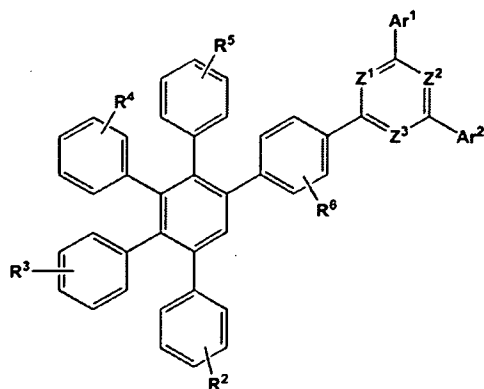
Ar^1 及 Ar^2 獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C18 芳基。

【第3項】如申請專利範圍第2項所述的有機光電元件用化合物，其中所述化學式 1-I 由化學式 1-Ia、化學式 1-Ib 或化學式 1-Ic 表示：

[化學式 1-Ia] [化學式 1-Ib]



[化學式 1-Ic]



其中，在化學式 1-Ia 至化學式 1-Ic 中，

R^2 至 R^5 獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C4 烷基或苯基，

Z^1 至 Z^3 獨立地為 CR^a 或 N，

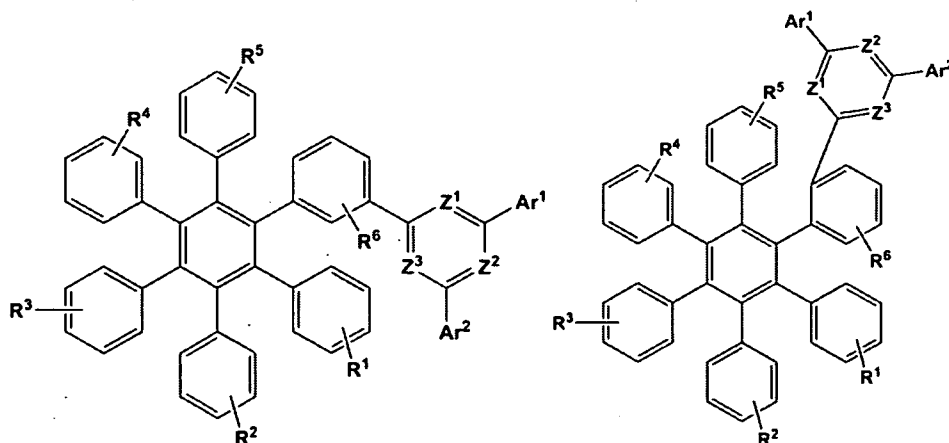
Z^1 至 Z^3 中的至少兩者為 N，

R^a 及 R^6 為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C12 芳基，且

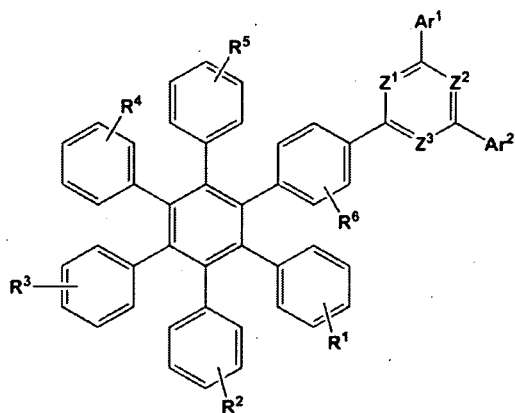
Ar^1 及 Ar^2 獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C18 芳基。

【第4項】如申請專利範圍第2項所述的有機光電元件用化合物，其中所述化學式 1-II 由化學式 1-IIa、化學式 1-IIb 或化學式 1-IIc 表示：

[化學式 1-IIa] [化學式 1-IIb]



[化學式 1-IIc]



其中，在化學式 1-IIa 至化學式 1-IIc 中，

R^1 至 R^5 獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C4 烷基或苯基，

Z^1 至 Z^3 獨立地為 CR^a 或 N，

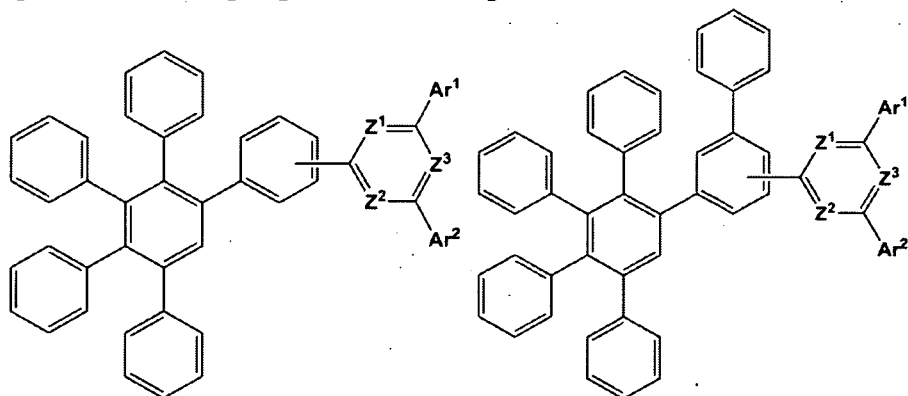
Z^1 至 Z^3 中的至少兩者為 N，

R^a 及 R^6 為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C12 芳基，且

Ar^1 及 Ar^2 獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C18 芳基。

【第5項】如申請專利範圍第2項所述的有機光電元件用化合物，其中所述化學式 1-I 由化學式 1-Id 或化學式 1-Ie 表示：

[化學式 1-Id] [化學式 1-Ie]



其中，在化學式 1-Id 及化學式 1-Ie 中，

Z^1 至 Z^3 獨立地為 CR^a 或 N，

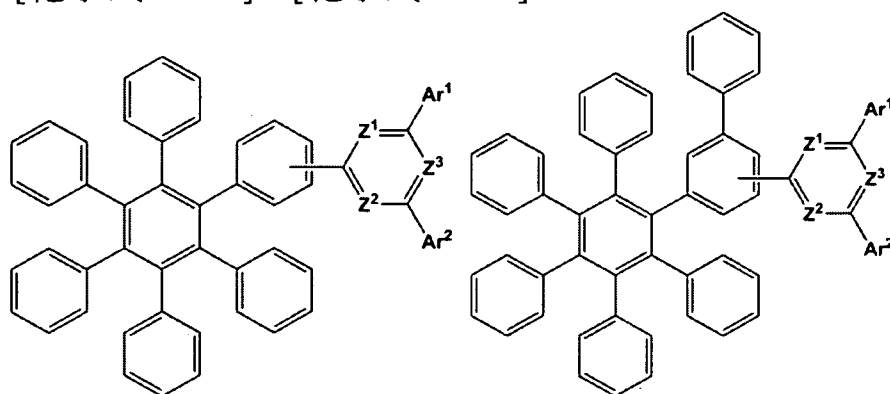
Z^1 至 Z^3 中的至少兩者為 N，

R^a 為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C12 芳基，且

Ar^1 及 Ar^2 獨立地為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C18 芳基。

【第6項】如申請專利範圍第2項所述的有機光電元件用化合物，其中所述化學式1-II由化學式1-IIId或化學式1-IIe表示：

[化學式 1-IIId] [化學式 1-IIe]



其中，在化學式 1-IIId 及化學式 1-IIe 中，

Z^1 至 Z^3 獨立地為 CR^a 或 N，

Z^1 至 Z^3 中的至少兩者為 N，

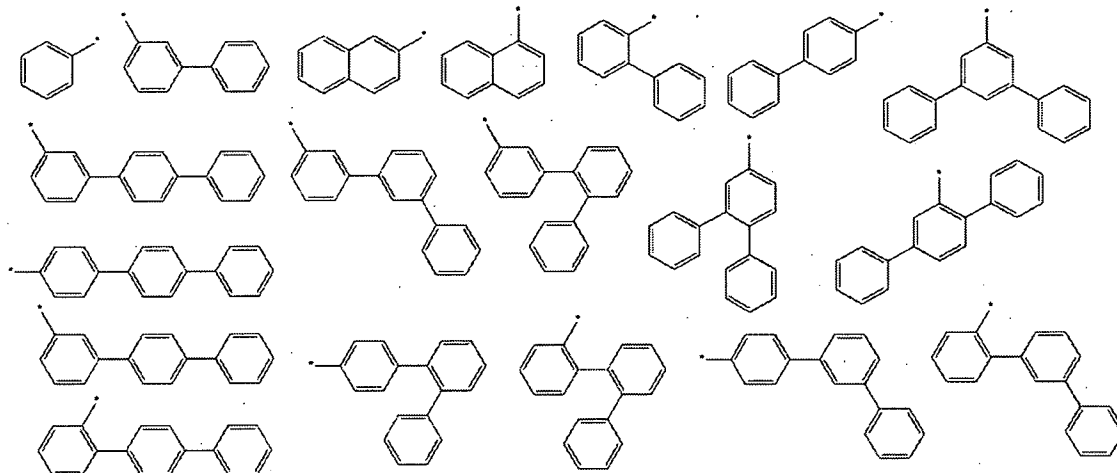
R^a 為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C12 芳基，且

Ar^1 及 Ar^2 獨立地為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C18 芳基。

【第7項】如申請專利範圍第1項所述的有機光電元件用化合物，其中 Ar^1 及 Ar^2 獨立地為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的聯三苯基或經取代或未經取代的萘基。

【第8項】 如申請專利範圍第7項所述的有機光電元件用化合物，其中Ar¹及Ar²為群組1的取代基中的一者：

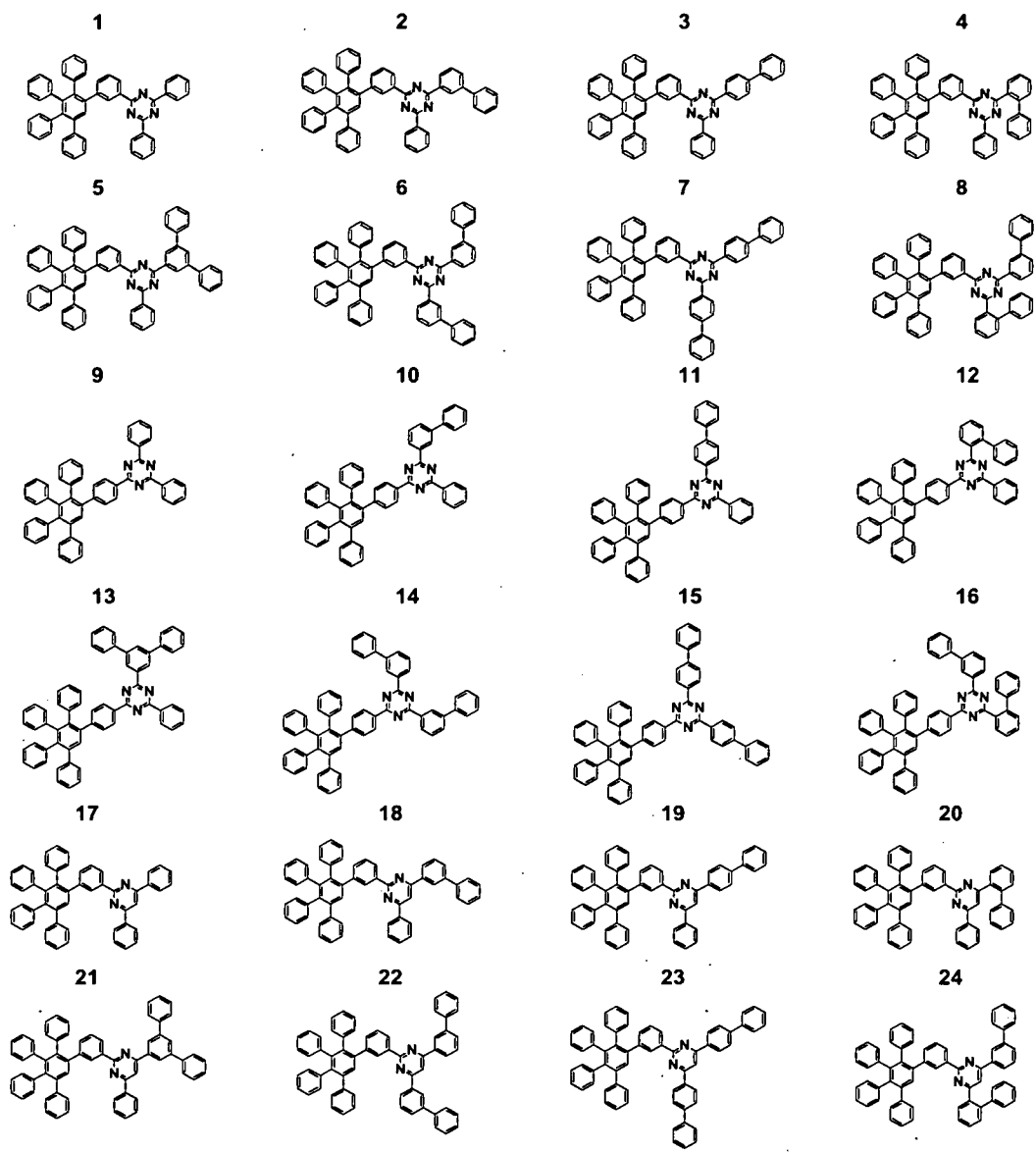
[群組 1]

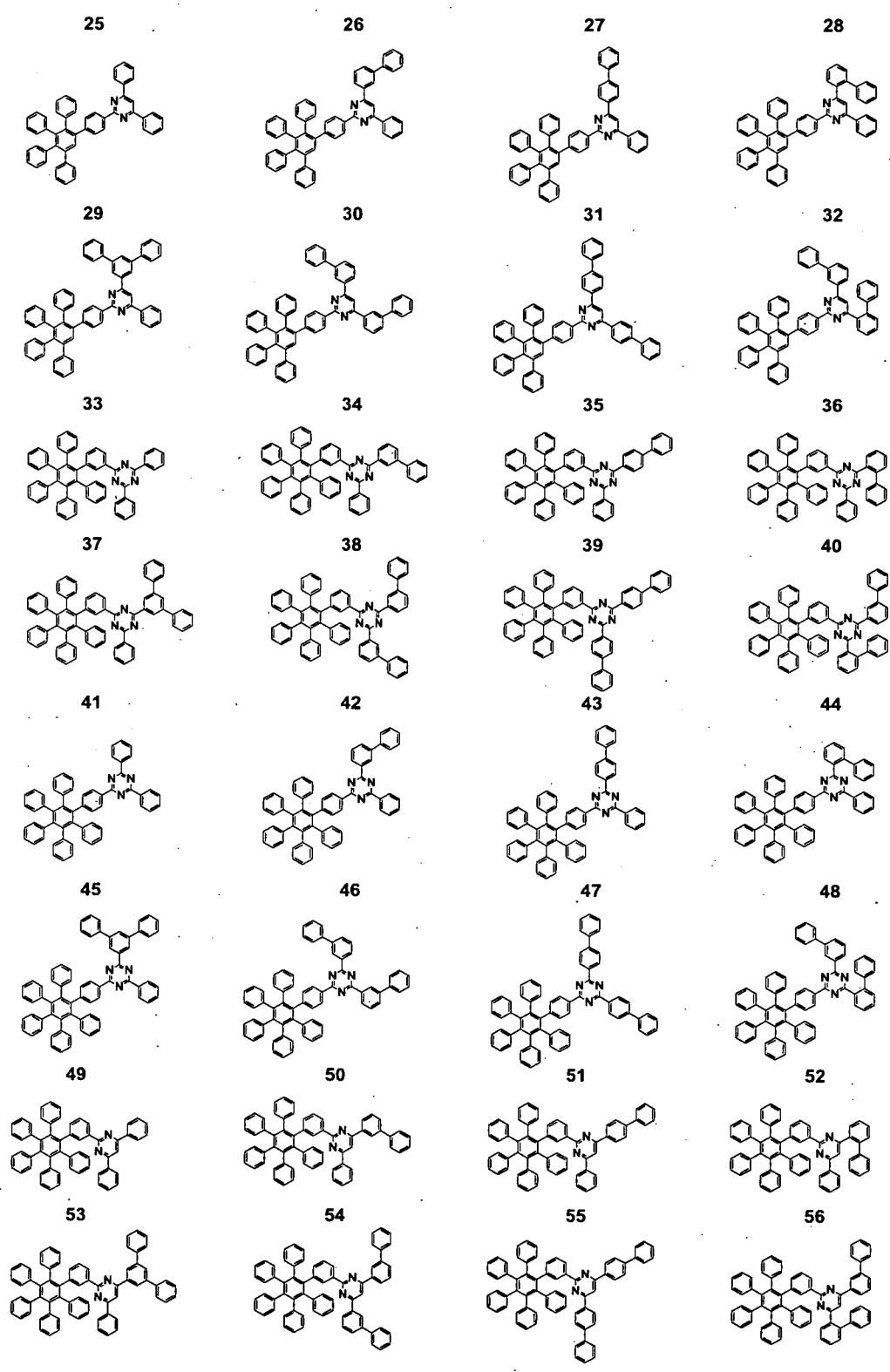


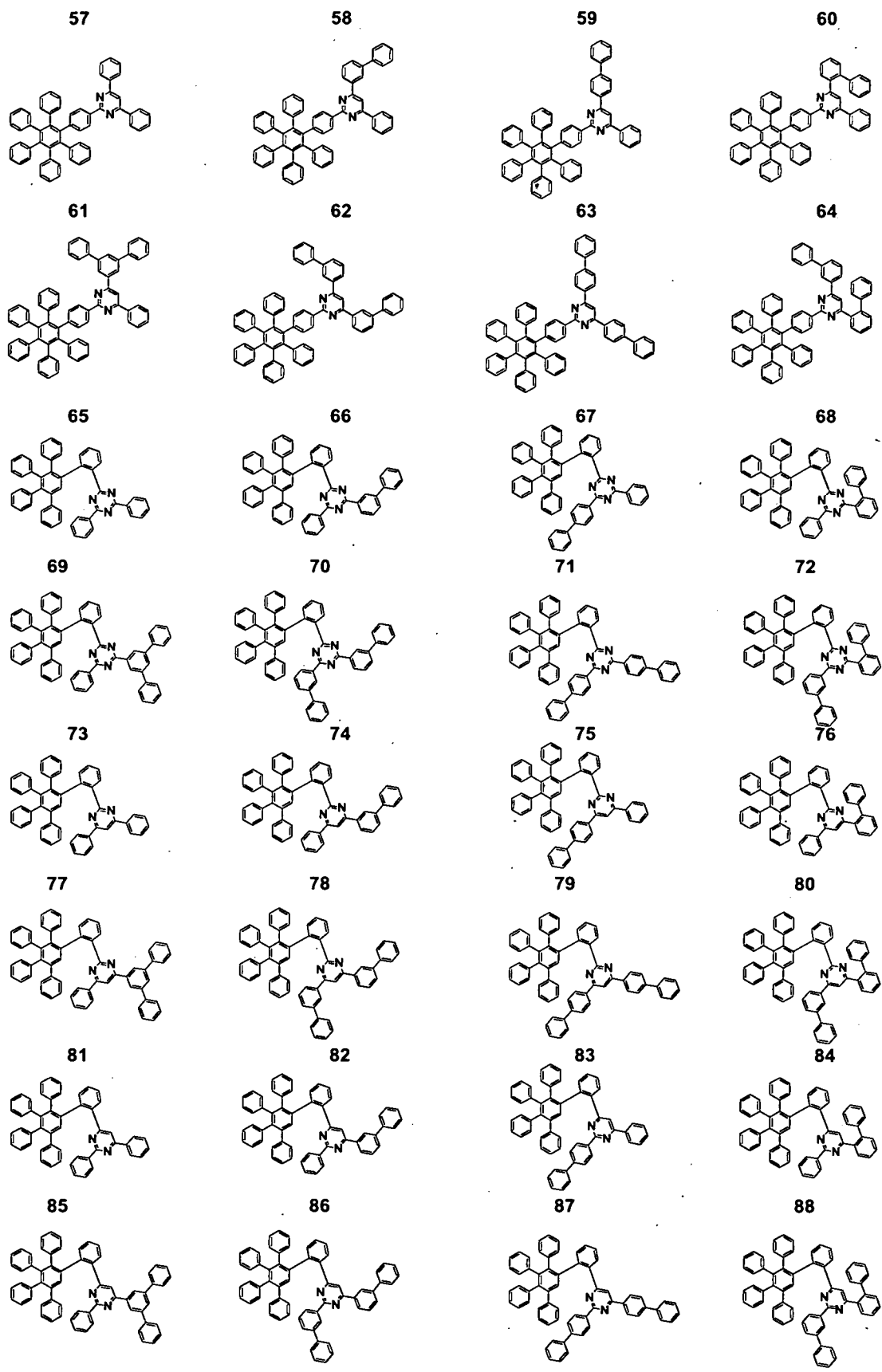
其中，在群組 1 中，*為連接點。

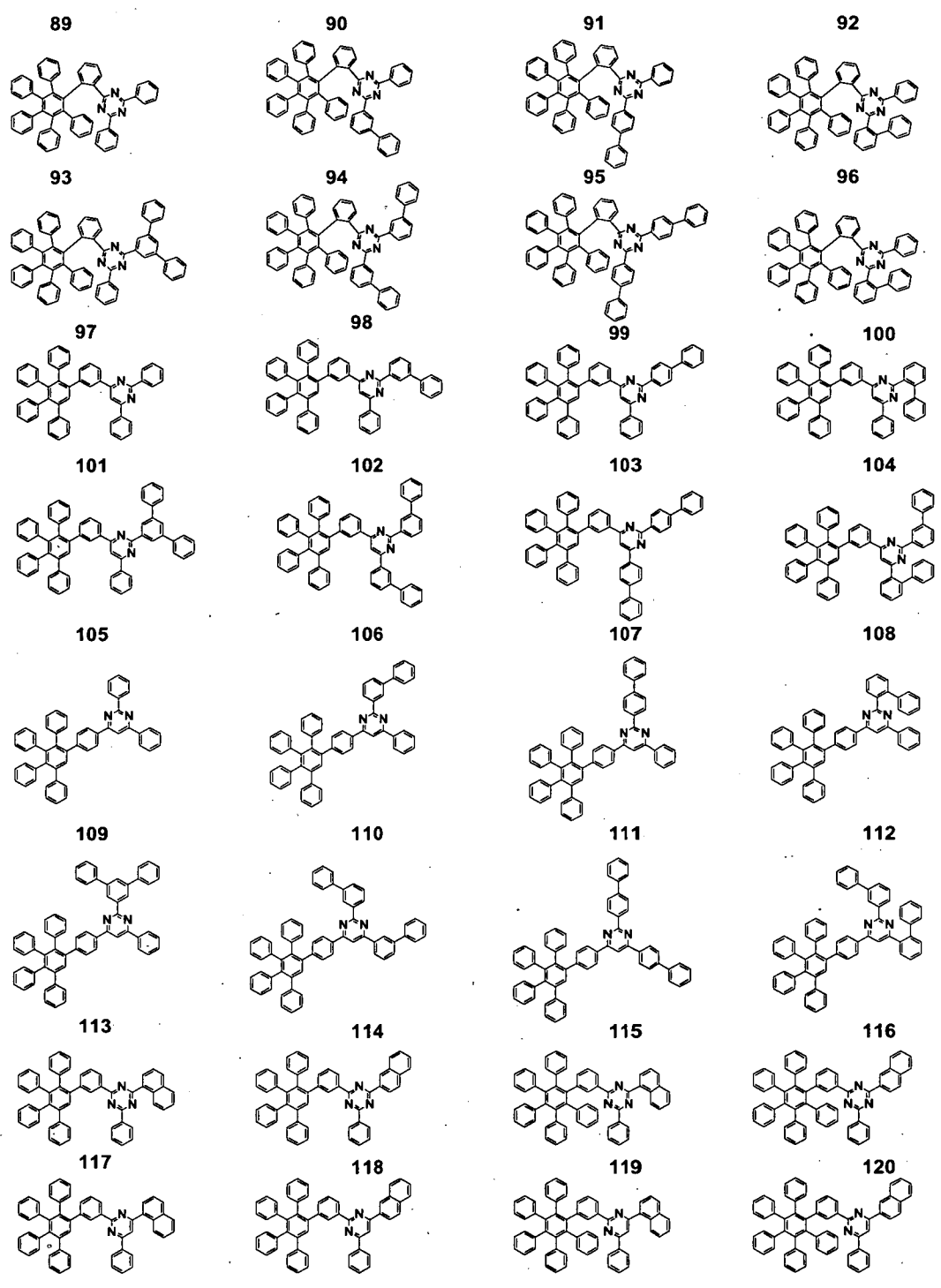
【第9項】 如申請專利範圍第1項所述的有機光電元件用化合物，其中所述化合物為群組2的化合物中的一者：

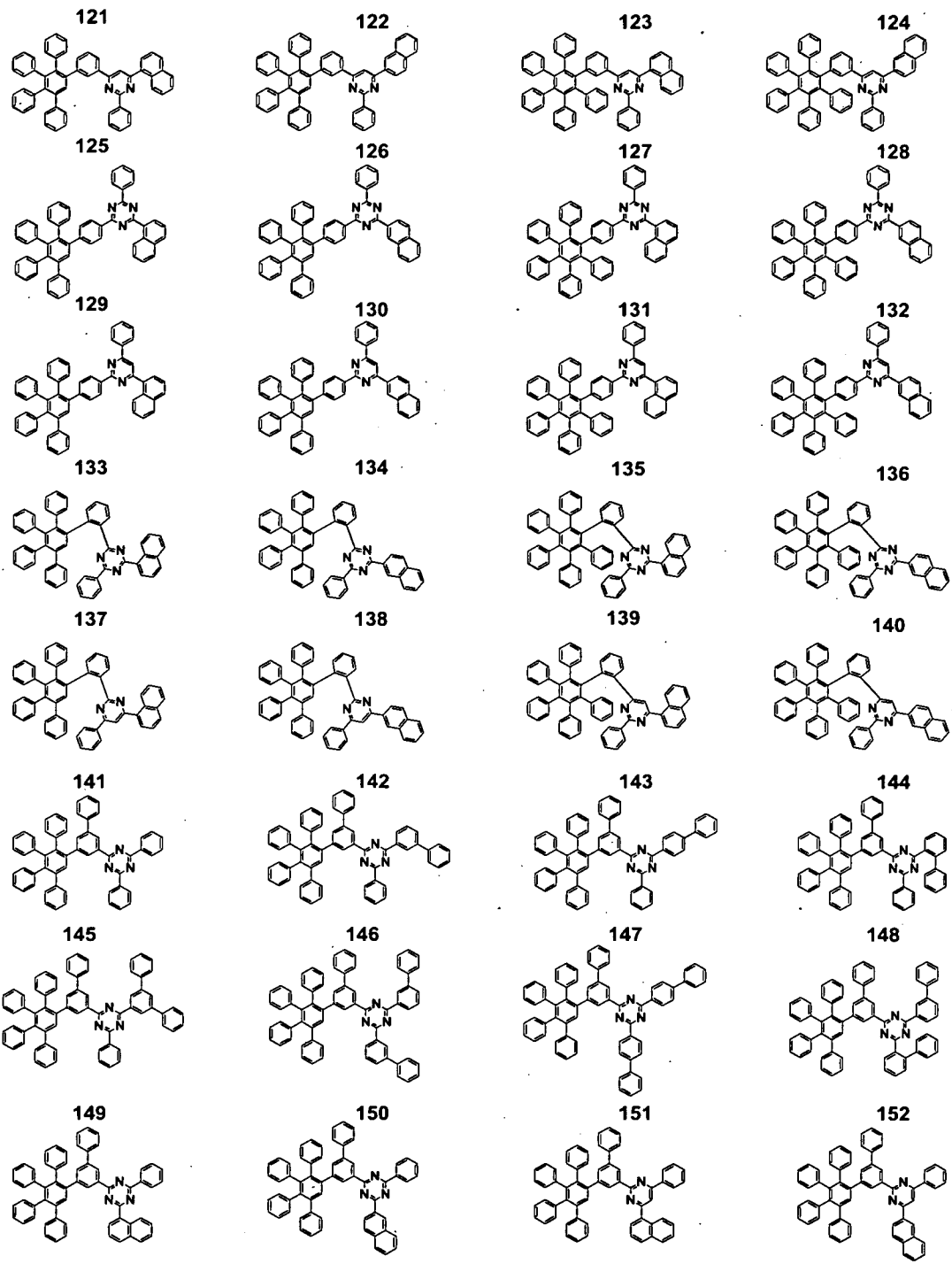
[群組 2]











【第10項】 一種有機光電元件，包括

 面向彼此的陽極及陰極，以及

 在所述陽極與所述陰極之間的至少一個有機層

 其中所述有機層包含如申請專利範圍第 1 項至申請專利範圍第 9 項中

 任一項所述的有機光電元件用化合物。

【第11項】如申請專利範圍第10項所述的有機光電元件，其中所述有機層包括發射層、電子傳輸層以及電洞傳輸層，

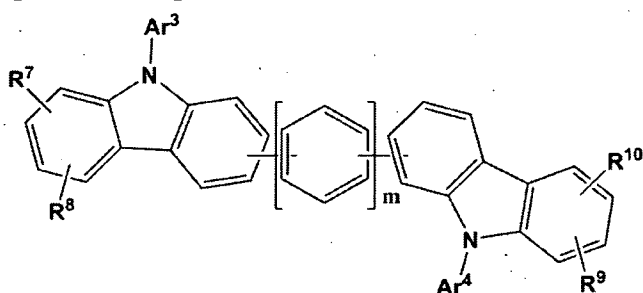
其中所述電子傳輸層或所述發射層包含所述有機光電元件用化合物。

【第12項】如申請專利範圍第11項所述的有機光電元件，其中所述電子傳輸層更包括鄰近於所述發射層的電子傳輸輔助層，且

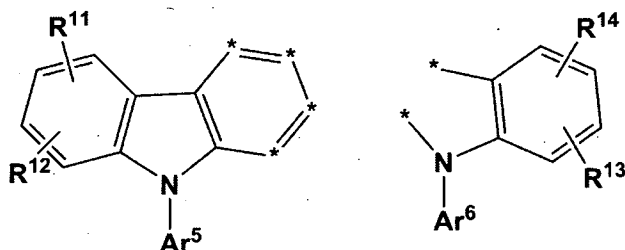
所述電子傳輸輔助層包含所述有機光電元件用化合物。

【第13項】如申請專利範圍第11項所述的有機光電元件，其中所述發射層更包含至少一種以下化合物：由化學式2表示的化合物以及由化學式3表示的部分與由化學式4表示的部分組成的化合物：

[化學式 2]



[化學式 3] [化學式 4]



其中，在化學式 2 至化學式 4 中，

Ar^3 至 Ar^6 獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基，

m 為整數 0 或 1，

化學式 3 的相鄰兩個*與化學式 4 的兩個*組合形成稠合環，且化學式 3 的不形成稠合環的*獨立地為 CR^b ，且

R^b 及 R^7 至 R^{14} 獨立地為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基、C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

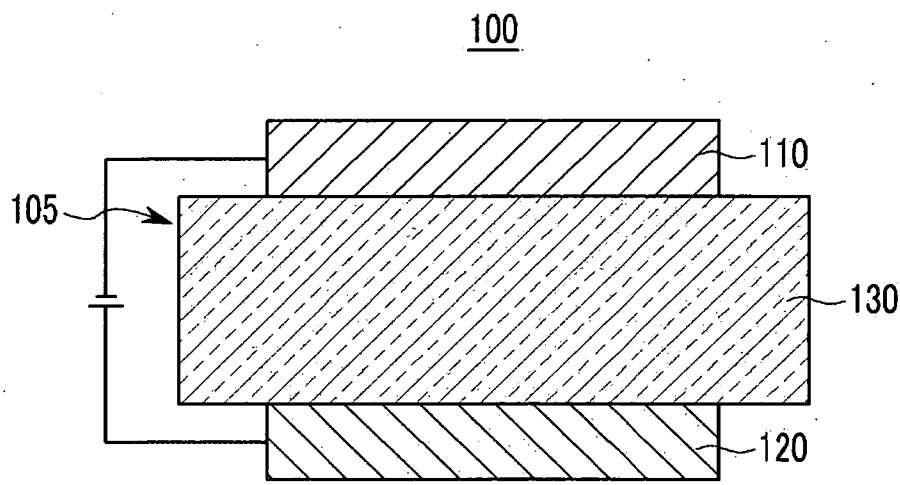
【第14項】如申請專利範圍第13項所述的有機光電元件，其中所述經取代或未經取代的C6至C30芳基為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的聯三苯基、經取代或未經取代的聯四苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的聯伸三苯基或經取代或未經取代的萘基，且

所述經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基為經取代或未經取代的二苯並呋喃基、經取代或未經取代的二苯並噻吩基、經取代或未經取代的吡啶基、經取代或未經取代的嘧啶基、經取代或未經取代的三嗪基、經取代或未經取代的喹啉基、經取代或未經取代的異喹啉基或經取代或未經取代的喹唑啉基，

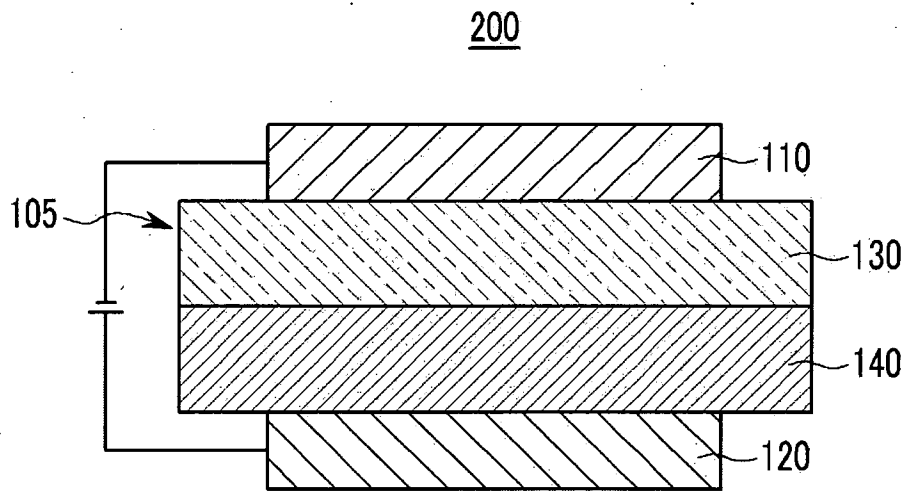
其中所述「經取代」是指至少一個氫經氖、C1 至 C10 烷基、C6 至 C18 芳基或 C3 至 C20 雜芳基置換。

【第15項】一種顯示元件，包括如申請專利範圍第10項所述的有機光電元件。

【發明圖式】

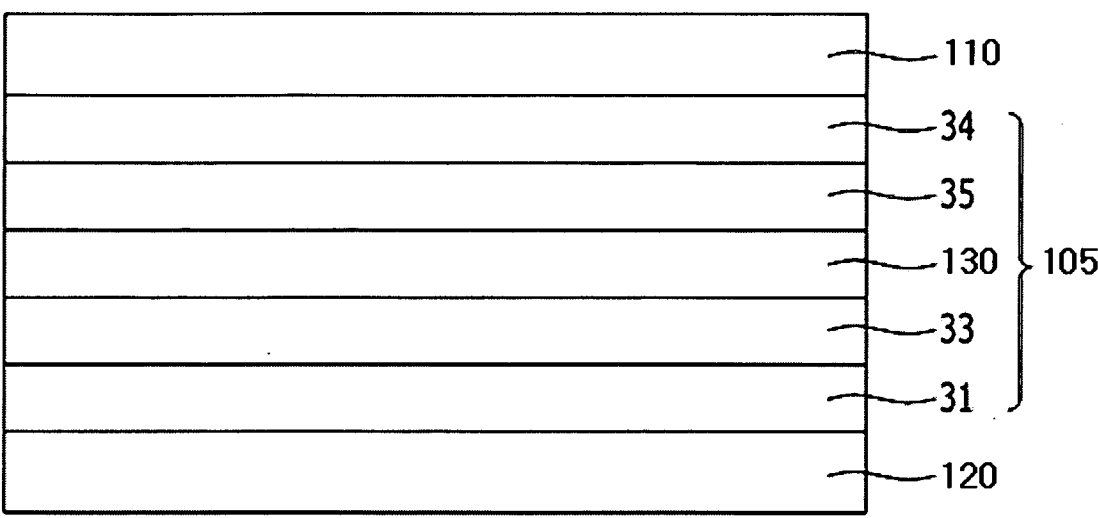


【圖1】



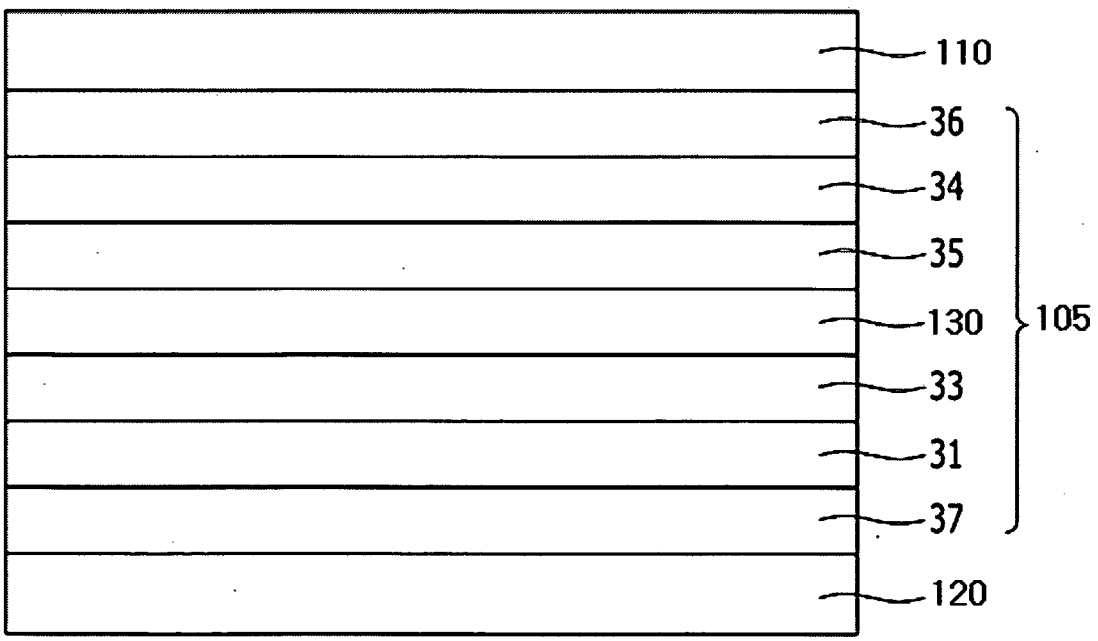
【圖2】

300



【圖3】

400



【圖4】

**【發明摘要】**

申請日: C07D 251/24 (2006.01)

IPC分類: C07D 239/26 (2006.01)

C07K 11/06 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

H05B 33/12 (2006.01)

【中文發明名稱】 有機化合物、有機光電元件、以及顯示元件**【英文發明名稱】** ORGANIC COMPOUND, ORGANIC

OPTOELECTRONIC DEVICE, AND DISPLAY DEVICE

【中文】 本發明提供一種由化學式1表示的有機光電元件用化合物、有機光電元件以及顯示元件。

化學式 1 的詳情定義在說明書中。

【英文】 A compound for an organic optoelectronic device represented by Chemical Formula 1, an organic optoelectronic device, and a display device are provided.

Details of Chemical Formula 1 are defined in the specification.

【指定代表圖】 圖1。

【代表圖之符號簡單說明】

100：有機發光二極體

105：有機層

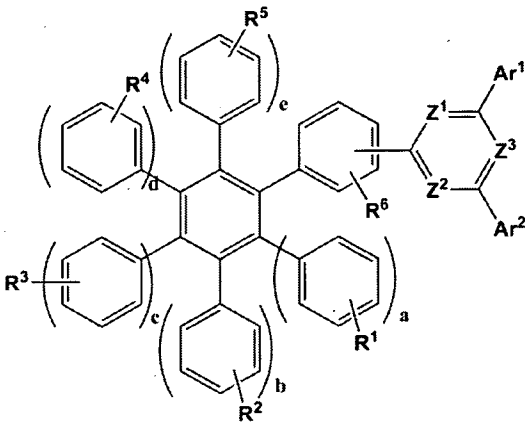
110：陰極

120：陽極

130：發射層

【特徵化學式】

105-8-26



【發明說明書】

【中文發明名稱】有機化合物、有機光電元件、以及顯示元件

【英文發明名稱】ORGANIC COMPOUND, ORGANIC

OPTOELECTRONIC DEVICE, AND DISPLAY DEVICE

【技術領域】

【0001】本發明揭示一種有機光電元件用化合物、有機光電元件以及顯示元件。

【先前技術】

【0002】有機光電元件（organic optoelectronic device）為將電能轉換成光能且反之亦然之元件。

【0003】有機光電元件可根據其驅動原理分類如下。一種為光電元件，其中由光能產生激子，分離成電子及電洞且轉移至不同電極以產生電能，且另一種為發光元件，其中將電壓或電流供應至電極以由電能產生光能。

【0004】有機光電元件的實例可為有機光電式元件（organic photoelectric device）、有機發光二極體、有機太陽電池以及有機光導鼓（organic photo conductor drum）。

【0005】其中，有機發光二極體（organic light emitting diode, OLED）近來已由於對平板顯示器的需求增加而引起關注。有機發光二極體藉由施加電流至有機發光材料而將電能轉換成光且具有在陽極與陰極之

間插入有機層的結構。在本文中，有機層可包括發射層及視需要輔助層，且輔助層可為例如選自電洞注入層、電洞傳輸層、電子阻擋層、電子傳輸層、電子注入層以及電洞阻擋層中的至少一者以用於改良有機發光二極體的效率及穩定性。

【0006】有機發光二極體的效能可受有機層的特徵影響，且其中可主要受有機層有機材料的特徵影響。

【0007】尤其需要開發一種能夠增加電洞及電子遷移率且同時增加電化學穩定性的有機材料，以使得有機發光二極體可應用於大尺寸的平板顯示器。

【發明內容】

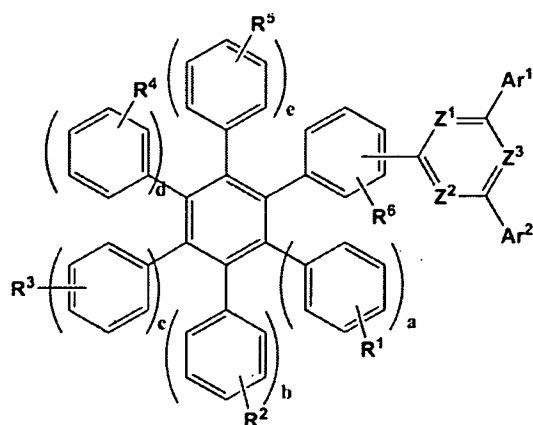
【0008】一實施例提供一種有機光電元件用化合物，所述化合物能夠實現具有高效率及長壽命的有機光電元件。

【0009】另一實施例提供一種有機光電元件，所述有機光電元件包含所述有機光電元件用化合物。

【0010】又一實施例提供一種顯示元件，所述顯示元件包括所述有機光電元件。

【0011】根據一實施例，一種有機光電元件用化合物由化學式 1 表示。

[化學式 1]



【0012】在化學式 1 中，

R^1 至 R^5 獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C4 烷基或苯基，

Z^1 至 Z^3 獨立地為 CR^a 或 N，

Z^1 至 Z^3 中的至少兩者為 N，

R^a 及 R^6 為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C12 芳基，

Ar^1 及 Ar^2 獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C18 芳基，

a、b、c、d 以及 e 獨立地為整數 0 或 1，

$4 \leq a+b+c+d+e \leq 5$ ，且

所述「經取代」是指至少一個氫經氘、C1 至 C4 烷基或 C6 至 C12 芳基置換。

【0013】根據另一實施例，有機光電元件包括面向彼此的陽極及陰極、在所述陽極與所述陰極之間的至少一個有機層，其中所述有機層包含所述有機光電元件用化合物。

【0014】根據又一實施例，提供一種包括所述有機光電元件的顯示元

件。

【0015】可獲得一種具有高效率及長壽命的有機光電元件。

【圖式簡單說明】

【0016】

圖 1 至圖 4 為顯示根據實施例的有機發光二極體的剖視圖。

【實施方式】

【0017】在下文中詳細闡述本發明的實施例。然而，此等實施例為示例性的，本發明不限於此且本發明由申請專利範圍的範圍所界定。

【0018】在本說明書中，當不另外提供定義時，術語「經取代」是指經氬、鹵素、羥基、胺基、經取代或未經取代的 C1 至 C30 胺基、硝基、經取代或未經取代的 C1 至 C40 矽烷基、C1 至 C30 烷基、C1 至 C10 烷基矽烷基、C6 至 C30 芳基矽烷基、C3 至 C30 環烷基、C3 至 C30 雜環烷基、C6 至 C30 芳基、C6 至 C30 雜芳基、C1 至 C20 烷氧基、氟基、C1 至 C10 三氟烷基（例如三氟甲基）或氰基取代以代替取代基或化合物的至少一個氫。

【0019】在本說明書中，當不另外提供特定定義時，「雜」是指在一種化合物或取代基中包含 1 至 3 個選自由 N、O、S、P 以及 Si 組成的群組中的雜原子且其餘為碳。

【0020】在本說明書中，當不另外提供定義時，「烷基」是指脂族烴基。烷基可為無任何雙鍵或三鍵的「飽和烷基」。

【0021】烷基可為 C1 至 C30 烷基。更具體而言，烷基可為 C1 至 C20 烷基或 C1 至 C10 烷基。舉例而言，C1 至 C4 烷基可在烷基鏈中具有 1 至 4 個碳原子，其可選自甲基、乙基、丙基、異丙基、正丁基、異丁基、第二丁基及第三丁基。

【0022】烷基的特定實例可為甲基、乙基、丙基、異丙基、丁基、異丁基、第三丁基、戊基、己基、環丙基、環丁基、環戊基、環己基等。

【0023】在本說明書中，「芳基」是指包含至少一個烴芳族部分的基團，且

烴芳族部分的所有元素具有形成共軛的 p 軌道，例如苯基、萘基等，

兩個或更多個烴芳族部分可藉由 σ 鍵連接，且可為例如聯苯基、聯三苯基、聯四苯基等，且

兩個或更多個烴芳族部分直接或間接稠合以提供非芳族稠合環。舉例而言，其可為萘基。

【0024】芳基可包含單環、多環或稠合環多環（亦即，共用相鄰碳原子對的環）官能基。

【0025】舉例而言，「雜芳基」可指包含至少一個選自 N、O、S、P 及 Si 的雜原子且其餘為碳的芳基。兩個或更多個雜芳基藉由 σ 鍵直接連接，或當雜芳基包含兩個或更多個環時，所述兩個或更多個環可稠合。當雜芳基為稠合環時，每個環可包含 1 至 3 個雜原子。

【0026】雜芳基的特定實例可為吡啶基、嘧啶基、吡嗪基、噻嗪基、三嗪基、喹啉基、異喹啉基等。

【0027】更具體而言，經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基及/或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基可為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的蒽基、經取代或未經取代的菲基、經取代或未經取代的稠四苯基、經取代或未經取代的芘基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的對聯三苯基、經取代或未經取代的間聯三苯基、經取代或未經取代的屈基、經取代或未經取代的聯伸三苯基、經取代或未經取代的茈基、經取代或未經取代的蒾基、經取代或未經取代的茛基、經取代或未經取代的呋喃基、經取代或未經取代的噻吩基、經取代或未經取代的吡咯基、經取代或未經取代的吡唑基、經取代或未經取代的咪唑基、經取代或未經取代的三唑基、經取代或未經取代的噁唑基、經取代或未經取代的噻唑基、經取代或未經取代的噁二唑基、經取代或未經取代的噻二唑基、經取代或未經取代的吡啶基、經取代或未經取代的嘧啶基、經取代或未經取代的吡嗪基、經取代或未經取代的三嗪基、經取代或未經取代的苯並呋喃基、經取代或未經取代的苯並噻吩基、經取代或未經取代的苯並咪唑基、經取代或未經取代的吲哚基、經取代或未經取代的喹啉基、經取代或未經取代的異喹啉基、經取代或未經取代的喹唑啉基、經取代或未經取代的喹噁啉基、經取代或未經取代的蔡啶基、經取代或未經取代的苯並噁嗪基、經取代或未經取代的苯並噻嗪基、經取代或未經取代的吡啶基、經取代或未經取代的啡嗪基、經取代或未經取代的啡噻嗪基、經取代或未經取代的啡噁嗪基、經取代或未經取代的二苯並呋喃基、或經取代或未經取代的二苯並噻吩基、或其組合，但不限於此。

105-8-26

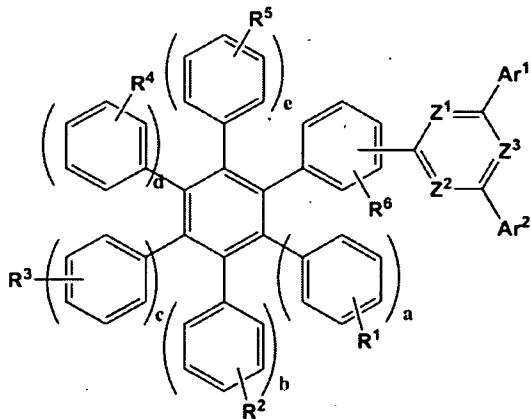
【0028】在本說明書中，電洞特徵是指當施加電場時貢獻出電子以形成電洞的能力，且在陽極中形成的電洞可由於根據最高佔用分子軌道（highest occupied molecular orbital，HOMO）能級的傳導特徵而易於注入發射層中且在發射層中傳輸。

【0029】此外，電子特徵是指當施加電場時接受電子的能力，且在陰極中形成的電子可由於根據最低未佔用分子軌道（lowest unoccupied molecular orbital，LUMO）能級的傳導特徵而易於注入發射層且在發射層中傳輸。

【0030】在下文中，闡述一種根據實施例的有機光電元件用化合物。

【0031】根據實施例的有機光電元件用化合物由化學式 1 表示。

[化學式 1]



【0032】在化學式 1 中，

R¹ 至 R⁵ 獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C4 烷基或苯基，

Z¹ 至 Z³ 獨立地為 CR^a 或 N，

Z¹ 至 Z³ 中的至少兩者為 N，

R^a 及 R^6 為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C12 芳基，

Ar^1 及 Ar^2 獨立地為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取代或未經取代的 C6 至 C18 芳基，

a 、 b 、 c 、 d 以及 e 獨立地為整數 0 或 1，

$4 \leq a+b+c+d+e \leq 5$ ，且

「經取代」是指至少一個氫經氖、C1 至 C4 烷基或 C6 至 C12 芳基置換。

【0033】由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物具有經四個或更多個苯基取代的大體積芳族基部分經由苯基連接基團與含氮 6 員環連接的結構。

【0034】含氮 6 員環在元件中發揮使電子易於注入或傳輸的作用，且大體積芳族基部分發揮幫助電洞注入及傳輸或增加化合物的玻璃轉移溫度的作用，抑制分子當中的相互作用且因此增加發光效率且降低化合物相對於分子量的沈積溫度。因此，由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物顯示出當用於形成元件中的膜時，含氮 6 員環的改良填充物具有較大體積芳族基部分相對較扁平的結構，且因此易於電子在元件中的注入及傳輸。因此，由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物可在特別用於形成電子注入輔助層時因改良的電子傳輸特徵而降低元件的驅動電壓且因電子快速注入至發射層中而增加發光效率。另一方面，當化合物與具有改良的電洞注入及傳輸的材料混合形成發射層時，驅動電壓因改良的電子傳輸而降低，且可因藉由大體積芳族基部分減

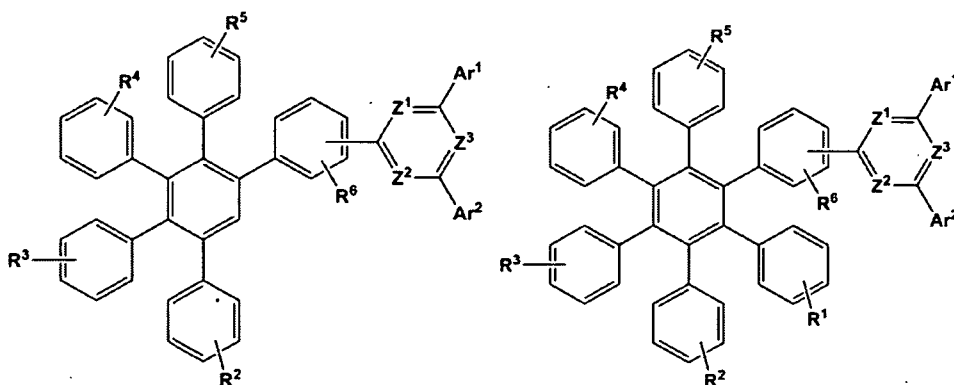
少分子當中的相互作用而獲得改良的發光效率。此外，由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物具有改良的溶解度且因此可有效應用於沈積及溶液方法以及可因大體積芳族基部分的球形結構而降低沈積溫度。

【0035】尤其，經由連接基團與大體積芳族基連接的含氮 6 員環可發揮增加鍵間預旋轉及降低結晶度的作用且亦因大體積芳族基及連接基團而增加分子的溶解度，其可實現溶液方法。

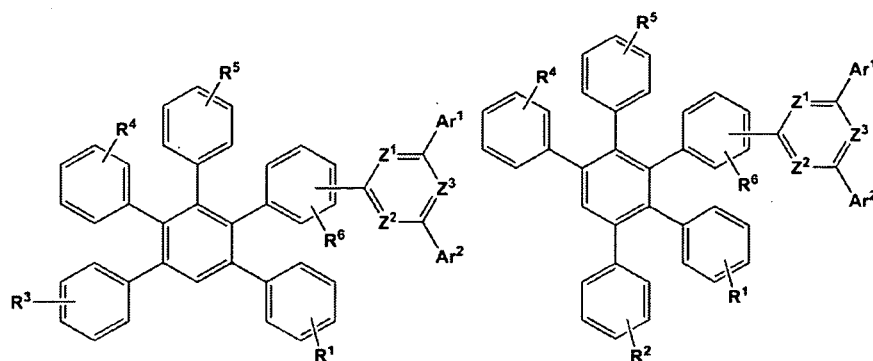
【0036】此外，連接基團藉由苯基固定且因此縮短含氮 6 員環與大體積芳族基之間的距離，因而可獲得更具球形的分子且因此降低沈積溫度並產生改良的耐熱穩定性。

【0037】化學式 1 可根據大體積芳族基部分中苯基的數目而由化學式 1-I 至化學式 1-IV 中的一者表示。

[化學式 1-I] [化學式 1-II]



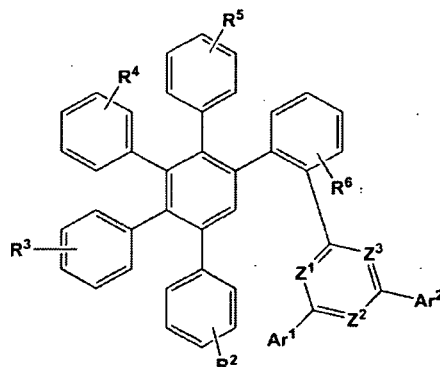
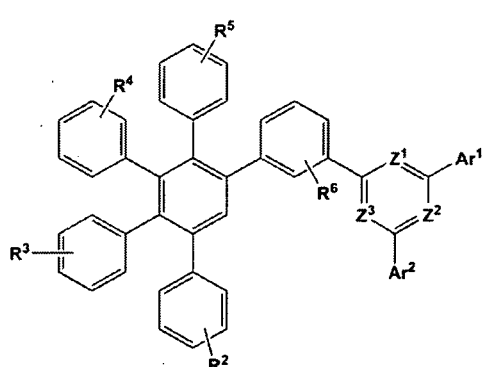
[化學式 1-III] [化學式 1-IV]



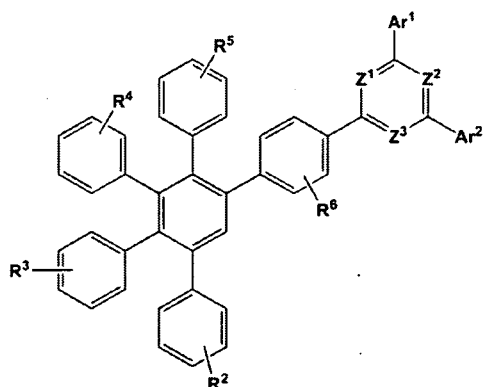
【0038】在化學式 1-I 至化學式 1-IV 中， R^1 至 R^6 、 Z^1 至 Z^3 、 Ar^1 以及 Ar^2 與上文所述相同。

【0039】化學式 1-I 可根據在間位、鄰位或對位連接的連接基團而由化學式 1-Ia、化學式 1-Ib 或化學式 1-Ic 中的一者表示。

[化學式 1-Ia] [化學式 1-Ib]

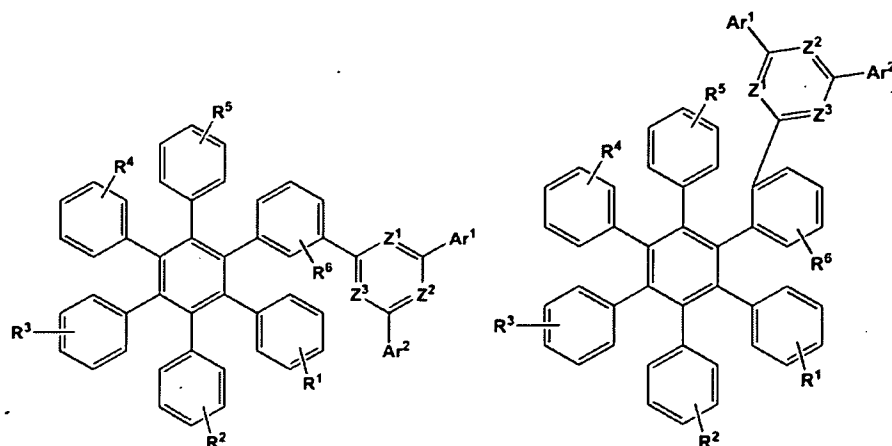


[化學式 1-Ic]

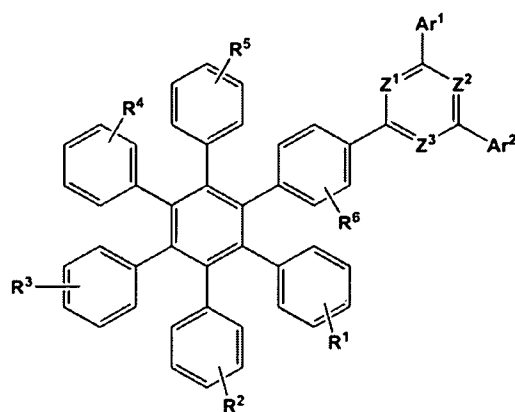


【0040】化學式 1-II 亦可根據在間位、鄰位或對位連接的連接基團而由化學式 1-IIa、化學式 1-IIb 或化學式 1-IIc 中的一者表示。

[化學式 1-IIa] [化學式 1-IIb]



[化學式 1-IIc]



【0041】 在本發明的實例中，有機光電元件用化合物可由化學式 1-Ia、化學式 1-Ib、化學式 1-Ic、化學式 1-IIa 或化學式 1-IIc 表示。

【0042】 在化學式 1-Ia、化學式 1-Ib、化學式 1-Ic、化學式 1-IIa、化學式 1-IIb 以及化學式 1-IIc 中， R^1 至 R^6 、 Z^1 至 Z^3 、 Ar^1 以及 Ar^2 與上文所述相同。

【0043】 在本發明的實施例中， R^1 至 R^5 獨立地為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C4 烷基或苯基。具體而言， R^1 至 R^5 可為氫、甲基、乙基、丙基、異丙基或苯基，例如 R^1 至 R^5 全部可為氫。

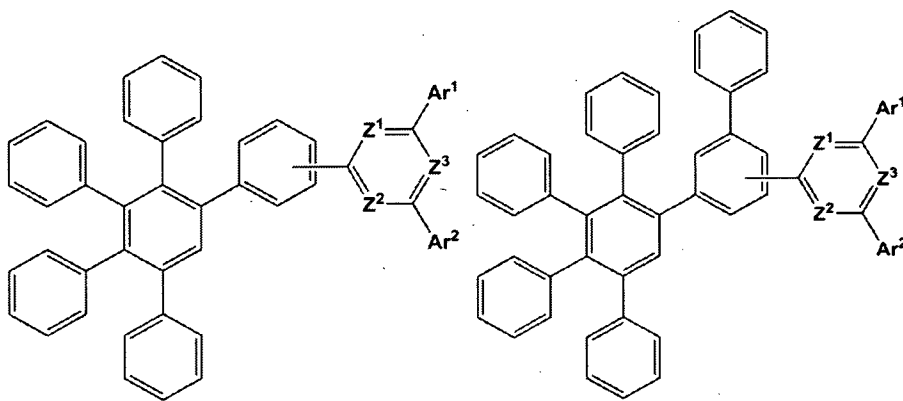
【0044】 R^6 可為氫、氘、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基或經取

105-8-26

代或未經取代的 C6 至 C12 芳基。具體而言， R^6 可為氫或經取代或未經取代的 C6 至 C12 芳基，且更具體而言可為氫、苯基、聯苯基，例如氫或苯基。

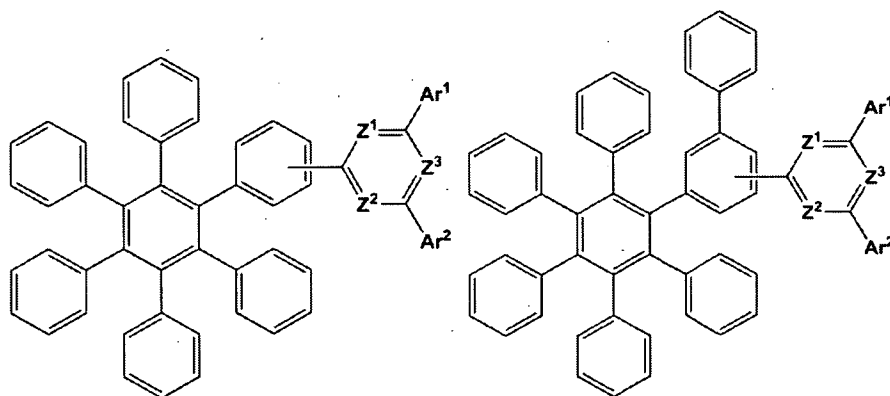
【0045】如更特定的實例，化學式 1-I 可由化學式 1-Id 或化學式 1-Ie 表示，

[化學式 1-Id] [化學式 1-Ie]



且化學式 1-II 可由化學式 1-IIId 或化學式 1-IIe 表示。

[化學式 1-IIId] [化學式 1-IIe]



【0046】在本發明的一個實例中，有機光電元件用化合物可由化學式 1-Id、化學式 1-Ie 或化學式 1-IIId 表示。

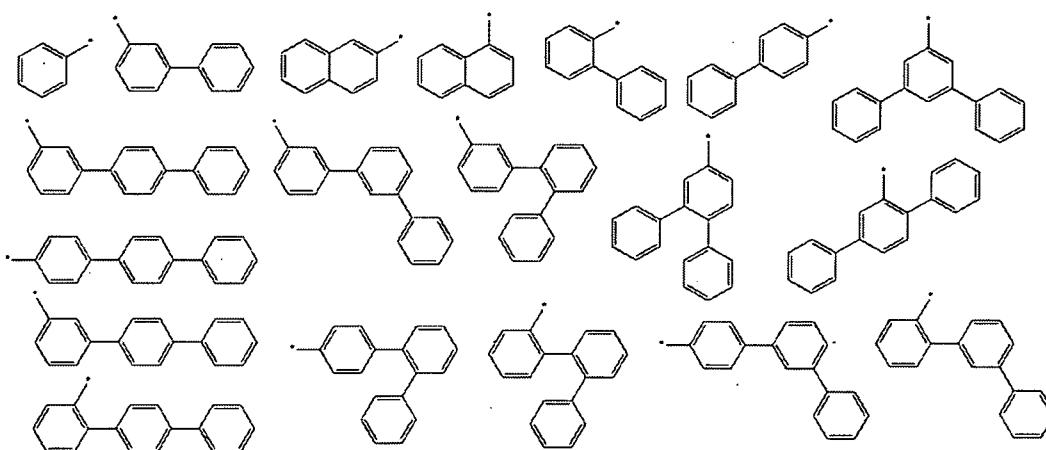
【0047】在化學式 1-Id、化學式 1-Ie、化學式 1-IIId 以及化學式 1-IIe 中， Z^1 至 Z^3 、 Ar^1 以及 Ar^2 與上文所述相同。

105-8-26

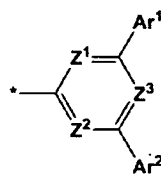
【0048】在本發明的實施例中， Z^1 至 Z^3 中的至少兩者可為 N。舉例而言， Z^1 及 Z^3 可為 N 或 Z^1 及 Z^2 為 N 以提供嘧啶基，且 Z^1 至 Z^3 可為 N 以提供三嗪基。

【0049】在本發明的實施例中， Ar^1 及 Ar^2 可獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C18 芳基。具體而言， Ar^1 及 Ar^2 可獨立地為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的聯三苯基或經取代或未經取代的萘基，例如群組 1 中的取代基中的一者。

[群組 1]



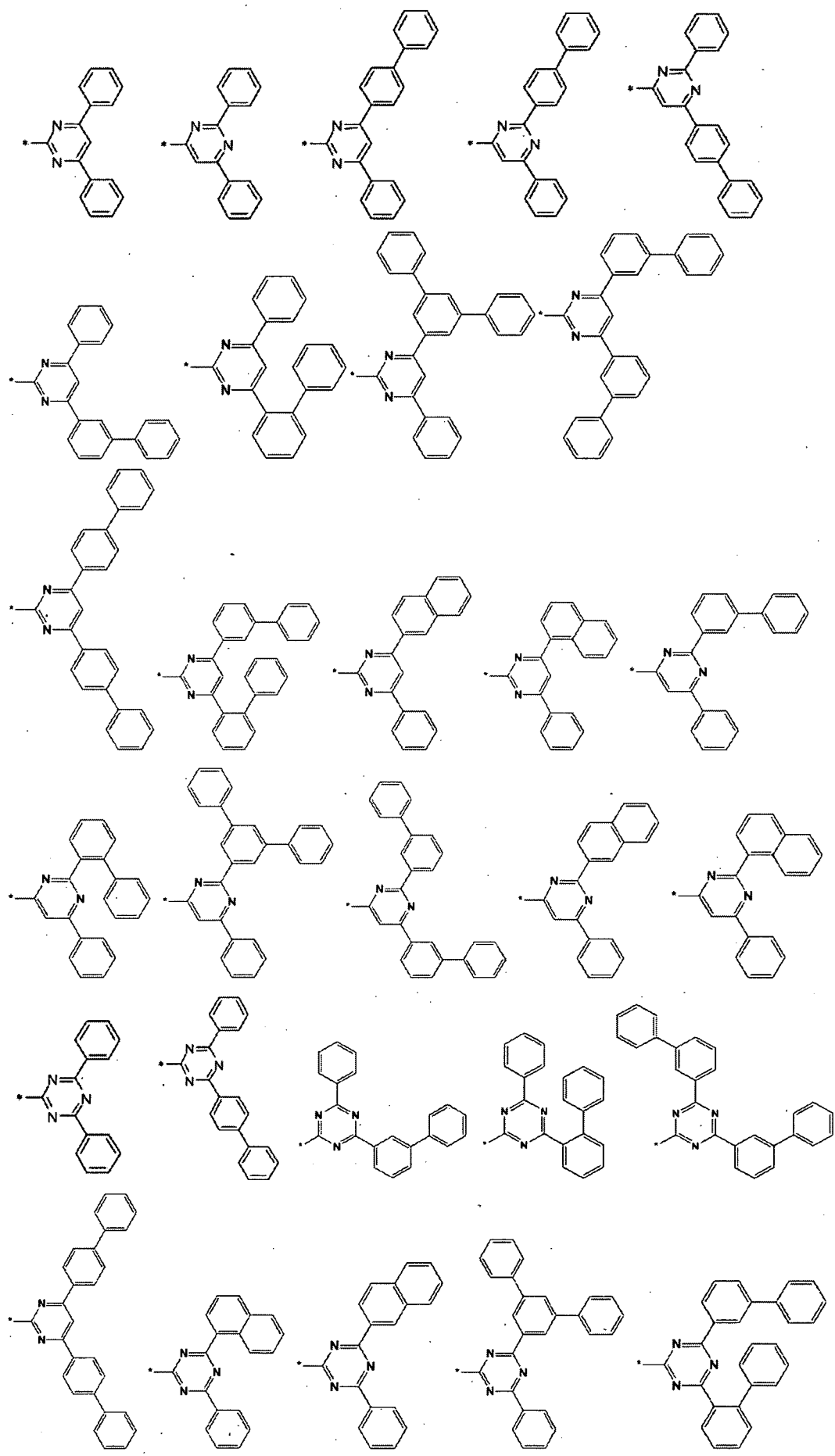
【0050】在群組 1 中，* 為連接點。



【0051】在化學式 1 中， Ar^1 及 Ar^2 的特定實例可選自群組 A 的取代基。

[群組 A]

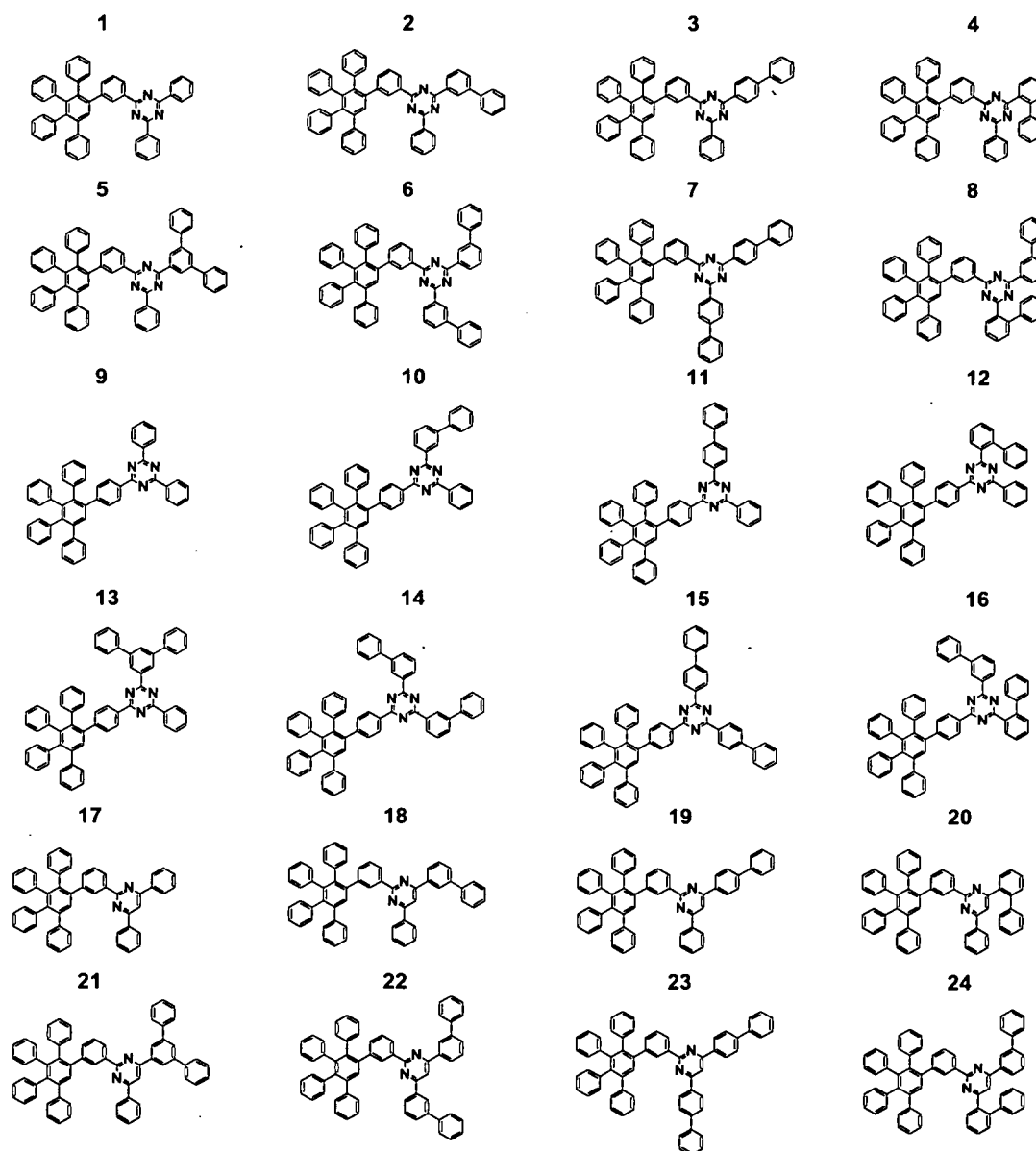
105-8-26



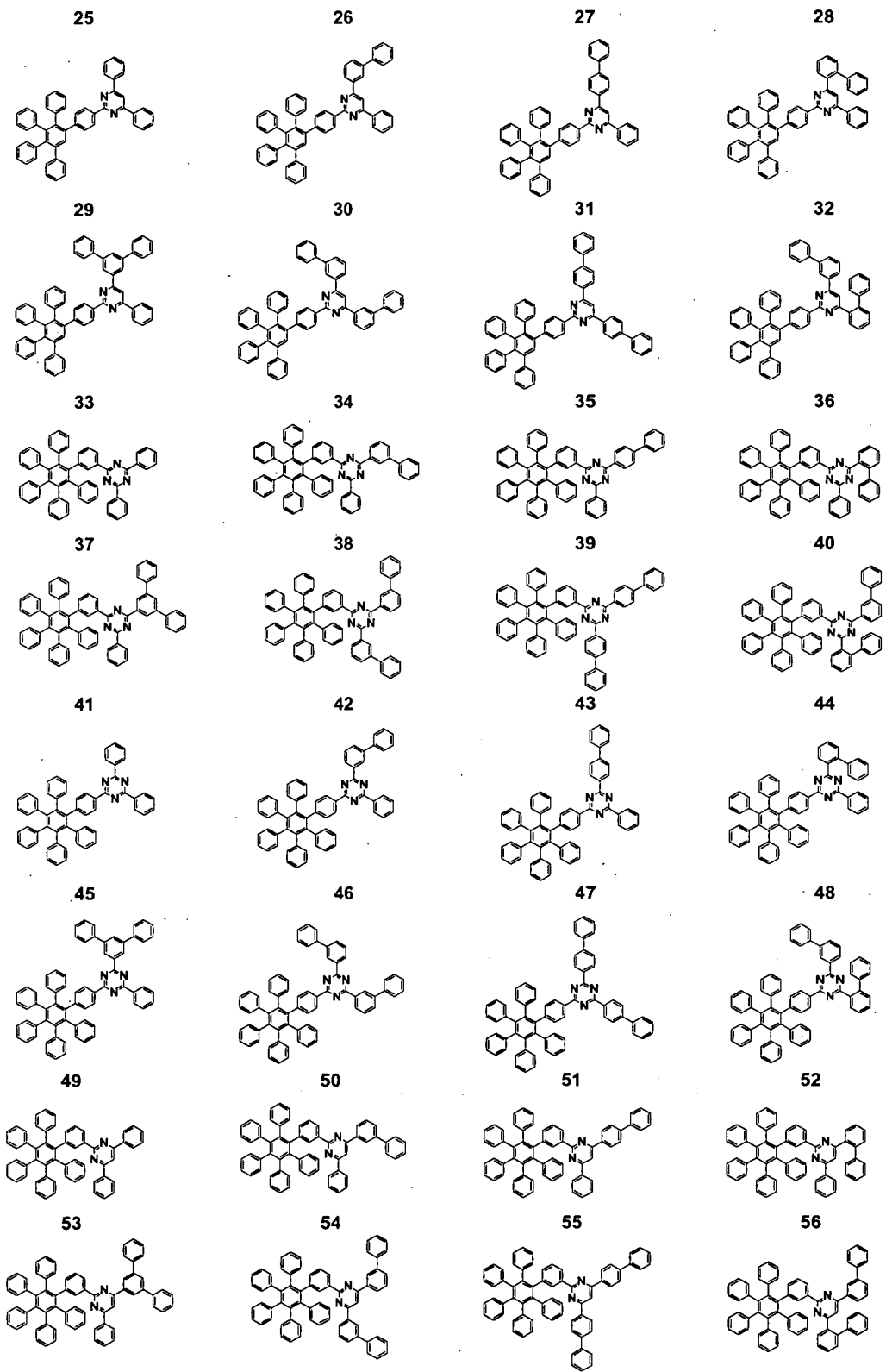
【0052】在群組 A 中，* 為連接點。

【0053】有機光電元件用化合物可例如選自群組 2 的化合物，但不限於此。

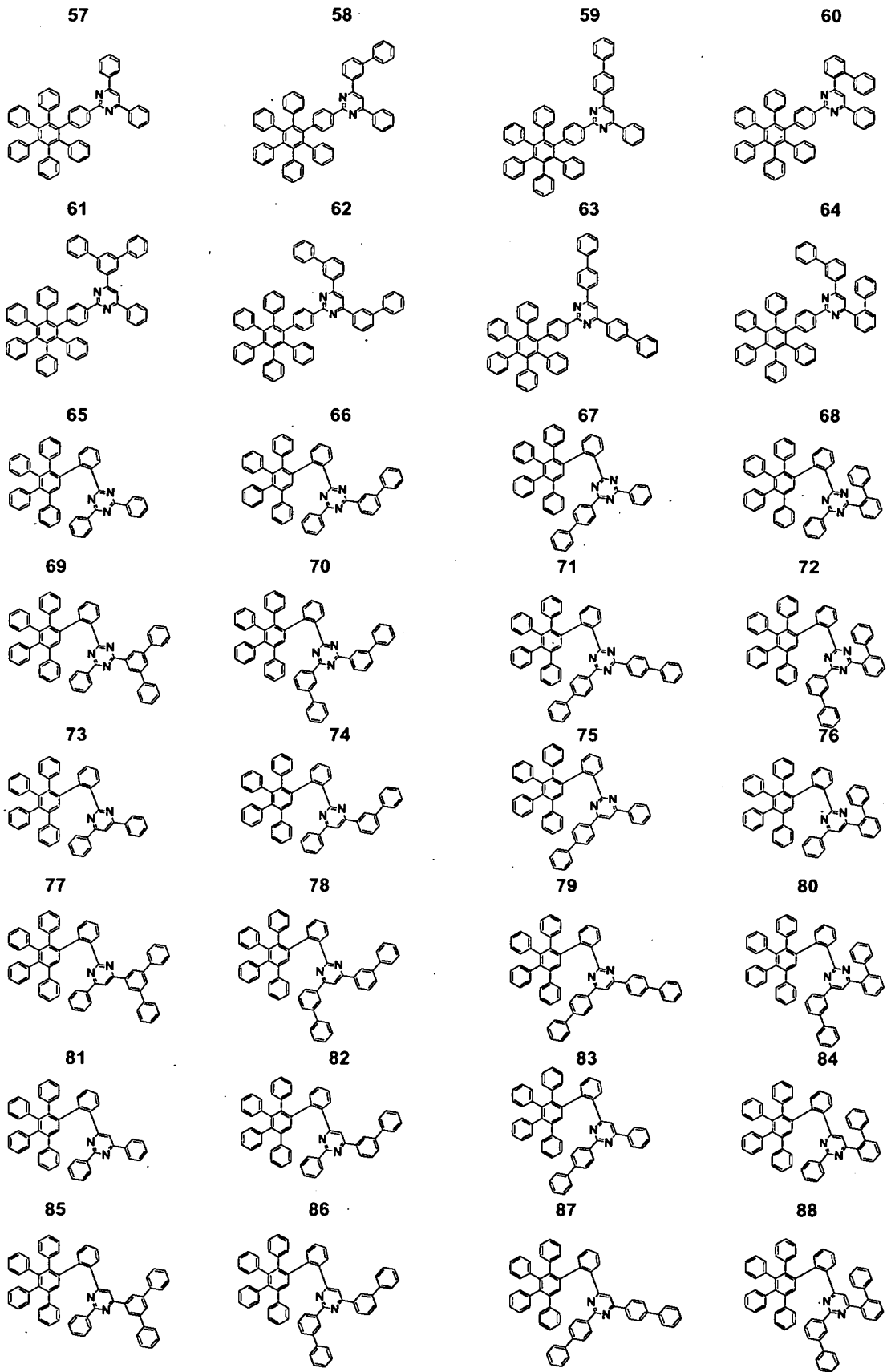
[群組 2]



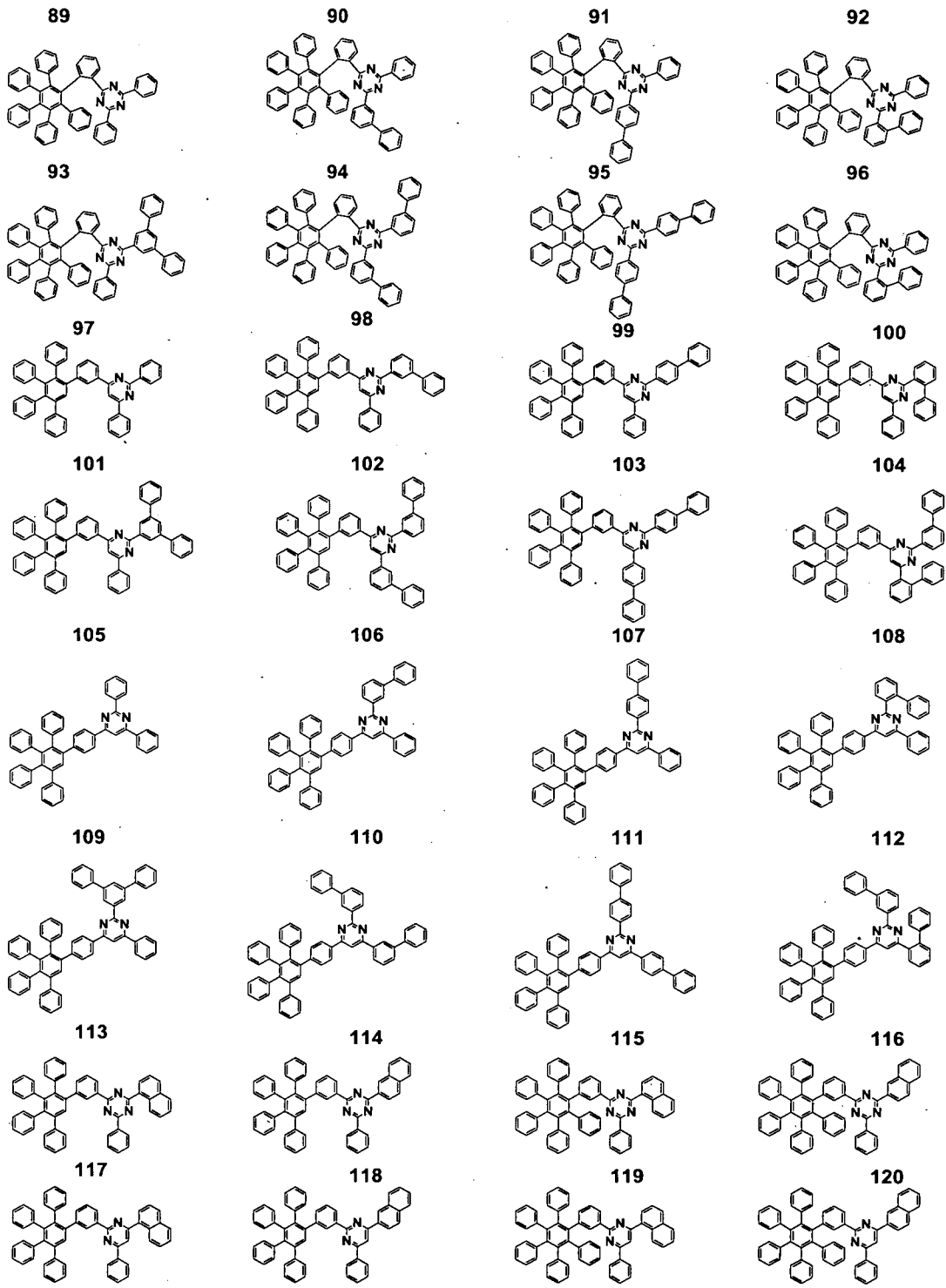
105-8-26



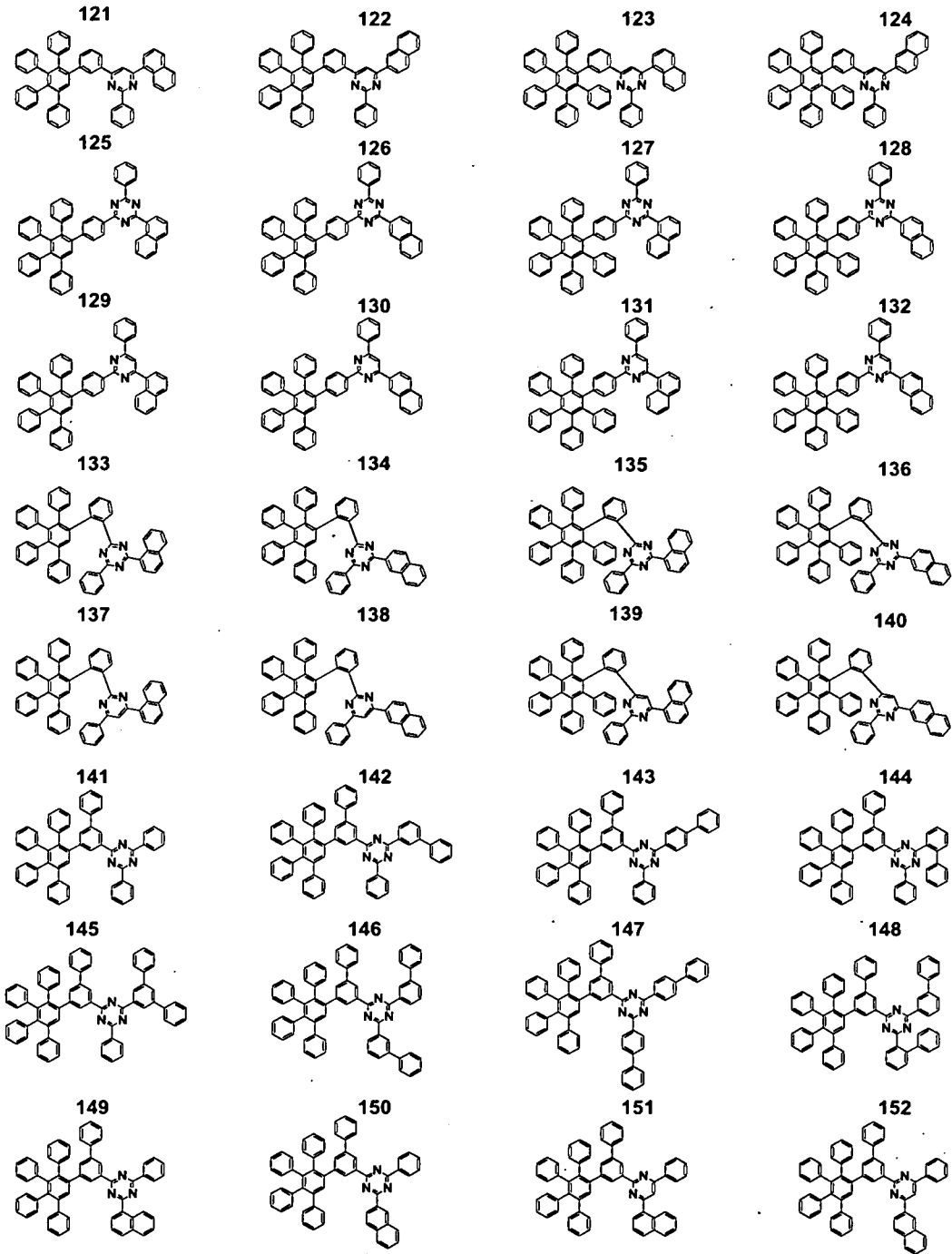
105-8-26



105-8-26



105-8-26



【0054】在下文中，闡述根據另一實施例的有機光電元件。

【0055】根據另一實施例的有機光電元件包括面向彼此的陽極及陰極以及在陽極與陰極之間的至少一個有機層，且有機層包含所述有機光電元件用化合物。

【0056】更具體而言，有機層可包括發射層、電子傳輸層以及電洞傳

輸層，且電子傳輸層或發射層包含由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物。

【0057】此外，電子傳輸層可更包括鄰近於發射層的電子傳輸輔助層，且有機光電元件用化合物可包含在電子傳輸輔助層中。

【0058】有機光電元件可藉由包括包含有機光電元件用化合物的有機層而實現低驅動電壓、高效率、高亮度以及長壽命。

【0059】圖 1 至圖 4 為根據本發明的實施例的有機發光二極體 100、200、300 以及 400 的示意性剖視圖。在下文中，參照圖 1，根據本發明的實施例的有機發光二極體的結構及其製造方法如下。

【0060】有機發光二極體 100 具有陰極 110、發射層 130 以及陽極 120 依次堆疊的結構。

【0061】基板可更安置在陰極 110 下或陽極 120 上。基板可為一般有機發光二極體所用的基板且可為具有強機械強度、熱穩定性、透明性、表面光滑度、容易處理以及防水性的玻璃基板或透明塑膠基板。

【0062】陽極 120 可藉由沈積或濺鍍陽極材料於基板上而形成。陽極材料可選自具有高功函數而使得電洞注入容易的材料。陽極 120 可為反射電極、透射反射電極或透射電極。陽極材料可使用氧化銦錫 (indium tin oxide, ITO)、氧化銦鋅 (indium zinc oxide, IZO)、氧化錫 (SnO_2)、氧化鋅 (ZnO) 等。或，其可為金屬，例如鎂 (Mg)、鋁 (Al)、鋁-鋰 (Al-Li)、鈣 (Ca)、鎂-銦 (Mg-In) 或鎂-銀 (Mg-Ag)。

【0063】陽極 120 可具有單層或兩層或更多層的多層式結構。

【0064】有機層 105 安置於陽極 120 上。

【0065】有機層 105 可包括電洞傳輸區；發射層；以及電子傳輸區。

舉例而言，參照圖 2，闡述根據本發明的實施例的有機發光二極體。

【0066】有機層 105 更包括在陽極 120 與發射層 130 之間的電洞輔助層 140。

【0067】參照圖 3，電洞傳輸區可包括至少兩層的電洞輔助層，且在此種情況下，接觸發射層的電洞輔助層定義為電洞傳輸輔助層 33 且接觸陽極的電洞輔助層定義為電洞傳輸層 31。

【0068】電洞傳輸區可包括電洞注入層、電洞傳輸層、電子阻擋層以及緩衝層中的至少一者。

【0069】電洞傳輸區可包括僅電洞注入層或僅電洞傳輸層。或，電洞傳輸區可具有電洞注入層 37/電洞傳輸層 31 或電洞注入層 37/電洞傳輸層 31/電子阻擋層自陽極 120 依次堆疊的結構。

【0070】舉例而言，另外包括電洞注入層 37 及電子注入層 36，且如圖 4 中所示，陽極 120/電洞注入層 37/電洞傳輸層 31/電洞傳輸輔助層 33/發射層 130/電子傳輸輔助層 35/電子傳輸層 34/電子注入層 36/陽極 110 依次堆疊。

【0071】電洞注入層 37 可改良作為陽極的 ITO 與用於電洞傳輸層 31 的有機材料之間的介面特性，且施用於非平坦化 ITO 上且因此使 ITO 表面平坦化。舉例而言，電洞注入層 37 可包括具有在 ITO 的功函數與電洞傳輸層 31 的 HOMO 之間的中位值（尤其合乎需要的電導率）的材料，以便調節作為陽極的 ITO 的功函數與電洞傳輸層 31 的 HOMO

的差值。結合本發明，電洞注入層 37 可包含 N4,N4'-二苯基-N4,N4'-雙(9-苯基-9H-咔唑-3-基)聯苯-4,4'-二胺) (N4,N4'-diphenyl-N4,N4'-bis(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)biphenyl-4,4'-diamine))，但不限於此。此外，電洞注入層 37 可更包含傳統材料，例如銅酞菁 (copper phthalocyanine, CuPc)；芳族胺，例如 N,N'-二萘基-N,N'-苯基-(1,1'-聯苯)-4,4'-二胺 (N,N'-dinaphthyl-N,N'-phenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamine, NPD)、4,4',4''-三[甲基苯基(苯基)胺基]三苯基胺 (4,4',4''-tris[methylphenyl(phenyl)amino] triphenyl amine, m-MTDATA)、4,4',4''-三[1-萘基(苯基)胺基]三苯基胺 (4,4',4''-tris[1-naphthyl(phenyl)amino] triphenyl amine, 1-TNATA)、4,4',4''-三[2-萘基(苯基)胺基]三苯基胺 (4,4',4''-tris[2-naphthyl(phenyl)amino] triphenyl amine, 2-TNATA)、1,3,5-三[N-(4-二苯基胺基苯基)苯基胺基]苯 (1,3,5-tris[N-(4-diphenylaminophenyl)phenylamino] benzene, p-DPA-TDAB)等；化合物，例如 4,4'-雙[N-[4-{N,N-雙(3-甲基苯基)胺基}苯基]-N-苯基胺基]聯苯 (4,4'-bis[N-[4-{N,N-bis(3-methylphenyl)amino}phenyl]-N-phenylamino]biphenyl, DNTPD)、六氮雜三伸苯基-己腈 (hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile, HAT-CN)等；聚噻吩衍生物，例如聚(3,4-伸乙二氧基噻吩)-聚(苯乙烯磺酸酯) (poly(3,4-ethylenedioxythiophene)-poly(styrenesulfonate), PEDOT)作為導電聚合物。電洞注入層 37 可例如以 10 埃至 300 埃的厚度塗佈於作為陽極的 ITO 上。

【0072】當電洞傳輸區包括電洞注入層 37 時，電洞注入層可藉由以下各種方法中的任一者形成於陽極 120 上，例如真空沈積、旋塗、澆鑄、朗繆爾-布羅傑特（Langmuir-Blodgett，LB）方法等。

【0073】當使用真空沈積形成電洞注入層時，真空沈積條件可視用於形成電洞注入層的材料以及待形成的電洞注入層的所需結構及熱特性而改變，且舉例而言，真空沈積可在約 100℃ 至約 500℃ 的溫度、約 10^{-8} 托至約 10^{-3} 托的壓力以及約 0.01 埃/秒至約 100 埃/秒的沈積速率下進行，但沈積條件不限於此。

【0074】當使用旋塗形成電洞注入層時，塗佈條件可視用於形成電洞注入層的材料以及待形成的電洞注入層的所需結構及熱特性而改變。舉例而言，塗佈速率可在約 2000 轉/分鐘至約 5000 轉/分鐘的範圍內，且在塗佈之後為移除溶劑所進行的熱處理的溫度可在約 80℃ 至約 200℃ 的範圍內，但塗佈條件不限於此。

【0075】形成電洞傳輸層及電子阻擋層的條件可基於上述電洞注入層的形成條件來定義。

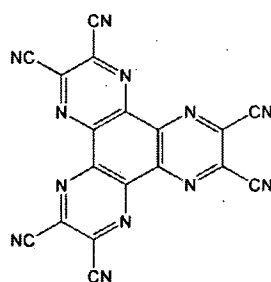
【0076】電洞傳輸區的厚度可為約 100 埃至約 10000 埃，例如約 100 埃至約 1000 埃。當電洞傳輸區包括電洞注入層及電洞傳輸層時，電洞注入層的厚度可為約 100 埃至約 10,000 埃，例如約 100 埃至約 1000 埃，且電洞傳輸層的厚度可為約 50 埃至約 2,000 埃，例如約 100 埃至約 1500 埃。當電洞傳輸區、電洞注入層（HIL）及電洞傳輸層（HTL）的厚度在此等範圍內時，可在不大幅度增加驅動電壓的情況下獲得令人滿意的電洞傳輸特徵。

105-8-26

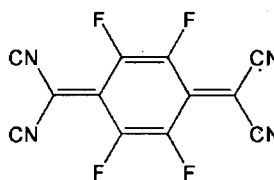
【0077】除如上所述的材料之外，電洞傳輸區可更包含電荷產生材料以改良導電性。電荷產生材料可均勻或非均勻地分散於電洞傳輸區中。

【0078】電荷產生材料可為例如 p-摻雜劑。p-摻雜劑可為奎寧衍生物 (quinine derivative)、金屬氧化物以及含氰基化合物中的一者，但不限於此。p-摻雜劑的非限制性實例為醌衍生物，例如四氰基醌二甲烷 (tetracyanoquinonodimethane, TCNQ)、2,3,5,6-四氟-四氰基-1,4-苯醌二甲烷 (2,3,5,6-tetrafluoro-tetracyano-1,4-benzoquinonodimethane, F4-TCNQ) 等；金屬氧化物，例如氧化鎢、氧化鋁等；以及含氰基化合物，例如以下化合物 HT-D1。

<化合物 HT-D1>



<F4-TCNQ>



【0079】電洞傳輸區可更包括緩衝層。

【0080】緩衝層可根據自發射層發射的光的波長補償光的光學共振距離且因此可增加效率。

【0081】發射層 (emission layer, EML) 可藉由使用真空沈積、旋塗、澆鑄、LB 方法等形成於電洞傳輸區上。當使用真空沈積或旋塗形成發射層時，沈積及塗佈條件可與形成電洞注入層的所述條件類似，但沈積及塗佈條件仍可視用於形成發射層的材料而改變。

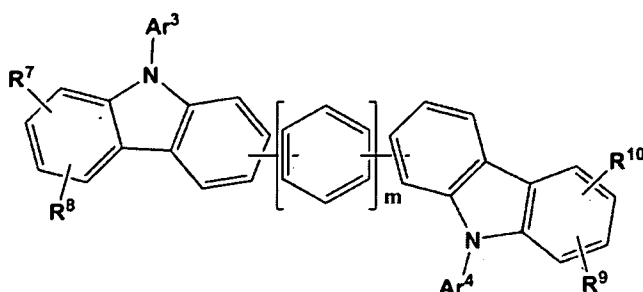
【0082】發射層可包含主體及摻雜劑。

105-8-26

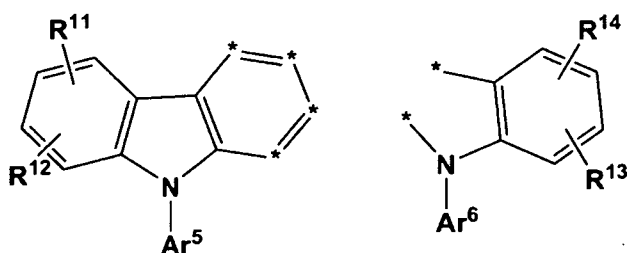
【0083】根據本發明實施例的有機光電元件包含單獨的由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物，或包含由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物作為第一主體及卟啉系化合物作為第二主體。

【0084】卟啉系化合物具體而言可由化學式 2 表示或可由化學式 3 表示的部分與由化學式 4 表示的部分的組合組成。

[化學式 2]



[化學式 3] [化學式 4]



【0085】在化學式 2 至化學式 4 中，

Ar³ 至 Ar⁶ 獨立地為經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基，

m 為整數 0 或 1，

化學式 3 的相鄰兩個*與化學式 4 的兩個*組合形成稠合環，且化學式 3 的不形成稠合環的*獨立地為 CR^b，且

R^b 及 R⁷ 至 R¹⁴ 獨立地為氫、氖、經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基、C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基。

【0086】在本發明的一個實例中，在化學式 2 至化學式 4 中，

經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基為經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的聯三苯基、經取代或未經取代的聯四苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的聯伸三苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的二苯並呋喃基、經取代或未經取代的二苯並噻吩基、經取代或未經取代的吡啶基、經取代或未經取代的嘧啶基、經取代或未經取代的三嗪基、經取代或未經取代的喹啉基、經取代或未經取代的異喹啉基或經取代或未經取代的喹啉基，

其中在「經取代或未經取代」中，「經取代」是指至少一個氫經氫、C1 至 C10 烷基、C6 至 C18 芳基或 C3 至 C20 雜芳基置換。

【0087】在本發明的一個實例中，在化學式 2 至化學式 4 中，

經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基是指經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的聯三苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的聯伸三苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的二苯並呋喃基、經取代或未經取代的二苯並噻吩基、經取代或未經取代的吡啶基、經取代或未經取代的嘧啶基、經取代或未經取代的三嗪基、經取代或未經取代的喹啉基、經取代或未經取代的異喹啉基或經取代或未經取代的喹啉基，

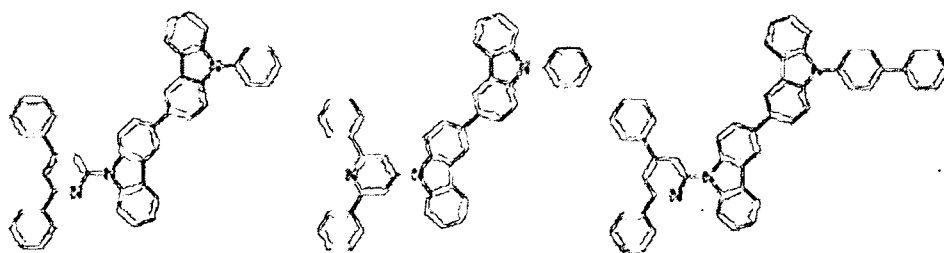
其中在「經取代或未經取代」中，「經取代」是指至少一個氫經氫、C1 至 C4 烷基、C6 至 C12 芳基或 C3 至 C15 雜芳基置換。

【0088】由化學式 2 表示的聯咪唑可例如選自群組 B 的化合物，

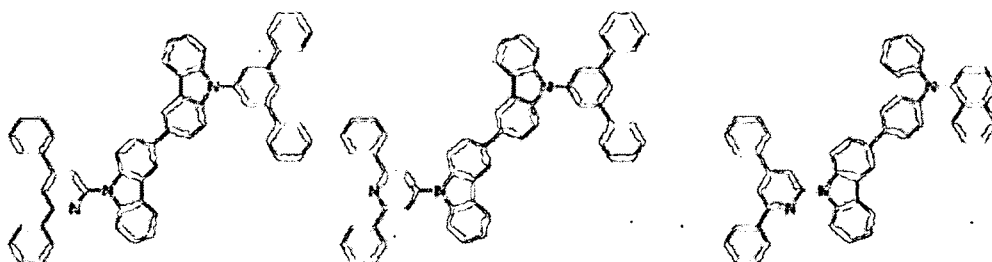
由化學式 3 表示的部分與由化學式 4 表示的部分的組合組成的吡
噪并咪唑（indolocarbazole）可例如選自群組 C 的化合物。

[群組 B]

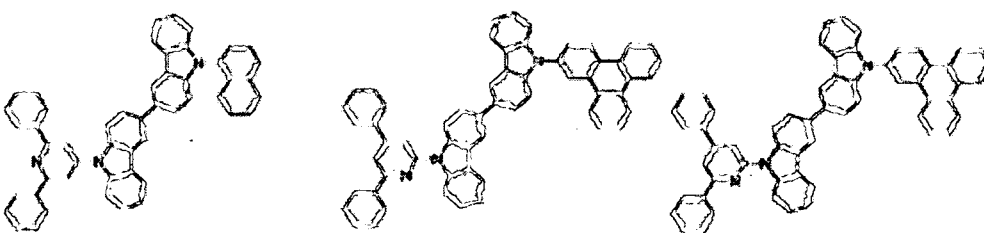
[B-1] [B-2] [B-3]



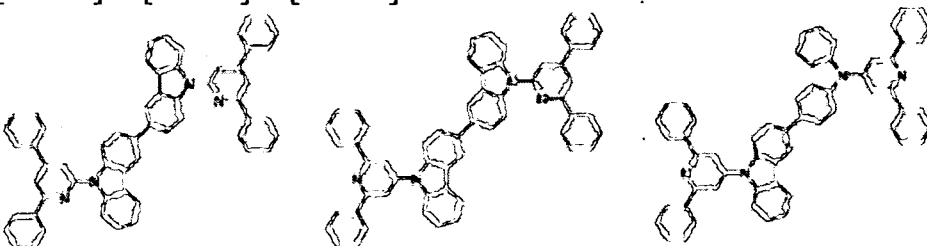
[B-4] [B-5] [B-6]



[B-7] [B-8] [B-9]

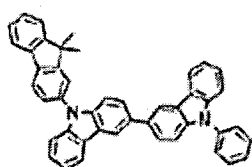


[B-10] [B-11] [B-12]

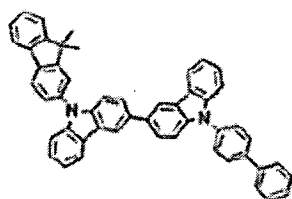


[B-13] [B-14] [B-15]

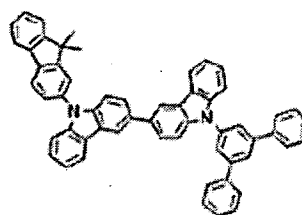
105-8-26



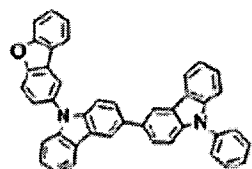
[B-16]



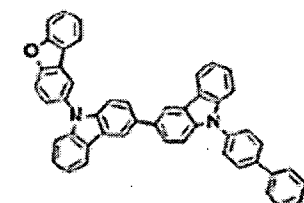
[B-17]



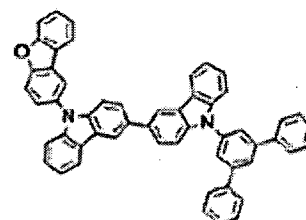
[B-18]



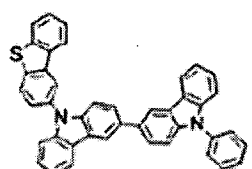
[B-19]



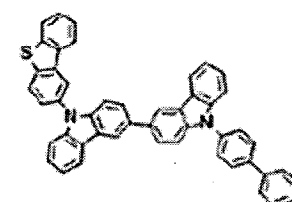
[B-20]



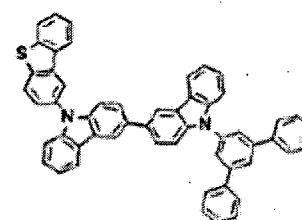
[B-21]



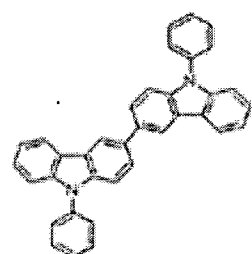
[B-22]



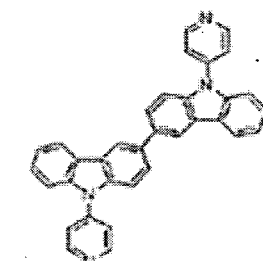
[B-23]



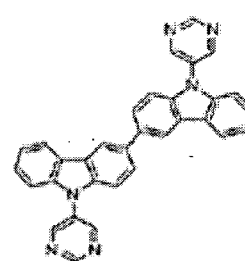
[B-24]



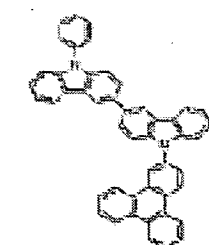
[B-25]



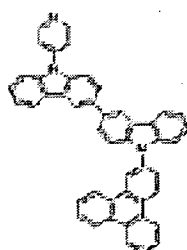
[B-26]



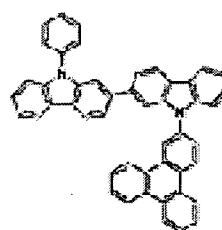
[B-27]



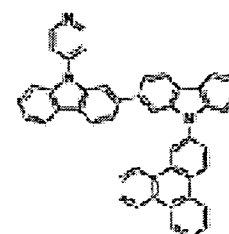
[B-28]



[B-29]



[B-30]

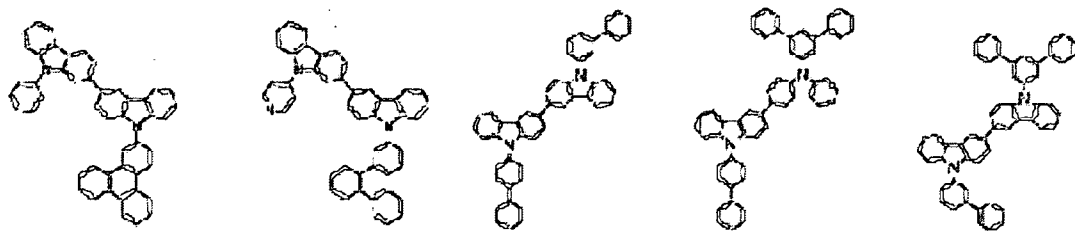


[B-31]

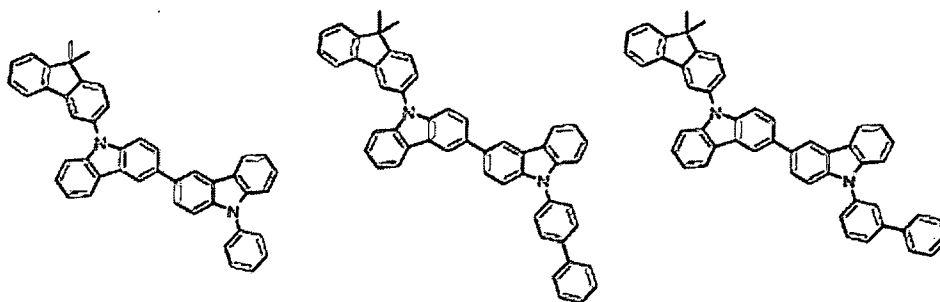
[B-32]

[B-33]

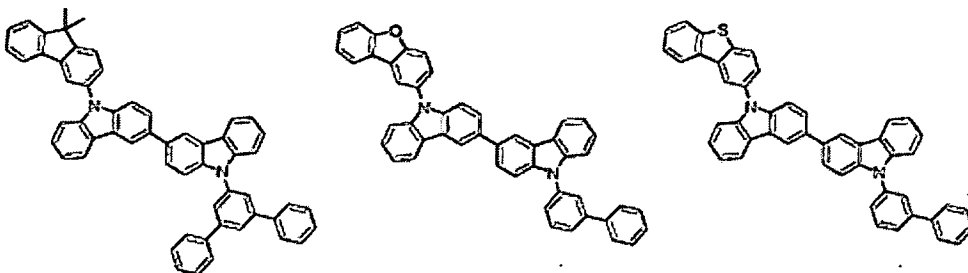
105-8-26



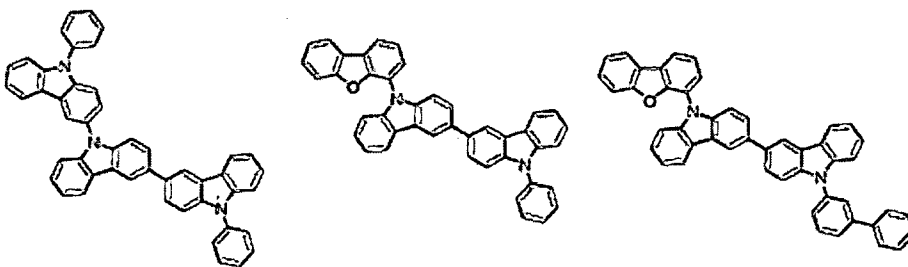
[B-34] [B-35] [B-36]



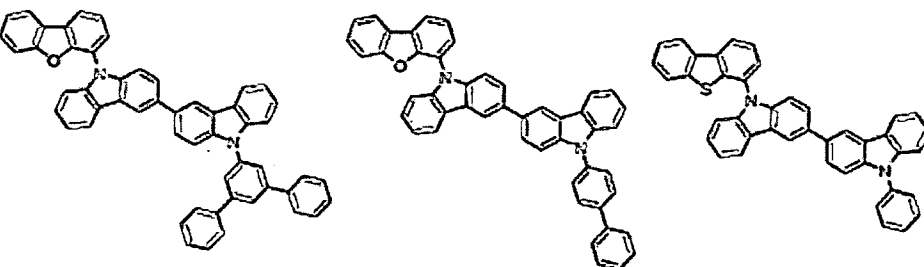
[B-37] [B-38] [B-39]



[B-40] [B-41] [B-42]

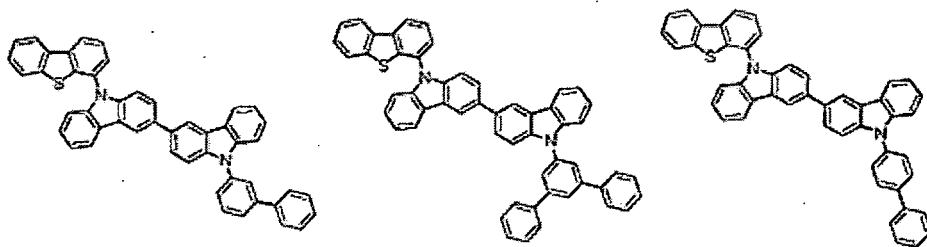


[B-43] [B-44] [B-45]

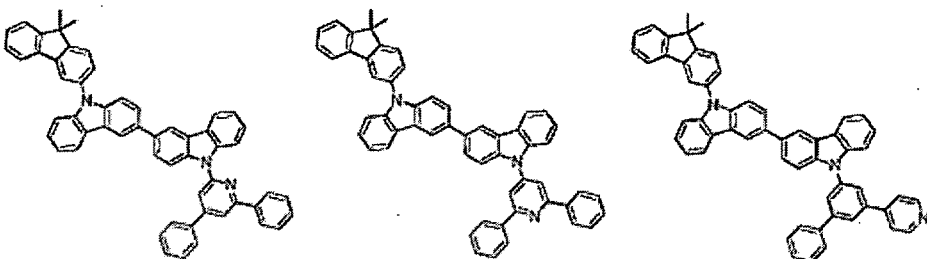


105-8-26

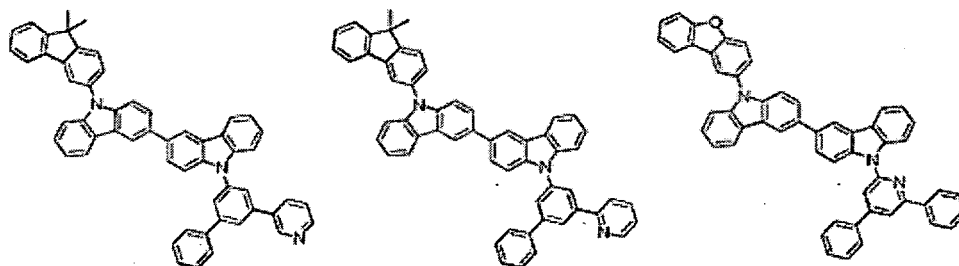
[B-46] [B-47] [B-48]



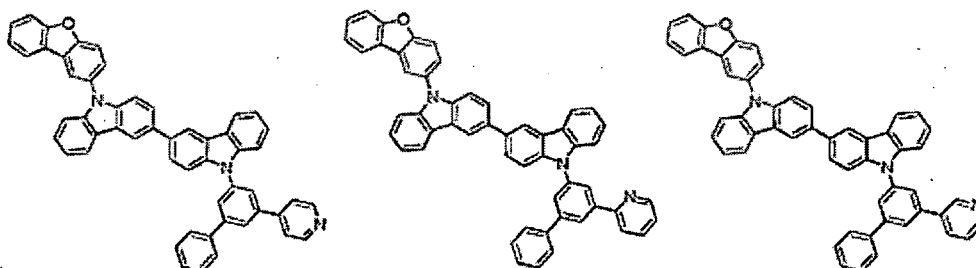
[B-49] [B-50] [B-51]



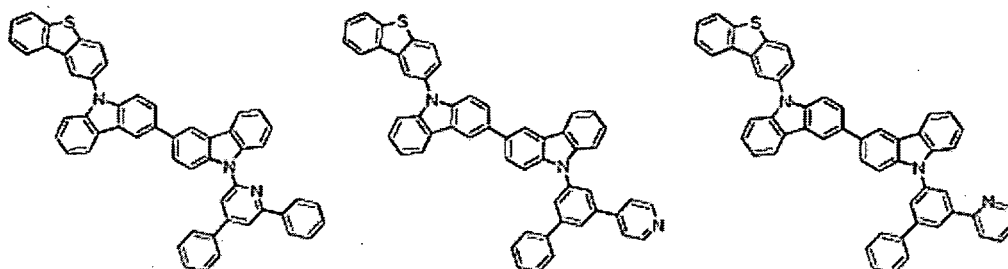
[B-52] [B-53] [B-54]



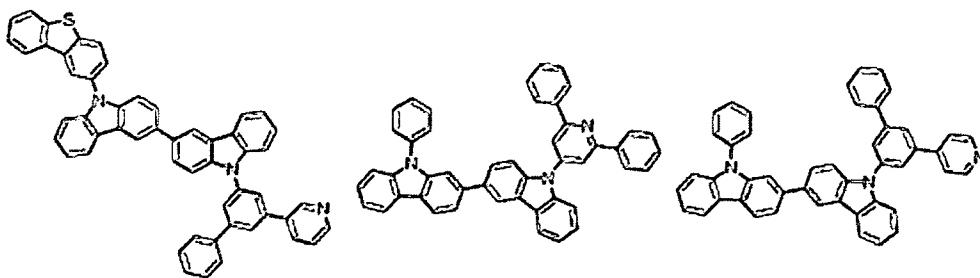
[B-55] [B-56] [B-57]



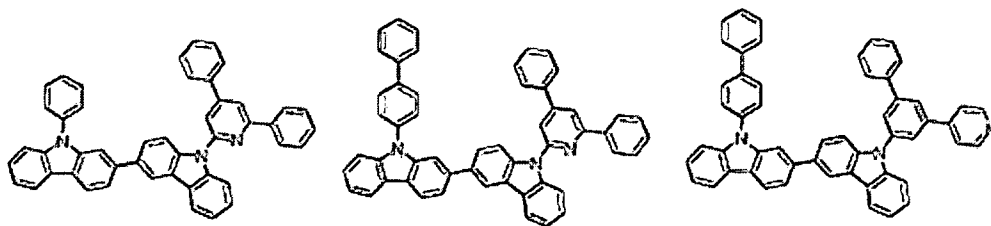
[B-58] [B-59] [B-60]



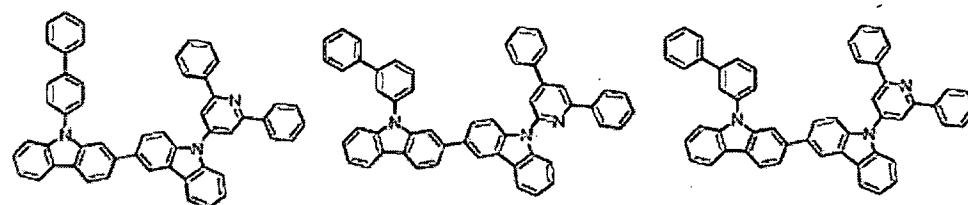
[B-61] [B-62] [B-63]



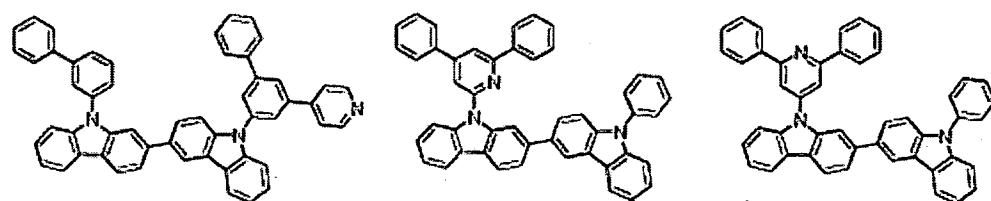
[B-64] [B-65] [B-66]



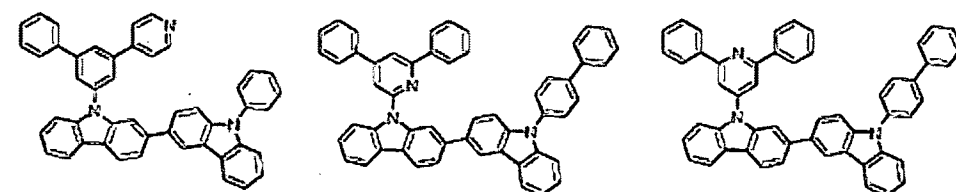
[B-67] [B-68] [B-69]



[B-70] [B-71] [B-72]

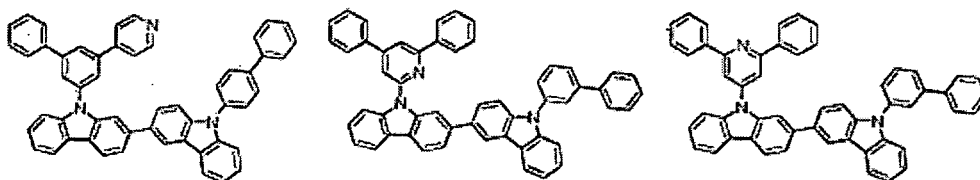


[B-73] [B-74] [B-75]

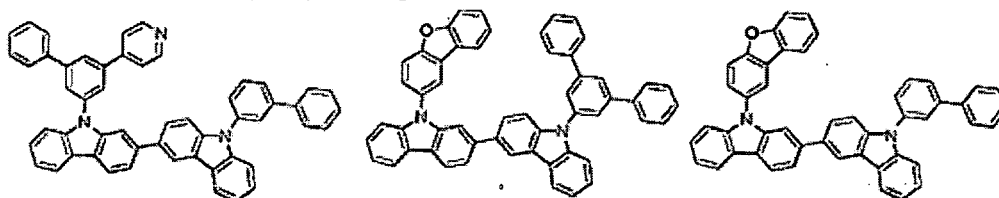


[B-76] [B-77] [B-78]

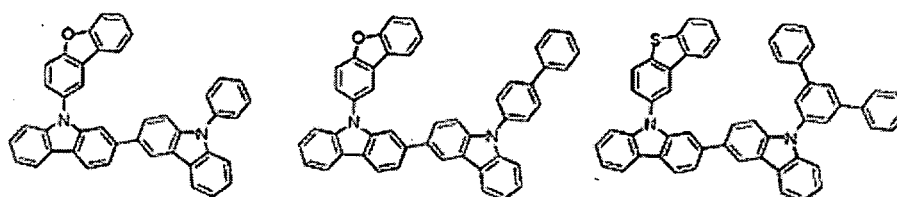
105-8-26



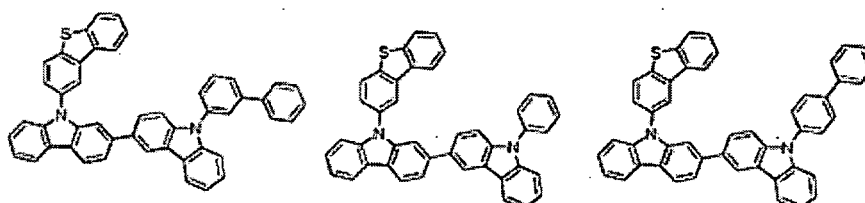
[B-79] [B-80] [B-81]



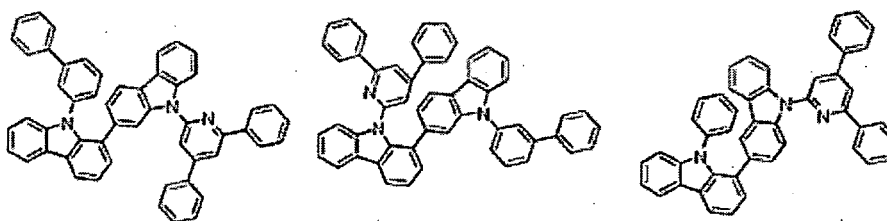
[B-82] [B-83] [B-84]



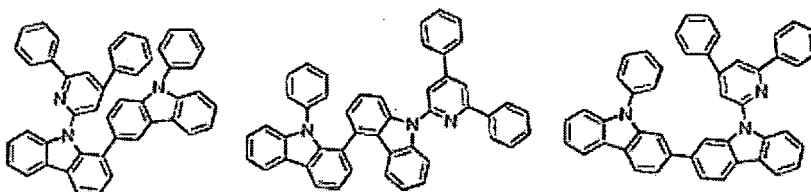
[B-85] [B-86] [B-87]



[B-88] [B-89] [B-90]

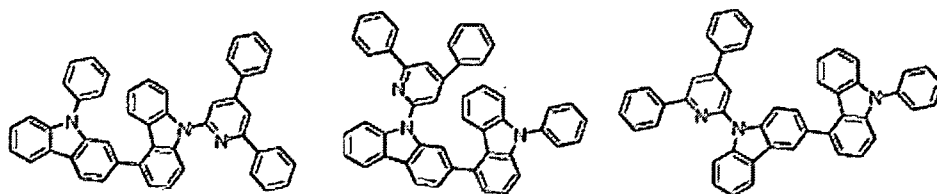


[B-91] [B-92] [B-93]

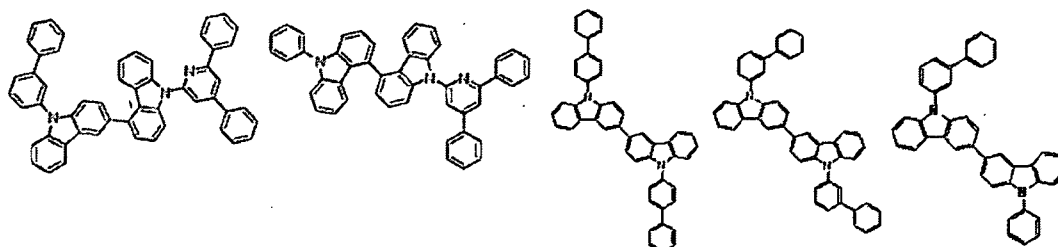


[B-94] [B-95] [B-96]

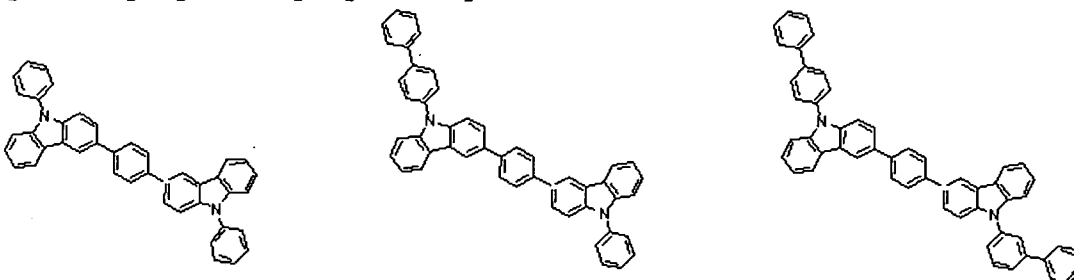
105-8-26



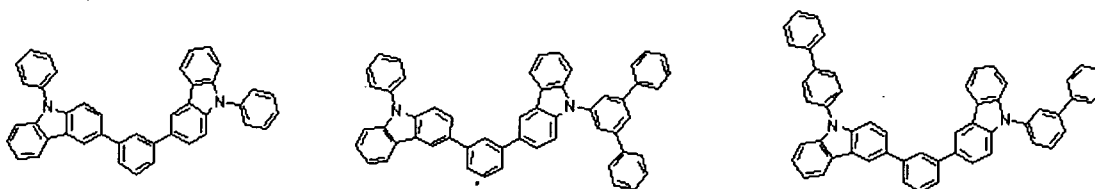
[B-97] [B-98] [B-99] [B-100] [B-101]



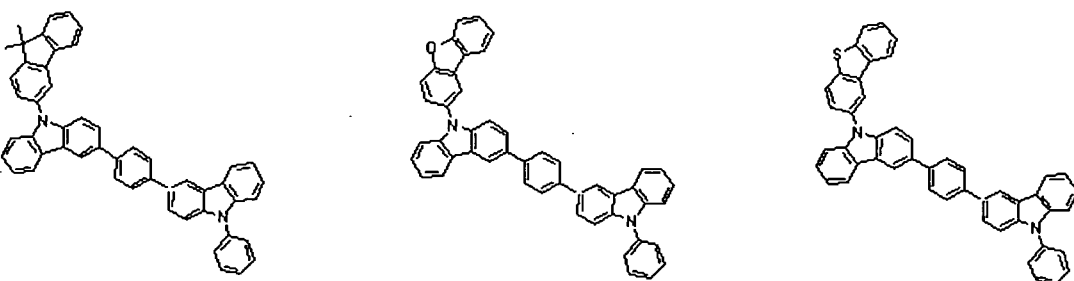
[B-102] [B-103] [B-104]



[B-105] [B-106] [B-107]

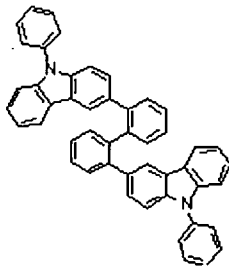


[B-108] [B-109] [B-110]

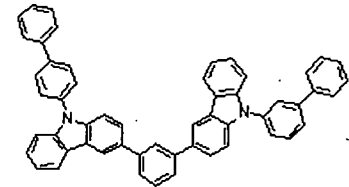
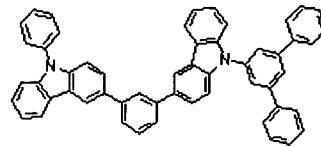
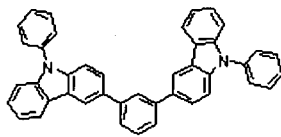
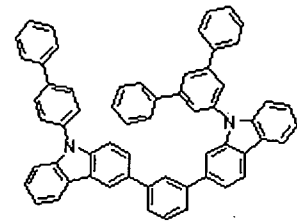
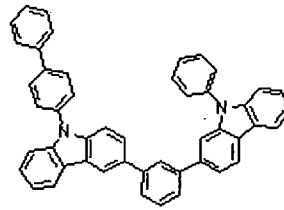


[B-111] [B-112] [B-113]

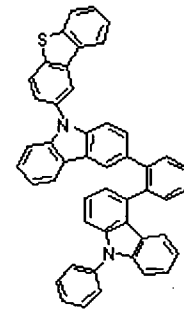
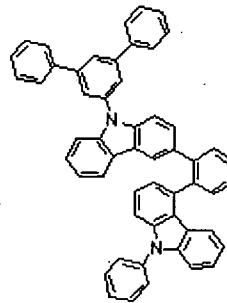
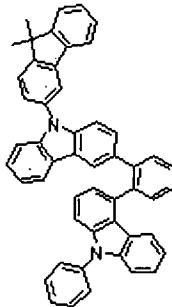
105-8-26



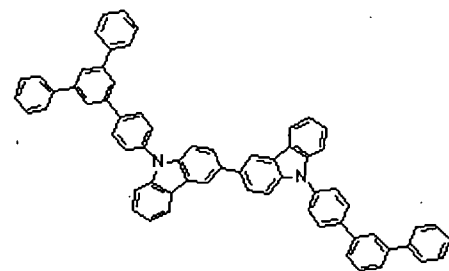
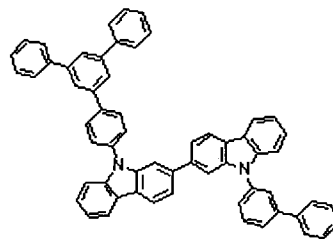
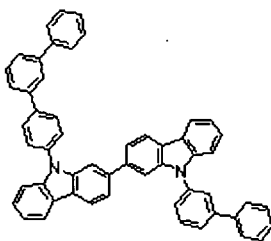
[B-114] [B-115] [B-116]



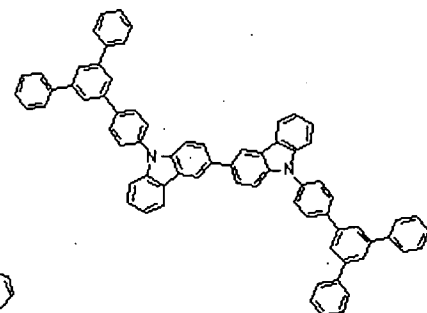
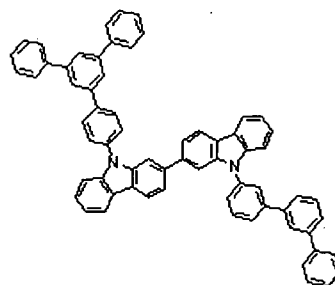
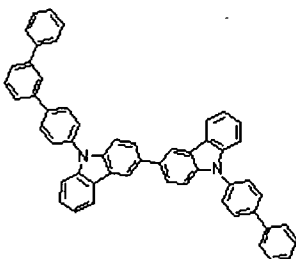
[B-117] [B-118] [B-119]



[B-120] [B-121] [B-122]

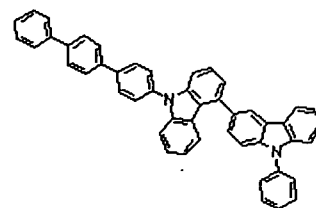
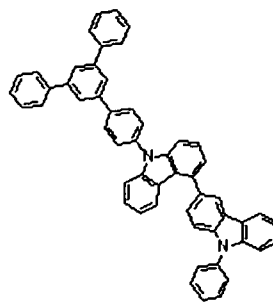
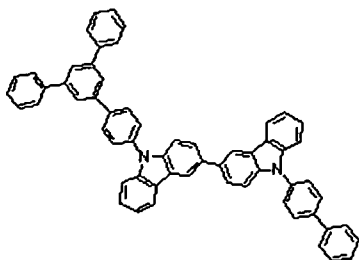


[B-123] [B-124] [B-125]

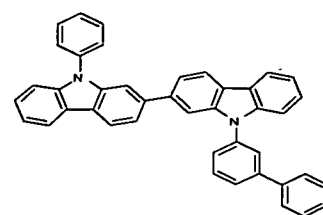
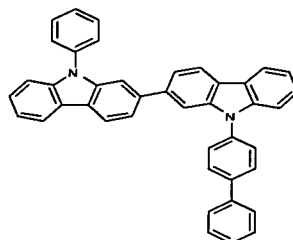
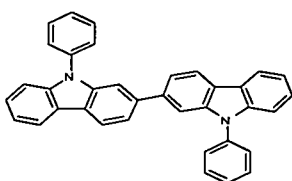


105-8-26

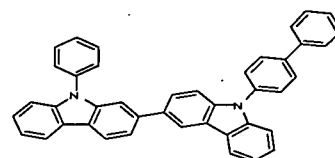
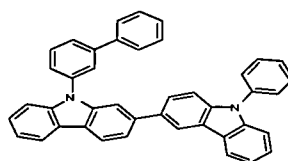
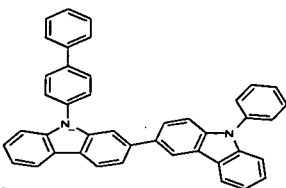
[B-126] [B-127] [B-128]



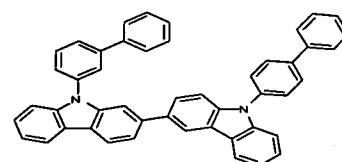
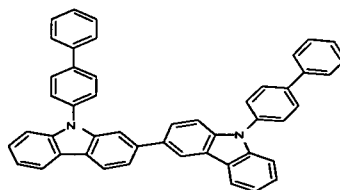
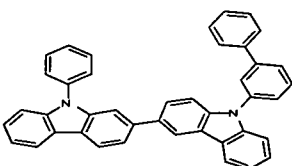
[B-129] [B-130] [B-131]



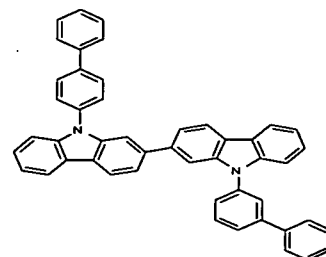
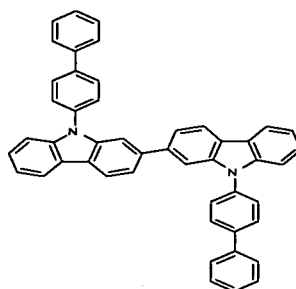
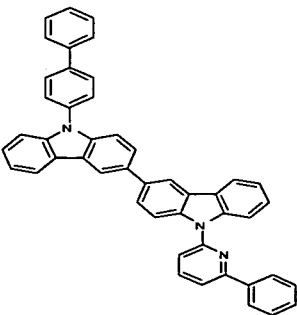
[B-131] [B-133] [B-134]



[B-135] [B-136] [B-137]

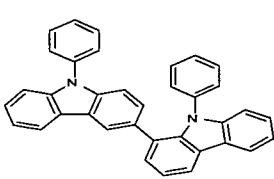


[B-138] [B-139] [B-140]

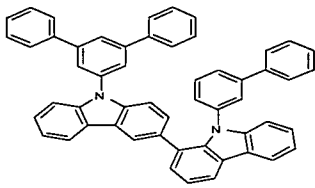
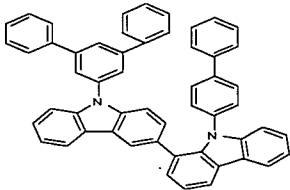
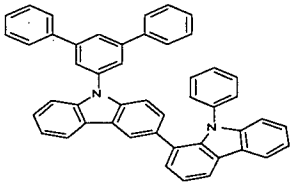
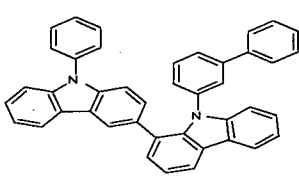
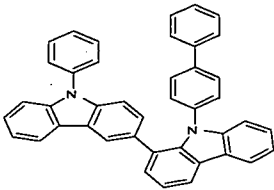


[B-141] [B-142] [B-143]

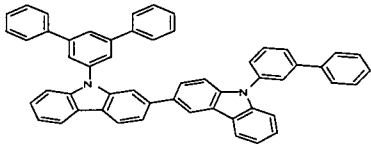
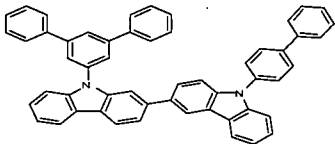
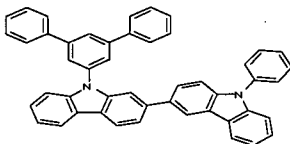
105-8-26



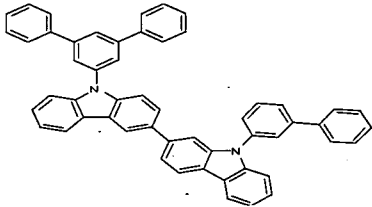
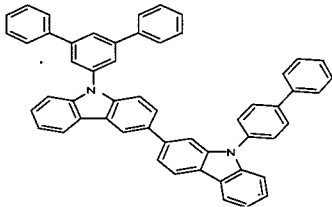
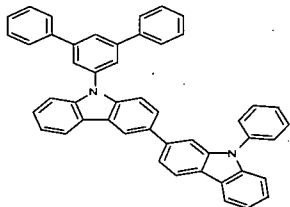
[B-144] [B-145] [B-146]



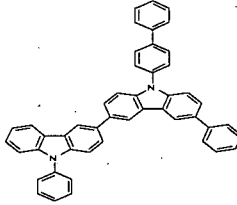
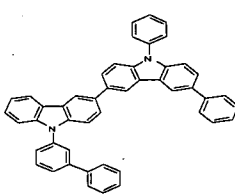
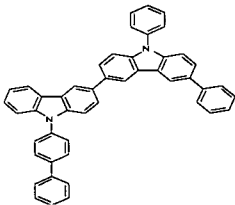
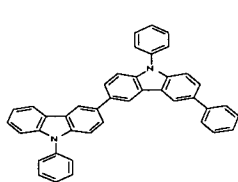
[B-147] [B-148] [B-149]



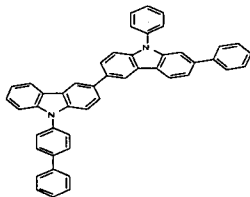
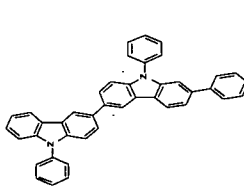
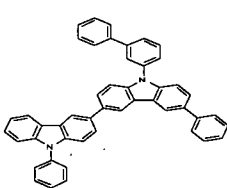
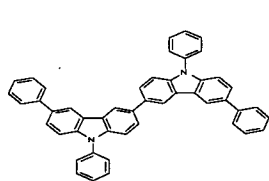
[B-150] [B-151] [B-152]



[B-153] [B-154] [B-155] [B-156]

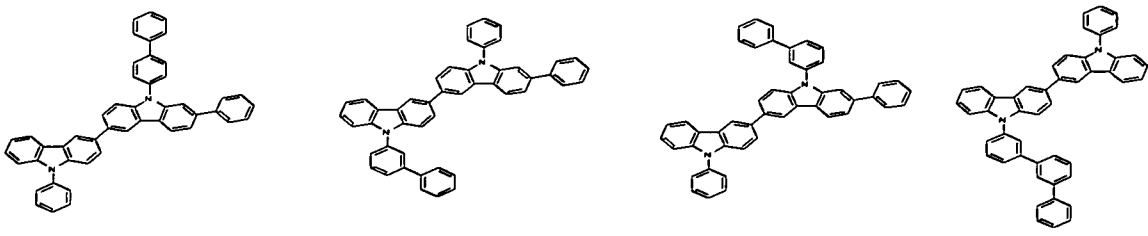


[B-157] [B-158] [B-159] [B-160]

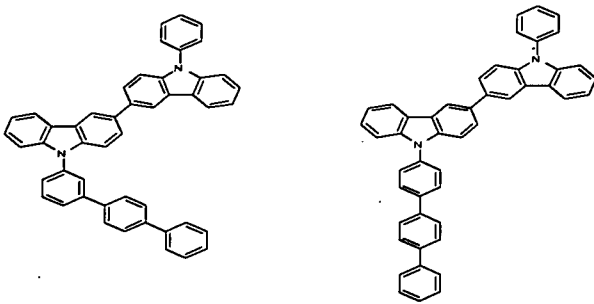


[B-161] [B-162] [B-163] [B-164]

105-8-26

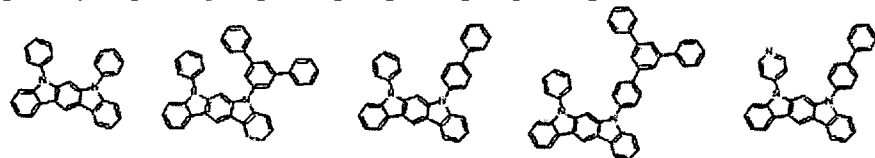


[B-165] [B-166]

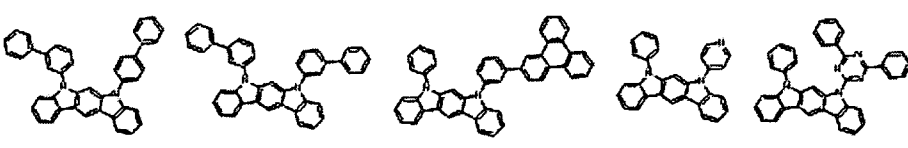


[群組 C]

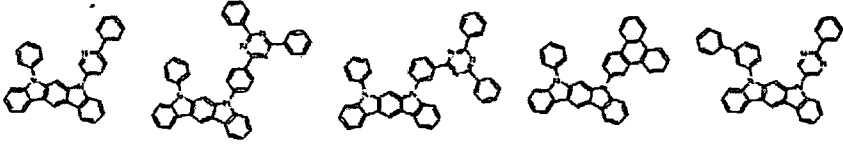
[C-1] [C-2] [C-3] [C-4] [C-5]



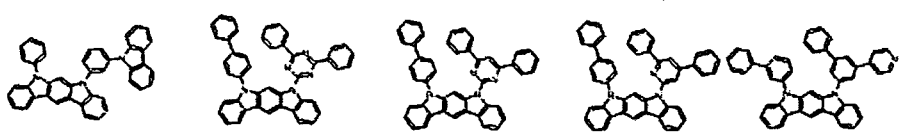
[C-6] [C-7] [C-8] [C-9] [C-10]



[C-11] [C-12] [C-13] [C-14] [C-15]

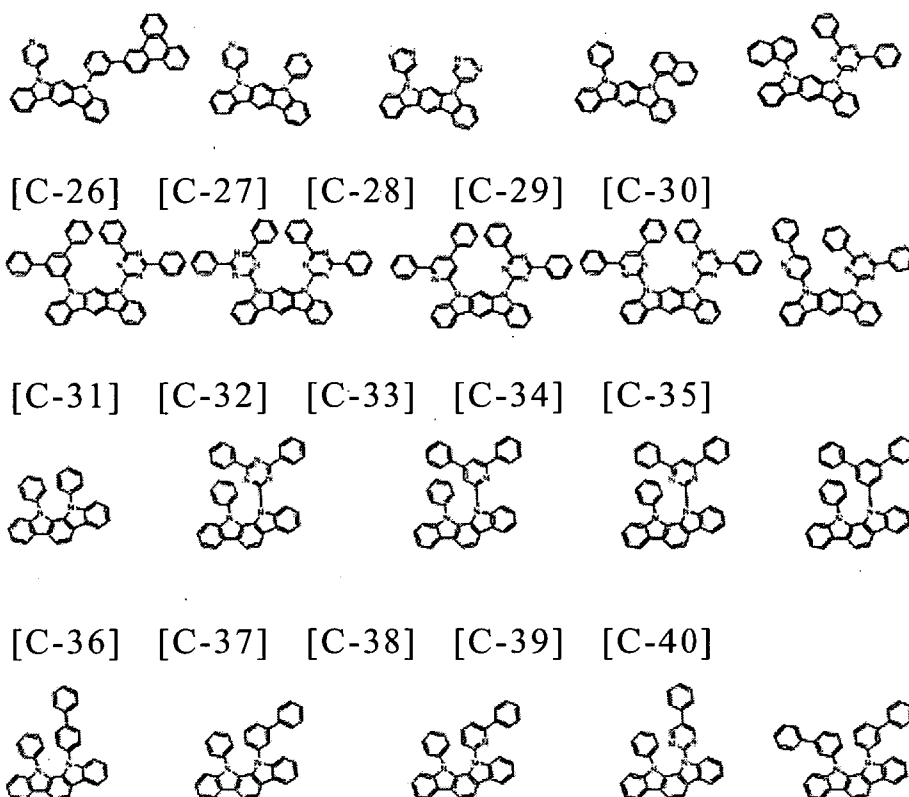


[C-16] [C-17] [C-18] [C-19] [C-20]



[C-21] [C-22] [C-23] [C-24] [C-25]

105-8-26



【0089】上述第一主體及第二主體可以各種比率用於製備各種組成物。舉例而言，第一主體及第二主體可以範圍介於 1：99 至 99：1，例如 10：90 至 90：10 的重量比使用。舉例而言，重量比可為 2：8 至 8：2、3：7 至 7：3、4：6 至 6：4 以及 5：5。當第一主體及第二主體滿足所述重量比範圍時，可平衡第一主體的電子傳輸特徵與第二主體的電洞傳輸特徵且因此改良有機發光二極體的亮度效率及壽命。

【0090】舉例而言，組成物可用作有機光電元件的光發射材料。在本文中，光發射材料可為作為主體的有機化合物，且可更包含至少一種摻雜劑。摻雜劑可為紅色、綠色或藍色摻雜劑。

【0091】摻雜劑以少量混合以引起光發射，且可一般為藉由多次激發至三重態或多於三重態而發光的材料，例如金屬錯合物。摻雜劑可為例如無機化合物、有機化合物或有機/無機化合物，且可使用其一或多

個種類。

【0092】摻雜劑可為磷光摻雜劑，且磷光摻雜劑的實例可為包含 Ir、Pt、Os、Ti、Zr、Hf、Eu、Tb、Tm、Fe、Co、Ni、Ru、Rh、Pd 或其組合的有機金屬化合物。磷光摻雜劑可為例如由化學式 Z 表示的化合物，但不限於此。

[化學式 Z]

L_2MX

● 【0093】在化學式 Z 中，M 為金屬，且 L 及 X 為相同或不同的，且為與 M 形成錯合物的配位體。

【0094】M 可為例如 Ir、Pt、Os、Ti、Zr、Hf、Eu、Tb、Tm、Fe、Co、Ni、Ru、Rh、Pd 或其組合，且 L 及 X 可為例如二齒配位體。

【0095】發射層的厚度可為約 100 埃至約 1000 埃，例如約 200 埃至約 600 埃。當發射層的厚度在此等範圍內時，發射層可在不大幅度增加驅動電壓的情況下具有改良的發射特徵。

● 【0096】接著，將電子傳輸區安置於發射層上。

【0097】電子傳輸區可包括電洞阻擋層、電子傳輸層以及電子注入層中的至少一者。

【0098】舉例而言，電子傳輸區可具有電洞阻擋層/電子傳輸層/電子注入層或電子傳輸層/電子注入層的結構，但不限於此。舉例而言，根據本發明實施例的有機發光二極體在電子傳輸區中包括至少兩個電子傳輸層，且在此種情況下，接觸發射層的電子傳輸層定義為電子傳輸輔助層 35。

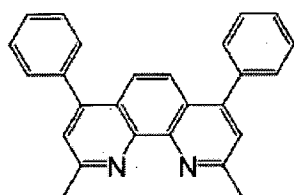
105-8-26

【0099】電子傳輸層可具有包含兩種或更多種不同材料的單層或多層式結構。

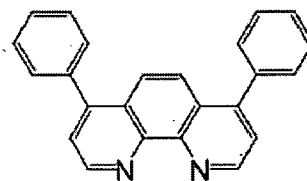
【0100】電子傳輸區可包含由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物。舉例而言，電子傳輸區可包括電子傳輸層，且電子傳輸層可包含由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物。更具體而言，電子傳輸輔助層可包含由化學式 1 表示的有機光電元件用化合物。

【0101】電子傳輸區的電洞阻擋層、電子傳輸層以及電子注入層的形成條件參照電洞注入層的形成條件。

【0102】當電子傳輸區包括電洞阻擋層時，電洞阻擋層可包含 BCP、Bphen 以及 BAlq 中的至少一者，但不限於此。



BCP

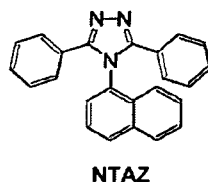
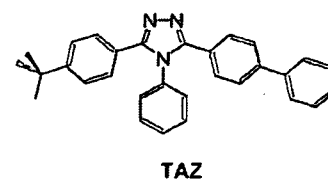
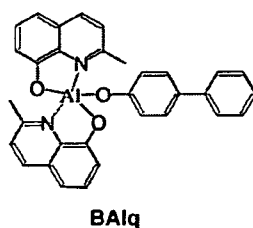
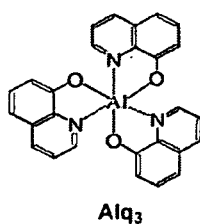


Bphen

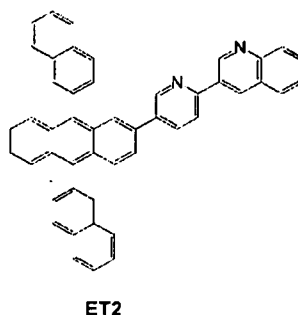
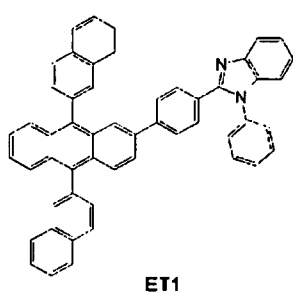
【0103】電洞阻擋層的厚度可為約 20 埃至約 1000 埃，例如約 30 埃至約 300 埃。當電洞阻擋層的厚度在此等範圍內時，電洞阻擋層可在不大幅度增加驅動電壓的情況下具有改良的電洞阻擋能力。

【0104】電子傳輸層可更包含 BCP、Bphen 及下列 Alq₃、Balq、TAZ 以及 NTAZ 中的至少一者。

105-8-26



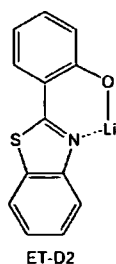
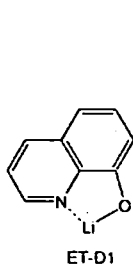
【0105】或，電子傳輸層可包含化合物 ET1 及化合物 ET2 中的至少一者，但不限於此。



【0106】電子傳輸層的厚度可為約 100 埃至約 1000 埃，例如約 150 埃至約 500 埃。當電子傳輸層的厚度在此等範圍內時，電子傳輸層可在不大幅度增加驅動電壓的情況下具有令人滿意的電子傳輸能力。

【0107】電子傳輸層可除上述材料之外更包含含金屬的材料。

【0108】含金屬的材料可包含鋰 (Li) 錯合物。Li 錯合物可包含例如化合物 ET-D1 (喹啉鋰，LiQ) 或化合物 ET-D2。



【0109】此外，電子傳輸區可包括電子注入層（electron injection layer，EIL），其可有助於電子自陽極 110 注入。

【0110】電子注入層 36 安置於電子傳輸層上且可發揮有助於電子自陰極注入且最終改良功率效率的作用，並藉由使用相關技術中所用的任何材料形成而無特別限制，例如 LiF、Li₂O、NaCl、CsF、Li₂O、BaO 等。

【0111】電子注入層可包含選自 LiF、NaCl、CsF、Li₂O 以及 BaO 中的至少一者。

【0112】EIL 的厚度可為約 1 埃至約 100 埃，或約 3 埃至約 90 埃。當電子注入層的厚度在此等範圍內時，電子注入層可在不大幅度增加驅動電壓的情況下具有令人滿意的電子注入能力。

【0113】陽極 110 安置於有機層 105 上。陽極 110 用材料可為具有低功函數的金屬、合金或導電化合物，或其組合。陽極 110 用材料的特定實例可為鋰（Li）、鎂（Mg）、鋁（Al）、鋁-鋰（Al-Li）、鈣（Ca）、鎂-銦（Mg-In）、鎂-銀（Mg-Ag）等。為了製造頂部發射發光元件，陽極 110 可由例如氧化銦錫（ITO）或氧化銦鋅（IZO）形成作為透射電極。

【0114】上述有機發光二極體可應用於有機發光二極體（OLED）顯示器。

【0115】在下文中參照實例更詳細地說明實施例。然而，本發明參照實例更詳細地說明。

（有機光電元件用化合物的合成）

105-8-26

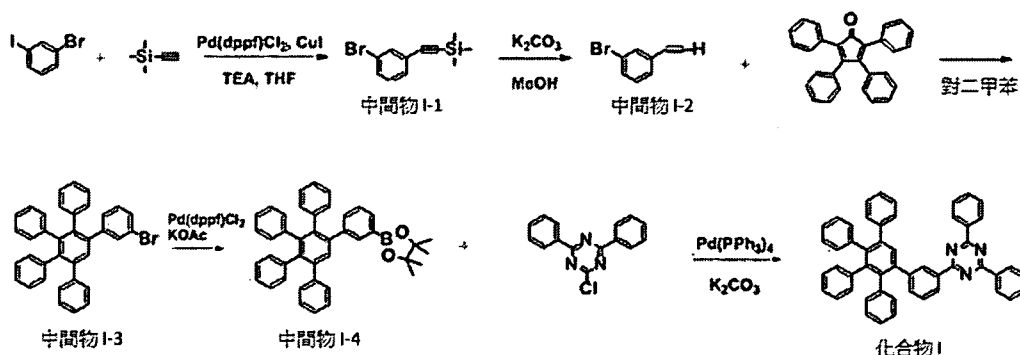
【0116】在下文中，實例及合成例中所用的起始材料及反應物購自西格瑪奧德里奇公司（Sigma-Aldrich Co. Ltd.）或 TCI 公司，只要不存在特別註釋且可易於合成作為眾所周知的材料即可。

【0117】在以下合成例中，當「使用『B』代替『A』」時，『A』與『B』的量以莫耳當量計為相同的。

【0118】作為本發明的有機光電元件用化合物的特定實例，化學式 1 的化合物藉由以下反應流程合成。

合成例 1：化合物 1 的合成

[反應流程 1]



第一步：中間物 I-1 的合成

【0119】在氮氣氛圍下，將 1-溴-3-碘苯（200.0 克，704.8 毫莫耳）及 (1,1'- 雙（二苯基膦）二茂鐵）二氯鈀 (II)（(1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium (II)）（25.8 克，35.4 毫莫耳）、碘化亞銅（4.04 克，21.2 毫莫耳）、三乙胺（295.6 毫升，2120 毫莫耳）以及四氫呋喃（1700 毫升）置於 3 升圓底燒瓶中。接著，以逐滴方式向其中添加三甲基矽烷基乙炔（107.6 毫升，776.6 毫莫耳），且將混合物在室溫下攪拌 3 小時。過濾反應物，且自其中

105-8-26

移除溶劑。經由管柱層析純化自其中獲得的化合物以獲得中間物 I-1 (166.0 克, 93%)。

第二步：中間物 I-2 的合成

【0120】將中間物 I-1 (166 克, 655.6 毫莫耳) 置於反應器中且溶解於甲醇 (1000 毫升) 中, 並以逐滴方式向其中緩慢添加碳酸鉀 (90.6 克, 655.6 毫莫耳)。攪拌混合物約 30 分鐘且過濾。在移除全部溶劑之後, 將反應物溶解於乙酸乙酯中且用蒸餾水洗滌兩次。接著, 藉由再次移除溶劑獲得中間物 I-2 (116 克, 98%)。

第三步：中間物 I-3 的合成

【0121】將中間物 I-2 (113.0 克, 624.2 毫莫耳) 及四苯基環戊二酮 (120.0 克, 312.1 毫莫耳) 置於且溶解於 700 毫升二甲苯中, 且隨後加熱並回流 3 小時。將反應物傾入甲醇 (2000 毫升) 中以完成反應。接著, 自其中過濾固體以獲得中間物 I-3 (124.1 克, 74%)。

第四步：中間物 I-4 的合成

【0122】在氮氣氛圍下, 將中間物 I-3 (52.0 克, 96.75 毫莫耳) 溶解於二甲基甲醯胺 (dimethyl formamide, DMF, 350 毫升) 中, 向其中添加雙(頻哪醇根基)二硼 (bis(pinacolato)diboron, 29.5 克, 116.1 毫莫耳)、(1,1'-雙(二苯基膦)二茂鐵)二氯鉑(II) ((1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)) (4.74 克, 5.8 毫莫耳) 以及乙酸鉀 (28.5 克, 290.2 毫莫耳), 且將混合物加熱並在 150°C 下回流 24 小時。當反應完成時, 添加水至反應溶液, 且過濾所獲得的混合物並在真空烘箱中乾燥。分離所獲得的殘餘物且經由

105-8-26

管柱層析純化以獲得中間物 I-4 (35 克, 62%)。

第五步：化合物 1 的合成

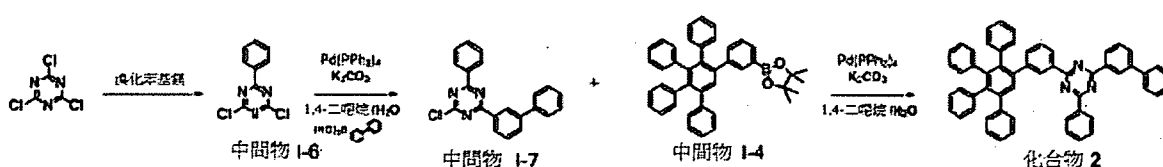
【0123】將中間物 I-4 (5.0 克, 8.6 毫莫耳)、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪 (2.8 克, 10.3 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.0 克, 21.4 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鉀(0) (tetrakis(triphenylphosphine) palladium (0)) (0.3 克, 0.3 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至 150 毫升甲醇中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶, 從而獲得化合物 1 (3.78 克, 產率: 64%)。

C₅₁H₃₅N₃ 計算值: C, 88.79; H, 5.11; N, 6.09; 實驗值: C, 88.78;

H, 5.10; N, 6.10

合成例 2：化合物 2 的合成

[反應流程 2]



第一步：中間物 I-6 的合成

【0124】將氰尿醯氯 (200.0 克, 1.085 毫莫耳) 及無水 THF (1.4 升) 置於 3 升燒瓶中, 且在 0°C 下以逐滴方式緩慢添加溴化苯基鎂 (3 M, 361.4 毫升)。當反應完成時, 將水傾入反應物中, 攪拌混合物 30 分鐘, 分離其中的有機層, 在藉由使用硫酸鎂自其中移除水分之後濃縮, 且用甲醇及己烷純化以獲得呈白色固體的中間物 I-6 (127.4 克, 產率:

52%)。

第二步：中間物 I-7 的合成

【0125】將中間物 I-6 (60.0 克, 265.4 毫莫耳)、3-聯苯硼酸 (50.0 克, 252.0 毫莫耳)、碳酸鉀 (91.6 克, 660.0 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (8.0 克, 9.2 毫莫耳) 置於 2 升圓底燒瓶中的 1,4-二噁烷 (880 毫升) 及水 (440 毫升) 中, 且將混合物加熱並在氮氣流下回流 16 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (3000 升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得中間物 I-7 (63.6 克, 產率: 70%)。

第三步：化合物 2 的合成

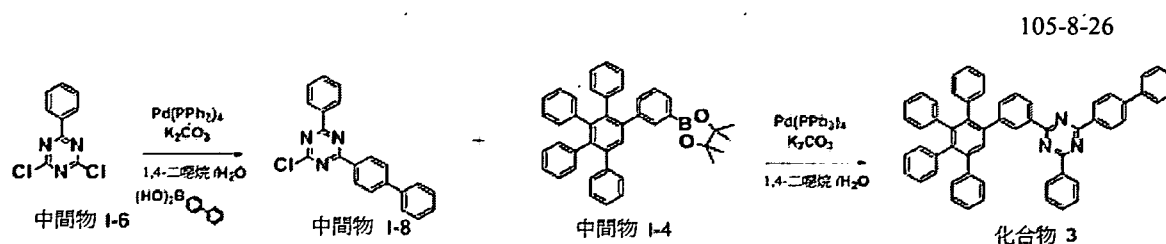
【0126】將中間物 I-7 (3.0 克, 8.7 毫莫耳)、中間物 I-4 (6.1 克, 10.5 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.0 克, 21.8 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.3 克, 0.3 毫莫耳) 置於 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (150 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後藉由使用甲醇再結晶以獲得化合物 2 (4.13 克, 62% 的產率)。

C₅₇H₃₉N₃ 計算值: C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; 實驗值: C, 89.38;

H, 5.13; N, 5.49

合成例 3：化合物 3 的合成

[反應流程 3]



第一步：中間物 I-8 的合成

【0127】將中間物 I-6 (60.0 克, 265.4 毫莫耳)、4-聯苯硼酸 (50.0 克, 252.0 毫莫耳)、碳酸鉀 (91.6 克, 660.0 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (8.0 克, 9.2 毫莫耳) 置於 2 升圓底燒瓶中的 1,4-二噁烷 (880 毫升) 及水 (440 毫升) 中, 且將混合物加熱並在氮氣流下回流 16 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (3000 升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於單氯苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得中間物 I-8 (60.2 克, 產率: 66%)。

第二步：化合物 3 的合成

【0128】將中間物 I-8 (3.0 克, 8.7 毫莫耳)、中間物 I-4 (6.1 克, 10.5 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.0 克, 21.8 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.3 克, 0.3 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (150 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於單氯苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 3 (4.39 克, 66% 的產率)。

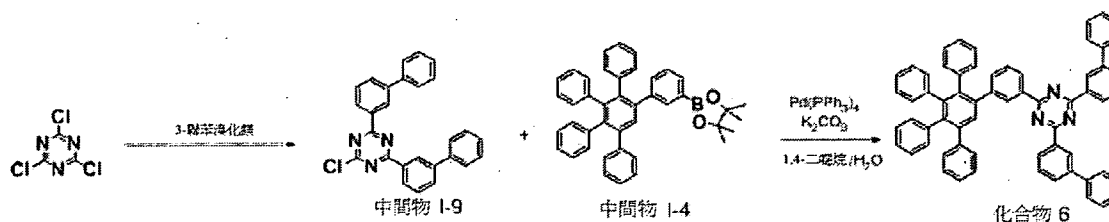
C₅₇H₃₉N₃ 計算值: C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; 實驗值: C, 89.37;

H, 5.13; N, 5.49

合成例 4：化合物 6 的合成

105-8-26

[反應流程 4]



第一步：中間物 I-9 的合成

【0129】將氰尿酸氯（100.0 克，542.3 毫莫耳）及無水 THF（700 毫升）置於 2 升燒瓶中，且在 0°C 下以逐滴方式向其中緩慢添加 3-聯苯溴化鎂（3 M，361.4 毫升）。當反應完成時，將水傾入反應溶液中，攪拌混合物 30 分鐘，分離其中的有機層，在用硫酸鎂移除水分之後濃縮，且用甲醇及己烷純化以獲得呈白色固體的中間物 I-9（122.9 克，產率：55%）。

第二步：化合物 6 的合成

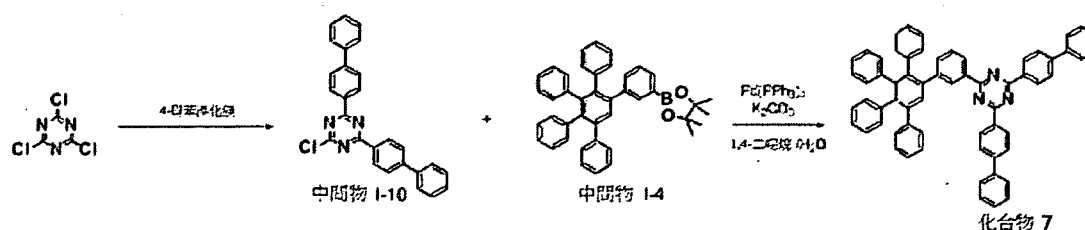
【0130】將中間物 I-9（3.0 克，7.1 毫莫耳）、中間物 I-4（5.0 克，8.6 毫莫耳）、碳酸鉀（2.5 克，17.9 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鈀(0)（0.3 克，0.2 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（20 毫升）及水（10 毫升）中，且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（100 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 6（4.07 克，產率：68%）。

$\text{C}_{63}\text{H}_{43}\text{N}_3$ 計算值：C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99; 實驗值：C, 89.86;

H, 5.15; N, 4.98

合成例 5：化合物 7 的合成

[反應流程 5]



第一步：中間物 I-10 的合成

【0131】將氰尿醯氯（100.0 克，542.3 毫莫耳）及無水 THF（700 毫升）置於 2 升燒瓶中，且在 0°C 下以逐滴方式向其中緩慢添加 4-聯苯溴化鎂（3 M，361.4 毫升）。當反應完成時，將水傾入反應溶液中，攪拌混合物 30 分鐘，且分離其中的有機層，在藉由使用硫酸鎂移除水分之後濃縮，且用甲醇及己烷純化以獲得呈白色固體的中間物 I-10（127.4 克，產率：57%）。

第二步：化合物 7 的合成

【0132】將中間物 I-10（3.0 克，7.1 毫莫耳）、中間物 I-4（5.0 克，8.6 毫莫耳）、碳酸鉀（2.5 克，17.9 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鈀(0)（0.3 克，0.2 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（20 毫升）及水（10 毫升）中，且將混合物在氮氣氛圍下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（100 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於二氯苯中，在移除適量有機溶劑之後經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後用甲醇再結晶以獲得化合物 7（4.19 克，產率：70%）。

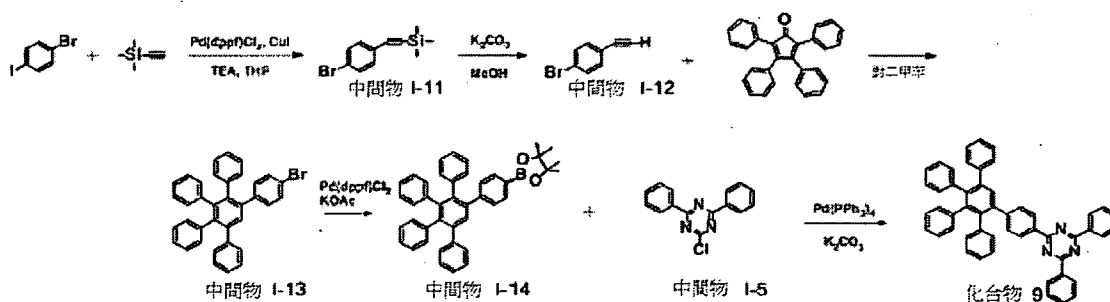
$\text{C}_{63}\text{H}_{43}\text{N}_3$ 計算值：C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99; 實驗值：C, 89.85;

H, 5.16; N, 4.99

合成例 6：化合物 9 的合成

105-8-26

[反應流程 6]



第一步：中間物 I-11 的合成

【0133】在氮氣氛圍下，將 1-溴-4-碘苯（200.0 克，704.8 毫莫耳）、(1,1'-雙(二苯基膦)二茂鐵)二氯鈾(II)（25.8 克，35.4 毫莫耳）、碘化亞銅（4.04 克，21.2 毫莫耳）、三乙胺（295.6 毫升，2120 毫莫耳）以及四氫呋喃（1700 毫升）置於 3 升圓底燒瓶中。接著，以逐滴方式向其中添加三甲基矽烷基乙炔（107.6 毫升，776.6 毫莫耳），且將混合物在室溫下攪拌 3 小時。過濾反應物，且移除其中的溶劑。經由管柱層析純化所得物以獲得中間物 I-11（155.3 克，產率：87%）。

第二步：中間物 I-12 的合成

【0134】將中間物 I-11（150 克，592.4 毫莫耳）添加至甲醇（1000 毫升）中且溶解於其中，並在反應器中以逐滴方式向其中緩慢添加碳酸鉀（81.6 克，592.4 毫莫耳）。攪拌混合物約 30 分鐘且隨後過濾。在自其中移除全部溶劑之後，將反應物溶解於乙酸乙酯中且溶液用蒸餾水洗滌兩次。接著，移除溶劑以獲得中間物 I-12（103 克，產率：96%）。

第三步：中間物 I-13 的合成

【0135】將中間物 I-12（100.0 克，552.5 毫莫耳）及四苯基環戊二酮（106.2 克，176.2 毫莫耳）放置且溶解於二甲苯（700 毫升）中，且

105-8-26

將溶液加熱並回流 3 小時。將反應物傾入甲醇（2000 毫升）中以完成反應。接著，過濾其中的固體以獲得中間物 I-13（116.0 克，產率：78%）。

第四步：中間物 I-14 的合成

【0136】在氮氣氛圍下，將中間物 I-13（50.0 克，93.02 毫莫耳）溶解於二甲基甲醯胺（DMF，350 毫升）中，向其中添加雙(頻哪醇根基)二硼（28.4 克，111.6 毫莫耳）、(1,1'-雙(二苯基膦)二茂鐵)二氯鈾(II)（4.6 克，5.6 毫莫耳）以及乙酸鉀（27.4 克，279.1 毫莫耳），且將混合物加熱並在 150℃ 下回流 24 小時。當反應完成時，添加水至反應溶液，且過濾混合物並隨後在真空烘箱中乾燥。分離所獲得的殘餘物且經由管柱層析純化以獲得中間物 I-14（37 克，產率：68%）。

第五步：化合物 9 的合成

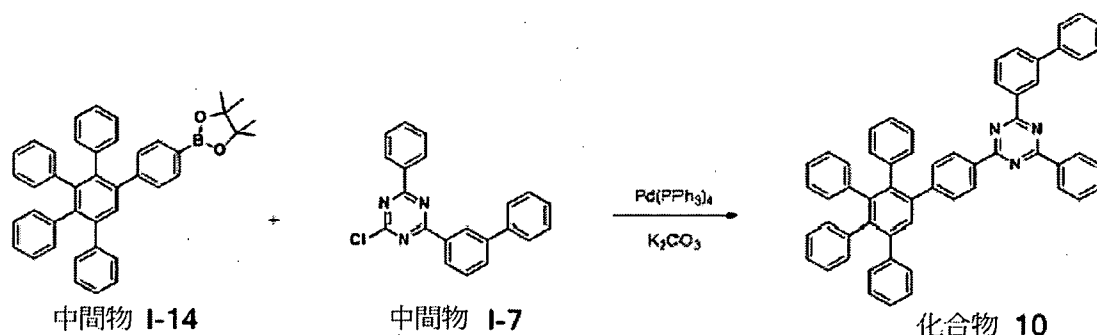
【0137】將中間物 I-14（5.0 克，8.6 毫莫耳）、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（2.8 克，10.3 毫莫耳）、碳酸鉀（3.0 克，21.4 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鈾(0)（0.3 克，0.3 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（30 毫升）及水（15 毫升）中，且將混合物在氮氣流下在 60℃ 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（150 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 9（3.89 克，產率：66%）。

C₅₁H₃₅N₃ 計算值：C, 88.79; H, 5.11; N, 6.09; 實驗值：C, 88.79;

H, 5.11; N, 6.10

合成例 7：化合物 10 的合成

[反應流程 7]



第一步：化合物 10 的合成

【0138】將 2-氯-4-(聯苯-3-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪 (3.0 克, 8.7 毫莫耳)、中間物 I-14 (6.1 克, 10.5 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.0 克, 21.8 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.3 克, 0.3 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60℃ 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (150 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 10 (4.59 克, 產率: 69%)。

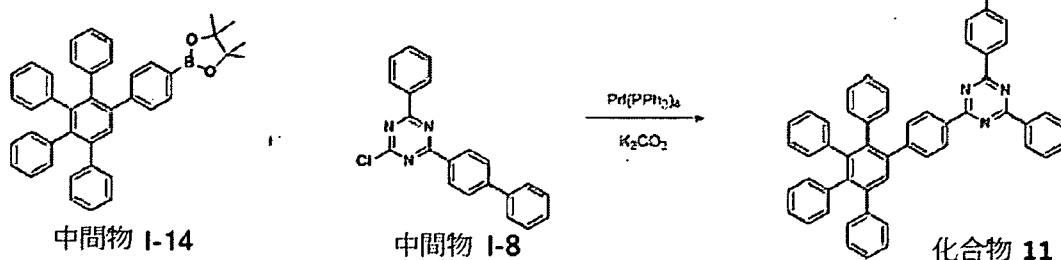
C₅₇H₃₉N₃ 計算值: C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; 實驗值: C, 89.38;

H, 5.13; N, 5.48

合成例 8：化合物 11 的合成

[反應流程 8]

105-8-26



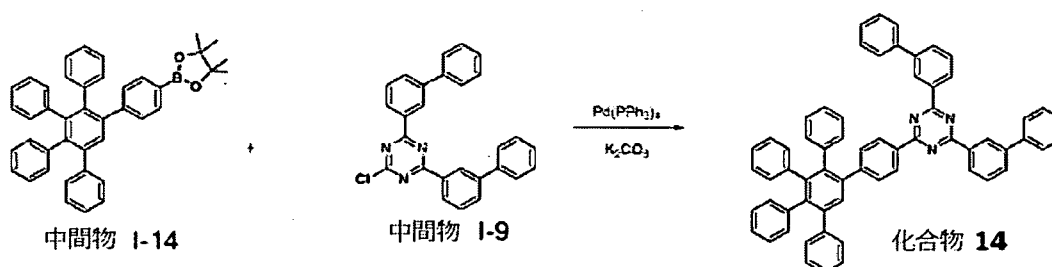
【0139】將 2-氯-4-(聯苯-4-基)-6-苯基-1,3,5-三嗪 (3.0 克, 8.7 毫莫耳)、中間物 I-14 (6.1 克, 10.5 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.0 克, 21.8 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鉀(0) (0.3 克, 0.3 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將此獲得的混合物添加至甲醇 (150 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於單氯苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 11 (4.06 克, 產率: 61%)。

C₅₇H₃₉N₃ 計算值: C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; 實驗值: C, 89.38;

H, 5.12; N, 5.48

合成例 9: 化合物 14 的合成

[反應流程 9]



【0140】將中間物 I-9 (3.0 克, 7.1 毫莫耳)、中間物 I-14 (5.0 克, 8.6 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.5 克, 17.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鉀(0)

105-8-26

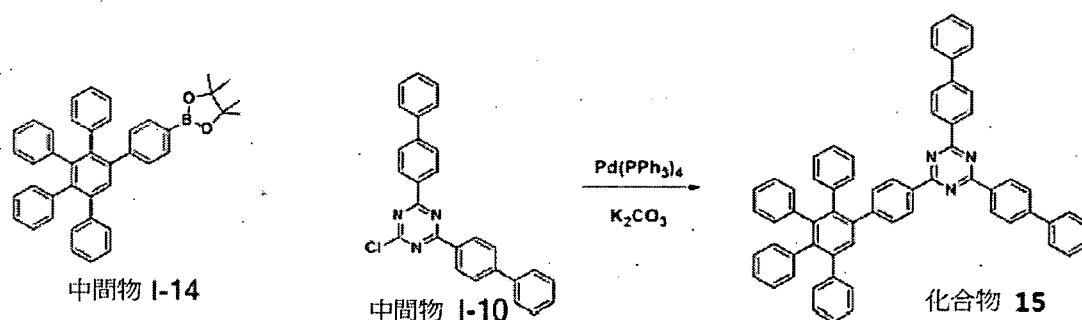
(0.3 克, 0.2 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷(20 毫升) 及水(10 毫升) 中, 且將混合物在氮氣氛圍下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇(100 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 14 (4.19 克, 產率: 70%)。

C₆₃H₄₃N₃ 計算值: C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99; 實驗值: C, 89.84;

H, 5.15; N, 4.99

合成例 10: 化合物 15 的合成

[反應流程 10]



【0141】將中間物 I-10 (3.0 克, 7.1 毫莫耳)、中間物 I-14 (5.0 克, 8.6 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.5 克, 17.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鉀(0) (0.3 克, 0.2 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷(20 毫升) 及水(10 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇(100 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於二氯苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 15 (4.13 克, 產率: 69%)。

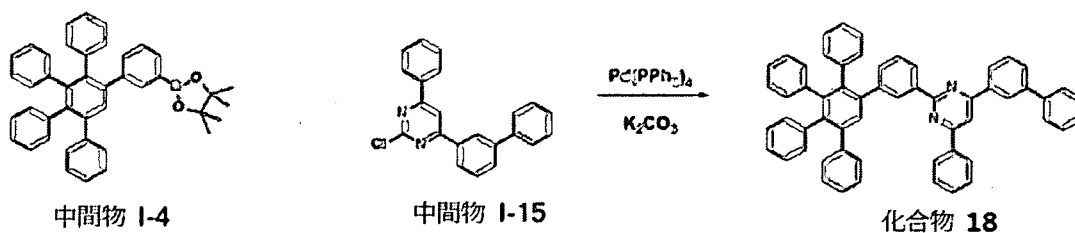
C₆₃H₄₃N₃ 計算值: C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99; 實驗值: C, 89.86;

H, 5.16; N, 4.99

105-8-26

合成例 11：化合物 18 的合成

[反應流程 11]



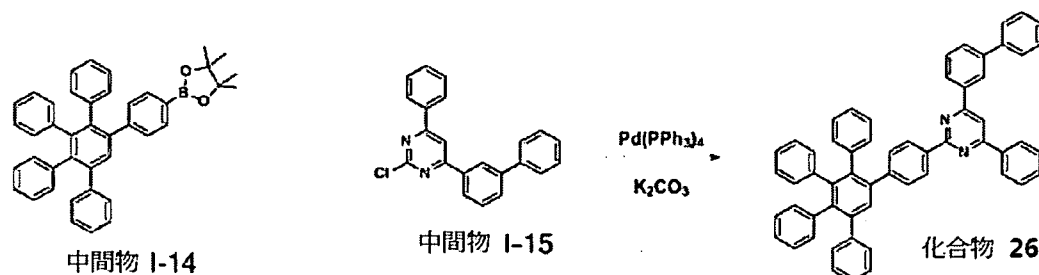
【0142】將中間物 I-4 (5.0 克, 8.6 毫莫耳)、中間物 I-15 (3.5 克, 10.3 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.0 克, 21.4 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.3 克, 0.3 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (100 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 18 (4.39 克, 產率: 67%)。

C₅₈H₄₀N₂ 計算值: C, 91.07; H, 5.27; N, 3.66; 實驗值: C, 91.08;

H, 5.26; N, 3.65

合成例 12：化合物 26 的合成

[反應流程 12]



【0143】將中間物 I-14 (5.0 克, 8.6 毫莫耳)、中間物 I-15 (3.5 克, 10.3 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.0 克, 21.4 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0)

105-8-26

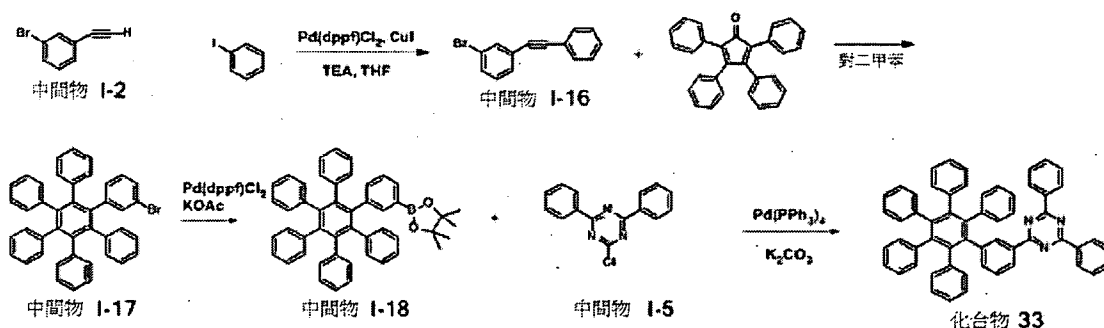
(0.3 克, 0.3 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (100 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 26 (4.19 克, 產率: 64%)。

C₅₈H₄₀N₂ 計算值: C, 91.07; H, 5.27; N, 3.66; 實驗值: C, 91.07;

H, 5.26; N, 3.67

合成例 13: 化合物 33 的合成

[反應流程 13]



第一步: 中間物 I-16 的合成

【0144】中間物 I-16 (100 克, 產率: 79%) 是根據與中間物 I-1 的合成方法相同的方法, 藉由使用中間物 I-2 (100 克, 549.0 毫莫耳) 及碘苯 (120 克, 488.18 毫莫耳) 在氮氣氛圍下獲得。

第二步: 中間物 I-17 的合成

【0145】中間物 I-17 (186 克, 產率: 74%) 是根據與中間物 I-3 的合成方法相同的方法, 藉由使用中間物 I-16 (93.0 克, 514.98 毫莫耳) 及四苯基環戊二酮 (180 克, 468.18 毫莫耳) 在氮氣氛圍下獲得。

第三步: 中間物 I-18 的合成

105-8-26

【0146】中間物 I-18 (72 克，產率：75%) 是根據與中間物 I-4 的合成方法相同的方法，藉由使用中間物 I-17 (90.0 克，146.71 毫莫耳) 在氮氣氛圍下獲得。

第四步：化合物 33 的合成

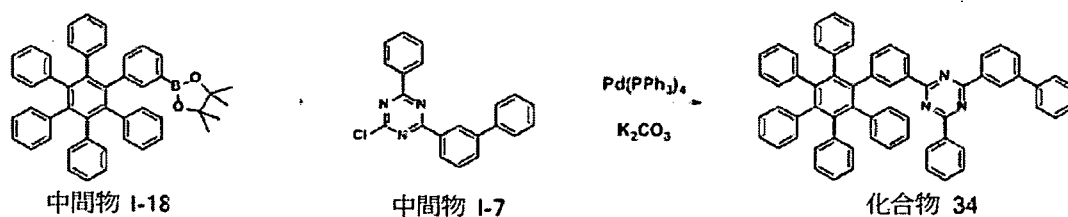
【0147】將中間物 I-18 5.0 克 (7.6 毫莫耳)、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪 (2.4 克，9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克，18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.26 克，0.23 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中，且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (100 毫升) 中，將其中結晶的固體溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 33 (4.18 克，產率：72%)。

C₅₇H₃₉N₃ 計算值：C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49，實驗值：C, 89.37;

H, 5.13; N, 5.48

合成例 14：化合物 34 的合成

[反應流程 14]



【0148】將中間物 I-18 (5.0 克，7.6 毫莫耳)、中間物 I-7 (3.1 克，9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克，18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.26 克，0.23 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中，且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小

105-8-26

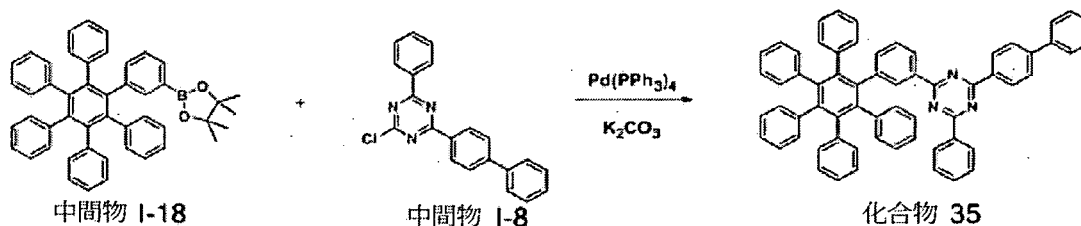
時。將所獲得的混合物添加至甲醇（100 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 34（3.83 克，產率：60%）。

C₆₃H₄₃N₃ 計算值：C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99，實驗值：C, 89.85;

H, 5.15; N, 4.99

合成例 15：化合物 35 的合成

[反應流程 15]



【0149】將中間物 I-18（5.0 克，7.6 毫莫耳）、中間物 I-8（3.1 克，9.1 毫莫耳）、碳酸鉀（2.6 克，18.9 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鈀(0)（0.26 克，0.23 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（30 毫升）及水（15 毫升）中，且將混合物在氮氣流下在 60℃ 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（100 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於單氯苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 35（4.01 克，產率：63%）。

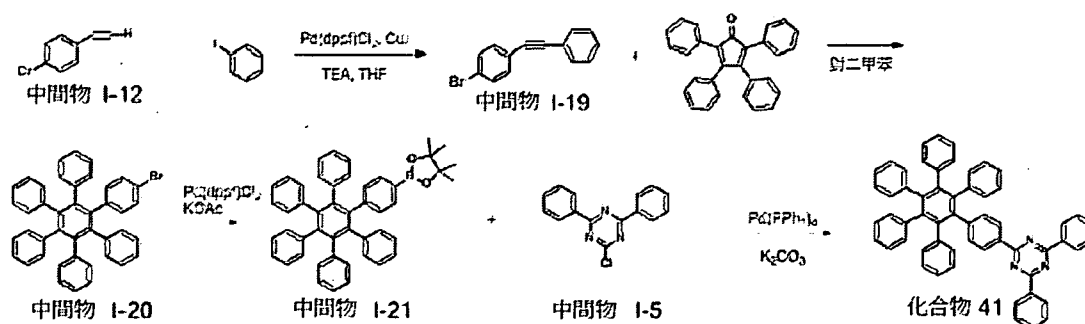
C₆₃H₄₃N₃ 計算值：C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99，實驗值：C, 89.86;

H, 5.15; N, 4.99

合成例 16：化合物 41 的合成

[反應流程 16]

105-8-26



第一步：中間物 I-19 的合成

【0150】中間物 I-19 (102 克，產率：80%) 是根據與中間物 I-1 的合成方法相同的方法，藉由使用中間物 I-12 (100 克，549.0 毫莫耳) 及碘苯 (120 克，488.18 毫莫耳) 在氮氣氛圍下獲得。

第二步：中間物 I-20 的合成

【0151】中間物 I-20 (196 克，產率：78%) 是根據與中間物 I-3 的合成方法相同的方法，藉由使用中間物 I-19 (93.0 克，514.98 毫莫耳) 及四苯基環戊二酮 (180 克，468.18 毫莫耳) 在氮氣氛圍下獲得。

第三步：中間物 I-21 的合成

【0152】中間物 I-21 (78 克，產率：81%) 是根據與中間物 I-4 的合成方法相同的方法，藉由使用中間物 I-20 (90.0 克，146.71 毫莫耳) 在氮氣氛圍下獲得。

第四步：化合物 41 的合成

【0153】將中間物 I-21 (5.0 克，7.6 毫莫耳)、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪 (2.4 克，9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克，18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.26 克，0.23 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中，且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (100 毫升) 中，且過

105-8-26

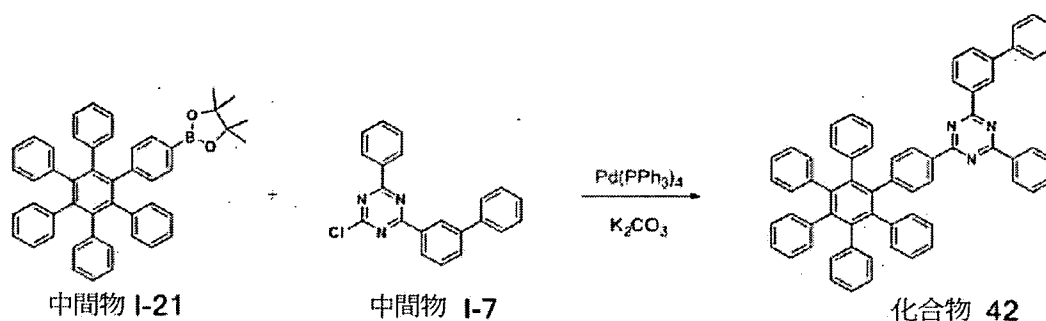
濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 41(3.88 克，產率：67%)。

C₅₇H₃₉N₃ 計算值：C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49，實驗值：C, 89.38;

H, 5.13; N, 5.49

合成例 17：化合物 42 的合成

[反應流程 17]



【0154】將中間物 I-21 (5.0 克，7.6 毫莫耳)、中間物 I-7 (3.1 克，9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克，18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鉀(0) (0.26 克，0.23 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中，且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (100 毫升) 中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 42 (4.08 克，產率：64%)。

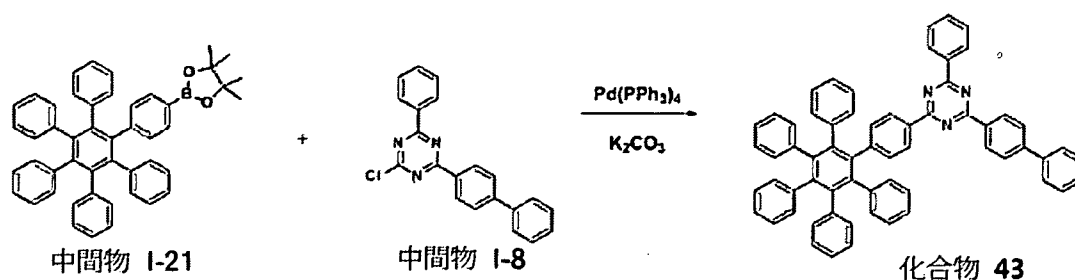
C₆₃H₄₃N₃ 計算值：C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99，實驗值：C, 89.86;

H, 5.15; N, 4.98

合成例 18：化合物 43 的合成

[反應流程 18]

105-8-26



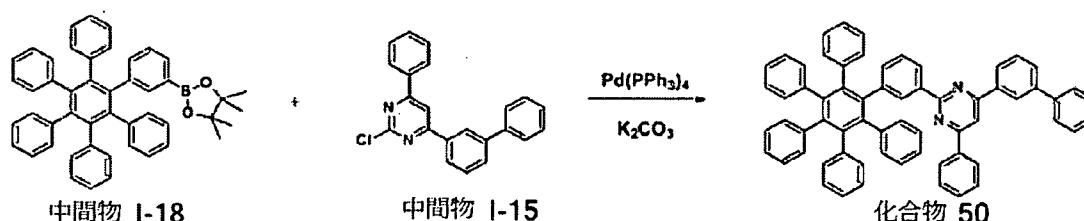
【0155】將中間物 I-21 (5.0 克, 7.6 毫莫耳)、中間物 I-8 (3.1 克, 9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克, 18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鉀(0) (0.26 克, 0.23 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (100 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於單氯苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 43 (4.26 克, 產率: 67%)。

C₆₃H₄₃N₃ 計算值: C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99, 實驗值: C, 89.86;

H, 5.14; N, 4.99

合成例 19: 化合物 50 的合成

[反應流程 19]



【0156】將中間物 I-18 (5.0 克, 7.6 毫莫耳)、中間物 I-15 (3.1 克, 9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克, 18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鉀(0) (0.26 克, 0.23 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小

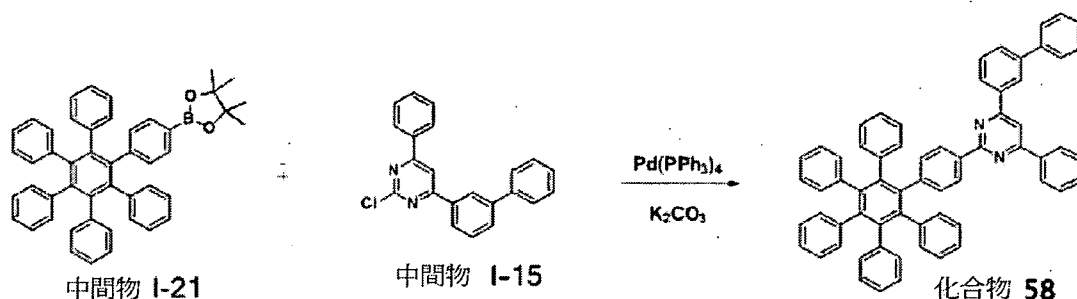
105-8-26

時。將所獲得的混合物添加至甲醇（100 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 50（4.32 克，產率：68%）。

C₆₄H₄₄N₂ 計算值：C, 91.40; H, 5.27; N, 3.33，實驗值：C, 91.40; H, 5.27; N, 3.32

合成例 20：化合物 58 的合成

[反應流程 20]



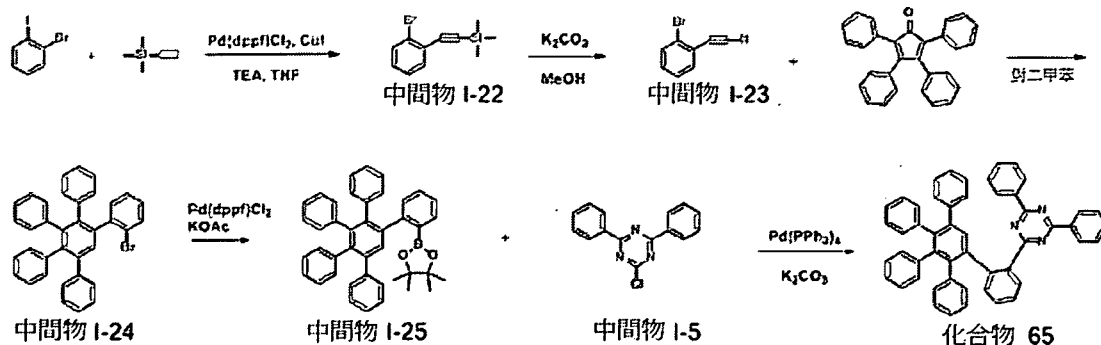
【0157】將中間物 I-21（5.0 克，7.6 毫莫耳）、中間物 I-15（3.1 克，9.1 毫莫耳）、碳酸鉀（2.6 克，18.9 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鉀(0)（0.26 克，0.23 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（30 毫升）及水（15 毫升）中，且將混合物在氮氣流下在 60℃ 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（100 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 58（3.78 克，產率：61%）。

C₆₄H₄₄N₂ 計算值：C, 91.40; H, 5.27; N, 3.33，實驗值：C, 91.39; H, 5.27; N, 3.32

合成例 21：化合物 65 的合成

[反應流程 21]

105-8-26



第一步：中間物 I-25 的合成

【0158】除使用 1-溴-2-碘苯代替合成例 1 的[反應流程 1]中的 1-溴-3-碘苯作為起始材料以外，根據與中間物 I-4 的合成方法相同的方法獲得中間物 I-25（30.2 克，產率：65%）。

第二步：化合物 65 的合成

【0159】將中間物 I-25（5.0 克，8.6 毫莫耳）、2-氯-4,6-二苯基-1,3,5-三嗪（2.8 克，10.3 毫莫耳）、碳酸鉀（3.0 克，21.4 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鉀(0)（0.3 克，0.3 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（30 毫升）及水（15 毫升）中，且將混合物在氮氣流下在 60℃ 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（150 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 66（4.06 克，產率：68%）。

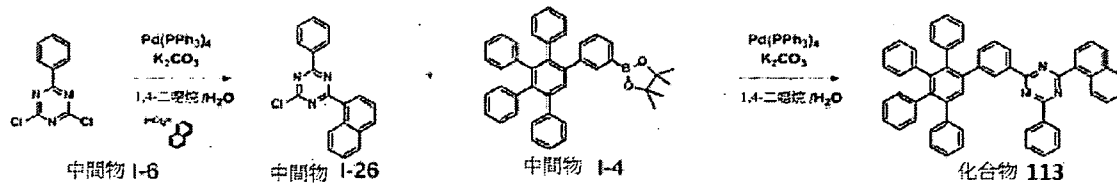
C₅₁H₃₅N₃ 計算值：C, 88.79; H, 5.11; N, 6.09; 實驗值：C, 88.79;

H, 5.11; N, 6.10

合成例 22：化合物 113 的合成

[反應流程 22]

105-8-26



第一步：中間物 I-26 的合成

【0160】除使用萘基硼酸代替 3-聯苯硼酸以外，根據與合成例 2 的中間物 I-7 相同的方法獲得中間物 I-26（15.2 克，產率：45%）。

第二步：化合物 113 的合成

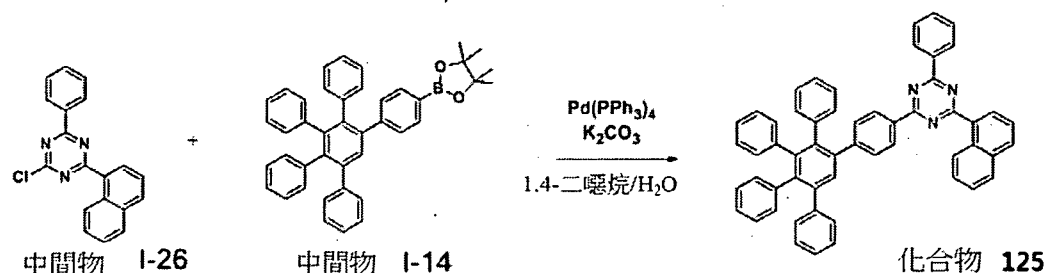
【0161】將中間物 I-26（3.0 克，9.4 毫莫耳）、中間物 I-4（6.6 克，11.3 毫莫耳）、碳酸鉀（3.3 克，23.6 毫莫耳）以及四(三苯基膦)鈀(0)（0.3 克，0.3 毫莫耳）添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷（30 毫升）及水（15 毫升）中，且將混合物在氮氣流下在 60℃ 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇（150 毫升）中，且過濾其中結晶的固體，溶解於甲苯中，經由矽膠/矽藻土過濾，且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 113（4.51 克，產率：65%）。

C55H37N3 計算值：C, 89.28; H, 5.04; N, 5.68; 實驗值：C, 89.28;

H, 5.03; N, 5.68

合成例 23：化合物 125 的合成

[反應流程 23]



105-8-26

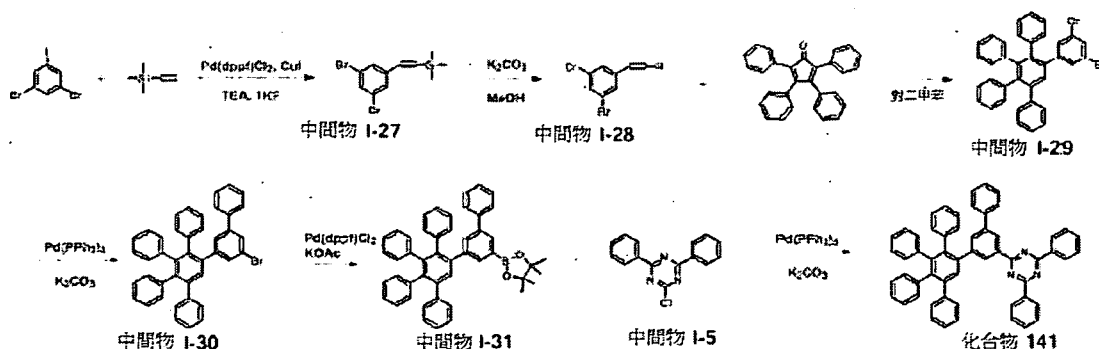
【0162】將中間物 I-26 (3.0 克, 9.4 毫莫耳)、中間物 I-14 (6.6 克, 11.3 毫莫耳)、碳酸鉀 (3.3 克, 23.6 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.3 克, 0.3 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷 (30 毫升) 及水 (15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60℃ 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇 (150 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 125 (4.67 克, 產率: 66%)。

C₅₅H₃₇N₃ 計算值: C, 89.28; H, 5.04; N, 5.68; 實驗值: C, 89.29;

H, 5.03; N, 5.67

合成例 24: 化合物 141 的合成

[反應流程 24]



第一步: 中間物 I-31 的合成

【0163】除使用 1,3-二溴-5-碘苯代替 1-溴-3-碘苯以外, 根據與中間物 I-4 的合成方法相同的方法獲得中間物 I-31 (48.4 克, 產率: 65%)。

第二步: 化合物 141 的合成

【0164】將中間物 I-31 (5.0 克, 7.6 毫莫耳)、中間物 I-5 (2.4 克, 9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克, 18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0)

105-8-26

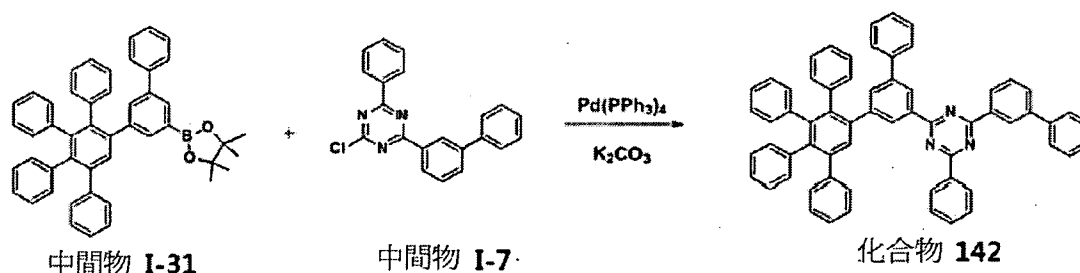
(0.3 克, 0.2 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷(30 毫升) 及水(15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇(150 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 141 (3.99 克, 產率: 69%)。

C₅₇H₃₉N₃ 計算值: C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; 實驗值: C, 89.38;

H, 5.12; N, 5.47

合成例 25: 化合物 142 的合成

[反應流程 25]



【0165】將中間物 I-31 (5.0 克, 7.6 毫莫耳)、中間物 I-7 (3.1 克, 9.1 毫莫耳)、碳酸鉀 (2.6 克, 18.9 毫莫耳) 以及四(三苯基膦)鈀(0) (0.3 克, 0.2 毫莫耳) 添加至 100 毫升燒瓶中的 1,4-二噁烷(30 毫升) 及水(15 毫升) 中, 且將混合物在氮氣流下在 60°C 下加熱 12 小時。將所獲得的混合物添加至甲醇(150 毫升) 中, 且過濾其中結晶的固體, 溶解於甲苯中, 經由矽膠/矽藻土過濾, 且隨後在移除適量有機溶劑之後用甲醇再結晶以獲得化合物 142 (4.22 克, 產率: 66%)。

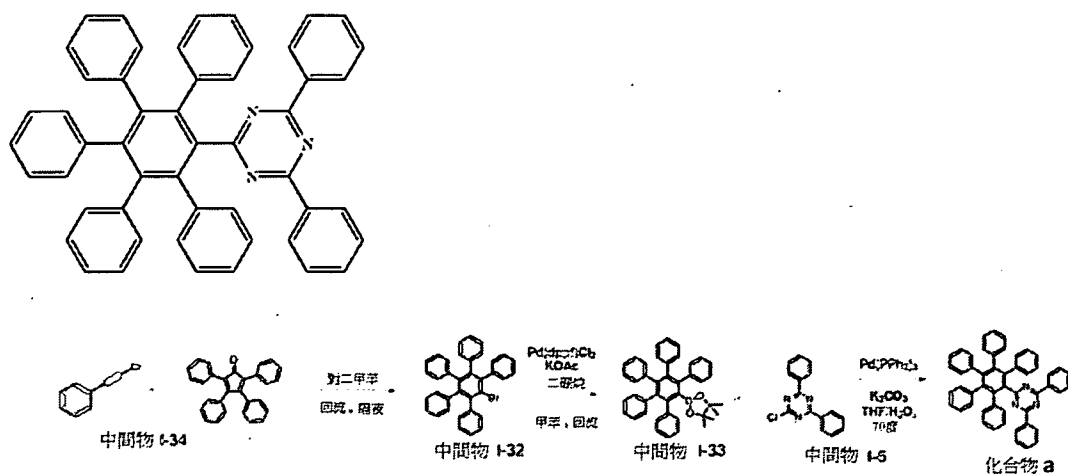
C₆₃H₄₃N₃ 計算值: C, 89.86; H, 5.15; N, 4.99; 實驗值: C, 89.86;

H, 5.15; N, 4.99

105-8-26

比較合成例 1

[化合物 a]

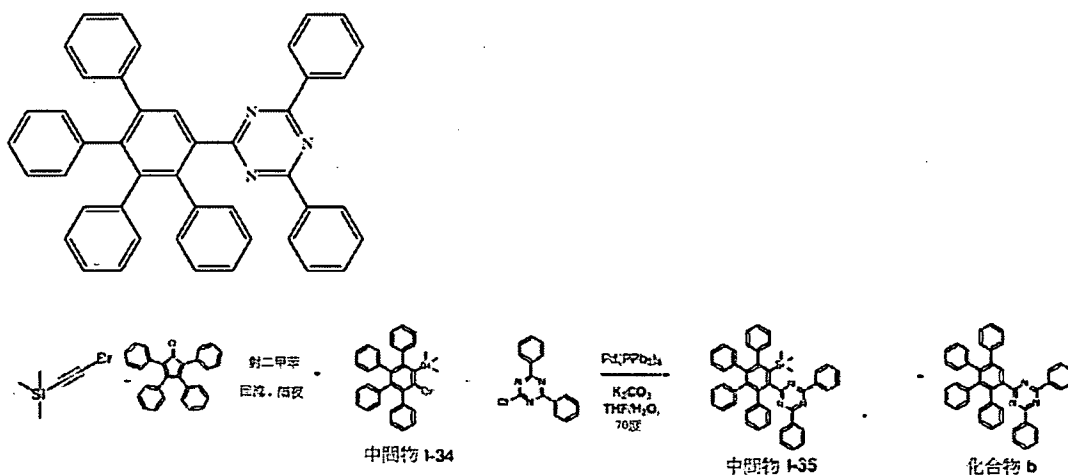


化合物 a 的合成

【0166】除使用中間物 1-34 代替中間物 1-2 以外，根據與合成例 1 的化合物 1 的合成方法相同的方法獲得化合物 a (6.3 克，產率：51%)。

比較合成例 2

[化合物 b]



化合物 b 的合成

【0167】除使用(溴乙炔基)三甲基矽烷代替中間物 1-2 以外，根據與合成例 1 的化合物 1 的合成方法相同的方法獲得化合物 b (3.4 克，產

率：41%）。

（製造有機發光二極體：發射層元件 1）

實例 1

【0168】藉由使用根據合成例 1 的化合物 1 作為主體及 Ir(PPy)₃ 作為摻雜劑來製造有機發光二極體。

【0169】使用 1000 埃厚的 ITO 作為陽極，且使用 1000 埃厚的鋁 (Al) 作為陰極。具體而言，在以下方法中製造有機發光二極體：將具有 15 歐姆/平方公分薄層電阻的 ITO 玻璃基板切割成 50 毫米×50 毫米×0.7 毫米的尺寸，將其分別在丙酮、異丙醇以及純水中超音波清潔 15 分鐘且將其 UV 臭氧清潔 30 分鐘。

【0170】在基板上，藉由在 650×10^{-7} 帕的真空度下以 0.1 奈米/秒至 0.3 奈米/秒的沈積速率沈積 N4,N4'-二(萘-1-基)-N4,N4'-二苯基聯苯-4,4'-二胺 (N4,N4'-di(naphthalen-1-yl)-N4,N4'-diphenylbiphenyl-4,4'-diamine, NPB) (80 奈米) 形成 800 埃厚的電洞傳輸層。隨後，藉由在與上述相同的真空沈積條件下使用根據合成例 1 的化合物 1 形成 300 埃厚的膜作為發射層，且在本文中，同時沈積 Ir(PPy)₃ 作為磷光摻雜劑。在本文中，藉由調節沈積速率以發射層總量的 100 重量%計沈積 10 重量%的量的磷光摻雜劑。

【0171】在發射層上，藉由在與上述相同的真空沈積條件下沈積雙(2-甲基-8-羥基喹啉)-4-(苯基苯酚根基)鋁 (bis(2-methyl-8-quinolinolate)-4-(phenylphenolato)aluminium, BAlq) 形成 50 埃厚的膜作為電洞阻擋層。隨後，藉由在與上述相同的真空沈積條件下沈積

Alq3 形成 200 埃厚的膜作為電子傳輸層。在電子傳輸層上，依序沈積 LiF 及 Al 作為陰極，從而製造有機光電式元件。

【0172】有機光電式元件具有 ITO/NPB (80 奈米)/EML (化合物 1 (90 重量%) + Ir(PPy)₃ (10 重量%)，(30 奈米))/Balq (5 奈米)/Alq3 (20 奈米)/LiF (1 奈米)/Al (100 奈米) 的結構。

實例 2 至實例 15

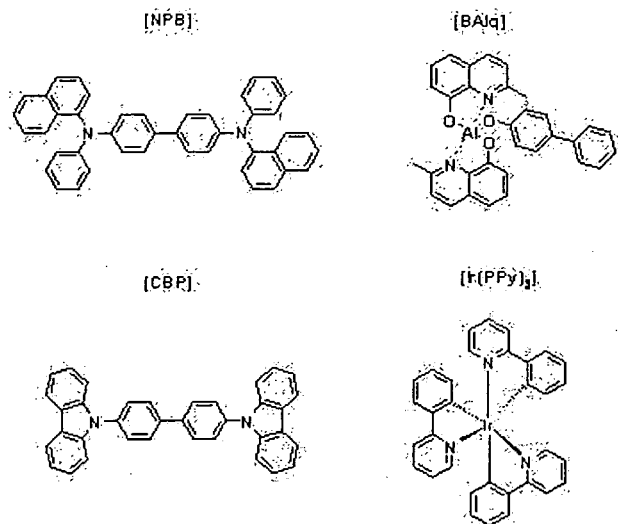
【0173】實例 2 至實例 15 的每一有機發光二極體是根據與實例 1 相同的方法，藉由使用根據合成例 2 至合成例 4、合成例 6、合成例 7、合成例 11 至合成例 14、合成例 16、合成例 17、合成例 21、合成例 22 以及合成例 25 的化合物 2、化合物 3、化合物 6、化合物 9、化合物 10、化合物 18、化合物 26、化合物 33、化合物 34、化合物 41、化合物 42、化合物 65、化合物 113 以及化合物 142 代替根據合成例 1 的化合物 1 來製造。

比較例 1 至比較例 3

【0174】比較例 1 至比較例 3 的每一有機發光二極體是根據與實例 1 相同的方法，藉由使用 CBP、化合物 a 或化合物 b 代替根據合成例 1 的化合物 1 來製造。

【0175】用於製造有機發光二極體的 NPB、Balq、CBP 以及 Ir(PPy)₃ 分別具有以下結構。

105-8-26



評估

【0176】量測根據實例 1 至實例 15 以及比較例 1 至比較例 3 的每一有機發光二極體的電流密度變化、亮度變化以及發光效率。

【0177】具體量測方法如下，且結果顯示於下表 1 中。

(1) 量測視電壓變化而定的電流密度變化

【0178】關於流入單位元件的電流值，使用電流-電壓計（吉時利（Keithley）2400）在電壓自 0 伏特增加至 10 伏特時量測所獲得的有機發光二極體，且所量測的電流值除以面積，從而得到結果。

(2) 量測視電壓變化而定的亮度變化

【0179】藉由使用亮度計（美能達（Minolta）Cs-1000A）在有機發光二極體的電壓自 0 伏特增加至 10 伏特時量測亮度。

(3) 量測發光效率

【0180】藉由使用來自項目（1）及項目（2）的亮度、電流密度及電壓（伏特）計算相同電流密度（10 毫安/平方公分）下的電流效率（坎德拉/安，cd/A）。

(4) 量測壽命

【0181】壽命是藉由在亮度（坎德拉/平方公尺）維持在 5000 坎德拉/平方公尺時，量測當電流效率（坎德拉/安）降低至 90% 時的時間來獲得。

[表 1]

編號	化合物	驅動電壓 (伏特)	顏色 (EL 顏色)	效率 (坎德拉/安)	90%壽命 (小時) (在 5000 坎德拉/平方公尺下)
實例 1	化合物 1	4.01	綠色	39.2	53
實例 2	化合物 2	3.84	綠色	42.3	54
實例 3	化合物 3	3.81	綠色	41.7	48
實例 4	化合物 6	3.78	綠色	41.0	52
實例 5	化合物 9	3.98	綠色	38.9	42
實例 6	化合物 10	3.82	綠色	41.5	43
實例 7	化合物 18	4.13	綠色	36.2	46
實例 8	化合物 26	4.09	綠色	37.5	47
實例 9	化合物 33	4.02	綠色	39.4	54
實例 10	化合物 34	3.83	綠色	42.3	55
實例 11	化合物 41	3.96	綠色	39.0	51
實例 12	化合物 42	3.81	綠色	41.7	53
實例 13	化合物 65	3.71	綠色	40.2	56
實例 14	化合物 113	4.11	綠色	37.1	40
實例 15	化合物 142	3.82	綠色	42.3	48
比較例 1	CBP	4.29	綠色	31.7	25
比較例 2	化合物 a	4.19	綠色	35.6	36
比較例 3	化合物 b	4.14	綠色	36.1	35

【0182】參照表 1，根據實例 1 至實例 15 的有機發光二極體相較於根據比較例 1 至比較例 3 的有機發光二極體，顯示出改良的壽命特徵以及改良的驅動電壓及效率。如上所述，由於藉由堆疊因大體積取代基而相對平坦的雜環部分使得電子易於注入及傳輸，故驅動電壓降低。相較於根據本發明的化合物，根據比較例的化合物不具有連接基團且

因此顯示出填充相對不足的分子並劣化二極體。相反地，具有鄰位鍵的實例 13 的化合物具有扭結分子結構且因此顯示出堆疊具有電子傳輸（electron transporting，ET）特徵取代基的雜環部分，從而驅動電壓最快。

（製造有機發光二極體：發射層元件 2）

實例 16

【0183】用氧化銦錫（ITO）塗佈為 1500 埃厚的薄膜的玻璃基板用蒸餾水進行超音波洗滌。在用蒸餾水洗滌之後，玻璃基板用例如異丙醇、丙酮、甲醇等溶劑進行超音波洗滌且乾燥，隨後移至電漿清潔器，藉由使用氧電漿清潔 10 分鐘，並移至真空沈積器。此獲得的 ITO 透明電極用作陽極，藉由真空沈積化合物 A 而在 ITO 基板上形成 700 埃厚的電洞注入層，且藉由沈積化合物 B 至 50 埃厚及沈積化合物 C 至 1020 埃厚而在注入層上形成電洞傳輸層。在電洞傳輸層上，藉由同時真空沈積根據合成例 2 的化合物 2 及作為第二主體化合物的化合物 B-1 作為主體及真空沈積摻雜量為 10 重量%的三(2-苯基吡啶)銱(III)[Ir(ppy)₃]作為摻雜劑形成 400 埃厚的發射層。在本文中，化合物 1 及化合物 B-1 以 1：1 的比率使用。

【0184】隨後，藉由在發射層上同時真空沈積 1：1 比率的化合物 D 及 Liq 形成 300 埃厚的電子傳輸層且在電子傳輸層上依序真空沈積 Liq（15 埃）及 Al（1200 埃）形成陰極來製造有機發光二極體。

【0185】有機發光二極體具體而言具有以下五個有機薄膜層狀結構。

【0186】ITO/化合物 A（700 埃）/化合物 B（50 埃）/化合物 C（1020

105-8-26

埃/EML [化合物 1 : B-1 : Ir(ppy)₃=45 重量% : 45 重量% : 10 重量%]
(400 埃) /化合物 D : Liq (300 埃) /Liq (15 埃) /Al (1200 埃) 的
結構。

化合物 A : N4,N4'-二苯基-N4,N4'-雙(9-苯基-9H-咔唑-3-基)聯苯
-4,4'-二胺 (N4,N4'-diphenyl-N4,N4'-bis(9-phenyl-9H-carbazol-3-
yl)biphenyl-4,4'-diamine)

化合物 B : 1,4,5,8,9,11-六氮雜三伸苯基-六甲腈 (1,4,5,8,9,11-
hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile , HAT-CN)

化合物 C : N-(聯苯-4-基)-9,9-二甲基-N-(4-(9-苯基-9H-咔唑-3-
基)苯基)-9H-芴-2-胺 (N-(biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-N-(4-(9-
phenyl-9H-carbazol-3-yl)phenyl)-9H-fluoren-2-amine)

化合物 D : 8-(4-(4,6-二(萘-2-基)-1,3,5-三嗪-2-基)苯基)喹啉 (8-
(4-(4,6-di(naphthalen-2-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)quinoline)

實例 17

【0187】除使用重量比為 1 : 1 的化合物 2 及化合物 B-31 以外，根據
與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 18

【0188】除使用重量比為 1 : 1 的化合物 2 及化合物 B-154 以外，根
據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 19

【0189】除使用重量比為 1 : 1 的化合物 2 及化合物 B-156 以外，根
據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 20

【0190】除使用重量比為 1：1 的化合物 2 及化合物 C-1 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 21

【0191】除使用重量比為 1：1 的化合物 10 及化合物 B-31 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 22

【0192】除使用重量比為 1：1 的化合物 34 及化合物 B-31 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 23

【0193】除使用重量比為 1：1 的化合物 42 及化合物 B-31 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 24

【0194】除使用重量比為 1：1 的化合物 65 及化合物 B-31 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

實例 25

【0195】除使用重量比為 1：1 的化合物 142 及化合物 B-31 以外，根據與實例 16 相同的方法製造有機發光二極體。

比較例 4 至比較例 6

【0196】除使用 CBP、化合物 a 或化合物 b 單獨作為主體以外，根據與實例 16 相同的方法製造根據比較例 4 至比較例 6 的每一有機發光二極體。

評估

【0197】量測根據實例 16 至實例 25 以及比較例 4 至比較例 6 的每一有機發光二極體的發光效率及壽命特徵。

【0198】具體量測方法如下，且結果顯示於下表 2 中。

(1) 量測視電壓變化而定的電流密度變化

【0199】關於流入單位元件的電流值，使用電流-電壓計(吉時利 2400)在電壓自 0 伏特增加至 10 伏特時量測所獲得的有機發光二極體，且所量測的電流值除以面積，從而得到結果。

(2) 量測視電壓變化而定的亮度變化

【0200】藉由使用亮度計(美能達 Cs-1000A)在有機發光二極體的電壓自 0 伏特增加至 10 伏特時量測亮度。

(3) 量測發光效率

【0201】藉由使用來自項目(1)及項目(2)的亮度、電流密度及電壓(伏特)計算相同電流密度(10 毫安/平方公分)下的電流效率(坎德拉/安)。

(4) 量測壽命

【0202】壽命是藉由在亮度(坎德拉/平方公尺)維持在 6000 坎德拉/平方公尺時，量測當電流效率(坎德拉/安)降低至 97%時的時間來獲得。

[表 2]

	第一主體	第二主體	第一主體：第二主體	發光效率 (坎德拉/安)	壽命 T 97 (小時)
實例 16	化合物 2	B-1	1 : 1	46.2	65
實例 17	化合物 2	B-31	1 : 1	53.5	71

105-8-26

實例 18	化合物 2	B-154	1 : 1	52.8	68
實例 19	化合物 2	B-156	1 : 1	52.5	67
實例 20	化合物 2	C-1	1 : 1	50.1	62
實例 23	化合物 10	B-31	1 : 1	52.5	70
實例 24	化合物 34	B-31	1 : 1	54.0	72
實例 25	化合物 42	B-31	1 : 1	52.4	69
實例 26	化合物 65	B-31	1 : 1	55.3	60
實例 27	化合物 142	B-31	1 : 1	54.4	69
比較例 4	CBP		-	31.7	25
比較例 5	化合物 a		-	35.6	36
比較例 6	化合物 b		-	36.1	35

【0203】參照表 2，根據實例 16 至實例 25 的有機發光二極體相較於根據比較例 3 至比較例 6 的有機發光二極體，顯示出顯著改良的發光效率及壽命特徵。

(製造有機發光二極體)

實例 26

【0204】用氧化銦錫 (ITO) 塗佈為 1500 埃厚的薄膜的玻璃基板用蒸餾水洗滌。在用蒸餾水洗滌之後，玻璃基板用例如異丙醇、丙酮、甲醇等溶劑進行超音波洗滌且乾燥，移至電漿清潔器，用氧電漿清潔 10 分鐘，並移至真空沈積器。此獲得的 ITO 透明電極用作陽極，藉由真空沈積化合物 A 而在 ITO 基板上形成 700 埃厚的電洞注入層，且藉由沈積化合物 B 至 50 埃厚及沈積化合物 C 至 1020 埃厚而在注入層上形成電洞傳輸層。接著，藉由真空沈積 BH113 及 BD370 (經銷商：SFC 公司 (SFC Inc.)) 作為藍螢光發光主體及摻雜劑濃度為 5 重量%的摻雜劑而在上面形成 200 埃厚的發射層。在發射層上，真空沈積化合物 1 以形成 50 埃厚的電子傳輸輔助層。電子傳輸輔助層可藉由單獨使用由

105-8-26

化學式 I 表示的材料或混合所述材料與化合物 B 及化合物 C 來形成。在電子傳輸輔助層上，藉由以 1：1 的重量比同時真空沈積化合物 D 及 Liq 形成 300 埃厚的電子傳輸層，且在電子傳輸層上，藉由依序真空沈積 Liq 至 15 埃厚及真空沈積 Al 至 1200 埃厚形成陰極，從而製造有機發光二極體。有機發光二極體具有 5 個有機薄膜層的結構且具體而言，ITO/化合物 A（700 埃）/化合物 B（50 埃）/化合物 C（1020 埃）/EML[BH113：BD370=95：5(重量：重量)]（200 埃）/化合物 1（50 埃）/化合物 D：Liq（300 埃）=1：1/Liq（15 埃）/Al（1200 埃）。

化合物 A：N₄,N₄'-二苯基-N₄,N₄'-雙(9-苯基-9H-呋啶-3-基)聯苯-4,4'-二胺

化合物 B：1,4,5,8,9,11-六氮雜三伸苯基-六甲腈（HAT-CN）

化合物 C：N-(聯苯-4-基)-9,9-二甲基-N-(4-(9-苯基-9H-呋啶-3-基)苯基)-9H-芴-2-胺

化合物 D：8-(4-(4,6-二(萘-2-基)-1,3,5-三嗪-2-基)苯基)喹啉

實例 27 至實例 40

【0205】除分別使用化合物 2、3、6、9、10、18、26、33、34、41、42、65、113 以及 142 以外，根據與實例 26 相同的方法製造根據實例 27 至實例 40 的每一有機發光二極體。

比較例 7

【0206】除使用化合物 a 以外，根據與實例 26 相同的方法製造有機發光二極體。

比較例 8

【0207】除使用化合物 b 以外，根據與實例 26 相同的方法製造有機發光二極體。

比較例 9

【0208】除不使用電子傳輸輔助層以外，根據與實例 26 相同的方法製造有機發光二極體。

評估

【0209】量測根據實例 26 至實例 40 以及比較例 7 至比較例 9 的每一有機發光二極體的電流密度變化、亮度變化以及發光效率。

【0210】具體量測方法如下，且結果顯示於表 3 中。

(1) 量測視電壓變化而定的電流密度變化

【0211】關於流入單位元件的電流值，使用電流-電壓計(吉時利 2400)在電壓自 0 伏特增加至 10 伏特時量測所獲得的有機發光二極體，且所量測的電流值除以面積，從而得到結果。

(2) 量測視電壓變化而定的亮度變化

【0212】藉由使用亮度計(美能達 Cs-1000A)在有機發光二極體的電壓自 0 伏特增加至 10 伏特時量測亮度。

(3) 量測發光效率

【0213】藉由使用來自項目(1)及項目(2)的亮度、電流密度及電壓(伏特)計算相同電流密度(10 毫安/平方公分)下的電流效率(坎德拉/安)。

(5) 量測壽命

【0214】根據實例 26 至實例 40 以及比較例 7 至比較例 9 的有機發光

二極體的 T97 壽命是在以 750 坎德拉/平方公尺作為初始亮度（坎德拉/平方公尺）發射光且使用博蘭諾克（Polanonix）壽命量測系統量測其亮度視時間而降低之後，作為當其亮度相對於初始亮度（坎德拉/平方公尺）降低至 97%時的時間來量測。

[表 3]

元件	電子傳輸輔助層 （重量比）	發光效率 （坎德拉/安）	色座標 (x, y)	T97（小時） 在 750 尼特下
實例 26	化合物 1	8.5	(0.132, 0.149)	66
實例 27	化合物 2	8.8	(0.133, 0.148)	69
實例 28	化合物 3	8.5	(0.132, 0.149)	66
實例 29	化合物 6	8.5	(0.132, 0.150)	65
實例 30	化合物 9	8.4	(0.132, 0.149)	65
實例 31	化合物 10	8.6	(0.133, 0.148)	67
實例 32	化合物 18	7.9	(0.132, 0.149)	62
實例 33	化合物 26	7.7	(0.132, 0.159)	61
實例 34	化合物 33	8.3	(0.133, 0.149)	65
實例 35	化合物 34	8.5	(0.133, 0.148)	68
實例 36	化合物 41	8.2	(0.132, 0.149)	64
實例 37	化合物 42	8.5	(0.133, 0.149)	66
實例 38	化合物 65	8.7	(0.132, 0.149)	62
實例 39	化合物 113	8.1	(0.133, 0.148)	63
實例 40	化合物 142	8.8	(0.132, 0.149)	69
比較例 7	化合物 a	7.5	(0.132, 0.149)	58
比較例 8	化合物 b	7.5	(0.132, 0.149)	57
比較例 9	不使用	5.8	(0.135, 0.147)	25

【0215】參照表 3，根據實例 26 至實例 40 的有機發光二極體相較於根據比較例 7 至比較例 9 的有機發光二極體，顯示出同時改良的發光效率及壽命特徵。

【0216】雖然本發明已結合目前視為實用的示例性實施例加以闡述，但應理解，本發明不限於所揭示的實施例，而是相反地意欲涵蓋包含在隨附申請專利範圍的精神和範圍內的各種修改及等效配置。因此，

應理解上述實施例為示例性的，而不以任何方式限制本發明。

【符號說明】

【0217】

31：電洞傳輸層

33：電洞傳輸輔助層

34：電子傳輸層

35：電子傳輸輔助層

36：電子注入層

37：電洞注入層

100、200、300、400：有機發光二極體

105：有機層

110：陰極

120：陽極

130：發射層

140：電洞輔助層