



(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 201529575 A

(43) 公開日：中華民國 104 (2015) 年 08 月 01 日

(21) 申請案號：104112487

(22) 申請日：中華民國 98 (2009) 年 12 月 11 日

(51) Int. Cl. :

*C07D471/04 (2006.01)**C07F15/00 (2006.01)**C09K11/06 (2006.01)**H01L51/50 (2006.01)*

(30) 優先權：2008/12/12 美國

61/122,259

2009/12/07 美國

12/632,251

(71) 申請人：環球展覽公司 (美國) UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION (US)

美國

(72) 發明人：蔡久宜 TSAI, JUI YI (TW)；亞吉爾 渥特 YEAGER, WALTER (US)；布魯克斯 傑森 BROOKS, JASON (US)；比爾斯 史考特 BEERS, SCOTT (US)；寇塔司 葛雷葛瑞 KOTTAS, GREGORY (US)；巴爾朗 愛得華 BARRON, EDWARD (US)；鄺志遠 KWONG, RAYMOND (US)

(74) 代理人：陳長文

申請實體審查：有 申請專利範圍項數：18 項 圖式數：3 共 68 頁

(54) 名稱

以咪唑并 [1, 2-f] 啡啶銱錯合物為主之高效能藍光發射體

BLUE EMITTER WITH HIGH EFFICIENCY BASED ON IMIDAZO[1,2-F]PHENANTHRIDINE  
IRIDIUM COMPLEXES

(57) 摘要

本發明提供咪唑并[1,2-f]啡啶化合物。該等化合物具有扭曲芳基部分，其進一步由具有 4 個或更多個原子之烷基取代。該等化合物可尤其作為發射摻雜物用於有機發光裝置中，從而提供具有經改良效能、穩定性及製造之裝置。具體而言，本文所提供化合物可用於具有高效能之藍光裝置中。

Imidazo[1,2-f]phenanthridine compounds are provided. The compounds have a twisted aryl moiety further substituted by alkyl having four or more atoms. The compounds may be used in organic light emitting devices, particularly as emissive dopants, providing devices with improved efficiency, stability, and manufacturing. In particular, the compounds provided herein may be used in blue devices having high efficiency.

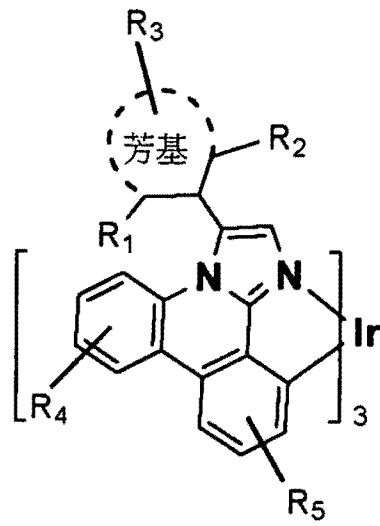
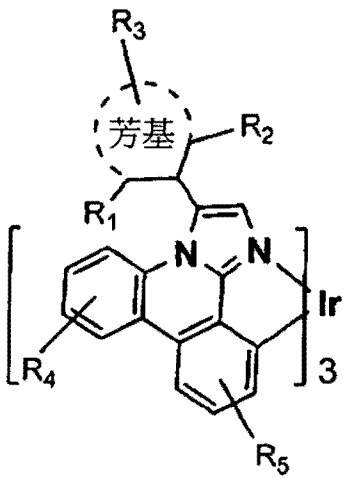


圖3



201529575

## 發明摘要

※ 申請案號：

104112487 (由9842607分割)

※ 申請日：

98.12.11

※IPC 分類：C07D 471/04 (2006.01)

C07F 15/00 (2006.01)

C09K 11/06 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

## 【發明名稱】

以咪唑并[1,2-f]啡啉銱錯合物為主之高效能藍光發射體

BLUE EMITTER WITH HIGH EFFICIENCY BASED ON

IMIDAZO[1,2-f]PHENANTHRIDINE IRIIDIUM COMPLEXES

## ● 【中文】

本發明提供咪唑并[1,2-f]啡啉化合物。該等化合物具有扭曲芳基部分，其進一步由具有4個或更多個原子之烷基取代。該等化合物可尤其作為發射摻雜物用於有機發光裝置中，從而提供具有經改良效能、穩定性及製造之裝置。具體而言，本文所提供化合物可用於具有高效能之藍光裝置中。

## ● 【英文】

Imidazo[1,2-f]phenanthridine compounds are provided. The compounds have a twisted aryl moiety further substituted by alkyl having four or more atoms. The compounds may be used in organic light emitting devices, particularly as emissive dopants, providing devices with improved efficiency, stability, and manufacturing. In particular, the compounds provided herein may be used in blue devices having high efficiency.

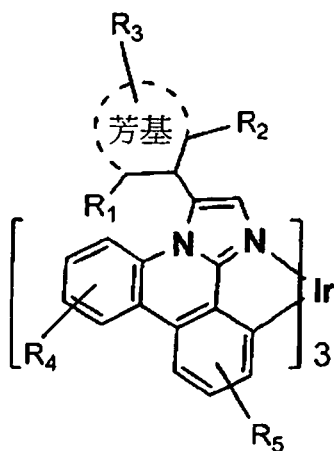
**【代表圖】**

【本案指定代表圖】：第（3）圖。

【本代表圖之符號簡單說明】：

無

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：



# 發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動)

## 【發明名稱】

以咪唑并[1,2-f]啡啶銱錯合物為主之高效能藍光發射體  
BLUE EMITTER WITH HIGH EFFICIENCY BASED ON  
IMIDAZO[1,2-f]PHENANTHRIDINE IRIDIUM COMPLEXES

## 【技術領域】

本發明係關於有機發光裝置(OLED)，且具體而言係關於此等裝置中所用之磷光有機材料。更具體而言，本發明係關於咪唑并[1,2-f]啡啶化合物及含有該等化合物之裝置。

本申請案主張於2008年12月12日提出申請的美國臨時申請案第61/122,259號之優先權，其全文以引用方式明確地併入本文中。

所主張發明係由、代表及/或結合聯合大學協作研究協定的以下各方中之一方或多方來完成：密歇根大學校董會、普林斯頓大學、南加州大學及Universal Display公司。該協定在完成所主張發明之日期及其之前有效，且所主張發明係作為在該協定之範疇內所採取之活動之結果來完成。

## 【先前技術】

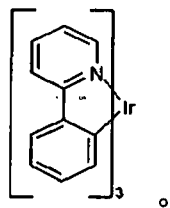
多種原因使得使用有機材料之光電子裝置變得越來越理想。用於製造此等裝置之許多材料價格相對較低廉，故有機光電子裝置較無機裝置具有成本優勢之潛力。此外，有機材料之固有性質(例如其撓性)使其極適用於特定應用中，例如於撓性基板上之製作。有機光電子裝置之實例包括有機發光裝置(OLED)、有機光電電晶體、有機光伏打電池及有機光檢測器。對於OLED，有機材料可具有優於習用材料之性能優勢。舉例而言，有機發射層所發射光之波長通常可容易地

用適當摻雜物進行調節。

OLED使用當在該裝置兩端施加電壓時可發光之薄有機膜。在諸如平板顯示器、照明及背光等應用中使用OLED正變成越來越令人感興趣之技術。許多OLED材料及構造闡述於美國專利第5,844,363號、第6,303,238號及第5,707,745號中，該等專利之全文以引用方式併入本文中。

磷光發射分子的一種應用係全色彩顯示器。此顯示器之工業標準要求適於發射特定色彩(稱為「飽和」色)之像素。具體而言，該等標準要求飽和紅色、綠色及藍色像素。色彩可使用為業內所熟知之CIE坐標來量測。

綠色發射分子之一個實例係叁(2-苯基吡啶)銱(表示為Ir(ppy)<sub>3</sub>)，其具有式I結構：



在此處及本文隨後圖中，將自氮至金屬(此處為Ir)之配位鍵繪示成直線。

本文所用術語「有機物」包括可用於製作有機光電子裝置之聚合物材料以及小分子有機材料。「小分子」意指任何不為聚合物之有機材料，且「小分子」實際上可相當大。在一些情況下，小分子可包括重複單元。舉例而言，使用長鏈烷基作為取代基不能將分子排除在「小分子」家族外。小分子亦可納入聚合物中，例如作為聚合物骨架上之側基或作為骨架之一部分。小分子亦可用作樹枝狀聚合物之核心部分，樹枝狀聚合物係由一系列構築於核心部分上之化學殼層組成。樹枝狀聚合物之核心部分可為螢光或磷光小分子發射體。樹枝狀聚合

物可為「小分子」，且據信當前用於OLED領域之所有樹枝狀聚合物皆為小分子。

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

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

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

如本文所用且如熟習此項技術者通常所熟知，若第一「最高佔據分子軌道」(HOMO)或「最低未佔據分子軌道」(LUMO)能階距真空能階更近，則該第一能階「大於」或「高於」第二HOMO或LUMO能階。由於電離電位(IP)量測為相對於真空能階之負能量，故較高HOMO能階對應於具有較小絕對值之IP(不太負之IP)。類似地，較高LUMO能階對應於具有較小絕對值之電子親和力(EA)(不太負之EA)。在真空能階位於頂部之習用能階圖上，材料之LUMO能階高於同一材料之HOMO能階。「更高」HOMO或LUMO能階看來較「更低」HOMO或LUMO能階更接近此圖之頂部。

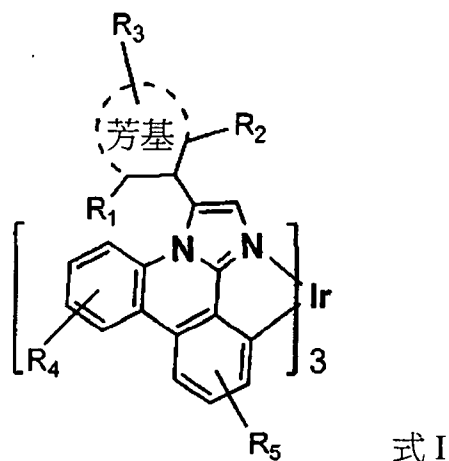
如本文所用且如熟習此項技術者通常所熟知，若第一功函數具有較高絕對值，則該第一功函數「大於」或「高於」第二功函數。由於功函數通常量測為相對於真空能階之負數，故此意指功函數「越高」則負值越大。在真空能階位於頂部之習用能階圖上，「較高」功

函數繪示為沿向下方向遠離真空能階。因此，HOMO及LUMO能階之定義遵循不同於功函數之慣例。

關於 OLED、及上述定義之更詳細內容可見於美國專利第 7,279,704 號中，其全文以引用方式併入本文中。

### 【發明內容】

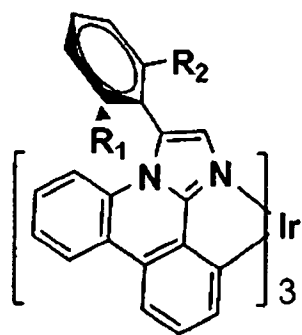
本發明提供具有下式之化合物：



$R_1$ 及 $R_2$ 獨立選自由氫、烷基及芳基組成之群。 $R_1$ 及 $R_2$ 中至少一個係具有4個或更多個原子之烷基。 $R_3$ 、 $R_4$ 及 $R_5$ 可代表單、二、三或四取代。 $R_3$ 、 $R_4$ 及 $R_5$ 獨立選自由氫、烷基及芳基組成之群。在一個態樣中， $R_1$ 與 $R_2$ 相同。在另一態樣中， $R_1$ 與 $R_2$ 不同。在再一態樣中， $R_1$ 及 $R_2$ 之一係芳基。

具有4個或更多個原子之烷基可為具支鏈烷基、環狀烷基、二環烷基或多環烷基。

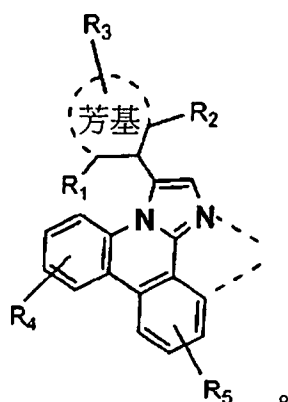
在一個態樣中，具有4個或更多個原子之烷基可含有所有碳原子。在另一態樣中，具有4個或更多個原子之烷基可為經取代烷基，其可進一步含有氧原子、氮原子及硫原子中之至少一者。



該化合物可具有式。

提供該化合物之具體實例，包括化合物1至36。較佳地，該化合物係化合物1或化合物2。

另外提供包括配位體之化合物。該配位體具有下式：



$R_1$ 及 $R_2$ 獨立選自由氫、烷基及芳基組成之群，且 $R_1$ 及 $R_2$ 中至少一個係具有4個或更多個原子之烷基。 $R_3$ 、 $R_4$ 及 $R_5$ 可代表單、二、三或四取代。 $R_3$ 、 $R_4$ 及 $R_5$ 獨立選自由氫、烷基及芳基組成之群。

亦提供一種有機發光裝置。該裝置具有陽極、陰極及佈置於該陽極與該陰極間之有機層。該有機層進一步包含具有式I之化合物。較佳地，該有機層係具有主體材料及發射摻雜物之發射層，且該化合物係該發射摻雜物。

亦提供消費產品。該產品含有具有陽極、陰極及佈置於該陽極與該陰極間之有機層之裝置，其中該有機層進一步包含具有式I之化合物。

### 【圖式簡單說明】

圖1展示有機發光裝置。

圖2展示不具有單獨的電子傳送層之倒置有機發光裝置。

圖3展示咪唑并[1,2-f]吡啶化合物。

### 【實施方式】

通常，OLED包含至少一個佈置於陽極與陰極間且與其電連結之有機層。當施加電流時，陽極將電洞注入有機層，且陰極將電子注入有機層。所注入電洞及電子各自朝向帶相反電荷之電極遷移。當電子與電洞位於同一分子上時，形成「激發子」，即具有激發態之定域電子-電洞對。當該激發子經由光電發射機制弛豫時，發射光。在一些情形中，激發子可位於激基締合物或激基複合物上。亦可存在非輻射機制(例如熱弛豫)，但通常認為其不理想。

初始OLED使用可自其單重態發光(「螢光」)之發射分子，如(例如)美國專利第4,769,292號中所揭示，該案之全文以引用方式併入本文中。螢光發射通常在小於10奈秒之時間訊框內發生。

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

圖1展示有機發光裝置100。該等圖不必按比例繪製。裝置100可包括基板110、陽極115、電洞注入層120、電洞傳送層125、電子阻擋層130、發射層135、電洞阻擋層140、電子傳送層145、電子注入層150、保護層155及陰極160。陰極160係具有第一導電層162及第二導電層164之複合陰極。裝置100可藉由按順序沈積所述層來製作。該等

各種層之性質及功能以及實例材料更詳細闡述於美國專利第7,279,704號第至10行中，其以引用方式併入。

提供該等層中每一層之更多實例。舉例而言，撓性及透明基板-陽極組合揭示於美國專利第5,844,363號中，其全文以引用方式併入本文中。經p-摻雜之電洞傳送層之實例係經T.sub.4-TCNQ以50:1之莫耳比摻雜之m-MTDATA，如美國專利申請公開案第2003/0230980號中所揭示，該案之全文以引用方式併入本文中。發射及主體材料之實例揭示於頒予Thompson等人之美國專利第6,303,238號中，該案之全文以引用方式併入本文中。經n-摻雜電子傳送層之實例係Li以1:1之莫耳比摻雜之Bphen，如美國專利申請公開案第2003/0230980號中所揭示，該案之全文以引用方式併入本文中。美國專利第5,703,436號及第5,707,745號(其全文以引用方式併入本文中)揭示多種陰極實例，其包括具有薄金屬層(例如Mg:Ag)以及上覆透明導電、濺鍍沈積之ITO層的複合陰極。阻擋層之理論及用途更詳細闡述於美國專利第6,097,147號及美國專利申請公開案第2003/0230980號中，其全文以引用方式併入本文中。注入層之實例提供於美國專利申請公開案第2004/0174116號中，其全文以引用方式併入本文中。保護層之闡述可見於美國專利申請公開案第2004/0174116號中，其全文以引用方式併入本文中。

圖2展示倒置OLED 200。該裝置包括基板210、陰極215、發射層220、電洞傳送層225及陽極230。裝置200可藉由按順序沈積所述層來製作。由於最常用之OLED構造具有佈置於陽極上之陰極，且裝置200具有佈置於陽極230下之陰極215，故裝置200可稱為「倒置」OLED。與彼等針對裝置100所闡述者相似之材料可用於裝置200之對應層中。圖2提供一個如何自裝置100之結構省略一些層之實例。

以非限制性實例形式提供圖1及2中所繪示之簡單分層結構，且應瞭解，本發明之實施例可結合眾多種其他結構使用。所闡述之具體

材料及結構實際上具有例示性，且可使用其他材料及結構。基於設計、性能及成本因素，藉由以不同方式組合所述各種層可達成功能 OLED，或可完全省略多個層。亦可包含未具體闡述之其他層。可使用不同於彼等具體闡述材料之材料。儘管本文所提供之許多實例闡述各種層為包含單一材料，但應瞭解，可使用材料之組合(例如主體材料與摻雜物之混合物)或更通常可使用混合物。而且，該等層可具有各種子層。本文中給定用於各種層之名稱不意欲具有嚴格限制性。舉例而言，在裝置200中，電洞傳送層225傳送電洞並將電洞注入發射層220中，且其可闡述為電洞傳送層或電洞注入層。在一個實施例中，OLED可闡述為具有佈置於陰極與陽極間之「有機層」。該有機層可包含單一層，或可進一步包含(例如)參照圖1及2所述不同有機材料之多層。

亦可使用未具體闡述之結構及材料，例如由聚合物材料構成之 OLED (PLED)，例如揭示於頒予Friend等人之美國專利第5,247,190號中者，該案之全文以引用方式併入本文中。進一步舉例而言，可使用具有單一有機層之 OLED。OLED可經堆疊，例如在頒予Forrest等人之美國專利第5,707,745號中所述者，該案之全文以引用方式併入本文中。OLED結構可與圖1及2中所示之簡單分層結構有偏差。舉例而言，基板可包括成角度之反射表面以改良輸出耦合，例如頒予Forrest等人之美國專利第6,091,195號中所述之臺面結構及/或頒予Bulovic等人之美國專利第5,834,893號中所述之凹坑結構，該等專利之全文以引用方式併入本文中。

除非另有說明，否則各實施例之任何層皆可藉由任何適宜方法來沈積。對於有機層而言，較佳方法包括熱蒸發、噴墨(例如在美國專利第6,013,982號及第6,087,196號中所述者，該等專利之全文以引用方式併入本文中)、有機氣相沈積(OVPD)(例如頒予Forrest等人之美

國專利第6,337,102號中所述者，該案之全文以引用方式併入本文中)及藉由有機物蒸氣噴射印刷(OVJP)沈積(例如闡述於美國專利申請案第10/233,470號中者，該案之全文以引用方式併入本文中)。其他適宜沈積方法包括旋轉塗佈及其他基於溶液之方法。基於溶液之方法較佳於氮氣或惰性氣氛下實施。對於其他層而言，較佳方法包括熱蒸發。較佳圖案化方法包括藉助遮罩沈積、冷鐳(例如闡述於美國專利第6,294,398號及第6,468,819號中者，該等專利之全文以引用方式併入本文中)及與一些沈積方法(例如噴墨及OVJD)相關之圖案化方法。亦可使用其他方法。擬沈積之材料可經修飾以使其能適合特定沈積方法。舉例而言，在小分子中可使用諸如具支鏈或無支鏈且較佳含有至少3個碳之烷基及芳基等取代基以增強其進行溶液處理之能力。可使用具有20個碳或更多個碳之取代基，且3至20個碳係較佳範圍。具有不對稱結構之材料可較彼等具有對稱結構之材料具有更佳溶液處理能力，此乃因不對稱材料可具有更低重結晶傾向。樹枝狀聚合物取代基可用於增強小分子經受溶液處理之能力。

根據本發明之實施例所製作之裝置可納入眾多種消費產品中，其包括平板顯示器、電腦監視器、電視、廣告牌、內部或外部照明燈及/或信號燈、抬頭顯示器、全透明顯示器、撓性顯示器、雷射印刷機、電話、行動電話、個人數位助理(PDA)、膝上型電腦、數字照相機、便攜式攝錄影機、取景器、微顯示器、車輛、大面積牆壁、影院或露天大型運動場顯示屏或招牌。可使用各種控制機制來控制根據本發明所製作之裝置，其包括被動矩陣及主動矩陣。許多裝置意欲用於使人感覺舒適之溫度範圍內，例如18°C至30°C，且更佳於室溫下(20-25°C)。

本文所述材料及結構可應用於除OLED以外之裝置中。舉例而言，其他光電子裝置(例如有機太陽能電池及有機光檢測器)可採用該

等材料及結構。更一般而言，有機裝置(例如有機電晶體)可採用該等材料及結構。

術語鹵基、鹵素、烷基、環烷基、烯基、炔基、芳烷基、雜環基團、芳基、芳族基團及雜芳基已為業內所熟知，且定義於美國專利第7,279,704號第31至32行中，其以引用方式併入本文中。

提供咪唑并[1,2-f]啡啶(本文稱為「咪唑并啡啶」)化合物，其含有進一步經具有4個或更多個原子之烷基取代之扭曲芳基部分。圖3展示此等經取代咪唑并啡啶化合物之結構。該等化合物可用於磷光有機發光裝置中以提供高效能、高穩定性、長壽命、經改良製造及經改良顏色。具體而言，含有作為發射材料之咪唑并[1,2-f]啡啶銥錯合物(其含有進一步經龐大烷基(即，含有4個或更多個原子之烷基)取代之扭曲芳基部分)之磷光有機發光裝置可具有顯著高於含有缺少經龐大烷基取代之扭曲芳基之發射材料的裝置之效能。該等化合物可用作彩色OLED及白色OLED中之磷光發射摻雜物。具體而言，該等化合物可用作高效能藍色磷光OLED中之發射摻雜物。特別期望研發適用於發射裝置中之摻雜物材料，例如本文所提供經取代咪唑并啡啶化合物。

銥咪唑并[1,2-f]啡啶錯合物含有進一步在2及/或n位經取代之扭曲芳基部分，其中n係芳基部分中之原子數，且連結至咪唑之芳基部分之原子係1位，烷基具有4個或更多個原子。該等含有龐大烷基之化合物可具有高光致發光(PL)及高電致發光(EL)效能。不受限於理論，據信扭曲芳基上之龐大烷基取代基向對自身淬滅相互作用尤其敏感之咪唑提供位阻保護。咪唑因較高極性而易於堆疊，且咪唑環堆疊可經由自身淬滅而容易使錯合物之活性狀態失活。據認為存在於該化合物扭曲芳基部分上之龐大烷基取代基可阻止咪唑環堆疊，藉此抑制自身淬滅。具體而言，具有4個或更多個原子之2, n烷基之三維排列特別有利於保護咪唑雜環。此外，由2, n龐大烷基取代基所提供位阻保護可

隨後使量子產率增加。因此，向芳基添加龐大烷基可改良裝置效能及裝置壽命。

儘管經取代咪唑并啡啶化合物及其在OLED中之用途已為吾人所熟知，但含有該等化合物之裝置可能具有若干問題。舉例而言，如表2中所展示，例如在比較實例1中用烷基在咪唑并啡啶之2位實施取代可獲得高PL及EL效能，但裝置壽命較短。另一實例係(例如)在比較實例2中位於具有較不龐大之 $R_1$ 及 $R_2$ 基團(例如，含有1個、2個或3個原子之烷基)之咪唑并啡啶之3位之扭曲芳基，其可提高裝置壽命，但PL效能較低，由此導致裝置效能較低。因此，期望研發可提供高裝置效能及高裝置壽命之摻雜物。

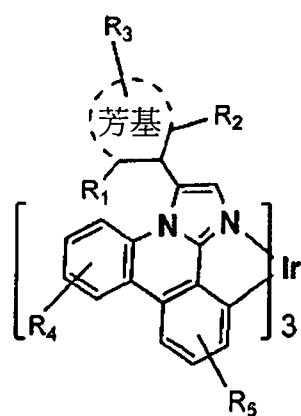
為了提高效率並維持壽命，向咪唑并啡啶化合物扭曲芳基部分之2及/或n位添加龐大烷基以合成化合物。據信烷基大小(即，具有4個或更多個原子之龐大烷基)與取代位點(即，扭曲芳基部分之2及/或n位)二者對於本文所提供化合物之有益性質而言較為重要。如上所述，龐大烷基可改良量子產率並提供高效能，此可能歸於咪唑之位阻保護。龐大烷基取代基亦可藉由保護咪唑免於與氧反應(降低量子產率之途徑)來改良發光量子產率。同樣，據認為龐大烷基之位置對於獲得增加的量子產率亦非常重要。舉例而言，在咪唑并啡啶化合物之另一位置上含有龐大烷基取代基之化合物可不表現相同EL及PL(參見表2中之比較實例3)。此外，本文所提供化合物可提供具有長壽命之裝置。舉例而言，本發明化合物(例如化合物1及2)之裝置壽命可顯著長於缺少經龐大烷基取代之扭曲芳基的其他咪唑并啡啶化合物之裝置壽命(參見表2)。此外，2及n位之某些龐大烷基可提供較徹底昇華，由此可改良裝置性能及處理性。

亦提供不對稱化合物，其中 $R_1$ 與 $R_2$ 不相同，但 $R_1$ 及 $R_2$ 中至少一個係具有4個或更多個原子之烷基。該等不對稱化合物可提供經改良壽

命及效能以及提供若干額外優勢。舉例而言，不對稱化合物可提供昇華及處理優勢。不對稱化合物可維持上述對稱化合物之優勢，並可進一步受益於在 $R_1$ 及 $R_2$ 之另一處具有較不龐大(例如，氫、具有3個或更少個原子之烷基)取代基。藉由具有一個較不龐大取代基及一個較龐大取代基，該等化合物可具有較低分子量並由此可預期具有較低昇華溫度同時保持高發光量子產率之益處。因此，不對稱化合物可提供用以進一步調節具有裝置壽命及裝置穩定性之有益性質的發射摻雜物之性質之手段。

此外，合成本文所提供含有進一步由具有4個或更多個原子之烷基取代之扭曲芳基之咪唑并啡啶化合物僅涉及一個中間體。因此，合成該等化合物可優於合成其他化合物，該等其他化合物需要更多步驟及更多中間體以便生成產物。

提供具有下式之咪唑并[1,2-f]啡啶化合物，其可有利地用於OLED中：



式 I

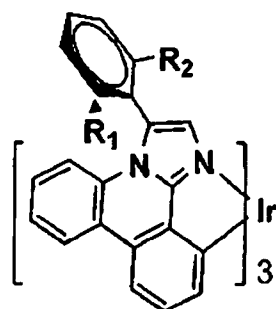
其中 $R_1$ 及 $R_2$ 獨立選自由氫、烷基及芳基組成之群，且 $R_1$ 及 $R_2$ 中至少一個係具有4個或更多個原子之烷基。 $R_3$ 、 $R_4$ 及 $R_5$ 可代表單、二、三或四取代，且 $R_3$ 、 $R_4$ 及 $R_5$ 獨立選自由氫、烷基及芳基組成之群。在一個態樣中， $R_1$ 與 $R_2$ 相同。在另一態樣中， $R_1$ 與 $R_2$ 不同。在再一態樣中， $R_1$ 及 $R_2$ 之一係芳基。

在一個態樣中，具有4個或更多個原子之烷基係具支鏈烷基。具

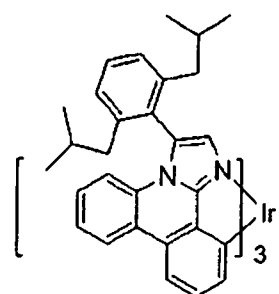
有4個或更多個原子之具支鏈烷基取代基可藉由提供額外體積(即，更多個原子)來進一步阻止咪唑環堆疊，由此增加藉由龐大烷基取代基所提供位阻保護並改良量子產率。在另一態樣中，具有4個或更多個原子之烷基係環狀烷基。具體而言，環狀烷基可為二環烷基及多環烷基。類似地，在R<sub>1</sub>及R<sub>2</sub>處存在環狀、二環及/或多環烷基可提供增加的體積及更大的位阻保護，由此改良量子產率。

在一個態樣中，具有4個或更多個原子之烷基僅含有碳原子。在另一態樣中，具有4個或更多個原子之烷基係雜烷基。本文所用「雜烷基」係指具有4個或更多個原子之烷基，其中該等原子中至少一個係常用雜原子。本文所用「雜原子」係指除碳或氫以外之原子，包括(但不限於)氧、氮、磷、硫、硒、砷、氯、溴、矽及氟。較佳地，雜烷基含有氧原子。雜烷基取代基用作吸電子基團，由此降低LUMO能階(即，增加電子穩定性)並改良裝置穩定性。此外，基於標準計算，雜烷基可使該化合物產生最小紅移。因此，該等化合物提供良好藍光發射以及經改良穩定性、壽命及處理性。

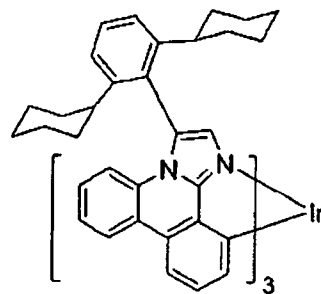
在一個態樣中，該化合物具有以下式：



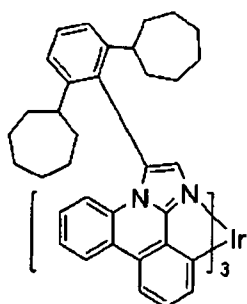
該化合物之具體實例包括選自由以下組成之群之化合物：



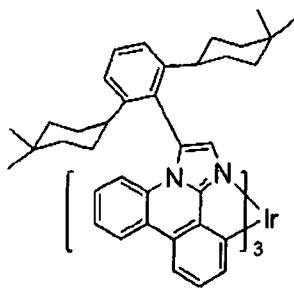
化合物 1



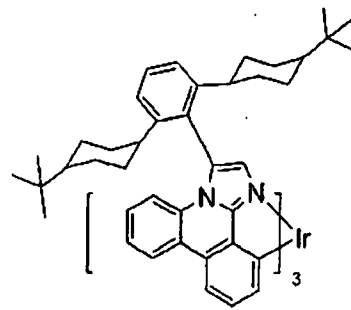
化合物 2



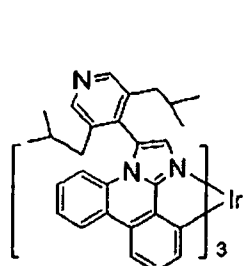
化合物 3



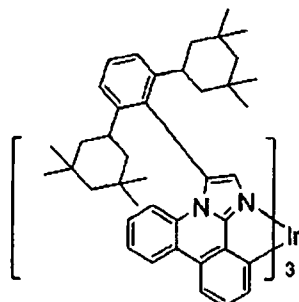
化合物 4



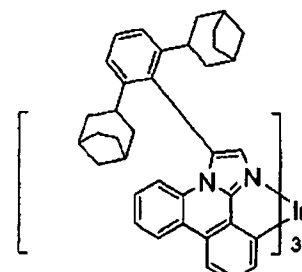
化合物 5



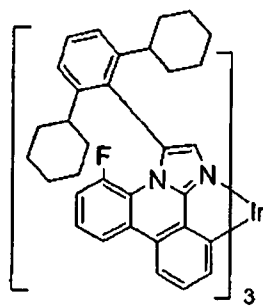
化合物 6



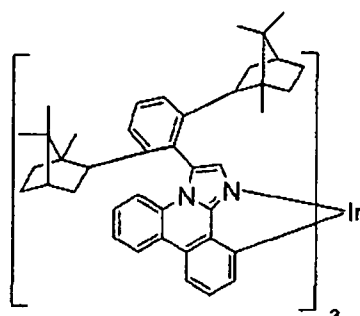
化合物 7



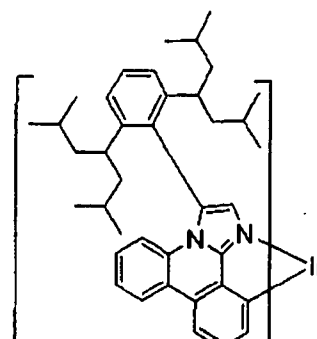
化合物 8



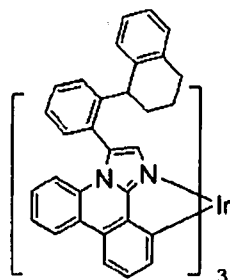
化合物 9



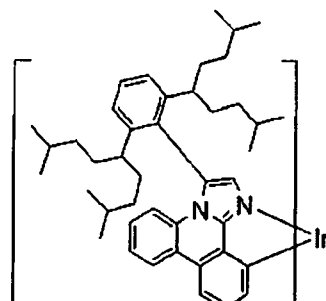
化合物 10



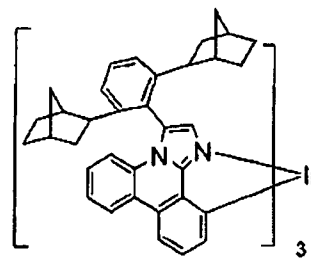
化合物 11



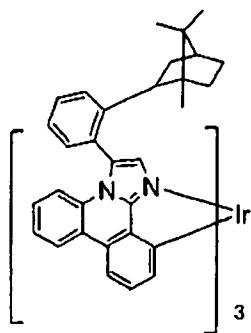
化合物 12



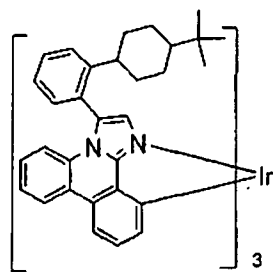
化合物 13



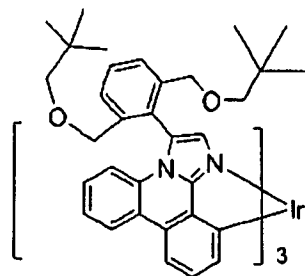
化合物 14



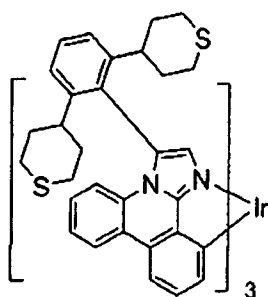
化合物 15



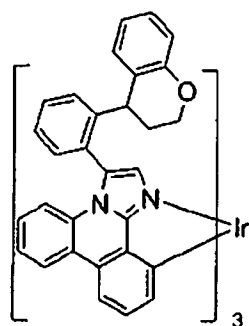
化合物 16



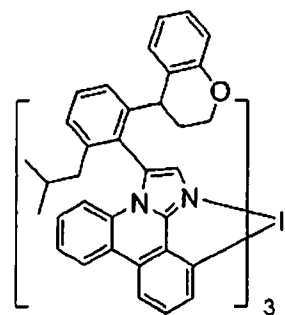
化合物 17



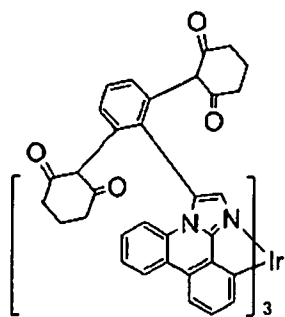
化合物 18



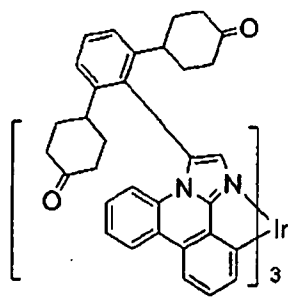
化合物 19



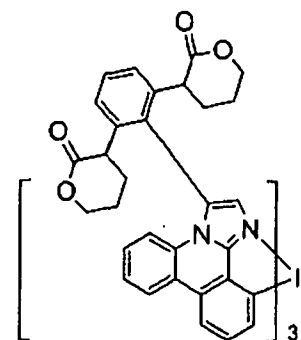
化合物 20



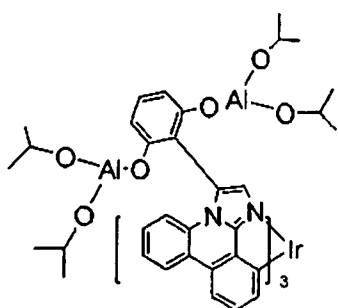
化合物 21



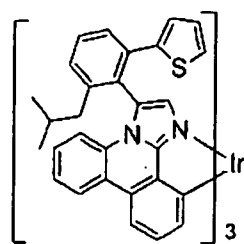
化合物 22



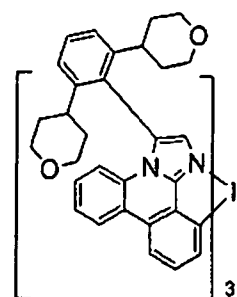
化合物 23



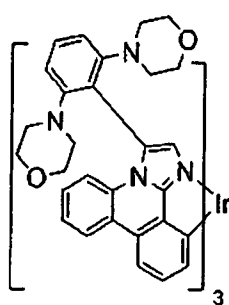
化合物 24



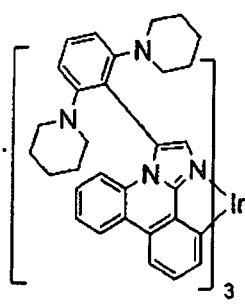
化合物 25



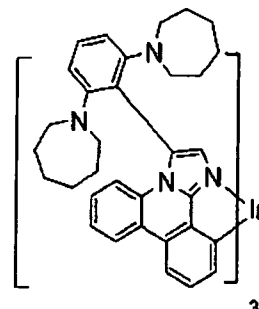
化合物 26



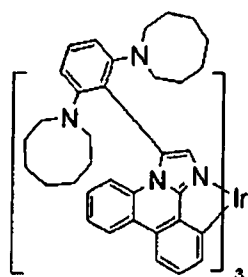
化合物 27



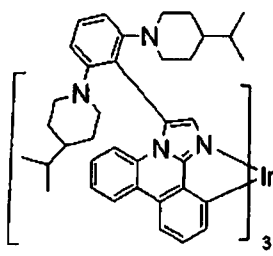
化合物 28



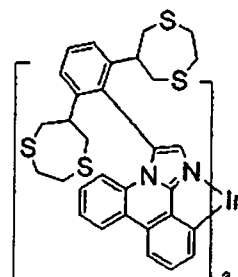
化合物 29



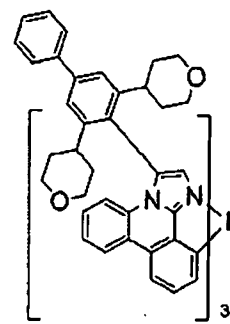
化合物 30



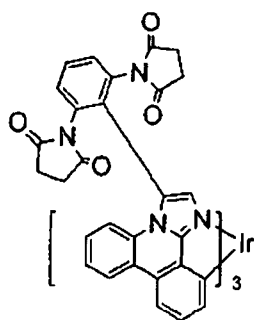
化合物 31



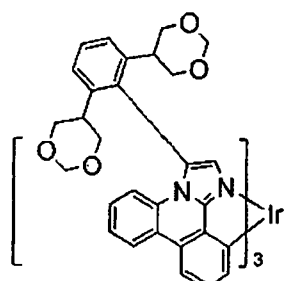
化合物 32



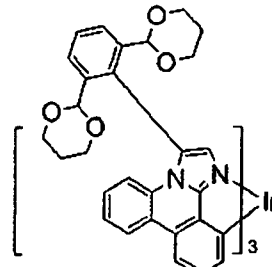
化合物 33



化合物 34



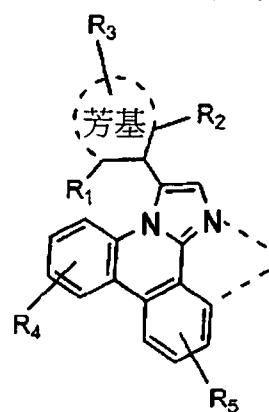
化合物 35



化合物 36

更佳地，該化合物選自由化合物1及化合物2組成之群。

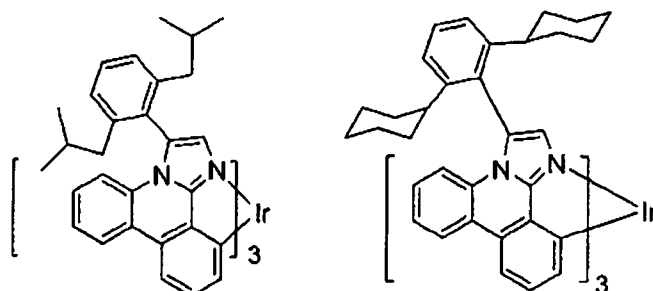
亦提供包括配位體之化合物，其中該配位體具有下式：



。R<sub>1</sub>及R<sub>2</sub>獨立選自由氫、烷基及芳基組成之群，且R<sub>1</sub>及R<sub>2</sub>中至少一個係具有4個或更多個原子之烷基。R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>及R<sub>5</sub>可代表單、二、三或四取代。R<sub>3</sub>、R<sub>4</sub>及R<sub>5</sub>獨立選自由氫、烷基及芳基組

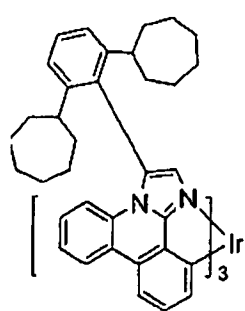
成之群。虛線代表配位體至金屬之連接。由原子數大於40之非放射性金屬組成之金屬可適用於該錯合物。舉例而言，該錯合物可包括選自由以下組成之群之金屬：Re、Ru、Os、Rh、Ir、Pd、Pt、Cu及Au。較佳地，該金屬係Ir。此外，包括所提供配位體之錯合物可為均配錯合物或異配錯合物。較佳地，含有所提供配位體之錯合物係叁Ir錯合物。

另外亦提供有機發光裝置。該裝置可包括陽極、陰極及佈置於該陽極與該陰極間之有機發射層。該有機發射層進一步包含具有式I之化合物。較佳地，該有機層進一步包含選自由以下組成之群之化合物：

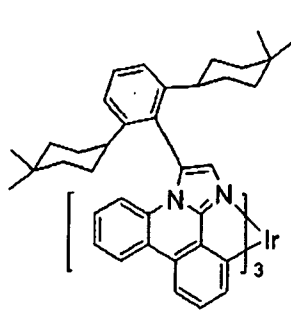


化合物 1

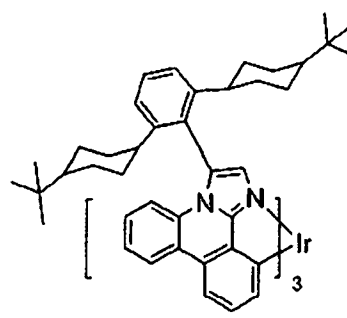
化合物 2



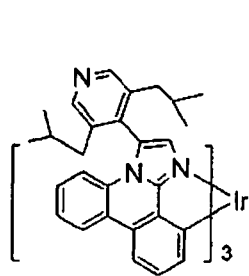
化合物 3



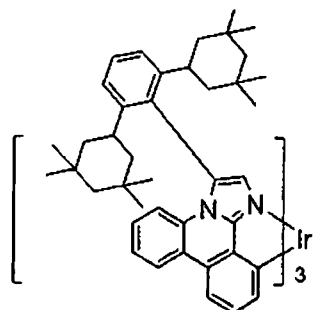
化合物 4



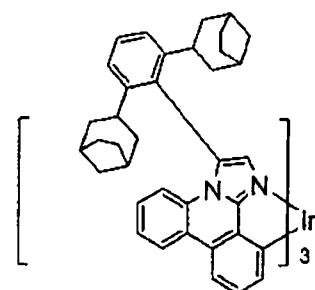
化合物 5



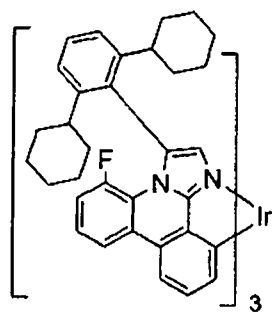
化合物 6



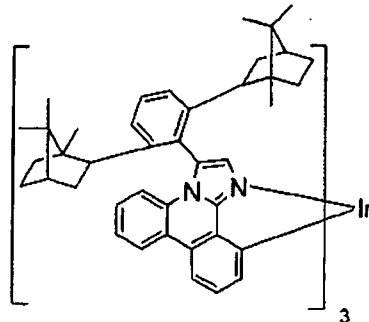
化合物 7



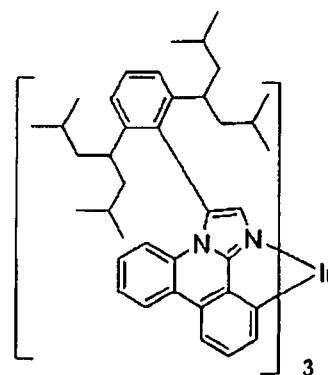
化合物 8



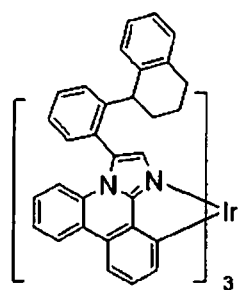
化合物 9



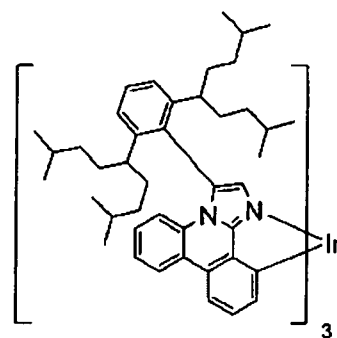
化合物 10



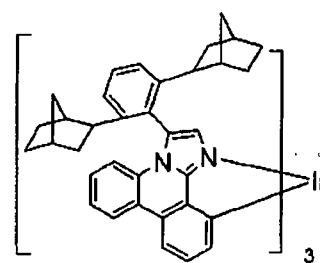
化合物 11



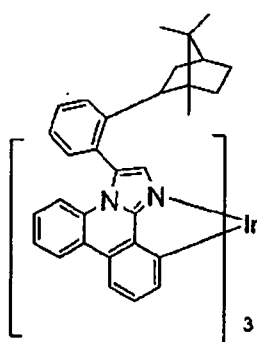
化合物 12



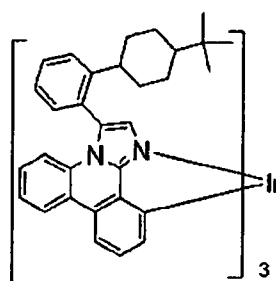
化合物 13



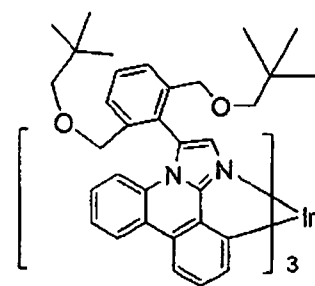
化合物 14



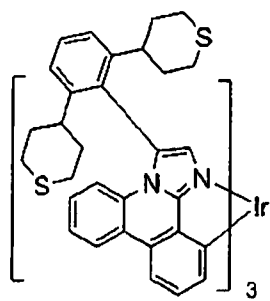
化合物 15



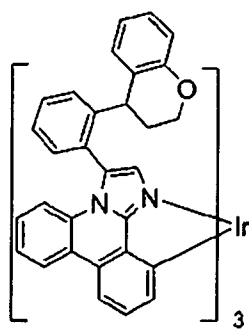
化合物 16



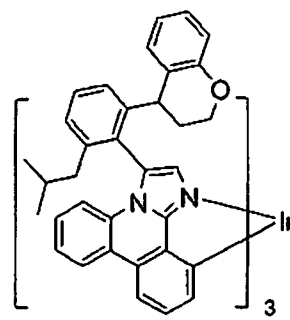
化合物 17



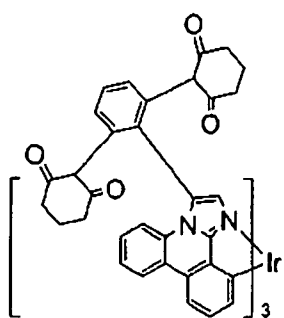
化合物 18



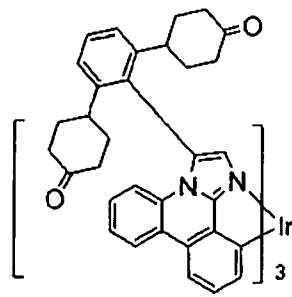
化合物 19



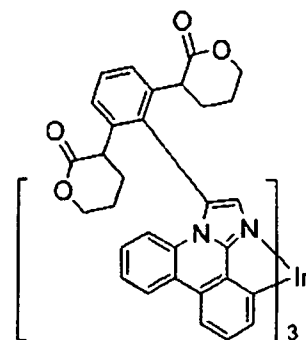
化合物 20



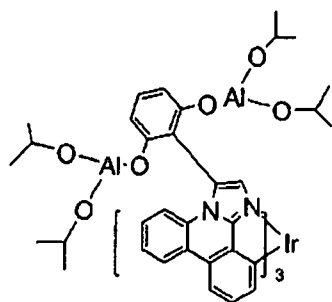
化合物 21



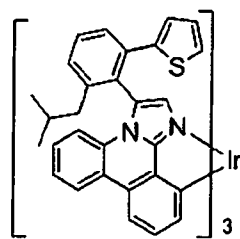
化合物 22



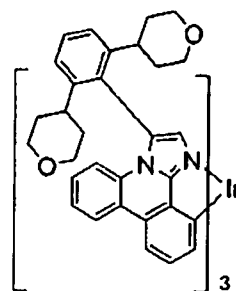
化合物 23



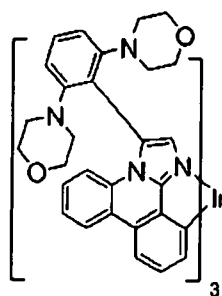
化合物 24



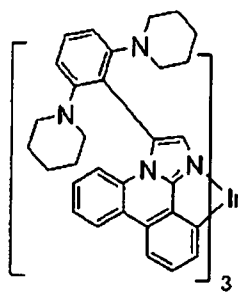
化合物 25



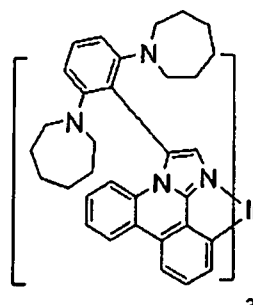
化合物 26



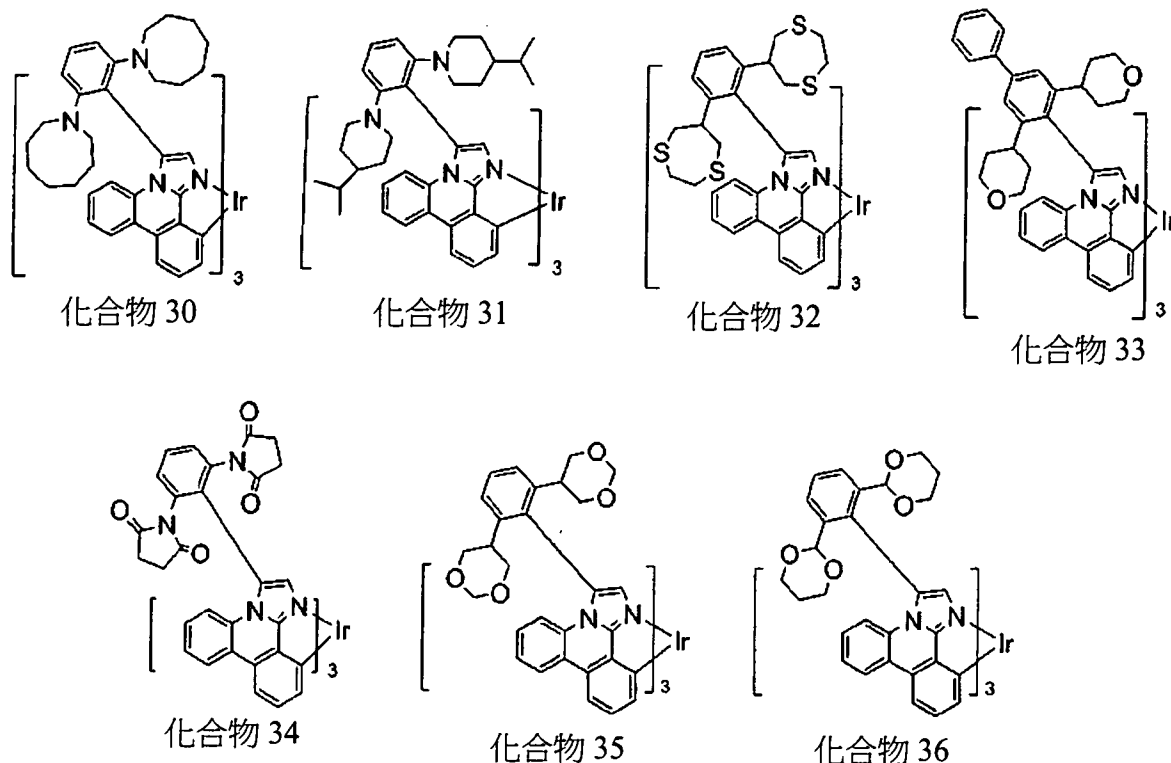
化合物 27



化合物 28

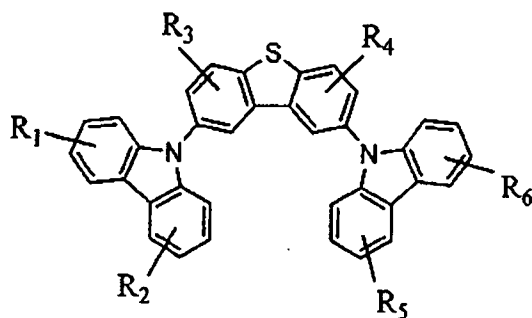


化合物 29



更佳地，該有機層含有選自由化合物1及化合物2組成之群之化合物。含有該等化合物之裝置已顯示具有尤佳性質，例如高效能及長壽命。

該有機層可為發射層，其中具有式I之化合物係發射化合物。該有機發射層可進一步包含主體材料。較佳，該主體材料具有下式：



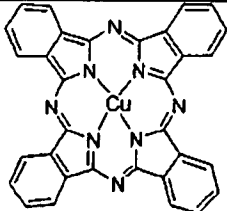
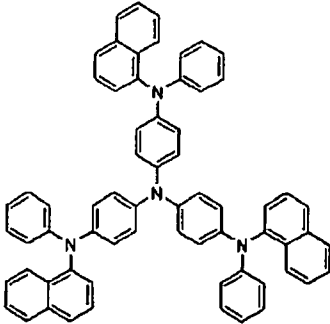
其中 $R_1$ 至 $R_6$ 中之每一者皆獨立選自由以下組成之群：任一烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基、雜芳基及氫，且其中 $R_1$ 至 $R_6$ 中之每一者可代表多次取代。

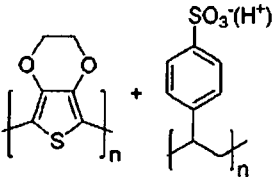
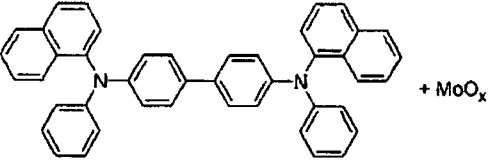
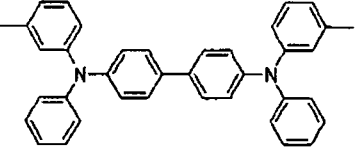
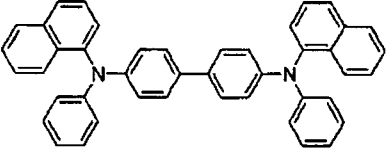
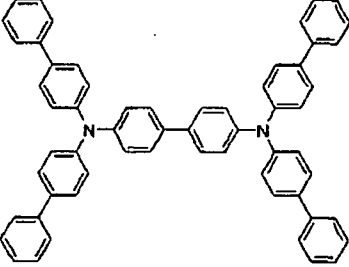
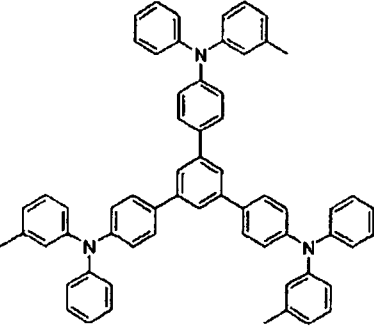
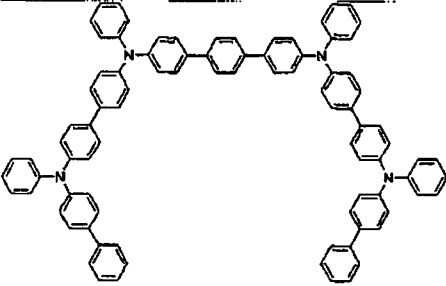
亦提供包含裝置之消費產品，其中該裝置進一步包含陽極、陰極及有機層。該有機層進一步包含具有式I之化合物。

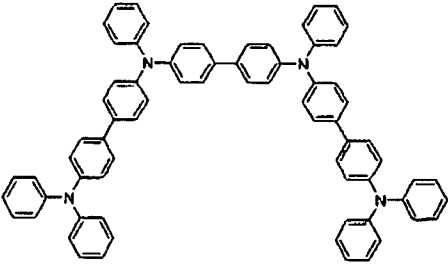
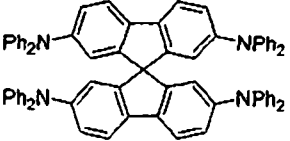
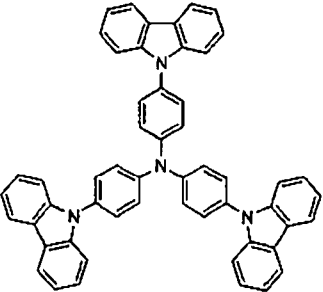
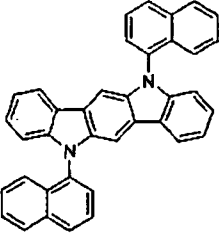
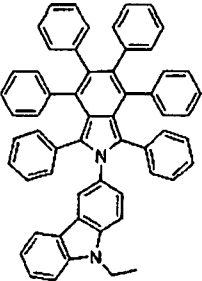
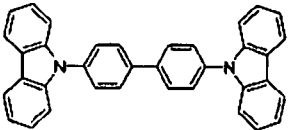
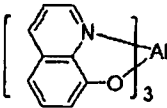
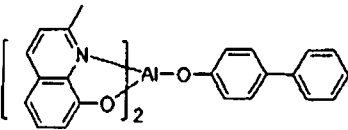
本文所述用於有機發光裝置中特定層之材料可與眾多種存在於該裝置中之其他材料組合使用。舉例而言，本文所揭示發射摻雜物可與眾多種主體材料、傳送層、阻擋層、注入層、電極及可存在之其他層結合使用。下文所述或所提及材料係可與本文所揭示化合物組合使用之材料之非限制性實例，且熟習此項技術者可容易地查閱文獻來識別可組合使用之其他材料。

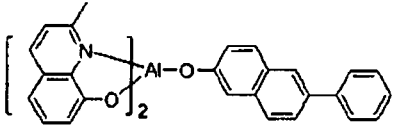
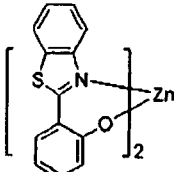
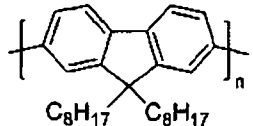
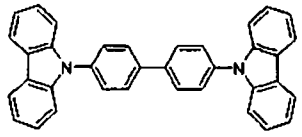
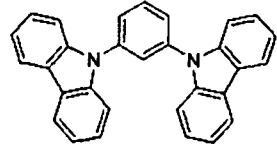
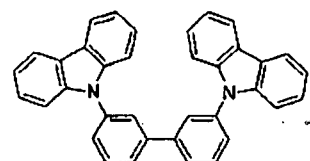
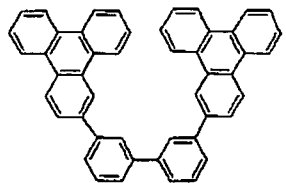
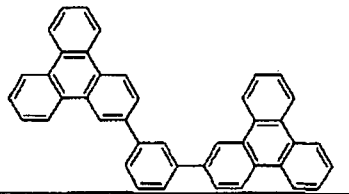
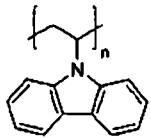
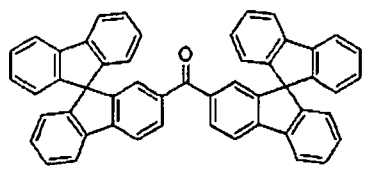
除了本文所揭示材料以外及/或與該等材料組合，在OLED中亦可使用許多電洞注入材料、電洞傳送材料、主體材料、摻雜物材料、激發子/電洞阻擋層材料、電子傳送及電子注入材料。可與本文所揭示材料組合用於OLED中之材料之非限制性實例列示於下表1中。表1列示非限制性材料類、用於各類材料之化合物之非限制性實例及揭示該等材料之參考文獻。

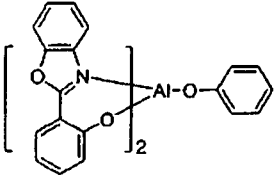
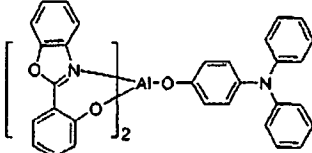
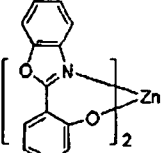
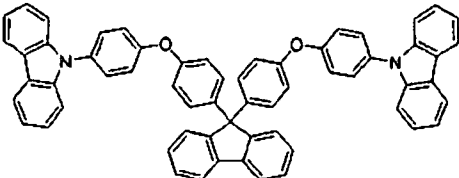
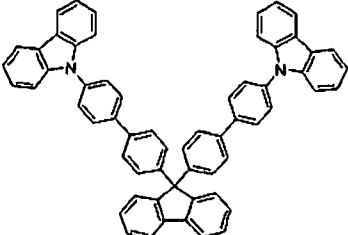
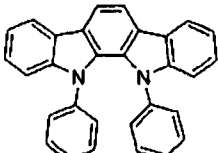
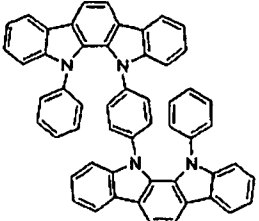
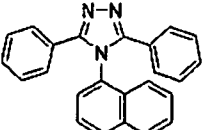
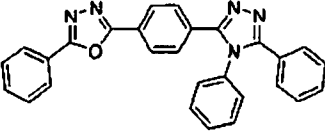
表1

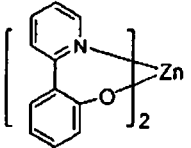
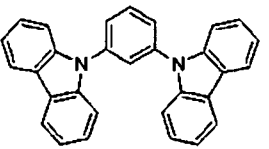
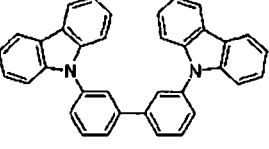
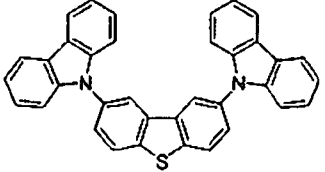
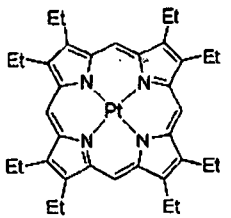
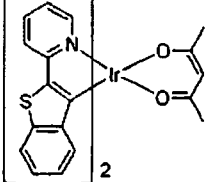
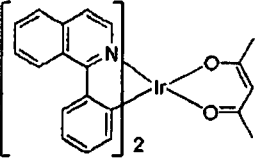
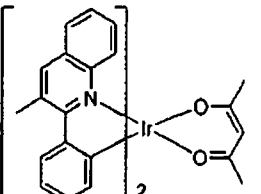
材料	材料之實例	出版物
<b>電洞注入材料</b>		
酞菁及卟啉化合物		Appl. Phys. Lett. 69, 2160(1996)
星狀放射型三芳基胺		J. Lumin. 72-74, 985 (1997)
CF <sub>x</sub> 氟代烴聚合物	$\left[ \text{CH}_x\text{F}_y \right]_n$	Appl. Phys. Lett. 78, 673(2001)

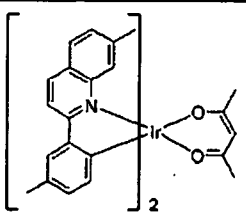
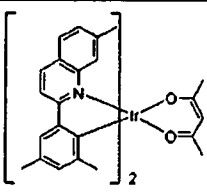
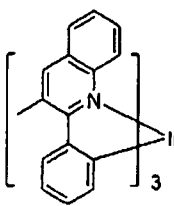
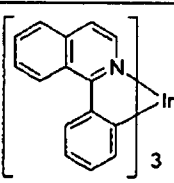
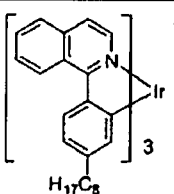
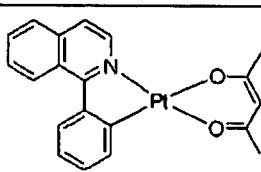
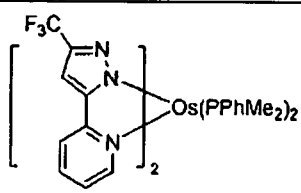
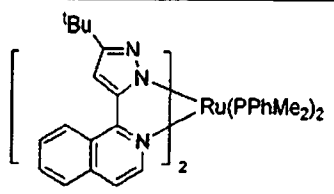
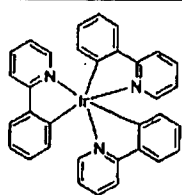
導電聚合物(例如, PEDOT:PSS, 聚苯胺, 聚噻吩)		Synth. Met. 87, 171 (1997)
與金屬氧化物(例如氧化鉬及氧化鎢)錯合之芳基胺錯合物		SID Symposium Digest, 37, 923 (2006)
<b>電洞傳送材料</b>		
三芳基胺(例如, TPD, $\alpha$ -NPD)		Appl. Phys. Lett. 51, 913(1987)
		US 5061569
		EP 650955
		J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503(2007)

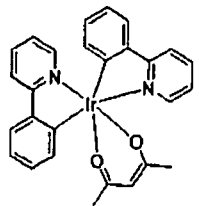
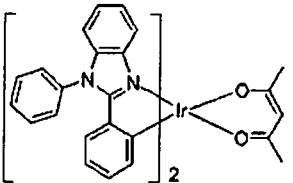
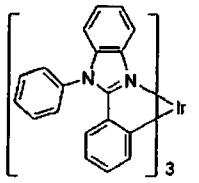
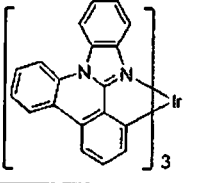
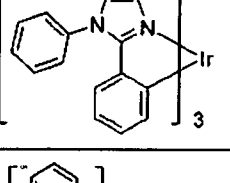
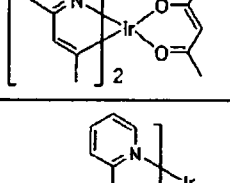
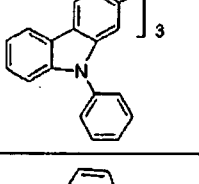
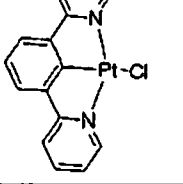
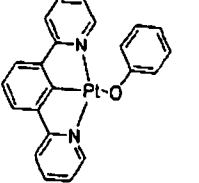
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503(2007)
螺芴(spirofluorene)核上之三芳基胺		Synth. Met. 91,209 (1997)
芳基胺咪唑化合物		Adv. Mater. 6, 677 (1994)
吡啶咪唑		Synth. Met. 111, 421 (2000)
異吡啶化合物		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)
<b>磷光OLED主體材料</b>		
<b>紅色主體材料</b>		
芳基咪唑		Appl. Phys. Lett. 78, 1622(2001)
金屬8-羥基喹啉酸鹽(例如, Alq <sub>3</sub> , BAiq)		Nature 395, 151 (1998)
		US 20060202194

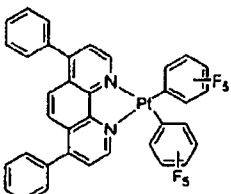
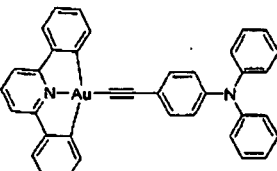
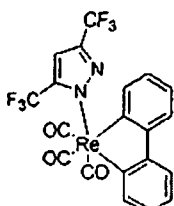
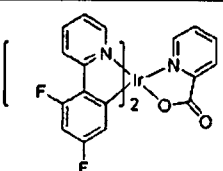
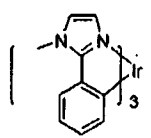
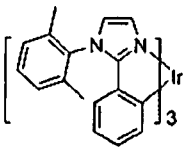
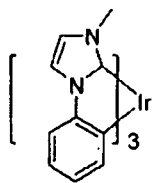
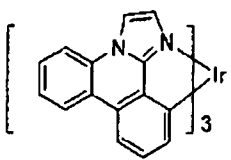
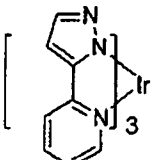
		WO 2005014551
金屬苯氧基苯并噻唑化合物		Appl. Phys. Lett. 90, 123509(2007)
共軛寡聚物及聚合物(例如, 聚芴)		Org. Electron. 1, 15 (2000)
<b>綠色主體材料</b>		
芳基咔唑		Appl. Phys. Lett. 78, 1622(2001)
		US 2003175553
		WO 2001039234
芳基聯伸三苯化合物		US 20060280965
		US 20060280965
聚合物(例如, PVK)		Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)
螺芴化合物		WO 2004093207

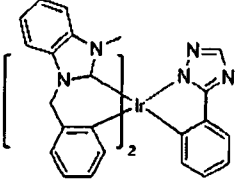
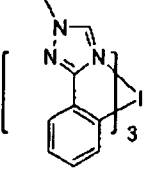
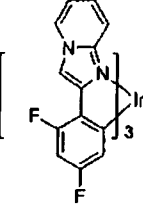
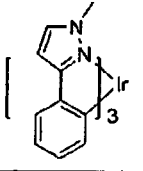
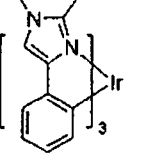
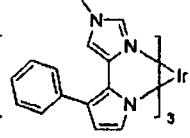
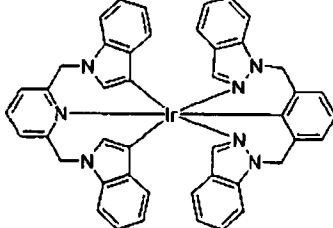
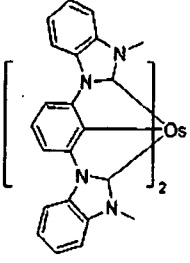
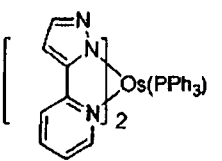
金屬苯氧基苯并噁唑化合物		WO 05089025
		WO 06132173
		JP 200511610
螺芬-咪唑化合物		JP 2007254297
		JP 2007254297
吩啉咪唑		WO 07063796
		WO 07063754
5員環缺電子雜環(例如，三唑，噁二唑)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)
		WO 04107822

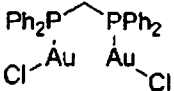
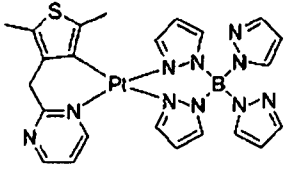
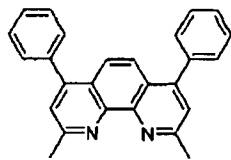
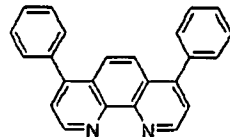
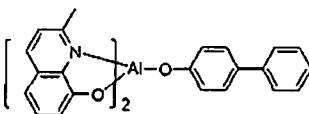
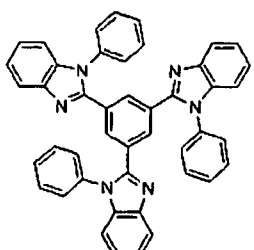
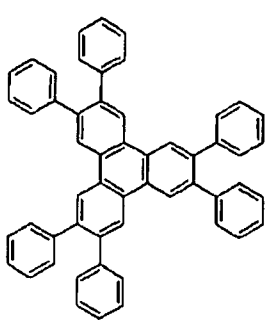
金屬苯氧基吡啶化合物		WO 05030900
<b>藍色主體材料</b>		
芳基咪唑		Appl. Phys. Lett, 82, 2422 (2003)
		US 20070190359
二苯并噻吩-咪唑化合物		WO 2006114966
<b>磷光摻雜物</b>		
<b>紅色摻雜物</b>		
重金屬卟啉(例如，PtOEP)		Nature 395, 151 (1998)
鈹(III)有機金屬錯合物		Appl. Phys. Lett. 78, 1622(2001)
		US 06835469
		US 06835469

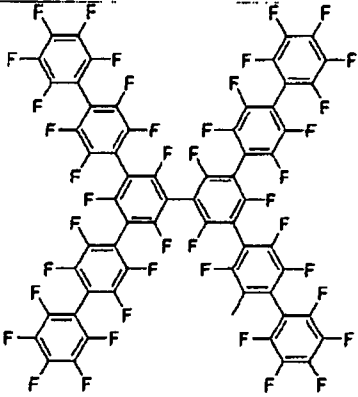
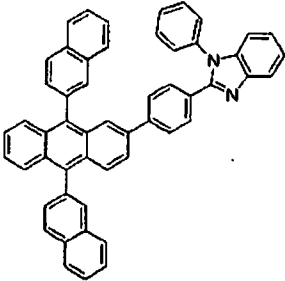
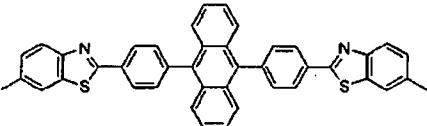
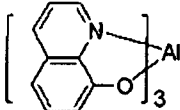
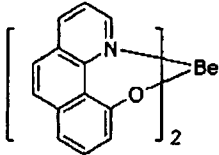
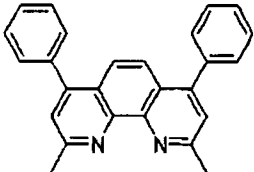
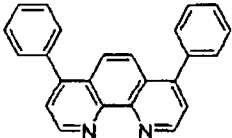
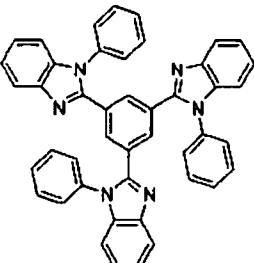
		US 20060202194
		US 20060202194
		US 07087321
		US 07087321
		Adv. Mater. 19, 739 (2007)
鉑(II)有機金屬錯合物		WO 2003040257
鐵(III)錯合物		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)
鈦(II)錯合物		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
綠色摻雜物		
鈱(III)有機金屬錯合物	 及其衍生物	Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)

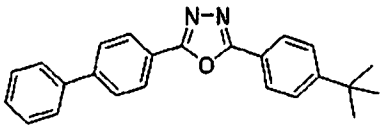
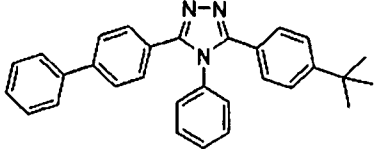
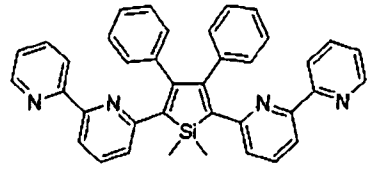
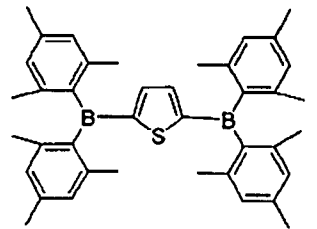
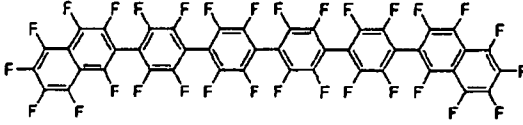
		US 2002034656
		US 06687266
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)
		US 2007190359
		US 2006008670 JP 2007123392
		Adv. Mater. 16, 2003 (2004)
		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
Pt(II)有機金屬錯合物		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)

		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
金錯合物		Chem. Commun. 2906 (2005)
銦(III)錯合物		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
藍色摻雜物		
銦(III)有機金屬錯合物		WO 2002002714
		WO 2006009024
		US 2006251923
		WO 2006056418, US 2005260441
		US 2007190359
		US 2002134984

		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)
		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)
		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)
		WO 05123873
		WO 05123873
		WO 07004380
		WO 06082742
鐵(II)錯合物		US 2005260449
		Organometallics 23, 3745 (2004)

金錯合物		Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)
鉑(II)錯合物		WO 06098120, WO 06103874
<b>激發子/電洞阻擋層材料</b>		
浴銅靈(bathocuprine)化合物(例如, BCP, BPhen)		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
金屬8-羥基喹啉酸鹽(例如, BAlq)		Appl. Phys. Lett. 81, 162(2002)
5員環缺電子雜環, 例如三唑、噁二唑、咪唑、苯并咪唑		Appl. Phys. Lett. 81, 162(2002)
聯伸三苯化合物		US 20050025993

氟化芳族化合物		Appl. Phys. Lett. 79, 156(2001)
電子傳送材料		
蔥-苯并咪唑化合物		WO 03060956
蔥-苯并噻唑化合物		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
金屬8-羥基喹啉酸鹽(例如, Alq <sub>3</sub> )		Appl. Phys. Lett. 51, 913(1987)
金屬羥基喹啉酸鹽		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
浴銅靈化合物, 例如 BCP、BPhen等		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449(2001)
5員環缺電子雜環(例如, 三唑、噁二唑、咪唑、苯并咪唑)		Appl. Phys. Lett. 74, 865(1999)

		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)
		Jpn. J. Apply. Phys. 32, L917(1993)
矽羅(Silole)化合物		Org.電子. 4, 113 (2003)
芳基硼烷化合物		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714(1998)
氟化芳族化合物		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832(2000)

實驗：

化合物實例

比較實例2之合成

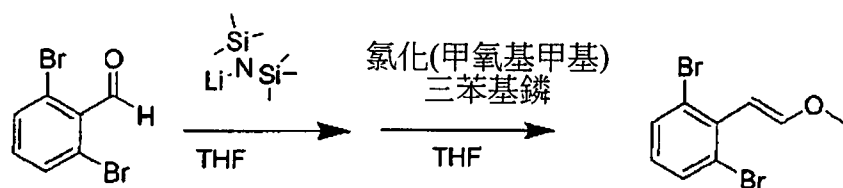
步驟1



向裝配有磁力攪拌器、冷凝器及熱電偶之1000 mL 3頸燒瓶中加入存於THF中之100 mL 2.0 M二異丙基醯胺鋰(LDA)。將該溶液冷卻至-75°C。接下來，經1/2 h時段向經冷卻LDA溶液中逐滴添加溶解於200 mL無水THF中之1,3-二溴苯(39.3 g, 0.167 mol)。將內部溫度維持在-75°C (+/- 5°C)下2 h。接下來，經1/2 h時期向經冷反應混合物中逐滴添加溶解於50 mL無水THF中之二甲基甲醯胺(30.8 g, 0.4 mol)。將

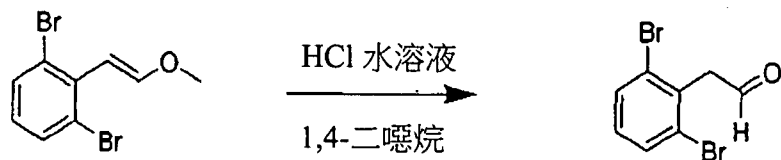
內部溫度維持在 $-75^{\circ}\text{C}$  ( $\pm 5^{\circ}\text{C}$ ) 下 2 h。藉由逐滴添加 100 mL 5% 硫酸來淬滅反應混合物。移除冷卻浴並使反應混合物升溫至室溫。分離有機層並用  $1 \times 100$  mL 乙醚及  $1 \times 50$  mL 乙酸乙酯萃取水層。將有機物合併並用  $1 \times 100$  mL 鹽水洗滌。隨後經硫酸鈉乾燥有機萃取物，將其過濾並於真空下濃縮。使粗製產物自己烷重結晶，生成 21.6 g (49% 產率) 產物。

## 步驟 2



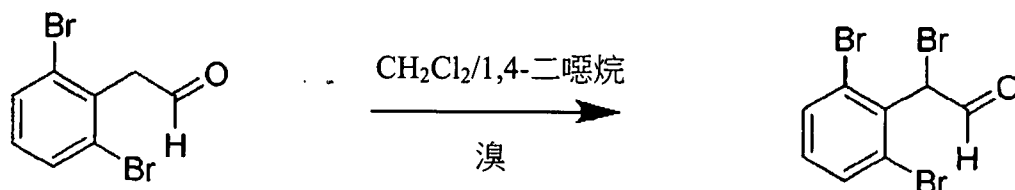
向具有 75 mL THF 之 500 mL 3 頸燒瓶中加入氯化(甲氧基甲基)三苯基磷 (34.3 g, 0.10 mol)。將該溶液冷卻至  $-78^{\circ}\text{C}$ ，之後逐滴添加存於 THF 中之 100 mL (0.1 mol) 1.0 M 雙(三甲基甲矽烷基)醯胺鋰。添加時間係約 20 分鐘且內部溫度維持在  $-78^{\circ}\text{C}$  至  $-70^{\circ}\text{C}$  下。隨後移除冷卻浴並使反應混合物升溫至  $0$  至  $3^{\circ}\text{C}$ 。然後將反應混合物重新冷卻至  $-78^{\circ}\text{C}$ 。接下來，經 20 min 時期向經冷卻反應混合物中逐滴添加溶解於 75 mL THF 中之 2,6-二溴苯甲醛 (22.8 g, 0.086 mol)。將內部溫度維持在  $-78^{\circ}\text{C}$  與  $-70^{\circ}\text{C}$  之間。隨後使反應混合物逐漸升溫至室溫。將反應混合物用氯化銨水溶液淬滅並隨後用  $3 \times 300$  mL 乙酸乙酯萃取。合併有機萃取物，將其用 200 mL 10% LiCl 溶液洗滌 1 次並經硫酸鎂乾燥。隨後將萃取物過濾並在真空下移除溶劑。藉由真空蒸餾來純化粗製產物，生成 22.5 g (90%) 淡橙色油狀產物。

## 步驟 3



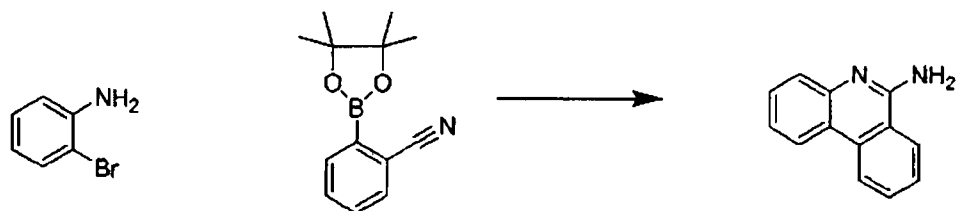
向含有110 mL水之500 mL圓底燒瓶中緩慢添加70 mL濃HCl。將o-甲基2,6-二溴苯基乙醛(22.5 g, 0.077 mol)溶解於70 mL 1,4-二噁烷中，並將該溶液一次性添加至500 mL圓底燒瓶中。攪拌反應混合物並將其於輕緩回流下加熱18 h。將反應混合物冷卻至室溫並用2×400 mL乙酸乙酯萃取。合併該等萃取物並用1×100 mL 10% LiCl水溶液洗滌。隨後經硫酸鈉乾燥萃取物，將其過濾並在真空下移除溶劑。使用矽膠層析以15%/75%二氯甲烷/己烷作為洗脫液來純化2,6-二溴苯基乙醛。獲得17.1 g(80%產率)白色固體產物。

#### 步驟4

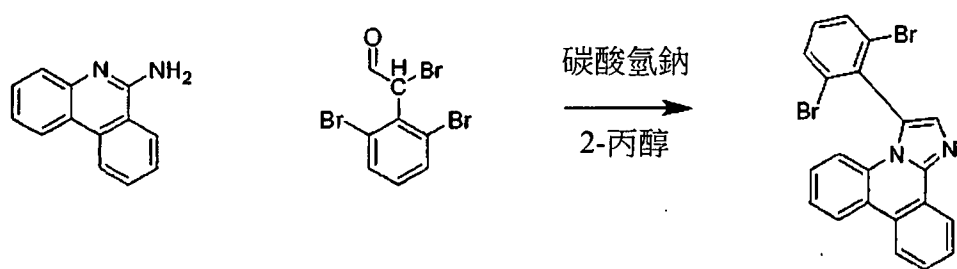


向200 mL圓底燒瓶中添加3.75 g (0.013 mol) 2,6-二溴苯基乙醛、30 mL二氯甲烷及60 mL 1,4-二噁烷。接下來，將2.32 g, (0.014 mol)溴溶解於30 mL二氯甲烷中並在室溫下經10 min時期逐滴添加至該反應混合物中。在室溫下連續攪拌2 h。將額外溴(0.23 g, 0.001 mol)添加至該反應混合物中。在室溫下將該混合物攪拌1小時。在真空下濃縮反應混合物。隨後將粗製產物溶解於50 mL乙醚中並用1 × 50 mL亞硫酸氫鈉水溶液及1×50 mL 10%氯化鋰水溶液洗滌。經硫酸鈉乾燥醚萃取物，隨後將其過濾並在真空下移除溶劑，生成4.2 g(90%產率)黃色黏性油狀產物，其立即用於下一步驟。

#### 步驟5



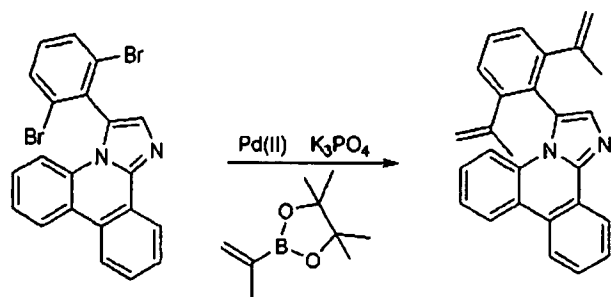
向1 L 3頸燒瓶中添加19 g (0.11 mol) 2-溴苯胺、27.7 g (0.12 mol) 2-氨基苯基硼酸頻哪醇(pinacol)酯、74.5 g (0.32 mol) 磷酸三鉀單水合物及1.8 g (0.002 mol) [1,1'-雙[(二苯基膦基)二茂鐵]二氯-鈾(II)與二氯甲烷之錯合物(1:1)。將該混合物脫氣並用氮氣回填。接下來，向反應混合物中添加水(13 mL)及350 mL 1,4-二噁烷並重複脫氣程序。攪拌反應混合物並將其回流下於氮氣下加熱18 h。在冷卻後，用350 mL水稀釋反應混合物。用3×250 mL乙酸乙酯萃取反應混合物。合併該等萃取物並經硫酸鎂將其乾燥。將萃取物過濾並在真空下移除溶劑。用己烷/乙酸乙酯混合物研磨粗製產物。經由過濾分離淡灰色固體。



向200 mL圓底燒瓶中加入0.77 g (0.004 mol) 6-氨基喹啉及50 mL 無水2-丙醇。將1.42 g (0.004 mol)  $\alpha$ -溴-2,6-二溴苯基乙醛一次性添加至該混合物中。隨後在回流下將該混合物加熱24 h。接下來，將反應混合物冷卻至60°C並一次性添加0.67 g (0.008 mol) 碳酸氫鈉。在回流下將該混合物加熱24 h。將反應混合物冷卻至室溫，用300 mL水稀釋並隨後用3×200 mL乙酸乙酯萃取。將該等有機萃取物合併，用1×100 mL 10% LiCl水溶液洗滌，經硫酸鈉乾燥，隨後過濾並在真空下濃縮。藉由矽膠管柱層析(1-7%乙酸乙酯/二氯甲烷)來純化粗製產物，

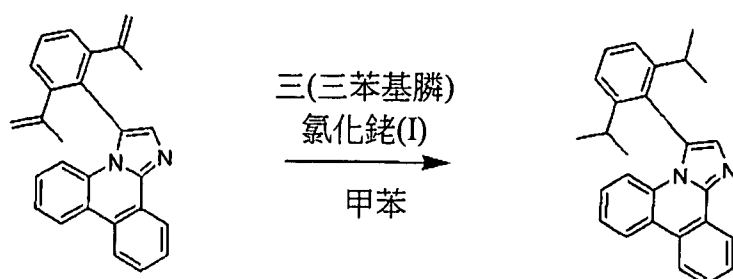
生成1 g(55%產率)灰白色固體產物。

### 步驟7



向200 mL燒瓶中添加來自步驟6之二溴化物(2.34 g, 5.175 mmol)、異丙烯基硼酸頻哪醇酯(10.44 g, 62.1 mmol)、乙酸鈣(II)(0.17 g, 0.76 mmol)、2-二環己基膦基-2',6'-二甲氧基聯苯(0.62 g, 1.52 mmol)、磷酸三鉀單水合物(5.96 g, 25.88 mmol)、122 mL甲苯及122 mL水。藉由冷凍-抽氣-解凍技術將反應混合物完全脫氣。將反應物加熱至回流並在氮氣氣氛下攪拌16 h。藉助矽藻土墊將反應混合物過濾。分離甲苯層並用75 mL甲苯萃取水層1次。將甲苯萃取物合併，經硫酸鈉乾燥，隨後過濾並在真空下濃縮。使用矽膠層析以1-8%乙酸乙酯/二氯甲烷作為洗脫液來純化產物，得到1.7 g(87%產率)產物。

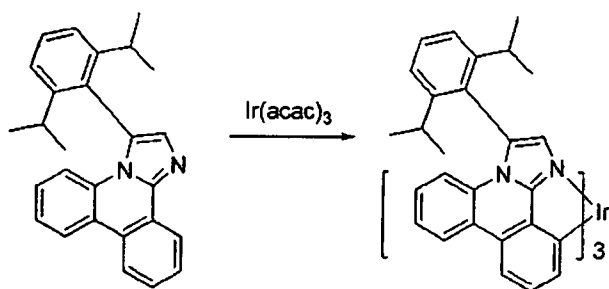
### 步驟8



將2,6-二異丙基咪唑并吡啶(1.7 g, 4.6 mmol)溶解於75 mL甲苯中。向用N<sub>2</sub>吹掃且含有1.5 g叁(三苯基膦)碘化銦(I)之Parr氫化器容器中添加該溶液。將該容器置於Parr氫化器上並用氫填充該容器並且將其抽真空(總共重複3次)。隨後用氫將該容器填充至45 psi。使該混合

物振盪反應21 h。在真空下自反應混合物移除溶劑。使用矽膠管柱以1-8%乙酸乙酯/二氯甲烷作為洗脫液對粗製產物實施層析，生成1.65 g產物。

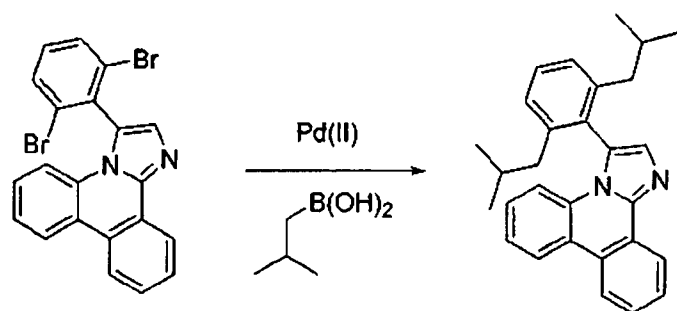
### 步驟9



### 比較實例2

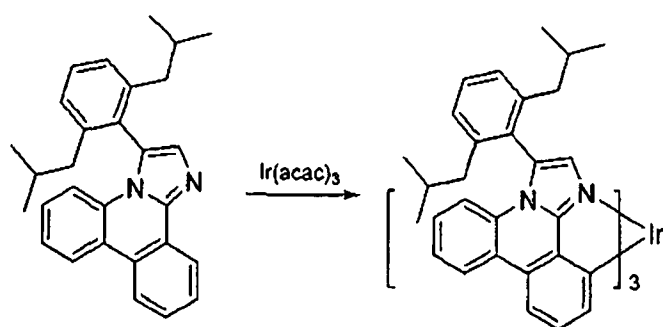
向50 mL Schlenk管中添加來自步驟8之配位體(1.47 g, 3.88 mmol)、 $\text{Ir}(\text{acac})_3$  (0.38 g, 0.78 mmol)及十三烷(50滴)。將混合物脫氣並在 $240^\circ\text{C}$ 至 $250^\circ\text{C}$ 之砂浴中於氮氣下攪拌加熱66 h。在冷卻後，用溶劑混合物( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ :己烷=1:1)溶解反應混合物並以1:1  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ :己烷作為洗脫液對其實施急驟管柱層析。自 $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 與甲醇之混合物重結晶管柱層析後之固體，生成0.65 g (65%)產物。

### 化合物1之合成



**步驟1**：向200 mL燒瓶中添加二溴化物(1.0 g, 2.2 mmol)、異丁基硼酸(2.7 g, 26.5 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.15 g, 0.16 mmol)、2-二環己基膦基-2',6'-二甲氧基聯苯(0.27 g, 0.65 mmol)、磷酸三鉀單水合物(8.7 g, 37.58 mmol)及100 mL甲苯。藉由冷凍-抽氣-解凍技術將反應混合物完

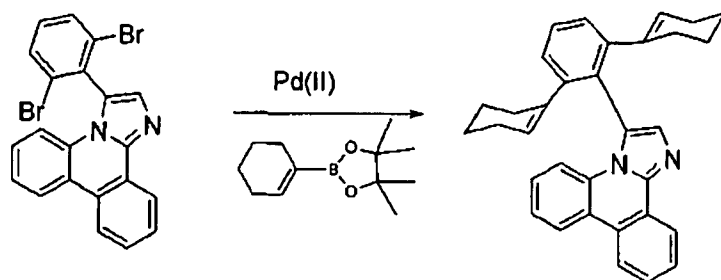
全脫氣。將反應物加熱至回流並在氬氣氣氛下攪拌16 h。藉助矽藻土墊將反應混合物過濾。分離甲苯層並用75 mL甲苯萃取水層1次。將甲苯萃取物合併，經硫酸鈉乾燥，隨後過濾並在真空下濃縮。使用矽膠層析以1-8%乙酸乙酯/二氯甲烷作為洗脫液來純化產物，得到0.76 g產物(84%產率)。



化合物1

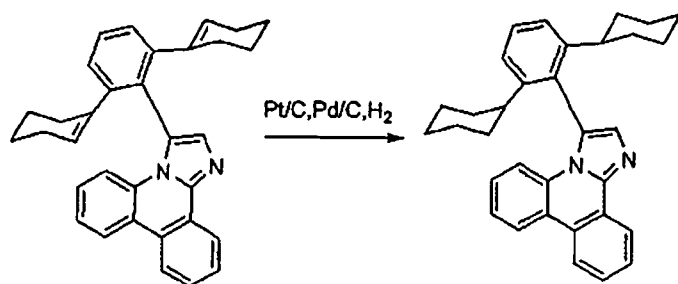
**步驟2：**向50 mL Schlenk管中添加配位體(2.8 g, 6.89 mmol)、 $\text{Ir}(\text{acac})_3$  (0.68 g, 1.38 mmol)及十三烷(50滴)。將混合物脫氣並在 $240^\circ\text{C}$ 至 $250^\circ\text{C}$ 之砂浴中於氬氣下攪拌加熱73 h。在冷卻後，用溶劑混合物( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ：己烷=1:1)溶解反應混合物並以1:1  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ :己烷作為洗脫液對其實施急驟管柱層析。自 $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 與甲醇之混合物重結晶管柱層析後之固體，生成1.69 g (87%)產物。

### 化合物2之合成

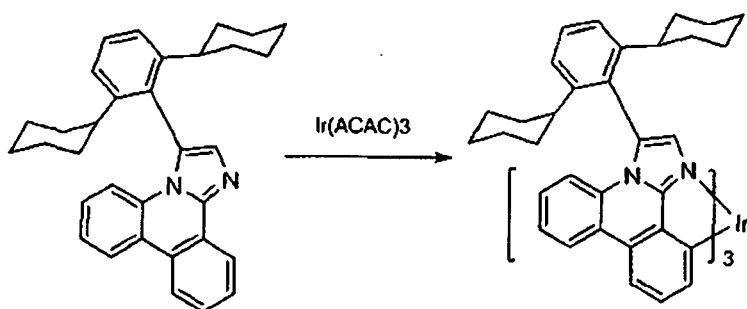


**步驟1：**向200 mL燒瓶中添加二溴化物(4 g, 8.84 mmol)、1-環己烯硼酸頻哪醇酯(18.37 g, 88.27 mmol)、 $\text{Pd}(\text{OAc})_2$  (1.98 g, 2.9 mmol)、2-二環己基磷基-2',6'-二甲氧基聯苯(2.4 g, 5.83 mmol)、磷酸三鉀單水

合物(10.18 g, 44.23 mmol)、100 mL甲苯及100 mL水。藉由冷凍-抽氣-解凍技術將反應混合物完全脫氣。將反應物加熱至回流並在氬氣氣氛下攪拌16 h。藉助矽藻土墊將反應混合物過濾。自濾液分離甲苯層。用75 mL甲苯萃取水層。將甲苯萃取物合併，經硫酸鈉乾燥，隨後過濾並在真空下濃縮。藉由管柱層析以1-4%乙酸乙酯/二氯甲烷作為洗脫液來純化粗製產物，生成3.2 g產物。



**步驟2：**將3.2 g (0.007 mol)環己烯基化合物溶解於150 mL甲苯中。將該溶液添加至Parr氬化容器中，該容器已用氬氣吹掃且裝有2.8 g 10%活性炭載鈦及1.4 g潤濕活性炭載鉑(5 wt%(乾基))(Degussa type F101)。在Parr氬化器上將該異質混合物振盪72 h。藉助矽藻土墊過濾反應混合物。在真空下濃縮甲苯濾液。藉由管柱層析以1-5%乙酸乙酯/二氯甲烷作為洗脫液來純化粗製產物，生成3.1 g產物。

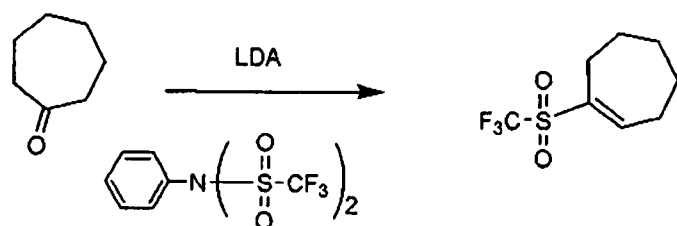


化合物2

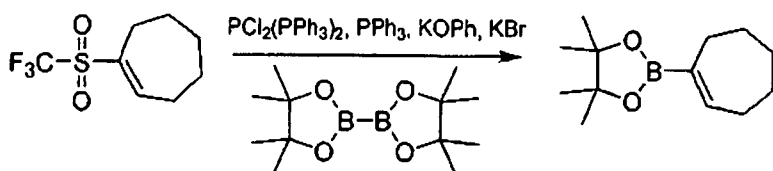
**步驟3：**向50 mL Schlenk管中添加配位體(2.3 g, 5.08 mmol)、Ir(acac)<sub>3</sub> (0.5 g, 1.01 mmol)及十三烷(50滴)。將混合物脫氣並在砂浴

中於氮氣下攪拌加熱73 h。在冷卻後，用溶劑混合物(CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>:己烷=1:1)溶解反應混合物並以1:1 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>:己烷作為洗脫液對其實施急驟管柱層析。自CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>與甲醇之混合物重結晶管柱層析後之固體，生成0.93 g (58%)產物。

### 化合物3之合成

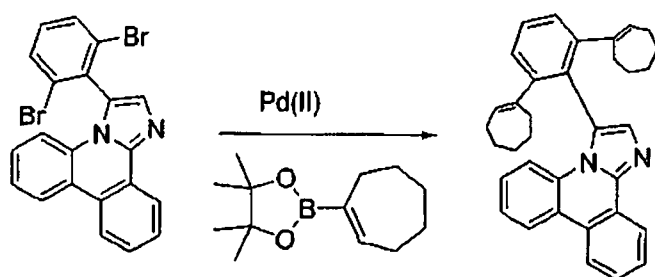


**步驟1.**向500 mL 3頸燒瓶中加入二異丙胺(9.9 g, 0.098 mol)及100 mL THF。將該溶液冷卻至-78°C，並經由注射器向經冷卻反應混合物中添加存於己烷中之0.073 mol n-BuLi (45.6 mL, 1.6 M)。在-78°C下將該混合物攪拌1/2 h，隨後向經冷卻反應混合物中逐滴添加存於30 mL THF中之環庚酮(6.0 g, 0.054 mol)。在-78°C下將該溶液攪拌2 h。向經冷卻混合物中逐滴添加N-苯基-雙-三氟甲烷磺醯亞胺(21.2 g, 0.059 mol)之THF溶液。隨後將該混合物逐漸升溫至室溫並攪拌過夜。將反應混合物用氯化銨水溶液淬滅並隨後用2×300 mL乙酸乙酯萃取。隨後經硫酸鎂乾燥萃取物，並將其過濾並且於真空下濃縮。以30-40%二氯甲烷/己烷作為洗脫液對粗製產物實施層析，生成9.0 g(69%產率)產物。

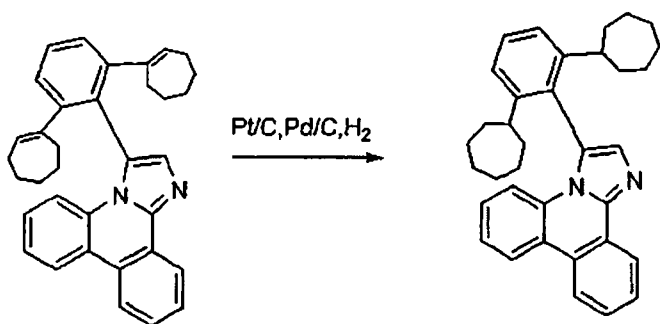


**步驟2.**向燒瓶中添加PdCl<sub>2</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(1.722 g, 2.45 mmol)、PPh<sub>3</sub>(1.28 g, 4.9 mmol)、雙(戊醯)二硼(90.76 g, 357 mmol)及KOPh(16.2 g, 122.7 mmol)。將該燒瓶用氮氣吹掃並隨後加入甲苯(300 mL)及三氟甲磺酸

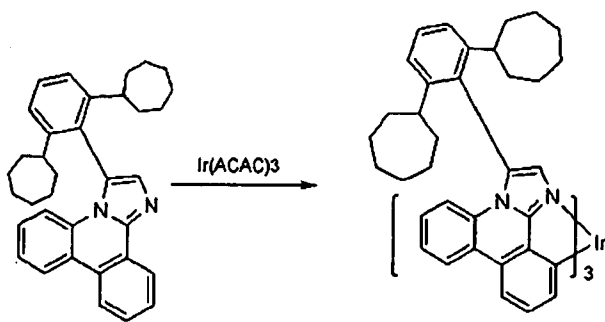
鹽(20 g, 81.8 mmol)。隨後在50°C下將該混合物攪拌16 h。用200 mL水稀釋反應混合物。分離甲苯層。用200 mL甲苯萃取水層。將甲苯萃取物合併，用100 mL 10%氯化鋰水溶液洗滌，經硫酸鎂乾燥，過濾並在真空下濃縮。使用Kugelrohr蒸餾設備對粗製產物實施蒸餾。罐溫度開始於85°C並升至115°C。以20-25%二氯甲烷/己烷作為洗脫液對該蒸餾混合物實施層析，生成9.85 g(55%產率)產物。



**步驟3.**向500 mL圓底燒瓶中添加二溴化物(4.7 g, 0.01 mol)、硼酸頻哪醇酯(9.81 g, 0.0442 mol)、Pd(OAc)<sub>2</sub> (0.75 g, 0.0033 mol)、二環己基磷基-2',6'-二甲氧基聯苯(2.73 g, 0.007 mol)、磷酸三鉀單水合物(12.0 g, 0.052 mol)、200 mL甲苯及75 mL水。將反應混合物抽真空並用氬氣回填。隨後將反應物加熱至回流並在氬氣氣氛下攪拌16 h。藉助矽藻土墊過濾混合物。分離甲苯層並用100 mL甲苯萃取水層。合併甲苯部分並將其經硫酸鎂乾燥。隨後將該乾燥有機混合物過濾並在真空下濃縮。藉由矽膠層析純化粗製產物。第一純化涉及以1-4%乙酸乙酯/二氯甲烷對管柱實施洗脫。第二純化涉及以2-12%乙酸乙酯/己烷對管柱實施洗脫。產量為4.1 g (82%)。



**步驟4.**將來自步驟3之烯基產物溶解於200 mL甲苯中並加入含有2.8 g 10% Pd/C及1.4 g 5% Pt/C Degussa Type F101 RA/W之Parr氫化瓶中。將該混合物置於Parr氫化器上達18 h。藉助矽藻土墊過濾反應混合物並用200 mL甲苯沖洗該墊。在真空下濃縮甲苯濾液。藉由矽膠層析以5-15%乙酸乙酯/己烷作為洗脫液純化粗製產物。將所得產物(3.6 g, 0.0074 mol)溶解於THF中並冷卻至-78°C。經由注射器經5 min時期向該經冷卻溶液中添加存於己烷中之6.3 mL 1.6M n-BuLi。將反應混合物再攪拌5 min並隨後藉由逐滴添加50 mL水將其淬滅。將該混合物升溫至室溫並隨後用2×150 mL乙酸乙酯萃取。經硫酸鎂乾燥該等萃取物，隨後將其過濾並於真空下濃縮。隨後將該等萃取物通過中性氧化鋁(藉由添加6% (w/w)水失活)管柱，用20-70%二氯甲烷/己烷對該管柱實施洗脫。將該物質溶解於50 mL二氯甲烷中，並在室溫下與0.8 g Si-TAAcoH及0.8 g Si-硫脲一起攪拌18 h。隨後將該混合物過濾，在真空下濃縮並自己烷重結晶所得材料，生成2.93 g(71%產率)產物。

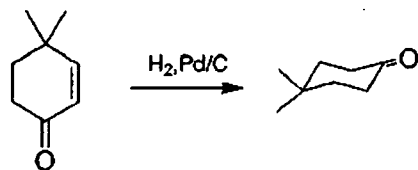


化合物3

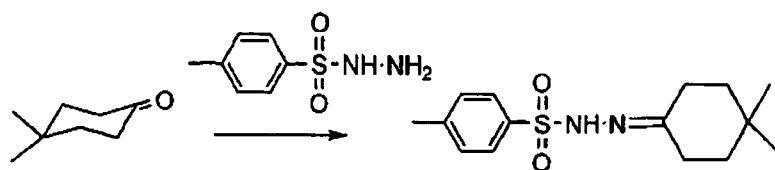
**步驟5.**向50 mL Schlenk管中添加配位體(2.93 g, 6.03 mmol)、Ir(acac)<sub>3</sub> (0.59 g, 1.205 mmol)及十三烷(50滴)。將混合物脫氣並在砂浴中於氫氣下攪拌加熱73 h。在冷卻後，用溶劑混合物(CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>:己烷=1:1)溶解反應混合物並以1:1 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>:己烷作為洗脫液對其實施急驟管

柱層析。自 $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 與甲醇之混合物重結晶管柱層析後之固體，生成 1.18 g 產物。

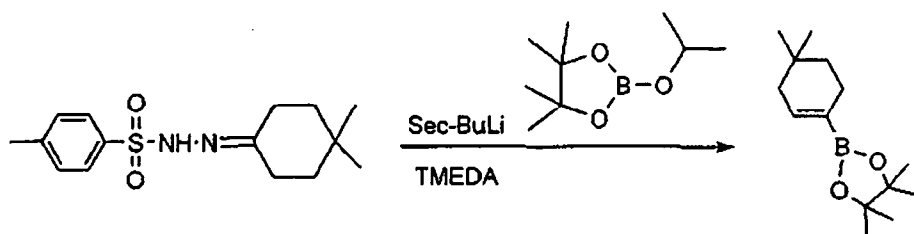
### 化合物4之合成



**步驟1.**將10.0 g (0.08 mol) 4,4-二甲基環己-2-烯酮溶解於150 mL 乙醇中。將該溶液添加至用氮氣吹掃並裝有0.5 g 10%活性炭載鈀之 Parr 氫化容器中。在Parr氫化器上將該異質混合物振盪8 h。藉助矽藻土過濾反應混合物並將其蒸發至乾燥，生成7.9 g 產物。

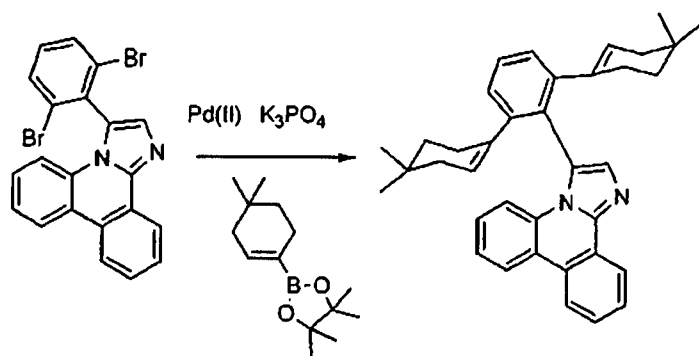


**步驟2.**在 $100^\circ\text{C}$ 下將對甲苯基磺醯基肼(6.8 g, 36.7 mmol)、60 mL 無水乙醇及酮(4.64 g, 36.76 mmol)之混合物加熱至回流。在加熱2 h 後，使用冰水浴將反應混合物冷卻以使大部分脞沉澱。藉由過濾收集所得固體並用冰冷乙醇充分洗滌。經1 h 空氣乾燥可獲得7.67 g 所需脞。

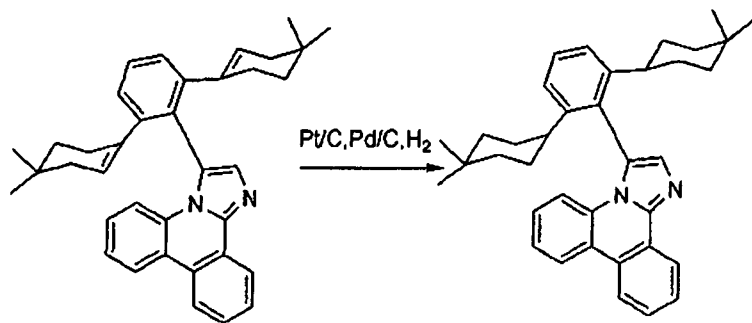


**步驟3.**向裝配有磁力攪拌棒及橡膠隔片之500 mL 乾燥圓底燒瓶中 添加脞(5 g, 17 mmol)，之後添加100 mL 無水己烷。向該混合物中添

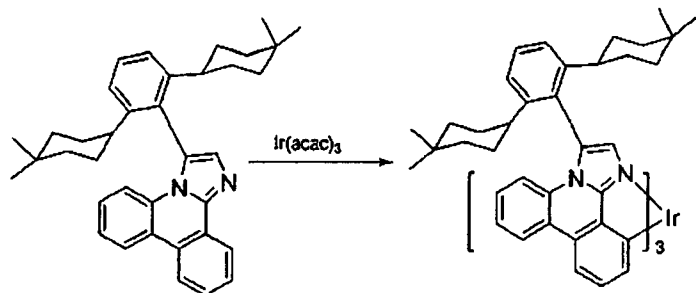
加100 mL無水TMEDA，並將反應混合物冷卻至 $-78^{\circ}\text{C}$ 並且在該溫度下維持15 min，此後經15 min添加60.6 mL (84.9 mmol) 2.5M sec-BuLi。然後在 $-78^{\circ}\text{C}$ 下將反應混合物攪拌1 h，並隨後使其達到室溫並且將其攪拌1.5 h。將混合物再次冷卻至 $-78^{\circ}\text{C}$ ，並隨後添加15.8 g (84.9 mmol)異丙醇頻哪醇硼酸酯(pinacol isopropyl borate)。在 $-78^{\circ}\text{C}$ 下將反應物再攪拌1小時，並隨後使其達到室溫並且將其攪拌3 h。藉由添加飽和 $\text{NH}_4\text{Cl}$ 使反應物淬滅並隨後用醚萃取3次。經無水 $\text{MgSO}_4$ 乾燥合併的有機萃取物，將其過濾並在真空中濃縮。對殘餘物實施急驟層析(存於己烷中之40%  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ )，獲得1.53 g (38%)期望產物。



**步驟4.**向200 mL燒瓶中添加二溴化物(5 g, 11.06 mmol)、來自步驟3之硼酸頻哪醇酯(11.26 g, 47.67 mmol)、Pd(OAc)<sub>2</sub>(819 mg, 3.64 mmol)、二環己基膦基-2',6'-二甲氧基聯苯(2.9 g, 7.3 mmol)、磷酸三鉀單水合物(12.73 g, 55.29 mmol)、150 mL甲苯及150 mL水。藉由冷凍-抽氣-解凍技術將反應混合物完全脫氣。將反應物加熱至回流並在氮氣氣氛下攪拌16 h。藉助矽藻土墊將反應混合物過濾。自濾液分離甲苯層。用75 mL甲苯萃取水層。將甲苯萃取物合併，經硫酸鈉乾燥，隨後過濾並在真空下濃縮。將粗製產物通過矽膠管柱。用存於己烷中之10%乙酸乙酯對該管柱實施洗脫，生成4.5 g期望產物。



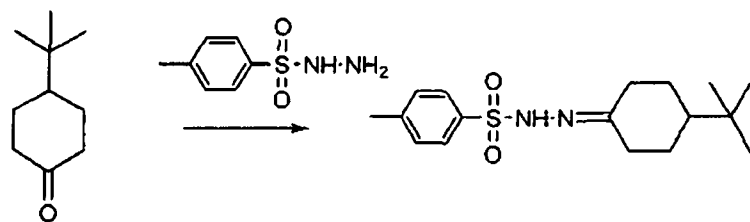
**步驟5.**將來自步驟4之4.5(8.81 mol)環乙烯基產物溶解於150 mL 甲苯中。將該溶液添加至Parr氫化容器中，該容器已用氮氣吹掃且裝有3.2 g 10%活性炭載鈀及2.8 g潤濕活性炭載鉑(5 wt%(乾基))(Degussa type F101)。在Parr氫化器上將該異質混合物振盪16 h。藉助矽藻土墊過濾反應混合物。在真空下濃縮甲苯濾液。將粗製產物通過矽膠管柱。用存於己烷中之10%乙酸乙酯對該管柱實施洗脫，生成4.24 g產物。



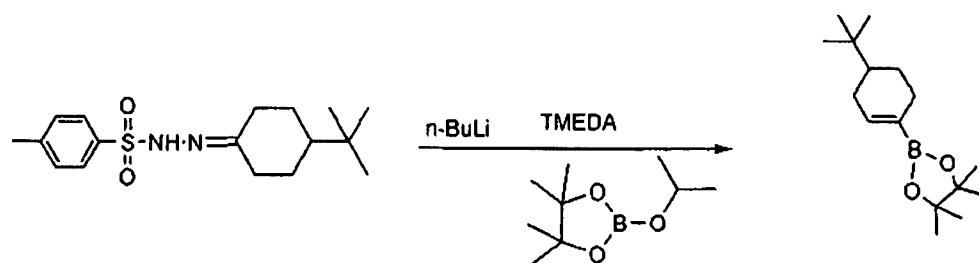
化合物4

**步驟6.**向50 mL Schlenk管中添加配位體(2.57 g, 5.03 mmol)、 $\text{Ir}(\text{acac})_3$  (0.495 g, 1.006 mmol)及十三烷(50滴)。將混合物脫氣並在砂浴中於氮氣氣氛下攪拌加熱73 h。在冷卻後，用溶劑混合物( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ：己烷=1:1)溶解反應混合物並對其實施急驟管柱層析( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ：己烷=1:1)。自 $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ 與甲醇之混合物重結晶管柱層析後之固體，生成0.8 g產物。

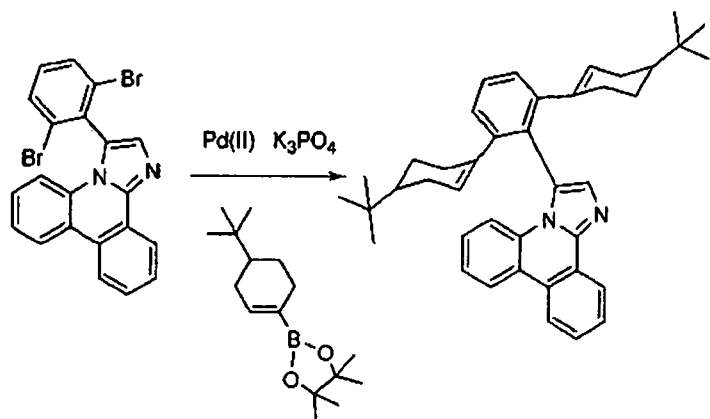
化合物5之合成



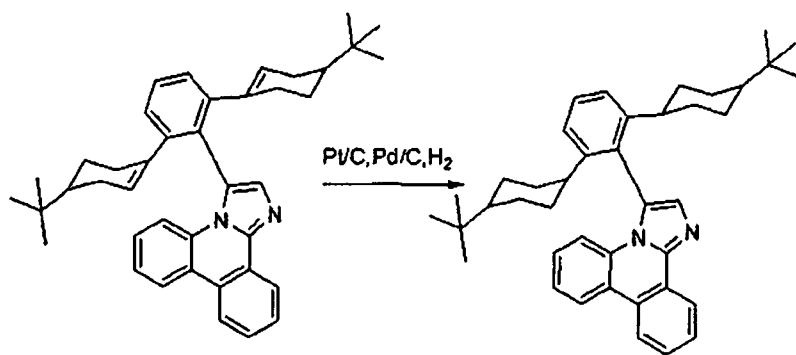
**步驟1.**將4-第三丁基環己酮(26.5 g, 0.172 mol)、對甲苯磺醯基醯肼(31.74 g, 0.171 mol)及450 mL無水乙醇之混合物加熱至回流達4 h，隨後冷卻至室溫。將反應混合物過濾並在真空下乾燥，生成35 g產物。



**步驟2.**向裝配有磁力攪拌棒及橡膠隔片之500 mL乾燥圓底燒瓶中添加脛(7.5 g, 0.023 mol)，之後添加70 mL無水己烷。向該混合物中添加70 mL無水TMEDA並將反應混合物冷卻至-78°C並且在該溫度下維持15 min，此後經15 min添加存於己烷中之37 mL (0.092 mol) 2.5M n-BuLi。然後在-78°C下將反應混合物攪拌1 h並隨後使其達到室溫並且將其攪拌3.5 h。使混合物再次達到-78°C並添加17 g (0.092 mol)異丙醇頻哪醇硼酸酯。在-78°C下將反應物再攪拌1小時並隨後使其達到室溫並且將其攪拌過夜。藉由添加飽和NH<sub>4</sub>Cl使反應物淬滅並隨後用200 mL醚使其分層。將該異質混合物通過矽藻土墊。分離醚層並用300 mL醚萃取水層。經無水MgSO<sub>4</sub>乾燥合併的有機萃取物，將其過濾並在真空下濃縮。將粗製產物通過矽膠管柱管柱(20-40%二氯甲烷/己烷)。獲得4.4 g(72%產率)產物。

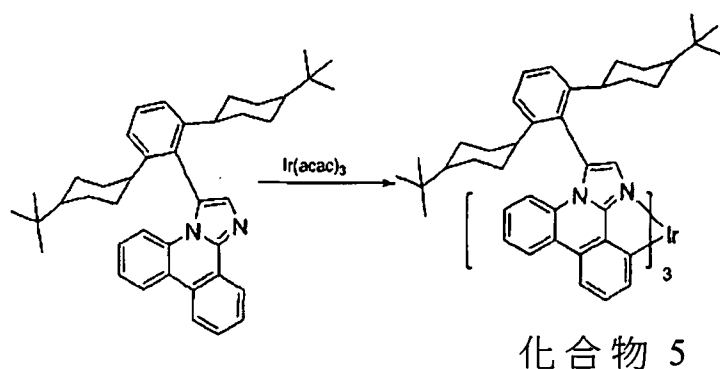


**步驟3.**向1 L圓底燒瓶中添加二溴化物(5 g, 0.011 mol)、來自步驟2之硼酸頻哪醇酯(7.3 g, 0.0276 mol)、叁(二亞苄基丙酮)二鈀(O) (0.2 g, 0.22 mmol)、二環己基膦基-2',6'-二甲氧基聯苯(0.36 g, 0.88 mmol)、磷酸三鉀單水合物(14.0 g, 0.066 mol)、300 mL甲苯及80 mL水。將反應混合物抽真空並用氮氣回填。隨後將反應物加熱至回流並在氮氣氣氛下攪拌16 h。藉助矽藻土墊過濾異質反應混合物。分離甲苯層並用100 mL甲苯萃取水層。合併甲苯部分並將其經硫酸鎂乾燥。隨後將該乾燥有機混合物過濾並在真空下濃縮。藉由矽膠層析純化粗製產物。用1-4%乙酸乙酯/二氯甲烷對管柱實施洗脫。獲得5 g(80%產率)產物。



**步驟4.**將來自步驟3之烯基產物(5.0 g, 0.0088 mol)溶解於200 mL甲苯中並加入業已含有3.8 g 10% Pd/C及3.0g 5% Pt/C Degussa Type F101 RA/W之Parr氫化瓶中。將該混合物置於Parr氫化器上達58 h。藉助矽藻土墊過濾反應混合物並用200 mL甲苯沖洗該墊。在真空下濃

縮甲苯濾液，生成4.3 g粗製產物。藉由矽膠層析純化粗製產物。用1-5%乙酸乙酯/二氯甲烷對管柱實施洗脫。接下來，將得自該管柱之產物溶解於50 mL二氯甲烷中並在室溫下與1.1 g Si-TAAcoH及1.1 g Si-硫脲一起攪拌18 h。此係為了移除任何殘餘鈦。將所得產物(3.9 g, 0.0068 mol)溶解於THF中並冷卻至-78°C。經由注射器經5 min時期向該經冷卻溶液中添加存於己烷中之5.8 mL 1.6 M n-BuLi。將反應混合物再攪拌5分鐘並隨後藉由逐滴添加50 mL水將其淬滅。將該混合物升溫至室溫並隨後用2×150 mL乙酸乙酯萃取。經硫酸鎂乾燥該等萃取物，隨後將其過濾並且於真空下濃縮。隨後將該等萃取物通過中性氧化鋁(藉由添加6% (w/w)水失活)管柱，用30-60%二氯甲烷/己烷對該管柱實施洗脫。獲得3.6 g產物。自己烷/乙酸乙酯重結晶得自中性氧化鋁管柱之產物。獲得2.90 g產物。



**步驟5.**向50 mL Schlenk管中添加配位體(2.78 g, 4.86 mmol)、Ir(acac)<sub>3</sub> (0.478 g, 0.97 mmol)及十三烷(50滴)。將混合物脫氣並在砂浴中於氬氣下攪拌加熱70 h。在冷卻後，用溶劑混合物(CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>:己烷=1:1)溶解反應混合物並對其實施急驟管柱層析(CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>:己烷=1:1)。自CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>與甲醇之混合物重結晶管柱層析後之固體，生成1.0 g產物。

### 裝置實例

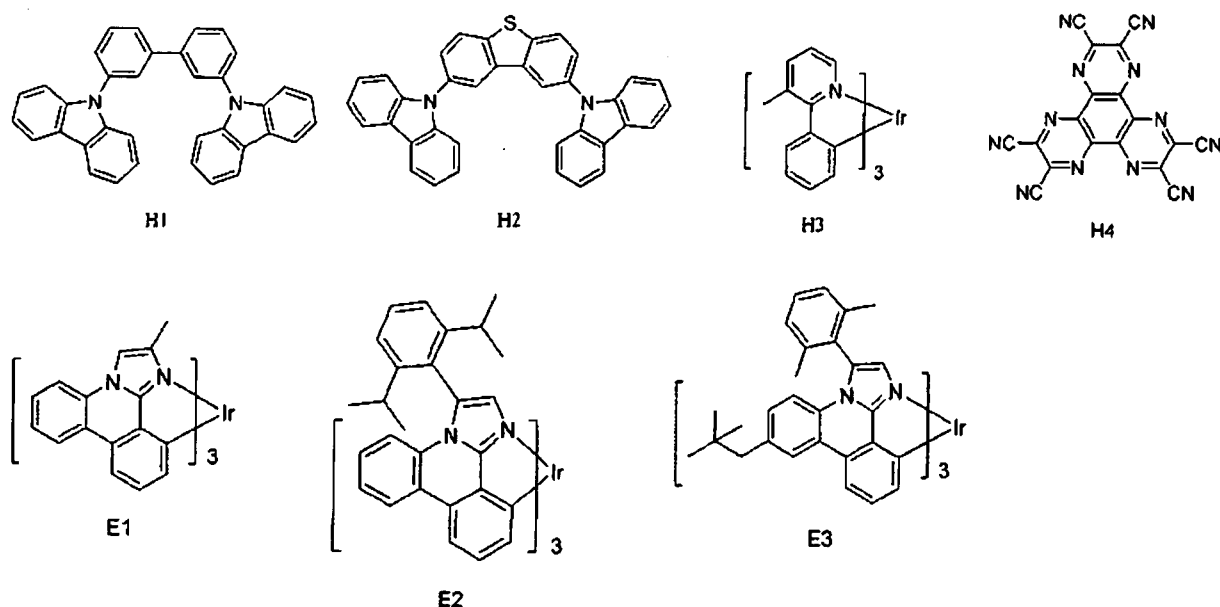
所有裝置實例皆由高真空(<10<sup>-7</sup>托)熱蒸發製作。陽極電極係1200Å氧化銦錫(ITO)。陰極係由10Å LiF再加上1000Å Al組成。製作

後立即在氮氣手套箱(<1 ppm H<sub>2</sub>O及O<sub>2</sub>)中用經環氧樹脂密封之玻璃蓋封裝所有裝置，且在包裝內納入水分吸收劑。

在表2中裝置實例1及2之有機堆疊自ITO表面開始依次由以下組成：10 nm H3或H4作為電洞注入層(HIL)、30 nm 4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-苯基胺基]聯苯( $\alpha$ -NPD)作為電洞傳送層(HTL)、摻雜有9%摻雜物發射體(例如，本發明化合物1至2)之30 nm H2作為發射層(EML)、5 nm H2作為ETL2及40 nm Alq作為ETL1。

以類似於裝置實例之方式製作比較實例1至3，只是E1、E2或E3用作發射摻雜物且H1用作EML中之主體材料及用作ETL2材料。

本文所用以下化合物具有以下結構：



提供用於OLED發射層之特定發射摻雜物，此可獲得具有尤佳性質之裝置。裝置結構及裝置測試結果提供於表2中。具有使用化合物1及2作為發射摻雜物之發射層之裝置展示經改良裝置效能及穩定性以及經改良顏色，表明該等經取代咪唑并啡啶化合物可能有益。

固態光致發光量子產率(PL%)可自聚甲基丙烯酸甲酯(PMMA)(光學惰性聚合物基質)中之1重量%摻雜物測定。藉由將摻雜物及PMMA

溶解於1 mL甲苯/100 mg固體(90 mg PMMA及10 mg摻雜物)中來製備各試樣。將各試樣過濾並滴鑄至預清潔石英基板上。在溶劑蒸發後，使用Hamamatsu絕對PL量子產率量測系統量測PL量子產率。該系統由積分球、氙燈源、單色儀及多通道CCD光譜儀構成，且收納於惰性氣氛手套箱中以防止氧產生淬滅。激發波長係342 nm。

表2

裝置實例	發射體(摻雜%)	1000 cd/m <sup>2</sup> 下之EQE (%)	1000 cd/m <sup>2</sup> 下之V(V)	2000 cd/m <sup>2</sup> 下之T <sub>1/2</sub> (h)	CIE	昇華溫度(°C)	HIL	主體材料	ETL2	PL%
比較1	E1 (9)	12	8	70	0.15,0.23	330	H3	H1	H1	52
比較2	E2 (9)	7	8	200	0.15,0.24	300	H4	H1	H1	26
比較3	E3 (9)	8	8	180	0.15,0.26	320	H4	H1	H1	40
1	1(9)	12	7	200	0.15,0.24	265	H3	H2	H2	56
2	2(9)	12	8	300	0.15,0.23	310	H4	H2	H2	60

自裝置實例1及2可見裝置效能與固態PL量子產率相關。與比較實例2相比，比較實例1給出更高PL效能。據信存在於比較實例1中所用E1之烷基取代抑制自身淬滅，此產生較高PL及EL效能。比較實例2使用E2，其具有2,6-二甲基扭曲芳基及相對低之PL量子產率。在該等情形中，2,6-烷基取代不夠龐大，不足以抑制自身淬滅。此外，比較實例3使用E3，其具有在配位體之另一環上實施取代之龐大新戊基，但此並不能明顯改良PL量子產率。吾人發現用龐大烷基對扭曲芳基實施取代之化合物1及2具有較高PL量子產率及(因此)經改良裝置效能。烷基特別有益，此乃因該等烷基可產生最小紅移。據信使用龐大烷基取代基(即，含有4個或更多個原子之烷基)係對化合物進行修飾以抑制自身淬滅之新穎方法。該等經龐大基團取代之化合物不會遭受

4-咪唑位經烷基取代之化合物之壽命限制，如比較實例1中所用E1所見。

如比較實例1中對於E1所展示，將甲基連接至咪唑并啡啶之2位可增加摻雜物之固態量子產率並達成較高裝置效能。然而，若干實例表明在該位添加烷基取代基可產生具有短壽命(即，在2000尼特下短於100小時)之裝置。或者，吾人發現連接龐大烷基(即，具有4個或更多個原子之烷基)可增加光致發光效能及裝置效能。舉例而言，化合物1及2具有類似於比較實例1之高效能及大於比較實例2及3之效能。龐大烷基取代基之選擇與取代位點(即，扭曲芳基之2及/或n位)二者對於獲得增加的效能而言可能均較重要。舉例而言，比較實例3中所用E3具有遠離咪唑之龐大新戊基取代基，但該化合物具有相對較低的PL產率(40%)。值得注意地，本文所提供化合物表現出明顯較長的裝置壽命。舉例而言，在與比較實例1進行比較時，本發明化合物1及2之裝置壽命為其3至4倍。在扭曲芳基上實施龐大烷基取代亦可改良裝置處理性。舉例而言，化合物1具有異丁基取代且具有265°C之昇華溫度，其係在該咪唑并[1,2-f]啡啶銻錯合物家族中迄今所觀察到的最低昇華溫度。

應瞭解，本文所述之各種實施例僅用於舉例說明，且其不欲限制本發明之範圍。舉例而言，許多本文所述材料及結構可由其他材料及結構代替，此並不背離本發明之精神。因此，如熟習此項技術者將顯而易見，所主張之本發明可包括本文所述特定實例及較佳實施例之變型。應瞭解，關於本發明為何可行之各種理論並不意欲具有限制性。

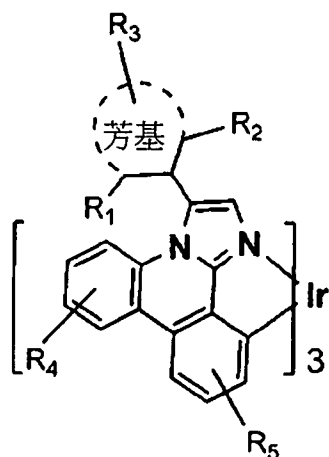
#### 【符號說明】

- 100 有機發光裝置
- 110 基板

115	陽極
120	電洞注入層
125	電洞傳送層
130	電子阻擋層
135	發射層
140	電洞阻擋層
145	電子傳送層
150	電子注入層
155	保護層
160	陰極
162	第一導電層
164	第二導電層
200	倒置有機發光裝置
210	基板
215	陰極
220	發射層
225	電洞傳送層
230	陽極

## 申請專利範圍

1. 一種具有下式之化合物，



其中 $R_1$ 及 $R_2$ 獨立選自由氫、烷基及芳基組成之群；

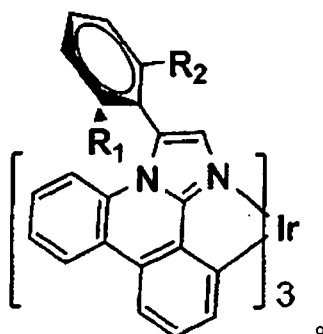
其中 $R_1$ 及 $R_2$ 中至少一個係環狀且具有4個或更多個碳原子之烷基；

其中 $R_3$ 、 $R_4$ 及 $R_5$ 可代表單、二、三或四取代；且

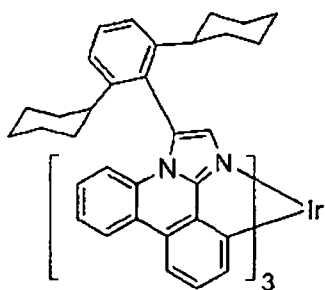
其中 $R_3$ 、 $R_4$ 及 $R_5$ 獨立選自由氫、烷基及芳基組成之群。

2. 如請求項1之化合物，其中該環狀且具有4個或更多個碳原子之烷基係具支鏈烷基。
3. 如請求項1之化合物，其中該環狀且具有4個或更多個碳原子之烷基係二環烷基。
4. 如請求項1之化合物，其中該環狀且具有4個或更多個碳原子之烷基係多環烷基。
5. 如請求項1之化合物，其中該環狀且具有4個或更多個碳原子之烷基不包括任何雜原子。
6. 如請求項1之化合物，其中該環狀且具有4個或更多個碳原子之烷基係含有氧原子、氮原子或硫原子中至少一者之雜烷基。
7. 如請求項1之化合物，其中 $R_1$ 與 $R_2$ 相同。

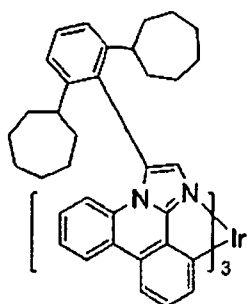
8. 如請求項1之化合物，其中 $R_1$ 與 $R_2$ 不同。
9. 如請求項1之化合物，其中 $R_1$ 及 $R_2$ 之一係芳基。
10. 如請求項1之化合物，其中該化合物具有下式：



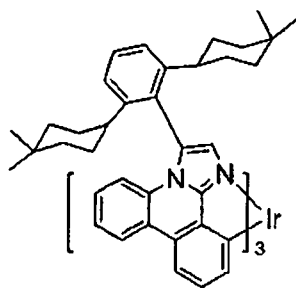
11. 如請求項1之化合物，其中該化合物選自由以下組成之群：



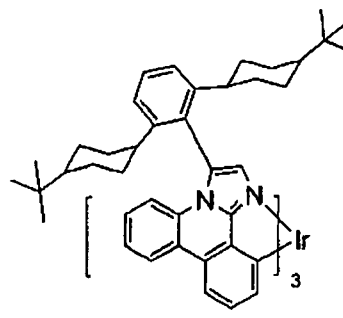
化合物 2



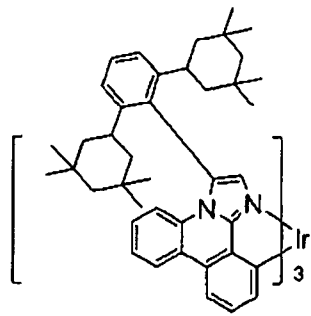
化合物 3



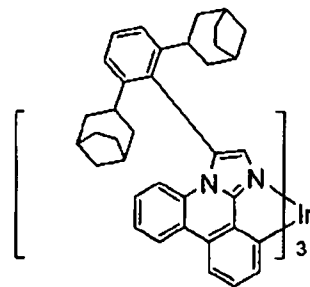
化合物 4



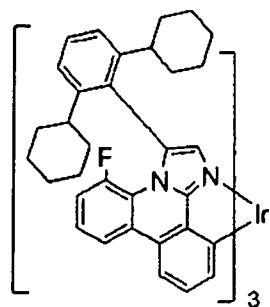
化合物 5



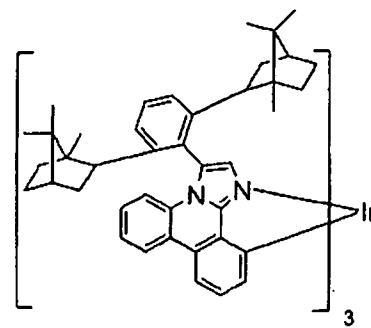
化合物 7



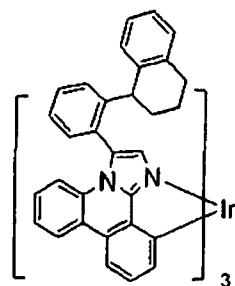
化合物 8



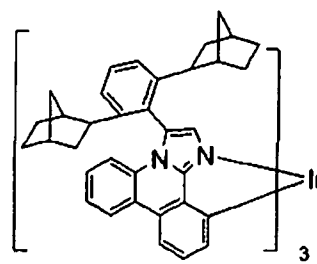
化合物 9



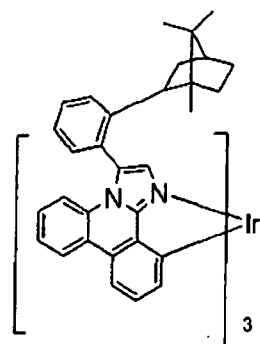
化合物 10



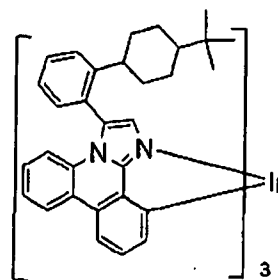
化合物 12



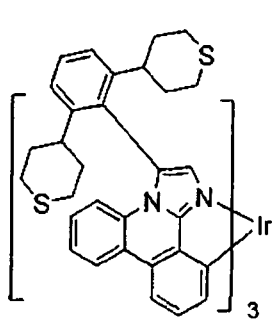
化合物 14



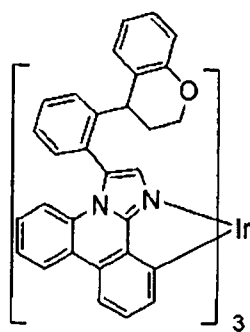
化合物 15



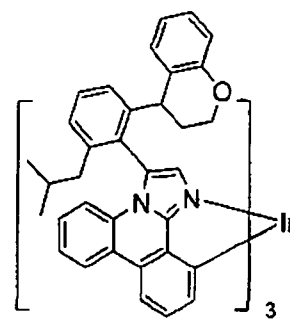
化合物 16



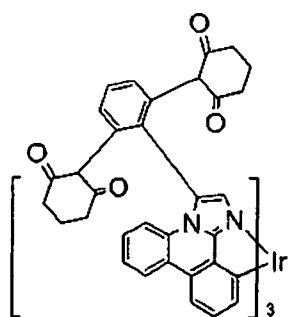
化合物 18



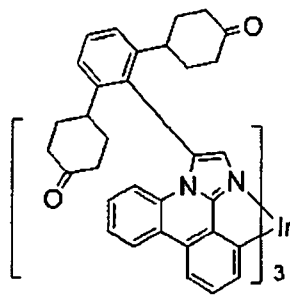
化合物 19



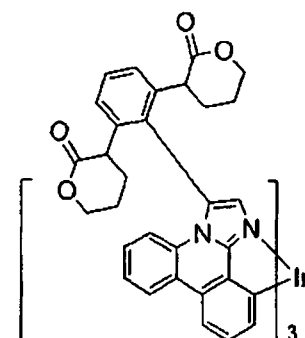
化合物 20



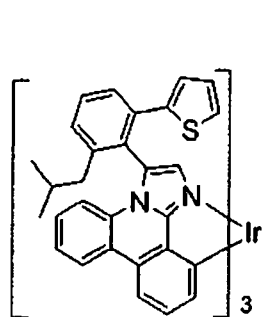
化合物 21



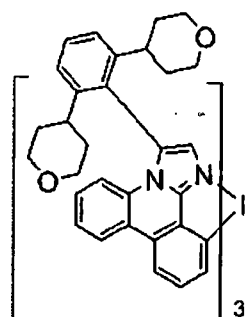
化合物 22



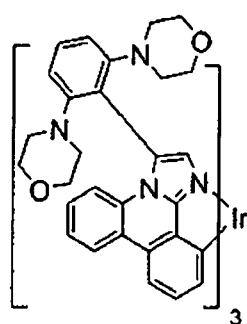
化合物 23



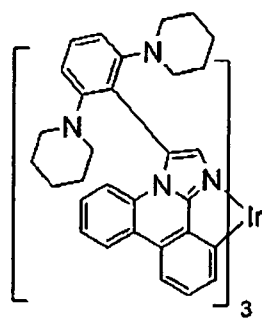
化合物 25



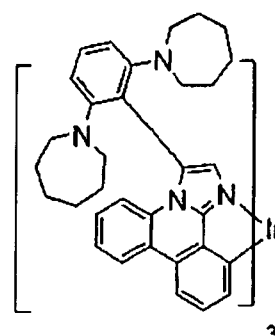
化合物 26



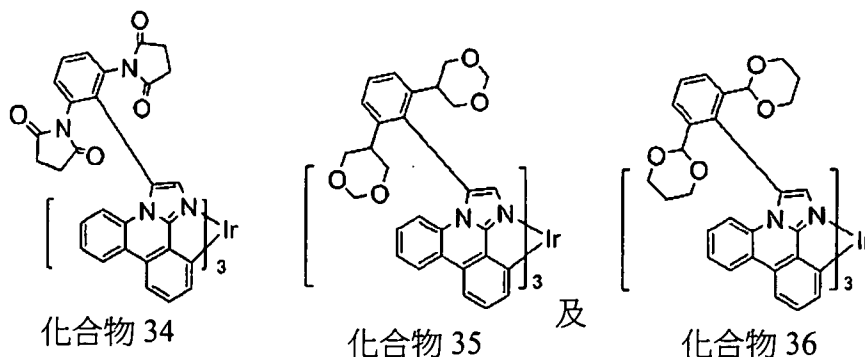
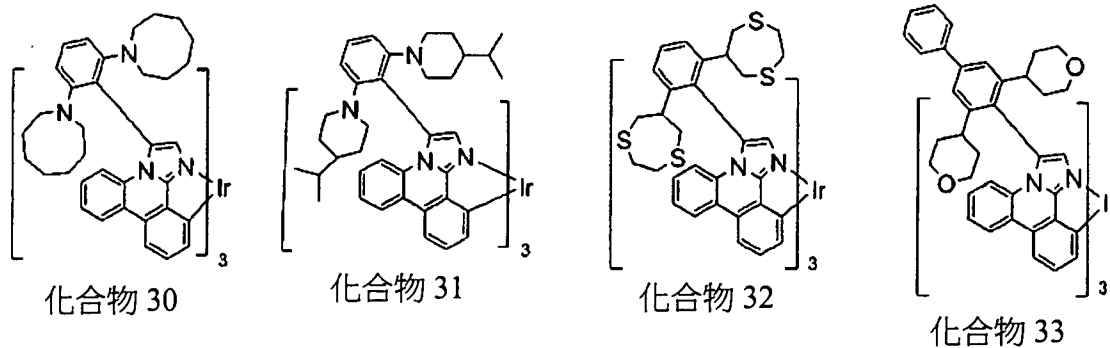
化合物 27



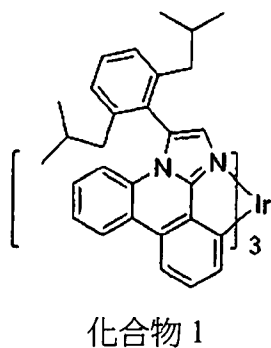
化合物 28



化合物 29



12. 一種具有下式之化合物：

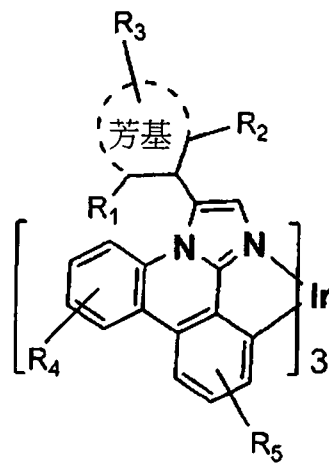


13. 一種包含有機發光裝置之第一裝置，其進一步包含：

陽極；

陰極；及

有機層，其佈置於該陽極與該陰極之間，該有機層進一步包含具有下式之化合物：



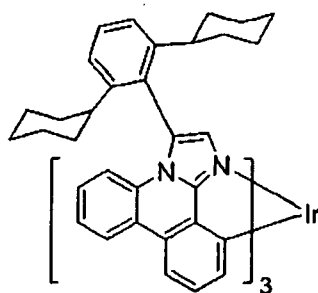
其中 $R_1$ 及 $R_2$ 獨立選自由氫、烷基及芳基組成之群；

其中 $R_1$ 及 $R_2$ 中至少一個係環狀且具有4個或更多個碳原子之烷基；

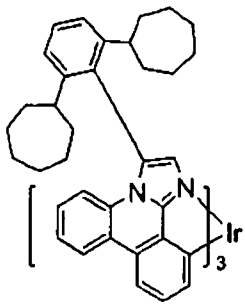
其中 $R_3$ 、 $R_4$ 及 $R_5$ 可代表單、二、三或四取代；且

其中 $R_3$ 、 $R_4$ 及 $R_5$ 獨立選自由氫、烷基及芳基組成之群。

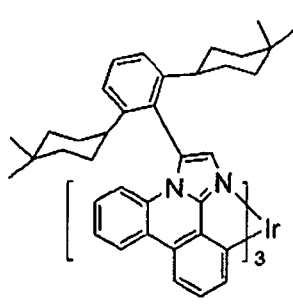
14. 如請求項13之有機發光裝置，其中該第一裝置係消費產品。
15. 如請求項13之有機發光裝置，其中該化合物係選自由以下組成之群：



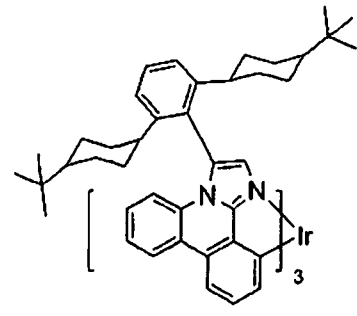
化合物 2



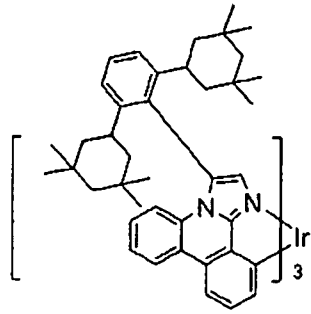
化合物 3



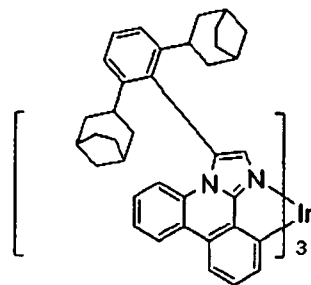
化合物 4



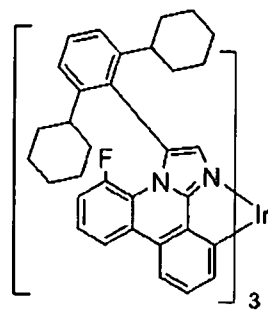
化合物 5



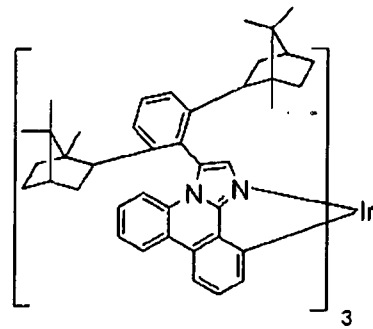
化合物 7



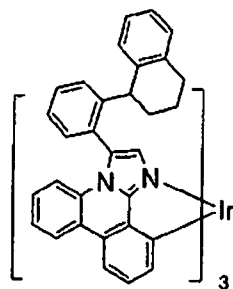
化合物 8



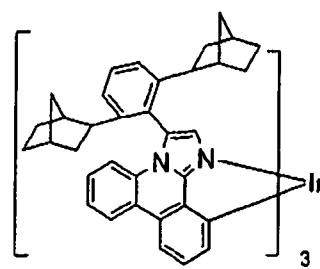
化合物 9



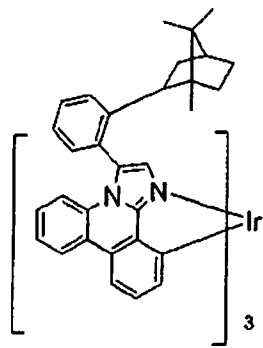
化合物 10



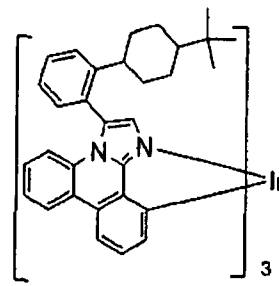
化合物 12



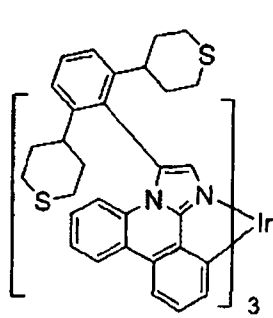
化合物 14



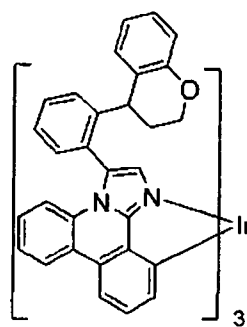
化合物 15



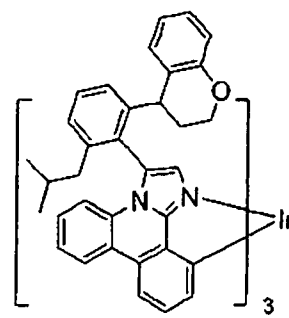
化合物 16



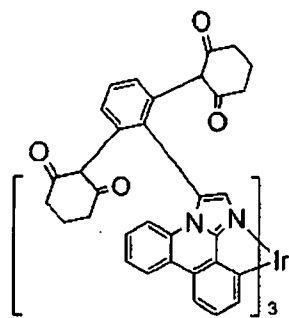
化合物 18



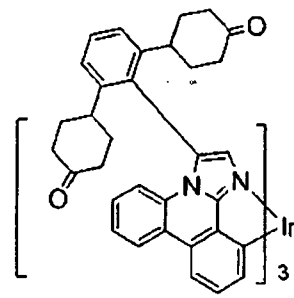
化合物 19



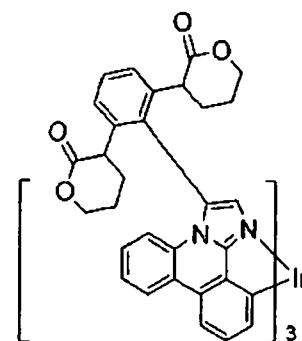
化合物 20



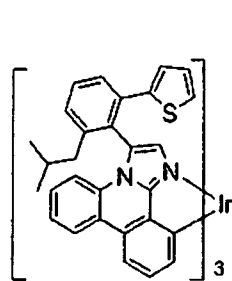
化合物 21



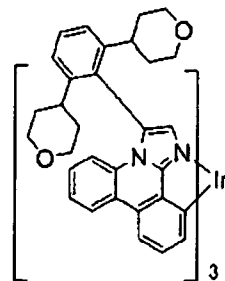
化合物 22



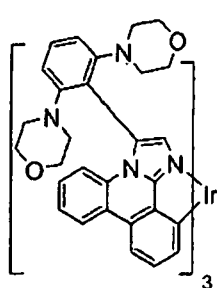
化合物 23



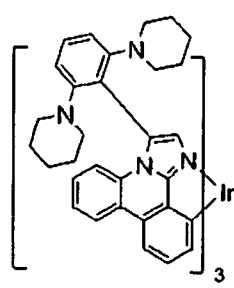
化合物 25



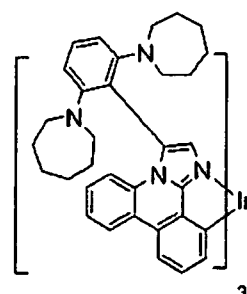
化合物 26



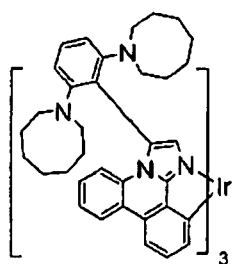
化合物 27



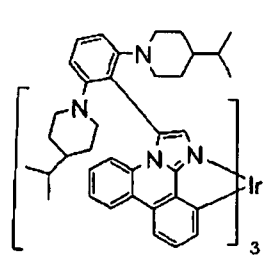
化合物 28



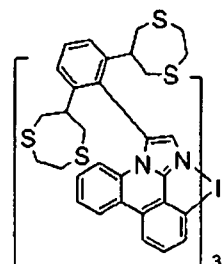
化合物 29



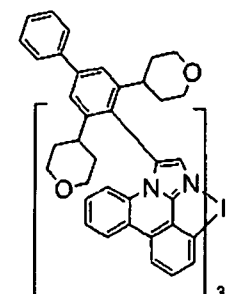
化合物 30



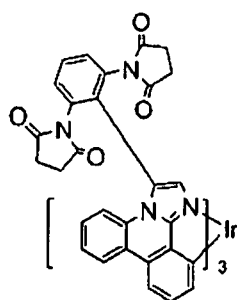
化合物 31



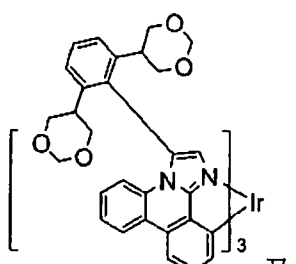
化合物 32



化合物 33

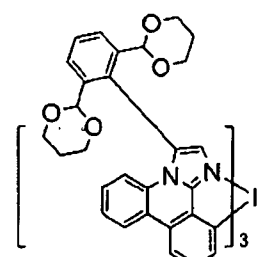


化合物 34



化合物 35

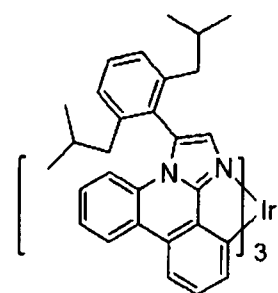
及



化合物 36

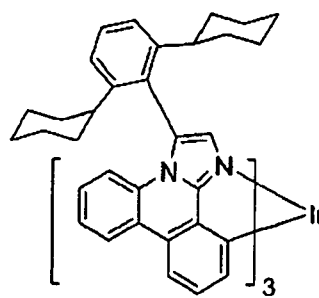
。

16. 如請求項13之有機發光裝置，其中該有機層進一步包含選自由以下組成之群之化合物：



化合物 1

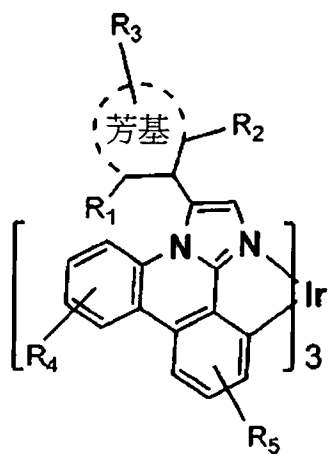
及



化合物 2

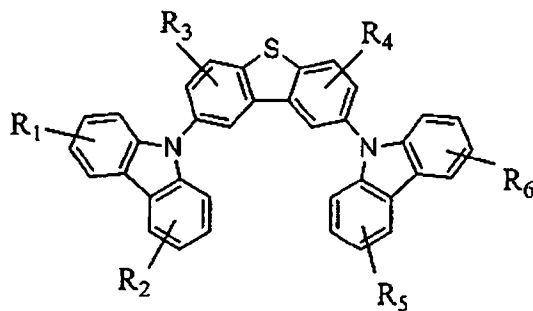
。

17. 如請求項13之有機發光裝置，其中該有機層係發射層且該具有



之化合物係發射化合物。

18. 如請求項13之有機發光裝置，其中該發射層進一步包含具有下式之主體材料：



其中 $R_1$ 至 $R_6$ 中之每一者皆獨立選自由以下組成之群：任一烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基、雜芳基及氫，且其中 $R_1$ 至 $R_6$ 中之每一者可代表多次取代。

圖式

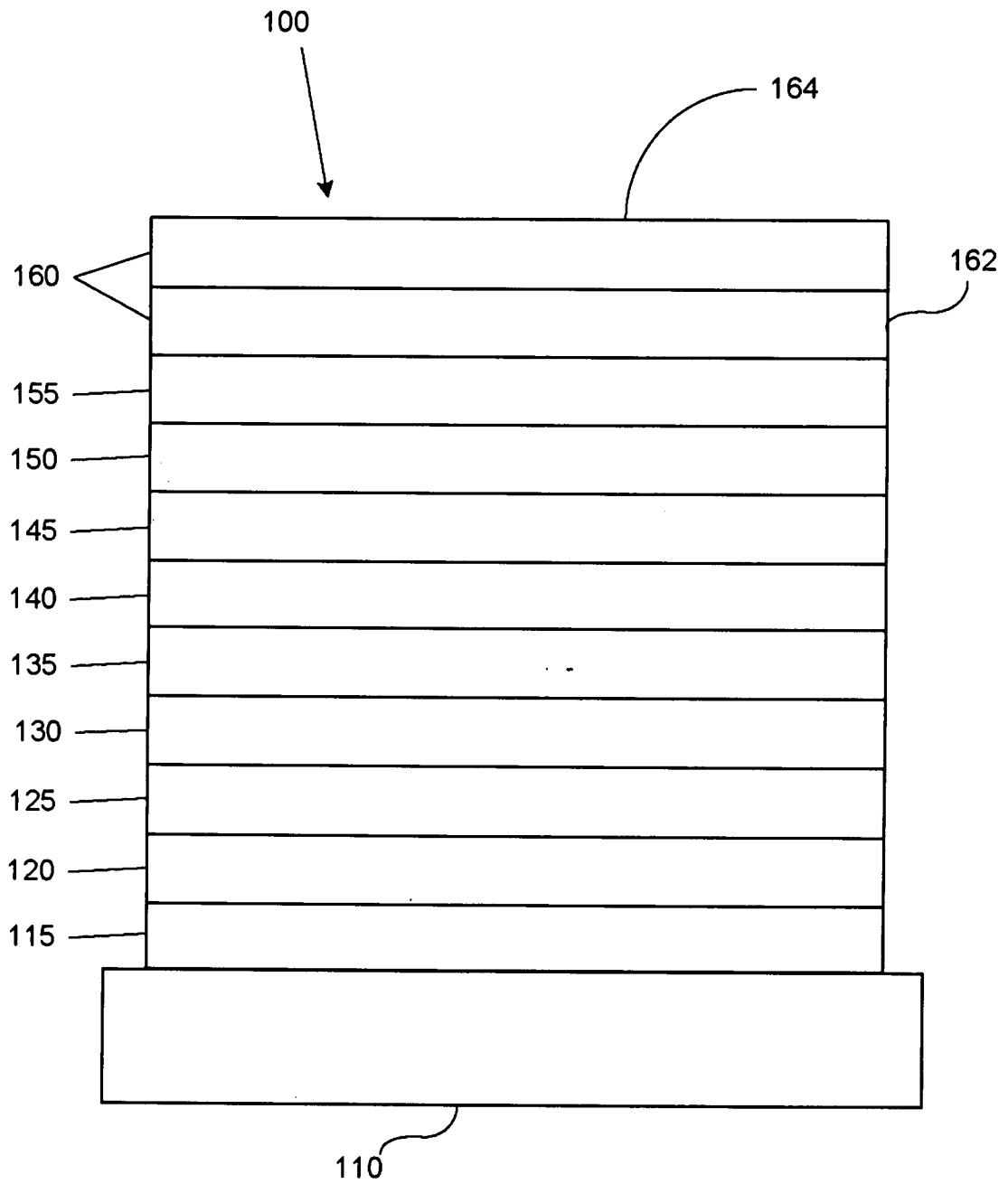


圖1

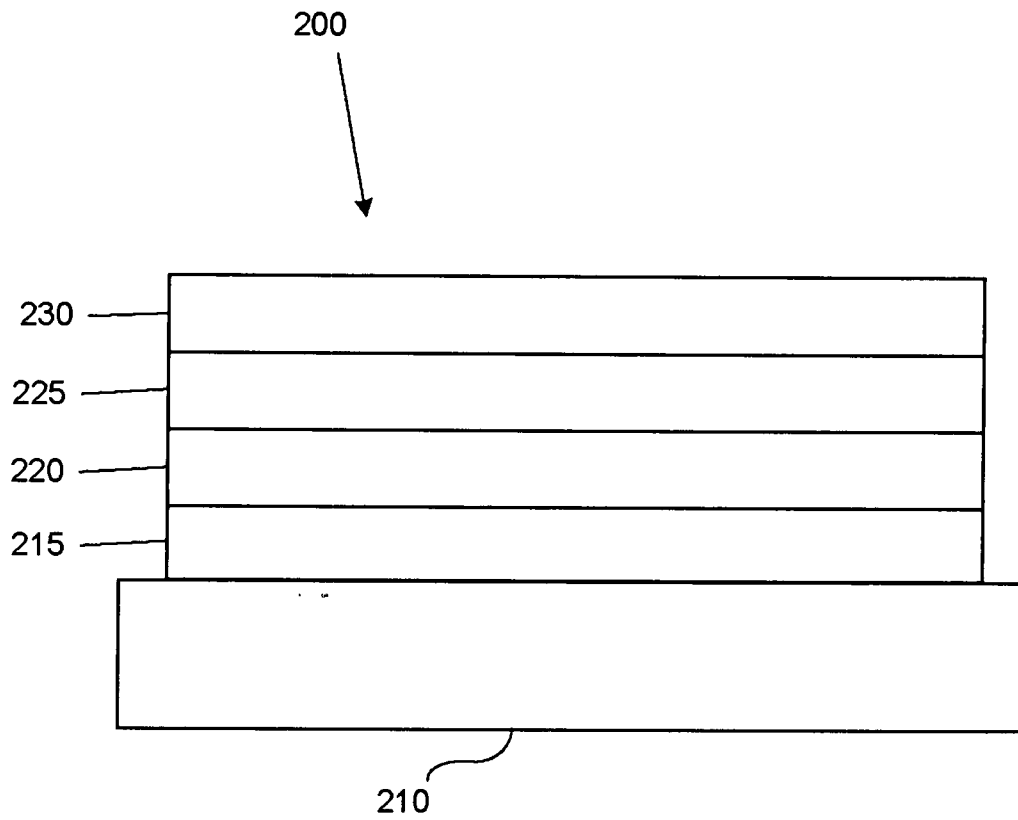


圖2

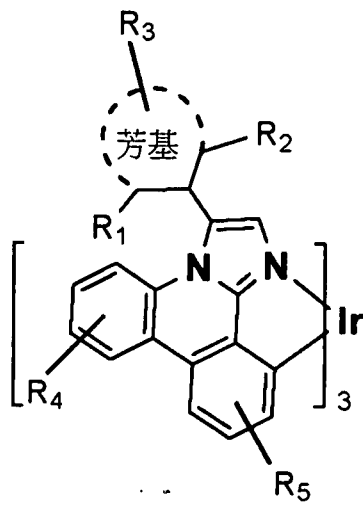


圖3