



(19) 中華民國智慧財產局

(12) 發明說明書公告本

(11) 證書號數：TW I589565 B

(45) 公告日：中華民國 106 (2017) 年 07 月 01 日

(21) 申請案號：104125718

(22) 申請日：中華民國 104 (2015) 年 08 月 07 日

(51) Int. Cl. : C07D251/24 (2006.01)

C07D239/26 (2006.01)

C07D401/14 (2006.01)

C07D403/14 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

(30) 優先權：2014/08/12 南韓

10-2014-0104458

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

南韓

(72) 發明人：李勝載 LEE, SEUNG-JAE (KR)；金炳求 KIM, BYUNG-KU (KR)；金榮權 KIM, YOUNG-KWON (KR)；閔修炫 MIN, SOO-HYUN (KR)；徐宙希 SEO, JOO-HEE (KR)；柳銀善 YU, EUN-SUN (KR)

(74) 代理人：葉璟宗；鄭婷文；詹富閔

(56) 參考文獻：

TW 201240976A1

審查人員：傅俊中

申請專利範圍項數：12 項 圖式數：2 共 61 頁

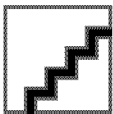
(54) 名稱

化合物、有機光電裝置及顯示裝置

COMPOUND, ORGANIC OPTOELECTRIC DEVICE AND DISPLAY DEVICE

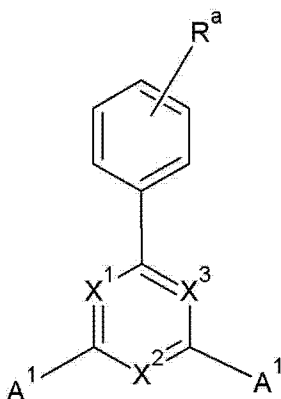
(57) 摘要

本發明揭露一種由以下化學式 1 所表示的化合物、包含其的有機光電裝置以及包含所述有機光電裝置的顯示裝置。[化學式 1]



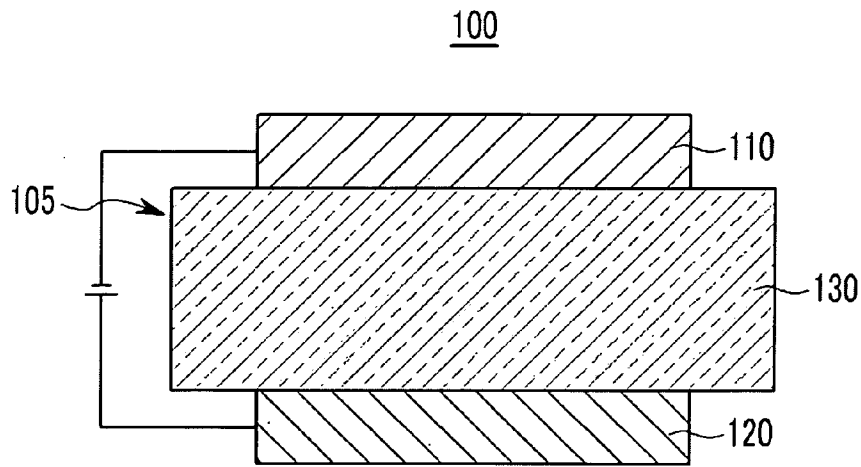
在化學式 1 中，X¹ 至 X³、A¹ 及 R^a 與說明書中所定義者相同。

A compound represented by the following Chemical Formula 1, an organic optoelectric device including the same and a display device including the organic optoelectric device are disclosed. [Chemical Formula 1]



In Chemical Formula 1, X¹toX³, A¹and R^aare the same as 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

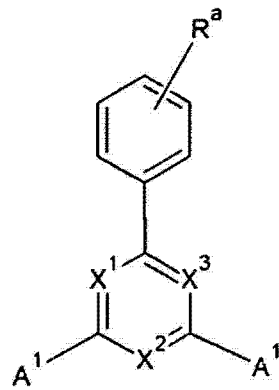
110 . . . 陰極

120 . . . 陽極

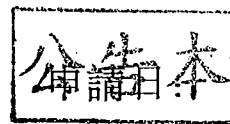
130 . . . 發射層

【圖1】

特徵化學式：



[化學式 1]



104. 8.07

IPC分類:

C07D 251/54 (2006.01)
23P56
401/14
403/14
H01L 51/50

【發明摘要】

【中文發明名稱】

化合物、有機光電裝置及顯示裝置

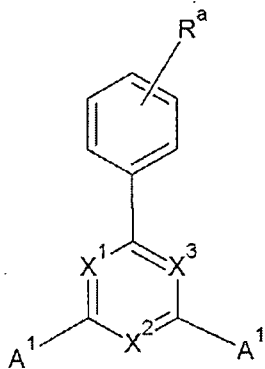
【英文發明名稱】

COMPOUND, ORGANIC OPTOELECTRIC DEVICE AND
DISPLAY DEVICE

【中文】

本發明揭露一種由以下化學式1所表示的化合物、包含其的有機光電裝置以及包含所述有機光電裝置的顯示裝置。

[化學式 1]

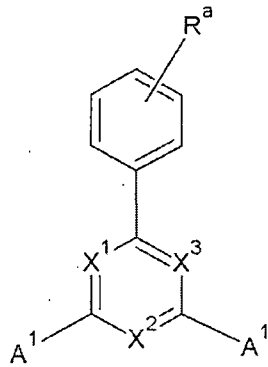


在化學式 1 中， X^1 至 X^3 、 A^1 及 R^a 與說明書中所定義者相同。

【英文】

A compound represented by the following Chemical Formula 1, an organic optoelectric device including the same and a display device including the organic optoelectric device are disclosed.

[Chemical Formula 1]



In Chemical Formula 1, X^1 to X^3 , A^1 and R^a are the same as 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

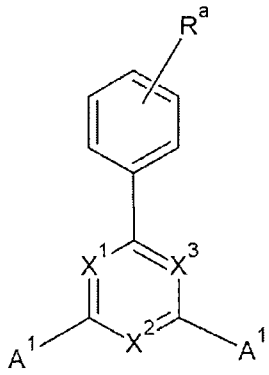
105：有機層

110：陰極

120：陽極

130：發射層

【特徵化學式】



[化學式 1]

【發明說明書】

【中文發明名稱】

化合物、有機光電裝置及顯示裝置

【英文發明名稱】

COMPOUND, ORGANIC OPTOELECTRIC DEVICE AND
DISPLAY DEVICE

【技術領域】

【0001】 本發明揭露了一種化合物、一種有機光電裝置以及一種顯示裝置。

【先前技術】

【0002】 有機光電裝置是將電能轉換成光能的裝置，並且也是將光能轉換成電能的裝置。

【0003】 根據其驅動原理，有機光電裝置可以分類如下。一種是光電裝置，其中激子由光能產生，分離成電子和電洞，並且電子和電洞轉移到不同電極以產生電能；並且另一種是發光裝置，其中將電壓或電流供應到電極而從電能產生光能。

【0004】 有機光電裝置的實例可以是有機光電裝置、有機發光二極體、有機太陽能電池以及有機光導鼓。

【0005】 在這些當中，由於對平板顯示器的需求增加，最近尤其

注意到了有機發光二極體（organic light emitting diode；OLED）。這種有機發光二極體通過將電流施加到有機發光材料而將電能轉換成光。其具有有機層插入於陽極與陰極之間的結構。在本文中，有機層可包含發射層且可選擇性地包含輔助層，且所述輔助層可包含例如從電洞注入層、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選出的至少一者，以增加有機發光二極體的效率及穩定性。

【0006】 有機發光二極體的性能可能受有機層的特徵的影響，並且尤其可能主要受有機層有機材料的特徵的影響。

【0007】 確切地說，需要開發能夠增加電洞和電子遷移率並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以應用於大型平板顯示器。

【發明內容】

【技術問題】

【0008】 一實施例提供一種能夠實現具有高效率 and 長使用壽命的有機光電裝置的化合物。

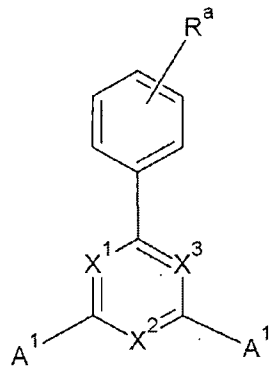
【0009】 另一實施例提供一種包含所述化合物的有機光電裝置。

【0010】 再一實施例提供一種包含所述有機光電裝置的顯示裝置。

【技術解決方案】

【0011】 在本發明之一實施例中，提供由化學式 1 表示之化合物。

[化學式 1]



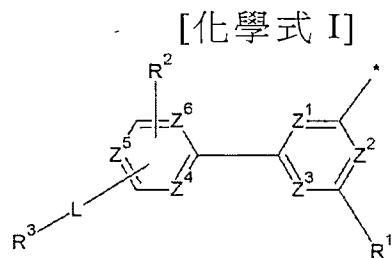
在化學式 1 中，

X^1 至 X^3 獨立地是 N 或 CR^b ，

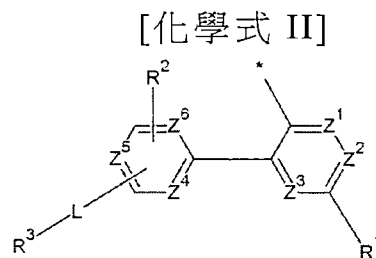
X^1 至 X^3 的至少一者是 N，

R^a 和 R^b 各自獨立地是氫、氬或經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基，以及

A^1 是由化學式 I 或化學式 II 表示，



[化學式 I]



[化學式 II]

其中，在化學式 I 和化學式 II 中，

Z^1 至 Z^6 各自獨立地是 N、C 或 CR^c ，

R^1 、 R^2 和 R^c 各自獨立地是：氫、氬、經取代或未經取代的 C1 至 C30 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C30 環烷基、經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基、經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基、經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳胺基、經取代或未經取代的 C1 至 C30 烷氧基、經取代或未經取代的 C3 至 C40 矽烷基、鹵素、含鹵素基團、氰基、羥基、胺基、硝基、羧基、二茂鐵基或其組

合，

L 是單鍵、C6 至 C30 伸芳基或 C2 至 C30 雜環基，

R³ 是氫、經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或除了咪唑基以外經取代或未經取代的 C2 至 C30 含氮雜環基，

當 L 是單鍵時，R¹ 至 R³ 的至少一者不是氫，以及

*是連接點，

其中「經取代」是指至少一個氫被氘、鹵素、羥基、胺基、C1 至 C30 烷基、C6 至 C30 芳基或 C2 至 C30 雜芳基取代。

【0012】 根據本發明一實施例的化合物可用於有機光電裝置。

【0013】 在本發明的另一實施例中，有機光電裝置包含彼此面對的陽極與陰極以及陽極與陰極之間的至少一個有機層，其中所述有機層包含發射層以及至少一個輔助層，所述輔助層選自電洞注入層、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，且所述輔助層包含所述化合物。

【0014】 在本發明的又一實施例中，提供了包含有機光電裝置的顯示裝置。

【0015】 可以實現具有高效率 and 長使用壽命的有機光電裝置。

【圖式簡單說明】

【0016】

圖 1 和圖 2 是呈現根據本發明一實施例的有機發光二極體的截面圖。

【實施方式】

【0017】 在下文中，詳細描述本發明的實施例。然而，這些實施例為示範性的，本發明並不以此為限，且本發明是由申請專利範圍所定義。

【0018】 在本說明書中，當不另外提供定義時，術語「經取代」是指被氬、鹵素、羥基、胺基、經取代或未經取代的 C1 到 C30 胺基、硝基、經取代或未經取代的 C1 到 C40 矽烷基、C1 到 C30 烷基、C1 到 C10 烷基矽烷基、C3 到 C30 環烷基、C3 到 C30 雜環烷基、C6 到 C30 芳基、C6 到 C30 雜芳基、C1 到 C20 烷氧基、氟基、C1 到 C10 三氟烷基（例如三氟甲基）或氰基取代，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」是指在一個官能團中包含 1 個到 3 個選自 N、O、S、P 以及 Si 的雜原子，並且其餘是碳。

【0020】 在本說明書中，當不另外提供定義時，「烷基」是指脂肪族烴基。烷基可以是不具有任何雙鍵或三鍵的「飽和烷基」。

【0021】 烷基可以是 C1 至 C20 烷基。具體言之，烷基可以是 C1 至 C10 烷基或是 C1 至 C6 烷基。舉例而言，C1 至 C4 烷基在烷鏈中可具有 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】 烷基的特定實例可以是甲基、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，術語「芳基」是指環的所有元素的 p 軌域形成共軛的取代基，並且可以是單環、多環或稠環多環（即，環共用相鄰碳原子對）官能團。

【0024】 在本說明書中，術語「雜環基」是指包含至少一個選自 N、O、S、P 以及 Si 的雜原子並且其餘是碳的環狀化合物，所述環狀化合物例如是芳基、環烷基、其稠環或其組合。當雜環基是稠環時，所述雜環基的整個環或每個環可以包含一個或多個雜原子。因此，雜環基是包含雜芳基的一般術語。

【0025】 具體言之，經取代或未經取代的 C6 到 C30 芳基和/或經取代或未經取代的 C2 到 C30 雜環基可以是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伸菲基、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蒞基、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茛基、經取代或未經取代的呋喃基、經取代或未經取代的苯硫基、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吡啶基、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喔啉基、經取代或未經取代的萘啶基、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芴基、經取代或未經取代的呋唑基、經取代或未經取代的二苯並呋喃基、經取代或未經取代的苯並噻吩基、其組合或上述基團的組合稠環，但是並不限於此。

【0026】 在本說明書中，除了呋唑基以外經取代或未經取代的 C2 至 C30 含氮雜環基是指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四唑基、經取代或未經取代的噁二唑基、經取代或未經取代的噁三唑基、經取代或未經取代的噻三唑基、經取代或未經取代的苯并咪唑基、經取代或未經取代的苯并三唑基、經取代或未經取代的啶基、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吡嗪基、經取代或未經取代的嘌呤基、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酞嗪基、經取代或未經取代的萘啶基 (naphpyridinyl group)、經取代或未經取代的喹噁啉基 (quinoxalinyl group)、經取代或未經取代的噻

啞啞基、經取代或未經取代的吡啶基、經取代或未經取代的啡啞基、經取代或未經取代的吩嗞基或其組合。

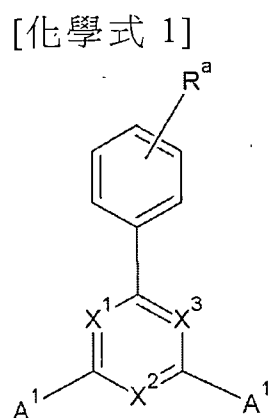
【0027】 在本說明書中，單鍵可指不具有碳的情況下除了碳以外的雜原子的直接連結，且特別是當 L 是單鍵時，直接連接至 L 的取代基直接連接至核心。亦即，在本說明書中，單鍵排除包含碳的亞甲基以及類似物。

【0028】 在本說明書中，電洞特徵是指由於根據最高佔有分子軌域 (highest occupied molecular orbital, HOMO) 能階的導電特徵，當施加電場時能夠供給電子以及在陽極中形成的電洞容易被注入發射層中並且在發射層中傳輸的特徵。

【0029】 另外，電子特徵是指由於根據最低未占分子軌域 (lowest unoccupied molecular orbital, LUMO) 能階的導電特徵，當施加電場時能夠接收電子以及在陰極中形成的電子容易被注入發射層中並且在發射層中傳輸的特徵。

【0030】 在下文中，描述根據一實施例的化合物。

【0031】 在本發明之一實施例中，提供由化學式 1 表示之化合物。



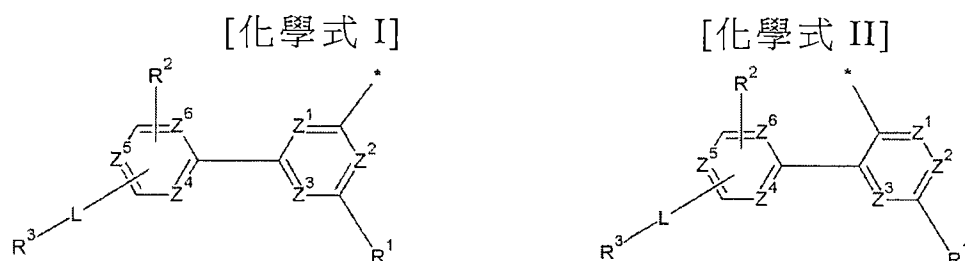
在化學式 I 中，

X^1 至 X^3 獨立地是 N 或 CR^b ，

X^1 至 X^3 的至少一者是 N，

R^a 和 R^b 各自獨立地是氫、氬或經取代或未經取代的 C1 至 C10 烷基，以及

A^1 是由化學式 I 或化學式 II 表示，



在化學式 I 和化學式 II 中，

Z^1 至 Z^6 各自獨立地是 N、C 或 CR^c ，

R^1 、 R^2 和 R^c 各自獨立地是：氫、氬、經取代或未經取代的 C1 至 C30 烷基、經取代或未經取代的 C3 至 C30 環烷基、經取代或未經取代的 C2 至 C30 雜芳基、經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基、經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳胺基、經取代或未經取代的 C1 至 C30 烷氧基、經取代或未經取代的 C3 至 C40 矽烷基、鹵素、含鹵素基團、氰基、羥基、胺基、硝基、羧基、二茂鐵基或其組合。

L 是單鍵、C6 至 C30 伸芳基、或 C2 至 C30 雜環基，

R^3 是氫、經取代或未經取代的 C6 至 C30 芳基或除了咪唑基以外經取代或未經取代的 C2 至 C30 含氮雜環基，

當 L 是單鍵時， R^1 至 R^3 的至少一者不是氫，以及

*是連接點，

其中「經取代」是指至少一個氫被氬、鹵素、羥基、胺基、C1 至 C30 烷基、C6 至 C30 芳基或 C2 至 C30 雜芳基取代。

【0032】 由化學式 1 表示之化合物包含與含有至少一個氮作為其中心的雜芳基的核心形成雙軸對稱的相同取代基。

【0033】 形成雙軸對稱的取代基可與核心在間位或鄰位鍵結。

【0034】 所述化合物包含至少一個含氮環，且因此可具有當對其施加電場時容易地接收電子的結構，且如此一來，藉由使用所述化合物製造的有機光電裝置的驅動電壓降低。

【0035】 再者，所述化合物包含形成雙軸對稱的相同取代基，且因此容易且快速地通過少量步驟合成，亦變得更具晶性，因此透過容易地移除雜質而具有高純度。

【0036】 相較於具有三分支結構的化合物，所述化合物的分子量較小，因此其結構透過連接至各種取代基而具有理想的 HOMO、LUMO 及 T_1 ，並具有低沉積溫度。

【0037】 具體來說，因為取代基在間位或鄰位連結至核心，因此藉由分離 HOMO 及 LUMO 的電子雲可改善使用壽命，且因此電洞及電子的流動平順。再者，當取代基在間位或鄰位連結而非在對位連結時，所述化合物可具有低沉積溫度。

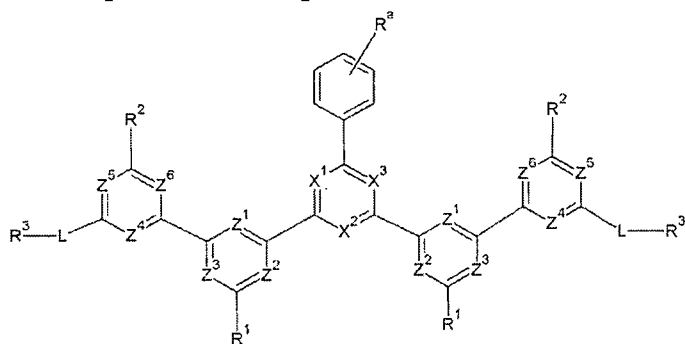
【0038】 另一方面，取代基在對位連結，因此形成扁平結構 (flat structure)，此扁平結構呈現良好薄膜特徵，因此在沉積期間具有堆積效應 (packing effect)，結果經堆積的膜可能對裝置的使用壽命帶來負面影響。

【0039】 因此，當將依據本發明的一實施例在間位或鄰位具有鍵結的化合物應用至有機光電裝置時，所述有機光電裝置可具有高

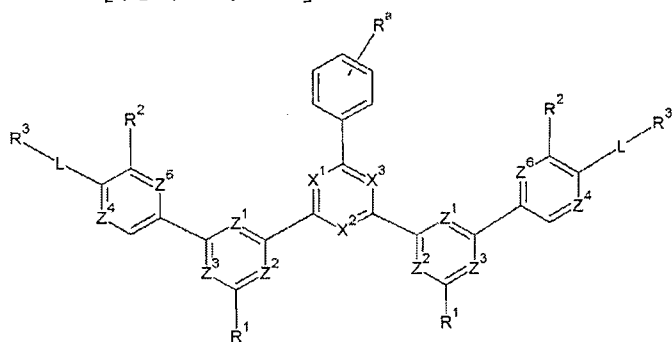
效率、高使用壽命以及在低電壓下被驅動的特徵。

【0040】 取決於末端取代基的鍵結位置，上述化學式 1 可由以下化學式 I-a、化學式 I-b、化學式 I-c、化學式 II-a、化學式 II-b 及化學式 II-c 中的一者表示。

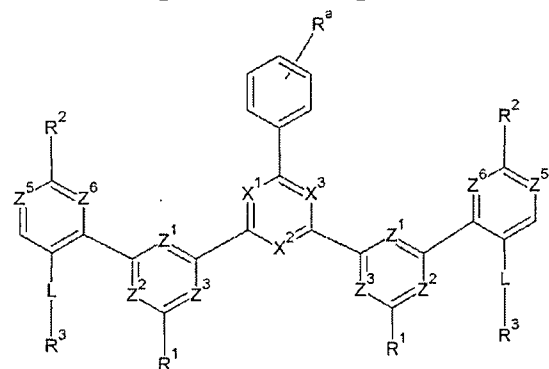
[化學式 I-a]



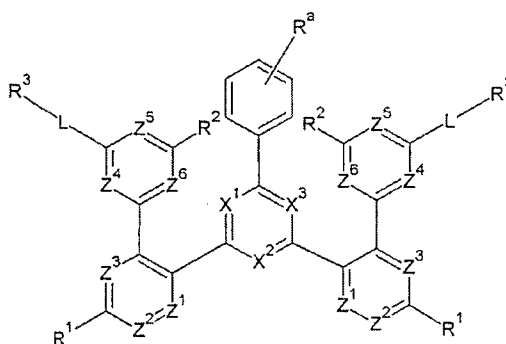
[化學式 I-b]



[化學式 I-c]

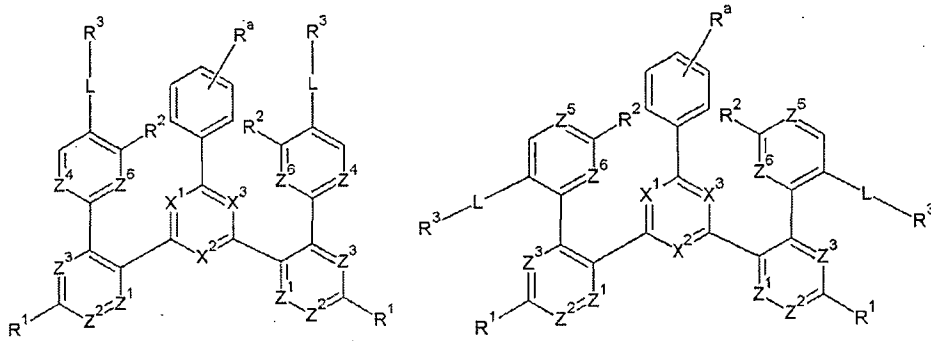


[化學式 II-a]



[化學式 II-b]

[化學式 II-c]

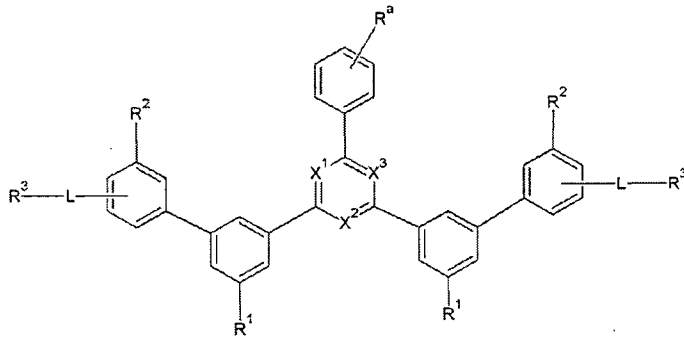


在化學式 I-a、化學式 I-b、化學式 I-c、化學式 II-a、化學式 II-b 及化學式 II-c 中，

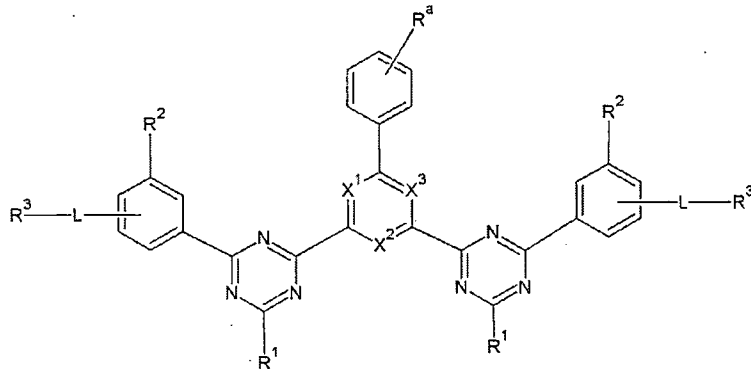
X^1 至 X^3 、 R^a 、 R^b 、 Z^1 至 Z^6 、 R^1 、 R^2 、 R^c 、 L 以及 R^3 與上述說明相同。

【0041】 在屬於化學式 1 的由化學式 I 或化學式 II 所表示的取代基中， Z^1 至 Z^6 可以全部是碳，或可包含 N。明確地，它們可以由化學式 I-d、化學式 I-e、化學式 I-f、化學式 II-d 及化學式 II-e 的一者表示。

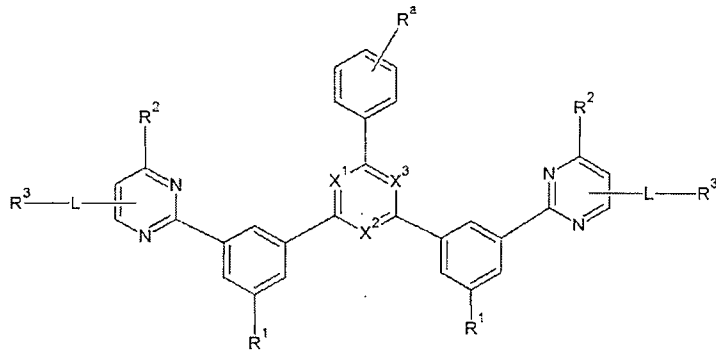
[化學式 I-d]



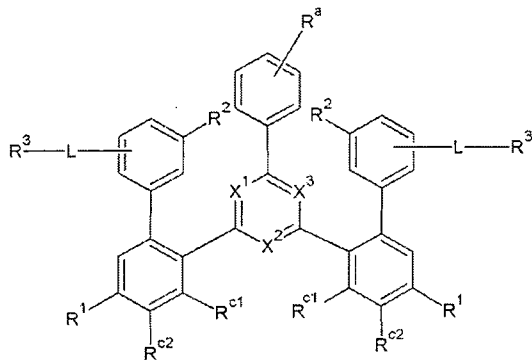
[化學式 I-e]



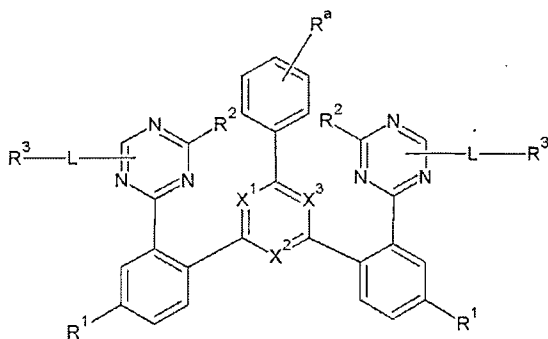
[化學式 I-f]



[化學式 II-d]



[化學式 II-e]



在化學式 I-d、化學式 I-e、化學式 II-d 及化學式 II-e 中，
 X^1 至 X^3 、 R^a 、 R^b 、 R^1 、 R^2 、 L 以及 R^3 與上述定義相同，以及
 R^{c1} 及 R^{c2} 與上述定義的 R^1 相同。

【0042】 在 R^3 的定義中，除了咪唑基以外經取代或未經取代的 C2 至 C30 含氮雜環基是指當施加電場時具有接收電子之特徵以及具有由於根據最低未占分子軌域 (LUMO) 能階的傳導特徵容易將在陰極中形成的電子注入發射層中並且傳輸至發射層中之特徵的

取代基，且除了咪唑基以外經取代或未經取代的 C2 至 C30 含氮雜環基可以例如是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四唑基、經取代或未經取代的噁二唑基、經取代或未經取代的噁三唑基、經取代或未經取代的噻三唑基、經取代或未經取代的苯并咪唑基、經取代或未經取代的苯并三唑基、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三嗪基、經取代或未經取代的吡嗪基、經取代或未經取代的嘌呤基、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酞嗪基、經取代或未經取代的萘啶基、經取代或未經取代的喹噁啉基、經取代或未經取代的喹啉基、經取代或未經取代的吡啶基、經取代或未經取代的啡啉基、經取代或未經取代的吩嗪基或其組合。

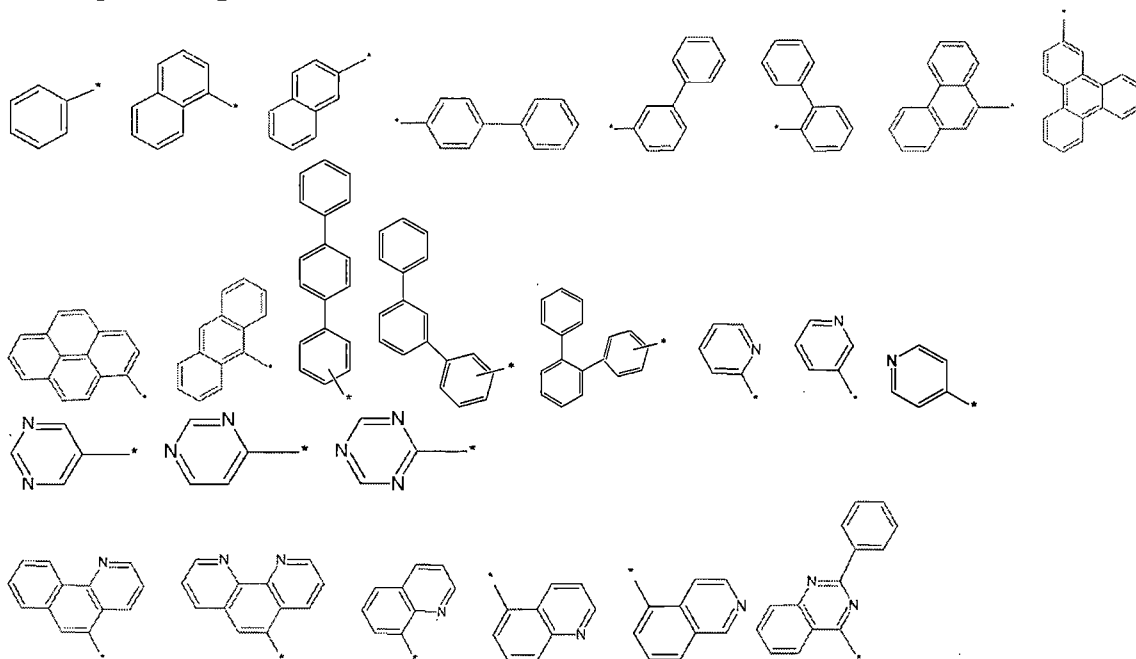
【0043】 R^1 、 R^{c1} 、 R^{c2} 、 R^2 以及 R^c 可各獨立地是氫、經取代或未經取代的苯基、經取代或未經取代的聯苯基、經取代或未經取代的聯三苯基、經取代或未經取代的萘基、經取代或未經取代的啶基、經取代或未經取代的嘧啶基、經取代或未經取代的三嗪基，且

R^3 是氫、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蒽基、經取代或未經取代的菲基、取代或未經取代的芘基、取代或未經取代的聯伸三苯基、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四唑基、經取代或未經取代的噁二唑基、經取代或未經取代的噁三唑基、經取代或未經取代的

噻三唑基、經取代或未經取代的苯并咪唑基、經取代或未經取代的苯并三唑基、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三嗪基、經取代或未經取代的吡嗪基、經取代或未經取代的嘌呤基、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酞嗪基、經取代或未經取代的萘啶基、經取代或未經取代的喹噁啉基、經取代或未經取代的喹啉基、經取代或未經取代的吡啶基、經取代或未經取代的氮雜菲基 (azaphenanthrenyl group)、經取代或未經取代的啡啉基、經取代或未經取代的啡嗪基或其組合。

【0044】 具體而言， R^3 可選自群組 I 中經取代或未經取代的基團。

[群組 I]



在群組 1 中，

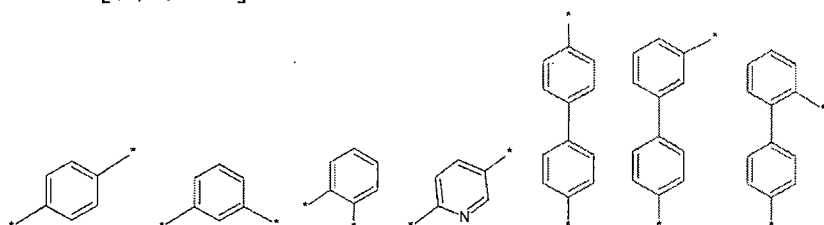
*是連接點。

【0045】 在本文中，「經取代」是指至少一個氫被氘、鹵素、羥基、胺基、C1 至 C30 烷基、C6 至 C30 芳基或 C2 至 C30 雜芳基

取代。

【0046】 具體來說，L 可以是單鍵、經取代或未經取代的伸苯基、經取代或未經取代的伸聯苯基、經取代或未經取代的萘基、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或其組合。舉例來說，L 可選自群組 II 中經取代或未經取代的基團。

[群組 II]



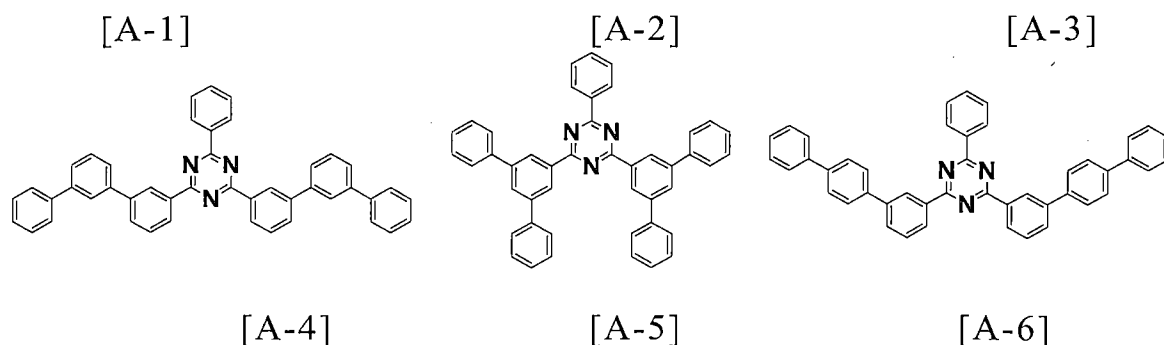
在群組 II 中，

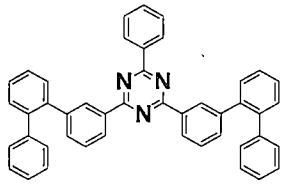
*是連接點。

【0047】 在本文中，「經取代」是指至少一個氫被氬、鹵素、羥基、胺基、C1 至 C30 烷基、C6 至 C30 芳基或 C2 至 C30 雜芳基取代。

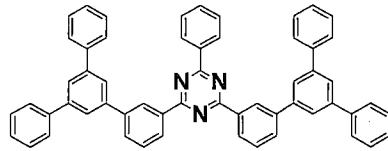
【0048】 由化學式 1 表示的化合物可以例如是下列的化合物，但是並不限於這些化合物。

在以下具體化學式中，雜原子都是 "N"。

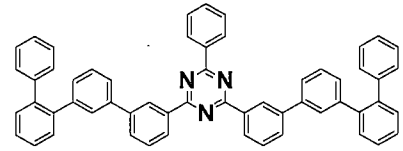




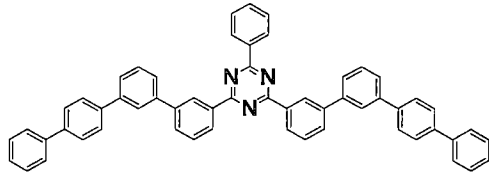
[A-7]



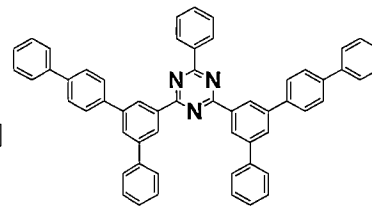
[A-8]



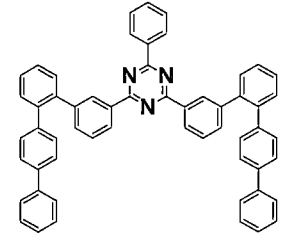
[A-9]



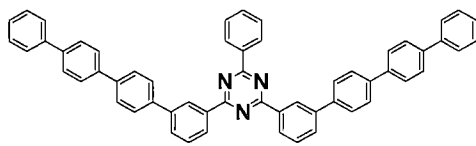
[A-10]



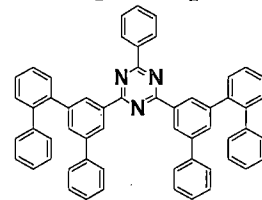
[A-11]



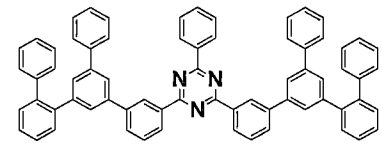
[A-12]



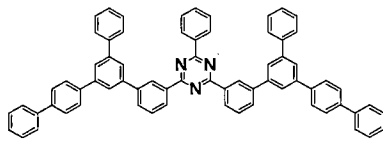
[A-13]



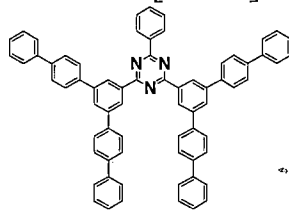
[A-14]



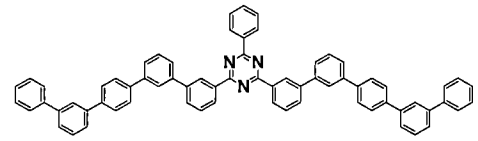
[A-15]



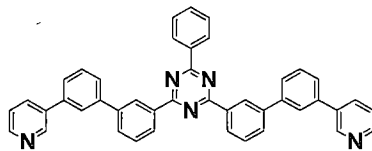
[A-16]



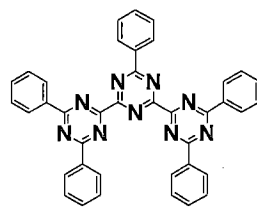
[A-17]



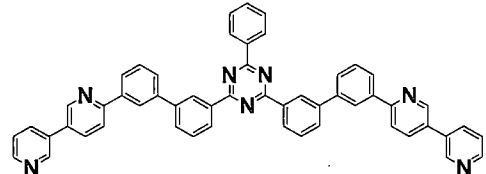
[A-18]



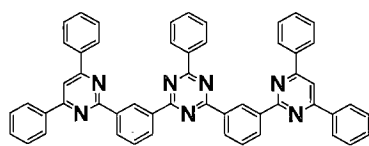
[A-19]



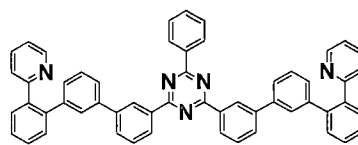
[A-20]



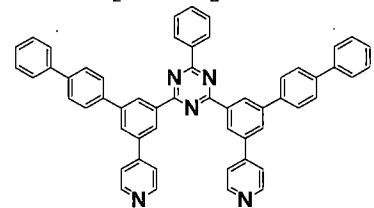
[A-21]



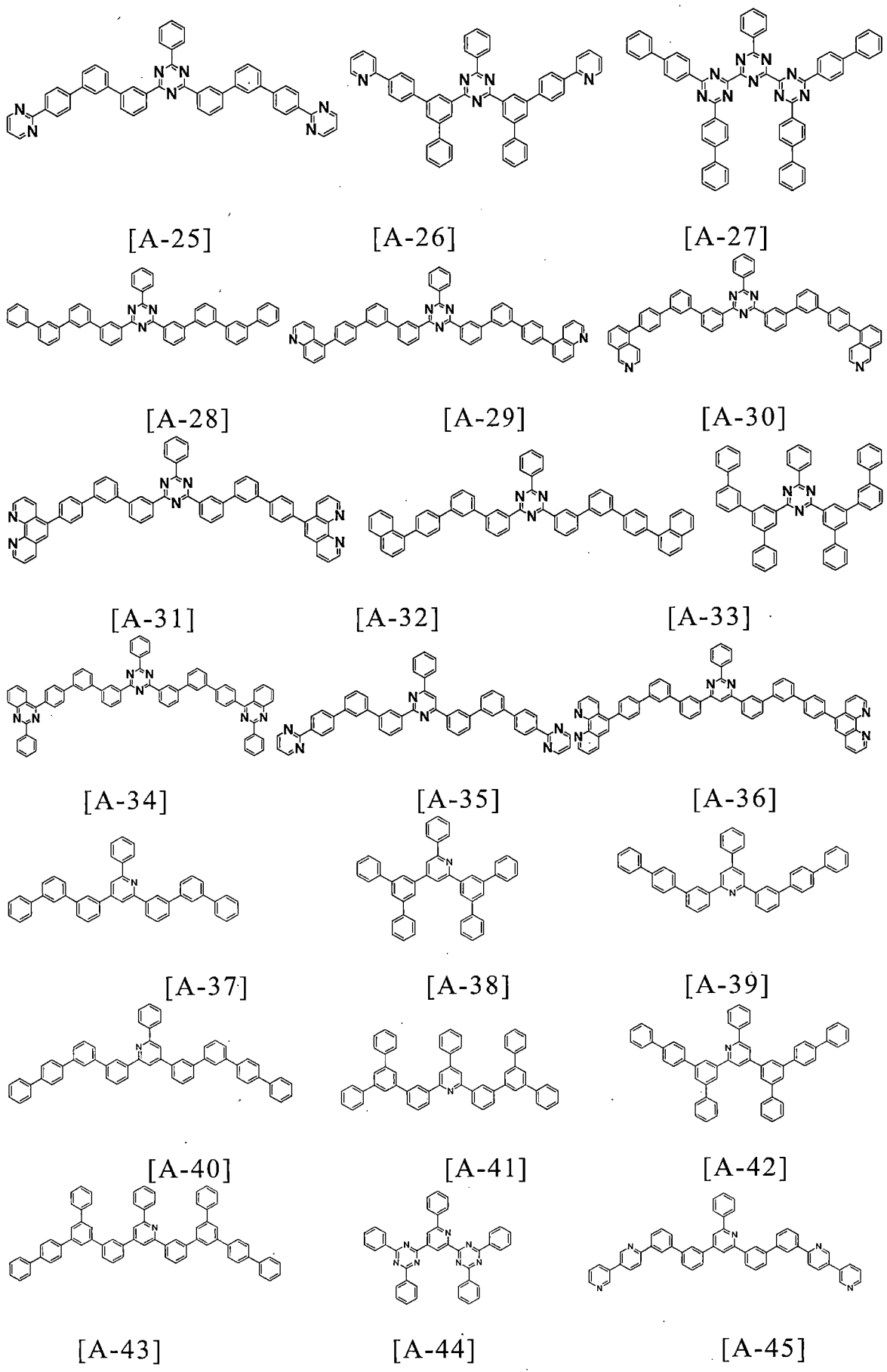
[A-22]

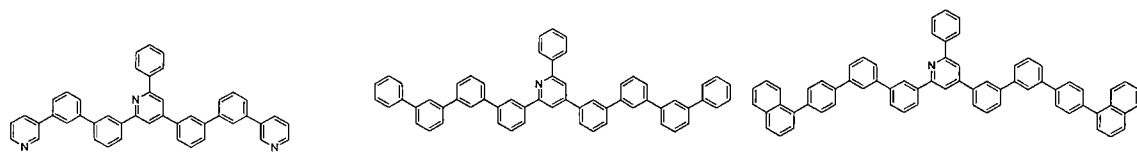


[A-23]



[A-24]

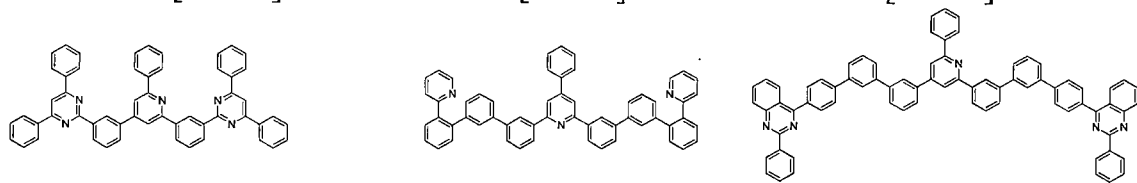




[A-46]

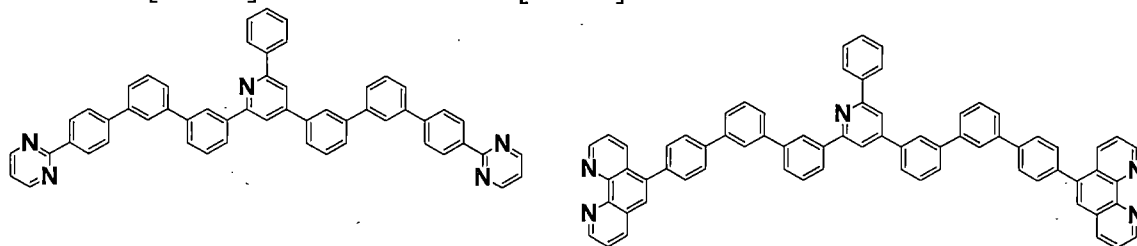
[A-47]

[A-48]



[A-49]

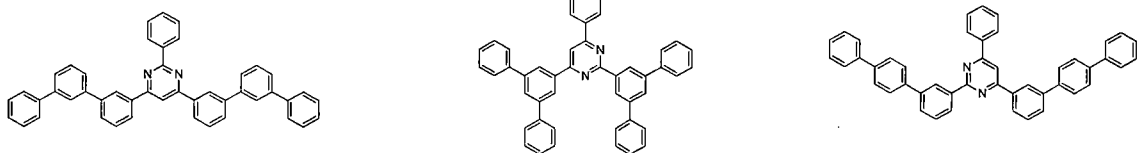
[A-50]



[A-51]

[A-52]

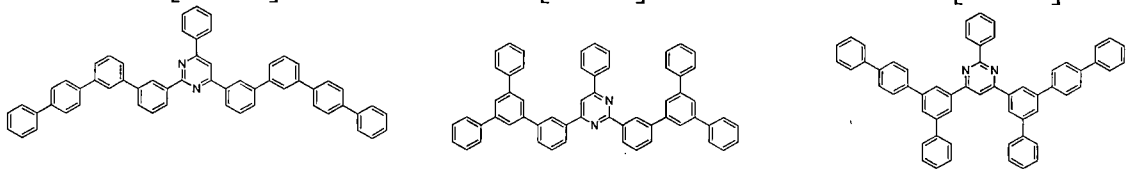
[A-53]



[A-54]

[A-55]

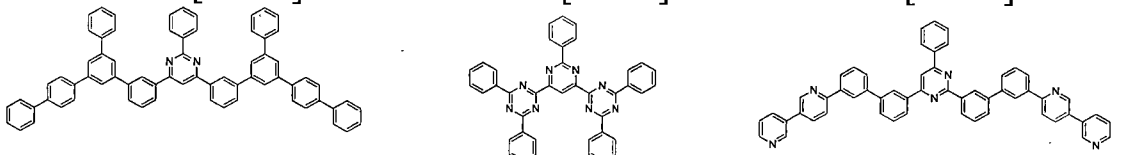
[A-56]



[A-57]

[A-58]

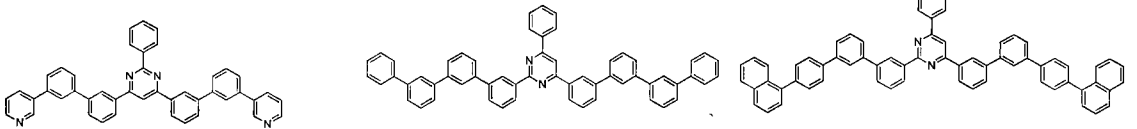
[A-59]



[A-60]

[A-61]

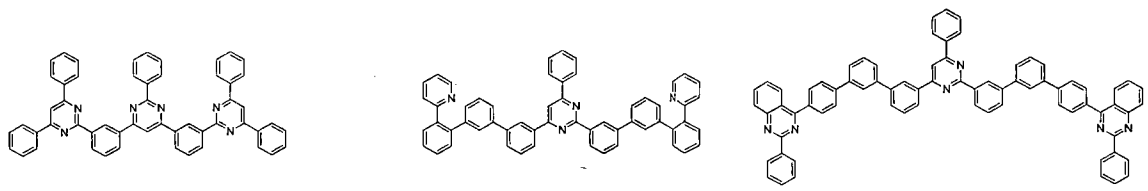
[A-62]



[A-63]

[A-64]

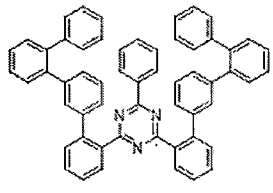
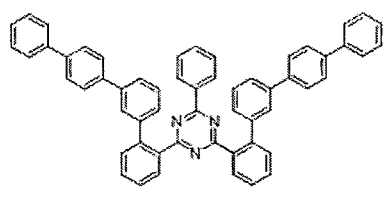
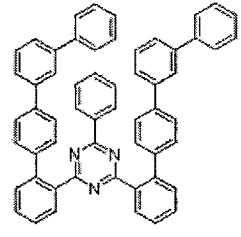
[A-65]



[B-1]

[B-2]

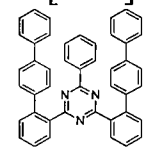
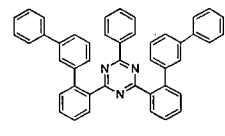
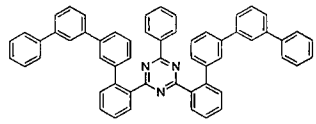
[B-3]



[B-4]

[B-5]

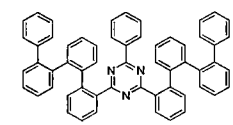
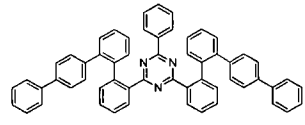
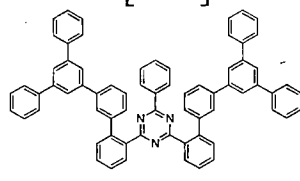
[B-6]



[B-7]

[B-8]

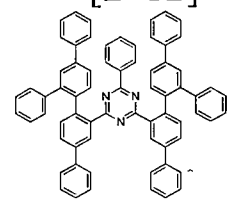
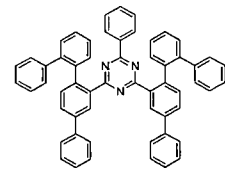
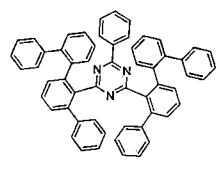
[B-9]



[B-10]

[B-11]

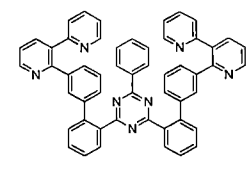
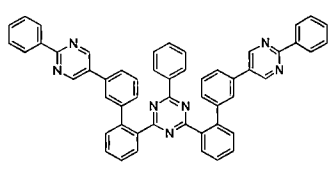
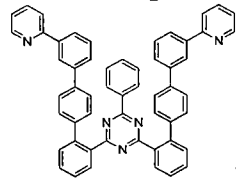
[B-12]



[B-13]

[B-14]

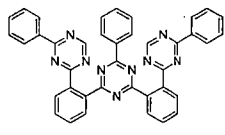
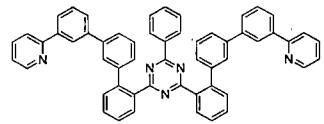
[B-15]



[B-16]

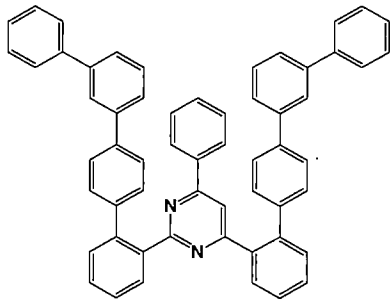
[B-17]

[B-18]

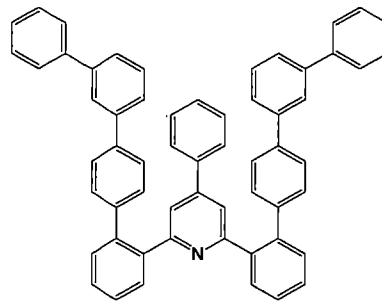


[B-19]

[B-20]

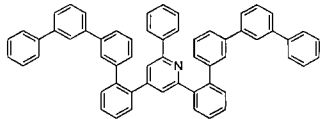


[B-21]

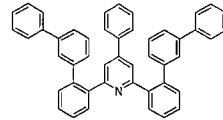


[B-22]

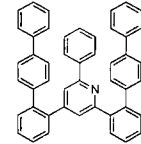
[B-23]



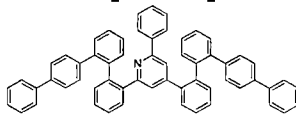
[B-24]



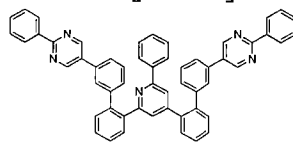
[B-25]



[B-26]

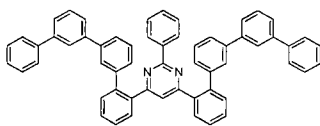


[B-27]

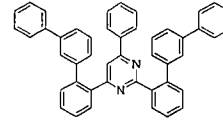


[B-28]

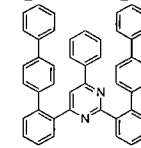
[B-29]



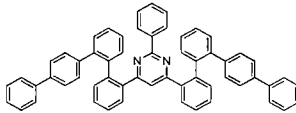
[B-30]



[B-31]



[B-32]



【0049】 所述化合物可以用於有機光電裝置。

【0050】 在下文中，描述包含所述化合物的有機光電裝置。

【0051】 在本發明的另一實施例中，有機光電裝置包含彼此相對的陽極和陰極以及至少一個在所述陽極與所述陰極之間的有機層，其中所述有機層包含所述化合物。

【0052】 有機層可包含發射層，且所述發射層可包含本發明的化合物。

【0053】 具體而言，所述化合物可被包含以作為發射層的主體。

【0054】 在本發明的一實施例中，有機層可包含至少一輔助層，所述輔助層選自電洞注入層（hole transport layer，HTL）、電洞傳輸層（hole transport layer，HTL）、電洞傳輸輔助層、電子傳輸輔助層、電子傳輸層（electron transport layer，ETL）以及電子注入層（electron injection layer，EIL），且所述輔助層包含所述化合物。

【0055】 所述有機光電裝置可以用於將電能轉換成光能（並且反之亦然）並且沒有特別限制，並且可以是例如有機光電裝置、有機發光二極體、有機太陽能電池以及有機光導鼓。

【0056】 在本文中，參看圖式描述作為有機光電裝置的一個實例的有機發光二極體。

【0057】 圖 1 和圖 2 是根據一實施例的每一有機發光二極體的截面圖。

【0058】 請參照圖 1，根據一實施例的有機發光二極體 100 包含彼此相對的陽極 120 和陰極 110 以及插入於陽極 120 與陰極 110 之間的有機層 105。

【0059】 陽極 120 可以由具有大的功函數的導體製成，以用於幫助電洞注入，並且可以是例如金屬、金屬氧化物和/或導電聚合物。陽極 120 可以例如是金屬，例如鎳、鉑、鈳、鉻、銅、鋅以及金或其合金；金屬氧化物，例如氧化鋅、氧化銦、氧化銦錫（indium tin oxide；ITO）、氧化銦鋅（indium zinc oxide；IZO）等；金屬和氧化物的組合，例如 ZnO 和 Al 或 SnO₂ 和 Sb；導電聚合物，例如聚(3-甲基噻吩)、聚(3,4-(伸乙基-1,2-二氧基)噻吩)（PEDT）、聚吡咯以及聚苯胺，但是並不限於這些。

【0060】 陰極 110 可以由具有小的功函數的導體製成，以用於幫

助電子注入，並且可以是例如金屬、金屬氧化物和/或導電聚合物。陰極 110 可以是例如金屬或其合金，例如鎂、鈣、鈉、鉀、鈦、銮、鉕、鋰、釷、鋁、銀、錫、鉛、銻、鋇等；多層結構物質，例如 LiF/Al、LiO₂/Al、LiF/Ca、LiF/Al 以及 BaF₂/Ca，但是並不限於這些。

【0061】 有機層 105 包含發射層 130，發射層 130 包含所述化合物。

【0062】 發射層 130 可以包含例如單獨的有機化合物或有機化合物中至少兩種的混合物，且可包含不同於所述化合物的另一種化合物。當所述化合物與另一種化合物混合時，它們可以例如是主體與摻雜劑，且所述化合物可以例如是主體。主體可以例如是發磷光主體或發螢光主體，且可以例如是發磷光主體。

【0063】 當所述化合物是主體時，摻雜劑可以是無機化合物、有機化合物或有機/無機化合物，且可選自己知摻雜劑。

【0064】 請參照圖 2，除了發射層 230 以外，有機發光二極體 200 更包含電洞輔助層 140。電洞輔助層 140 可改善陽極 120 與發射層 230 之間的電洞注入及/或電洞遷移率，並且可阻擋電子。電洞輔助層 140 可包含例如電洞傳輸層、電洞注入層及/或電子阻擋層的至少一者。所述化合物可包含於電洞輔助層 140 中。

【0065】 即使未示於圖 1 或圖 2 中，有機層 105 可更包含電子注入層、電子傳輸層、輔助電子傳輸層、電洞傳輸層、輔助電洞傳輸層、電洞注入層或其組合。本發明的化合物可包含於有機層中。有機發光二極體 100 和有機發光二極體 200 可以通過以下來製造：在基底上形成陽極或陰極；根據乾式塗佈法（例如蒸鍍、濺

鍍、電漿電鍍以及離子電鍍)或根據濕式塗佈法(例如旋轉塗佈、浸漬以及流塗)形成有機層;以及在其上形成陰極或陽極。

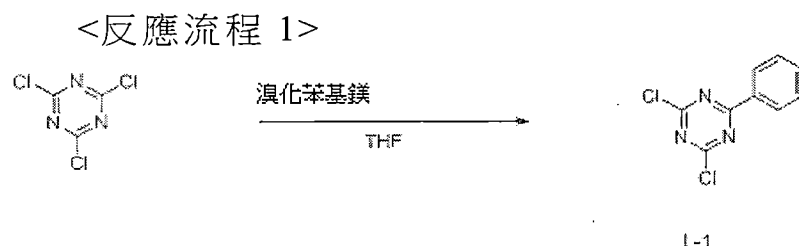
【0066】 有機發光二極體可以應用於有機發光二極體(organic light emitting diode; OLED)顯示器。

【0067】 在下文中,參照實例更詳細地說明實施例。然而,這些實例不以任何意義被解釋為限制本發明的範圍。

化合物的製備

【0068】 透過以下步驟合成化合物作為依據本發明的化合物的具體實例。

合成實例 1: 合成中間物 L-1



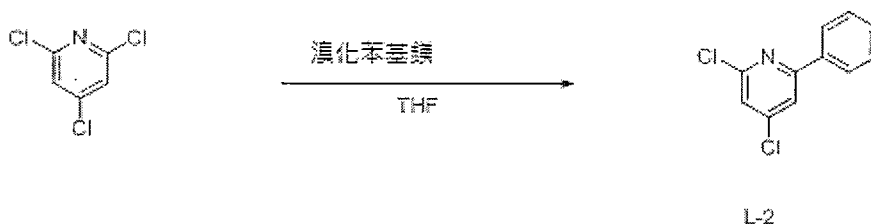
【0069】 將 30 克 (162.68 mmol) 的 2,4,6-三氯-1,3,5-三嗪放入 500 mL 燒瓶中,並溶解於 325 ml 的四氫呋喃溶劑中。使用冰水使溶劑冷卻後,在氮氣流下透過滴液漏斗緩慢地將具有 3 M 濃度的 54.23 ml (162.68 mmol) 的溴化苯基鎂滴入其中。當溴化苯基鎂完全地加入其中時,攪拌混合物 30 分鐘,接著將水加入其中,完成反應。將水從四氫呋喃分離並移除,透過蒸餾器移除四氫呋喃,取得固體。以 100 ml 甲醇攪拌固體,接著過濾。接著,再度以 100 ml 己烷攪拌固體,接著過濾,獲得中間物 L-1 (27 克, 73% 產率)。

$C_9H_5Cl_2N_3$ 的計算值: C, 47.82; H, 2.23; Cl, 31.37; N, 18.59; 實測值: C, 47.56; H, 2.12; Cl, 31.42; N, 18.43

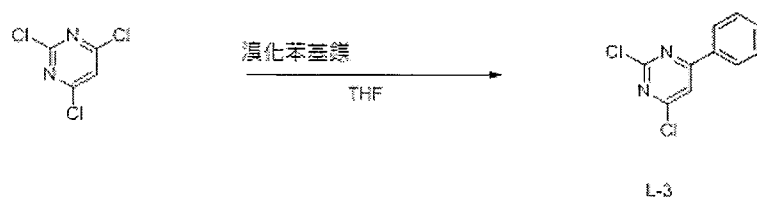
合成實例 2 及合成實例 3：合成中間物 L-2 及中間物 L-3

【0070】 依據以下反應流程 2 以及反應流程 3 在與合成實例 1 的 L-1 相同的方法中合成作為依據本發明的化合物的具體實例的中間物 L-2 及中間物 L-3。

<反應流程 2>中間物 L-2 的合成反應流程

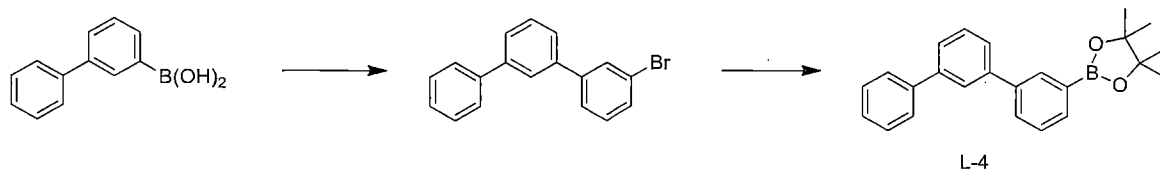


<反應流程 3>中間物 L-3 的合成反應流程

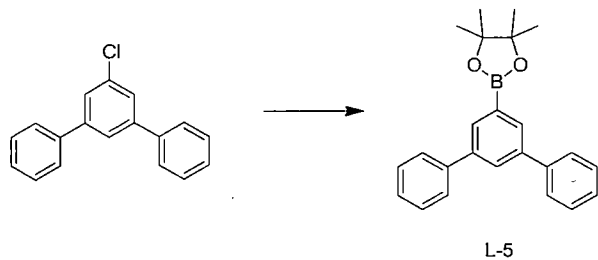


中間物 L-4、中間物 L-5 及中間物 L-6 的合成過程

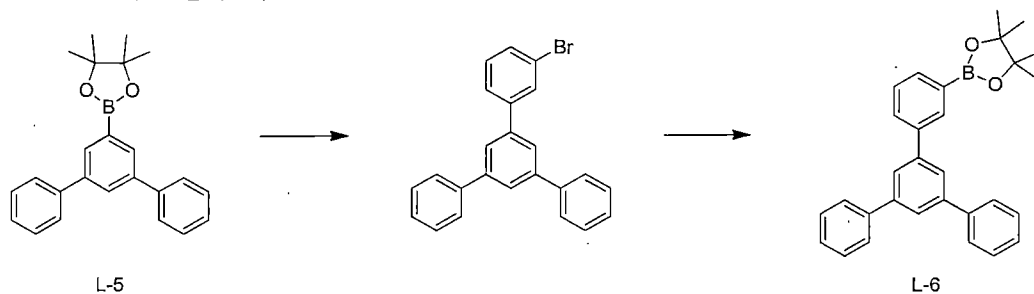
<反應流程 4>



<反應流程 5>

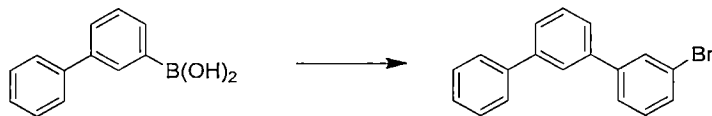


<反應流程 6>



合成實例 4：合成化合物，3-溴-1,1':3,1''-聯三苯

<反應流程 4-1>

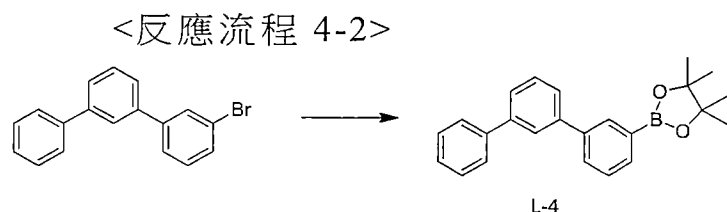


【0071】 將 50.0 克 (252.49 mmol) 的中間物[1,1'-聯苯]-3-基硼酸、92.86 克 (328.23 mmol) 的 1-溴-3-碘化苯、69.79 克 (504.97 mmol) 的碳酸鉀以及 14.59 克 (12.62 mmol) 的 Pd(PPh₃)₄ (四(三苯基膦)鈀(0))加入 2000 ml 燒瓶中的 500 ml 的四氫呋喃與 250 ml 的水中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將 1500 ml 的甲醇加入所獲得的混合物以結晶化的固體，並溶解於二氯甲烷中，且接著以矽氧凝膠/矽藻土 (Celite) 過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的甲醇再結晶，獲得化合物 A-1 (55.32 克，產率 71%)。以下提供化合物 3-溴-1,1':3,1''-聯三苯的元素分析結果。

C₁₈H₁₃Br 的計算值:C, 69.92; H, 4.24; Br, 25.84;實測值:C,

69.62; H, 4.11; Br, 25.75

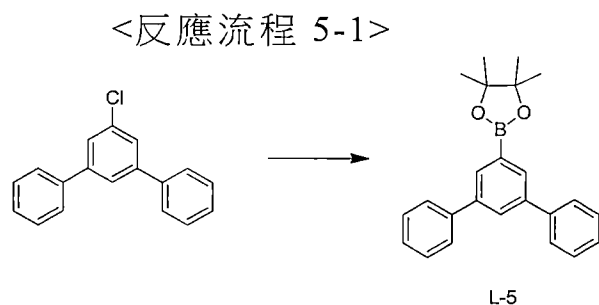
合成實例 5：合成中間物 L-4



【0072】 將 50.0 克 (161.71 mmol) 的中間物 3-溴-1,1':3,1''-聯三苯、59.38 克 (210.22 mmol) 的雙聯頻哪醇硼酸酯 (bispinacolato diboron) 以及 14.59 克 (12.62 mmol) 的 Pd(dppf)Cl₂ 加入 1000 ml 燒瓶中的 580 ml 的甲苯中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將 1500 ml 的甲醇加入所獲得的混合物以結晶化的固體，並溶解於二氯甲烷中，以矽氧凝膠/矽藻土過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的己烷再結晶，獲得化合物 L-4 (45.6 克，產率 79%)。以下提供化合物 L-4 的元素分析結果。

C₂₄H₂₅BO₂ 的計算值:C, 80.91; H, 7.07; B, 3.03; O, 8.98;實測值:C, 80.87; H, 7.13; B, 3.24; O, 8.76

合成實例 6：合成中間物 L-5

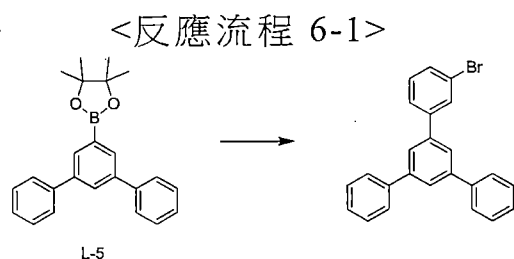


【0073】 將 50.0 克 (188.86 mmol) 的中間物 5-氯-1,1':3,1''-聯三

苯、62.35 克 (245.51 mmol) 的雙聯頻哪醇硼酸酯、55.60 克 (566.67 mmol) 的乙酸鉀以及 9.25 克 (11.33 mmol) 的 Pd(dppf)Cl₂ 加入 1000 ml 燒瓶中的 670 ml 的二甲基甲醯胺中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將 1500 ml 的甲醇加入所獲得的混合物以結晶化的固體，並溶解於二氯甲烷中，以矽氧凝膠/矽藻土過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的己烷再結晶，獲得化合物 L-5 (46.34 克，產率 69%)。以下提供化合物 L-5 的元素分析結果。

C₂₄H₂₅BO₂ 的計算值: C, 80.91; H, 7.07; B, 3.03; O, 8.98; 實測值: C, 80.34; H, 7.53; B, 3.21; O, 8.64

合成實例 7：合成化合物 3-溴-5'-苯基-1,1':3,1''-聯三苯



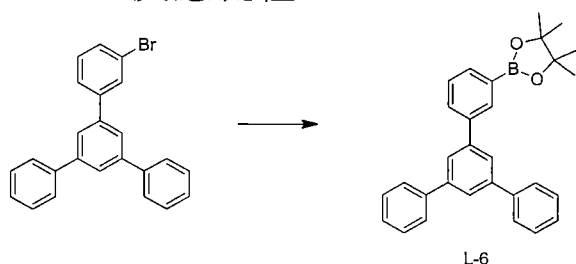
【0074】 將 70.0 克 (196.48 mmol) 的中間物 L-5、72.26 克 (255.42 mmol) 的 1-溴-3-碘化苯、54.31 克 (392.96 mmol) 的碳酸鉀以及 11.35 克 (9.82 mmol) 的 Pd(PPh₃)₄ (四(三苯基膦)鈀(0)) 加入 2000 ml 燒瓶中的 400 ml 的四氫呋喃與 200 ml 的水中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將 1500 ml 的甲醇加入所獲得的混合物以結晶化的固體，並溶解於二氯甲烷中，且接著以矽氧凝膠/矽藻土過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的甲醇再結晶，獲得化合物 3-溴-5'-苯基-1,1':3,1''-聯三苯 (58.63 克，

產率 77%)。以下提供化合物 3-溴-5'-苯基-1,1':3,1''-聯三苯的元素分析結果。

$C_{24}H_{17}Br$ 的計算值:C, 74.81; H, 4.45; Br, 20.74;實測值:C, 74.65; H, 4.35; Br, 20.87

合成實例 8：合成中間物 L-6

<反應流程 6-2>



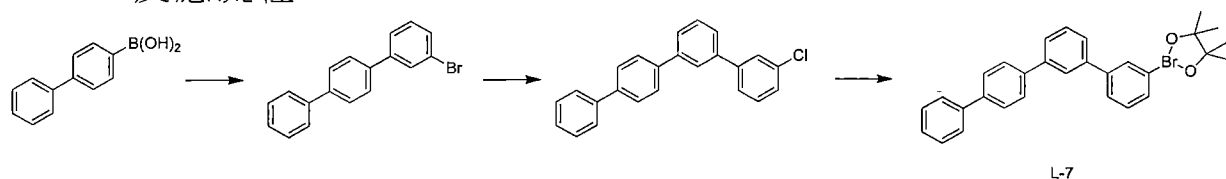
【0075】 將 50.0 克 (139.55 mmol) 的中間物 3-溴-5'-苯基-1,1':3,1''-聯三苯、46.07 克 (181.41 mmol) 的雙聯頻哪醇硼酸酯、41.09 克 (418.64 mmol) 的乙酸鉀以及 6.84 克 (8.37 mmol) 的 $Pd(dppf)Cl_2$ 加入 1000 ml 燒瓶中的 500 ml 的甲苯中，且在氬氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將 1500 ml 的甲醇加入所獲得的混合物以結晶化的固體，並溶解於二氯甲烷中，且接著以矽氧凝膠/矽藻土過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的己烷再結晶，獲得化合物 L-6 (51.23 克，產率 85%)。以下提供化合物 L-6 的元素分析結果。

$C_{24}H_{25}BO_2$ 的計算值:C, 80.91; H, 7.07; B, 3.03; O, 8.98;實測值:C, 80.87; H, 7.13; B, 3.24; O, 8.76

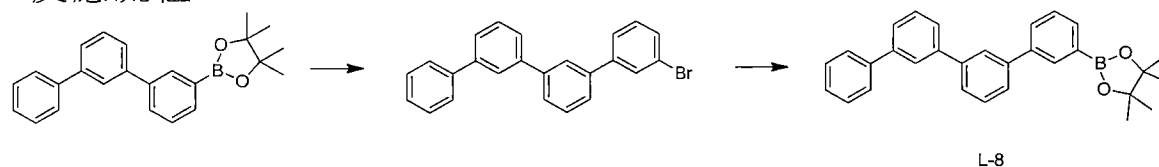
合成中間物 L-7、中間物 L-8、中間物 L-9 及中間物 L-10

【0076】 依據合成實例 4 至合成實例 8 依據與中間物 L-4、中間物 L-5 及中間物 L-6 相同的方法（三種基本反應：鈴木（Suzuki）反應、Br 硼化（Boration）反應、Cl 的硼化反應）合成作為依據本發明的化合物的具體實例的中間物 L-7、中間物 L-8、中間物 L-9 及中間物 L-10。

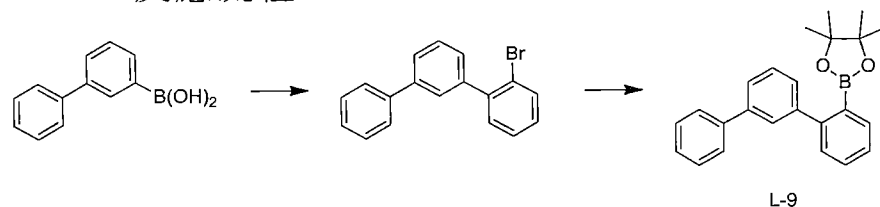
<反應流程 7>



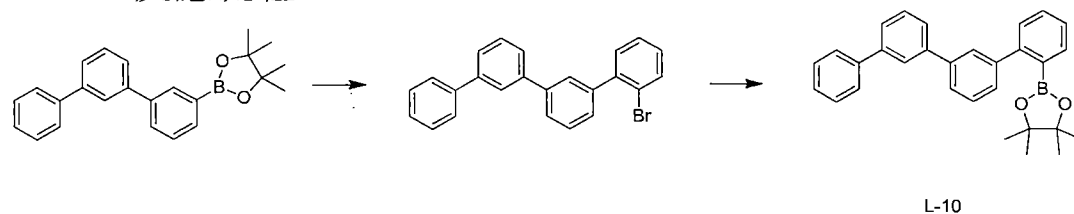
<反應流程 8>



<反應流程 9>

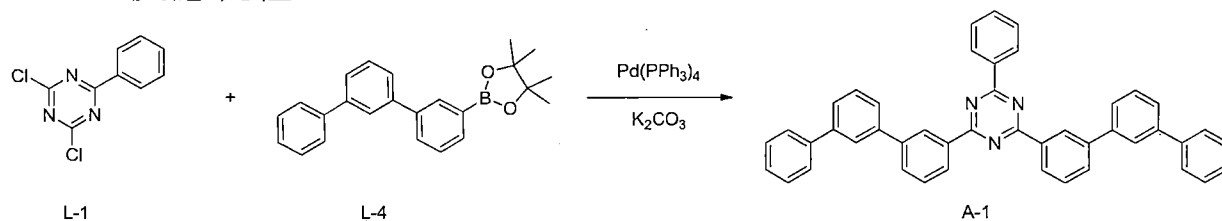


<反應流程 10>



合成實例 1：合成化合物 A-1

<反應流程 11>

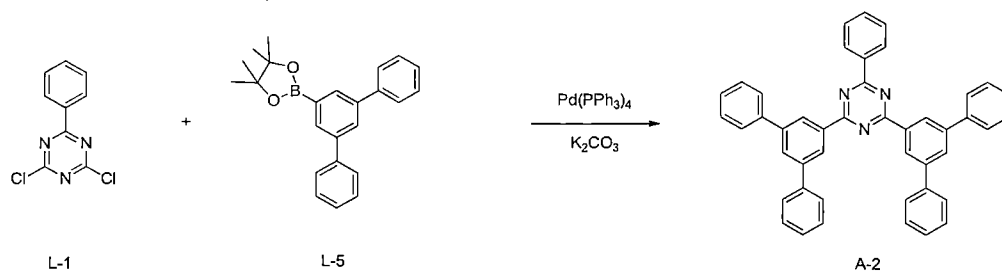


【0077】 將 5.0 克 (22.12 mmol) 的中間物 L-1 (2,4-二氯-6-苯-s-三嗪)、18.12 克 (50.87 mmol) 的中間物 L-4、7.64 克 (55.30 mmol) 的碳酸鉀以及 1.28 克 (1.11 mmol) 的 Pd(PPh₃)₄ (四(三苯基膦)鈀(0)) 加入 250 ml 燒瓶中的 100 ml 的四氫呋喃與 30 ml 的水中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將 500 ml 的甲醇加入所獲得的混合物以結晶化的固體，並溶解於一氯化苯 (monochlorobenzene) 中，且接著以矽氧凝膠/矽藻土過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的甲醇再結晶，獲得化合物 A-1 (11.3 克，產率 83%)。以下提供化合物 A-1 的元素分析結果。

C₄₅H₃₁N₃ 的計算值: C, 88.06; H, 5.09; N, 6.85; 實測值: C, 87.94; H, 5.12; N, 6.76

合成實例 2：合成化合物 A-2

<反應流程 12>



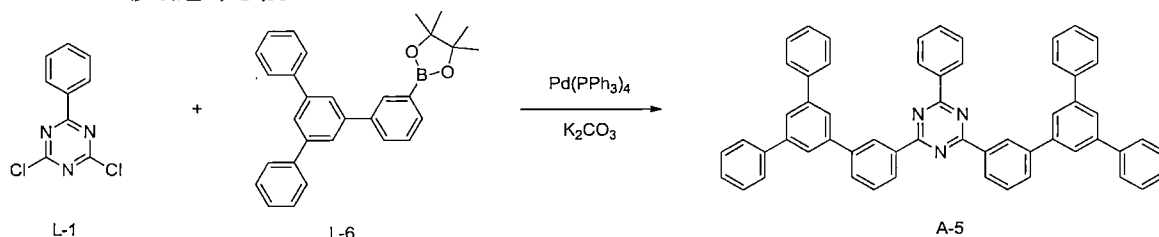
【0078】 將 5.0 克 (22.12 mmol) 的中間物 L-1 (2,4-二氯-6-苯-s-三嗪)、18.12 克 (50.87 mmol) 的中間物 L-5、7.64 克 (55.30 mmol) 的碳酸鉀以及 1.28 克 (1.11 mmol) 的 Pd(PPh₃)₄ (四(三苯基膦)鈀(0)) 加入 250 ml 燒瓶中的 100 ml 的四氫呋喃與 30 ml 的水中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將 500 ml

的甲醇加入所獲得的混合物以結晶化的固體，並溶解於一氯化苯中，以矽氧凝膠/矽藻土再次過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的甲醇再結晶，獲得化合物 A-2 (8.5 克，產率 63%)。以下提供化合物 A-2 的元素分析結果。

$C_{45}H_{31}N_3$ 的計算值:C, 88.06; H, 5.09; N, 6.85;實測值:C, 88.16; H, 5.23; N, 6.63

合成實例 3：合成化合物 A-5

<反應流程 13>

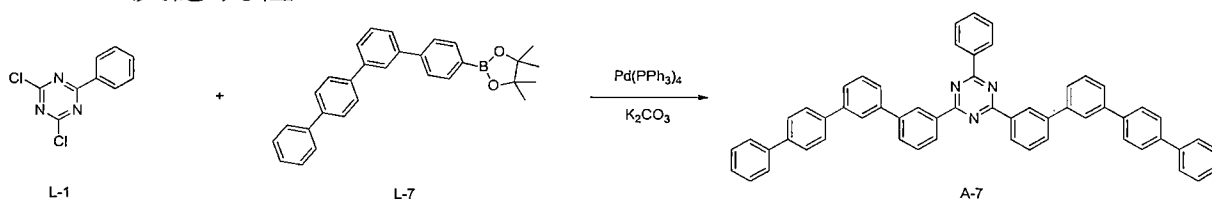


【0079】 將 5.0 克 (22.12 mmol) 的中間物 L-1 (2,4-二氯-6-苯-s-三嗪)、21.99 克 (46.60 mmol) 的中間物 L-6、7.64 克 (55.30 mmol) 的碳酸鉀以及 1.28 克 (1.11 mmol) 的 $Pd(PPh_3)_4$ (四(三苯基膦)鈀(0)) 加入 250 ml 燒瓶中的 100 ml 的四氫呋喃與 30 ml 的水中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將所獲得的混合物加入 500 ml 的甲醇以結晶化的固體，並溶解於一氯化苯中，以矽氧凝膠/矽藻土再次過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的甲醇再結晶，獲得化合物 A-5 (13.0 克，產率 77%)。以下提供化合物 A-5 的元素分析結果。

$C_{57}H_{39}N_3$ 的計算值:C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49;實測值:C, 89.21; H, 5.04; N, 5.53

合成實例 4：合成化合物 A-7

<反應流程 14>

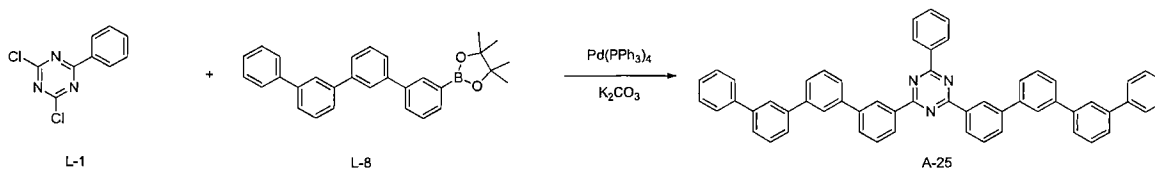


【0080】 將 5.0 克 (22.12 mmol) 的中間物 L-1 (2,4-二氯-6-苯-s-三嗪)、21.99 克 (46.60 mmol) 的中間物 L-7、7.64 克 (55.30 mmol) 的碳酸鉀以及 1.28 克 (1.11 mmol) 的 Pd(PPh₃)₄ (四(三苯基膦)鈀(0)) 加入 250 ml 燒瓶中的 100 ml 的四氫呋喃與 30 ml 的水中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將 500 ml 的甲醇加入所獲得的混合物以結晶化的固體，並溶解於一氯化苯中，以矽氧凝膠/矽藻土再次過濾，接著在移除適有機溶劑後以當量的甲醇再結晶，獲得化合物 A-7 (14.2 克，產率 84%)。以下提供化合物 A-7 的元素分析結果。

C₅₇H₃₉N₃ 的計算值：C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; 實測值：C, 89.48; H, 5.33; N, 5.41

合成實例 5：合成化合物 A-25

<反應流程 15>



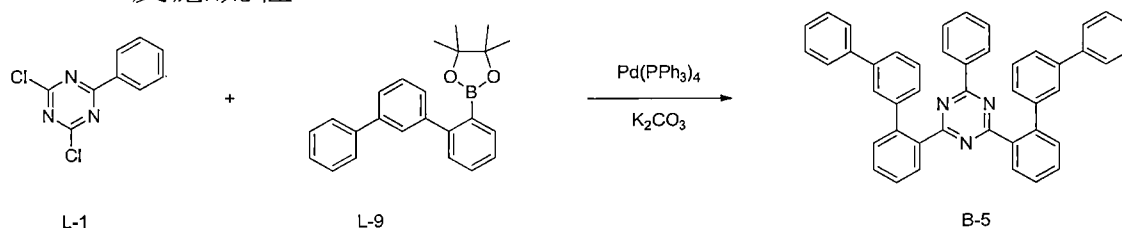
【0081】 將 5.0 克 (22.12 mmol) 的中間物 L-1 (2,4-二氯-6-苯-s-三嗪)、21.99 克 (46.60 mmol) 的中間物 L-8、7.64 克 (55.30 mmol)

的碳酸鉀以及 1.28 克 (1.11 mmol) 的 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (四(三苯基膦)鈀(0)) 加入 250 ml 燒瓶中的 100 ml 的四氫呋喃與 30 ml 的水中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將所獲得的混合物加入 500 ml 的甲醇以結晶化的固體，並溶解於一氯化苯中，以矽氧凝膠/矽藻土再次過濾，接著在移除適當量的有機溶劑後以甲醇再結晶，獲得化合物 A-25 (12.2 克，產率 72%)。以下提供化合物 A-25 的元素分析結果。

$\text{C}_{57}\text{H}_{39}\text{N}_3$ 的計算值: C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; 實測值: C, 89.71; H, 5.46; N, 5.24

合成實例 6：合成化合物 B-5

<反應流程 16>

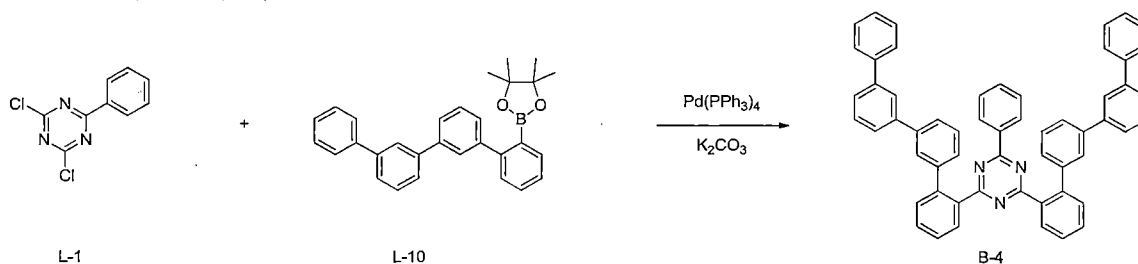


【0082】 將 5.0 克 (22.12 mmol) 的中間物 L-1 (2,4-二氯-6-苯-s-三嗪)、18.12 克 (50.87 mmol) 的中間物 L-9、7.64 克 (55.30 mmol) 的碳酸鉀以及 1.28 克 (1.11 mmol) 的 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (四(三苯基膦)鈀(0)) 加入 250 ml 燒瓶中的 100 ml 的四氫呋喃與 30 ml 的水中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，藉由將所獲得的混合物加入 500 ml 的甲醇以結晶化的固體溶解於一氯化苯中，以矽氧凝膠/矽藻土過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的甲醇再結晶，獲得化合物 B-5 (10.3 克，產率 76%)。以下提供化合物 B-5 的元素分析結果。

$C_{45}H_{31}N_3$ 的計算值:C, 88.06; H, 5.09; N, 6.85;實測值:C, 87.84;
H, 5.134; N, 6.75

合成實例 7：合成化合物 B-4

<反應流程 17>

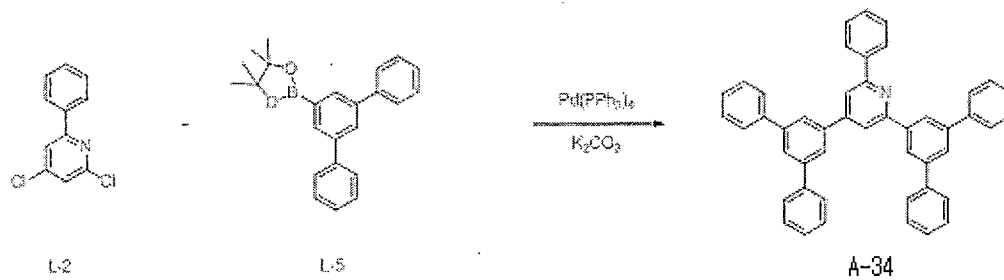


【0083】 將 5.0 克 (22.12 mmol) 的中間物 L-1 (2,4-二氯-6-苯-s-三嗪)、21.99 克 (46.60 mmol) 的中間物 L-10、7.64 克 (55.30 mmol) 的碳酸鉀以及 1.28 克 (1.11 mmol) 的 Pd(PPh₃)₄ (四(三苯基膦)鈀(0)) 加入 250 ml 燒瓶中的 100 ml 的四氫呋與 30 ml 的水中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將所獲得的混合物加入 500 ml 的甲醇以結晶化的固體，並溶解於一氯化苯中，以矽氧凝膠/矽藻土再次過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的甲醇再結晶，獲得化合物 B-4 (13.2 克，產率 78%)。以下提供化合物 B-4 的元素分析結果。

$C_{57}H_{39}N_3$ 的計算值:C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49;實測值:C, 89.77;
H, 5.36; N, 5.14

合成實例 8：合成化合物 A-34

<反應流程 18>

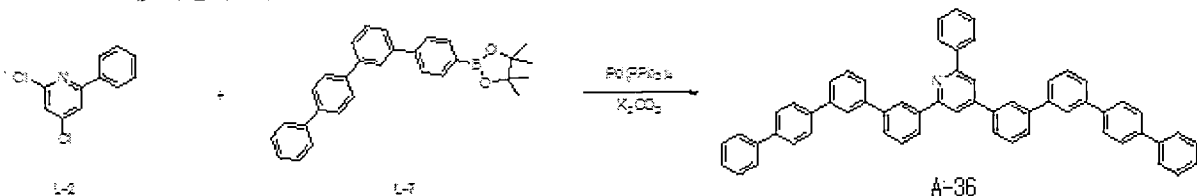


【0084】 將 5.0 克 (22.12 mmol) 的中間物 L-2 (2,4-二氯-6-苯-s-三嗪)、18.28 克 (51.32 mmol) 的中間物 L-5、7.71 克 (55.78 mmol) 的碳酸鉀以及 1.29 克 (1.12 mmol) 的 Pd(PPh₃)₄ (四(三苯基膦)鈀(0)) 加入 250 ml 燒瓶中的 100 ml 的四氫呋喃與 30 ml 的水中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將所獲得的混合物加入 500 ml 的甲醇以結晶化的固體，並溶解於一氯化苯中，以矽氧凝膠/矽藻土再次過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的甲醇再結晶，獲得化合物 A-34 (9.65 克，產率 71%)。以下提供化合物 A-34 的元素分析結果。

C₄₇H₃₃N 的計算值:C, 92.27; H, 5.44; N, 2.29;實測值:C, 92.12; H, 5.23; N, 2.26

合成實例 9：合成化合物 A-36

<反應流程 19>



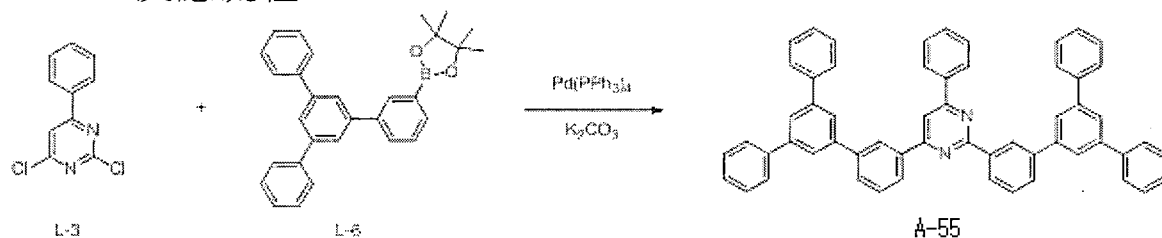
【0085】 將 5.0 克 (22.31 mmol) 的中間物 L-2、21.99 克 (51.32 mmol) 的中間物 L-7、7.71 克 (55.78 mmol) 的碳酸鉀以及 1.29 克 (1.12 mmol) 的 Pd(PPh₃)₄ (四(三苯基膦)鈀(0)) 加入 250 ml 燒瓶中的 100 ml 的四氫呋喃與 30 ml 的水中，且在氮氣流下加熱

並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將所獲得的混合物加入 500 ml 的甲醇以結晶化的固體，並溶解於一氯化苯中，以矽氧凝膠/矽藻土再次過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的甲醇再結晶，獲得化合物 A-36 (14.3 克，產率 84%)。以下提供化合物 A-36 的元素分析結果。

$C_{59}H_{41}N$ 的計算值: C, 92.76; H, 5.41; N, 1.83; 實測值: C, 92.66; H, 5.23; N, 1.75

合成實例 10：合成化合物 A-55

<反應流程 20>



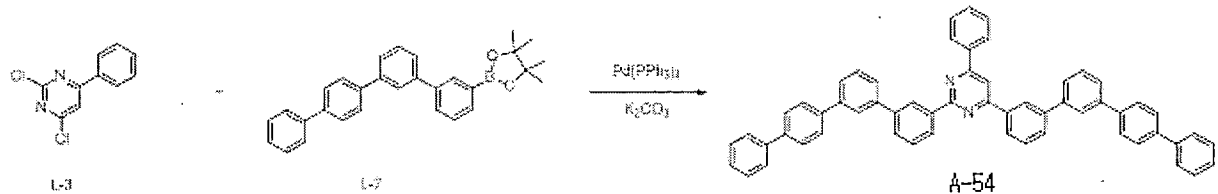
【0086】 將 5.0 克 (22.22 mmol) 的中間物 L-3、22.09 克 (51.1 mmol) 的中間物 L-6、7.68 克 (55.54 mmol) 的碳酸鉀以及 1.28 克 (1.11 mmol) 的 Pd(PPh₃)₄ (四(三苯基膦)鉀(0)) 加入 250 ml 燒瓶中的 100 ml 的四氫呋喃與 30 ml 的水中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將所獲得的混合物加入 500 ml 的甲醇以結晶化的固體，並溶解於一氯化苯中，以矽氧凝膠/矽藻土再次過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的甲醇再結晶，獲得化合物 A-55 (12.68 克，產率 75%)。以下提供化合物 A-55 的元素分析結果。

$C_{58}H_{40}N_2$ 的計算值: C, 91.07; H, 5.27; N, 3.66; 實測值: C, 91.12;

H, 5.17; N, 3.56

合成實例 11：合成化合物 A-54

<反應流程 21>



【0087】 將 5.0 克 (22.22 mmol) 的中間物 L-3、22.09 克 (51.1 mmol) 的中間物 L-7、7.68 克 (55.54 mmol) 的碳酸鉀以及 1.28 克 (1.11 mmol) 的 Pd(PPh₃)₄ (四(三苯基膦)鈀(0)) 加入 250 ml 燒瓶中的 100 ml 的四氫呋喃與 30 ml 的水中，且在氮氣流下加熱並回流混合物 10 小時。接著，過濾藉由將所獲得的混合物加入 500 ml 的甲醇以結晶化的固體，並溶解於一氯化苯中，以矽氧凝膠/矽藻土再次過濾，接著在移除有機溶劑後以適當量的甲醇再結晶，獲得化合物 A-54 (13.12 克，產率 77%)。以下提供化合物 A-54 的元素分析結果。

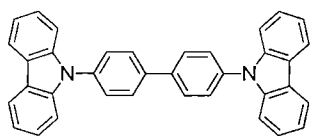
C₅₈H₄₀N₂ 的計算值：C, 91.07; H, 5.27; N, 3.66; 實測值：C, 91.01;

H, 5.12; N, 3.48

比較例 1：合成 CBP

【0088】 以與國際公開案 WO 2013032035 中所揭示相同之方法合成由以下化學式 a 表示之化合物。

化學式 a



所製備化合物的模擬特徵比較

【0089】 藉由使用超級電腦 GAIA (IBM power 6) 以高斯 09 方法 (Gaussian 09 method) 計算各材料之能階，並將結果提供在以下表 1 中。

[表 1]

實例	化合物	HOMO (eV)	LUMO (eV)	T1 (eV)	S1 (eV)
比較例 1	CBP	-5.319	-1.231	2.971	3.560
合成實例 1	A-1	-6.027	-1.868	2.94	3.728
合成實例 2	A-2	-6.041	-1.874	2.883	3.629
合成實例 3	A-5	-6.02	-1.871	2.93	3.737
合成實例 4	A-7	-6.037	-1.922	2.784	3.689
合成實例 5	A-25	-5.965	-1.819	2.941	3.748
合成實例 6	B-5	-5.938	-1.7	3.067	3.638
合成實例 7	B-4	-5.902	-1.682	3.062	3.653
-	B-13	-5.753	-1.687	2.942	3.486
-	A-51	-6.025	-1.694	2.934	3.828
-	A-52	-5.905	-1.706	2.87	3.734
合成實例 10	A-55	-5.922	-1.713	2.905	3.769
合成實例 11	A-54	-5.722	-1.714	2.907	3.672

【0090】 如表 1 中所示，由於當化合物具有模擬中所需 HOMO/LUMO 能階（HOMO 為 -5.0 eV 至 -6.2 eV 且 LUMO 為 -1.65 eV 至 -2.1 eV）時展示電子傳輸特徵，比較例 1 滿足 HOMO 能階但未滿足 LUMO 能階，且因此與化合物 A-1、化合物 A-2、化合物 A-5、化合物 A-7、化合物 A-25、化合物 B-4、化合物 B-5、化合物 B-13、化合物 A-51、化合物 A-52、化合物 A-54 及化合物 A-55 相比，預期電洞與電子之間的不平衡。

【0091】 本發明之化合物與比較例 1 相比具有適當能階，且因此預期展示極好的效率及使用壽命。

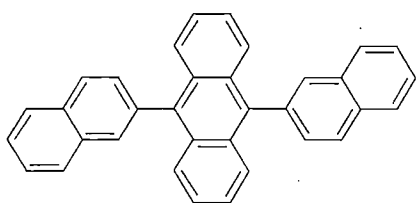
有機發光二極體（包含電子傳輸輔助層的裝置）之製造

裝置實例 1

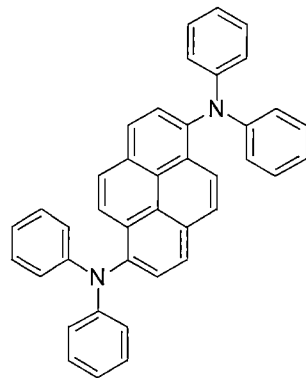
【0092】 使用蒸餾水以超音波洗滌塗布 ITO（indium tin oxide，氧化銦錫）至 1500 Å 厚的玻璃基板。接下來，以諸如異丙醇、丙酮、甲醇等的溶劑超音波洗滌玻璃基板，移動至電漿清潔器，使用氧氣電漿清潔 10 分鐘，接著移動至真空沉積器。獲得的此 ITO 透明電極用作陽極，且將 HT13 真空沉積於 ITO 基板上以形成 1400 Å 厚的電洞注入層。藉由真空沉積作為藍螢光發光主體（摻雜有 5 wt% 的 9,10-雙(2-萘)蒽（9,10-di(2-naphthyl)anthracene，ADN）及 BD01 作為摻雜劑）的 9,10-雙(2-萘)蒽（ADN），以在其上形成 200 Å 厚的發射層。下方展示 AND 及 BD01 的結構。在發射層上真空沉積合成實例 1 的 A-1 以形成 50 Å 厚的電子傳輸輔助層。在電子傳輸輔助層上真空沉積三-(8-羥基喹啉)鋁（Tris(8-hydroxyquinoline)aluminum，Alq3）以形成 310 Å 厚的電

子傳輸層 (ETL)，並在電子傳輸層 (ETL) 上依序地真空沉積 Liq (15 Å) 及 Al (1200 Å) 以形成陰極，製造有機發光二極體。

【0093】 有機發光二極體具有五層有機薄膜結構，且具體而言，
ITO/HT13 1400 Å//EML[ADN:BD01 = 95:5 wt%] 200 Å/化合物 A-1 50 Å/Alq3 310 Å/Liq 15 Å/Al 1200 Å。



ADN



BD01

裝置實例 2

【0094】 根據與實例 1 相同的方法製造有機發光二極體，除了使用合成實例 2 的 A-2 代替合成實例 1 的 A-1。

裝置實例 3

【0095】 根據與實例 1 相同的方法製造有機發光二極體，除了使用合成實例 3 的 A-5 代替合成實例 1 的 A-1。

裝置實例 4

【0096】 根據與實例 1 相同的方法製造有機發光二極體，除了使用合成實例 4 的 A-7 代替合成實例 1 的 A-1。

裝置實例 5

【0097】 根據與實例 1 相同的方法製造有機發光二極體，除了使用合成實例 5 的 A-25 代替合成實例 1 的 A-1。

裝置比較例 1

【0098】 根據與實例 1 相同的方法製造有機發光二極體，除了不使用電子傳輸輔助層。

評估

【0099】 測量隨根據裝置實例 1、裝置實例 2、裝置實例 3、裝置實例 4 及裝置實例 5 以及裝置比較例 1 的每一有機發光二極體的電壓、發光效率及使用壽命而變的電流密度和亮度變化。

【0100】 以下為具體測量方法，並且結果提供在表 1 中。

(1) 測量隨電壓變化而變的電流密度變化

在使用電流-電壓計（吉時利（Keithley）2400）使電壓從 0 V 增加到 10 V 的同時，測量所獲得的有機發光二極體的單元裝置中流動的電流值，所測量的電流值除以面積以得出結果。

(2) 測量隨電壓變化而變的亮度變化

在使有機發光二極體電壓從 0 V 增加至 10 V 的同時，使用亮度計（美能達 Cs-1000A（Minolta Cs-1000A））測量亮度。

(3) 測量發光效率

藉由使用來自項目（1）和項目（2）的亮度、電流密度以及電壓（V）計算在相同電流密度（10 mA/cm²）下的電流效率（cd/A）。

(4) 使用壽命

實例 1 以及比較例 1 的有機發光二極體的 T97 使用壽命是測量為在以 750 cd/m^2 作為初始亮度 (cd/m^2) 發光之後當其亮度相對於初始亮度 (cd/m^2) 降低至 97% 的時間，並以 Polanonix 使用壽命測量系統測量其隨時間降低的亮度。

[表 2]

裝置	電子傳輸輔助層	驅動電壓	發光效率	色彩坐標 (x, y)	T97 使用壽命 (h) @750 尼特 (nit)
裝置實例 1	化合物 A-1	5.04	6.2	(0.133, 0.149)	180
裝置實例 2	化合物 A-2	5.18	6.8	(0.133, 0.149)	175
裝置實例 3	化合物 A-5	5.10	6.7	(0.133, 0.149)	170
裝置實例 4	化合物 A-7	5.15	6.6	(0.133, 0.149)	200
裝置實例 5	化合物 A-25	5.15	6.5	(0.133, 0.149)	180
裝置比較例 1	未使用	5	6.8	(0.133, 0.146)	120

【0101】 請參照表 2，相較於依據裝置比較例 1 的有機發光二極體的使用壽命，依據裝置實例 4 的有機發光二極體展示增加約 1.7

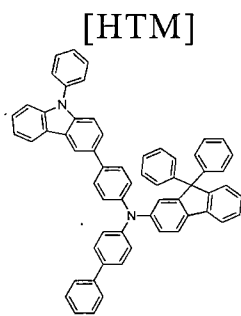
倍的使用壽命，且相較於依據裝置比較例 1 的有機發光二極體的使用壽命，依據裝置實例 1、裝置實例 2、裝置實例 3 及裝置實例 5 的有機發光二極體展示增加約 1.5 倍的使用壽命。因此，證明電子傳輸輔助層改善有機發光二極體的使用壽命特徵。

製造有機發光二極體（使用化合物作為主體的裝置）

裝置比較例 2

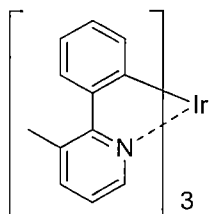
【0102】 具體地說明製造有機發光裝置的方法：藉由將具有 $15 \Omega/\text{cm}^2$ 薄層電阻的 ITO 玻璃基底切割成 $50 \text{ mm} \times 50 \text{ mm} \times 0.7 \text{ mm}$ 的尺寸以製造陽極，分別在丙酮、異丙醇以及純水中以超音波洗滌經切割的基底 15 分鐘，接著以紫外臭氧將其清潔 30 分鐘。

【0103】 接下來，真空沉積以下 HTM 化合物，以在此 ITO 透明電極上形成 1200 \AA 厚的電洞注入層作為 1000 \AA 厚的陽極。



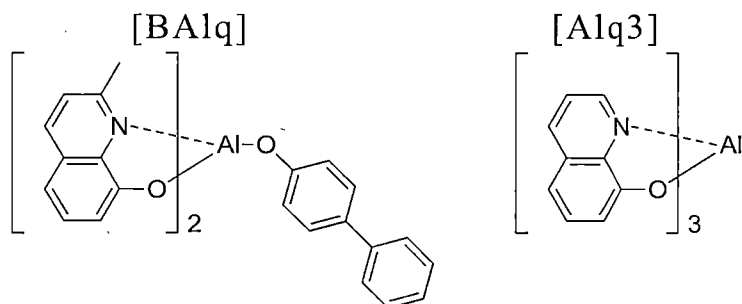
【0104】 真空沉積摻雜有作為磷光綠摻雜劑的 7 wt% 的以下 PhGD 化合物之作為發射層主體的 4,4-N,N-二咔唑基聯苯（4,4-N,N-dicarbazolebiphenyl, CBP）以形成 300 \AA 厚的發射層。





【0105】 接下來，層疊雙(2-甲基-8-羥基喹啉-N1,O8)-(1,1'-聯苯-4-羥基)鋁 (bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum, BAlq) 至 50 Å 厚，且接著層疊 Alq3 至 250 Å 厚，以在發射層上形成電子傳輸層。

【0106】 在電子傳輸層上，依序地真空沉積 LiF 及 Al 分別至 5Å 厚及 1000 Å 厚以形成陰極，製造有機發光裝置。



裝置實例 6

【0107】 根據與裝置比較例 2 相同的方法製造有機發光裝置，除了使用根據合成實例 1 的化合物 A-1 作為發射層的主體。

裝置實例 7

【0108】 根據與裝置比較例 2 相同的方法製造有機發光裝置，除了使用根據合成實例 2 的化合物 A-2 作為發射層的主體。

裝置實例 8

【0109】 根據與裝置比較例 2 相同的方法製造有機發光裝置，除了使用根據合成實例 3 的化合物 A-5 作為發射層的主體。

裝置實例 9

【0110】 根據與裝置比較例 2 相同的方法製造有機發光裝置，除了使用根據合成實例 4 的化合物 A-7 作為發射層的主體。

裝置實例 10

【0111】 根據與裝置比較例 2 相同的方法製造有機發光裝置，除了使用根據合成實例 5 的化合物 A-25 作為發射層的主體。

有機發光二極體的效能測量

【0112】 測量根據裝置實例 6、裝置實例 7、裝置實例 8、裝置實例 9 及裝置實例 10 以及裝置比較例 2 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。

【0113】 以下為具體測量方法，結果展示於下方表 3 中。

(1) 測量隨電壓變化而變的電流密度變化

在使用電流-電壓計(吉時利 2400)使電壓從 0 V 增加到 10 V 的同時，測量所獲得的有機發光二極體的單元裝置中流動的電流值，所測量的電流值除以面積以得出結果。

(2) 測量隨電壓變化而變的亮度變化

在使有機發光二極體電壓從 0 V 增加至 10 V 的同時，使用亮度計(美能達 Cs-1000A)測量亮度。

(3) 測量發光效率

藉由使用來自項目(1)和項目(2)的亮度、電流密度以及電壓(V)計算在相同電流密度(10 mA/cm^2)下的電流效率(cd/A)。

(4) 使用壽命

在使亮度(cd/m^2)維持為 5000 cd/m^2 的同時，測量當電流效率(cd/A)降低至 90%時的時間。

[表 3]

樣本號碼	發射層 (主體)	驅動電 壓 (V)	色彩 (EL 色彩)	效率 (cd/A)	在 5000 cd/m^2 的 90%使用壽命(h)
裝置實例 6	A-1	4.06	綠	58.1	360
裝置實例 7	A-2	4.08	綠	57.6	240
裝置實例 8	A-5	4.28	綠	50.4	380
裝置實例 9	A-7	4.35	綠	50.7	450
裝置實例 10	A-25	4.14	綠	54.2	440
裝置比較例 2	CBP	6.70	綠	34.8	50

【0114】 如表 3 所示，當使用依據本發明的化合物作為發射層的主體時，裝置整體展示 4 V 的早期驅動電壓，相較之下，裝置比較例 2 的驅動電壓升高，且相較於裝置比較例 2 的發光效率，所述裝置展示增加約 1.5 倍的發光效率。再者，依據本發明的化合物展示經改良的特徵，因此相較於裝置比較例 2 展示出偏長的使用壽命。換言之，所述化合物在驅動電壓、發光效率及/或動力效率方面展示經改良的特徵。

【0115】 雖然已經結合目前被認為是實用的示例性實施方式對本發明進行了描述，但是應當理解到，本發明並不限於所公開的實施方式，相反地，旨在涵蓋包括在所附申請專利範圍的精神和範圍內的各種修改和等同安排。因此，上述實施方式應該理解為是示範性的，但不以任何方式限制本發明。

【符號說明】

【0116】

100、200：有機發光二極體

105：有機層

110：陰極

120：陽極

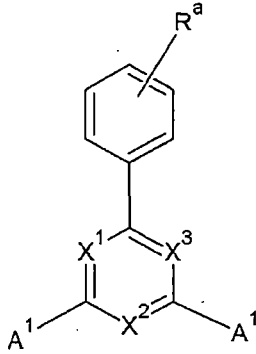
130、230：發射層

140：電洞輔助層

【發明申請專利範圍】

【第1項】一種化合物，由以下化學式1表示：

[化學式1]



其中，在化學式1中，

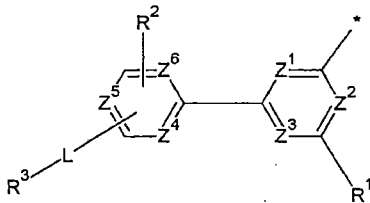
X¹至X³獨立地是N或CR^b，

X¹至X³的至少一者是N，

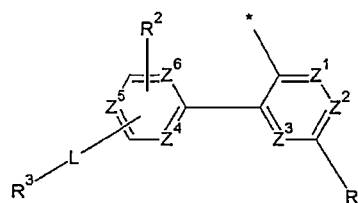
R^a和R^b是氫，以及

A¹是由化學式I或化學式II表示，

[化學式I]



[化學式II]



其中，在化學式I和化學式II中，

Z¹至Z⁶獨立地是C或CH，

R¹和R²是氫，

L是C₆至C₃₀伸芳基，

R³是經取代或未經取代的C₆至C₃₀芳基，

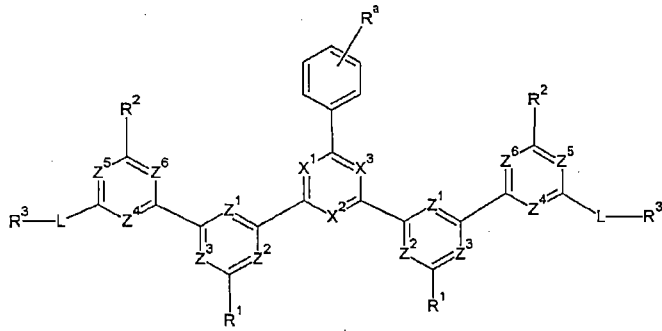
其中「經取代」是指至少一個氫被氬、鹵素、羥基、胺基、

C₁至C₃₀烷基或C₆至C₃₀芳基取代。

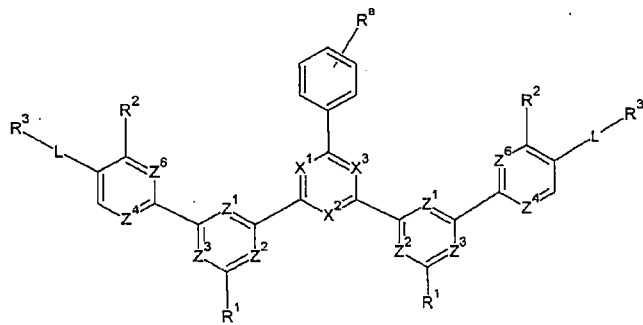
105-08-03

【第2項】如申請專利範圍第1項所述的化合物，其中化學式1是由化學式I-a、化學式I-b、化學式I-c、化學式II-a、化學式II-b及化學式II-c中的一者表示：

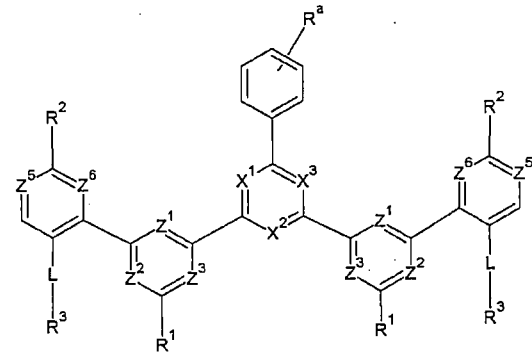
[化學式I-a]



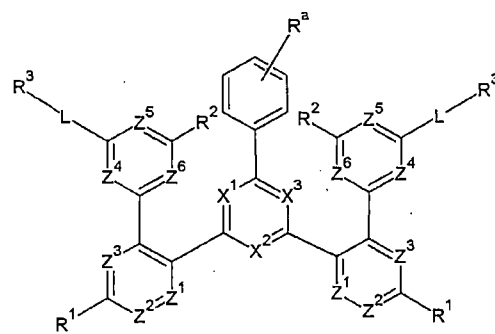
[化學式I-b]



[化學式I-c]



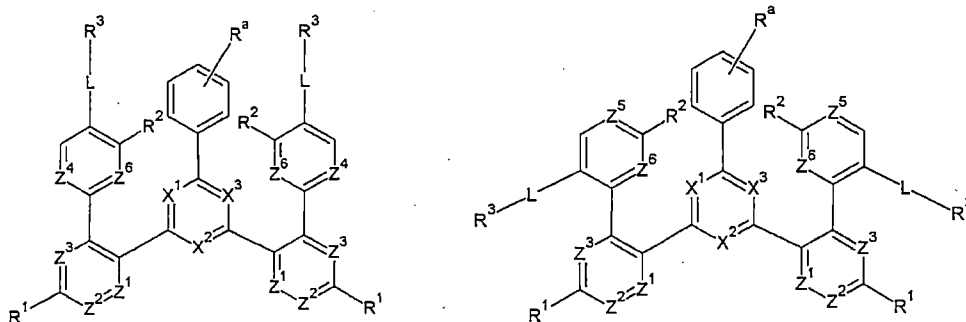
[化學式II-a]



[化學式II-b]

[化學式II-c]

105-08-03



其中，在化學式I-a、化學式I-b、化學式I-c、化學式II-a、化學式II-b及化學式II-c中，

X^1 至 X^3 獨立地是N或 CR^b ，

X^1 至 X^3 的至少一者是N，

R^a 和 R^b 是氫，

Z^1 至 Z^6 是CH，

R^1 和 R^2 是氫，

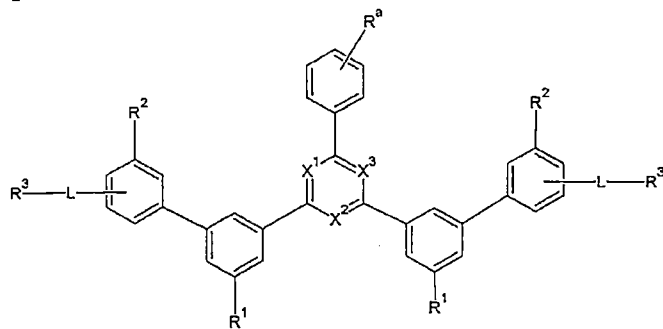
L是C6至C30伸芳基，

R^3 是經取代或未經取代的C6至C30芳基，

其中「經取代」是指至少一個氫被氘、鹵素、羥基、胺基、C1至C30烷基或C6至C30芳基取代。

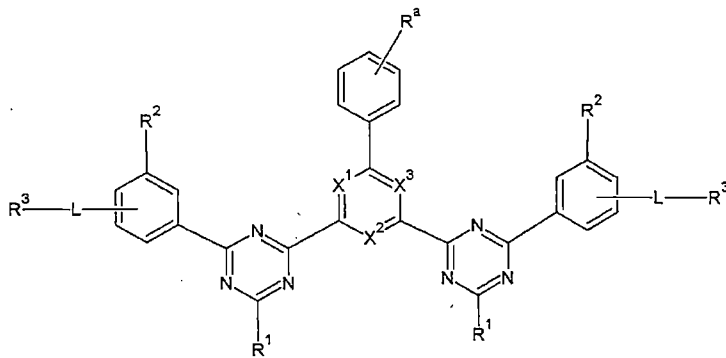
【第3項】如申請專利範圍第1項所述的化合物，其中化學式1是由化學式I-d、化學式I-e、化學式I-f、化學式II-d及化學式II-e中的一者表示：

[化學式I-d]

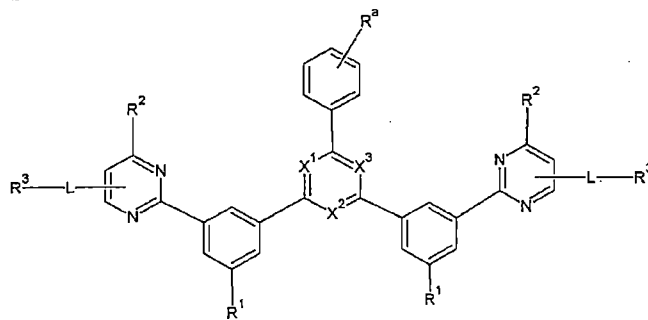


105-08-03

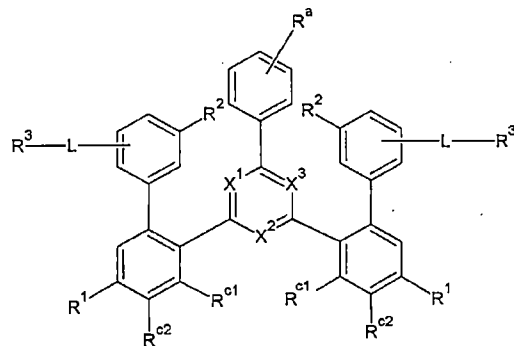
[化學式I-e]



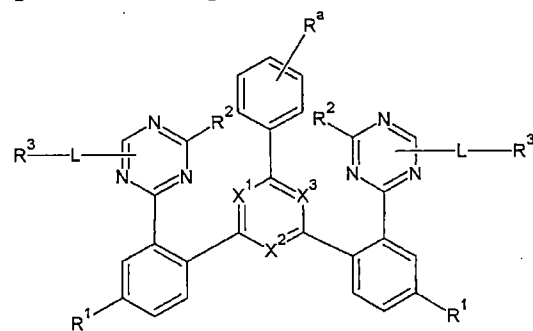
[化學式I-f]



[化學式II-d]



[化學式II-e]



其中，在化學式I-d、化學式I-e、化學式I-f、化學式II-d及化

105-08-03

學式II-e中，

X^1 至 X^3 獨立地是N或 CR^b ，

X^1 至 X^3 的至少一者是N，

R^a 和 R^b 是氫，

R^1 、 R^{c1} 、 R^{c2} 及 R^2 是氫，

L是C6至C30伸芳基，

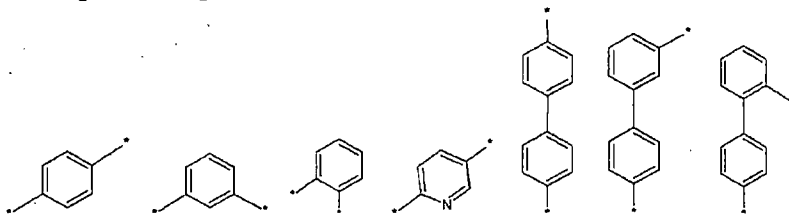
R^3 是經取代或未經取代的C6至C30芳基，

其中「經取代」是指至少一個氫被氬、鹵素、羥基、胺基、C1至C30烷基或C6至C30芳基取代。

【第4項】如申請專利範圍第1項所述的化合物，其中L是未經取代的伸苯基、未經取代的伸聯苯基或未經取代的萘基。

【第5項】如申請專利範圍第1項所述的化合物，其中L選自群組II：

[群組II]



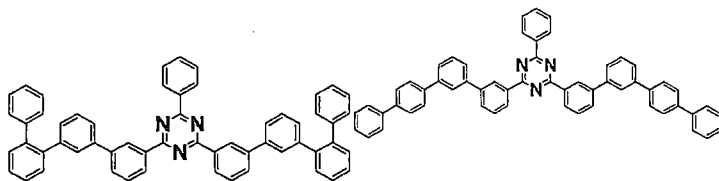
其中，在群組II中，

*是連接點。

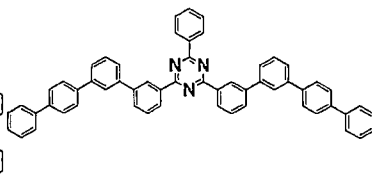
【第6項】如申請專利範圍第1項所述的化合物，其中由化學式1所表示的所述化合物是選自化學式A-6、化學式A-7、化學式A-9、化學式A-10、化學式A-15、化學式A-25、化學式A-29、化學式A-37、化學式A-44、化學式A-45、化學式A-54、化學式A-61、化學式A-62、化學式B-1至化學式B-4、化學式B-8、化學式B-9、化學式B-19至化學式B-21、化學式B-24、化學式B-27與化學式B-30：

105-08-03

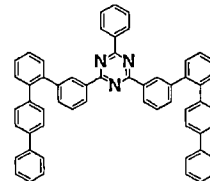
[A-6]



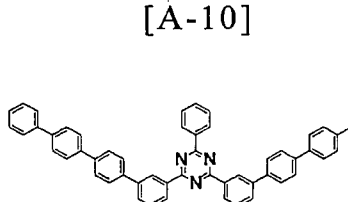
[A-7]



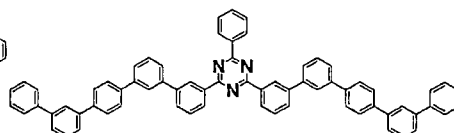
[A-9]



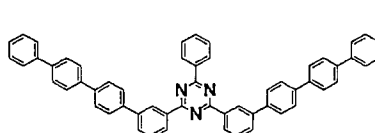
[A-10]



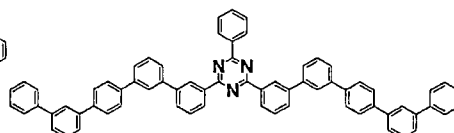
[A-15]



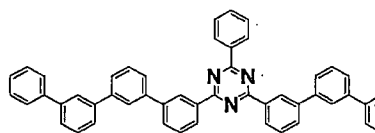
[A-25]



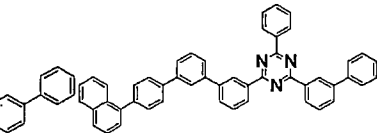
[A-29]



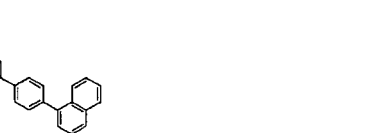
[A-37]



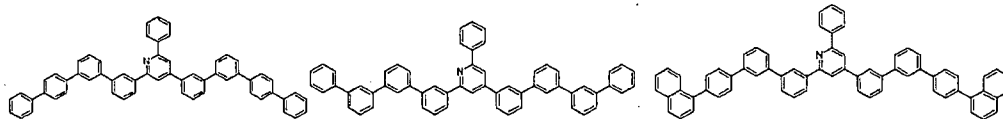
[A-44]



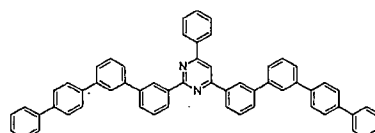
[A-45]



[A-54]



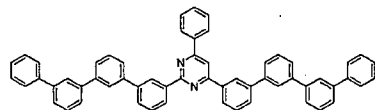
[A-61]



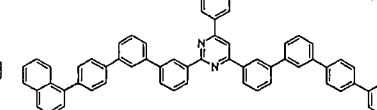
[A-62]



[B-1]



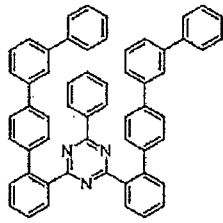
[B-2]



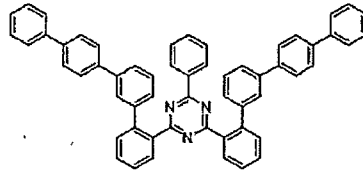
[B-3]



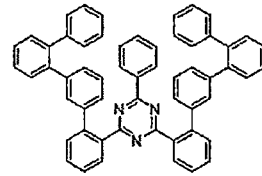
105-08-03



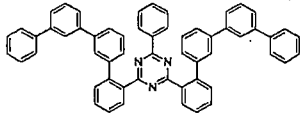
[B-4]



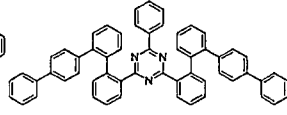
[B-8]



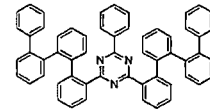
[B-9]



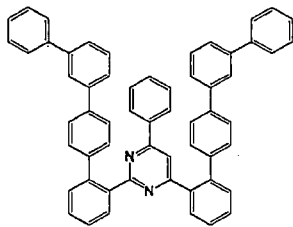
[B-19]



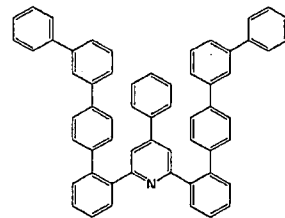
[B-20]



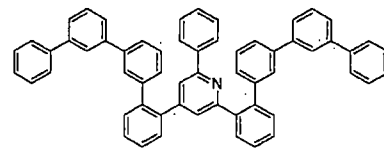
[B-21]



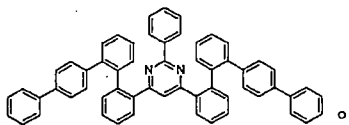
[B-24]



[B-27]



[B-30]



【第7項】如申請專利範圍第1項至第6項中任一項所述的化合物，其中所述化合物是用於有機光電裝置。

【第8項】一種有機光電裝置，包括：

彼此相對的陽極和陰極；以及

至少一有機層，位於所述陽極與所述陰極之間，所述有機層包括如申請專利範圍第1項至第6項中任一項所述的化合物。

105-08-03

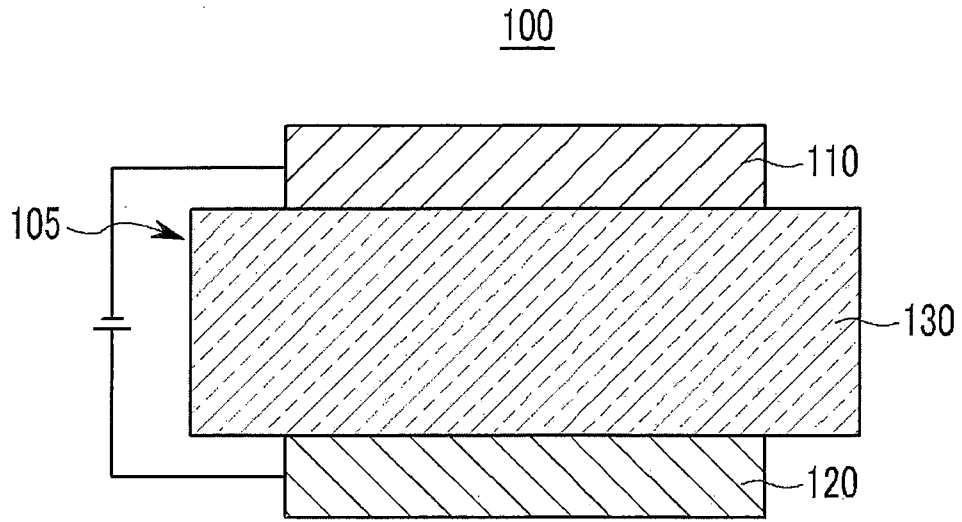
【第9項】如申請專利範圍第8項所述的有機光電裝置，其中所述有機層為發射層，且所述發射層包括所述化合物。

【第10項】如申請專利範圍第9項所述的有機光電裝置，其中所述化合物經包含以作為所述發射層的主體。

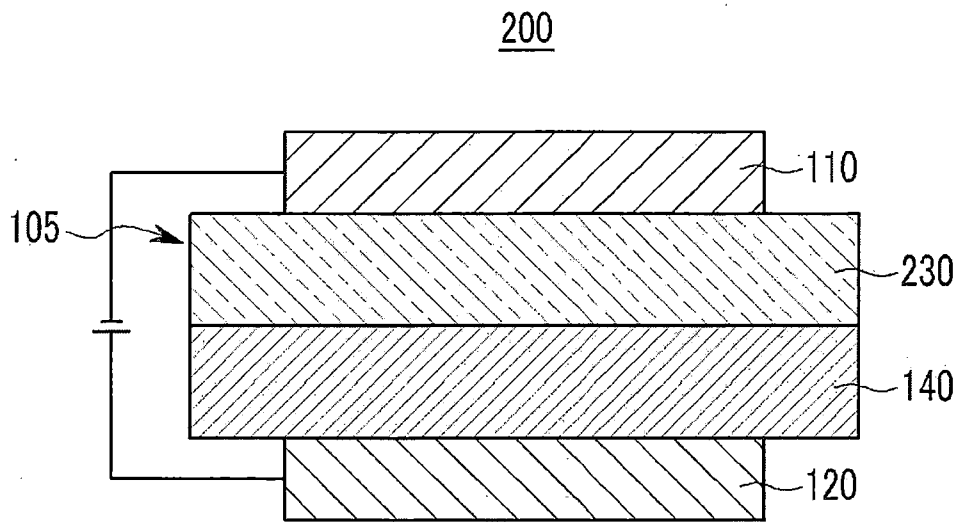
【第11項】如申請專利範圍第8項所述的有機光電裝置，其中所述有機層包括至少一輔助層，所述輔助層選自電洞注入層（HTL）、電洞傳輸層（HTL）、電洞傳輸輔助層、電子傳輸輔助層、電子傳輸層（ETL）以及電子注入層（EIL），所述輔助層包括所述化合物。

【第12項】一種顯示裝置，包括如申請專利範圍第8項所述的有機光電裝置。

【發明圖式】



【圖1】



【圖2】