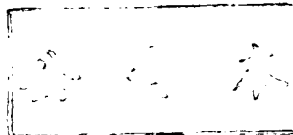


年 月 日 補 充 18 本



100年11月18日修正替換頁

# 發明專利說明書

(本說明書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號： 951-6829

※申請日期： 95.7.21

※IPC 分類：

C01D 235/18, C01D 49/04  
C01D 401/12

## 一、發明名稱：(中文/英文)

製備新咪唑衍生物之方法及利用前述方法製作之有機電子元件  
NEW IMIDAZOLE DERIVATIVES, PREPARATION METHOD  
THEREOF AND ORGANIC ELECTRONIC DEVICE USING THE SAME

## 二、申請人：(共 1 人)

姓名或名稱：(中文/英文)

LG 化學股份有限公司 / LG CHEM. LTD.

代表人：(中文/英文) 李翰宣 / Han Sun LEE

住居所或營業所地址：(中文/英文)

韓國郵便番號 150-721 首爾市永登浦區汝矣島洞 20 番地  
20, Yeouido-dong, Youngdungpo-gu, Seoul, 150-721, Republic of Korea

國 籍：(中文/英文) 大韓民國 / REPUBLIC OF KOREA

## 三、發明人：(共 4 人)

1. 姓 名：(中文/英文)

裴在順 / BAE, JAE SOON

國 籍：(中文/英文) 大韓民國 / REPUBLIC OF KOREA

2. 姓 名：(中文/英文)

李東勳 / LEE, DONG HOON

國 籍：(中文/英文) 大韓民國 / REPUBLIC OF KOREA

3. 姓 名：(中文/英文)

李大雄 / LEE, DAE WOONG

國 籍：(中文/英文) 大韓民國 / REPUBLIC OF KOREA

4. 姓 名：(中文/英文)

張俊起 / JANG, JUN GI

國 籍：(中文/英文) 大韓民國 / REPUBLIC OF KOREA

#### 四、聲明事項：

主張專利法第二十二條第二項  第一款或  第二款規定之事實，其實發生日期為： 年 月 日。

申請前已向下列國家（地區）申請專利：

【格式請依：受理國家（地區）、申請日、申請案號 順序註記】

有主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

1. 大韓民國；2005/07/22；10-2005-0066730

無主張專利法第二十七條第一項國際優先權：

主張專利法第二十九條第一項國內優先權：

【格式請依：申請日、申請案號 順序註記】

主張專利法第三十條生物材料：

須寄存生物材料者：

國內生物材料 【格式請依：寄存機構、日期、號碼 順序註記】

國外生物材料 【格式請依：寄存國家、機構、日期、號碼 順序註記】

不須寄存生物材料者：

所屬技術領域中具有通常知識者易於獲得時，不須寄存。

## 九、發明說明：

### 【發明所屬之技術領域】

本發明係關於一新的咪唑衍生物，一製備新咪唑衍生物之方法及利用前述方法製作之有機電子元件。

本專利申請係主張於2005年7月22日向韓國智慧財產局所提出韓國專利申請號碼10-2005-0066730之申請日優先權，其所揭露之事項已依照其關聯性，完整地併入本文中。

### 【先前技術】

用於本說明書中之用語“有機電子元件”係指一元件，該元件需在一電極和一有機材料間，利用電洞及／或電子來進行電荷交換。該有機電子元件大半可依其操作原理而被分成下列二類：一類型是具有一種型態之電子元件，在該種型態中，藉由從一外在光源將光子注入一元件中，以在一有機材料層中形成一激子，並且該激子可被分成一電子和一電洞，該電子及電洞被各別轉移至一不同的電極，以便做為一電流源（電壓源）；而另一種類型是具一種型態之一電子元件，在該種型態中，一電洞和／或電子被注入至一有機材料半體導中，藉由施加一電壓或電流至二或多個電極上，使其與一電極形成一界面，使該元件得利用該注入的電子和電洞來運轉。

有機電子元件之實施例包括一有機發光元件、一有機太陽能電池、一有機感光鼓(OPC)及一有機電晶體，該些元件全都需要一電洞注入或電洞傳輸材料、一電子注入或電子傳輸材料、或一發光材料，以驅動該元件。在下文中，該有機發光元件會被主要地且詳細地說明，但在上面所提到之有機電

子元件、電洞注入或電洞傳輸材料、一電子注入或電子傳輸材料、或一發光材料會依照相似的原理來產生功用。

一般而言，“有機發光現象”之用語係指一現象，在該現象中，利用一有機材料可以將電能轉變成光能。使用有機發光現象之有機發光元件具有一結構，通常會包括一陽極、一陰極及一置放在該二者間之有機材料層。在本文中，有機材料層大都是以一包括不同材料的層之多層結構所形成的，例如，電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層、電子注入層及其相類似者，以改良有機發光元件之效能及穩定度。在具有這樣一結構之有機發光元件中，當在二電極間施加一電壓時，從陽極的電洞和從一陰極的電子會被注入至有機材料層中，被注入的電洞和電子會結合在一起而形成激子。甚且，當該激子掉到一基態時，就會發出光。這樣一有機發光元件已知具有一些特性，如自發光、高亮度、高效能、低驅動電壓、廣視角、高對比及高速反應。

做為有機發光元件之有機材料層之材料，依照他們的功用可以被區分為一發光材料和一光電材料，例如，一電洞注入材料、一電洞傳輸材料、一電子傳輸材料和一電子注入材料。此外，有機發光材料可以依照發光顏色而被分成一藍、綠或紅發光材料和需提供更多天然顏色之一黃或橙發光材料。另一方面，當只使用一種材料做為發光材料時，由於最大亮度波長被移向較長波長而會使元件的效能降低、顏色純度退化；或因分子間之交互作用而降低發光效能，因此可以利用一主體／客體系統來做為發光材料，經由能量轉換而達到增進顏色純度及發光效能之目的。

為了讓有機發光元件可充分展現上面所提到之優越特性，在一元件中含有機材料層之一材料，例如，一電洞注入材料、一電洞傳輸材料、一發光材料、一電子傳輸材料及一電子注入材料，應是由一穩定的且有效能的材料所組成的。然而，有機發光元件用之一穩定且有效能之有機材料層之開發尚未被徹底的實現。因此，新材料的開發是有需要的。這樣一材料的開發對於上面所提到之其他有機電子元件同樣是需要的。

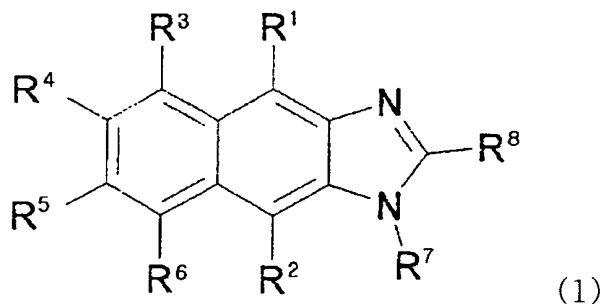
### 【發明內容】

本發明人發現一具新結構之咪唑衍生物，並且發現該新衍生物可以在一包括一有機發光元件之有機電子元件中履行電洞注入、電洞傳輸、電子注入、電子傳輸、和/或發光的功能。

因此，本發明之目的係提供一具有新的結構之咪唑衍生物、一製備該衍生物之方法、及一使用該衍生物之有機電子元件。

### 【實施方式】

本發明提供一種下列分子結構式(1)所示之咪唑衍生物：



其中  $R^1$  至  $R^6$  每一個皆是獨立或同時地選自由一氫原子、一經取代的或未經取代的烷基、一經取代的或未經取代的烷氧基、一經取代的或未經取代的烯基、一經取代的或未

經取代的芳香基、一經取代的或未經取代的芳香胺、一經取代的或未經取代的雜環基、一經取代的或未經取代的脂肪族環基、一經取代的或未經取代的矽基、一經取代的或未經取代的硼基、一胺基、一腈基、一硝基、一鹵素、一醯胺基及一酯基所組成的群組； $R^7$  是選自由一經取代的或未經取代的烷基、一經取代的或未經取代的芳香基、一經取代的或未經取代的雜環基、一經取代的或未經取代的脂肪族環基、及一經取代的或未經取代的矽基所組成的群組；且  $R^8$  是選自由一經取代的或未經取代的烷基、一經取代的或未經取代的芳香基、及一經取代的或未經取代的雜環基所組成的群組。

此外，本發明提供一有機電子元件，該元件是由一第一電極、一第二電極及至少一置放在第一電極和第二電極間之有機材料層所組成的，在該元件中，至少一有機材料層包含該以上述分子結構式(1)作代表之化合物。

在下文中，將詳細說明本發明之化合物。

上述分子結構式(1)之化合物是一新的化合物且其取代基係詳細地說明如下：

在上述分子結構式(1)中， $R^1$  至  $R^8$  之烷基較佳係具有 1 到 30 個碳原子。

在上述分子結構式(1)中之  $R^1$  至  $R^6$  之烷氧基和烯基較佳係具有 1 到 30 個碳原子。

在上述分子結構式(1)中之  $R^1$  至  $R^8$ ，其芳香基之實施例係包括，但不限於，一苯基、一萘基、一蔥基、一雙苯基、一芘基及一蒽基。

在上述分子結構式(1)中之  $R^1$  至  $R^6$ ，其芳香胺基之實施

例係包括，但不限於，一二苯胺基、一苯萘胺基、一二甲苯胺基、一苯甲苯胺基、一咪唑基及一三苯胺基。

在上述分子結構式(1)中之  $R^1$  至  $R^8$ ，其雜環基之實施例係包括，但不限於，一吡啶基、一雙吡啶基、一吡啶基、一噻吩基、一咪唑基、一噁唑基、一噻唑基及一喹啉基。

在上述分子結構式(1)中之  $R^1$  至  $R^6$ ，其鹵素群組之實施例係包括，但不限於，氟、氯、溴及碘。

在本發明中， $R^7$  較佳係選自由一經取代的或未經取代的烷基、一經取代的或未經取代的環烷基、一經取代的或未經取代的芳香基、及一經取代的或未經取代的雜芳香基所組成的群組。烷基之實施例包含一甲基、一乙基、一丙基、一異丙基、一丁基、一正丁基、一戊基、一己基及一庚基。環烷基之實施例包含一環戊烷基、環己烷基、及其相類似者所組成的群組。烷基或環烷基之實施例包含，但不限於，那些具有 1 至 30 個沒有立體阻礙(steric hinderance)的碳原子。芳香基之實施例較佳係包含一苯基、一雙苯基及一萘基，而且如一吡啶基、一雙吡啶基、一喹啉基、一異喹啉基之雜芳香基亦為較佳的。

在本發明中，當分子結構式(1)中之  $R^1$  至  $R^8$  被其他取代基所取代時，這些取代基中至少有一個取代基是選自-CN、一硝基、一羰基、一醯胺、一烷基、一烯基、一芳香基、一芳香胺、一雜環、一脂肪族環、-BRR'及 -SiRR'R"中(其中 R、R'與 R"可以是彼此相同或彼此不同，且是個別選自一  $C_1$  至  $C_{20}$  之烷基、一  $C_6$  至  $C_{20}$  之芳香基、或一被以一  $C_1$  至  $C_{20}$  烷基取代之  $C_6$  至  $C_{20}$  芳香基)。較佳的烷基是  $C_1$  至  $C_{20}$ ，較佳的

烯基是  $C_2$  至  $C_{20}$ 。較佳的芳香基是  $C_6$  至  $C_{20}$ ，而較佳的芳香胺是一經  $C_6$  至  $C_{20}$  芳香基取代之胺基。當上述分子結構式(1)化合物具有上述取代基時，該化合物不會因取代基的類型及上述中心結構而在它的特性上有所不同。在本發明中，當在分子結構式(1)中之  $R^1$  至  $R^8$  被其他取代基所取代時，OH 是被排除在該些取代基之外的。

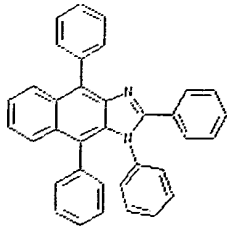
在上述分子結構式(1)中，較佳係  $R^1$  和  $R^2$  是各自選自由一氫原子、一經取代的或未經取代的芳香基、一經取代的或未經取代的烯基、一經取代的或未經取代的芳香胺基、及一經取代的或未經取代的雜環所組成的群組，只要  $R^1$  和  $R^2$  不同時為一氫原子。

$R^3$  至  $R^6$  是各自選自由一氫原子、一腈基、一經取代的或未經取代的芳香基、一經取代的或未經取代的芳香胺基、及一經取代的或未經取代的雜環所組成的群組。

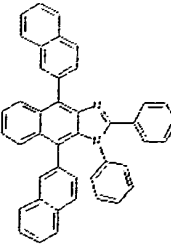
$R^7$  是選自由一烷基和一如一苯基、一雙苯基及一萘基之芳香基所組成的群組；且  $R^8$  是選自由一經取代的或未經取代的烷基、一經取代的或未經取代的芳香基、和一經取代的或未經取代的雜環所組成的群組。

在上述分子結構式(1)中，更佳係  $R^1$ 、 $R^2$  和  $R^8$  是各自選自由一芳香基及一雜環所組成的群組中挑選； $R^3$  至  $R^6$  是一氫原子；且  $R^7$  是從一烷基及一芳香基所組成的群組。

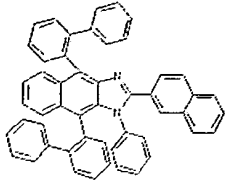
下列分子結構式係在說明分子結構式(1)之化合物之具體實施例，但本發明之範圍並不受限於此等實施例。



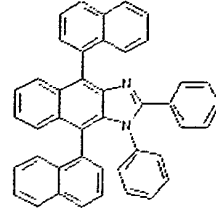
(1-1)



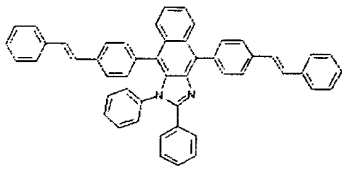
(1-2)



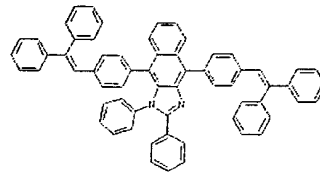
(1-3)



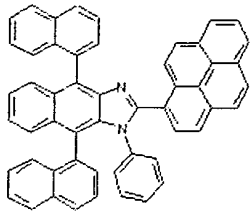
(1-4)



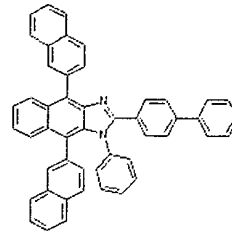
(1-5)



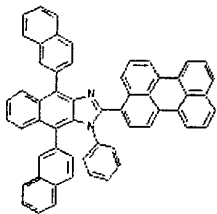
(1-6)



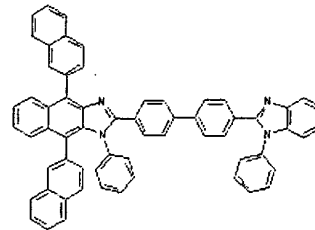
(1-7)



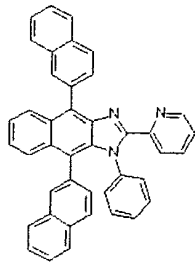
(1-8)



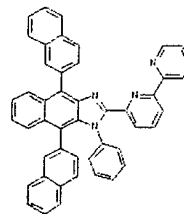
(1-9)



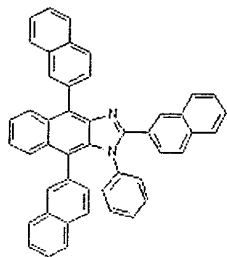
(1-10)



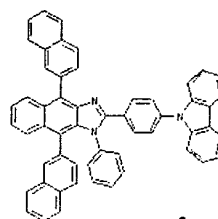
(1-11)



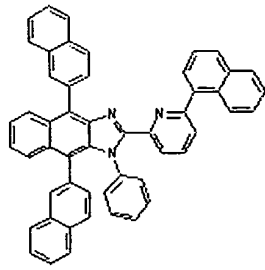
(1-12)



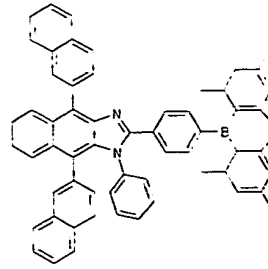
(1-13)



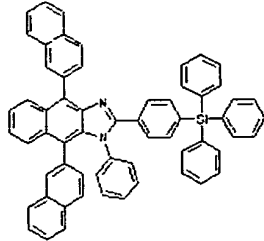
(1-14)



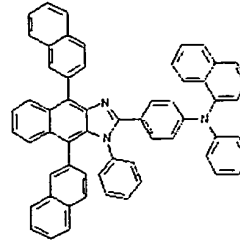
(1-15)



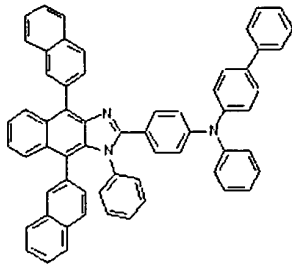
(1-16)



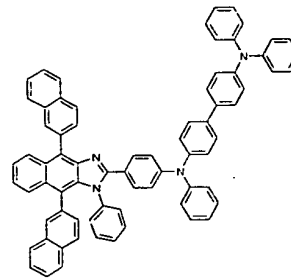
(1-17)



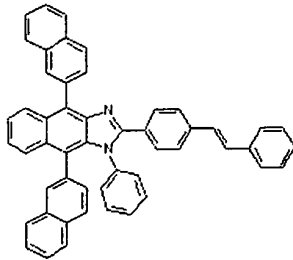
(1-18)



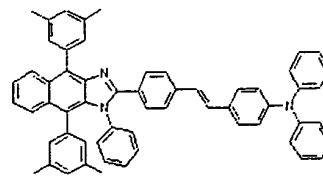
(1-19)



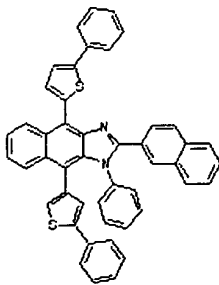
(1-20)



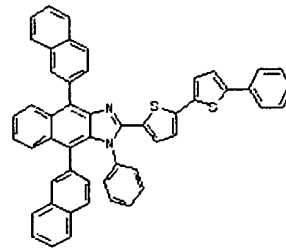
(1-21)



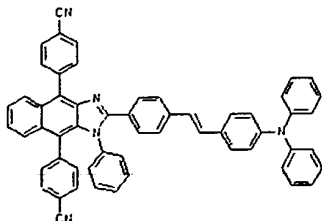
(1-22)



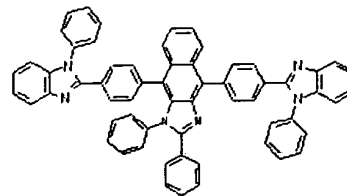
(1-23)



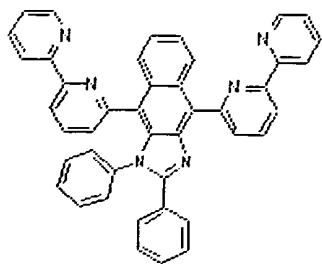
(1-24)



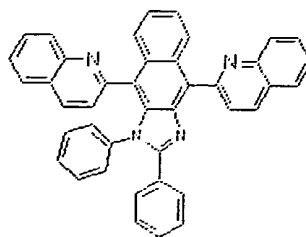
(1-25)



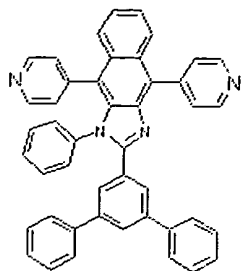
(1-26)



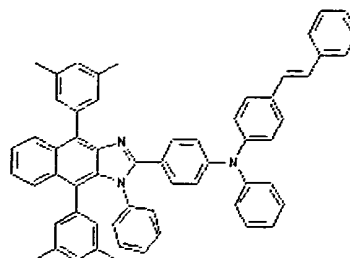
(1-27)



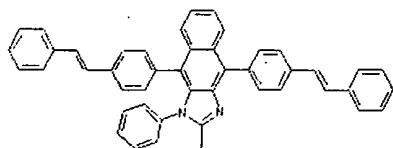
(1-28)



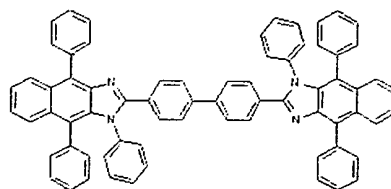
(1-29)



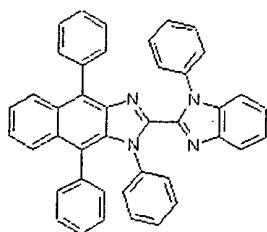
(1-30)



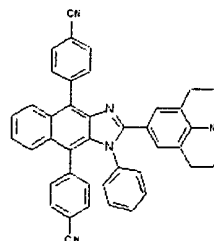
(1-31)



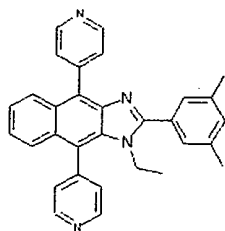
(1-32)



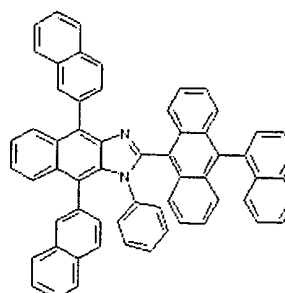
(1-33)



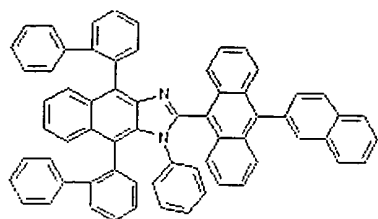
(1-34)



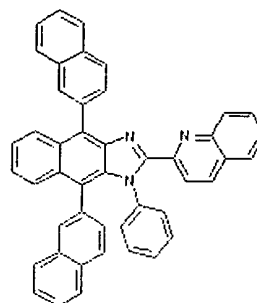
(1-35)



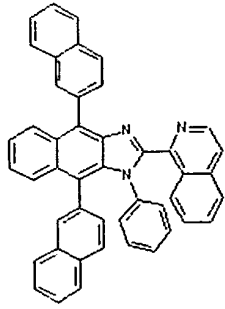
(1-36)



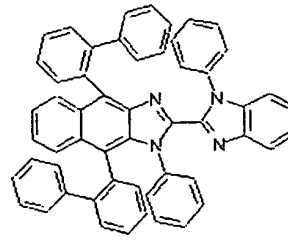
(1-37)



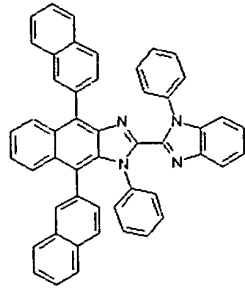
(1-38)



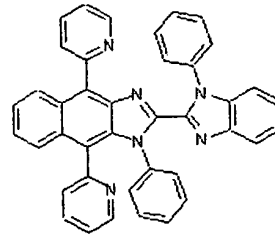
(1-39)



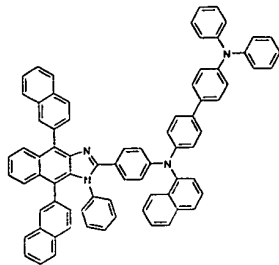
(1-40)



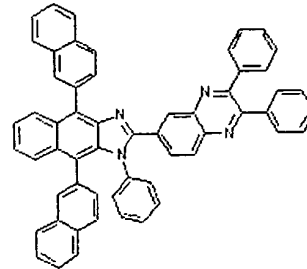
(1-41)



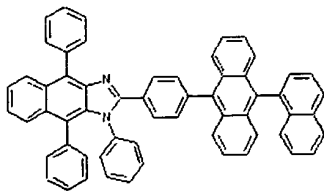
(1-42)



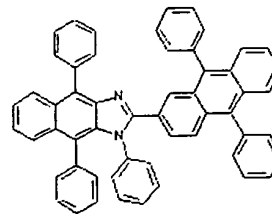
(1-43)



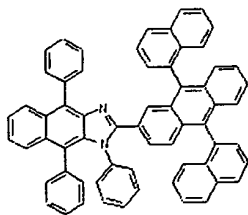
(1-44)



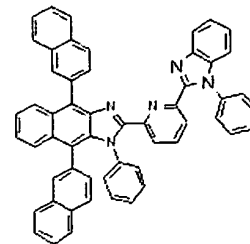
(1-45)



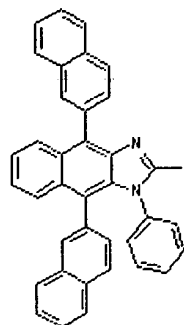
(1-46)



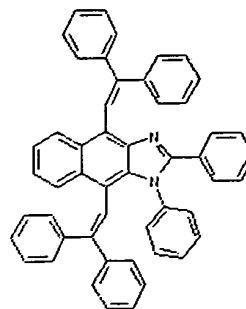
(1-47)



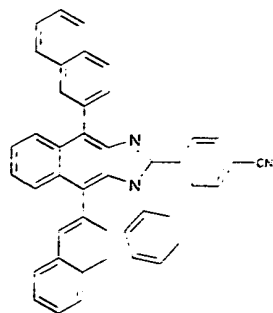
(1-48)



(1-49)



(1-50)



(1-51)

此外，本發明亦提供一種製備上述分子結構式(1)所示之咪唑衍生物之方法。

依照本發明，上述化合物之製備如下所述。

例如，製備上述分子結構式(1)化合物之方法包含的步驟為：

a) 將一含  $R^7$  之胺基及一胺基( $NH_2$ )分別導入一到經取代的或未經取代的萘醌之 2- 及 3- 碳原子位置上，並且將  $R^8$  導入至胺基( $NH_2$ )上；

b) 在上面 a) 中所獲得之化合物，藉由鏈結被導入之  $R^7$  及  $R^8$  部份的鏈而形成一咪唑基；

c) 將在上面 b) 中所獲得之化合物轉換成一二醇衍生物；  
並且

d) 還原在上面 c) 中所獲得之化合物，以形成一萘基。

另外，上述分子結構式(1)化合物可以藉由一方法來製備，該方法包含的步驟為：

a) 將一含  $R^7$  之胺基及一胺基( $NH_2$ )分別導入至一經取代的或未經取代的萘醌之 2- 及 3- 碳原子位置上，並且將  $R^8$  導入至胺基( $NH_2$ )上；

b) 在上面 a) 中所獲得之化合物，藉由鏈結被導入之  $R^7$  及  $R^8$  部份的鏈而形成一咪唑基；

c) 還原在上面 b) 中所獲得之化合物，以形成一萘基；

d) 將一溴基導入在上面 c) 中所獲得之化合物之 8- 或 9-

碳原子的位置上；並且

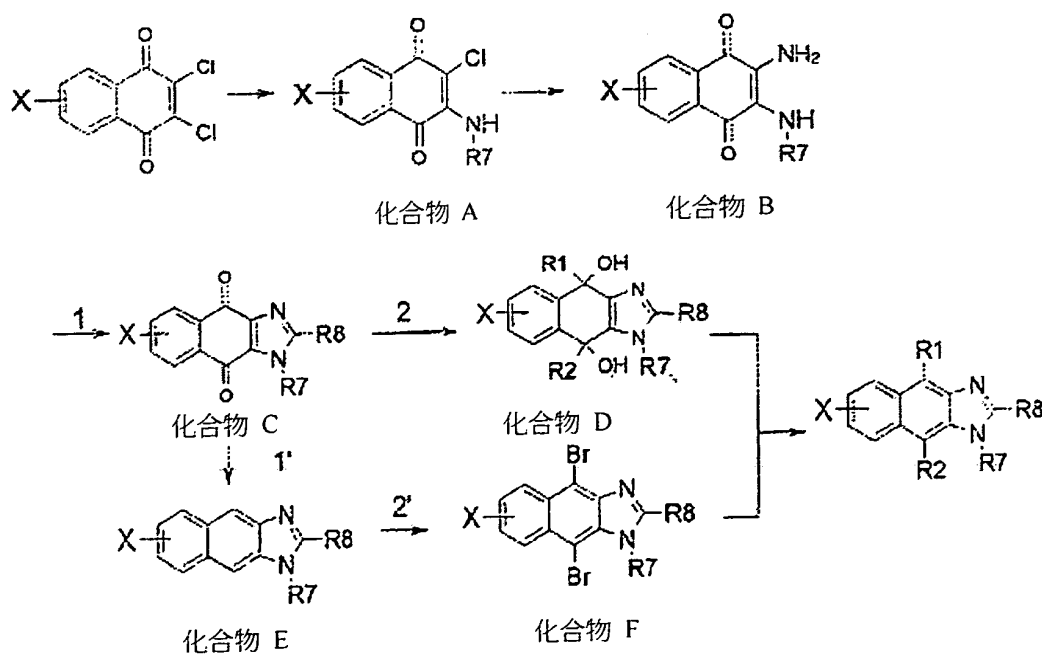
e)將取代基與硼酸導入至上述 d)中所獲得之化合物的溴基導入其中之位置上。

在上述方法中，可藉由該化合物和 N-溴代丁二醯亞胺或溴(Br<sub>2</sub>)在一如二甲基甲醯胺(DMF)、氯仿(CHCl<sub>3</sub>)和醋酸之溶劑中，進行反應，來進行導入一溴基之 d)步驟。

上述方法和製備一化合物之方法是不同的，在該方法中，上述分子結構式(1)之 R<sup>7</sup> 位置上會出現一氫原子。也就是，依照本發明，分子結構式(1)之化合物中，R<sup>7</sup> 的取代基係由一胺基所衍生的，因此，本發明之化合物和在上述分子結構式(1)中 R<sup>7</sup> 位置是一氫原子的化合物是不同的。

特別地，可依照下列反應式 1 來製備上述分子結構式(1)之化合物：

反應式 1

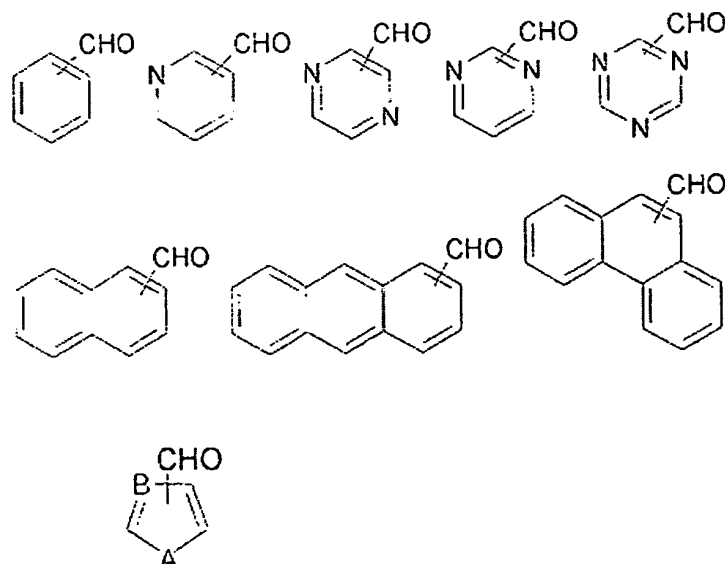


其中 X 係選自由一氫原子一經取代的或未經取代的烷

基、一經取代的或未經取代的烷氧基、一經取代的或未經取代的烯基、一經取代的或未經取代的芳香基、一經取代的或未經取代的芳香胺、一經取代的或未經取代的雜環基、一經取代的或未經取代的脂肪族環基、一經取代的或未經取代的矽基、一經取代的或未經取代的硼基、一胺基、一腈基、一硝基、一鹵素、一醯胺基、及一酯基所組成的群組，並且可存在有二個或多個 X，當存在有兩個 X 時彼等可彼此不同；且

$R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^7$  及  $R^8$  係如上述分子結構式(1)中所定義。

具體地說，本發明之化合物之製備方法如下。藉由一做為起始材料之經取代的或未經取代的 2,3-氯萘醌與一含  $R^7$  取代基之第一級胺基和醋酸進行反應，以製備化合物 A。接下來，藉由讓化合物 A 和疊氮化鈉( $\text{NaN}_3$ )、二甲基甲醯胺(DMF)和水進行反應，以製備化合物 B。然後，讓化合物 B 和具一導入甲醯基之  $R^8$  取代基和二甲基乙醯胺 (DMAC) (1) 進行反應，以製備化合物 C。在本文中，含甲醯基導入其中之  $R^8$  取代基可以是下列群組，其中每一個群組皆具有一甲醯基被導入其中，但本發明並不因此而受到限制。



A; S, SO<sub>2</sub>, O, N, NR<sub>7</sub>, P, PO<sub>2</sub>

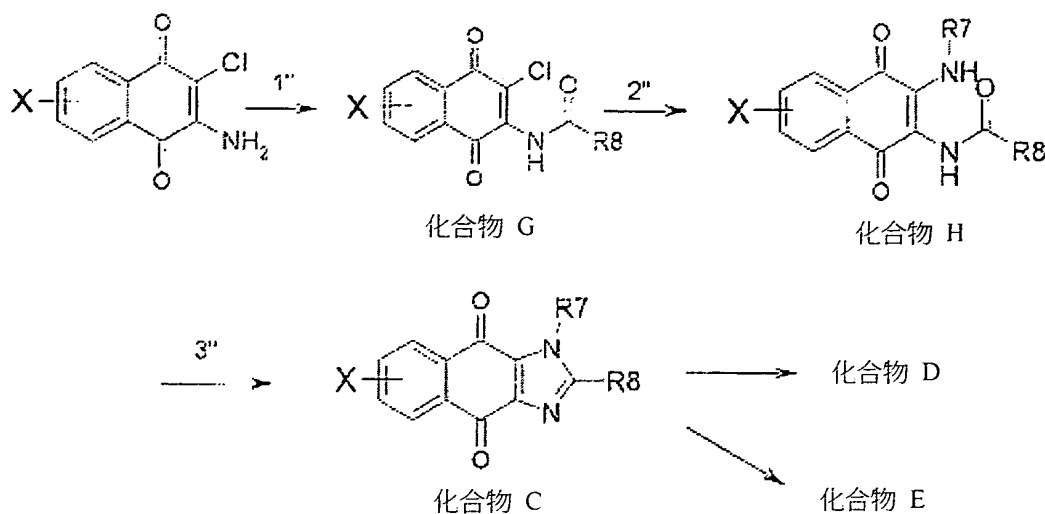
B; C, N

然後， $-R^1$  或  $R^2$  取代基，例如  $-R^1Br$  或  $R^2Br$  之化合物被溶解在無水 THF 中，並且將 t-BuLi 或 n-BuLi 加入其中。然後，將化合物 C 加入該混合物中，進行反應，以製備化合物 D (2)。化合物 D 可以和醋酸、KI、NaH<sub>2</sub>PO<sub>2</sub> 反應，以製備分子結構式(1)之化合物。

此外，依上述而製備之化合物 C 可和活性鋅(Zn)和氫氧化鈉(NaOH)進行反應，以製備化合物 E (1')。接著，化合物 E 可和 NBS (N-溴代丁二醯亞胺)和二甲基甲醯胺 (DMF)進行反應，以製備化合物 F (2')。然後，化合物 F 可以和含  $R^1$  或  $R^2$  之硼酸、Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>、K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 和 THF 進行反應，以製備分子結構式(1)之化合物。

此外，依照下列反應式 2 可以製備上述分子結構式(1)之化合物。

反應式 2



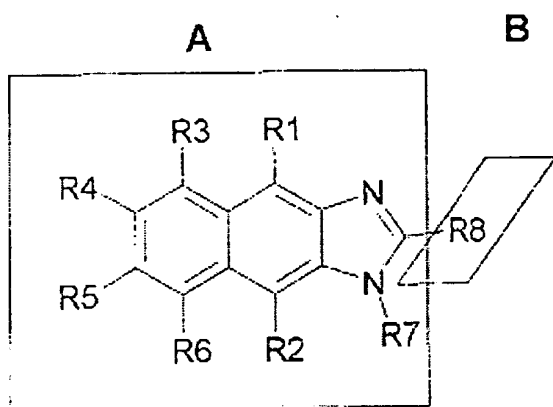
其中 X 係如上述反應式 1 中所定義；而 R<sup>7</sup> 和 R<sup>8</sup> 係如上述反應式 1 中所定義。

具體地說，一經取代或未經取代的 2-氨基-3-氯-1,4-萘醌，和乙酸酐、烷基氯化碳醯 (R<sup>8</sup>COCl)，如一經取代之氯化乙醯或一經取代的或未經取代的氯化甲醯，進行反應以製備化合物 G (1'')。在一如甲苯和二甲苯之有機溶劑中，一被以醯胺所取代之萘醌化合物 G 和 R<sup>7</sup>NH<sub>2</sub> 反應，以將一 R<sup>7</sup>NH-基導入殘存的氯基(-Cl)中，因此製備了化合物 H (2'')。將化合物 H 在 2 N 的 NaOH/EtOH 中加熱並攪拌 10 分鐘至 2 小時，以製備化合物 C (3'')。以上述反應式 1 相同的方法，從分子結構式(1)之化合物可以製備這個化合物 C。

此外，本發明提供一由一第一電極、一第二電極及至少一置放在第一電極和第二電極間之有機材料層所組成之有機電子元件，在該元件中，至少一有機材料層包括以上述分子結構式(1)作代表之化合物。

依照本發明，上述分子結構式(1)之化合物之空間結構可

以被劃分成如下圖所示之二部份，A 和 B 部份：



A 部份具有一平面結構，就如同在一完整的蔥的結構中，在其結構中一萘基和一咪唑基形成一稠環 (fused ring)。

一咪唑基被廣泛地使用做為一電子注入和／或傳輸材料之取代基或做為有機發光元件中之發光材料，且已知其對於電子注入或傳輸或發光之功能上具有一重要的影響力。因此，上述分子結構式(1)之 A 部份具有 n-型態 (n-type) 性質，係因為其中包含一咪唑基的緣故。然而，該上述分子結構式(1)之化合物具有一中心結構，在該結構中，蔥之三個苯環中只有一個苯環可被一咪唑基所取代，而不同的取代基可被導入中心結構之 R<sup>1</sup> 至 R<sup>8</sup> 位置上。因為這種結構特性，分子結構式(1)之化合物會具有 n-型 (n-type) 和 p-型 (p-type) 特性之雙性特質 (amphoteric properties)，不像一苯并咪唑基只簡單地具有 n-型 (n-type) 特性。該用於本文中之“n-型特性”用語係指由於取決於最低未被佔據之分子軌道能階 (LUMO levels) 導電特質，藉由形成電子以顯示陰離子特質之特性。此外，用於本文中之“p-型”用語係指由於取決於最高被佔據之分子軌道能階 (HOMO levels) 導電特質，藉由形成電洞

以顯示陽離子特質之特性。

具有雙性特性之該上述分子結構式(1)之化合物，可藉由導入不同的取代基至 A 或 B 部份，而使整分子表現出更強的 n-型或 p-型行為。例如，當一特定之取代基被導入分子結構式(1)之 B 部份且該分子結構式(1)之化合物會表現出比其他行為更強之一行為時，該分子結構式(1)之化合物就是一較適宜符合需求之化合物，該需求如一電洞注入或電洞傳輸材料、一電子注入或電子傳輸材料、或一發光材料。例如，當 B 部份之  $R^8$  被一含胺基之烷基、一含胺基之環烷基、一含胺基之芳香基、一含胺基之雜芳香基及其類似者所取代時，該分子結構式(1)之化合物可做為一電洞注入層和電洞傳輸層用之材料，而被廣泛地應用。另一方面，當  $R^8$  被具高電子親和力之物質所取代時，該物質如一雜芳香基、腈基、硝基、羰基和醯胺，該分子結構式(1)之化合物可做為一電子注入層和電子傳輸層用之材料，而被廣泛地應用。再者，當  $R^8$  被如蔥、二萘嵌苯（二萘嵌苯）、苯駢菲和二苯乙烯之烯基所取代時，則該分子結構式(1)之化合物可被應用至發光層。即使當不同的取代基被導入至  $R^1$  至  $R^7$  上時，一原理，在該原理中不同的取代基被導入  $R^8$  上中，亦可被應用。

此外，不同的取代基可被導入至上述分子結構式(1)之  $R^1$  至  $R^8$  位置上，可降低該化合物結構中之 pi-pi 交互作用，藉此以壓制從具有一扁平結構之物質激發之準分子 (excimer) 或激發之激發錯體 (exciplex) 之形成。

再者，不同的取代基可被導入至上述分子結構式(1)之  $R^1$  至  $R^8$  位置上，以合成一含不同能帶間隙 (energy band gap) 之化

合物。因此，上述分子結構式(1)之化合物可以以不同取代基的方法而形成一符合電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電子注入層和電子傳輸層用等需求之化合物。在本發明中，一依照上述分子結構式(1)化合物之取代基而具適當能階之化合物，可以被挑選出並使用於一有機電子元件中，以實現一具低驅動電壓和高發光效率之元件。

除了使用上述化合物來形成一或多種有機材料層以外，亦可藉由有機電子元件之一般生產方法和材料來製造本發明之有機電子元件。

在下文中，將說明有機發光元件。

在本發明之一具體實施例中，該有機發光元件具有由一第一電極、一第二電極和一置放在其二者間之有機材料層所組成之結構，除了依照本發明之分子結構式(1)化合物被使用在有機發光元件之一或多種有機材料層中以外，並且可藉由有機電子元件之一般生產方法和材料來製備。依照本發明之有機發光元件之結構如第一圖所示。

例如，依照本發明之有機發光元件係可以藉由將金屬或具有導電性之金屬氧化物、或其金屬合金沈積至一基板上來形成一陽極，在其上面再形成一包括一電洞注入層、一電洞傳輸層、發光層及一電子傳輸層之有機金屬層，然後利用一如濺鍍和電子束蒸發等物理氣相沈積 (PVD) 技術將一可做為陰極之材料沈積在有機金屬層上來予以製備。除這個方法之外，亦可以將一陰極材料、一有機金屬層及一陽極材料連續地沈積在基板上來製備有機發光元件 (請參考國際專利號碼 WO 03/012890)。

有機金屬層可以是一由電洞注入層、一電洞傳輸層、發光層、一電子傳輸層及其類似者，但並不僅限於此，之多層結構所組成的，並且亦可是單層結構。此外，可不使用一真空沈積而藉由使用一如旋轉塗布、浸沾式塗布、刮刀式塗布、網印 (screen printing)、噴墨印刷、熱傳導方法或其相類似者之溶劑方法，以不同高分子材料，來製備少數層之有機金屬層。

較佳之陽極材料是具有大的功函數的材料，通常可使電洞注入至有機金屬層變較容易。可用於本發明之陽極材料之具體實施例包含如鈳、鉻、銅、鋅和金或其合金之金屬；如氧化鋅、氧化銦、氧化銦錫 (ITO) 和氧化銦鋅 (IZO) 之金屬氧化物；如 ZnO:Al 或 SnO<sub>2</sub>:Sb 之金屬／氧化化合物；及如聚 (3-甲基噻吩)、聚 [3,4-(次乙基-1,2-二氧) 噻吩] (PEDT)、聚吡咯及聚苯胺之導電性聚合物，但並不僅限於此。

較佳之陰極材料是具有小的功函數的材料，通常可使電子注入至有機金屬層變較容易。可用於本發明之陰極材料之具體實施例包含如鎂、鈣、鈉、鉀、鈦、銦、釷、鋰、鈳、鋁、銀、錫及鉛或其合金之金屬；及如 LiF/Al 或 LiO<sub>2</sub>/Al 之多層材料，但並不僅限於此。

電洞注入材料是一可在低電壓時使從一陽極之電洞注入變得較容易之材料。電洞注入材料之較佳 HOMO (最高被佔據之分子軌道) 能階是位於陽極材料之功函數和其隔壁有機金屬層之 HOMO 能階之間。電洞注入材料之具體實施例包括金屬卟啉 (metal porphyrin)、寡噻吩 (oligothiophene)、芳香胺型 (arylamine-based) 有機金屬、六腈六氮三次苯 (hexanitride)

hexaazatriphenylene)、二萘嵌苯型( perylene-based )有機金屬、蔥醌、及聚苯胺型及聚噻吩型導電性聚合物，但並不僅限於此。

電洞傳輸材料係以一具高電洞移動率之材料較為合適，該電洞移動率係可以從陽極或電洞注入層將電洞轉移至發光層。其具體實施例包括芳香胺型有機金屬、導電性聚合物和具共軛部份和非共軛二者部份之嵌段共聚物，但並不僅限於此。

發光材料是一藉由接受和再結合從電洞傳輸層來的電洞及從電子傳輸層來的電子而可發射出可見光之材料，具有對螢光或磷光而言之高量子效率的材料為較佳。其具體實施例包括 8-羥基喹啉鋁錯合物(8-hydroxyquinoline aluminum complex (Alq<sub>3</sub>))、咔唑型(carbazole-based)化合物、二聚物的苯乙烯基(dimerized styryl)化合物、BAlq、10-羥基苯并喹啉鋁錯合物(10-hydroxybenzoquinoline-metal)、苯并噁唑型(benzoxazole-based)化合物、苯并噻唑型(benzothiazole-based)化合物、及苯并咪唑型化合物、聚對伸苯乙烯型(poly(p-phenylenevinylene) (PPV)-based)聚合物、螺環化合物、聚芴(polyfluorene)、紅螢烯(rubrene)及其相似者，但並不僅限於此。

電子傳輸材料係以一具高電子移動率之材料較為合適，該電子移動率係指可從陰極將電子轉移至發光層。其具體實施例包括 8-羥基喹啉鋁錯合物(8-hydroxyquinoline aluminum complex (Alq<sub>3</sub>))、有機基化合物、及羥基黃酮—金屬錯合物(hydroxyflavone-metal complexes)，但並不僅限於此。

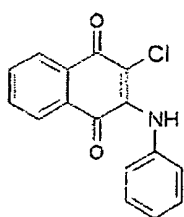
依照所使用之材料，依照本發明之有機發光元件可以是一頂端發光結構、一底部發光結構或一頂端和底部發光結構。依照與應用於有機發光元件相似之一原理，依照本發明之化合物，可以在一有機電子元件中產生功能，該有機發光元件包括一有機太陽能電池、一有機感光鼓及一有機電晶體。

本發明之化合物是一新的化合物，該化合物在一含一有機發光元件之有機電子元件中，可以執行電洞注入、電洞傳輸、電子注入、電子傳輸、和/或發光之功能，並且更一步地和一適當的摻雜劑(dopant)一起執行一發光主體的作用。藉由應用本發明之化合物至含一有機發光元件之有機電子元件中，在一元件之效率、驅動電壓和穩定性方面，可以達到優越的效能。

在下文中，將利用實施例和實驗實施例來給予本發明一更加詳細之說明，但本發明之範圍並不因此而受限制。

實施例 1：分子結構式(1-10)之化合物之合成

1. 下述分子結構式(10A)之化合物之合成

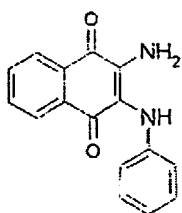


(10A)

將 2,3-二氯茶醌 (22.7 g, 100 mmol)、苯胺 (9.3 g, 100 mmol)、N,N-二甲基苯胺 (50 mL) 和醋酸 (200 mL) 混合在一起並加熱 6 小時。當反應進行時，反應混合物會轉變成一暗紅色溶液。將反應物冷卻至室溫，並且在減壓下過濾所形成的固體，然後真空乾燥，得到上述分子結構式(10A)之化合物 (22 g, 產量 78%)。

MS:  $[M+H]^+ = 284(\text{Cl} \times 1)$

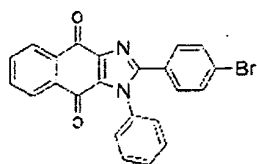
## 2. 下述分子結構式(10B)之化合物之合成



(10B)

將分子結構式(10A) 化合物(22 g, 77.6 mmol)和疊氮化鈉 ( $\text{NaN}_3$ , 10.1 g, 155.2 mmol)溶在二甲基甲醯胺 (DMF, 200 mL) 中，然後加入水(30 ml)至其中，然後將反應物加熱至  $120^\circ\text{C}$  並攪拌 20 小時。將反應物冷卻至室溫，過濾所形成之黑色固體，用水和乙醇清洗，然後乾燥，得到固體的分子結構式(10B) 之化合物(20.0 g，產量 97.6%)。

## 3. 下述分子結構式(10C-1)之化合物之合成

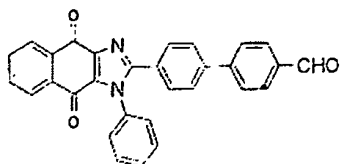


(10C-1)

將分子結構式(10B) 化合物(5.28 g, 20 mmol)、4-溴苯甲醛 (3.70 g, 20 mmol) 和 二甲基乙醯胺 (DMAC, 80 mL) 混合在一起並加熱 16 小時。在減壓下將反應溶劑移除後，將 100 mL 乙酸乙酯加入反應混合物中，然後攪拌反應生成物，以得到上述分子結構式(10C-1) 化合物之固體(4.5 g，產量 53%)。

MS:  $[M+H]^+ = 429(\text{Br} \times 1)$

## 4. 下述分子結構式(10C-2)之化合物之合成

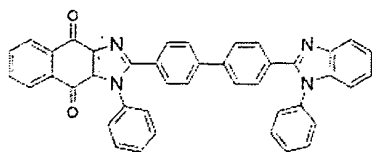


(10C-2)

將分子結構式(10C-1)之化合物(4.50 g, 10.5 mmol)、四氫呋喃(THF, 25 ml), 4-甲醯基苯硼酸 (1.80 g, 1.8 mmol)、四(三苯基膦)化鈦 ( tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0) [Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub>, 0.02 mmol, 0.02 g]) 及 2 M 碳酸鉀(2 M K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, 25 mL)混合在一起並加熱攪拌 12 小時。將反應物冷卻至室溫，然後在真空下蒸餾掉少量之四氫呋喃(THF)。將乙醇加入所形成之沈澱物中，然後將反應生成物進行攪拌、過濾、以水和乙醇清洗，然後乾燥，以得到上述分子結構式(10C-2)之化合物(2.5 g，產量 52%)。

MS [M+H]<sup>+</sup>= 455

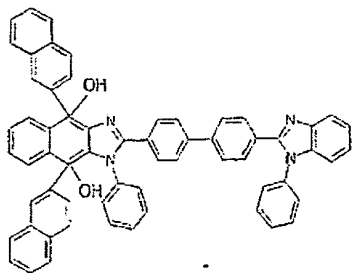
#### 5. 下述分子結構式(10C-3)之化合物之合成



(10C-3)

將上述分子結構式(10C-2)之化合物(2.5 g, 5.5 mmol)、N-苯基-1,2-伸苯二胺 ( N-phenyl-1,2-phenylenediamine (1 g, 5.5 mmol)) 及 N,N-二甲基乙醯胺 (30 mL) 混合在一起並在 160 °C 加熱 10 小時。在減壓的情況下將溶劑移除後，在反應混合物中加入 100 mL 乙醇，然後攪拌反應生成物，得到上述分子結構式(10C-3)化合物之黃色固體(2.2 g，產量 65.4%)。

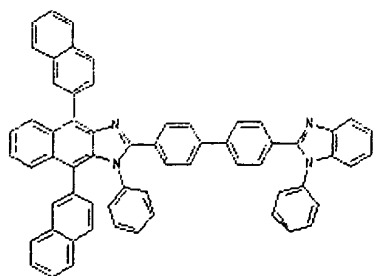
#### 6. 下述分子結構式(10D)之化合物之合成



(10D)

將 2-溴萘 (1.8 g, 2.4 eq, 8.6 mmol) 溶在 40 mL 之無水 THF 中。冷卻反應混合物至 78°C 之後，將 t-BuLi (1.7 M 在戊烷中) (3.0 eq, 10.8 mmol, 6.4 mL) 緩慢逐滴地加入其中，並且將所生成之反應物混合物進行攪拌 40 分鐘。然後，依上述方式所製備之分子結構式(10C-3) (2.2 g, 3.6 mmol)，以固體狀態逐滴加入至一反應容器中，然後將所生成之反應物混合物進行攪拌 4 小時。將一水溶性之 NH<sub>4</sub>Cl 加入至所生成之反應物混合物中，以進行相分離並用 THF 萃取。以無水 MgSO<sub>4</sub> 乾燥該萃取物，在減壓下進行真空濃縮。將殘餘物攪入 100 ml 的乙醚中以得到一上述分子結構式(10D) 化合物之固體(2.2 g, 產量 70%)。

#### 7. 下述分子結構式(1-10)之化合物之合成



(1-10)

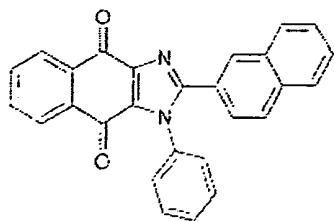
將上述分子結構式(10D) 化合物(2.2 g, 2.6 mmol)和 60 mL 之醋酸、KI (4.3 g, 26 mmol) 和 NaH<sub>2</sub>PO<sub>2</sub> (5.2 g, 49 mmol) 混合在一起，並且將該反應混合物在 120°C 攪拌 5 小時。在反應溶液冷卻後，將所形成的固體過濾，以水清洗，然後乾燥，以得到分子結構式(1-10) 之化合物(1.97 g, 產量 90%)。分子結構式(1-10)化合物之 UV 光譜係顯示於第二圖中。

Tg: 195°C (2nd)

MS [M+H]<sup>+</sup>= 841

實施例 2：分子結構式(1-13)之化合物之合成

## 1. 下述分子結構式(13C)之化合物之合成

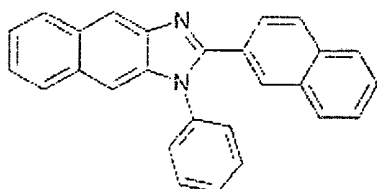


(13C)

除了使用 2-甲醯基萘以取代實施例 1-3 中的 4-溴苯甲醛外，上述分子結構式(13C)化合物之製備方法係與分子結構式(10C-1)化合物之製備方法相同。

MS [M+H]<sup>+</sup>= 401

## 2. 下述分子結構式(13E)之化合物之合成

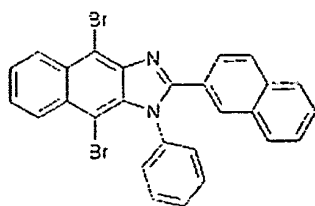


(13E)

將蒸餾水(165 ml)、氫氧化鈉(NaOH, 62 mmol, 24.8 g)和上述分子結構式(13C) 化合物(12.2 mmol, 4.85 g)導入至活性鋅(Zinc, 20 g)中，加熱攪拌該反應混合物 24 小時。接著，將混合物冷卻至室溫並且透過矽藻土 (Celite) 過濾。將過濾物以二氯甲烷(50 ml x 3)萃取，以無水硫酸鎂乾燥，並且在減壓下過濾。在減壓下將溶劑從過濾物中移除，將殘餘物以乙醚和己烷再結晶，以得到上述分子結構式(13E)之化合物(2.3 g，產量 52%)。

MS [M+H]<sup>+</sup>= 371

## 3. 下述分子結構式(13 F)之化合物之合成

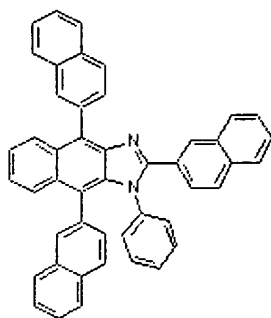


(13F)

將上述分子結構式(13E) 化合物(6.2 mmol, 2.3 g)和 NBS (N-溴代丁二醯亞胺) (6.4 mmol, 1.2 g)溶入二甲基甲醯胺 (DMF, 70 ml)中，並且在室溫攪拌反應混合物 40 分鐘。將所產生之沈澱物在減壓下過濾，以得到上述分子結構式(13F) 化合物(2.9 g，產量 90%)。

MS  $[M+H]^+ = 526$  (Br x 2)

#### 4. 分子結構式(1-13)之化合物之合成

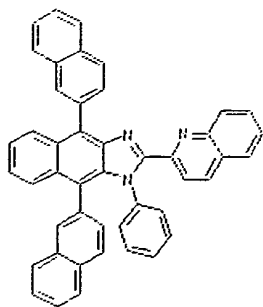


(1-13)

將上述所製備之分子結構式(13F) 化合物(2.9 g, 5.5 mmol)和 萘-2-硼酸(2.3g, 13.2 mmol)、 $Pd(PPh_3)_4$  [0.038 g, 0.033 mmol] 及 40 mL 之 2 M  $K_2CO_3$  混合在一起，並且將反應混合物放在 80 mL THF 中，於 80°C 攪拌 8 小時。將反應混合物冷卻至室溫，並且在真空下將過多的 THF 蒸餾掉。接著，加入 200 mL 乙醇至反應混合物中，攪拌反應生成物以得到分子結構式(1-13) 之化合物固體(2.7 g，產量 80%)。

MS  $[M+H]^+ = 623$

#### 實施例 3：分子結構式(1-38)之化合物之合成



(1-38)

藉由使用上述分子結構式(10B) 化合物(5.28 g, 20 mmol) 和喹啉-2-羧基醛 (quinoline-2-carboxaldehyde) 做為起始材料, 分子結構式(1-38)化合物之製備方法與分子結構式(10C-1) 化合物、分子結構式(10D)化合物和分子結構式(1-10)化合物之製備方法相同。

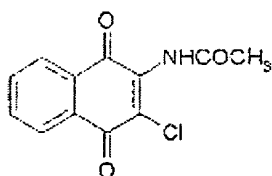
Tg: 195°C, Tm: N.D(2nd)

MS: [M+H]<sup>+</sup>= 511

實施例 4：分子結構式(1-49)之化合物之合成

1. 分子結構式(49G)之化合物之合成

將 2 mL 之 98% 硫酸逐滴加入 2-氨基-3-氯-1,4-萘醌 (4.4 g, 21.2 mmol) 和 60 mL 的乙酸酐中, 並且在室溫攪拌該反應混合物達 3 小時。過濾所形成之沈澱物、以水充分地清洗, 然後乾燥, 以製備下面的分子結構式(49G)之化合物(3.3 g, 產量 63%)。

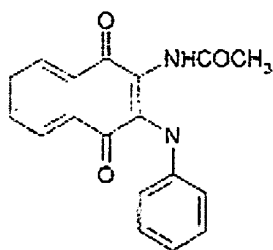


(49G)

2. 分子結構式(49 H)之化合物之合成

將苯胺 (1.68 g, 18 mmol) 和 70 mL 的甲苯放入上述分子結構式(49G)之化合物(3.3 g, 13.3 mmol)中, 將該反應混合物在室溫中攪拌達 16 小時。將 100 mL 的正己烷加入反應溶液

中，將該混合物攪拌 10 分鐘，過濾及乾燥以製備下述分子結構式(49H)之中間物 (3.2 g，產量 92%)。



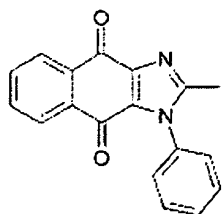
(49H)

該中間物之質譜分析結果如下列：

MS [M-H]<sup>-</sup> = 305, MS [M+H]<sup>+</sup> = 307

### 3. 分子結構式(49C)之化合物之合成

將 30 mL 之 2 N NaOH 和 100 mL 之乙醇放入至上述分子結構式(49H) 化合物(3.2 g, 12.2 mmol)中，然後加熱攪拌該反應混合物達 30 分鐘。將所形成之淡綠色固體過濾，接著用水和乙醇清洗，然後乾燥以製備下述分子結構式(49C)之化合物(2.3 g，產量 66%)。

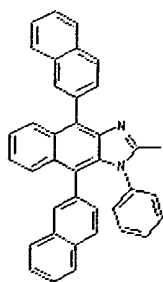


(49C)

MS [M+H]<sup>+</sup> = 289

### 4. 分子結構式(1-49)之化合物之合成

然後，藉由使用上述分子結構式(49C)之化合物，以製備分子結構式(10D)之化合物及分子結構式(1-10)之相同方法來製備分子結構式(1-49)之化合物(1.7 g)，化合物之質量分析結果如下列：



(1-49)

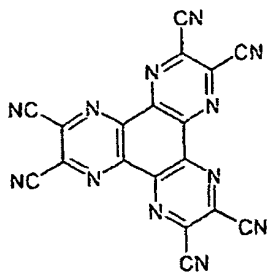
MS  $[M+H]^+ = 511$

#### 實驗實施例 1:

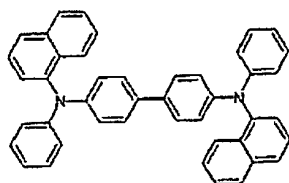
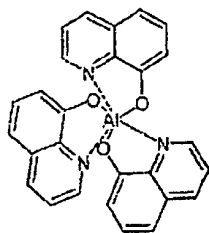
將上面塗布有厚度為 1500 Å ITO (氧化銦錫) 薄膜之玻璃基板浸入含清潔劑之蒸餾水中，以超音波清洗該基板達 30 分鐘 (在這個時候，該清潔劑可以從 Fisher 公司購得，並且該蒸餾水可利用從 Millipore 所購得之濾紙過濾二次)。接下來，以蒸餾水來進行超音波清洗該基板，重覆二次 10 分鐘。以蒸餾水進行超音波清洗完畢後，使用如異丙醇、丙酮及甲醇之溶劑來進行超音波清洗。將該結果物乾燥後換至一電漿清洗機中。然後，以氧電漿清潔該基板達 5 分鐘後，換至一真空沈積裝置。

在因此所製備之 ITO 透明電極上，以熱真空沈積的方法，將六腈六氮三次苯 (hexanitrile hexaazatriphenylene) 塗布一 500 Å 的厚度。接著，以真空塗布的方式，將做為一電洞傳輸材料之 NPB 塗布在該透明電極上達一 400 Å 之厚度。此外，再以真空塗布的方式，將 Alq<sub>3</sub> 化合物塗布在該透明電極上達一 300 Å 之厚度，以形成一發光層。

[六腈六氮三次苯 (hexanitrile hexaazatriphenylene) ]



[NPB]

[Alq<sub>3</sub>]

以真空沈澱的方式，將實施例 1 所製備之分子結構式 (1-10) 之化合物塗布在該發光層上至一 200 Å 的厚度，以形成一電子注入／傳輸層。接著，在該電子注入／傳輸層上，各別將氟化鉀(LiF)及鋁真空沈積至一 12 Å 和 2000 Å 之厚度，以形成陰極。

在上面之方法中，每一有機金屬之沈積速率應被維持在 1 Å/sec 且氟化鉀(LiF)和鋁之沈積速率應被各別維持在 0.2 Å/sec 和 3 至 7 Å/sec。

當施加一 6.7 V 之正向電場 (forward electric field) 至該上面所製備之有機發光元件時，在一 50 mA/cm<sup>2</sup> 之電流密度，可以觀察到以 1931 CIE 顏色座標為準之 x=0.34 及 y=0.51 之

綠光發射。當施加一 7.7 V 之正向電場時，在 100 mA/cm<sup>2</sup>之電流密度，可以觀察到 3.9 cd/A 之綠光發射。

#### 實驗實施例 2:

在如描述於實驗實施例 1 中所製備之 ITO 電極上，熱真空沈積藉由熱真空沈積，將六腈六氮三次苯、NPB、在實施例 2 中所製備之分子結構式化合物(1-13)及 Alq3 被連續地塗布在該 ITO 電極上至一 500 Å、400 Å、200 Å 及 300 Å 之厚度，藉以依次序形成一電洞注入層、一電洞傳輸層、一發光層和一電子傳輸層。接著，在該電子傳輸層上，各別將氟化鉀(LiF)及鋁真空沈積至一 12 Å 和 2000 Å 之厚度，以形成陰極。因此，製備了有機發光元件。

當施加一 6.2V 之正向電場 (forward electric field) 至該上面所製備之有機發光元件時，在 50 mA/cm<sup>2</sup>之電流密度，可以觀察到以 1931 CIE 顏色座標為準之  $x=0.16$  及  $y=0.2$  之藍光發射。當施加一 6.7 V 之正向電場時，在 100 mA/cm<sup>2</sup>之電流密度，可以觀察到 2.3 cd/A 之藍光發射。

#### 【圖式簡單說明】

第一圖係說明依照本發明之一具體實施例，一有機發光元件之一結構。

第二圖係顯示依照本發明，分子結構式(1-10)之化合物之 UV 光譜。

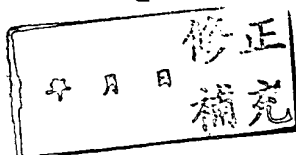
#### 【主要元件符號說明】

無。

## 五、中文發明摘要：

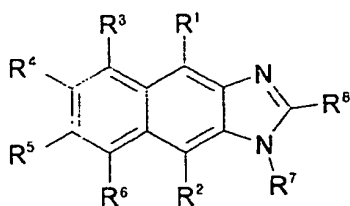
本發明係關於一種新的咪唑衍生物、製備新咪唑衍生物之方法及利用前述方法製作之有機電子元件。依照本發明，該咪唑衍生物可以在一包括有機發光元件之有機電子元件中執行電洞注入、電洞傳輸、電子注入、電子傳輸、和／或發光的功能。依照本發明，該有機電子元件在效率、驅動電壓和穩定性方面，可以達到優越的效能。

## 六、英文發明摘要：



## 十、申請專利範圍：

1. 一種下述分子結構式(1)所示之咪唑衍生物，



(1)

其中，該  $R^1$  和  $R^2$  是各自選自由經取代的或未經取代的苯基、經取代的或未經取代的萘基、經取代的或未經取代的蒽基、經取代的或未經取代的雙苯基、經取代的或未經取代的芘基、經取代的或未經取代的芘基、經取代的或未經取代的  $C_1$  至  $C_7$  烯基、經取代的或未經取代的二苯胺基、經取代的或未經取代的苯胺基、經取代的或未經取代的二甲苯胺基、經取代的或未經取代的苯胺基、經取代的或未經取代的吡啶基、經取代的或未經取代的雙吡啶基、經取代的或未經取代的吡啶基、經取代的或未經取代的噻吩基、經取代的或未經取代的咪唑基、經取代的或未經取代的噁唑基、經取代的或未經取代的噻唑基及經取代的或未經取代的喹啉基所組成的群組；

該  $R^3$  至  $R^6$  是各自選自由氫原子、腈基、經取代的或未經取代的苯基、經取代的或未經取代的萘基、經取代的或未經取代的蒽基、經取代的或未經取代的雙苯基、經取代的或未經取代的芘基、經取代的或未經取代的芘基、經取代的或未經取代的二苯胺基、經取代的或未經取代的苯胺基、經取代的或未經取代的二甲苯胺基、經取代的或未經取代的苯胺基

胺基、經取代的或未經取代的咪唑基、經取代的或未經取代的三苯胺基、經取代的或未經取代的吡啶基、經取代的或未經取代的雙吡啶基、經取代的或未經取代的吡啶基、經取代的或未經取代的噻吩基、經取代的或未經取代的咪唑基、經取代的或未經取代的噁唑基、經取代的或未經取代的噻唑基及經取代的或未經取代的喹啉基所組成的群組；

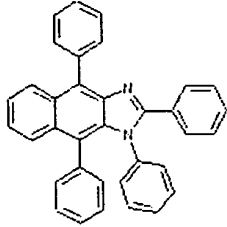
該  $R^7$  是選自由  $C_1$  至  $C_7$  烷基、經取代的或未經取代的苯基、經取代的或未經取代的萘基、經取代的或未經取代的蒽基、經取代的或未經取代的雙苯基、經取代的或未經取代的芘基及經取代的或未經取代的蒽基所組成的群組；且

該  $R^8$  是選自由經取代的或未經取代的  $C_1$  至  $C_7$  烷基、經取代的或未經取代的苯基、經取代的或未經取代的萘基、經取代的或未經取代的蒽基、經取代的或未經取代的雙苯基、經取代的或未經取代的芘基、經取代的或未經取代的蒽基、經取代的或未經取代的吡啶基、經取代的或未經取代的雙吡啶基、經取代的或未經取代的吡啶基、經取代的或未經取代的噻吩基、經取代的或未經取代的咪唑基、經取代的或未經取代的噁唑基、經取代的或未經取代的噻唑基及經取代的或未經取代的喹啉基所組成的群組，且

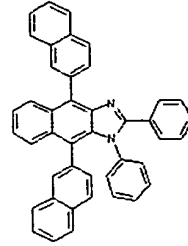
在結構式(1)的  $R^1$  至  $R^8$  至少具有一個取代基的情形下，該分子結構式(1)之  $R^1$  至  $R^8$  所至少具有的一個取代基是選自 -CN、硝基、羰基、醯胺基、烷基、烯基、芳香基、芳香胺基、雜環基、脂肪族環基、-BRR'及-SiRR'R"，其中 R、R'與 R"係可彼此相同或彼此不同，且是個別選自  $C_1$  至  $C_{20}$  之烷基、 $C_6$  至  $C_{20}$  之芳香基、或經  $C_1$  至  $C_{20}$  烷基取代之  $C_6$  至  $C_{20}$

芳香基。

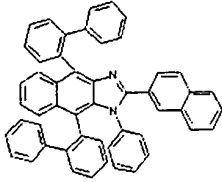
2. 如申請專利範圍第 1 項之咪唑衍生物，其中該分子結構式(1)之化合物是選自由下述分子結構式(1-1)至(1-51)所組成之群組：



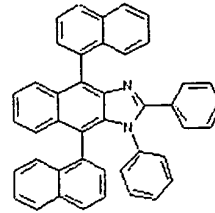
(1-1)



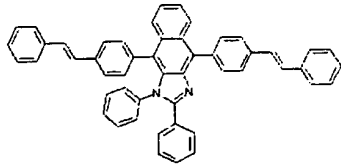
(1-2)



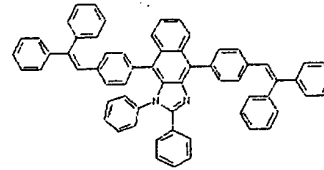
(1-3)



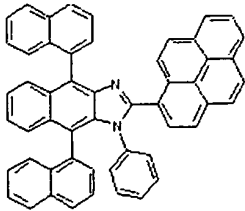
(1-4)



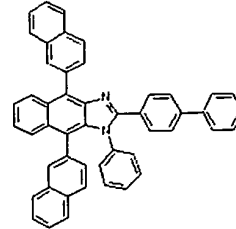
(1-5)



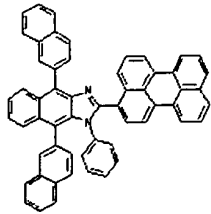
(1-6)



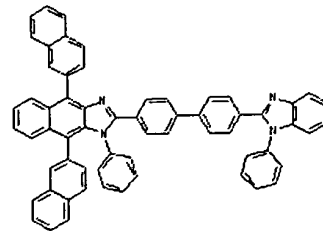
(1-7)



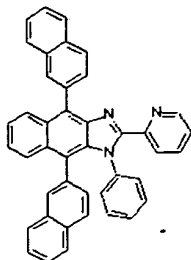
(1-8)



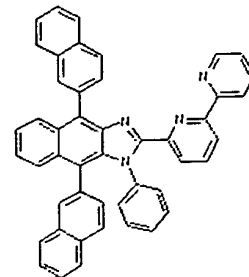
(1-9)



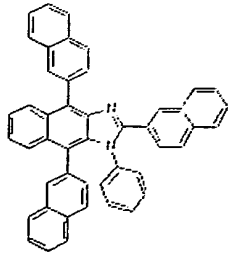
(1-10)



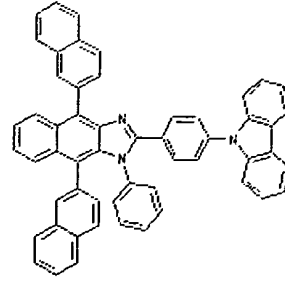
(1-11)



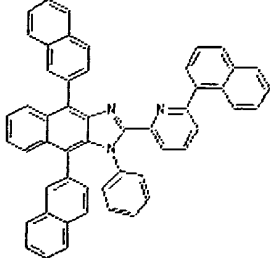
(1-12)



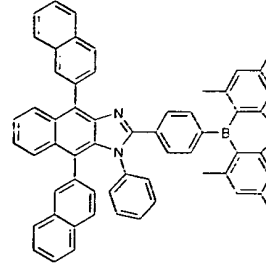
(1-13)



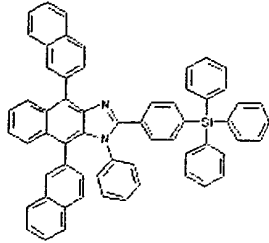
(1-14)



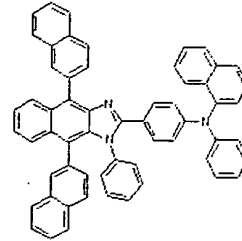
(1-15)



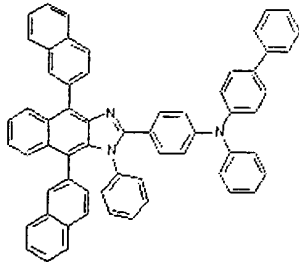
(1-16)



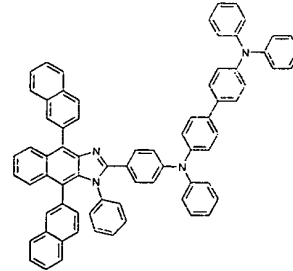
(1-17)



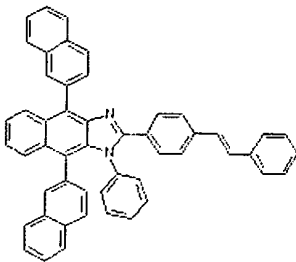
(1-18)



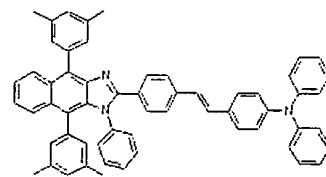
(1-19)



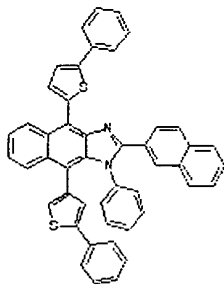
(1-20)



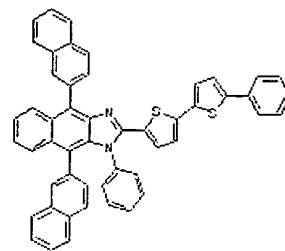
(1-21)



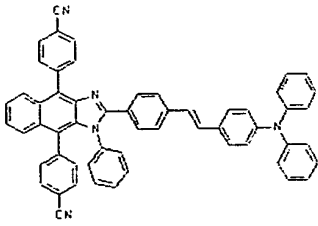
(1-22)



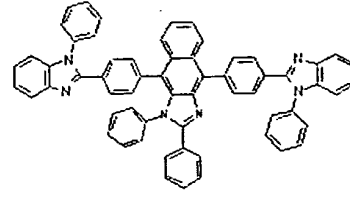
(1-23)



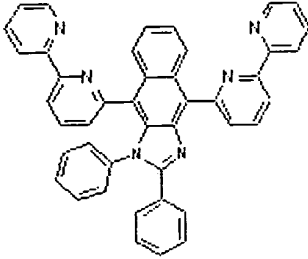
(1-24)



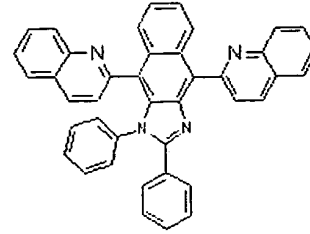
(1-25)



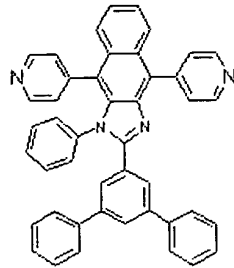
(1-26)



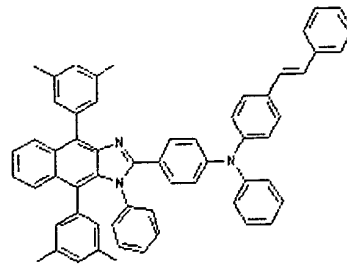
(1-27)



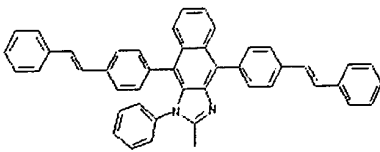
(1-28)



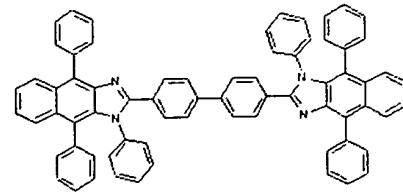
(1-29)



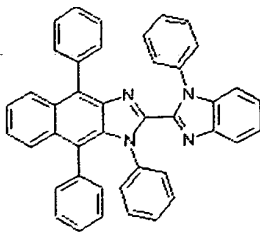
(1-30)



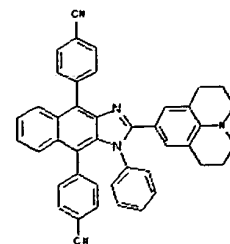
(1-31)



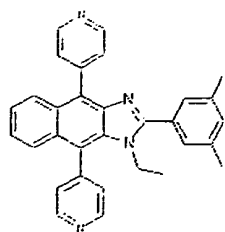
(1-32)



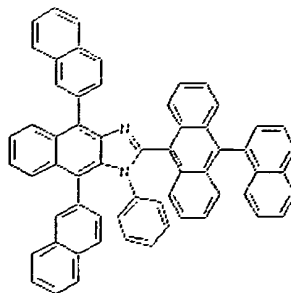
(1-33)



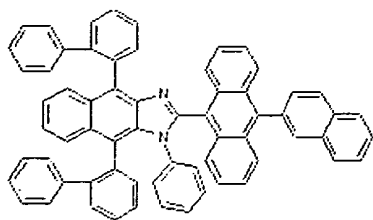
(1-34)



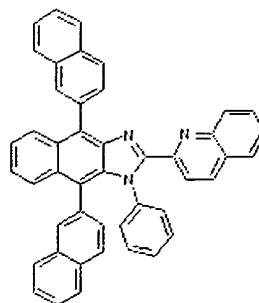
(1-35)



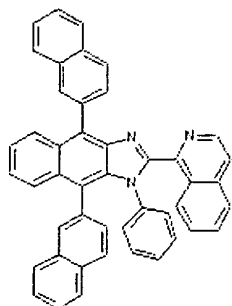
(1-36)



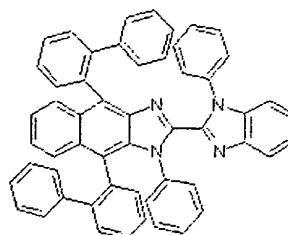
(1-37)



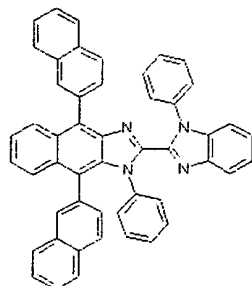
(1-38)



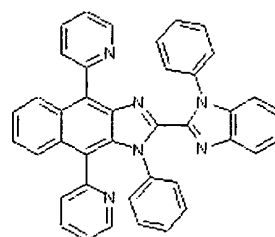
(1-39)



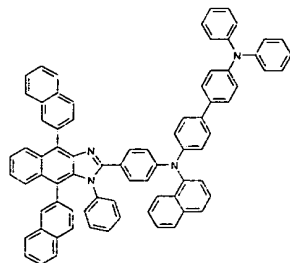
(1-40)



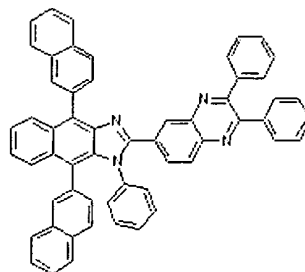
(1-41)



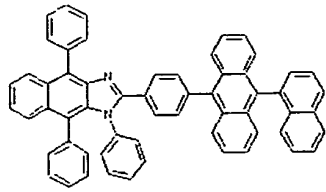
(1-42)



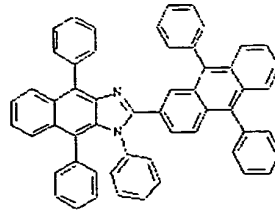
(1-43)



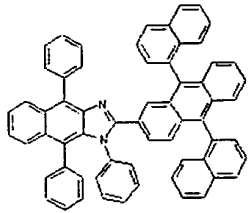
(1-44)



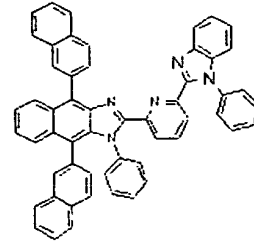
(1-45)



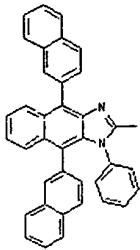
(1-46)



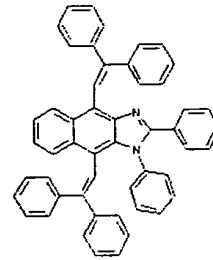
(1-47)



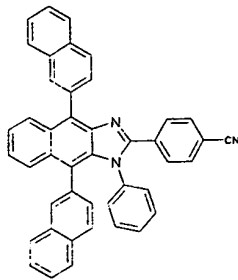
(1-48)



(1-49)



(1-50)



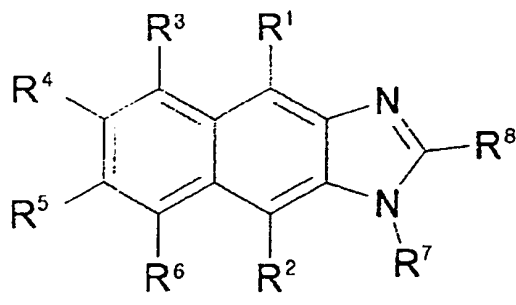
(1-51)

3. 一種使用如申請專利範圍第1項之咪唑衍生物所得之有機電子元件，其係包括：

第一電極；

第二電極；及

至少一有機材料層，其置放在該第一電極和該第二電極間之間，其中該至少一有機材料層係包含下述分子結構式(1)所示之化合物：



其中該  $R^1$  和  $R^2$  是選自由經取代的或未經取代的苯基、經取代的或未經取代的萘基、經取代的或未經取代的蒽基、經取代的或未經取代的雙苯基、經取代的或未經取代的芘基、經取代的或未經取代的芘基、經取代的或未經取代的  $C_1$  至  $C_7$  烯基、經取代的或未經取代的二苯胺基、經取代的或未經取代的苯萘胺基、經取代的或未經取代的二甲苯胺基、經取代的或未經取代的苯甲苯胺基、經取代的或未經取代的咪唑基、經取代的或未經取代的三苯胺基、經取代的或未經取代的吡啶基、經取代的或未經取代的雙吡啶基、經取代的或未經取代的吡啶基、經取代的或未經取代的噻吩基、經取代的或未經取代的咪唑基、經取代的或未經取代的噁唑基、經取代的或未經取代的噻唑基及經取代的或未經取代的喹啉基所組成的群組；

該  $R^3$  至  $R^6$  是選自由氫原子、腈基、經取代的或未經取代的苯基、經取代的或未經取代的萘基、經取代的或未經取代的蒽基、經取代的或未經取代的雙苯基、經取代的或未經取代的芘基、經取代的或未經取代的芘基、經取代的或未經取代的二苯胺基、經取代的或未經取代的苯萘胺基、經取代的或未經取代的二甲苯胺基、經取代的或未經取代的苯甲苯胺基、經取代的或未經取代的咪唑基、經取代的或未經取代的三苯胺基、經取代的或未經取代的吡啶基、經取代的或未經取代

的雙吡啶基、經取代的或未經取代的吡啶基、經取代的或未經取代的噻吩基、經取代的或未經取代的咪唑基、經取代的或未經取代的噁唑基、經取代的或未經取代的噻唑基及經取代的或未經取代的喹啉基所組成的群組；

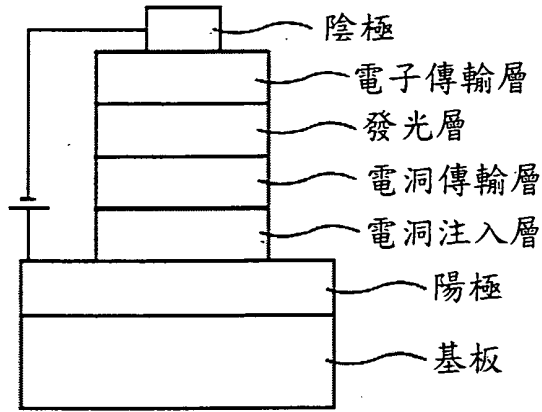
該  $R^7$  是選自由  $C_1$  至  $C_7$  烷基、經取代的或未經取代的苯基、經取代的或未經取代的萘基、經取代的或未經取代的蒽基、經取代的或未經取代的雙苯基、經取代的或未經取代的芘基及經取代的或未經取代的茈基所組成的群組；且

該  $R^8$  是選自由經取代的或未經取代的  $C_1$  至  $C_7$  烷基、經取代的或未經取代的苯基、經取代的或未經取代的萘基、經取代的或未經取代的蒽基、經取代的或未經取代的雙苯基、經取代的或未經取代的芘基、經取代的或未經取代的茈基、經取代的或未經取代的吡啶基、經取代的或未經取代的雙吡啶基、經取代的或未經取代的吡啶基、經取代的或未經取代的噻吩基、經取代的或未經取代的咪唑基、經取代的或未經取代的噁唑基、經取代的或未經取代的噻唑基及經取代的或未經取代的喹啉基所組成的群組。

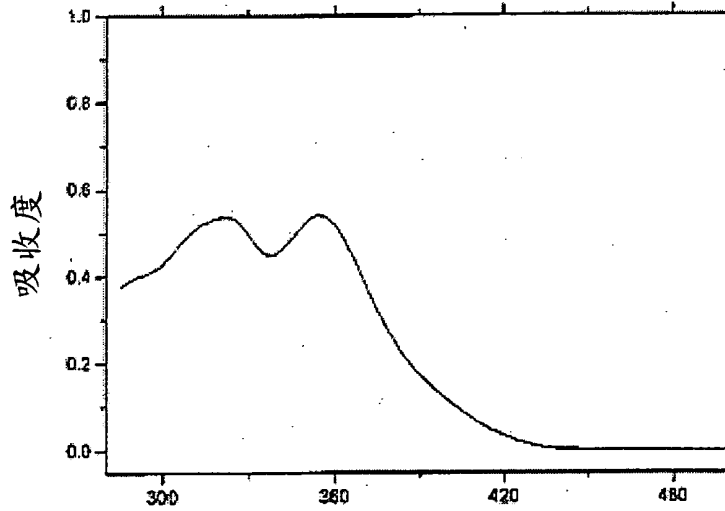
4. 如申請專利範圍第 3 項之有機電子元件，其中該有機材料層包含電子注入及傳輸層，且該電子注入及傳輸層包含該分子結構式(1)之化合物。
5. 如申請專利範圍第 3 項之有機電子元件，其中該有機材料層包含發光層，且該發光層包含該分子結構式(1)之化合物。
6. 如申請專利範圍第 3 項之有機電子元件，其中該有機材料層包含電洞傳輸層，且該電洞傳輸層包含該分子結構式(1)之化合物。

7. 如申請專利範圍第 3 項之有機電子元件，其中該有機材料層包含可同時執行電子注入／傳輸及發光的層，且該層包含該分子結構式(1)之化合物。
8. 如申請專利範圍第 3 項之有機電子元件，其中該有機電子元件是選自由有機發光元件、有機太陽能電池、有機感光鼓(OPC)及有機電晶體所組成的群組。
9. 一種製備如申請專利範圍第 1 項之分子結構式(1)化合物之方法，其係包括下列步驟：
  - a)將含  $R^7$  之胺基及胺基( $NH_2$ )分別導入到經取代的或未經取代的萘醌之 2- 及 3-碳原子位置上，並且將  $R^8$  導入至胺基( $NH_2$ )上；
  - b)在上面 a)中所獲得之化合物，藉由鏈結被導入之  $R^7$  及  $R^8$  部份的鏈而形成咪唑基；
  - c)將在上面 b)中所獲得之化合物轉換成二醇衍生物；並且
  - d)還原在上面 c)中所獲得之化合物，以形成萘基。
10. 一種製備如申請專利範圍第 1 項之分子結構式(1)化合物之方法，其係包括下列步驟：
  - a)將含  $R^7$  之胺基及胺基( $NH_2$ )分別導入至經取代的或未經取代的萘醌之 2- 及 3-碳原子位置上，並且將  $R^8$  導入至胺基( $NH_2$ )上；
  - b)在上面 a)中所獲得之化合物，藉由鏈結被導入之  $R^7$  及  $R^8$  部份的鏈而形成咪唑基；
  - c)還原在上面 b)中所獲得之化合物，以形成萘基；
  - d)將溴基導入在上面 c)中所獲得之化合物之 8- 或 9-碳原子的位置上；並且

e)將取代基與硼酸導入至上述 d)中所獲得之化合物的溴基導入其中之位置上。



第一圖



波長(2×10<sup>-5</sup>M, 在甲苯中

分子結構式 (1-10) 之UV光譜

第二圖

七、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：第(一)圖。

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

無。

八、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

無。