



(19) 中華民國智慧財產局

(12) 發明說明書公告本

(11) 證書號數：TW I551665 B

(45) 公告日：中華民國 105 (2016) 年 10 月 01 日

(21) 申請案號：100106271

(22) 申請日：中華民國 100 (2011) 年 02 月 24 日

(51) Int. Cl. : C09K11/06 (2006.01)

C07F15/00 (2006.01)

C07D403/14 (2006.01)

C07D405/14 (2006.01)

C07D409/14 (2006.01)

C07D233/66 (2006.01)

H01L51/54 (2006.01)

H05B33/14 (2006.01)

(30) 優先權：2010/02/25 美國

12/712,802

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

美國

(72) 發明人：夏傳軍 XIA, CHUANJUN (CN)；雷亞巴拉什 丹尼須 RAYABARAPU, DINESH

(IN)

(74) 代理人：陳長文

(56) 參考文獻：

TW I237524B

TW 200907018A

TW 200925150A

TW 200948183A1

CN 101525354A

WO 2009107497A1

審查人員：葉猷全

申請專利範圍項數：22 項 圖式數：3 共 112 頁

(54) 名稱

磷光發射體

PHOSPHORESCENT EMITTERS

(57) 摘要

本發明提供包括配體之化合物，該配體具有二苯并稠合 5 員環取代基。具體而言，該等化合物可係銥錯合物，其包括配位至二苯并取代配體之咪唑。該配體之二苯并稠合 5 員環部分可相對於配體結構之其餘部分離面扭曲或最低離面扭曲。該化合物可用於有機發光裝置中，尤其用作藍光裝置中之發射摻雜物。包含該等化合物之裝置可在維持優良色彩的同時顯示經改良之穩定性。

Compounds including a ligand with a dibenzo-fused 5-membered ring substituent are provided. In particular, the compounds may be iridium complexes including imidazole coordinated to the dibenzo-substituted ligand. The dibenzo-fused 5-membered ring moiety of the ligand may be twisted or minimally twisted out of plane with respect to the rest of the ligand structure. The compound may be used in organic light emitting devices, particularly as emitting dopants in blue devices. Devices comprising the compounds may demonstrate improved stability while maintaining excellent color.

指定代表圖：

符號簡單說明：
(無元件符號說明)

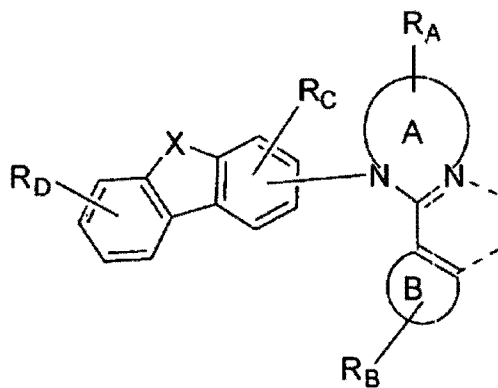
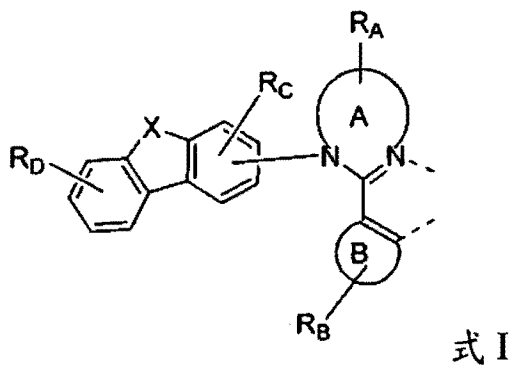


圖3

特徵化學式：



公告本 發明專利說明書

(本說明書格式、順序及粗體字，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號：100106271

※申請日：100.2.24

※IPC 分類：C07D; H01L

一、發明名稱：(中文/英文)

磷光發射體

PHOSPHORESCENT EMITTERS

二、中文發明摘要：

本發明提供包括配體之化合物，該配體具有二苯并稠合5員環取代基。具體而言，該等化合物可係銨錯合物，其包括配位至二苯并取代配體之咪唑。該配體之二苯并稠合5員環部分可相對於配體結構之其餘部分離面扭曲或最低離面扭曲。該化合物可用於有機發光裝置中，尤其用作藍光裝置中之發射摻雜物。包含該等化合物之裝置可在維持優良色彩的同時顯示經改良之穩定性。

三、英文發明摘要：

Compounds including a ligand with a dibenzo-fused 5-membered ring substituent are provided. In particular, the compounds may be iridium complexes including imidazole coordinated to the dibenzo-substituted ligand. The dibenzo-fused 5-membered ring moiety of the ligand may be twisted or minimally twisted out of plane with respect to the rest of the ligand structure. The compound may be used in organic light emitting devices, particularly as emitting dopants in blue devices. Devices comprising the compounds may demonstrate improved stability while maintaining excellent color.

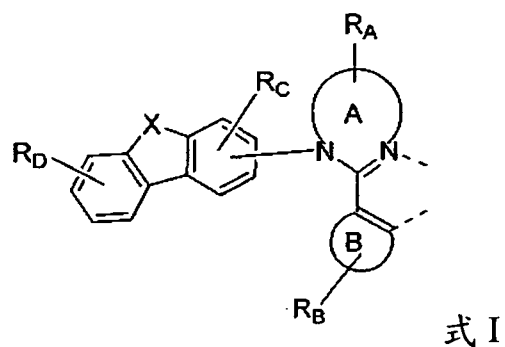
C07K11/66 (2006.01)
 C07F15/60 (2006.01)
 C07D403/4 (2006.01)
 405/4 (2006.01)
 409/4 (2006.01)
 23/6 (2006.01)
 H01L51/54 (2006.01)
 H01B33/4 (2006.01)

四、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：第 (3) 圖。

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

(無元件符號說明)

五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

六、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明係關於有機發光裝置(OLED)。更特定而言，本發明係關於含有配體之磷光有機材料及含有該等化合物之裝置，該配體具有二苯并稠合5員環取代基。

所主張之發明係由、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。該協定在做出所主張之發明之日期時及其之前有效，且所主張之發明係作為在該協定之範圍內所採取之活動的結果而做出。

【先前技術】

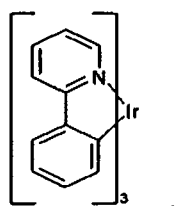
多種原因使得使用有機材料之光電子裝置變得越來越理想。用於製造該等裝置之許多材料價格相對較低廉，故有機光電子裝置較無機裝置具有成本優勢之潛力。另外，有機材料之固有性質(例如其撓性)使其極適用於特定應用中，例如於撓性基板上之製作。有機光電子裝置之實例包括有機發光裝置(OLED)、有機光電電晶體、有機光伏打電池及有機光檢測器。對於OLED，有機材料可具有優於習用材料之性能優勢。舉例而言，有機發射層所發射光之波長通常可容易地用適當摻雜物進行調整。

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，該等專利之全文皆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」色彩)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 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$)，其具有以下結構：



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」係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化學殼層構築於核心部分上而構成。樹枝狀聚合物之核心部分可係螢光或

磷光小分子發射體。樹枝狀聚合物可為「小分子」，且人們認為當前用於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。

當人們認為配體直接促進發射材料之光活性性質時，該配體可稱為具有「光活性」。當人們認為配體並不促進發射材料之光活性性質，但輔助配體可改變光活性配體之性質時，該配體可稱為「輔助配體」。

如本文所用且如熟習此項技術者通常所瞭解，若第一「最高佔據分子軌道」(HOMO)或「最低未佔據分子軌道」(LUMO)能級更接近真空能級，則該第一能級「大於」或「高於」第二HOMO或LUMO能級。由於電離電位(IP)量測為相對於真空能級之負能量，則較高HOMO能級對應於具有較小絕對值之IP(不太負之IP)。類似地，較高LUMO能級對應於具有較小絕對值之電子親和力(EA)(不太負之EA)。在真空能級位於頂部之習用能級圖上，材料之

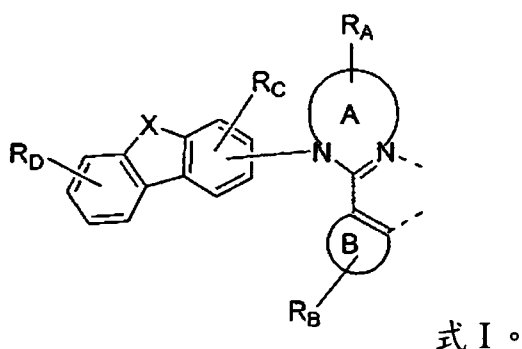
LUMO能級高於同一材料之HOMO能級。「更高」HOMO或LUMO能級看來較「更低」HOMO或LUMO能級更接近此圖之頂部。

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

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

【發明內容】

本文提供包含配體L之化合物，該配體具有下式：



A及B各自獨立地為5員或6員碳環或雜環。較佳地，B係苯基。R_A、R_B、R_C及R_D代表單、二、三或四取代。R_A、R_B、R_C及R_D獨立地選自氫、鹵素、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳基及雜芳基。R_A、R_B、R_C及R_D視情

況經稠合。X選自由CRR'、NR、O及S組成之群。R及R'獨立地選自由烷基及芳基組成之群。配體L係配位至原子序數大於40之金屬M。較佳地，M係Ir。

在一個態樣中，該化合物係均配物。均配化合物之實例包括但不限於化合物1至72及化合物83至114。

在另一態樣中，化合物係異配物且化合物中之所有配體L均具有式I。在又一態樣中，化合物係異配物且化合物中之至少一個配體L具有式I。

在一個態樣中，R_C係兩個烷基取代基。在另一態樣中，R_C係兩個具有3個或更多個碳原子之取代基。

含有R_C之環可在連接至A之碳原子之鄰位處具有其他取代。在一個態樣中，含有R_C之環在連接至A之碳原子之一個鄰位處經取代。在另一態樣中，含有R_C之環具有兩個位於連接至A之碳原子之鄰位處的取代基。在再一態樣中，含有R_C之環具有一個位於附接至A之碳原子之鄰位處的取代基且附接至A之碳原子之另一鄰位係由經取代二苯并部分佔據。

在一個態樣中，R_C係氫。

在一個態樣中，該化合物選自由化合物1至化合物114組成之群。

在一個態樣中，R_A稠合至A。較佳地，R_A係芳基或雜芳基。更佳地，R_A係咪唑。

包括經二苯并取代之苯并咪唑配體之化合物包括選自由化合物37至化合物72組成之群之化合物。

在一個態樣中，化合物包含配體L，其中X係O。包含二苯并咪喃配體之化合物包括選自由化合物1至化合物48組成之群之化合物。

在一個態樣中，化合物包含配體L，其中X係S。包含二苯并噻吩配體之化合物包括選自由化合物13至化合物60組成之群之化合物。

在一個態樣中，化合物包含配體L，其中X係NR。包含咪唑配體之化合物包括選自由化合物25至化合物72組成之群之化合物。

亦提供包含有機發光裝置之第一裝置。該有機發光裝置進一步包含陽極、陰極及佈置於該陽極與該陰極間之有機層，該有機層包含含有式I之配體L之化合物，如上文所述。所述較佳用於包括式I之配體L之化合物之取代基選擇亦較佳用於包含包括式I之配體L之化合物之裝置中。該等選擇包括彼等針對B、M、R_C、R_A及X所述者。

A及B各自獨立地為5員或6員碳環或雜環。較佳地，B係苯基。R_A、R_B、R_C及R_D代表單、二、三或四取代。R_A、R_B、R_C及R_D獨立地選自氫、鹵素、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳基及雜芳基。R_A、R_B、R_C及R_D視情況經稠合。X選自由CRR'、NR、O及S組成之群。R及R'獨立地選自由烷基及芳基組成之群。配體L係配位至原子序數大於40之金屬M。較佳地，M係Ir。

在一個態樣中，第一裝置係消費產品。在一個具體態樣中，第一裝置係有機發光裝置。在另一具體態樣中，第一

裝置係顯示器。

在一個態樣中，化合物係均配物。在另一態樣中，化合物係異配物且化合物中之所有配體L均具有式I。在又一態樣中，化合物係異配物且化合物中之至少一個配體L具有式I。

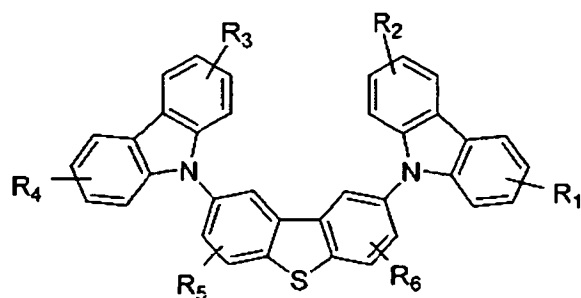
在一個態樣中， R_C 係兩個烷基取代基。在另一態樣中， R_C 係兩個具有3個或更多個碳原子之取代基。

在一個態樣中，含有 R_C 之環係在連接至A之碳原子之兩個鄰位處經取代。

在一個態樣中， R_C 係氫。

提供具體裝置，其中該等裝置包括選自由化合物1至化合物114組成之群之化合物。

另外，提供裝置，其中有機層係發射層且包含式I之配體L之化合物係發射摻雜物。此外，該有機層進一步包含主體材料。較佳地，該主體材料具有下式：



式II。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5

及 R_6 獨立地選自由氫、烷基及芳基組成之群。

最佳地，該主體材料係H1。

【實施方式】

通常，OLED包含至少一個佈置於陽極與陰極間且與陽

極及陰極電連接之有機層。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。所注入之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。在一些情況下，激發子可定位於一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，該專利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。

然而，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。磷光更詳細地闡述於美國專利第7,279,704號第5至6行中，其以引用方式併入。

圖1顯示有機發光裝置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

輸層 125、電子阻擋層 130、發射層 135、電洞阻擋層 140、電子傳輸層 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可藉由依序沈積所述各層來製作。該等各種層之性質及功能以及實例材料更詳細地闡述於 US 7,279,704第6至10行中，其以引用方式併入。

可獲得更多該等層中各個層之實例。舉例而言，撓性及透明基板-陽極組合係揭示於美國專利第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F.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，該專利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，該專利之全文以引用方式併入本文中。經n-摻雜之電子傳送層之實例係經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，該專利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係更詳細地闡述於美國專利第6,097,147號及美國專利申請公開案第2003/0230980號中，其全文以引用方式併入本文中。注入層之實例係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

層之闡述可在美國專利申請公開案第2004/0174116號中找到，其全文以引用方式併入本文中。

圖2顯示倒置OLED 200。該裝置包括基板210、陰極215、發射層220、電洞傳輸層225及陽極230。裝置200可藉由依序沈積所述各層來製作。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之相應層中。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。所闡述之特定材料及結構係為例示性本質，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之各種層可達成功能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劑之混合物)或更通常可使用混合物。而且，該等層可具有各種子層。本文中提供給各種層之名稱不欲具有嚴格限制性。舉例而言，在裝置200中，電洞傳輸層225傳輸電洞並將電洞注入發射層220中，且可將其闡述為電洞傳輸層或電洞注入層。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，該專利之全文以引用方式併入本文中。進一步舉例而言，可使用具有一單一有機層之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，該專利之全文以引用方式併入本文中。OLED結構可不同於圖1及2中所示之簡單分層結構。舉例而言，基板可包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，該等專利之全文皆以引用之方式併入本文中。

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，該專利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，該專利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。欲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個碳原子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、數位照相機、便攜式攝錄影機、取景器、微顯示器、車輛、大面積牆壁、影院或露天大型運動場顯示屏或招牌。可使用各種控制機制來控制根據本發明所製作之裝置，其包括被動矩陣及主動矩陣。許多裝置意欲在使人感覺舒適之溫度範圍內使用，例如18°C至30°C，且更佳於室溫(20-25°C)下。

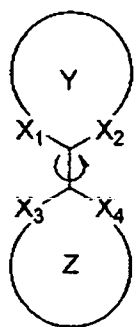
本文所述材料及結構可應用於除OLED以外之裝置中。

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)可使用該等材料及結構。更一般而言，有機裝置(例如有機電晶體)可使用該等材料及結構。

術語鹵基、鹵素、烷基、環烷基、烯基、炔基、芳烷基、雜環基團、芳基、芳香族基團及雜芳基已為業內所熟知，且在美國專利第7,279,704號第31至32行中對其進行界定，該專利以引用方式併入本文中。

提供包括配體之新穎化合物，該配體具有二苯并稠合5員環取代基(繪示於圖3中)。具體而言，配體上之二苯并稠合5員環取代基包括二苯并噻吩、二苯并呋喃、咪唑及芴配體。二苯并稠合5員環取代基相對於配體之環金屬部分離面扭曲或最低離面扭曲。該等化合物可顯示尤其有益之性質，且可有利地用於有機發光裝置中。

當兩個芳香族碳環及/或雜環連接時，該兩個環可相對於彼此離面扭曲。舉例而言，式I顯示含有兩個環之結構，即環Y及環Z，其可相對於彼此離面扭曲



式I。

二面角可較小，例如約 0° 至約 40° 。舉例而言，聯苯具有兩個彼此連接之苯環，且二面角係約 40° 。在先前實例

中，若環Y與環Z中之一或二者係5員環，或者若 X_1 至 X_4 中之一或多者係N而非C-H，則二面角可小於 40° 或約為 40° 。二面角對兩個芳香族環間之共軛具有顯著效應。人們認為聯苯中之兩個環彼此完全共軛。本文所用最低扭曲定義為二面角介於 0° 至 40° 之間，且扭曲定義為二面角介於 41° 至 90° 之間。

具有扭曲芳基取代基之有機金屬化合物已報導於文獻(參見US 20070088167及US 20060251923)中。然而，本文所提供化合物含有新穎結構並顯示經改良性質。本文化合物包含具有二苯并稠合5員環取代基之配體，其中該二苯并稠合5員環取代基可相對於A環平面扭曲或最低扭曲。藉由在二苯并稠合5員環取代基與配體之其餘部分(即A環)間之附接點之一或多個鄰位處添加龐大取代基，二苯并稠合5員環取代基可相對於A環離面扭曲。在一個鄰位添加龐大取代基可一定程度地扭曲二苯并稠合5員環取代基，並減小A環與二苯并稠合5員環取代基間之共軛。兩個鄰位處之龐大取代基可完全破壞共軛，即接近 90° 之二面角。

包括具有扭曲二苯并稠合5員環取代基之配體的化合物可具有經改良性質。不受理論限制，人們認為龐大的鄰位取代基可使二苯并稠合5員環取代基離面扭曲並破壞共軛。具體而言，具有苯基咪唑之化合物易於氧化。認為藉由鄰位取代基所形成之位阻效應可保護A環免受氧之攻擊，從而可增加化合物之穩定性。龐大的鄰位取代基亦可減少化合物之堆疊並藉此增加量子產率。因此，扭曲之二

苯并稠合5員環取代配體可改良裝置效率及裝置壽命。

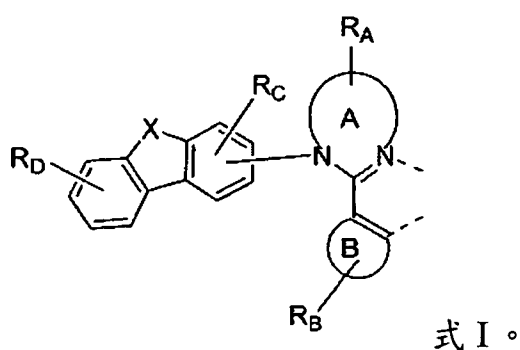
認為LUMO係位於化合物中配體上之二苯并稠合5員環取代基(即C環)上。主體材料中之二苯并呋喃及二苯并噻吩區段可使電子穩定。人們認為增加C環之共軛可改良裝置穩定性。本文所提供之化合物具有二苯并稠合5員環作為LUMO位以使該等化合物可提供更佳裝置穩定性。具體而言，包括二苯并呋喃及/或二苯并噻吩作為C環之化合物可具有更穩定之LUMO及經改良裝置穩定性。舉例而言，化合物1包括二苯并呋喃部分且E1包括苯基。與E1相比，化合物1在裝置中顯示經改良之穩定性。

另外，該等化合物在維持期望之發射譜的同時提供有益性質。舉例而言，與E1相比，化合物1之色彩僅發生微小偏移。

此外，與先前所報導之化合物相比，所提供之化合物具有較短激發態壽命且具有較高輻射速率。該等化合物之經縮短之暫態壽命可提供經改良之光物理性質。具體而言，該等化合物可在激發態中耗費較少時間，藉此降低光化學反應或猝滅發生的可能性。舉例而言，所提供化合物之所量測暫態壽命係短於先前所報導化合物之暫態壽命(參見表4)。因此，該等化合物可提供具有經改良穩定性之裝置。

本文提供包括具有二苯并稠合5員環取代基之配體之新穎化合物。該等化合物提供可有利地用於OLED中之新型材料。

本文提供包含配體L之化合物，該配體具有下式：



A及B各自獨立地為5員或6員碳環或雜環。較佳地，B係苯基。R_A、R_B、R_C及R_D代表單、二、三或四取代。R_A、R_B、R_C及R_D獨立地選自氫、鹵素、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳基及雜芳基。R_A、R_B、R_C及R_D視情況經稠合。X選自由CRR'、NR、O及S組成之群。R及R'獨立地選自由烷基及芳基組成之群。配體L係配位至原子序數大於40之金屬M。較佳地，M係Ir。

在一個態樣中，該化合物係均配物。均配化合物可具有若干有利性質，例如直接合成及純化及可預測光物理性質。具體而言，均配化合物可更容易地合成並純化，此乃因錯合物中之所有配體均相。均配化合物之實例包括但不限於化合物1至72及化合物83至114。

本文所提供化合物亦可係異配物。異配化合物可具有若干有益性質，包括改良化合物之性質之能力。具體而言，異配化合物提供高度可調磷光發射材料，此乃因該錯合物可含有具有不同HOMO/LUMO能級之不同配體。另外，異配化合物可具有較低昇華溫度。在另一態樣中，化合物係

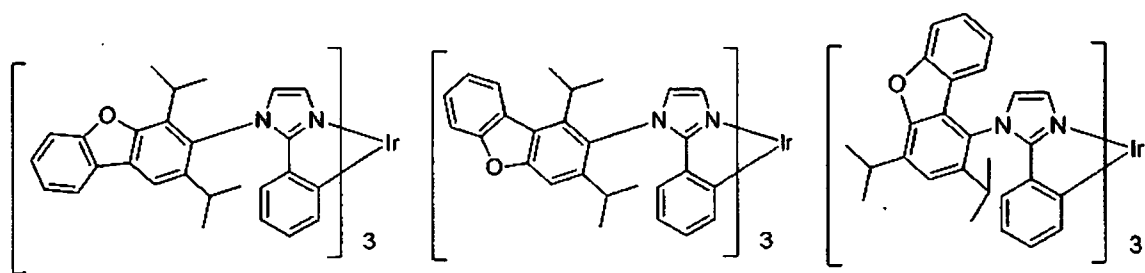
異配物且化合物中之所有配體L均具有式I。該等化合物之實例包括但不限於化合物81及82。在又一態樣中，化合物係異配物且化合物中之至少一個配體L具有式I。該等化合物之實例包括但不限於化合物73至82。

在一個態樣中， R_C 係兩個烷基取代基。在另一態樣中， R_C 係兩個具有3個或更多個碳原子之取代基。具有3個或更多個碳原子之烷基取代基可包括具有3個以上碳原子之直鏈烷基(例如，丁基)、具有3個以上碳原子之具支鏈烷基(例如，異丁基)及具有3個以上碳原子之環烷烴(例如，環己基)。 R_C 係兩個具有3個或更多個碳原子之烷基取代基之化合物的實例包括但不限於化合物1至82。

含有 R_C 之環可在連接至A之碳原子之鄰位處具有其他取代。在一個態樣中，含有 R_C 之環在連接至A之碳原子之一個鄰位處經取代。在另一態樣中，含有 R_C 之環具有兩個位於連接至A之碳原子之鄰位處的取代基。該等化合物可包括(例如)化合物1、2及4至6。在再一態樣中，含有 R_C 之環具有一個位於附接至A之碳原子之鄰位處的取代基且附接至A之碳原子之另一鄰位係由經取代二苯并部分佔據。該等化合物可包括(例如)化合物3、7及11。

在一個態樣中， R_C 係氫。此等化合物之二苯并稠合5員環取代基相對於A環(例如咪唑)最低離面扭曲。包含最低扭曲二苯并稠合5員環取代配體之化合物的實例包括但不限於化合物83至114。

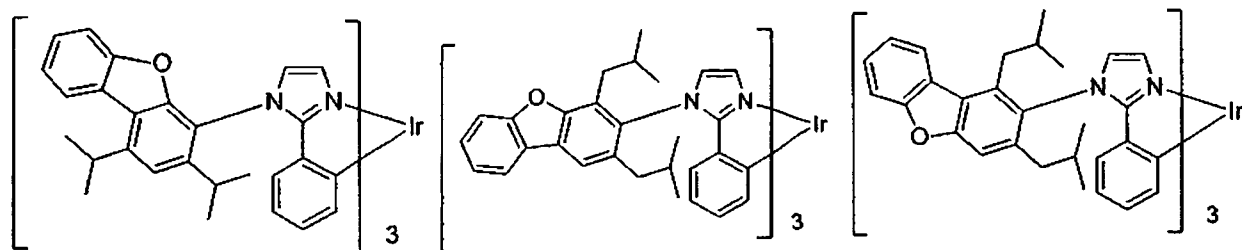
在一個態樣中，該化合物選自由以下組成之群：



化合物 1

化合物 2

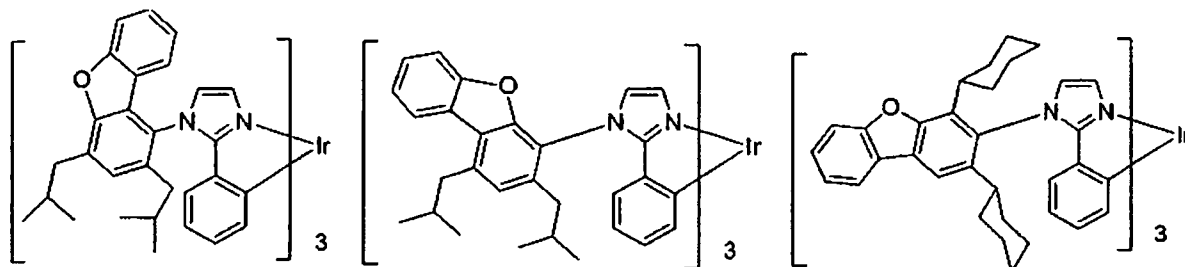
化合物 3



化合物 4

化合物 5

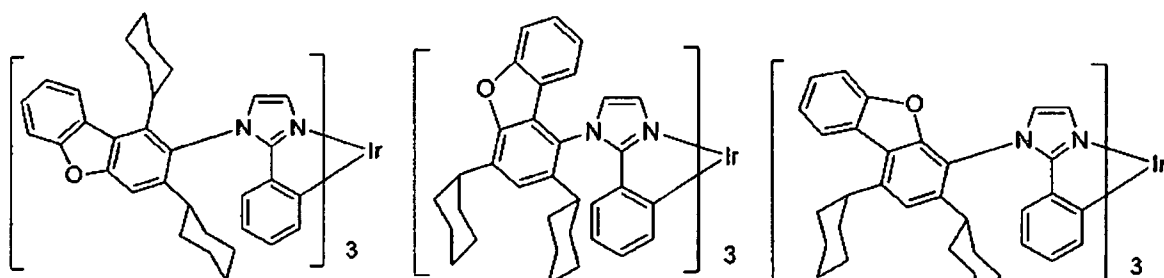
化合物 6



化合物 7

化合物 8

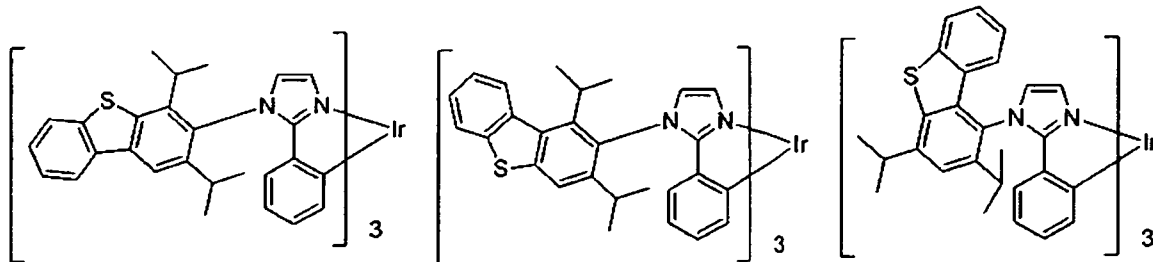
化合物 9



化合物 10

化合物 11

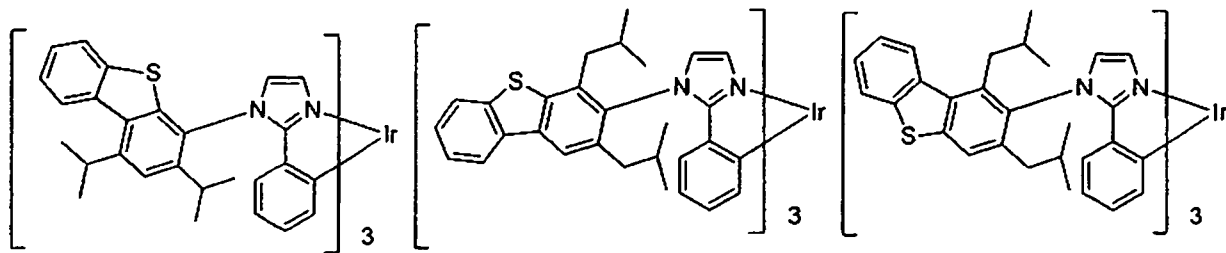
化合物 12



化合物 13

化合物 14

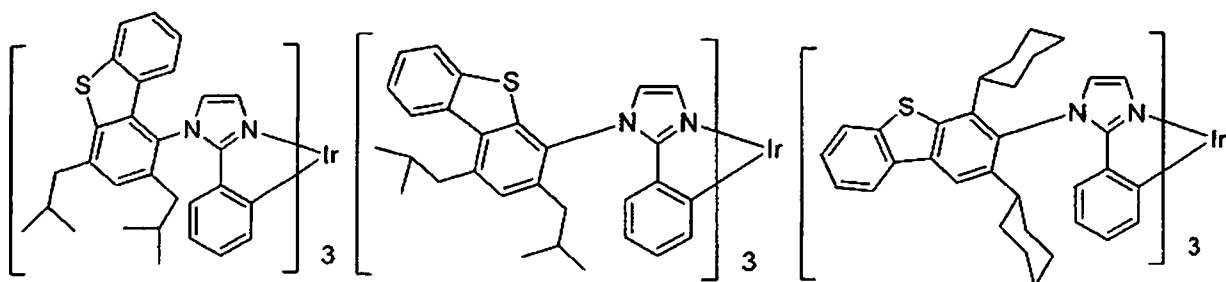
化合物 15



化合物 16

化合物 17

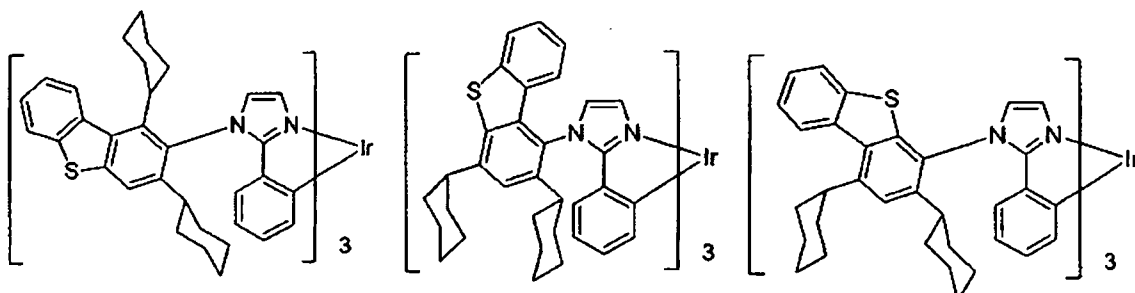
化合物 18



化合物 19

化合物 20

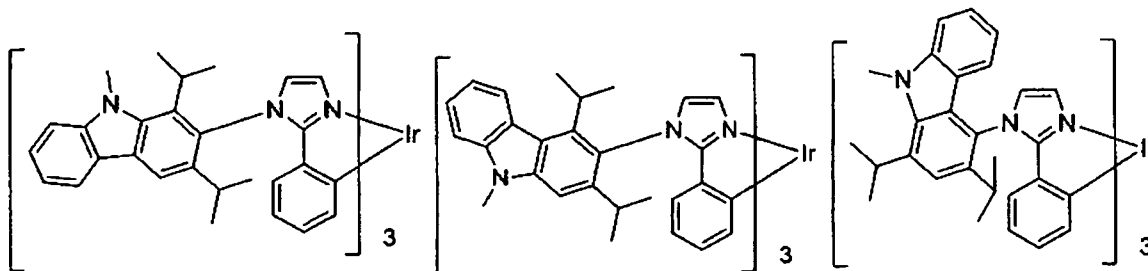
化合物 21



化合物 22

化合物 23

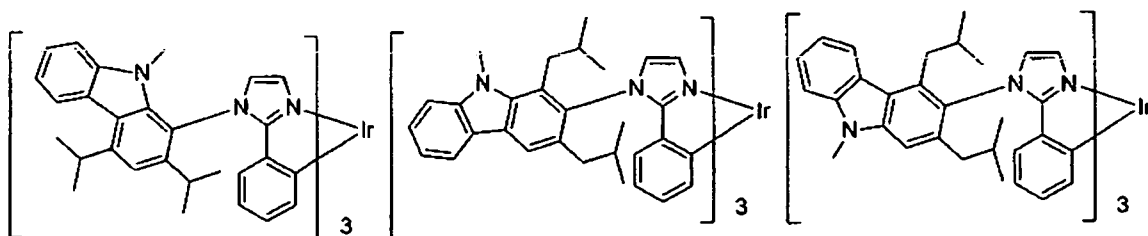
化合物 24



化合物 25

化合物 26

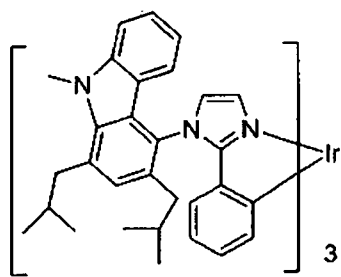
化合物 27



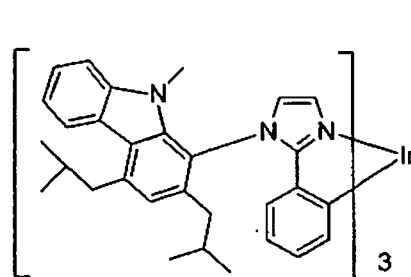
化合物 28

化合物 29

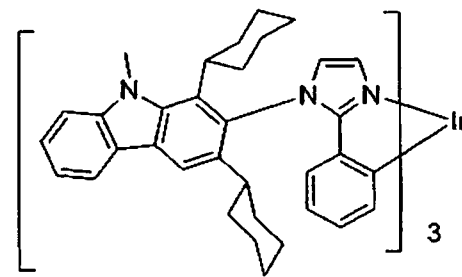
化合物 30



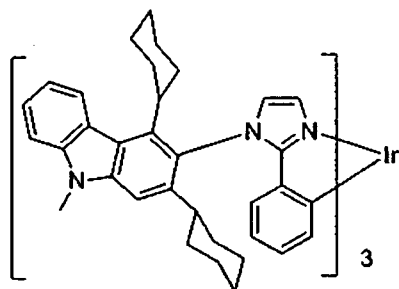
化合物 31



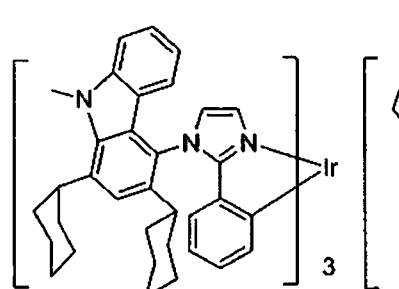
化合物 32



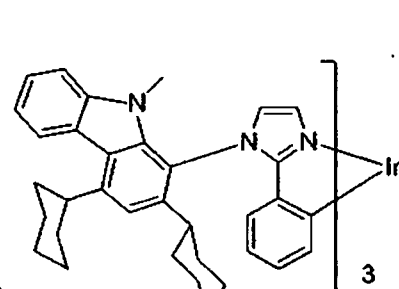
化合物 33



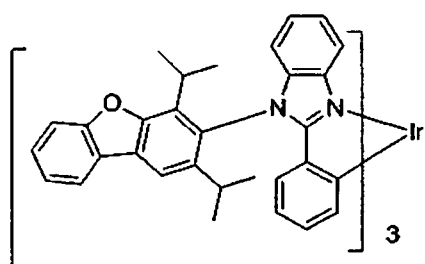
化合物 34



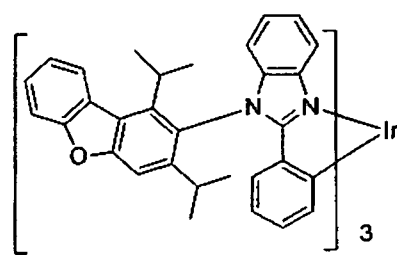
化合物 35



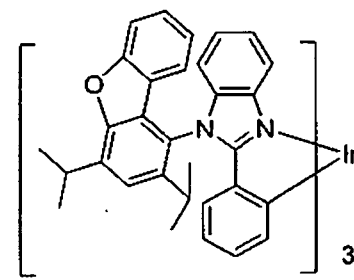
化合物 36



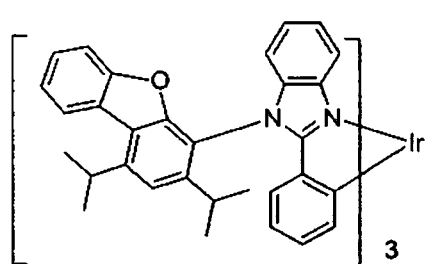
化合物 37



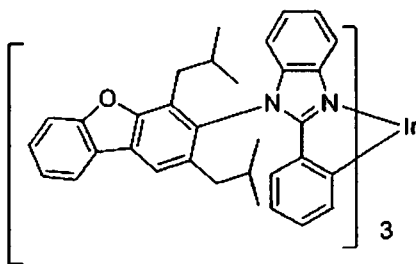
化合物 38



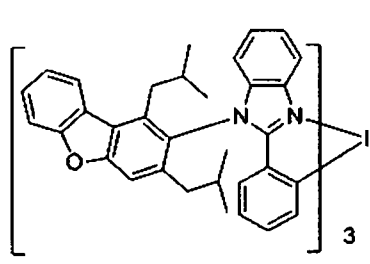
化合物 39



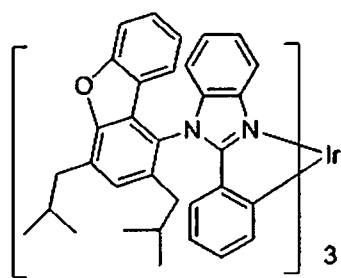
化合物 40



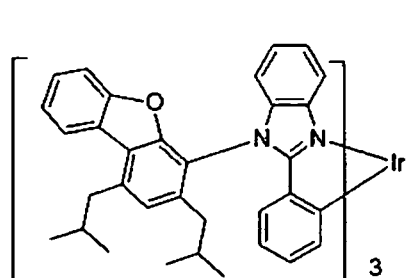
化合物 41



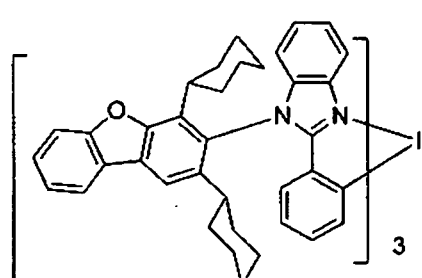
化合物 42



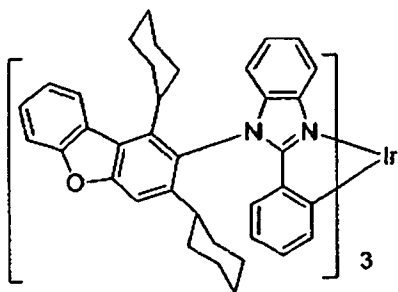
化合物 43



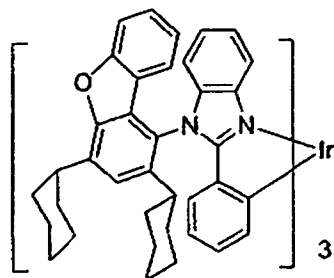
化合物 44



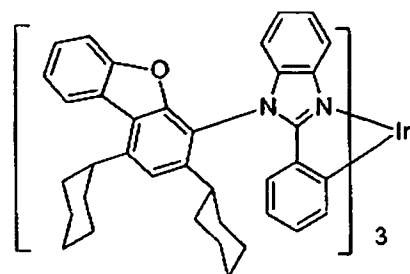
化合物 45



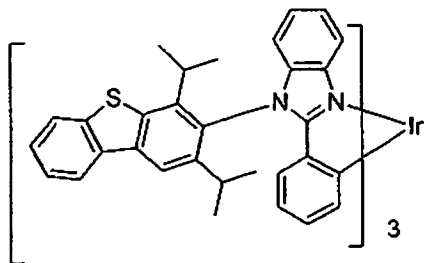
化合物 46



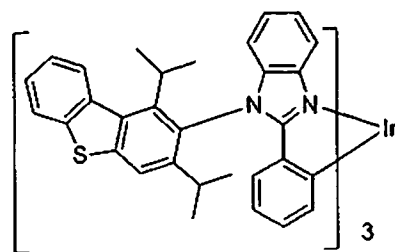
化合物 47



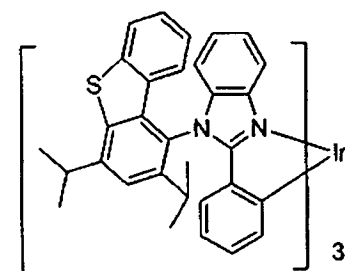
化合物 48



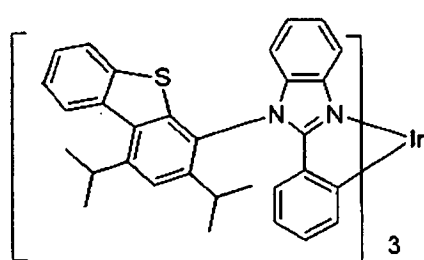
化合物 49



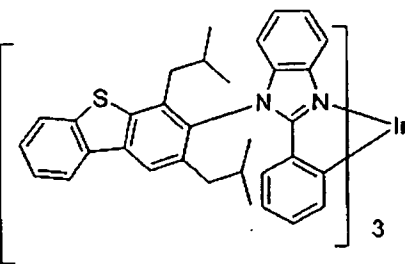
化合物 50



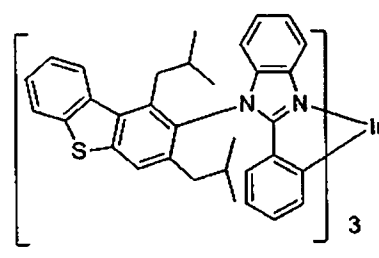
化合物 51



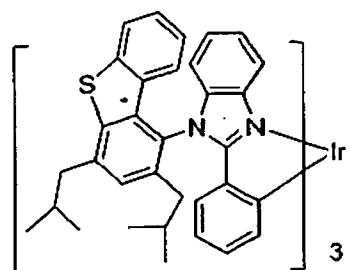
化合物 52



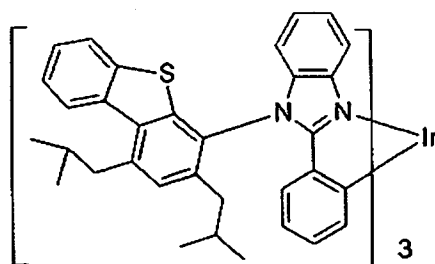
化合物 53



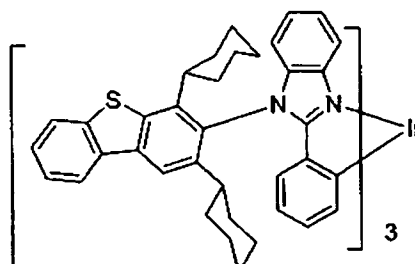
化合物 54



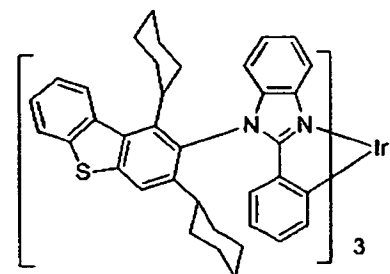
化合物 55



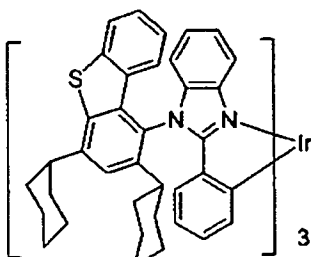
化合物 56



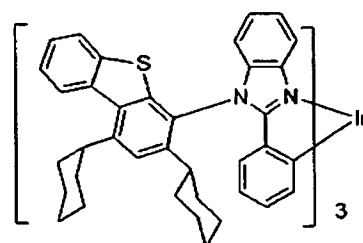
化合物 57



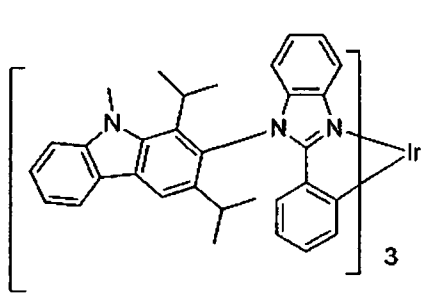
化合物 58



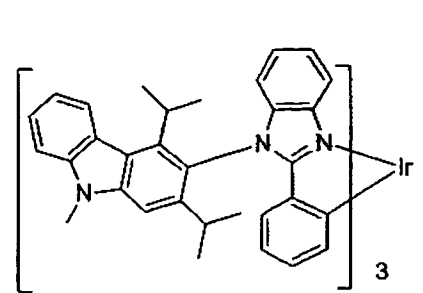
化合物 59



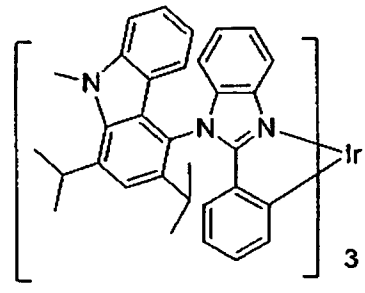
化合物 60



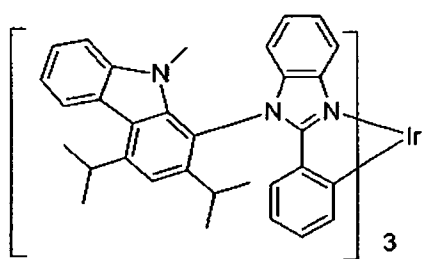
化合物 61



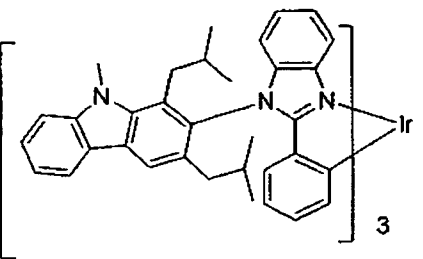
化合物 62



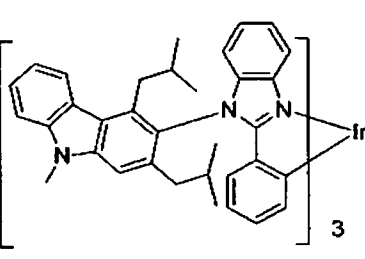
化合物 63



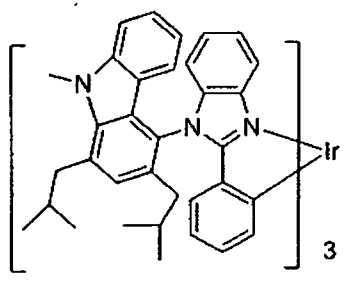
化合物 64



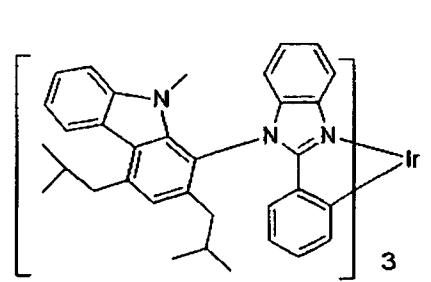
化合物 65



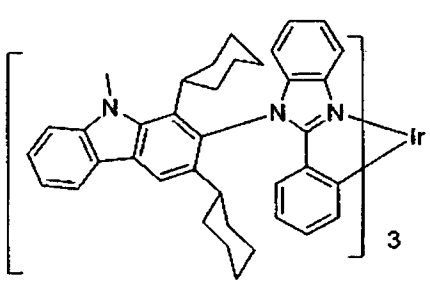
化合物 66



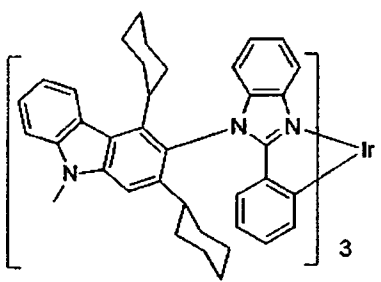
化合物 67



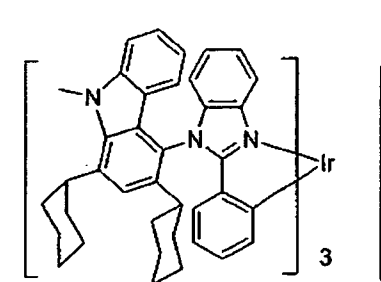
化合物 68



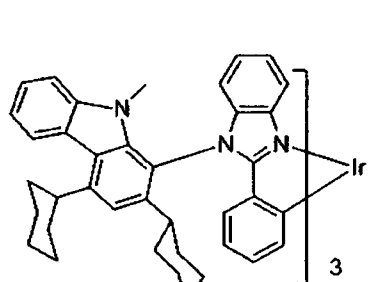
化合物 69



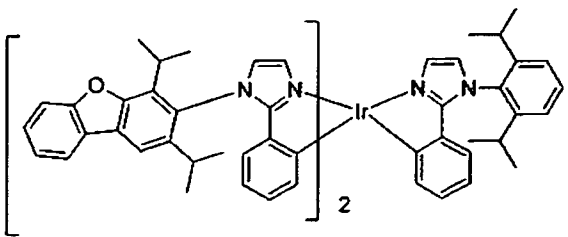
化合物 70



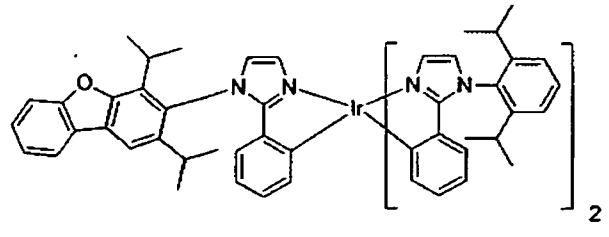
化合物 71



化合物 72

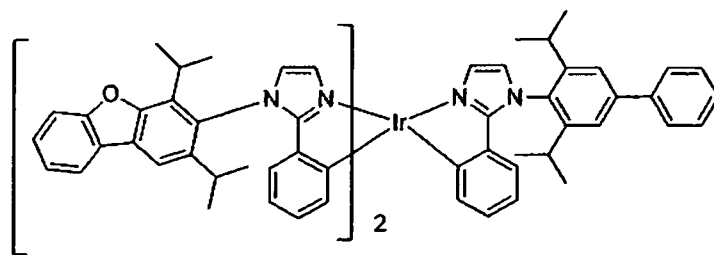


化合物 73

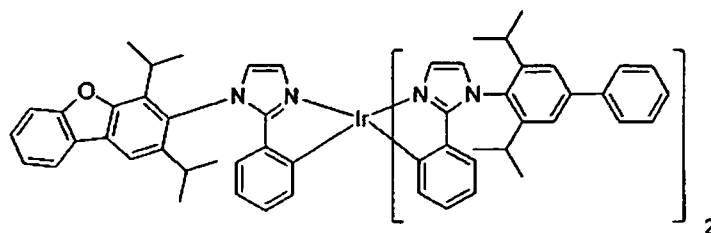


化合物 74

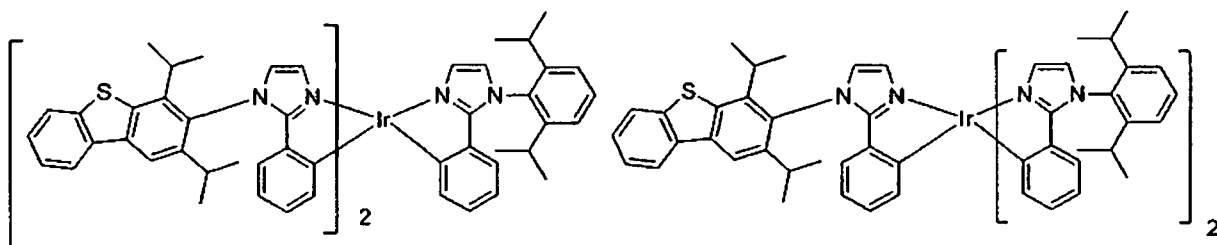




化合物 75

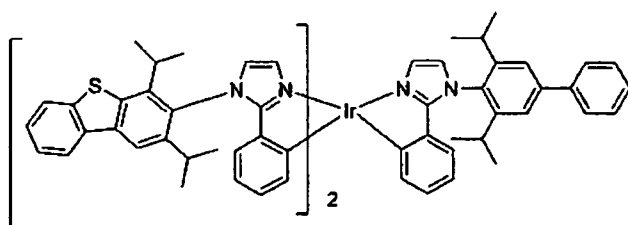


化合物 76

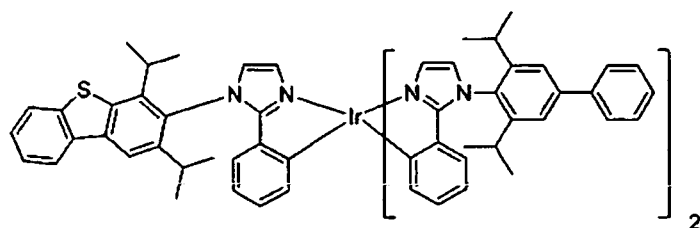


化合物 77

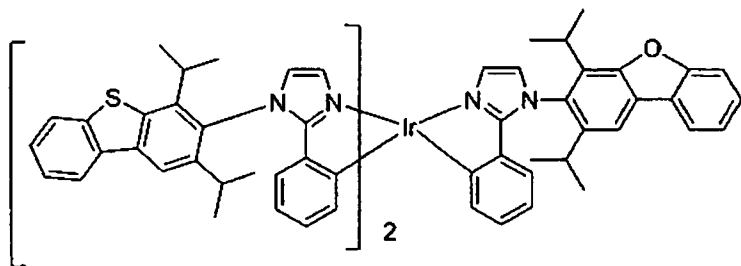
化合物 78



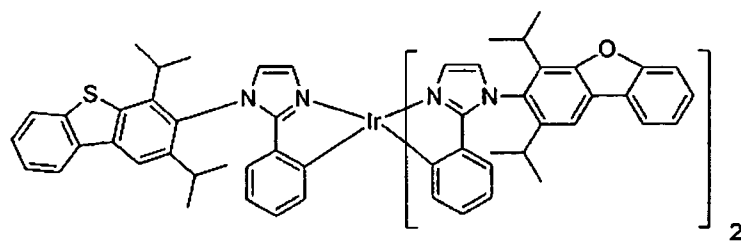
化合物 79



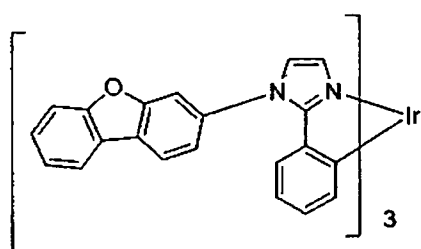
化合物 80



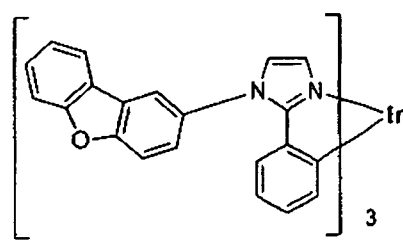
化合物 81



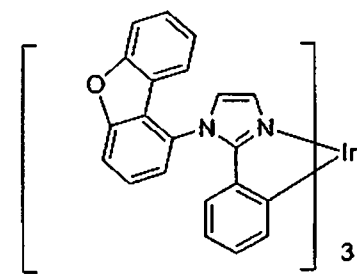
化合物 82



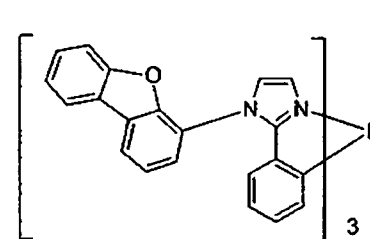
化合物 83



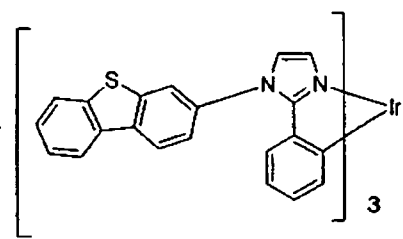
化合物 84



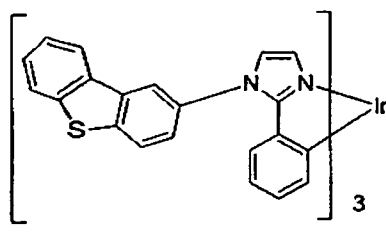
化合物 85



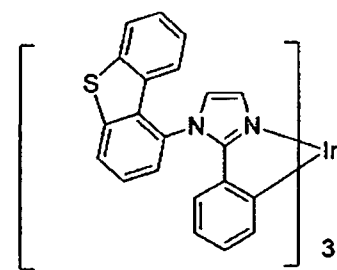
化合物 86



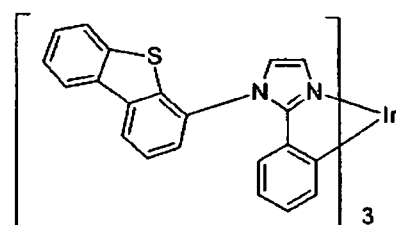
化合物 87



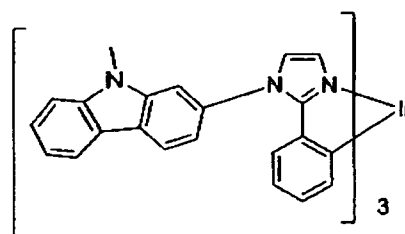
化合物 88



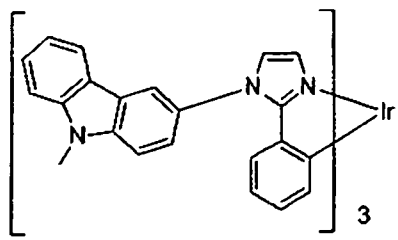
化合物 89



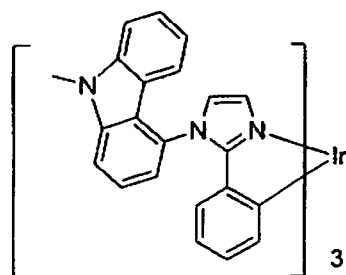
化合物 90



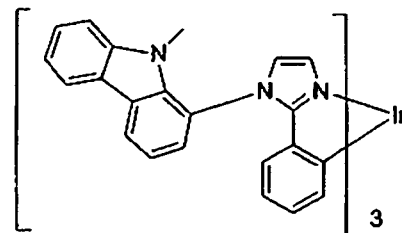
化合物 91



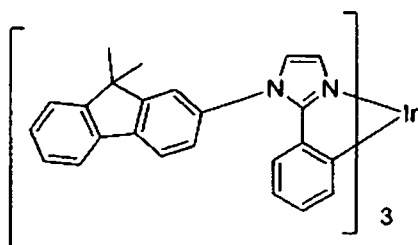
化合物 92



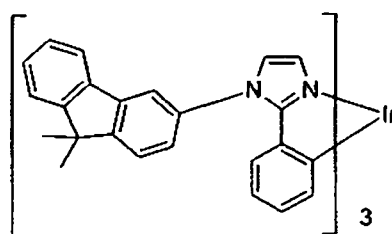
化合物 93



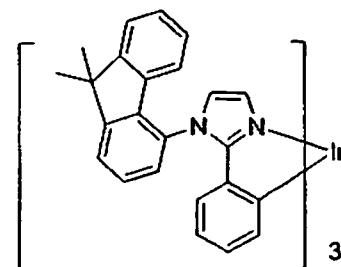
化合物 94



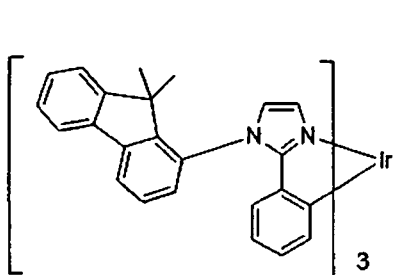
化合物 95



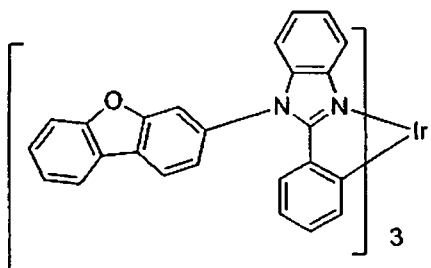
化合物 96



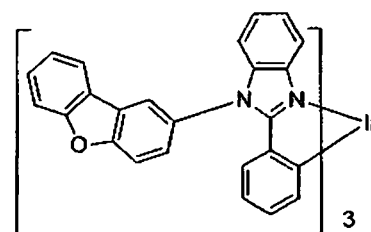
化合物 97



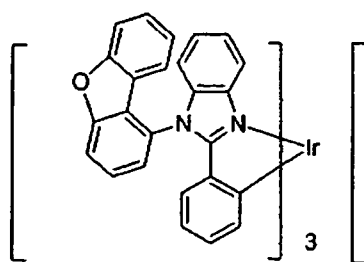
化合物 98



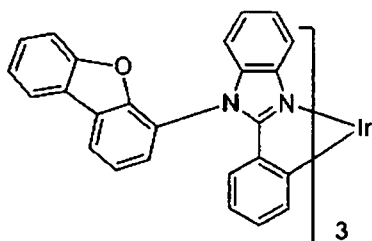
化合物 99



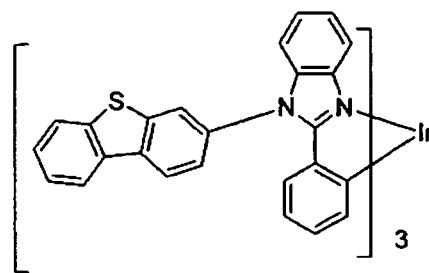
化合物 100



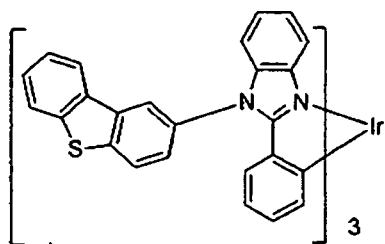
化合物 101



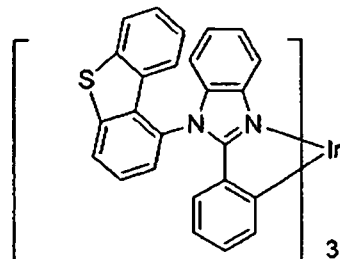
化合物 102



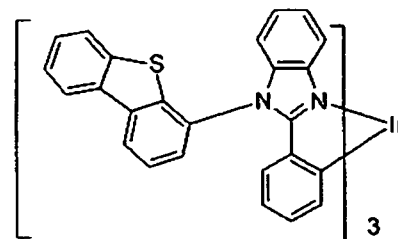
化合物 103



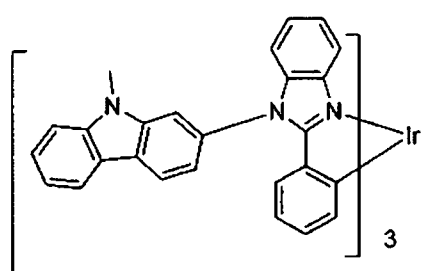
化合物 104



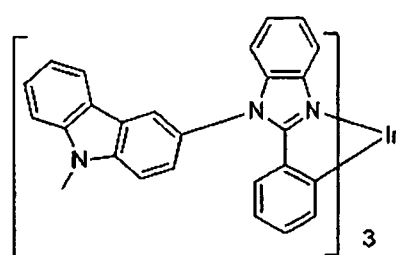
化合物 105



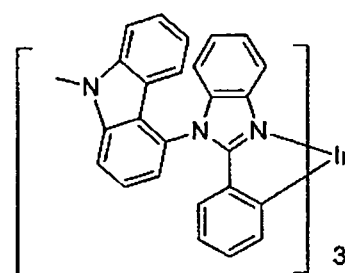
化合物 106



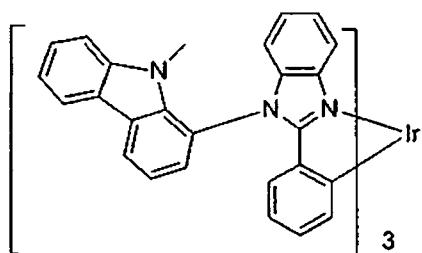
化合物 107



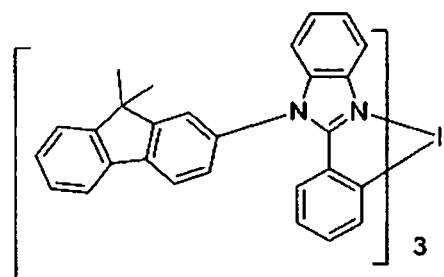
化合物 108



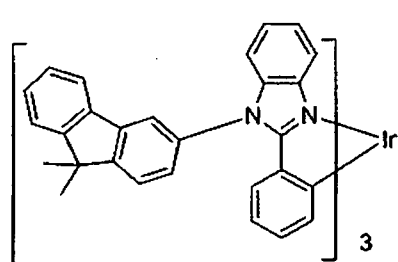
化合物 109



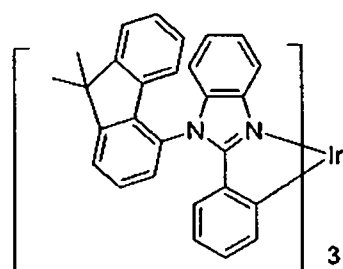
化合物 110



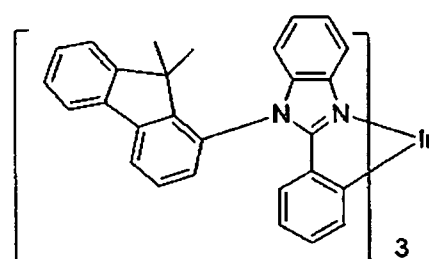
化合物 111



化合物 112



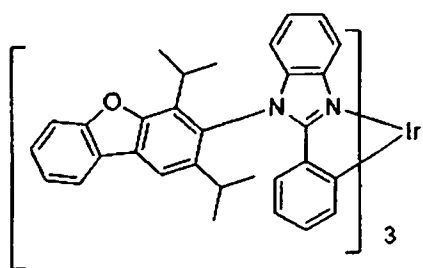
化合物 113



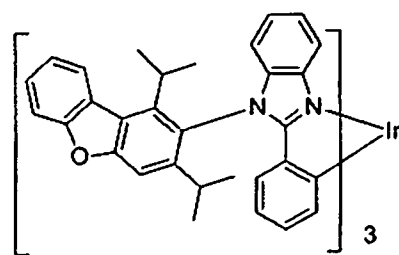
化合物 114

在一個態樣中， R_A 稠合至A。較佳地， R_A 係芳基或雜芳基。更佳地， R_A 係咪唑。包括二苯并稠合5員環取代之苯并咪唑配體的化合物可具有尤其合意之性質，例如經改良量子效率及穩定性。

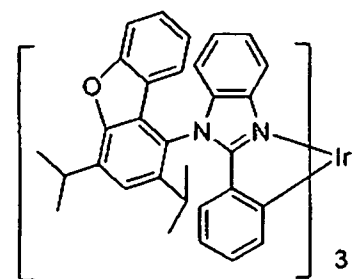
包括二苯并稠合5員環取代之苯并咪唑配體的化合物包括選自由以下組成之群之化合物：



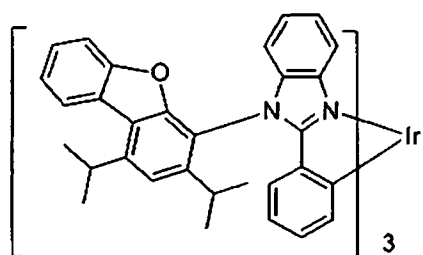
化合物 37



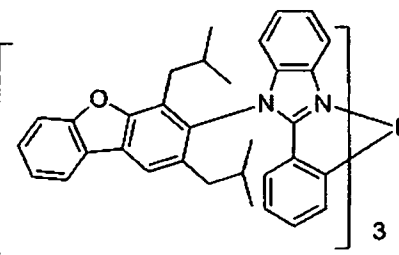
化合物 38



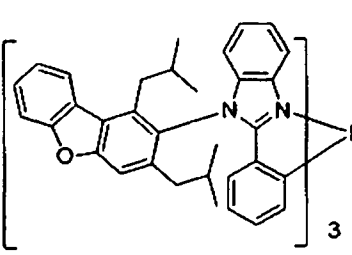
化合物 39



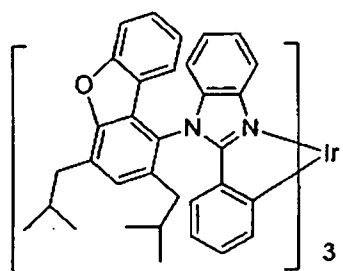
化合物 40



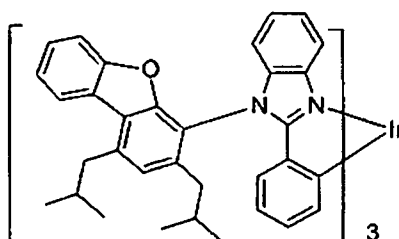
化合物 41



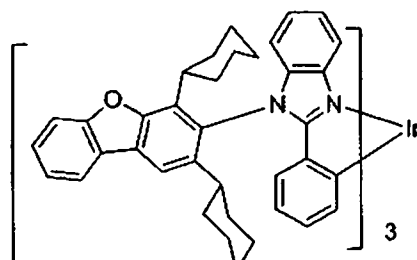
化合物 42



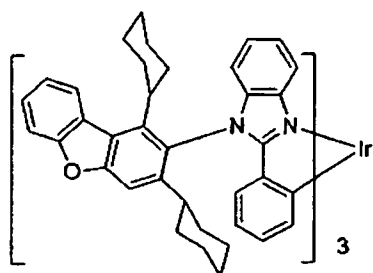
化合物 43



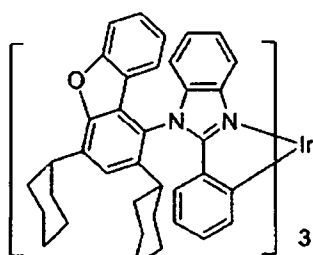
化合物 44



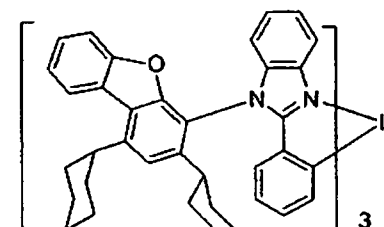
化合物 45



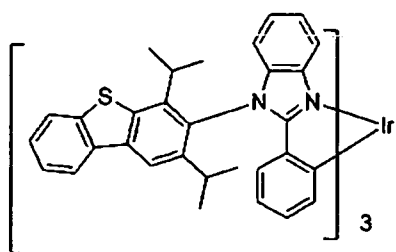
化合物 46



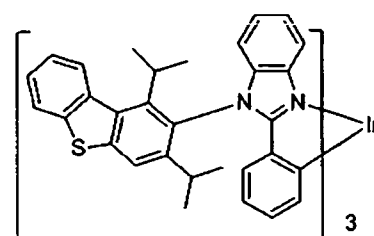
化合物 47



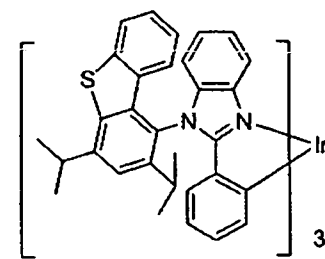
化合物 48



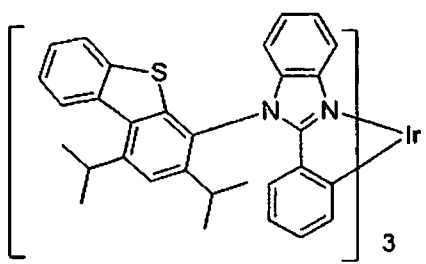
化合物 49



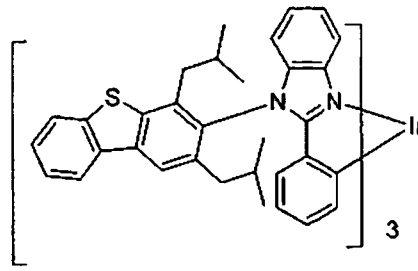
化合物 50



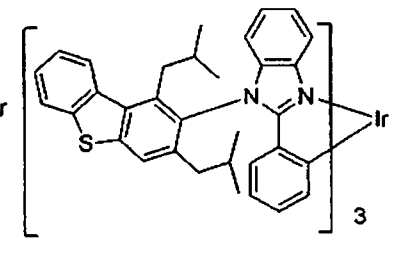
化合物 51



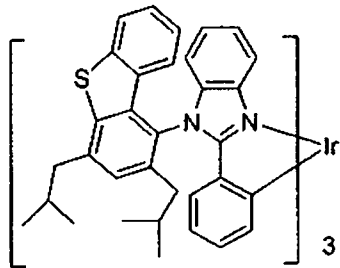
化合物 52



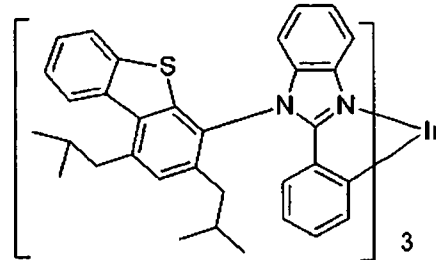
化合物 53



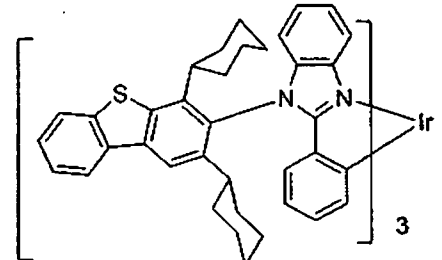
化合物 54



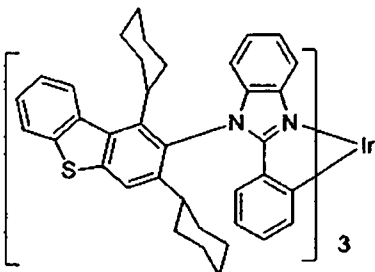
化合物 55



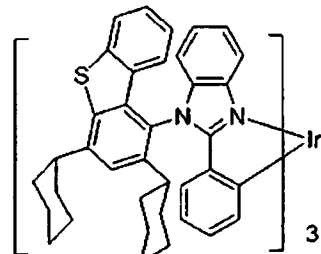
化合物 56



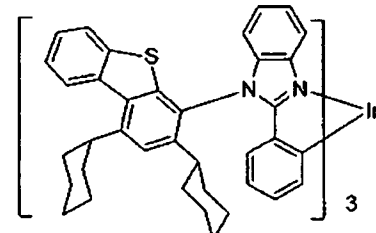
化合物 57



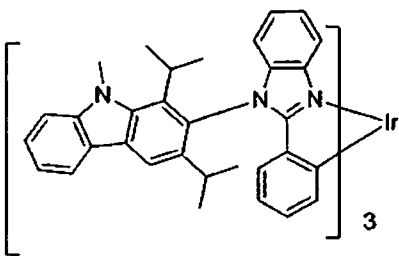
化合物 58



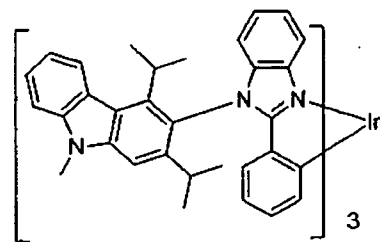
化合物 59



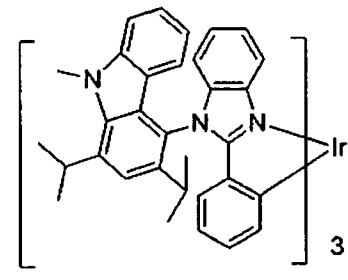
化合物 60



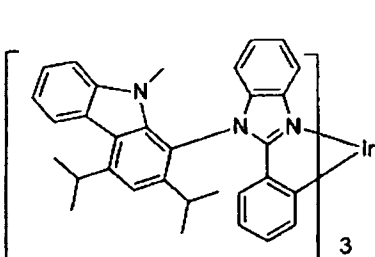
化合物 61



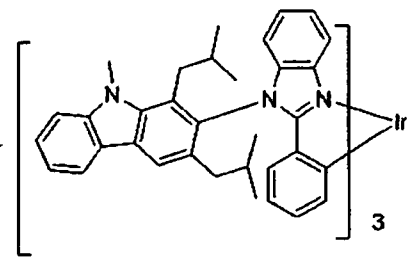
化合物 62



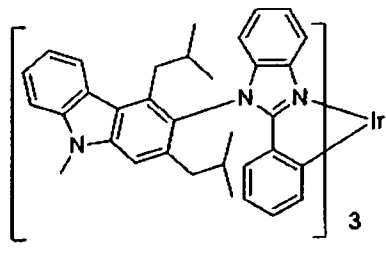
化合物 63



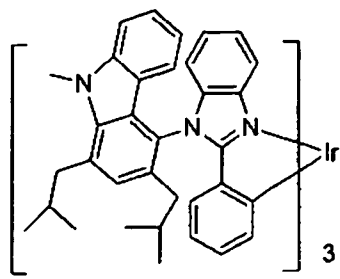
化合物 64



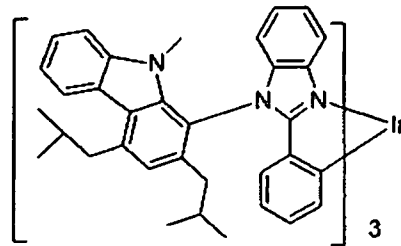
化合物 65



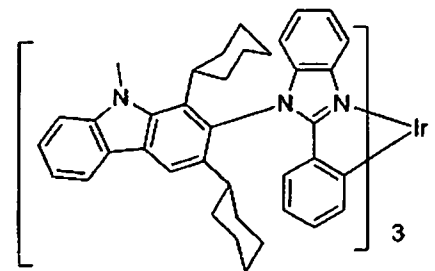
化合物 66



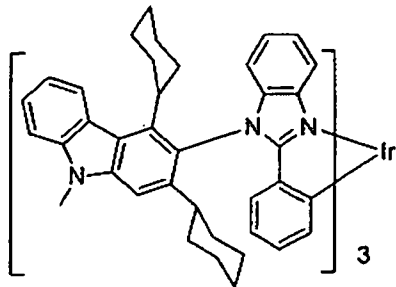
化合物 67



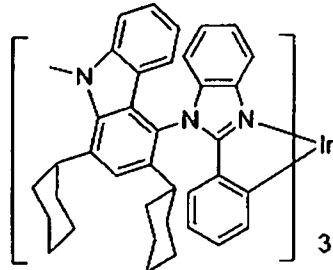
化合物 68



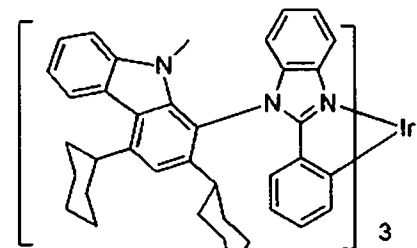
化合物 69



化合物 70

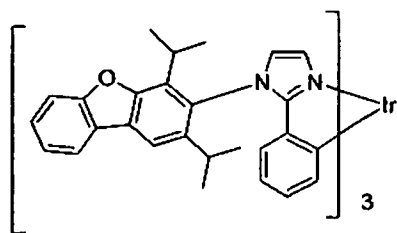


化合物 71

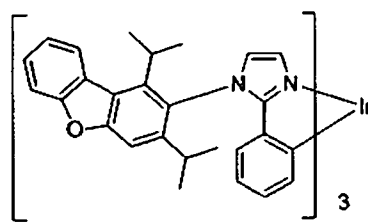


化合物 72

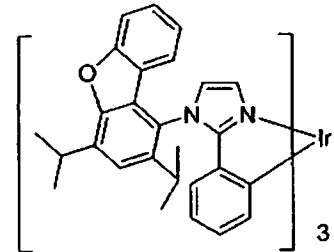
在一個態樣中，化合物包含配體L，其中X係O。包含二苯并咪喃配體之化合物包括選自由以下組成之群之化合物：



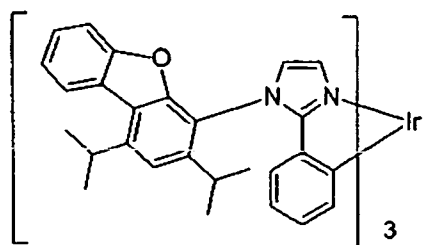
化合物 1



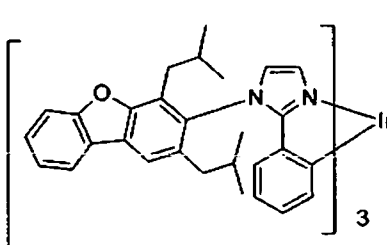
化合物 2



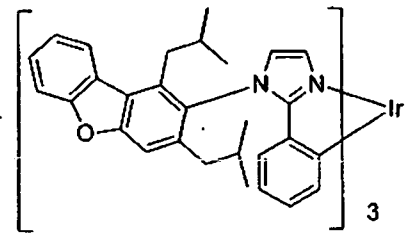
化合物 3



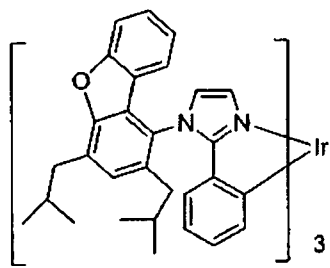
化合物 4



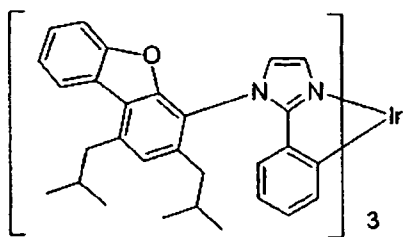
化合物 5



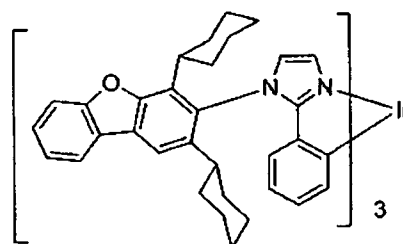
化合物 6



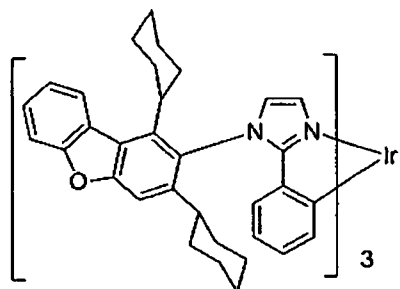
化合物 7



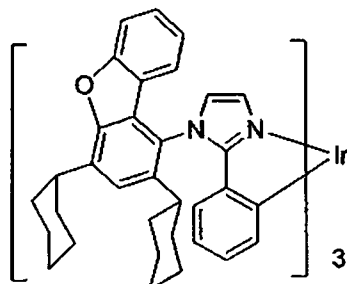
化合物 8



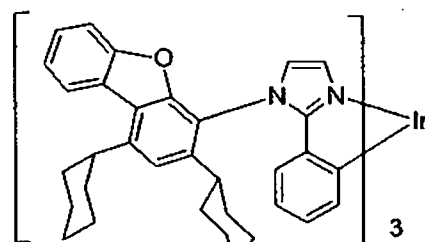
化合物 9



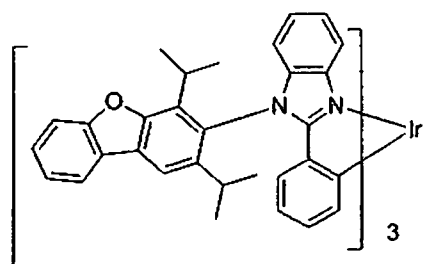
化合物 10



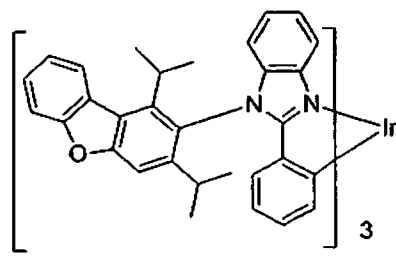
化合物 11



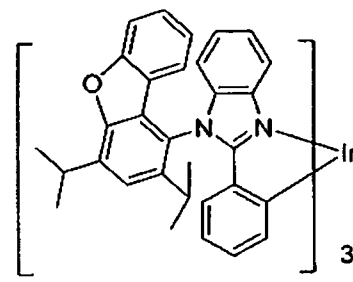
化合物 12



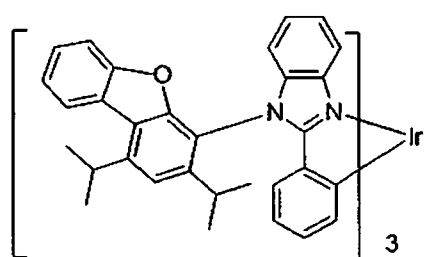
化合物 37



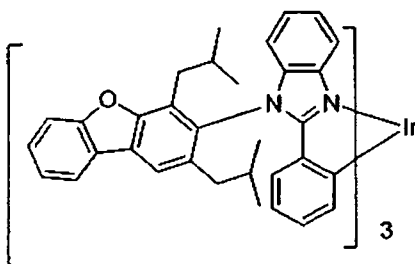
化合物 38



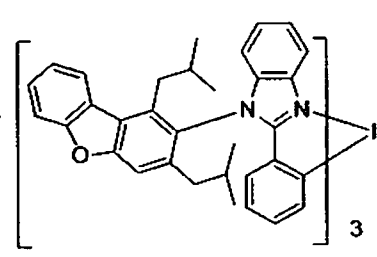
化合物 39



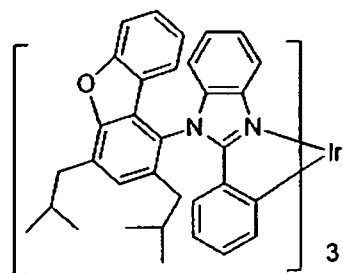
化合物 40



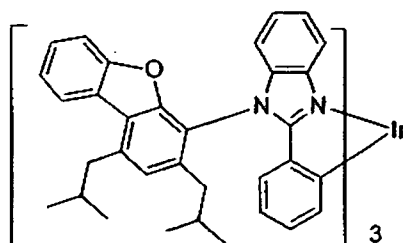
化合物 41



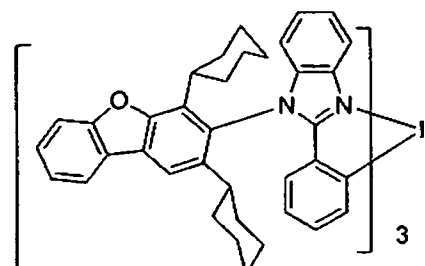
化合物 42



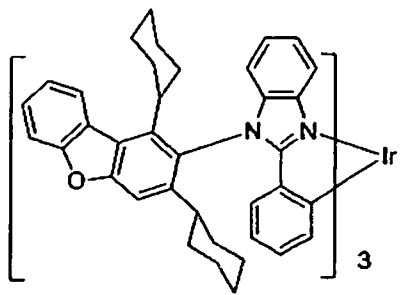
化合物 43



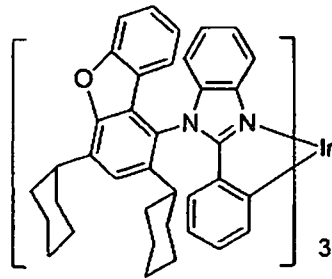
化合物 44



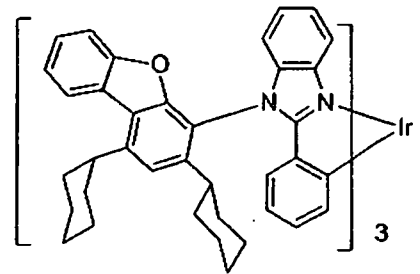
化合物 45



化合物 46

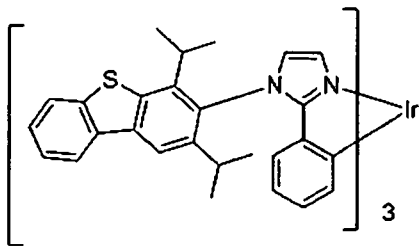


化合物 47

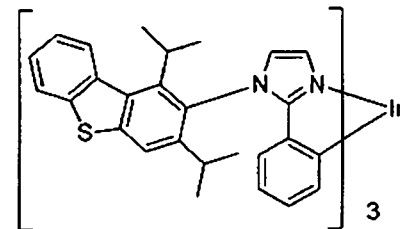


化合物 48。

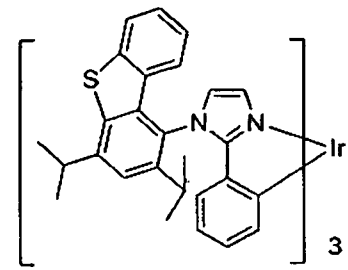
在一個態樣中，化合物包含配體L，其中X係S。包含二苯并噻吩配體之化合物包括選自由以下組成之群之化合物：



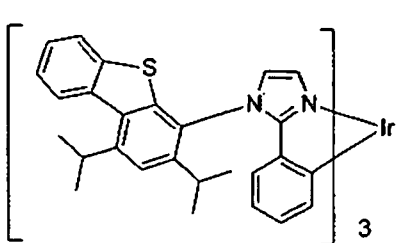
化合物 13



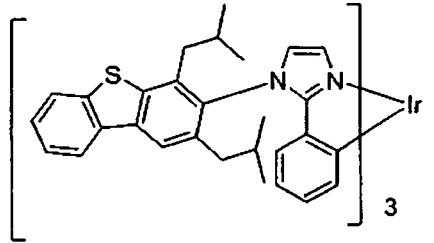
化合物 14



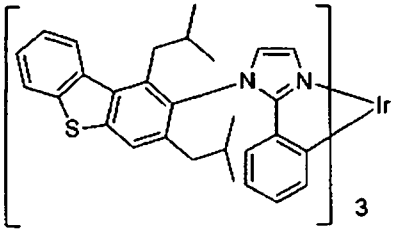
化合物 15



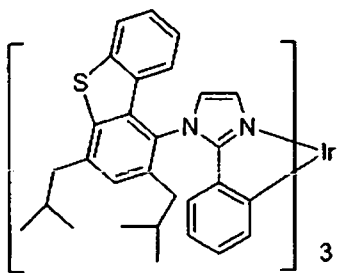
化合物 16



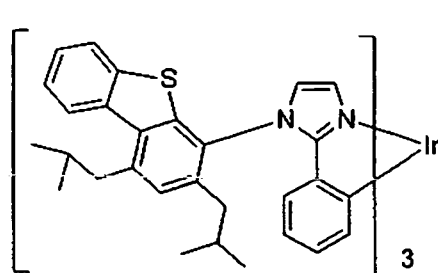
化合物 17



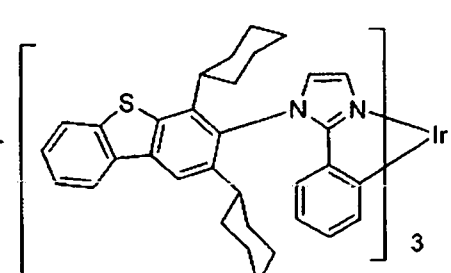
化合物 18



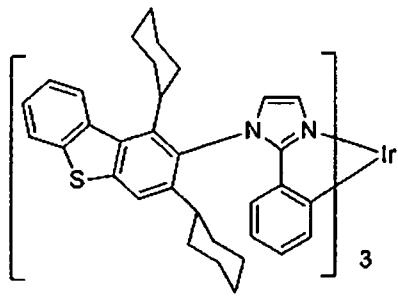
化合物 19



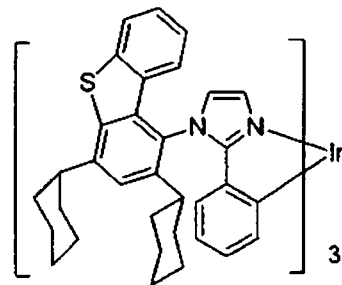
化合物 20



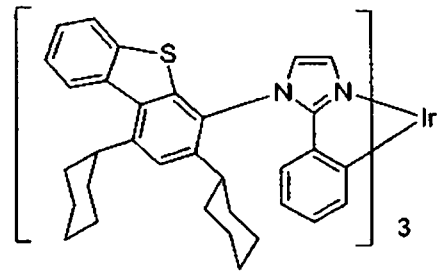
化合物 21



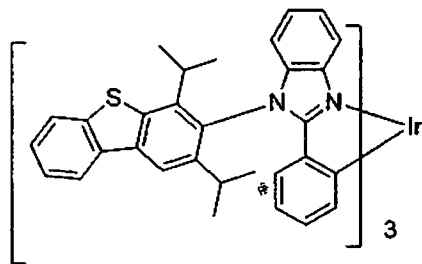
化合物 22



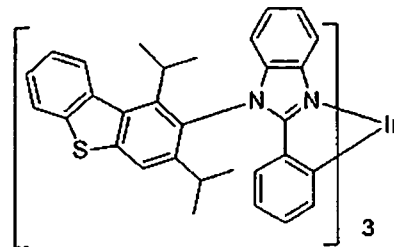
化合物 23



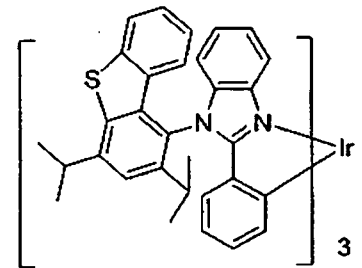
化合物 24



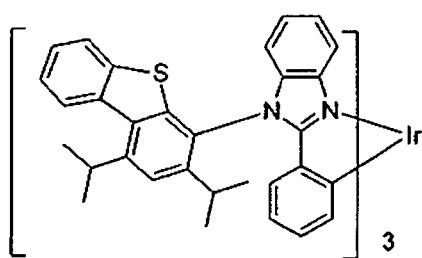
化合物 49



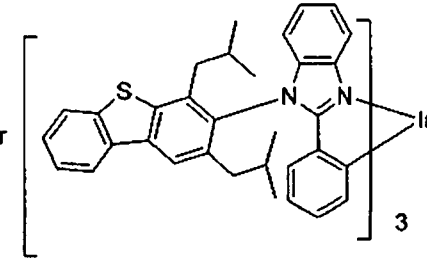
化合物 50



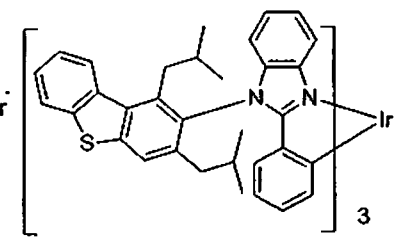
化合物 51



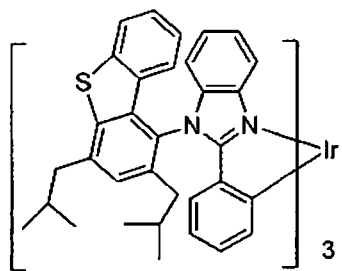
化合物 52



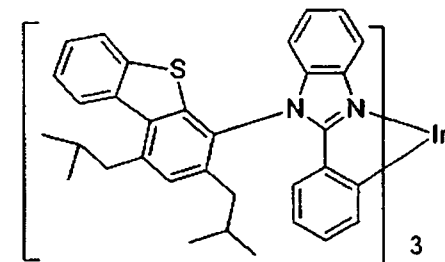
化合物 53



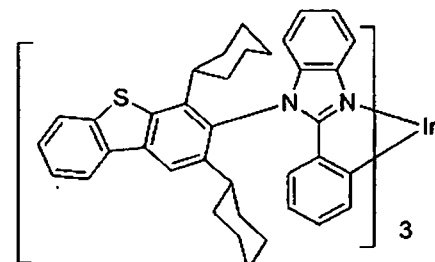
化合物 54



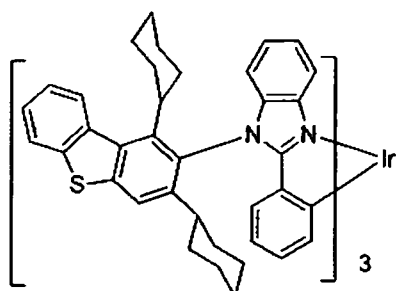
化合物 55



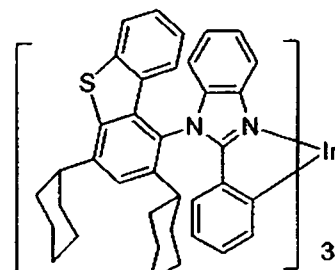
化合物 56



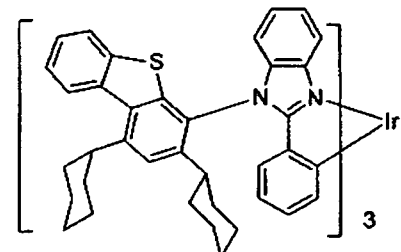
化合物 57



化合物 58

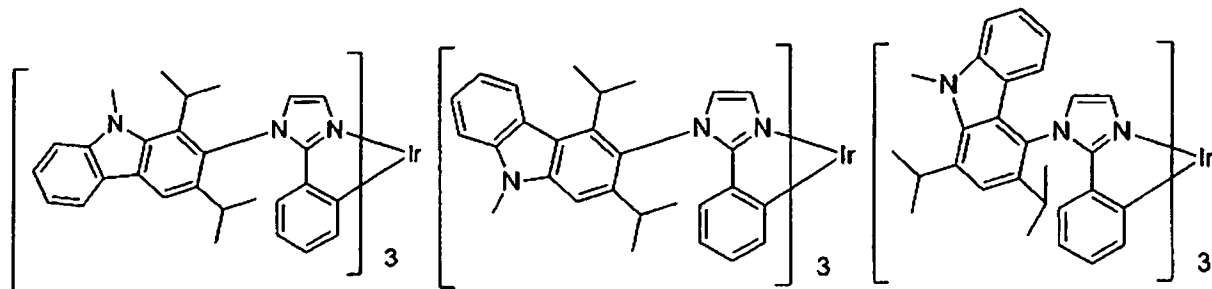


化合物 59



化合物 60

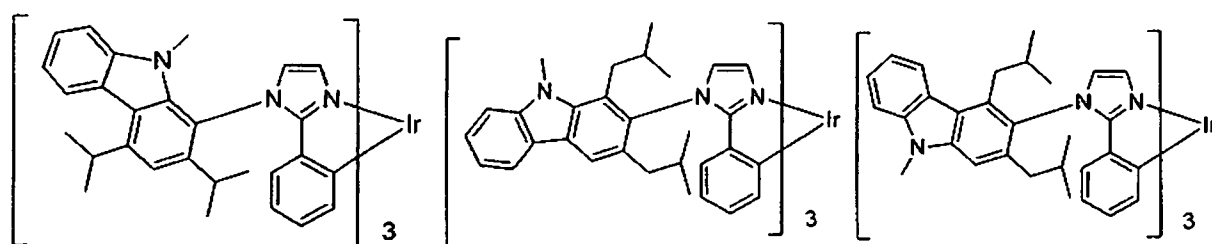
在一個態樣中，化合物包含配體L，其中X係NR。包含
 咪唑配體之化合物包括選自由以下組成之群之化合物：



化合物 25

化合物 26

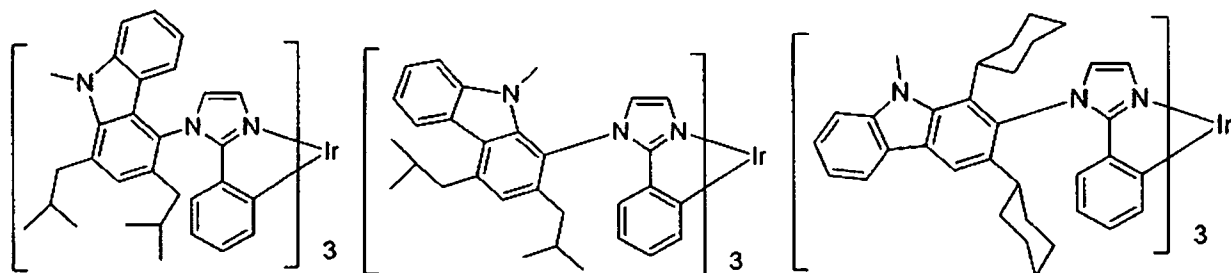
化合物 27



化合物 28

化合物 29

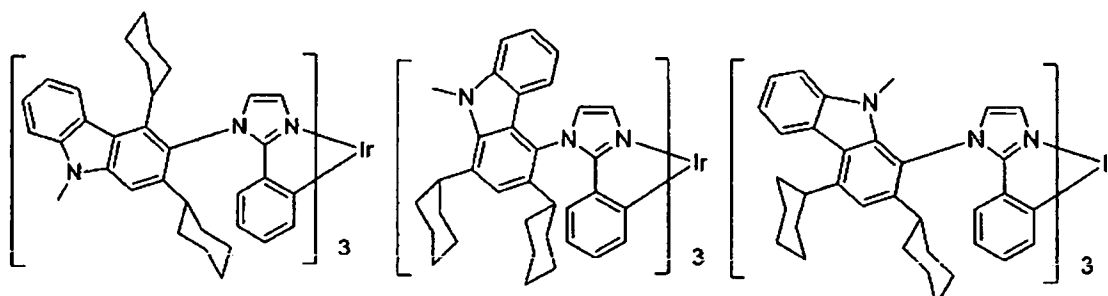
化合物 30



化合物 31

化合物 32

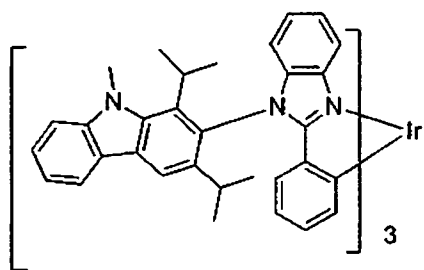
化合物 33



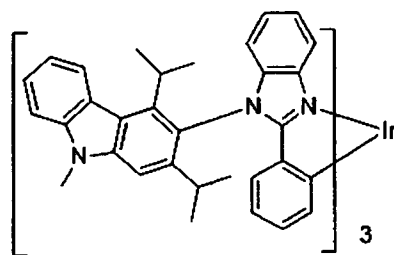
化合物 34

化合物 35

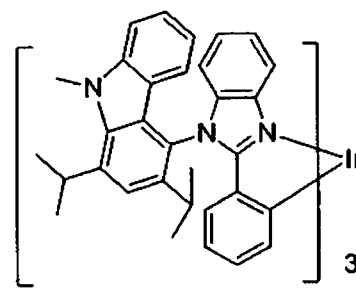
化合物 36



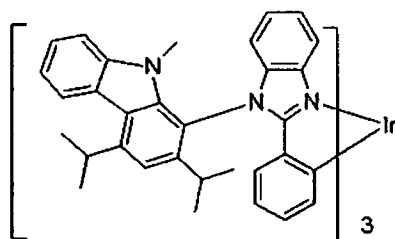
化合物 61



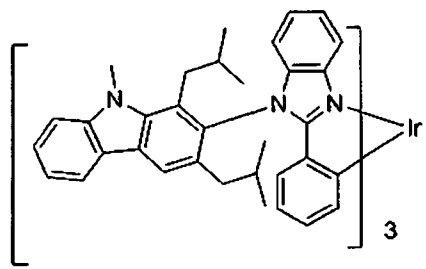
化合物 62



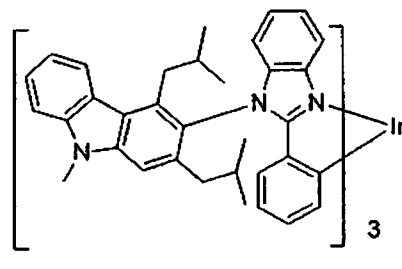
化合物 63



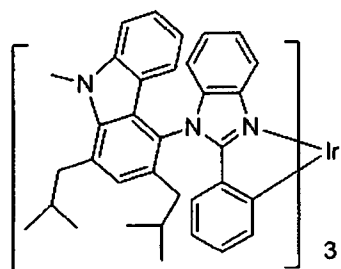
化合物 64



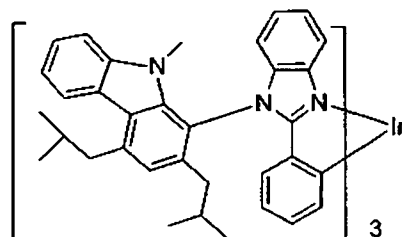
化合物 65



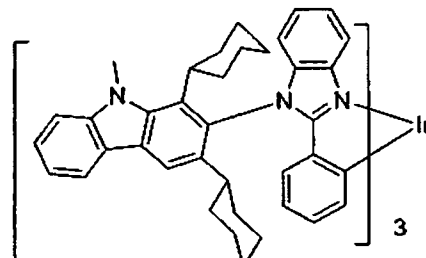
化合物 66



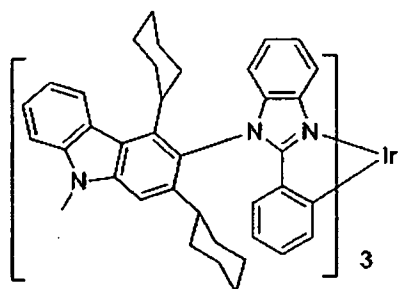
化合物 67



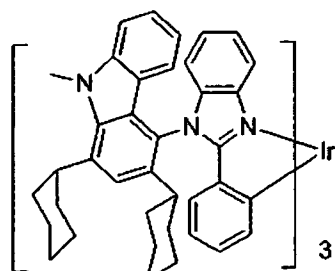
化合物 68



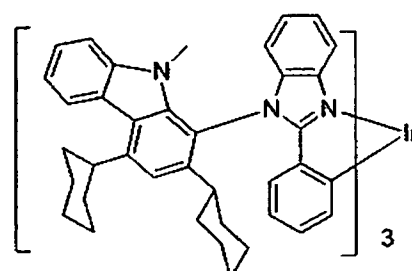
化合物 69



化合物 70



化合物 71



化合物 72

提供包含有機發光裝置之第一裝置。該有機發光裝置進一步包含陽極、陰極及佈置於該陽極與該陰極間之有機層，該有機層包含含有式I之配體L之化合物，如上文所述。所述較佳用於包括式I之配體L之化合物之取代基選擇

亦較佳用於包含包括式I之配體L之化合物之裝置中。該等選擇包括彼等針對B、M、R_C、R_A及X所述者。

A及B各自獨立地為5員或6員碳環或雜環。較佳地，B係苯基。R_A、R_B、R_C及R_D代表單、二、三或四取代。R_A、R_B、R_C及R_D獨立地選自氫、鹵素、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳基及雜芳基。R_A、R_B、R_C及R_D視情況經稠合。X選自由CRR'、NR、O及S組成之群。R及R'獨立地選自由烷基及芳基組成之群。配體L係配位至原子序數大於40之金屬M。較佳地，M係Ir。

在一個態樣中，第一裝置係消費產品。在一個具體態樣中，第一裝置係有機發光裝置。在另一具體態樣中，第一裝置係顯示器。

在一個態樣中，該化合物係均配物。如上文所述，均配化合物可具有許多期望性質。均配化合物之實例包括但不限於化合物1至72及化合物83至114。在另一態樣中，化合物係異配物且化合物中之所有配體L均具有式I。在又一態樣中，化合物係異配物且化合物中之至少一個配體L具有式I。該等化合物之實例包括但不限於化合物73至82。如上文所述，可有利地使用異配化合物。

在一個態樣中，R_C係兩個烷基取代基。在另一態樣中，R_C係兩個具有3個或更多個碳原子之取代基。

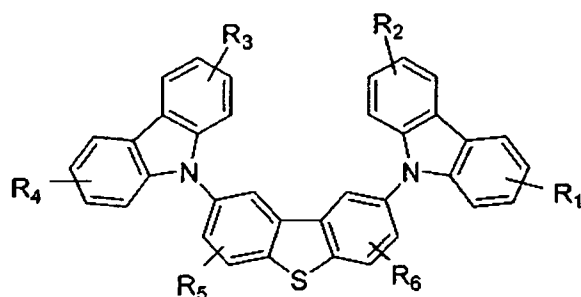
含有R_C之環可在連接至A之碳原子之鄰位處具有其他取代。在一個態樣中，含有R_C之環在連接至A之碳原子之一個鄰位處經取代。在另一態樣中，含有R_C之環具有兩個位

於連接至A之碳原子之鄰位處的取代基。該等化合物可包括(例如)化合物1、2及4至6。在另一態樣中，含有 R_C 之環具有一個位於附接至A之碳原子之鄰位處的取代基且附接至A之碳原子之另一鄰位係由經取代二苯并部分佔據。該等化合物可包括(例如)化合物3、7及11。

在一個態樣中， R_C 係氫。

提供具體裝置，其中該等裝置包括選自由化合物1至化合物114組成之群之化合物。

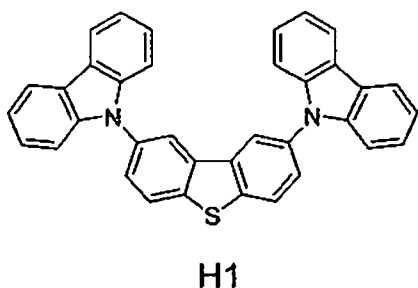
另外，提供裝置，其中有機層係發射層且包含式I之配體L之化合物係發射摻雜物。此外，該有機層進一步包含主體材料。較佳地，該主體材料具有下式：



式 II。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5

及 R_6 獨立地選自由氫、烷基及芳基組成之群。

最佳地，該主體材料係：

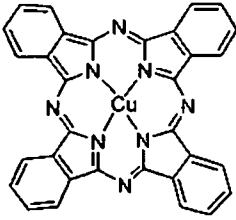
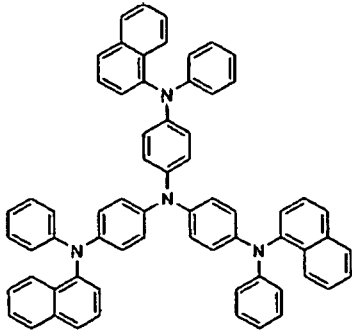


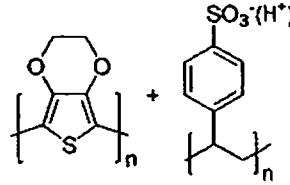
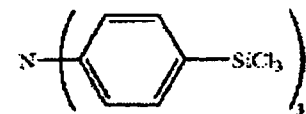
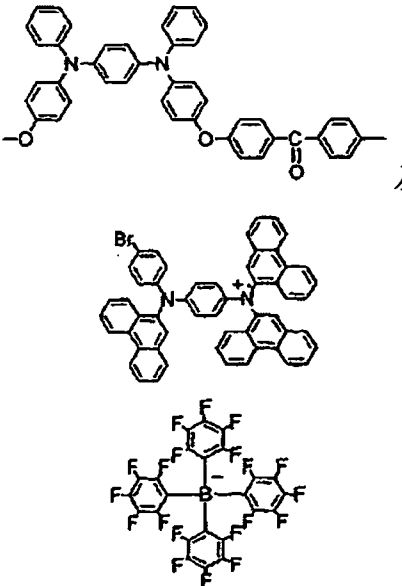
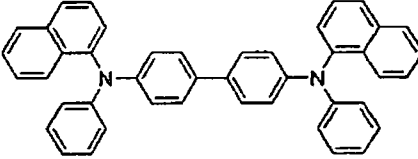
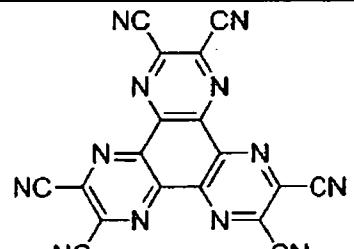
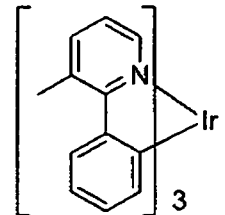
本文所述用於有機發光裝置中特定層之材料可與眾多種

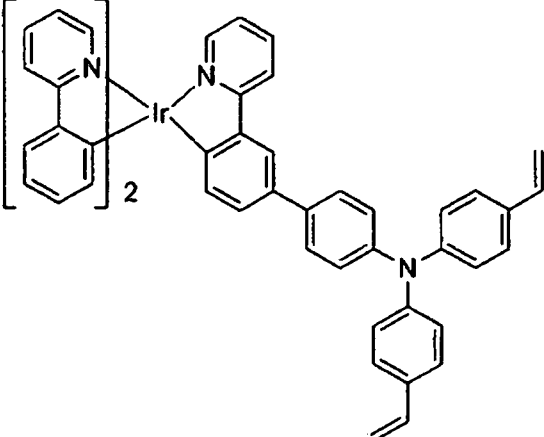
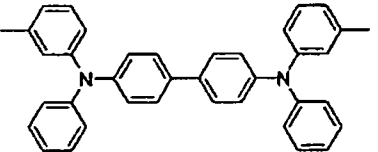
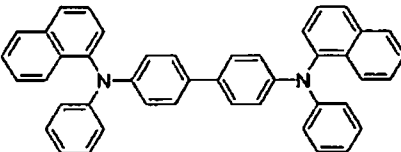
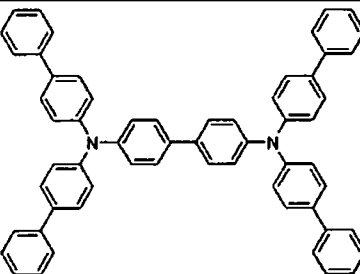
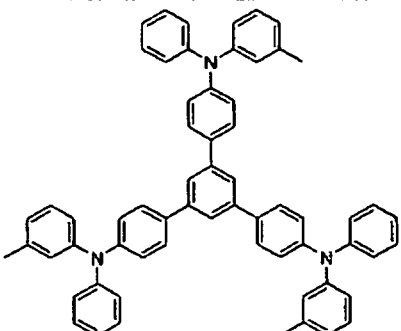
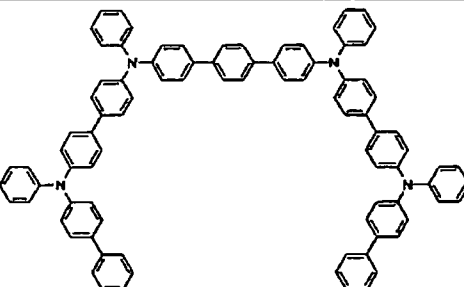
存在於該裝置中之其他材料組合使用。舉例而言，本文所揭示發射摻雜物可與眾多種主體材料、傳送層、阻擋層、注入層、電極及可存在之其他層結合使用。下文所述或所提及材料係可與本文所揭示化合物組合使用之材料之非限制性實例，且熟習此項技術者可容易地查閱文獻來識別可組合使用之其他材料。

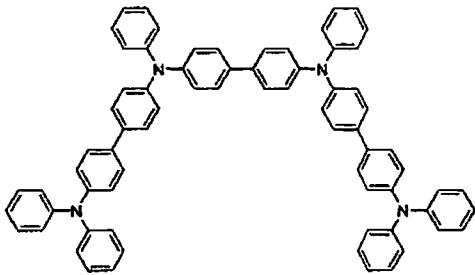
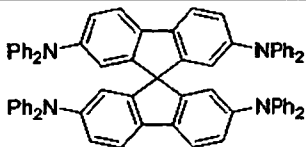
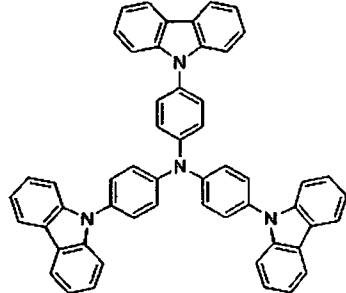
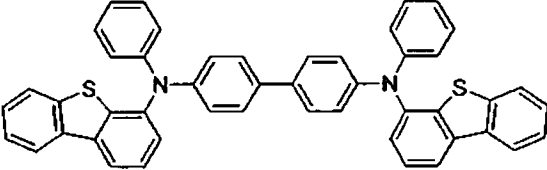
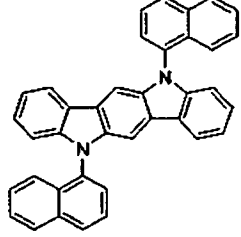
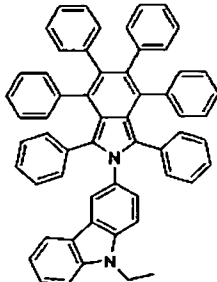
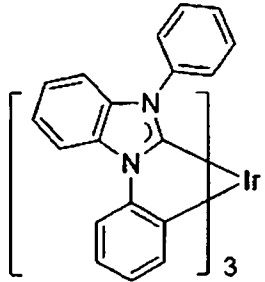
除了本文所揭示材料以外及/或與該等材料組合，在OLED中亦可使用許多電洞注入材料、電洞傳送材料、主體材料、摻雜物材料、激發子/電洞阻擋層材料、電子傳送及電子注入材料。可與本文所揭示材料組合用於OLED中之材料之非限制性實例列示於下表1中。表1列示非限制性材料類、用於各類材料之化合物之非限制性實例及揭示該等材料之參考文獻。

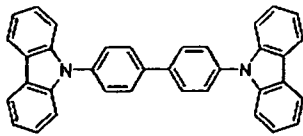
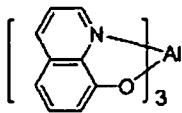
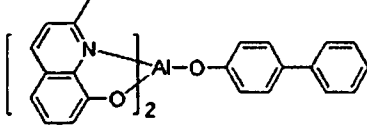
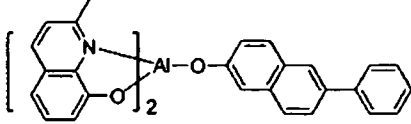
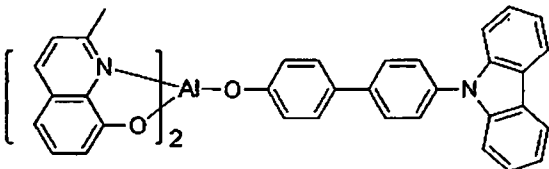
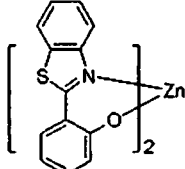
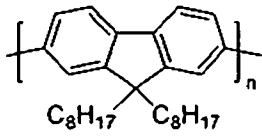
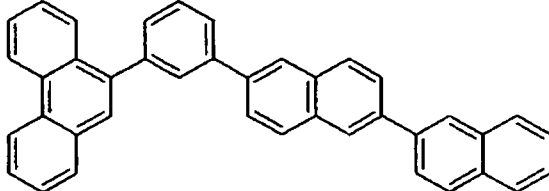
表 1

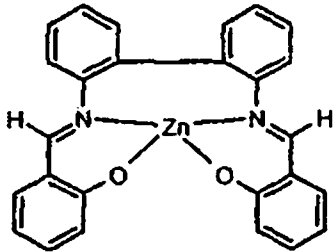
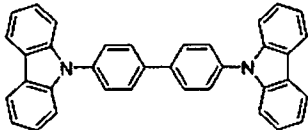
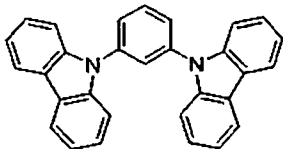
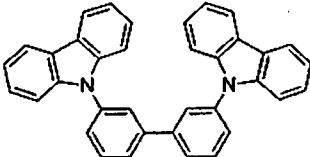
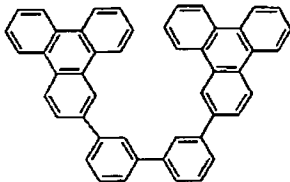
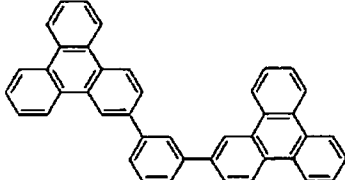
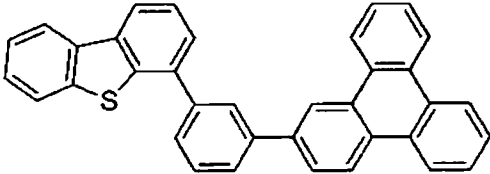
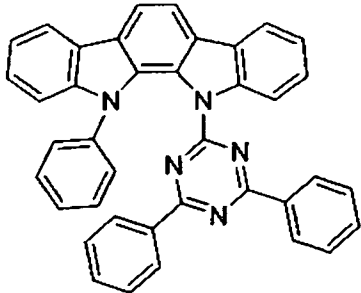
材料	材料實例	出版物
電洞注入材料		
酞菁及卟啉化合物		Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)
星射型(starburst)三芳基胺		J. Lumin. 72-74, 985 (1997)

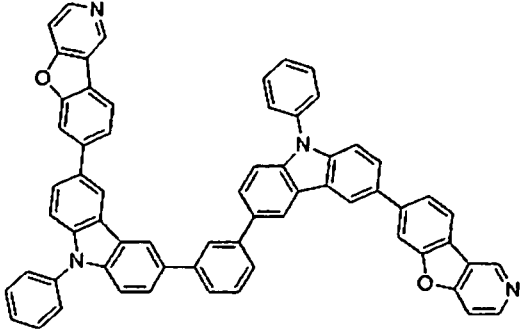
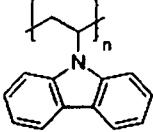
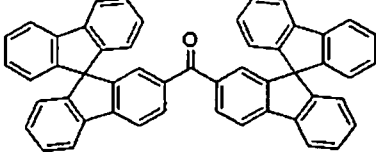
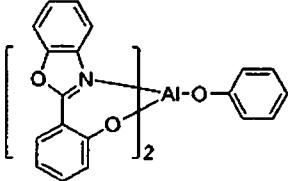
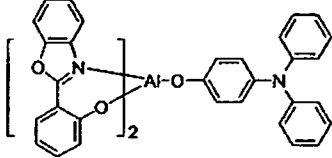
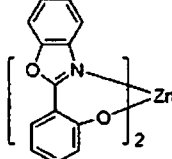
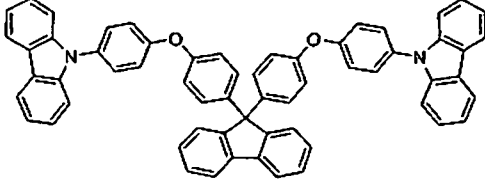
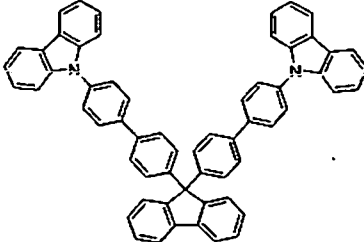
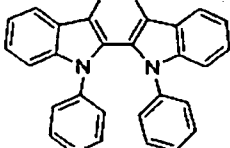
CF _x 氟代烴聚合物	$\left[\text{CH}_x\text{F}_y \right]_n$	Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)
導電聚合物(例如, PEDOT:PSS, 聚苯胺、聚噻吩)	 <p>The image shows the chemical structures of PEDOT (poly(2,2,5-thienopyridine)) and PSS (poly(styrene sulfonate)). PEDOT is represented as a chain of five-membered rings containing sulfur and nitrogen atoms. PSS is represented as a chain of benzene rings with a sulfonate group (-SO₃⁻(H⁺)) attached to each ring.</p>	Synth. Met. 87, 171 (1997) WO 2007002683
膦酸及矽烷 SAM	 <p>The image shows the chemical structure of a self-assembled monolayer (SAM) molecule, specifically a trialkylsilyl ether. It consists of a central silicon atom bonded to three methyl groups (-CH₃) and one oxygen atom, which is further bonded to a benzene ring. The benzene ring is attached to a nitrogen atom, which is part of a larger polymer chain.</p>	US 20030162053
三芳基胺或聚噻吩聚合物 連同導電性摻雜物	 <p>The image shows three chemical structures. The top structure is a triarylamine derivative with a central nitrogen atom bonded to three phenyl rings, one of which has a methoxy group (-OCH₃). The middle structure is a polyaniline derivative with a central nitrogen atom bonded to three phenyl rings, one of which has a bromine atom (-Br). The bottom structure is a polyaniline derivative with a central nitrogen atom bonded to three phenyl rings, one of which has a fluorine atom (-F).</p>	EA 01725079A1
與諸如鉬氧化物及鎢 氧化物等金屬氧化物 錯合之芳基胺	 <p>The image shows the chemical structure of a triarylamine derivative with a central nitrogen atom bonded to three phenyl rings, one of which is a naphthalene ring. The structure is shown with a plus sign and MoO_x, indicating its coordination with molybdenum oxide.</p>	SID Symposium Digest, 37, 923 (2006) WO 2009018009
p型半導體有機錯合 物	 <p>The image shows the chemical structure of a p-type semiconductor organic complex, specifically a cyanide-substituted porphyrin derivative. It consists of a central nitrogen atom bonded to four nitrogen atoms, which are further bonded to four carbon atoms, each of which is bonded to a cyanide group (-CN).</p>	US 20020158242
金屬有機金屬錯合物	 <p>The image shows the chemical structure of a metal-organic-metal complex, specifically a complex of iridium (Ir) with a porphyrin derivative. The structure is shown with a plus sign and a subscript 3, indicating its coordination with three iridium atoms.</p>	US 20060240279

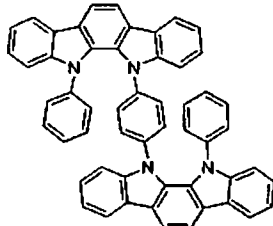
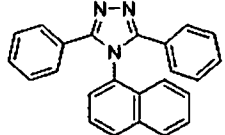
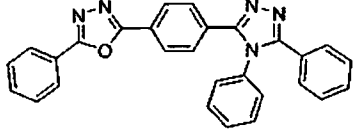
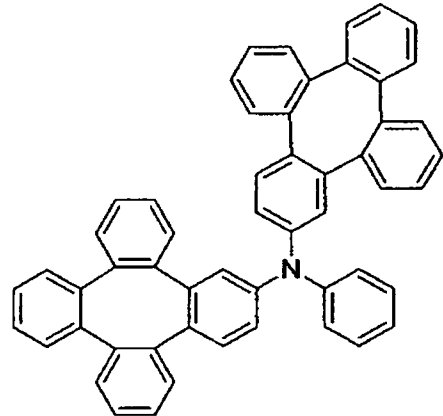
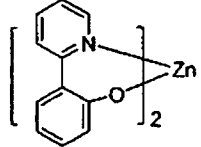
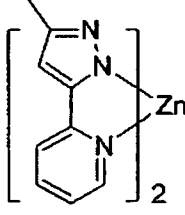
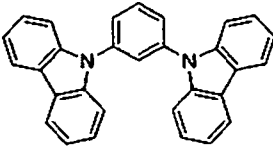
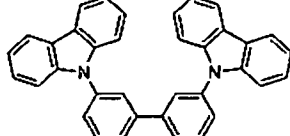
可交聯化合物		US 20080220265
電洞傳送材料		
三芳基胺 (例如, TPD、 α -NPD)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)
		US 5061569
		EP 650955
		J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)

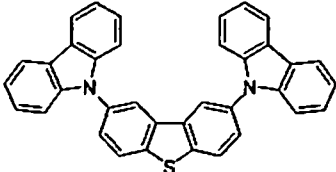
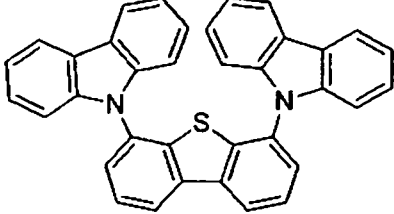
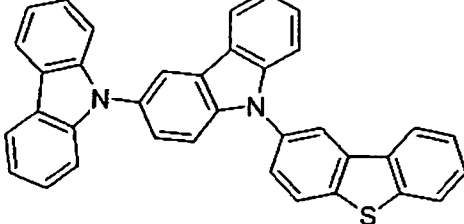
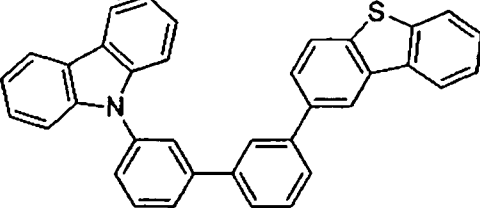
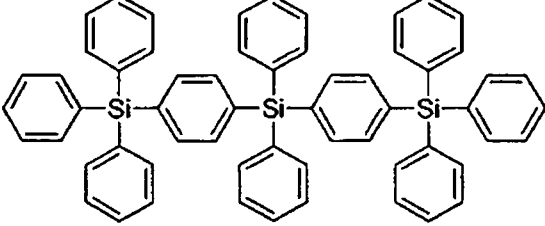
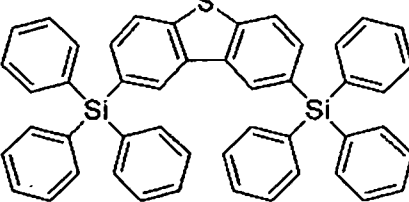
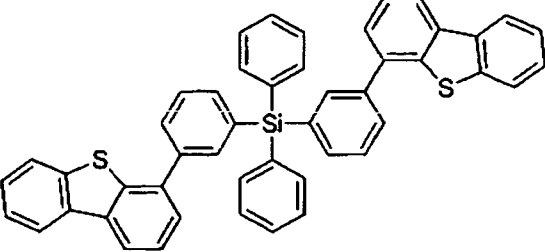
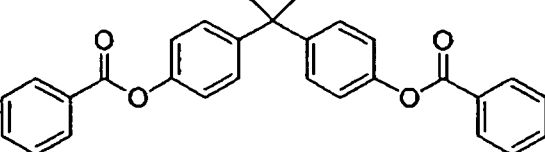
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
螺芴 (spirofluorene) 核 上之三芳基胺		Synth. Met. 91, 209 (1997)
芳基胺吡唑化合物		Adv. Mater. 6, 677 (1994), US 20080124572
具有(二)苯并噻吩 (二)苯并咪喃之三芳 基胺		US 20070278938, US 20080106190
吡啶并咪唑		Synth. Met. 111, 421 (2000)
異吡啶化合物		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)
金屬碳烯錯合物		US 20080018221
磷光OLED主體材料		

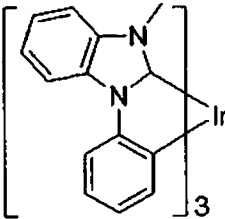
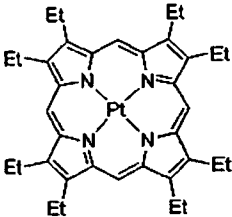
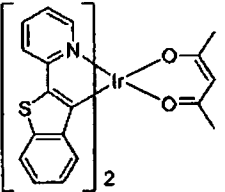
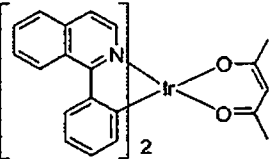
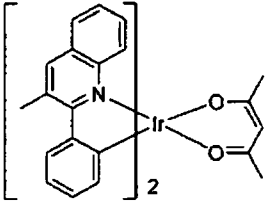
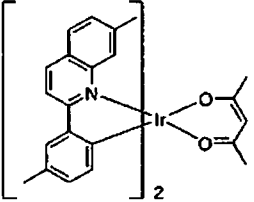
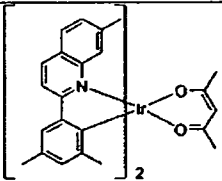
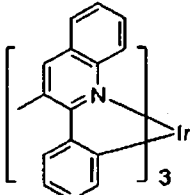
紅色主體材料		
芳基咪唑		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
金屬8-羥基喹啉酸鹽 (例如, Alq ₃ 、BAlq)		Nature 395, 151 (1998)
		US 20060202194
		WO 2005014551
		WO 2006072002
金屬苯氧基苯并噻唑 化合物		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
共軛寡聚物及聚合物 (例如, 聚芴)		Org. Electron. 1, 15 (2000)
芳香族稠合環		WO 2009066779、 WO 2009066778、 WO 2009063833、US 20090045731、 US 20090045730、 WO 2009008311、US 20090008605、 US 20090009065

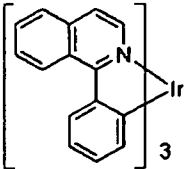
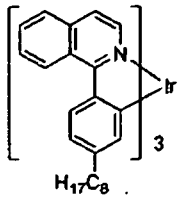
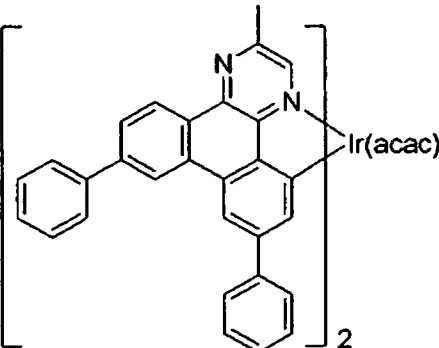
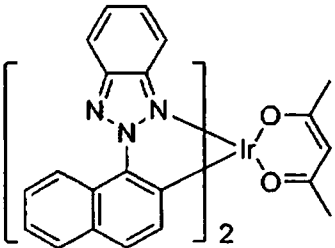
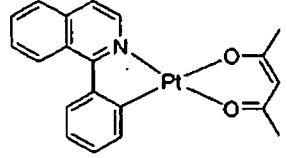
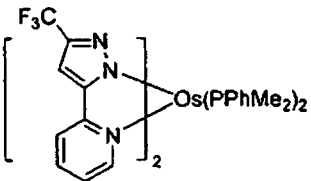
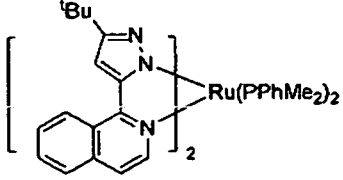
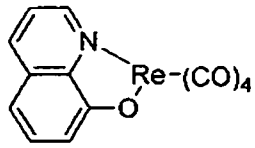
鋅錯合物		WO 2009062578
綠色主體材料		
芳基咪唑		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US 20030175553
		WO 2001039234
芳基聯伸三苯化合物		US 20060280965
		US 20060280965
		WO 2009021126
供體受體型分子		WO 2008056746

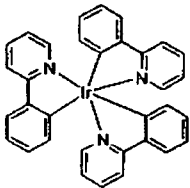
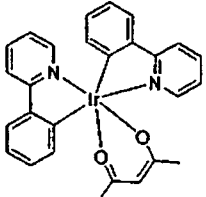
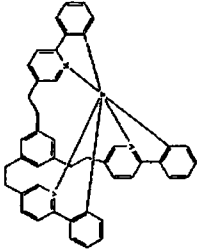
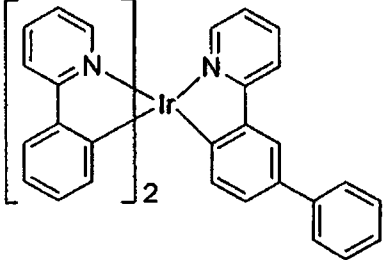
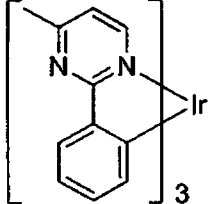
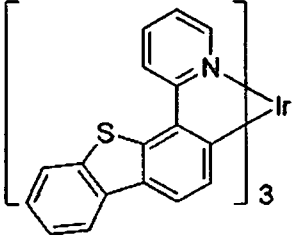
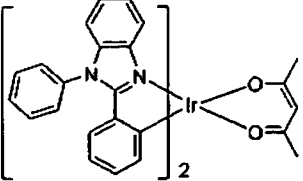
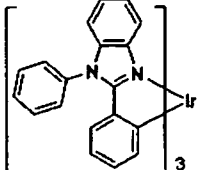
<p>氮雜-咪唑/DBT/DBF</p>		<p>JP 2008074939</p>
<p>聚合物(例如, PVK)</p>		<p>Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)</p>
<p>螺芴化合物</p>		<p>WO 2004093207</p>
<p>金屬苯氧基苯并噁唑 化合物</p>		<p>WO 2005089025</p>
		<p>WO 2006132173</p>
		<p>JP 200511610</p>
<p>螺芴-咪唑化合物</p>		<p>JP 2007254297</p>
		<p>JP 2007254297</p>
<p>吡啶并咪唑</p>		<p>WO 2007063796</p>

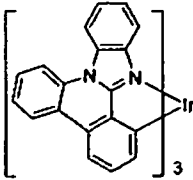
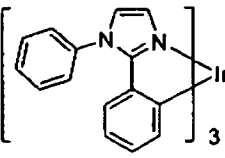
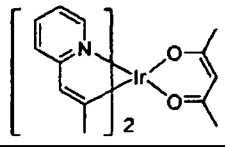
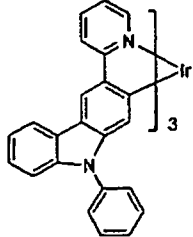
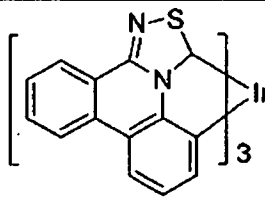
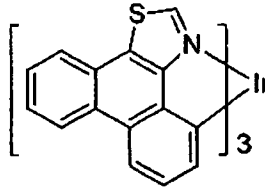
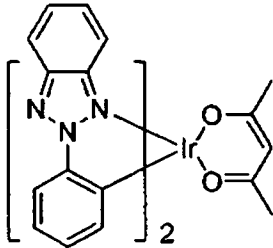
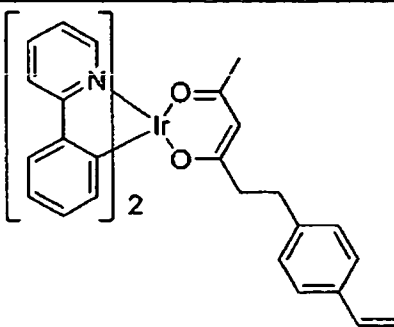
		WO 2007063754
5員環缺電子雜環(例如, 三唑、噁二唑)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)
		WO 2004107822
四伸苯錯合物		US 20050112407
金屬苯氧基吡啶化合物		WO 2005030900
金屬配位錯合物(例如, Zn、Al與N^N化合物)		US 20040137268、 US 20040137267
藍色主體材料		
芳基卟啉		Appl. Phys. Lett, 82, 2422 (2003)
		US 20070190359

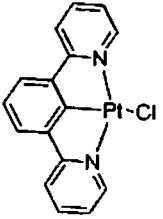
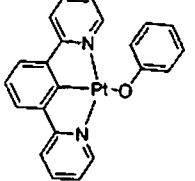
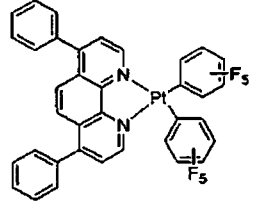
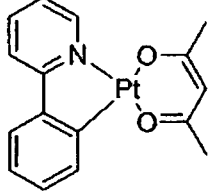
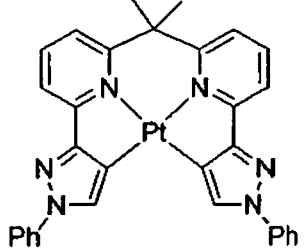
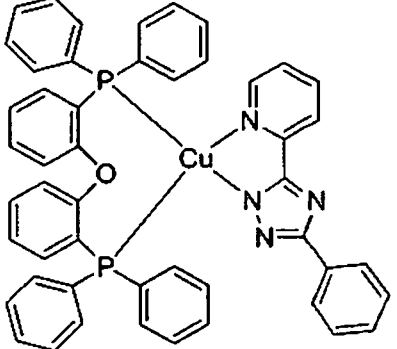
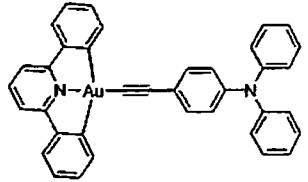
二苯并噻吩/二苯并咪喃-咔唑化合物		WO 2006114966、US 20090167162
		US 20090167162
		WO 2009086028
		US 20090030202、 US 20090017330
矽芳基化合物		US 20050238919
		WO 2009003898
矽/鍺芳基化合物		EP 2034538A
芳基苯甲醯基酯		WO 2006100298

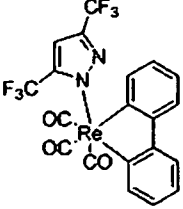
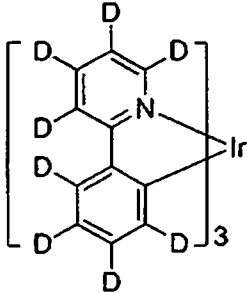
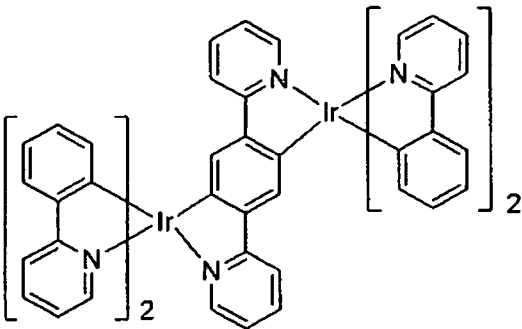
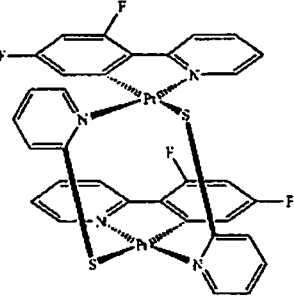
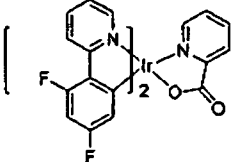
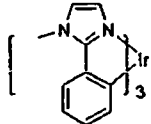
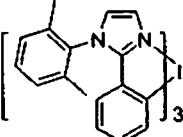
高三重態金屬有機金屬錯合物		US 7154114
磷光摻雜物		
紅色摻雜物		
重金屬卟啉(例如, PtOEP)		Nature 395, 151 (1998)
銥(III)有機金屬錯合物		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US 2006835469
		US 2006835469
		US 20060202194
		US 20060202194
		US 20070087321

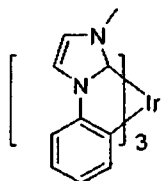
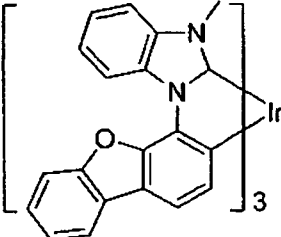
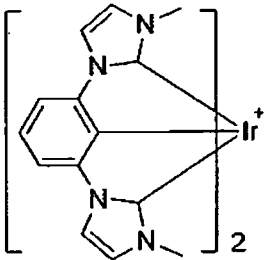
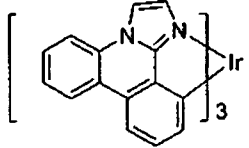
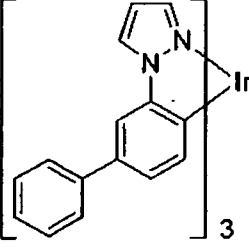
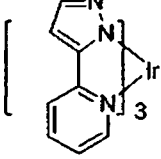
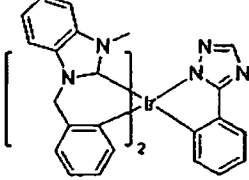
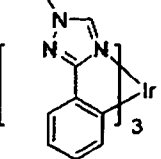
		US 20070087321
		Adv. Mater. 19, 739, (2007)
		WO 2009100991
		WO 2008101842
鉑(II)有機金屬錯合物		WO 2003040257
銱(III)錯合物		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)
鈦(II)錯合物		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
銩(I)、(II)及(III)錯合物		US 20050244673
綠色摻雜物		

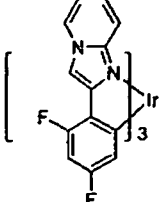
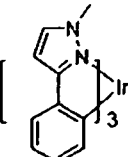
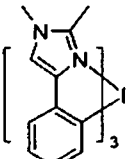
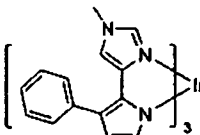
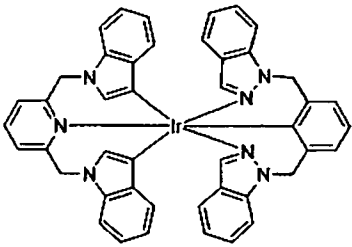
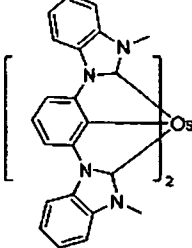

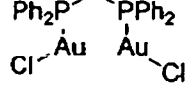
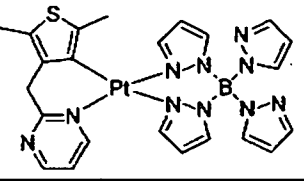
銱(III)有機金屬錯合 物	 <p>及其衍生物</p>	Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)
		US 20020034656
		US 7332232
		US 20090108737
		US 20090039776
		US 6921915
		US 6687266
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)

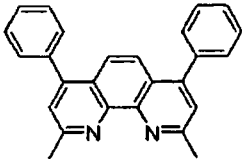
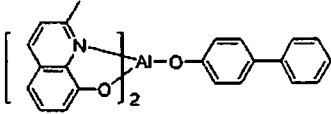
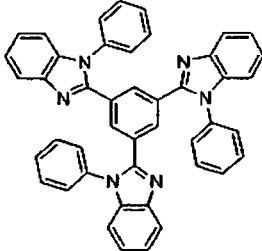
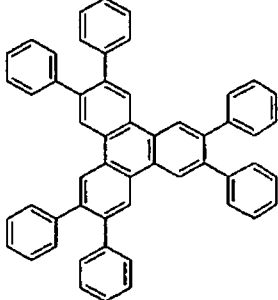
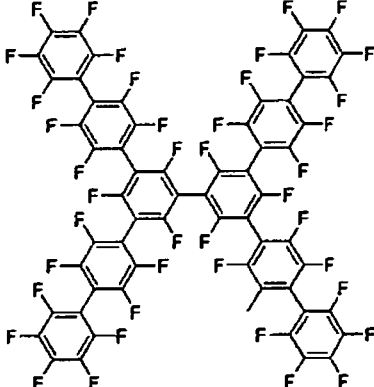
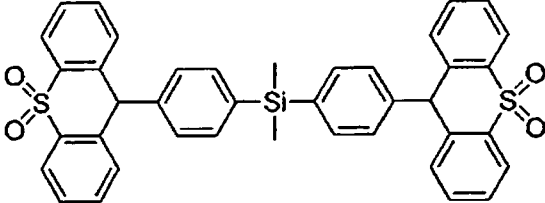
		US 20070190359
		US 20060008670 JP 2007123392
		Adv. Mater. 16, 2003, (2004)
		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
		WO 2009050290
		US 20090165846
		US 20080015355
聚合物金屬有機金屬 化合物之單體		US 7250226、US 7396598

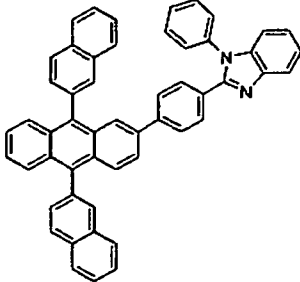
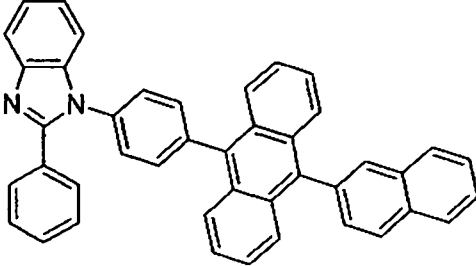
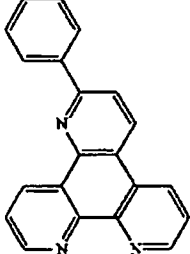
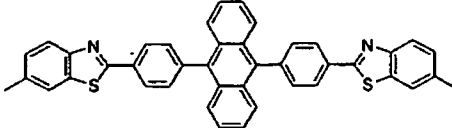
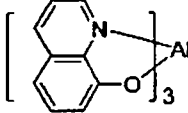
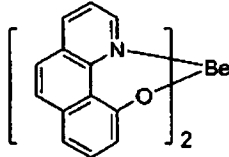
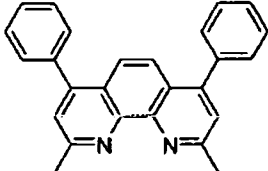
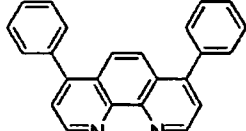
包括多齒狀化合物之 Pt(II)有機金屬錯合物		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
		WO 2002015645
		US 20060263635
Cu錯合物		WO 2009000673
金錯合物		Chem. Commun. 2906 (2005)

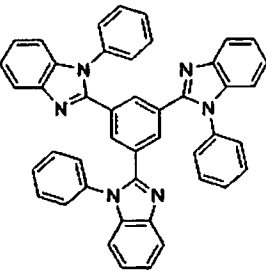
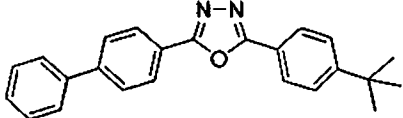
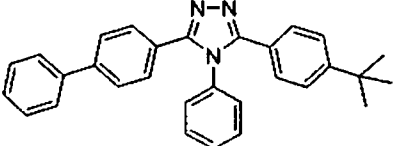
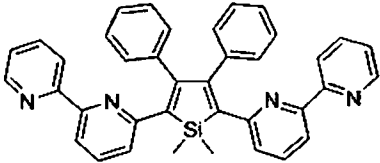
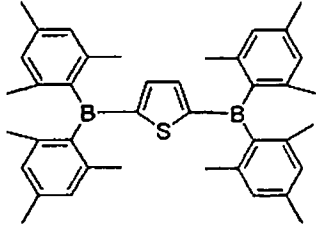
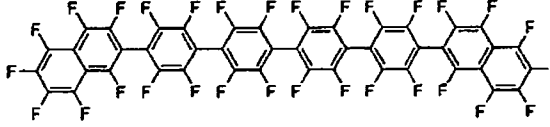
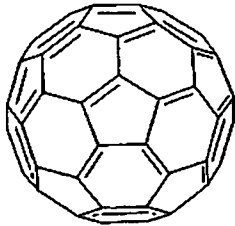
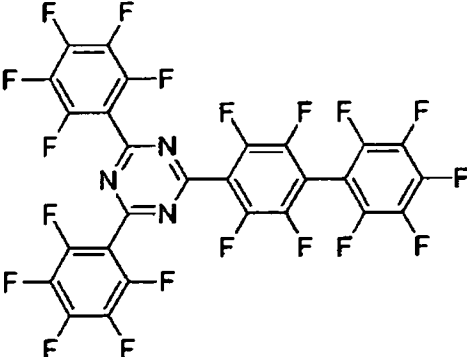
銻(III)錯合物		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
氘化有機金屬錯合物		US 20030138657
具有兩個或更多個金屬中心之有機金屬錯合物		US 20030152802
		US 7090928
藍色摻雜物		
銻(III)有機金屬錯合物		WO 2002002714
		WO 2006009024
		US 20060251923

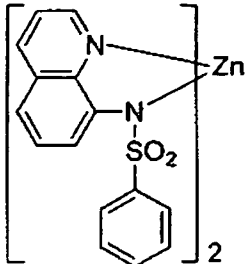
		US 7393599 、 WO 2006056418 、 US 20050260441 、 WO 2005019373
		US 7534505
		US 7445855
		US 20070190359 、 US 20080297033
		US 7338722
		US 20020134984
		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)
		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)

		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)
		WO 2005123873
		WO 2005123873
		WO 2007004380
		WO 2006082742
鐵(II)錯合物		US 7279704
		Organometallics 23, 3745 (2004)
金錯合物		Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)
鉑(II)錯合物		WO 2006098120、 WO 2006103874
激子/電洞阻擋層材料		

浴 銅 靈 (Bathocuproine) 化 合 物 (例 如 , BCP 、 BPhen)		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999)
金屬 8-羥基喹啉酸鹽 (例 如 , BAlq)		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. 81, 162 (2002)
聯 伸 三 苯 化 合 物		US 20050025993
氟 化 芳 香 族 化 合 物		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)
吩 噻 嗪 -S- 氧 化 物		WO 2008132085
電 子 傳 送 材 料		

蔥-苯并咪唑化合物		WO 2003060956
		US 20090179554
氮雜聯伸三苯衍生物		US 20090115316
蔥-苯并噻唑化合物		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
金屬基喹啉酸鹽(例如, Alq ₃ 、Zrq ₄)		Appl. Phys. Lett. 51, 913(1987) US 7230107
金屬羥基苯并喹啉酸鹽		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
浴銅靈化合物, 例如 BCP、BPhen等		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)

5員缺電子雜環(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)
噻咯(silole)化合物		Org. Electron. 4, 113 (2003)
芳基硼烷化合物		J. Am. Chem. Soc. 120, 9714, 1832 (1998)
氟化芳香族化合物		J. Am. Chem. Soc. 122, 1832 (2000)
富勒烯(例如, C60)		US 20090101870
三嗪錯合物		US 20040036077

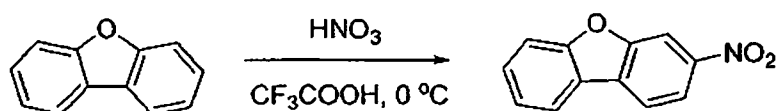
Zn (N^N)錯合物		US 6528187
-------------	---	------------

實驗：

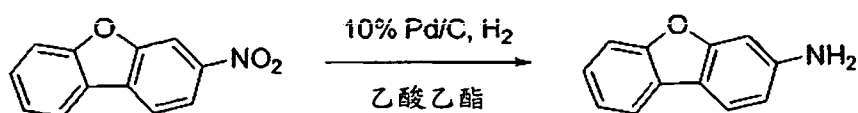
化合物實例

若干化合物係如下合成：

實例1. 化合物1之合成

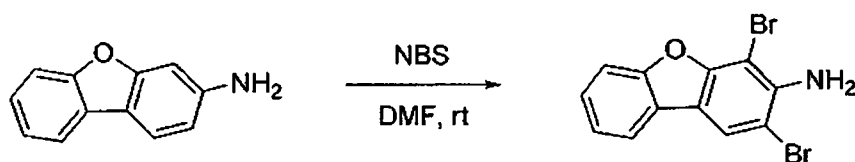


3-硝基二苯并呔喃之合成。將二苯并呔喃(30 g, 178 mmol)溶解於276 mL三氟乙酸(TFA)中並在冰水浴中冷卻。用3 mL水稀釋15 g(約17 mL)發煙硝酸且隨後將其溶解於25 mL TFA中並逐滴添加至二苯并呔喃溶液。幾乎立即發生反應並形成淺綠色稠沉澱物。在添加結束時，將燒瓶再攪拌20分鐘且隨後傾倒至冰上。然後將淺綠色沉澱物濾出，用2 M NaOH洗滌，乾燥並自沸騰乙醇重結晶，獲得30 g (76%)產物。

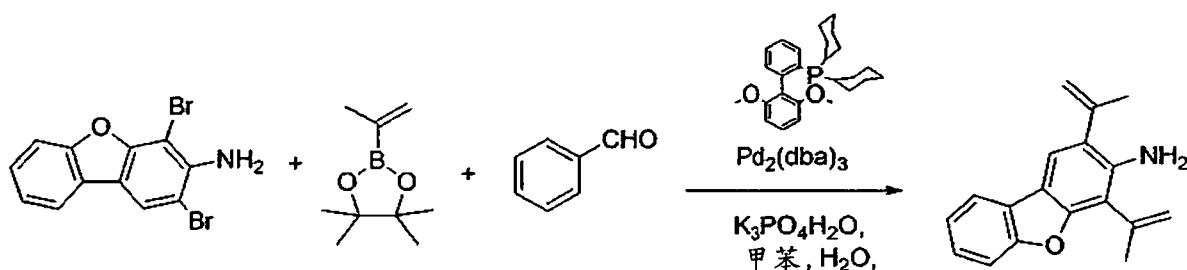


3-胺基二苯并呔喃之合成。在500 mL乙酸乙酯中攪拌3-硝基二苯并呔喃(30 g, 141 mmol)並將3 g 10% Pd/C添加至漿液中。在50 psi H₂壓力下將反應混合物氫化30分鐘。

藉助小矽藻土墊將反應混合物過濾。在減壓下濃縮濾液並使用9:1 DCM/己烷作為洗脫劑實施矽膠管柱層析。最終分離量係14.5 g(56%產率)。

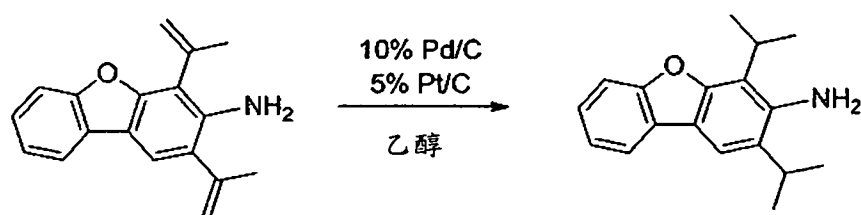


2,4-二溴-3-胺基二苯并呔喃之合成。將二苯并呔喃-3-胺(5.9 g, 32.2 mmol)溶解於無水DMF (25 mL)中並在室溫下逐滴添加N-溴琥珀醯胺(NBS)存於DMF (25 mL)中之溶液。將反應混合物攪拌攪拌1 h, 將所形成沉澱物過濾並用水洗滌數次。將沉澱物溶解於二氯甲烷中, 經硫酸鈉乾燥, 在減壓下濃縮。藉由短二氧化矽管柱使用己烷及乙酸乙酯作為洗脫劑來純化粗製產物, 獲得10.0 g(94%產率)標題化合物。

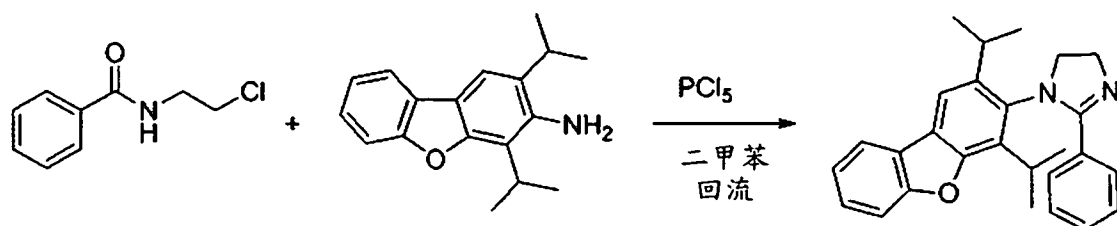


2,4-雙(異丙烯基)二苯并[b,d]呔喃-3-胺之合成。用N₂將2,4-二溴二苯并[b,d]呔喃-3-胺(14.5 g, 42.5 mmol)、苯甲醛(4.96 g, 46.8 mmol)、4,4,5,5-四甲基-2-(丙-1-烯-2-基)-1,3,2-二氧雜戊硼烷(21.44 g, 128 mmol)及磷酸鉀(45.1 g, 213 mmol)存於250 mL甲苯及25 mL H₂O中之混合物鼓

泡20分鐘。隨後添加二環己基(2',6'-二甲氧基聯苯-2-基)膦(0.698 g, 1.701 mmol)及 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.389 g, 0.425 mmol), 並在 N_2 下將混合物加熱至回流並保持14 h。GC-MS 指示反應完成。在冷卻至室溫後, 傾析甲苯層。用甲苯洗滌水層, 且將有機層合併。添加60 mL濃 HCl 。在室溫下將混合物攪拌1 h。藉由過濾收集沉澱物。將固體溶解於二氯甲烷中且用 NaOH 中和並經硫酸鎂乾燥。在溶劑蒸發後, 藉由管柱層析使用5-10%乙酸乙酯/己烷作為溶劑來純化殘餘物。純化後獲得6.6 g(59%產率)產物。

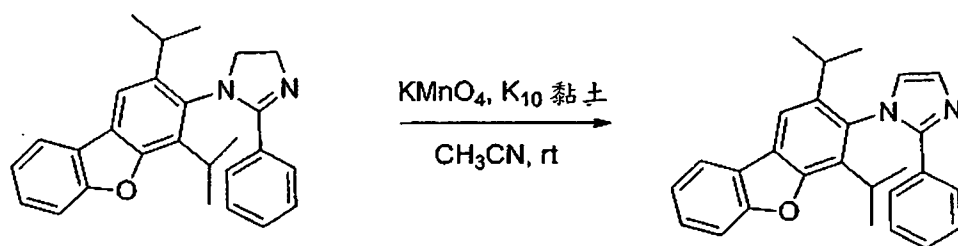


2,4-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-3-胺之合成。將2,4-雙(異丙烯基)二苯并[b,d]呋喃-3-胺(6.6 g, 25 mmol)溶解於乙醇(150 mL)中並向其中添加10% Pd/C (1.5 g)及5% Pt/C (1.5 g)且在50 psi H_2 下氫化過夜。GC指示烯烴向烷烴之轉化完成。藉助矽藻土墊將反應混合物過濾並用二氯甲烷洗滌。將濾液濃縮, 產生6 g(90%產率)期望產物。

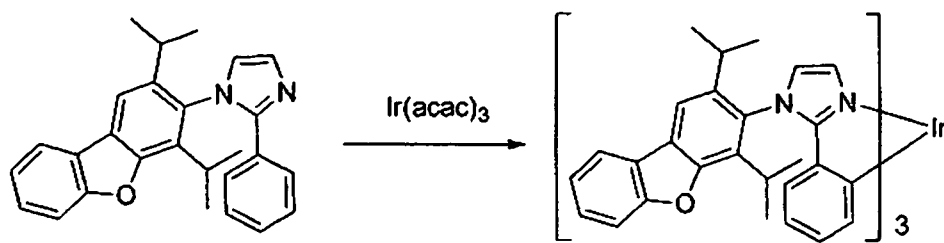


1-(2,4-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-3-基)-2-苯基-4,5-二氫-

1H-咪唑之合成。 在氮下將N-(2-氯乙基)苯甲醯胺(4.12 g, 22.44 mmol)及五氧化二磷(7.01 g, 33.7 mmol)於間二甲苯中回流2 h。將反應混合物冷卻至室溫。隨後向反應物中添加2,4-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-3-胺(6 g, 22.44 mmol)。將反應物回流16 h。在冷卻至室溫後，藉由過濾收集沉澱物，並用甲苯及己烷進行徹底洗滌。將氫氧化鈉溶液添加至固體中且隨後添加乙酸乙酯。分離有機層並經MgSO₄乾燥。蒸發溶劑。獲得7.4 g(83%產率)產物。



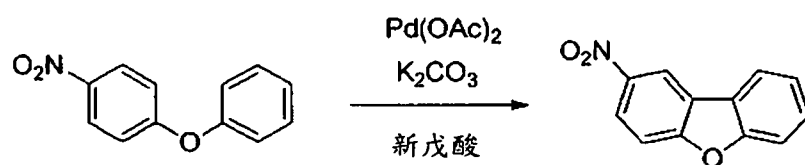
1-(2,4-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-3-基)-2-苯基-1H-咪唑之合成。 將1-(2,4-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-3-基)-2-苯基-4,5-二氫-1H-咪唑(7.4 g, 18.66 mmol)溶解於200 mL乙腈及100 mL二氯甲烷中。在研鉢中研磨高錳酸鉀(5.90 g, 37.3 mmol)及黏土K10(12 g, 30.7 mmol)。隨後將固體小心地添加至溶液中。在數分鐘後產生熱量。藉由TLC監測該反應。在1.5 h後用甲醇猝滅反應。藉助矽藻土將反應混合物過濾。蒸發溶劑並藉由管柱純化殘餘物。獲得5.3 g(72%產率)純產物。



化合物 1

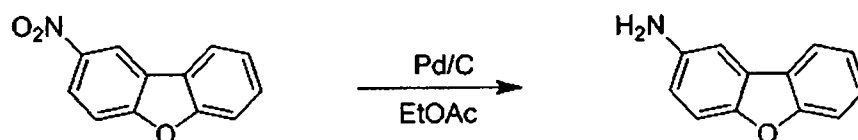
化合物 1 之合成。將 1-(2,4-二異丙基二苯并 [b,d] 咪唑 -3-基)-2-苯基-1H-咪唑 (1.3 g, 3.30 mmol) 及 參(乙醯丙酮酸) 銱(III) (0.323 g, 0.659 mmol) 添加至 Schlenk 管中。添加 1 mL 十三烷。將反應燒瓶抽真空並用氮回填。將此過程重複 3 次。在氮下將反應物加熱至 255 度並保持 68 h。在完成後，用二氯甲烷稀釋反應混合物並將其塗佈於矽藻土上。藉由管柱使用 2:3 二氯甲烷及己烷作為溶劑來純化產物。管柱純化後獲得 1.4 g (56% 產率) 產物。

實例 2. 化合物 2 之合成

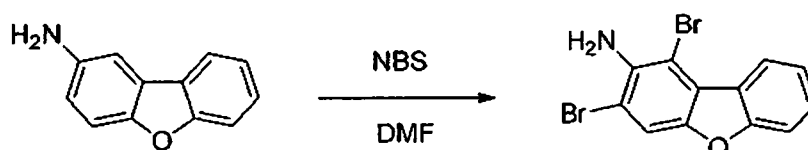


2-硝基二苯并咪唑之合成。在 1 L 圓底燒瓶中，添加 1-硝基-4-苯氧基 (50 g, 232 mmol)、碳酸鉀 (3.21 g, 23.23 mmol)、乙酸鈣 (2.61 g, 11.62 mmol) 及 280 mL 新戊酸。在空氣中將混合物加熱至 120°C。3 天後，在冰浴中冷卻反應混合物。隨時間以多份緩慢添加 125 mL 50% 氫氧化鈉溶液。用大量水及乙酸乙酯稀釋黑色乳液，藉助矽藻土將其過濾。分離有機層，經硫酸鎂乾燥並過濾。蒸發溶劑並預

吸附至矽藻土上。藉由矽膠塞用存於己烷中之10%至50%二氯甲烷洗脫來純化矽藻土混合物。獲得36.4 g(63%產率)期望產物。

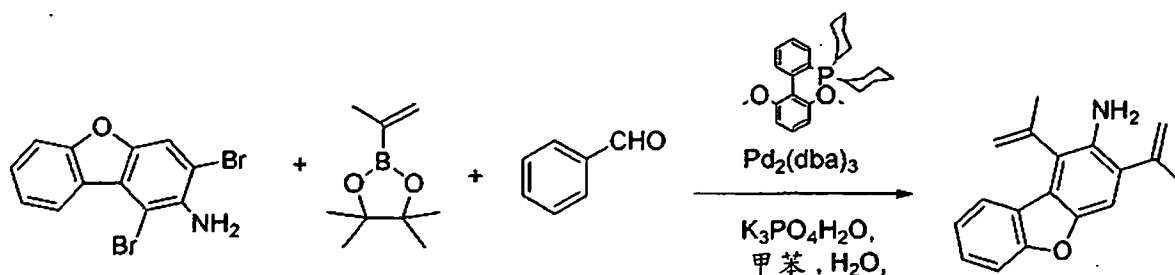


2-氨基二苯并咪喃之合成。在帕爾氫化瓶(Parr hydrogenation bottle)中，添加10% Pd/C (0.77 g, 0.724 mmol)並用氮吹掃該瓶。接下來，添加存於180 mL乙酸乙酯中之2-硝基二苯并[b,d]咪喃(15 g, 44.3 mmol)並在帕爾氫化器上將混合物氫化至溶液不再吸收氫。藉助矽藻土濾出觸媒並用乙酸乙酯洗滌。蒸發濾液並預吸收至矽藻土上。使用瓦裏安(Varian) 400 g管柱用二氯甲烷洗脫來純化矽藻土混合物。獲得10.9 g產物。

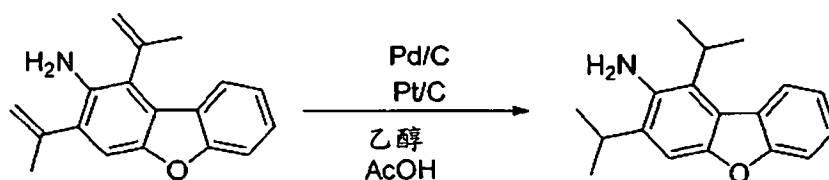


2-氨基-1,3-二溴苯并咪喃之合成。在3-頸圓底燒瓶中，將二苯并[b,d]咪喃-2-胺(20.8 g, 114 mmol)溶解於160 mL無水DMF中並冷卻至0°C。經1 h逐滴添加N-溴琥珀醯亞胺(NBS) (44.5 g, 250 mmol)存於200 mL DMF中之溶液並將溶液攪拌1 h。藉助矽膠將溶液過濾並添加二氯甲烷。用10% LiCl溶液反覆洗滌有機層以去除DMF。將有機層經硫

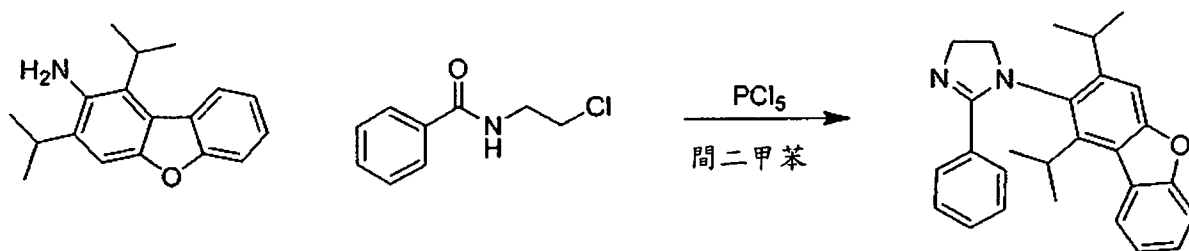
酸鎂乾燥，過濾，蒸發，得到紫色殘餘物。獲得 19.24 g (50% 產率) 產物。



1,3-二(丙-1-烯-2-基)二苯并[b,d]呋喃-2-胺之合成。在 3-頸 500 mL 圓底燒瓶中，將 1,3-二溴二苯并[b,d]呋喃-2-胺 (19.24 g, 56.4 mmol)、4,4,5,5-四甲基-2-(丙-1-烯-2-基)-1,3,2-二氧雜戊硼烷 (30 g, 179 mmol)、二環己基(2',6'-二甲氧基聯苯-2-基)膦 (1.85 g, 4.51 mmol)、苯甲醛 (5.7 mL, 56.4 mmol)、磷酸鉀單水合物 (52 g, 226 mmol)、甲苯 (400 mL) 與水 (40 mL) 混合。將氮直接鼓泡至混合物中達 15 分鐘，隨後添加 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.03 g, 1.13 mmol)。將反應混合物加熱至回流過夜。在冷卻至室溫後，分離有機層。將 40 mL 濃 HCl 添加至有機層中。將混合物劇烈攪拌 1 h。添加氫氧化鈉水溶液以鹼化混合物。分離有機層並藉由矽膠塞用 1:1 二氯甲烷/己烷洗脫來純化，獲得 19.1 g 褐色油狀物。

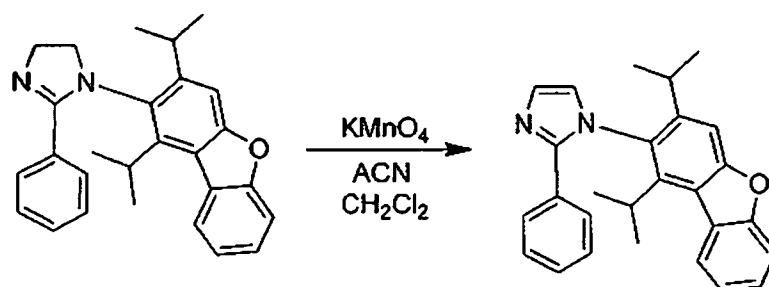


1,3-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-2-胺之合成。向500 mL帕爾氫化器瓶中添加1,2-二(丙-1-烯-2-基)二苯并[b,d]呋喃-2-胺(19.1 g, 72.5 mmol)、10%碳載鈀(5.7 g, 5.36 mmol)、5%碳載鉑(5.7 g, 1.46 mmol)、乙醇(180 mL)及乙酸(20 mL)。在帕爾氫化器上將混合物氫化過夜。藉助矽藻土將反應混合物過濾並用二氯甲烷洗滌。將濾液蒸發至褐色油狀物。將油狀物溶解於二氯甲烷中，用10%氫氧化鈉洗滌，經硫酸鎂乾燥，過濾，蒸發至褐色油狀物。使用200 g瓦裏安管柱用10%乙酸乙酯/己烷洗脫來純化油狀物。獲得6.55 g(34%產率)產物。

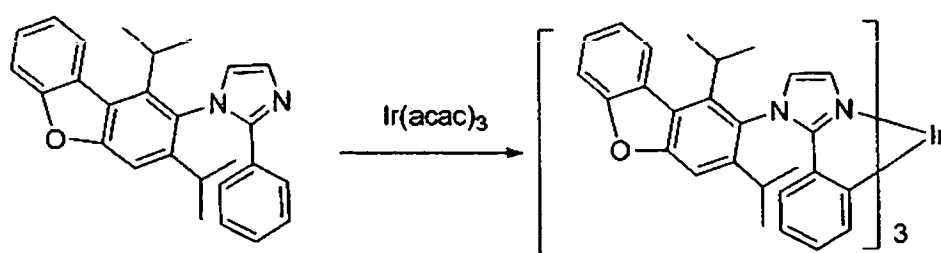


1-(1,3-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-2-基)-2-苯基-4,5-二氫-1H-咪唑之合成。將N-(2-氯乙基)苯甲醯胺(4.09 g, 22.27 mmol)及90 mL間二甲苯添加至250 mL圓底燒瓶中。接下來，小心地添加五氯化磷(6.96 g, 33.4 mmol)。在氮下將反應混合物加熱至回流並保持2 h。將反應混合物冷卻至室溫並添加存於30 mL間二甲苯中之1,3-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-2-胺(6.55 g, 24.50 mmol)。使反應混合物在氮氣下回流過夜。將反應混合物在冰浴中冷卻。藉由過濾收集白色固體。將固體用己烷洗滌，溶解於乙酸乙酯中，並

用 10% 氫氧化鈉溶液洗滌兩次。將有機層經硫酸鎂乾燥，過濾，蒸發成白色固體，將其真空下乾燥。獲得 4.78 g (54% 產率) 產物。



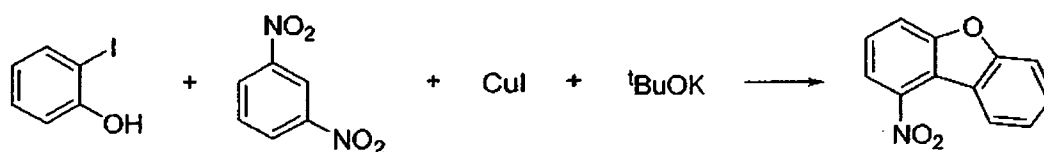
1-(1,3-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-2-基)-2-苯基-1H-咪唑之合成。將存於 70 mL 乙腈中之 1-(1,3-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-2-基)-2-苯基-4,5-二氫-1H-咪唑 (4.78 g, 12.05 mmol) 及 70 mL 二氯甲烷添加至 1 L 圓底燒瓶中。在研鉢中並用研杵研磨高錳酸鉀 (3.81 g, 24.11 mmol)。添加蒙脫石 (Monmorilonite K) 並將其與高錳酸鉀一起研成細粉。經 0.5 小時將此混合物以多份添加至溶液中。在第一次添加後進行 1 h 反應。添加 100 mL 甲醇並攪拌 1 h。藉助矽藻土將固體過濾。使用 200 g 瓦裏安管柱用 20% 乙酸乙酯/己烷洗脫來純化該材料。管柱純化後獲得 2.1 g (44% 產率) 產物。



化合物 2

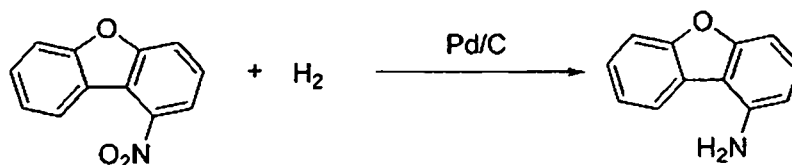
化合物2之合成。將1-(1,3-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-2-基)-2-苯基-1H-咪唑(2.1 g, 5.32 mmol)及叁(乙醯丙酮)鉍(III) (0.521 g, 1.065 mmol)添加至Schlenk管中。添加1 mL 十三烷。將反應燒瓶抽真空並用氮回填。將此過程重複三次。在氮下將反應物加熱至255度並保持70 h。在完成後，用二氯甲烷稀釋反應混合物並將其塗佈於矽藻土上。利用2:3二氯甲烷及己烷對產物進行管柱純化。管柱純化後獲得1.0 g(68%產率)產物。

實例3. 化合物3之合成

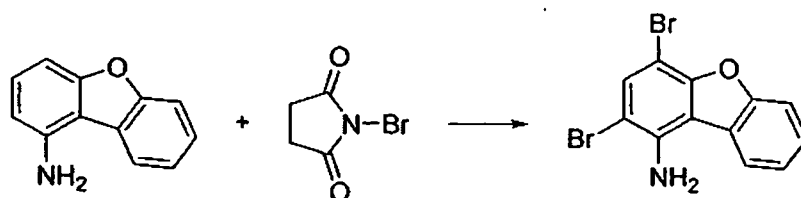


1-硝基二苯并[b,d]呋喃之合成。在經火焰乾燥之3-頸燒瓶中，將CuI (10.3 g, 54.3 mmol)及tBuOK (6.7 g, 60 mmol) 在120 mL二甲氧基乙烷中攪拌1 h。向攪拌溶液中添加280 mL吡啶且溶液變成淺紫色。在單獨燒瓶中將2-碘苯酚(24.1 g, 109 mmol)及tBuOK (12.9 g, 115 mmol)溶解於60 mL二甲氧基乙烷中並轉移至反應燒瓶中。隨後立即將固體2,4-二硝基二苯并呋喃(16 g, 95 mmol)添加至反應燒瓶中並攪拌10分鐘。然後將反應混合物回流2.5 h。完成後，使反應混合物冷卻並用8 M H₂SO₄小心地猝滅。藉助矽藻土將深色溶液過濾並使濾液在乙酸乙酯與水之間分配。用乙酸乙酯將水層萃取兩次。用亞硫酸鈉溶液、隨後Na₂CO₃溶液洗滌合併的有機層並經無水Na₂SO₄乾燥。在真

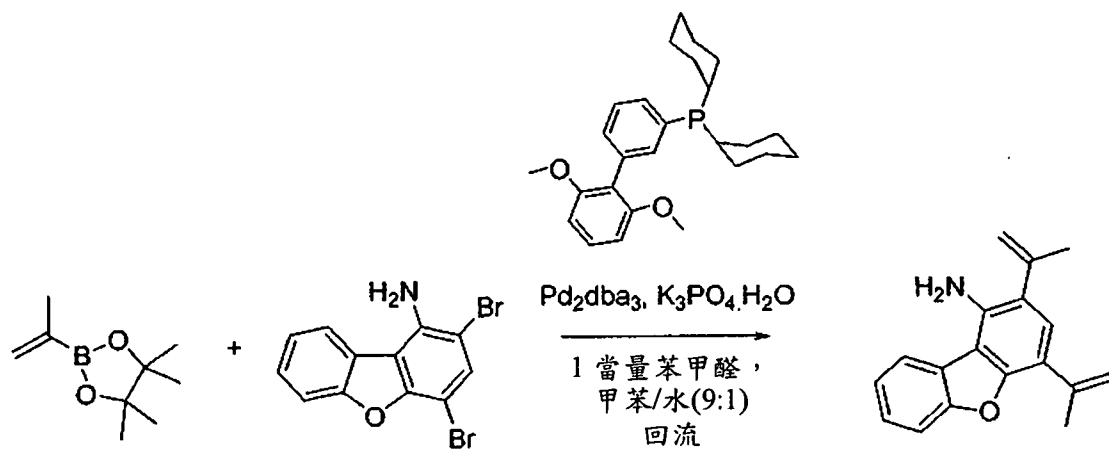
空下去除所有機溶劑。藉由用 20% DCM/己烷在矽膠上進行急驟層析來純化粗製產物。在真空下蒸發有機溶劑後，分離黃色固體狀目標化合物 (13 g, 64% 產率)。



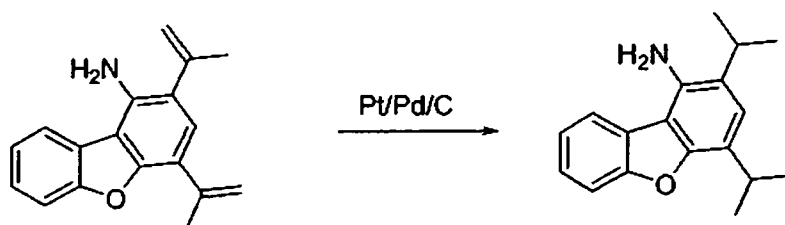
二苯并[b,d]呋喃-1-胺之合成。將 1-硝基二苯并[b,d]呋喃 (7.3 g, 34.2 mmol) 及 730 mg 10% Pd/C 添加至 150 mL 乙酸乙酯中並在 50 psi 下氫化反應混合物。隨後過濾出反應混合物並在真空下濃縮。藉由用 90% DCM/己烷在矽膠上進行急驟層析來純化粗製產物。分離灰白色固體狀目標化合物 (5.1 g, 82% 產率)。



2,4-二溴二苯并[b,d]呋喃-1-胺之合成。將二苯并[b,d]呋喃-1-胺 (5.1 g, 28 mmol) 溶解於 120 mL DCM 中並在冰浴中冷卻。向攪拌溶液中以小批量添加 N-溴琥珀醯亞胺 (10.9 g, 59 mmol)。在完成反應後，使粗製產物在鹽水與 DCM 中分配。將有機層用 Na₂CO₃ 溶液、隨後水洗滌並經無水 Na₂SO₄ 乾燥。將粗製產物用於下一反應中。

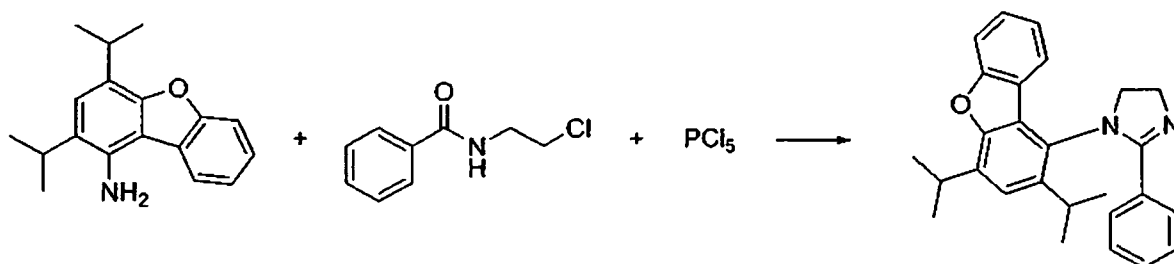


2,4-二(丙-1-烯-2-基)二苯并[b,d]呋喃-1-胺之合成。將 2,4-二溴二苯并[b,d]呋喃-1-胺(6.5 g, 18.5 mmol)、異丙烯基硼酸頻哪醇(pinacol)酯(15.5 g, 92 mmol)、磷酸鉀單水合物(17 g, 74 mmol)、二環己基(2',6'-二甲氧基聯苯-3-基)膦(0.6 g, 1.5 mmol)、苯甲醛(2 g, 18.5 mmol)添加至甲苯與水之 170 mL 9:1 混合物中。經由氮鼓泡將反應混合物脫氣 30 分鐘並在此時添加 Pd_2dba_3 (0.34 g, 0.4 mmol)。將反應混合物再脫氣 10 分鐘並隨後回流 3 h。藉助矽藻土墊將粗製反應混合物過濾並使其在鹽水與乙酸乙酯之間分配。用 1 N HCl、隨後飽和 Na_2CO_3 溶液洗滌乙酸乙酯層，且最後經無水 Na_2SO_4 乾燥。藉由用 40% DCM/己烷在矽膠上進行急驟層析來純化粗製產物。分離淺紅色油狀目標化合物(4.8 g, 99% 產率)。

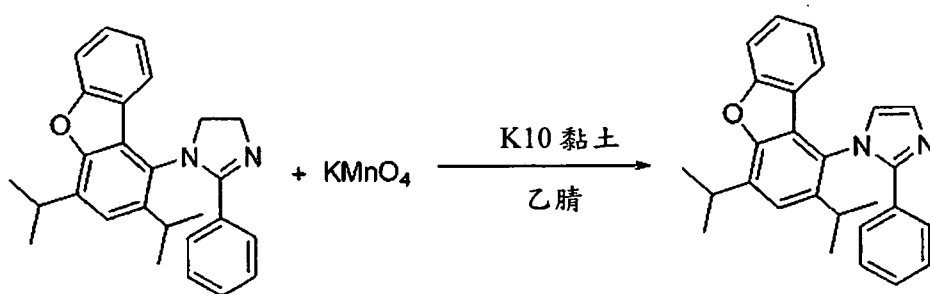


2,4-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-1-胺之合成。將 2,4-二

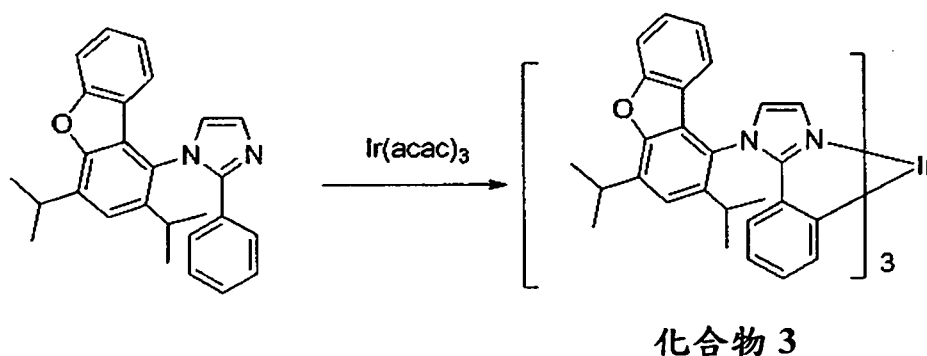
(丙-1-烯-2-基)二苯并[b,d]咪喃-1-胺(4.8 g, 18.2 mmol)及5% Pt/C (0.48 g)及10% Pd/C (0.48 g)添加至乙醇(90 mL)與乙酸(10 mL)之混合物中。在50 psi下將反應混合物氫化過夜。藉助矽藻土墊將反應混合物過濾並在真空下蒸發大部分有機溶劑。將粗製產物溶解於乙酸乙酯中並在1 N NaOH與乙酸乙酯之間分配，以除去任何乙酸。將有機層經無水Na₂SO₄乾燥，在真空下蒸發並藉由在矽膠上用40% DCM/己烷進行急驟層析來純化。分離白色晶體狀目標化合物(3.3 g, 68%)。



1-(2,4-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-1-基)-2-苯基-4,5-二氫-1H-咪唑之合成。將N-(2-氯乙基)苯甲醯胺(2.1 g, 11.2 mmol)、PCl₅ (3.5 g, 16.8 mmol)溶解於間二甲苯(100 mL)中並回流2 h。在使反應燒瓶冷卻至室溫後，將2,4-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-1-胺(3.3 g, 12.3 mmol)添加至其中且將反應混合物回流過夜。自冷卻反應混合物過濾出白色沉澱物。將沉澱物溶解於乙酸乙酯中並在乙酸乙酯與Na₂CO₃水溶液之間分配。萃取出有機相並在真空下乾燥。將目標化合物(4 g, 90%產率)不進一步純化即用於下一步驟。



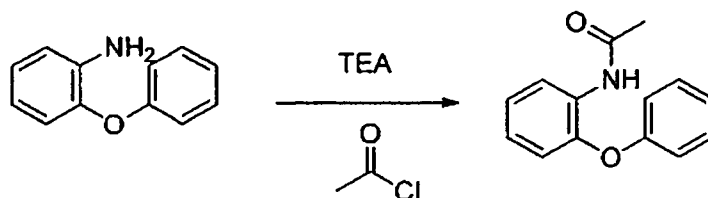
1-(2,4-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-1-基)-2-苯基-1H-咪唑之合成。將1-(2,4-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-1-基)-2-苯基-4,5-二氫-1H-咪唑(4.7 g, 12 mmol)溶解於100 mL乙腈中。向攪拌溶液中以小份添加KMnO₄ (3.8 g, 24 mmol)與4 g蒙脫石K10黏土之精細混合物並將反應混合物攪拌2 h。結束時，用MeOH猝滅反應並藉助矽藻土墊過濾。藉由用80% DCM/己烷至80% DCM/乙酸乙酯在矽膠上進行急驟層析來純化粗製產物。分離3 g淺黃色油狀物。藉由反相層析進一步純化此油狀物。分離白色固體狀目標化合物(1.3 g, 28%產率)。



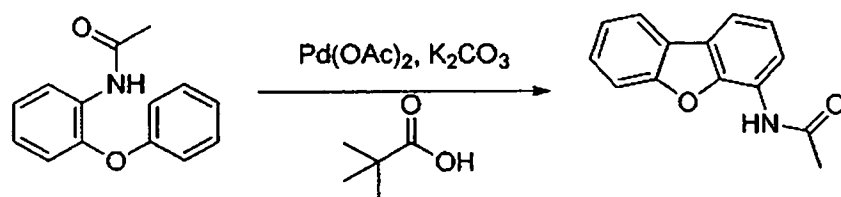
化合物3之合成。將1-(2,4-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-1-基)-2-苯基-1H-咪唑(1.2 g, 3 mmol)、Ir(acac)₃及100 μL十三烷添加於Schlenk燒瓶中並用氮吹掃。將反應混合物加熱至250°C並保持40 h。在矽膠上用1:1 DCM/己烷層析經

冷卻反應混合物。昇華後，獲得黃色晶體狀目標化合物 (0.12 g, 14% 產率)。

實例 4. 化合物 4 之合成

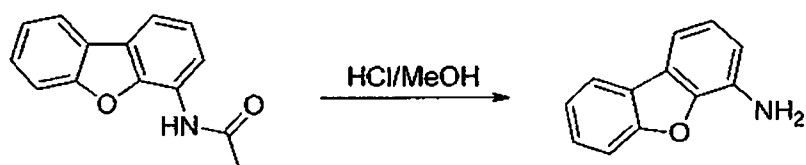


N-(2-苯氧基苯基)乙醯胺之合成。藉由冰浴將 2-苯氧基苯胺 (100 g, 540 mmol)、三乙胺 (0.090 L, 648 mmol) 與 1 L 二氯甲烷之混合物冷卻至 0°C。逐滴添加乙醯氯 (0.04 L, 567 mmol)。在添加完成後，在室溫下將反應攪拌 2 h。將混合物濃縮並藉由二氯甲烷稀釋。藉由水洗滌有機相並經硫酸鈉乾燥。藉由矽膠管柱 (存於己烷中之 20% EtOAc) 純化粗製產物，獲得紅褐色油狀固體 *N*-(2-苯氧基苯基)乙醯胺 (120 g, 98% 產率)。

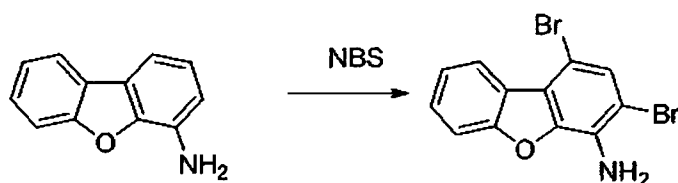


N-(二苯并[*b,d*]呋喃-4-基)乙醯胺之合成。製備 *N*-(2-苯氧基苯基)乙醯胺 (120 g, 528 mmol)、碳酸鉀 (7.30 g, 52.8 mmol)、乙酸鈮 (11.85 g, 52.8 mmol) 與新戊酸 (539 g, 5280 mmol) 之混合物並在 105°C (內部溫度) 下在空氣中加熱兩天。GC-MS 顯示 60% 產物。在 115°C (內部溫度) 下將反應

物攪拌另一晚。然後將反應物冷卻至室溫並藉由飽和碳酸鈉溶液中中和，隨後藉由EtOAc萃取三次。濃縮萃取物，獲得褐色固體狀粗製產物N-(二苯并[b,d]呋喃-4-基)乙醯胺(90 g, 76%產率)。

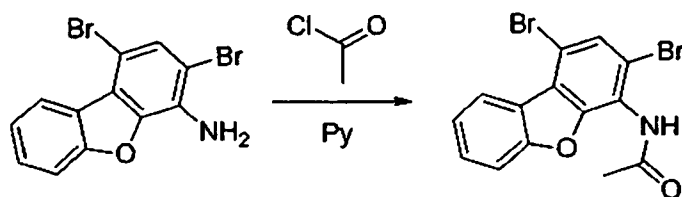


二苯并[b,d]呋喃-4-胺之合成。將N-(二苯并[b,d]呋喃-4-基)乙醯胺(90 g, 400 mmol)懸浮於濃HCl (240 mL)與甲醇(240 mL)之混合物中。使反應物回流2 h且隨後冷卻至室溫。使用飽和碳酸鈉中和溶液。藉由過濾收集殘餘物並將其重新溶解於DCM中。在經硫酸鈉之乾燥後，將溶液濃縮，獲得褐色固體狀二苯并[b,d]呋喃-4-胺(67 g, 92%產率)。

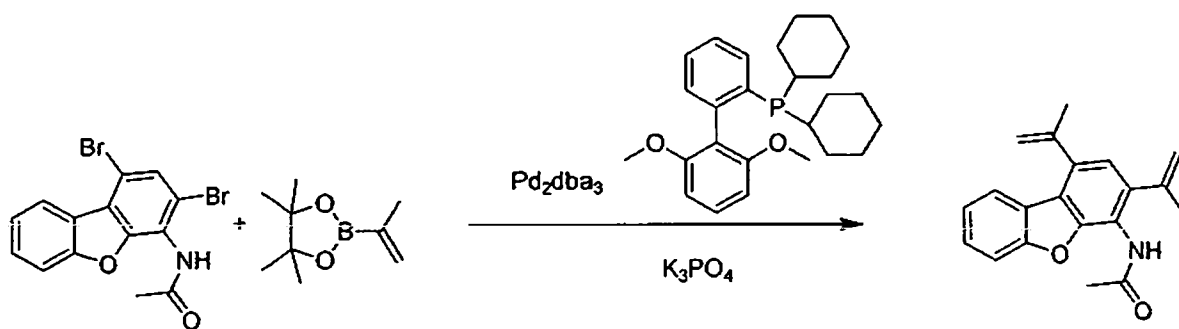


1,3-二溴二苯并[b,d]呋喃-4-胺之合成。將二苯并[b,d]呋喃-4-胺(33.4 g, 182 mmol)溶解於DMF (300 mL)中並藉由冰浴冷卻至0°C。將1-溴吡咯啉2,5-二酮(68.1 g, 383 mmol)溶解於DMF (300 mL)中並逐滴添加至反應溶液中。在添加後，在室溫下將反應物攪拌過夜。然後藉由EtOAc稀釋反應混合物並藉由10% LiCl溶液洗滌三次且藉由飽和

碳酸氫鈉洗滌兩次。將有機層經硫酸鈉乾燥並濃縮。用矽膠管柱(存於己烷中之<15% EtOAc)純化粗製產物，獲得紅褐色固體 1,3-二溴二苯并[b,d]呋喃-4-胺(76 g，122%產率，含有一些琥珀醯亞胺)。

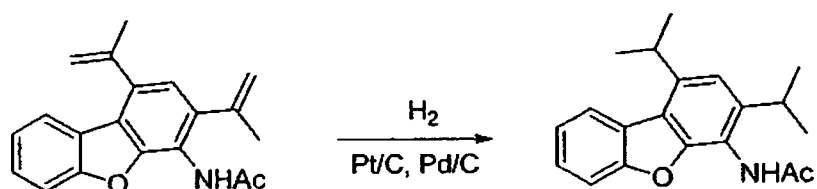


N-(1,3-二溴二苯并[b,d]呋喃-4-基)乙醯胺之合成。在 2 L 圓底燒瓶中，藉由冰浴冷卻存於二氯甲烷(800 mL)中之 1,3-二溴二苯并[b,d]呋喃-4-胺(76 g，223 mmol)及吡啶(180 mL，2229 mmol)。在攪拌的同時逐滴添加乙醯氯(31.7 mL，446 mmol)。隨後去除冰浴。在室溫下將反應物攪拌 1 h。藉由過濾收集殘餘物並藉由水及二氯甲烷洗滌，獲得褐色固體狀 N-(1,3-二溴二苯并[b,d]呋喃-4-基)乙醯胺(60 g，70.3%產率)。

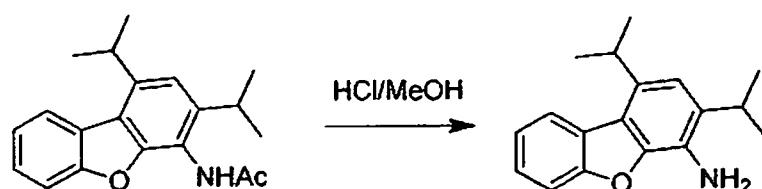


N-(1,3-二(丙-1-烯-2-基)二苯并[b,d]呋喃-4-基)乙醯胺之合成。將 N-(1,3-二溴二苯并[b,d]呋喃-4-基)乙醯胺(55 g，144 mmol)、4,4,5,5-四甲基-2-(丙-1-烯-2-基)-1,3,2-二氧雜

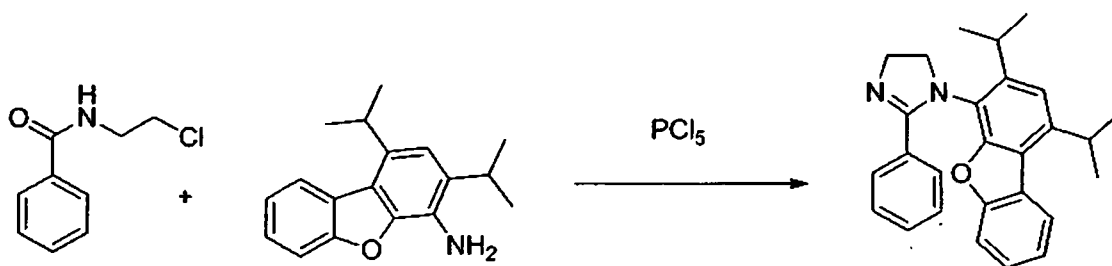
戊硼烷(72.4 g, 431 mmol)及磷酸三鉀(132 g, 574 mmol)混合至甲苯(800 mL)及水(80 mL)中。將混合物用氮鼓泡20分鐘。然後將Pd₂(dba)₃ (2.63 g, 2.87 mmol)及二環己基(2',6'-二甲氧基聯苯-2-基)膦(4.72 g, 11.49 mmol)添加至反應混合物中。在藉由氮再鼓泡20分鐘後，在氮下將反應物回流過夜。在冷卻至室溫後，藉由水洗滌有機層，經硫酸鈉乾燥並濃縮。在矽膠管柱(存於己烷中之30%-50% EtOAc)後，獲得褐色N-(1,3-二(丙-1-烯-2-基)二苯并[b,d]呋喃-4-基)乙醯胺(32.5 g, 74.1%產率)。



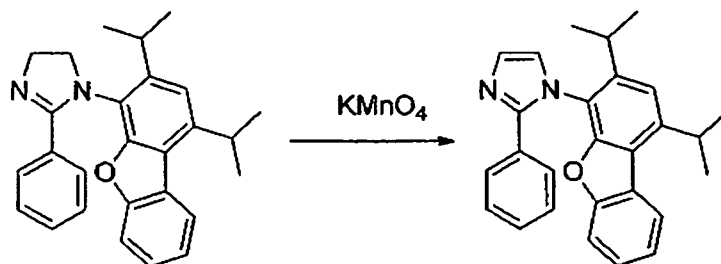
N-(1,3-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-4-基)乙醯胺之合成。在500 mL氮化容器中添加存於乙醇(200 mL)中之N-(1,3-二(丙-1-烯-2-基)二苯并[b,d]呋喃-4-基)乙醯胺(22.6 g, 74.0 mmol)、Pd/C, 10% (3 g, 74.0 mmol)及Pt/C, 5% (3 g, 74.0 mmol)。在兩天反應後，藉助矽藻土塞將溶液過濾並用二氯甲烷洗滌。濃縮過濾物，獲得白色固體狀粗製N-(1,3-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-4-基)乙醯胺(18.8 g, 82%產率)。



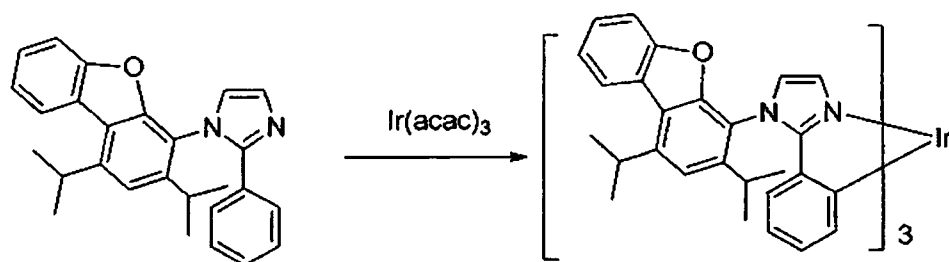
1,3-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-4-胺之合成。將 *N*-(1,3-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-4-基)乙醯胺(15 g, 48 mmol)懸浮於濃HCl (125 mL)與MeOH (125 mL)之混合物中。使混合物回流 2 h且隨後冷卻至室溫。使用飽和碳酸鈉中和溶液。藉由過濾收集殘餘物並將其重新溶解於DCM中。在經硫酸鈉之乾燥後，將溶液濃縮，獲得褐色固體狀1,3-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-4-胺(10.5 g, 81%產率)。



1-(1,3-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-4-基)-2-苯基-4,5-二氫-1H-咪唑之合成。將 *N*-(2-氯乙基)苯甲醯胺(6.3 g, 34 mmol)及 PCl_5 (7.9 g, 38 mmol)懸浮於二甲苯(75 mL)中並回流兩小時。然後添加1,3-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-4-胺(10 g, 38 mmol)。將混合物回流過夜。藉由冰浴冷卻後，未觀察到沉澱。將混合物濃縮並用少量甲苯及己烷洗滌殘餘物。將粗製1-(1,3-二異丙基二苯并[b,d]呋喃-4-基)-2-苯基-4,5-二氫-1H-咪唑(7.5 g, 19 mmol, 54.8%產率)不進一步純化即用於下一步驟中。



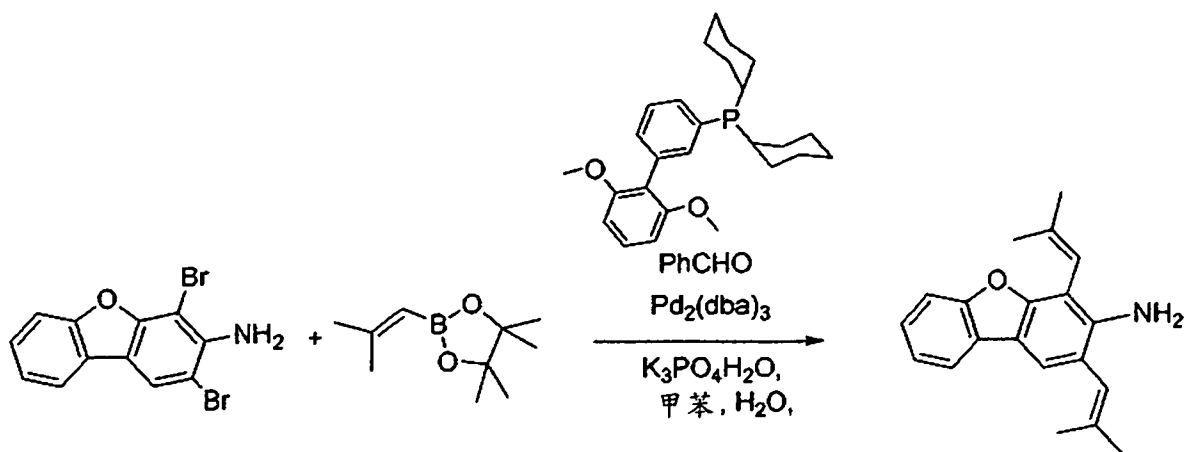
1-(1,3-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-4-基)-2-苯基-1H-咪唑之合成。將高錳酸鉀(5.58 g, 35.3 mmol)與蒙脫石K-10黏土(10 g)混合並磨成細粉。將混合物緩慢(約15分鐘)添加至二氯甲烷(50 mL)、乙腈(150 mL)與1-(1,3-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-4-基)-2-苯基-4,5-二氫-1H-咪唑(7 g, 17.6 mmol)之混合溶液中，藉由冰浴將其冷卻。隨後將反應物再攪拌1小時並藉由添加20 mL乙醇來猝滅。藉助矽藻土塞過濾。藉由矽膠管柱(存於己烷中之高達30% EtOAc)來純化粗製產物並自己烷重結晶。獲得白色固體狀1-(1,3-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-4-基)-2-苯基-1H-咪唑(2.6 g, 6.57 mmol, 37.2%產率)(99.8% HPLC)。



化合物 4

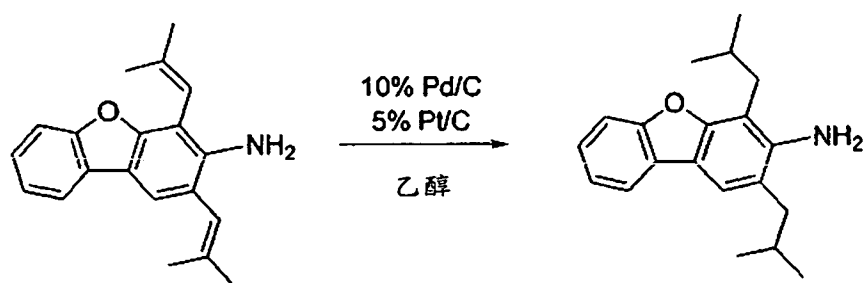
化合物4之合成。將Ir(acac)₃(0.620 g, 1.267 mmol)、1-(1,3-二異丙基二苯并[b,d]咪喃-4-基)-2-苯基-1H-咪唑(2.5 g, 6.34 mmol)及十三烷(1 mL)混合於Schlenk管中。在小心地真空化並用氮再填充4次後，將反應物在250°C砂浴中加熱3天。藉由二氧化矽管柱用存於己烷中之高達80%二氯甲烷純化粗製產物，獲得黃色固體狀產物(700 mg, 40.2%產率)。

實例5. 化合物5之合成



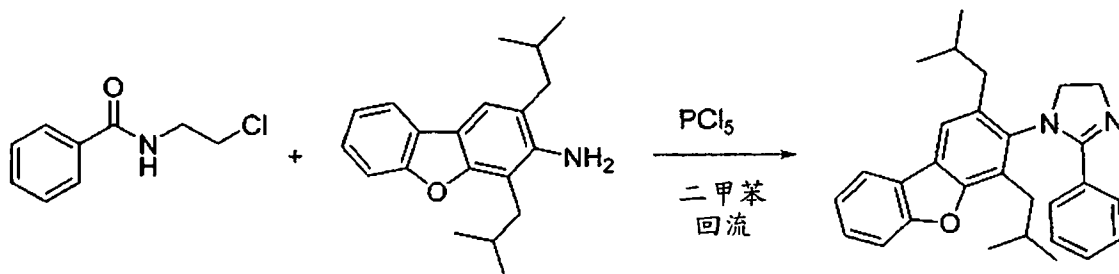
2,4-雙(2-甲基丙-1-烯基)二苯并[b,d]呋喃-3-胺之合成。

向脫氣甲苯(40 mL)中依序添加2,4-二溴二苯并呋喃-3-胺(1.5 g, 4.4 mmol)、苯甲醛(0.47g, 4.4 mmol)、4,4,5,5-四甲基-2-(2-甲基丙-1-烯基)-1,3,2-二氧雜戊硼烷(3.2 g, 17.6 mmol)、磷酸鉀(6.08 g, 26 mmol)、2-二環己基磷基-2',6'-二甲氧基聯苯(0.28 g, 0.704 mmol)、Pd₂(bda)₃ (0.161 g, 0.176 mmol)及水(6 mL)。將溶液在氮氣氛中回流過夜並隨後冷卻至室溫。用乙酸乙酯稀釋反應物並分離有機相與水相。經硫酸鈉乾燥有機相且在真空下去除溶劑。使用矽膠利用乙酸乙酯及己烷作為洗脫劑來層析產物。去除溶劑，獲得1.05 g(82%產率)標題化合物。

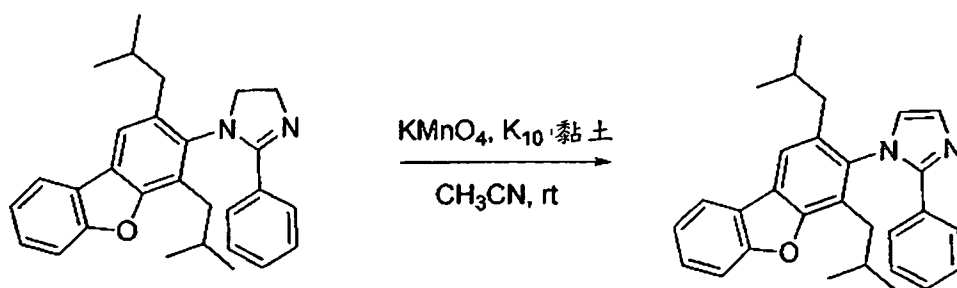


2,4-二異丁基二苯并[b,d]呋喃-3-胺之合成。將2,4-雙(2-甲基丙-1-烯基)二苯并[b,d]呋喃-3-胺(5.45 g, 18.7 mmol)溶解於乙醇(150 mL)中並向其中添加10% Pd/C (1.5 g)及

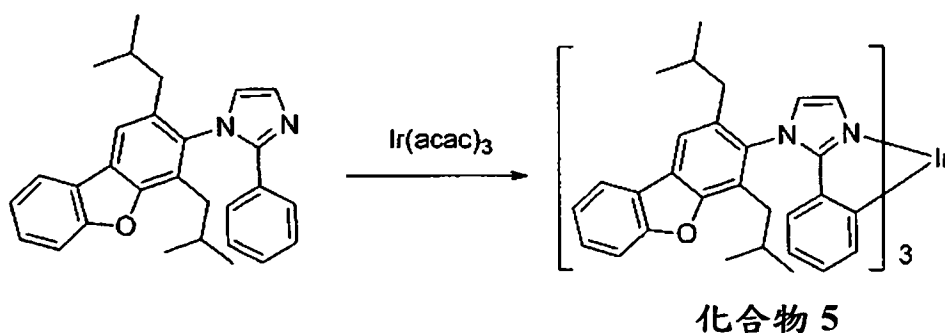
5% Pt/C (1.5 g)且在 50 psi H₂下氫化過夜。GC指示烯烴向烷烴之轉化完成。藉助矽藻土墊將反應混合物過濾並用二氯甲烷洗滌。將濾液濃縮，產生 5.3 g(96%產率)期望產物。



1-(2, 4-二異丁基二苯并[b,d]咪唑-3-基)-2-苯基-4, 5-二氫-1H-咪唑之合成。在氮下將N-(2-氯乙基)苯甲醯胺(3.1 g, 16.88 mmol)溶解於40 mL無水間二甲苯中。隨後小心地添加五氯化磷(5.27 g, 25.3 mmol)且在氮下將混合物加熱至回流並保持2 h。將溶液冷卻至室溫並添加2, 4-二異丁基二苯并[b,d]咪唑-3-胺(5.49 g, 18.57 mmol)。將反應混合物加熱至回流並保持20 h。在冷卻後，將沉澱物過濾並收集固體咪唑啉產物且用甲苯、隨後己烷洗滌。將所得粗製產物溶解於二氯甲烷中並用50% NaOH洗滌兩次。經MgSO₄乾燥有機層，將其過濾並在減壓下濃縮，獲得標題產物(5.5 g, 77%)。

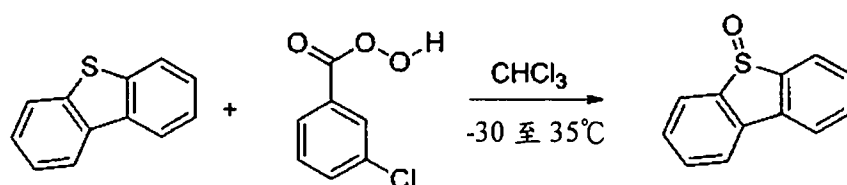


1-(2,4-二異丁基二苯并[b,d]咪喃-3-基)-2-苯基-1H-咪唑之合成。在研鉢中將高錳酸鉀(4.09g 25.9 mmol)及K-10(8.1 g)一起研磨直至獲得均勻細粉。將此KMnO₄-K-10粉末逐份添加至1-(2,4-二異丁基二苯并[b,d]咪喃-3-基)-2-苯基-4,5-二氫-1H-咪唑(5.5 g, 12.9 mmol)存於CH₃CN (100 mL)中之溶液中並在室溫下將混合物攪拌2 h。添加乙醇(5 mL)以還原過量氧化劑。再攪拌30分鐘後，藉助短砂藻土墊將混合物過濾並用CH₃CN (50 mL)洗滌固體。蒸發濾液並藉由在SiO₂上進行層析來純化所得粗製材料，獲得期望咪唑(2.76 g, 50%)。

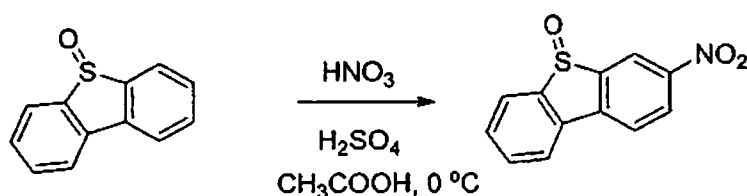


化合物5之合成。將(1-(2,4-二異丁基二苯并[b,d]咪喃-3-基)-2-苯基-1H-咪唑 1.97 g, 4.67 mmol)、十三烷(0.1 mL)及Ir(acac)₃ (0.44 g, 0.899 mmol)添加至Schlenk管中。將管抽真空並用氮再填充。將此過程重複三次。將反應物加熱至250°C並保持40 h。在冷卻至室溫後，用二氯甲烷稀釋反應物並藉由矽膠管柱層析使用1:1己烷及二氯甲烷作為洗脫劑來純化。獲得0.7 g(54%產率)產物。

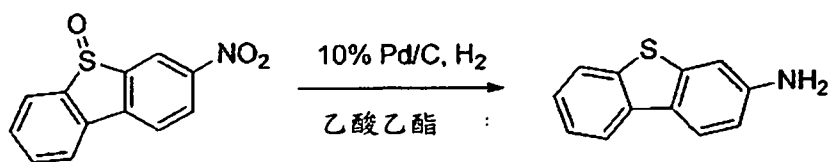
實例6. 化合物13之合成



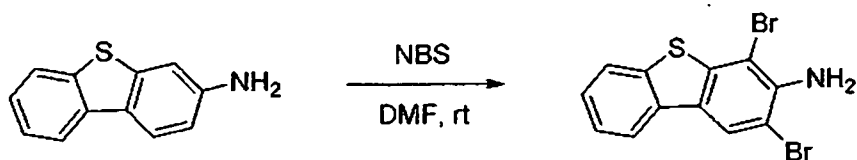
二苯并噻吩-9-氧化物之合成。在 -30°C 至 -35°C 下將3-氯過氧苯甲酸(22.38 g, 100 mmol) (mcpba)存於200 mL氯仿中之溶液逐滴添加至存於200 mL氯仿中之二苯并[b,d]噻吩(18.4 g, 100 mmol)中。在 -30°C 下攪拌1 h後，使反應混合物達到室溫並在室溫下攪拌1 h。藉助矽藻土墊將混合物過濾並使用 Na_2CO_3 水溶液中中和殘餘物。經 Na_2SO_4 乾燥反應混合物之有機層，在減壓真空下濃縮並使用1:1 DCM/己烷作為洗脫劑實施矽膠管柱層析。使固體產物自乙醇進一步重結晶，獲得白色二苯并噻吩-9-氧化物(14.6 g, 73%)。



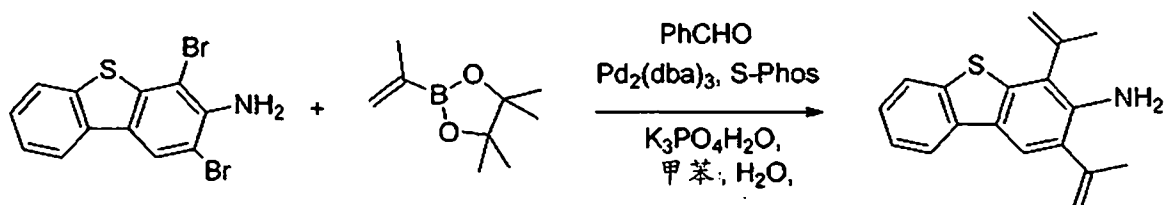
3-硝基二苯并噻吩-9-氧化物之合成。將二苯并噻吩-9-氧化物(15 g, 74.9 mmol)溶解於33 mL乙酸及33 mL硫酸中並在冰浴中冷卻至 0°C 。在15分鐘時段期間逐滴添加36 mL發煙硝酸。在 0°C 下將反應混合物攪拌劇烈30分鐘。然後添加冰冷水並形成黃色沉澱物，將其過濾並用大量水洗滌。將沉澱物溶解於二氯甲烷中，經 Na_2SO_4 乾燥並在減壓下濃縮。最後，使黃色固體自乙醇重結晶，獲得3-硝基二苯并噻吩-9-氧化物(11 g, 60%)。



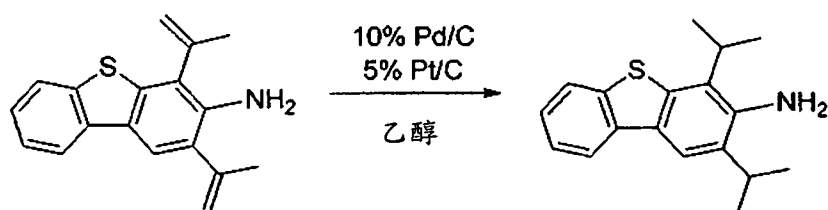
3-氨基二苯并噻吩之合成。將3-硝基二苯并噻吩-9-氧化物 (11 g, 44.9 mmol) 於 200 mL 乙酸乙酯中漿化並將 5 g 10% Pd/C 添加至燒瓶中。在 50 psi H₂ 壓力下將反應混合物氫化 45 分鐘。藉助小砂藻土墊將反應混合物過濾。在減壓下濃縮濾液並使用 DCM/己烷作為洗脫劑來實施矽膠管柱層析，產生期望化合物 (6.8 g, 76%)。



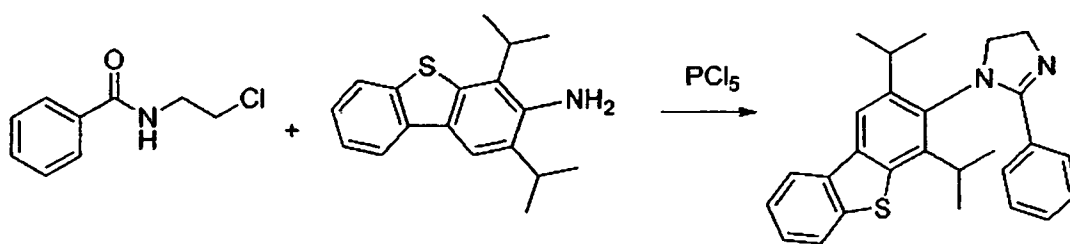
2, 4-二溴-3-氨基二苯并噻吩合成。將3-氨基二苯并噻吩 (6.8 g, 34.1 mmol) 溶解於無水 DMF (25 mL) 中並冷卻至 0°C。用導管使 N-溴琥珀醯胺 (NBS) 存於 DMF (30 mL) 中之溶液緩慢進入反應燒瓶中。在 0°C 下將反應混合物攪拌 1 h，隨後將水添加至反應混合物中並形成沉澱物，將其過濾並用水洗滌數次。將沉澱物溶解於二氯甲烷中，經硫酸鈉乾燥，在減壓下濃縮。藉由短二氧化矽管柱使用己烷及乙酸乙酯作為洗脫劑來純化粗製產物，獲得標題化合物 (12 g, 94%)。



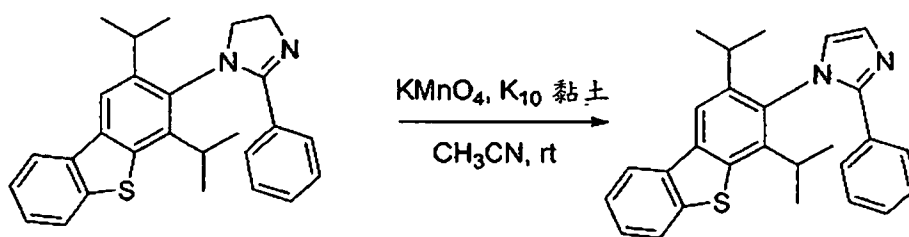
2,4-二(丙-1-烯-2-基)二苯并[b,d]噻吩-3-胺之合成。向脫氣甲苯(200 mL)中依序添加2,4-二溴二苯并[b,d]噻吩-3-胺(12.15 g, 34.0 mmol)、4,4,5,5-四甲基-2-(丙-1-烯-2-基)-1,3,2-二氧雜戊硼烷(17.15 g, 102 mmol)、苯甲醛(3.61 g, 34.0 mmol)、磷酸鉀(23.51 g, 102 mmol)、二環己基(2',6'-二甲氧基-[1,1'-聯苯]-2-基)膦(1.676 g, 4.08 mmol)及Pd₂(dba)₃ (0.935 g, 1.021 mmol)及水(20 mL)。將溶液在氮氣氛中回流過夜並隨後冷卻至室溫。用乙酸乙酯稀釋反應物並分離有機相與水相。經硫酸鈉乾燥有機相且在真空下去除溶劑。使用矽膠利用乙酸乙酯及己烷作為洗脫劑來層析產物。去除溶劑，獲得標題化合物(9.0, 95%)。



2,4-二異丙基二苯并[b,d]噻吩-3-胺之合成。將2,4-二(丙-1-烯-2-基)二苯并[b,d]噻吩-3-胺(9 g, 32.2 mmol)溶解於乙醇(150 mL)中並添加9 mL乙酸。向燒瓶中添加10% Pd/C (9.0 g)及5% Pt/C (9.0 g)並在40 psi H₂下氫化過夜。GC指示烯烴向烷烴之轉化完成。藉助矽藻土墊將反應混合物過濾並用二氯甲烷洗滌。將濾液濃縮，產生7.5 g (82%)期望產物。

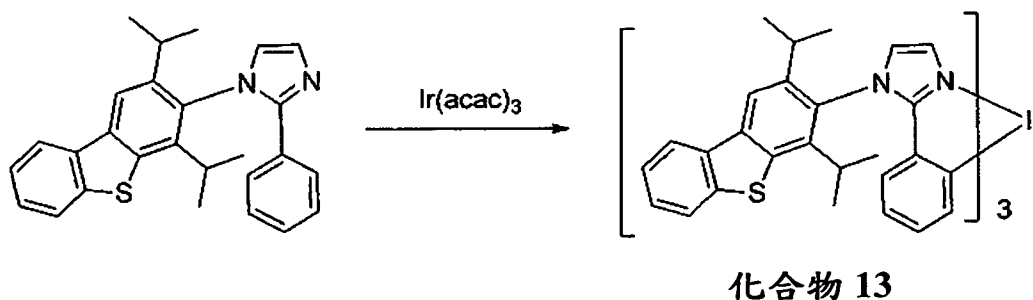


1-(2,4-二異丙基二苯并[b,d]噻吩-3-基)-2-苯基-4,5-二氫-1H-咪唑之合成。在氮下將N-(2-氯乙基)苯甲醯胺(4.3 g, 23.42 mmol)溶解於50 mL無水間二甲苯中。然後小心地添加五氯化磷(7.31 g, 35.1 mmol)並在氮下將混合物加熱至回流且保持2 h。將溶液冷卻至室溫並添加2,4-二異丙基二苯并[b,d]噻吩-3-胺(7.30 g, 25.8 mmol)。將反應混合物加熱至回流並保持20 h。在冷卻後，將沉澱物過濾並收集固體咪唑產物且用甲苯、隨後己烷洗滌。將所得粗製產物溶解於二氯甲烷中並用50% NaOH洗滌兩次。經MgSO₄乾燥有機層，將其過濾並在減壓下濃縮，獲得標題產物(4.8 g, 50%)。



1-(2,4-二異丙基二苯并[b,d]噻吩-3-基)-2-苯基-4,5-二氫-1H-咪唑之合成。在研鉢中將高錳酸鉀(3.6 g, 23.27 mmol)及蒙脫石K10黏土(7.2 g)一起研磨直至獲得均勻細粉。將此KMnO₄-K-10粉末逐份添加至1-(2,4-二異丙基二苯并[b,d]噻吩-3-基)-2-苯基-4,5-二氫-1H-咪唑(4.8 g, 11.63 mmol)存

於 CH_3CN (40 mL) 中之溶液中並在室溫下將混合物攪拌 2 h。添加 5 mL 乙醇以還原過量氧化劑。再攪拌 30 分鐘後，藉助短矽藻土墊將混合物過濾並用二氯甲烷 (50 mL) 洗滌固體。蒸發濾液並藉由在 SiO_2 上進行層析來純化所得粗製材料，獲得期望咪唑 (1.2 g, 25%)。



化合物 13 之合成。將 1-(2,4-二異丙基二苯并 [b,d] 噻吩-3-基)-2-苯基-1H-咪唑 (0.783 g, 1.907 mmol) 及 叁(乙醯丙酮) 銱 (III) (0.187 g, 0.381 mmol) 添加至 Schlenk 管中。添加 0.2 mL 十三烷。將反應燒瓶抽真空並用氮回填。將此過程重複 3 次。在氮下將反應物加熱至 255 度並保持 70 h。在完成後，用二氯甲烷稀釋反應混合物並將其塗佈於矽藻土上。藉由管柱使用 2:3 二氯甲烷及己烷作為溶劑來純化產物。純化後獲得 0.3 g (55.4% 產率) 產物。

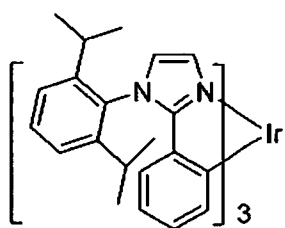
裝置實例

所有裝置實例皆由高真空 ($<10^{-7}$ 托) 熱蒸發製作。陽極電極係 800 Å 氧化銦錫 (ITO)。陰極由 10 Å LiF 隨後 1000 Å Al 組成。製作後立即在氮手套箱 (<1 ppm H_2O 及 O_2) 中用經環氧樹脂密封之玻璃蓋囊封所有裝置，且在封裝內部納入水分吸收劑。

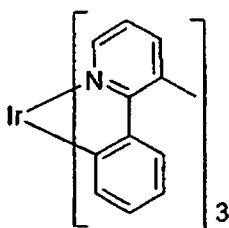
該裝置之有機堆疊自ITO表面開始依次由以下組成：100 Å E2作為電洞注入層(HIL)、300 Å 4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-苯基胺基]聯苯(α -NPD)作為電洞傳送層(HTL)、300 Å 摻雜有15%或9%發射摻雜物(例如，化合物1及13)之H1作為發射層(EML)、50 Å H1作為阻擋層(BL)及400 Å Alq₃ (參-8-羥基喹啉鋁)作為電子傳送層(ETL)。

以類似於裝置實例1至3之方式製作比較裝置實例1，只是使用E1作為發射摻雜物。

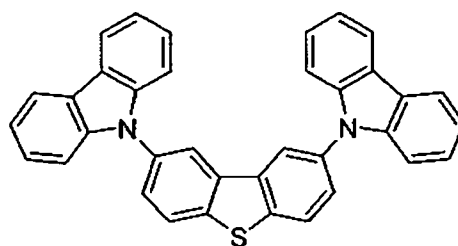
本文所用以下化合物具有以下結構：



E1



E2



H1

提供用於OLED發射層之特定發射摻雜物。該等化合物可產生具有尤佳性質之裝置。裝置結構提供於表2中，且相應裝置數據提供於表3中。Cmpd.係化合物(Compound)之縮寫。Ex.係實例(Example)之縮寫。Comp.係比較(Comparative)之縮寫。

表2.

實例	HIL	HTL	EML(300 Å, 摻雜%)		BL	ETL
Ex. 1	E2 100 Å	NPD 300 Å	H1	Cmpd. 1 9%	H1 50 Å	Alq 400 Å
Ex. 2	E2 100 Å	NPD 300 Å	H1	Cmpd. 1 15%	H1 50 Å	Alq 400 Å

Ex. 3	E2 100 Å	NPD 300 Å	H1	Cmpd. 13 15%	H1 50 Å	Alq 400 Å
Comp. Ex. 1	E2 100 Å	NPD 300 Å	H1	E1 15%	H1 50 Å	Alq 400 Å

表 3.

Ex.	1931 CIE		以1000 cd/m ²						以2000 cd/m ²
	x	y	λ_{\max}	FWHM (nm)	電壓 (V)	LE (Cd/A)	EQE (%)	PE (lm/W)	LT _{80%} (h)
Ex. 1	0.182	0.377	474	54	8.1	27	12.1	10.5	210
Ex. 2	0.183	0.381	474	52	7.1	31.2	14	13.8	320
Ex. 3	0.180	0.397	474	56	7.8	31.9	13.9	12.9	264
Comp. Ex. 1	0.175	0.384	474	56	5.9	40.2	18.4	21.3	155

自裝置實例1至3可見，使用本發明化合物作為藍色磷光 OLED中之發射摻雜物可獲得長裝置壽命。具體而言，本發明化合物之壽命LT_{80%}(定義為初始發光L₀之值在室溫下自2000 cd/m²之初始亮度開始以恆定電流密度衰減80%所需之時間)顯著長於E1。特定而言，與E1之155 h相比，化合物1及13之壽命分別為320 h及264 h。

化合物1、2、3、4、13及A之暫態壽命展示於表4中。發現具有二苯并呋喃(即，X係O)及二苯并噻吩(即，X係S)取代之化合物具有較短暫態壽命。具體而言，化合物1至4及13之77K PL暫態壽命小於針對先前所報導化合物所量測之壽命。特定而言，與壽命為3.2 μs之E1相比，化合物1至4及13之壽命<2.6 μs(參見表4)。經縮短暫態壽命可係化合物之重要光物理性質，此乃因具有較短激發態壽命之化合

物具有較高輻射速率。不受限於理論，人們認為該等化合物在裝置中可更穩定，此乃因分子在激發態中消耗較少時間。因此，可發生光化學反應或猝滅的可能性降低。因此，該等化合物可提供具有經改良壽命之裝置。

表 4.

Cmpd.	77K LT (μ s)
Cmpd. 1	2.34
Cmpd. 2	2.52
Cmpd. 3	2.56
Cmpd. 4	2.55
Cmpd. 13	2.27
E1	3.2

應瞭解，本文所述之各實施例僅用於舉例說明，且其並不意欲限制本發明之範疇。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，如熟習此項技術者應明瞭，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化形式。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。

【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。

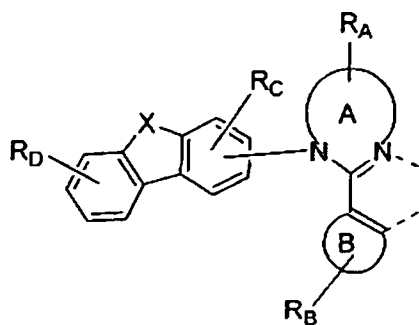
圖 3 展示具有二苯并稠合 5 員環取代基之配體。

【主要元件符號說明】

100	有機發光裝置
110	基板
115	陽極
120	電洞注入層
125	電洞傳輸層
130	電子阻擋層
135	發射層
140	電洞阻擋層
145	電子傳輸層
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	電洞傳輸層
230	陽極

七、申請專利範圍：

1. 一種化合物，其包含具有下式之配體 L，



式 I，

其中 A 為 5 員或 6 員雜環及 B 為 5 員或 6 員碳環；

其中 R_A 、 R_B 及 R_D 代表單、二、三或四取代；

其中 R_A 、 R_B 及 R_D 獨立地選自氫、鹵素、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳基及雜芳基；

其中 R_A 、 R_B 、 R_C 及 R_D 視情況經稠合；

其中 X 選自由 CRR'、NR、O 及 S 組成之群；

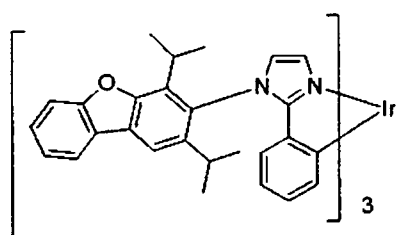
其中 R 及 R' 獨立地選自由烷基及芳基組成之群；

其中該配體 L 係配位至 Ir；且

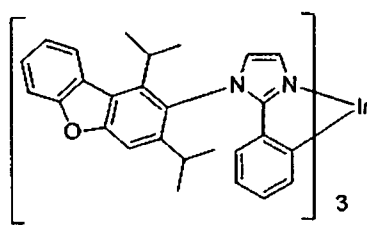
其中 R_C 係兩個烷基取代基。

2. 如請求項 1 之化合物，其中該化合物係均配物。
3. 如請求項 1 之化合物，其中該化合物係異配物且該化合物中之所有該等配體 L 均具有式 I。
4. 如請求項 1 之化合物，其中該化合物係異配物且該化合物中該等配體 L 中之至少一者具有式 I。
5. 如請求項 1 之化合物，其中 B 係苯基。
6. 如請求項 1 之化合物，其中 R_C 係兩個具有 3 個或更多個碳原子之烷基取代基。

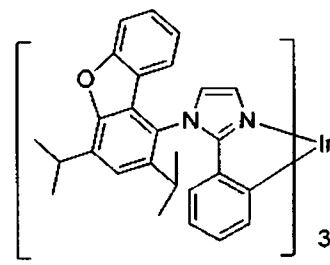
7. 如請求項1之化合物，其中該含有 R_C 之環在該連接至A之碳原子之一個鄰位處經取代。
8. 如請求項1之化合物，其中含有 R_C 之環具有兩個位於該連接至A之碳原子之鄰位處的取代基。
9. 如請求項1之化合物，其中該含有 R_C 之環具有一個位於該附接至A之碳原子之鄰位處的取代基且該附接至A之碳原子之另一鄰位係由經取代二苯并部分佔據。
10. 如請求項1之化合物，其中該化合物係選自由以下組成之群：



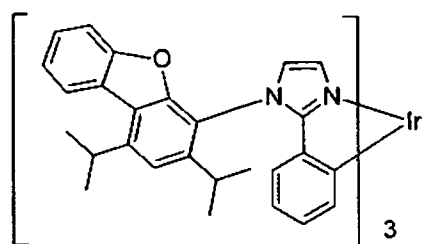
化合物 1



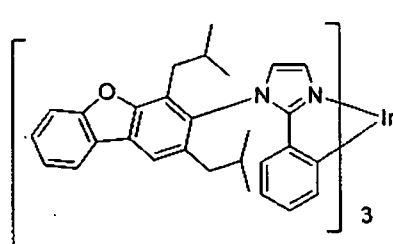
化合物 2



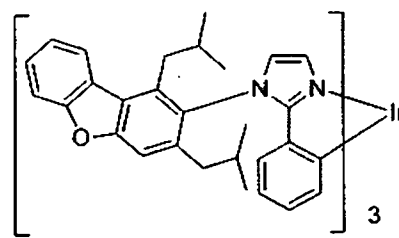
化合物 3



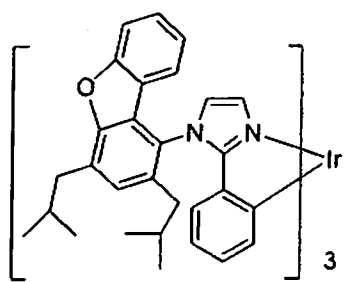
化合物 4



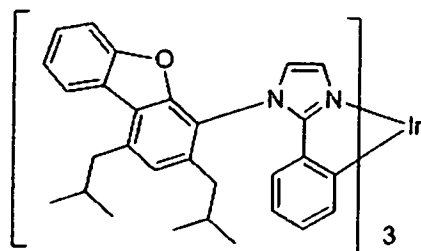
化合物 5



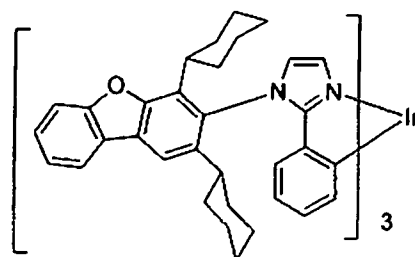
化合物 6



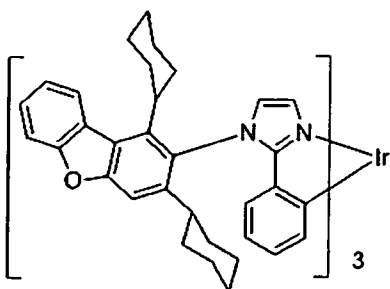
化合物 7



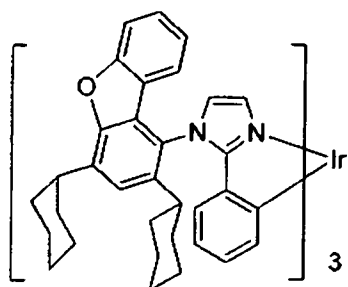
化合物 8



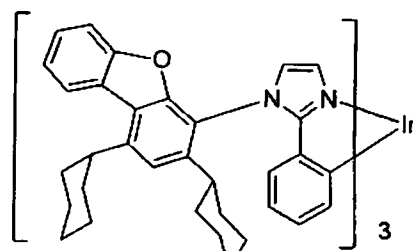
化合物 9



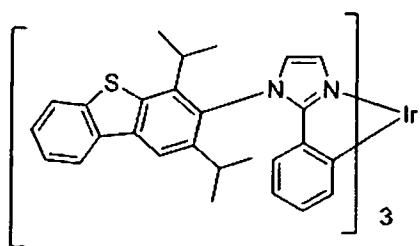
化合物 10



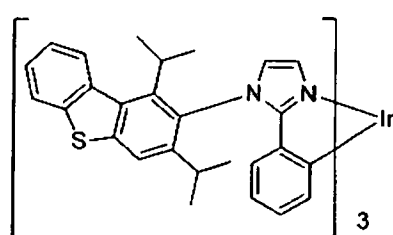
化合物 11



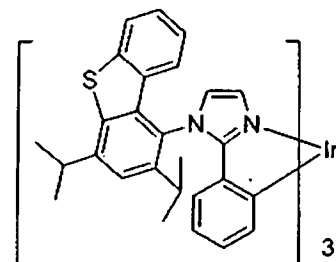
化合物 12



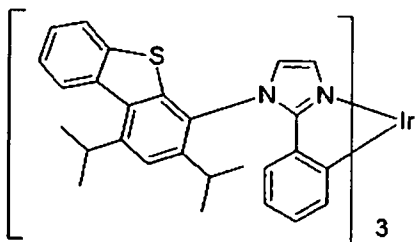
化合物 13



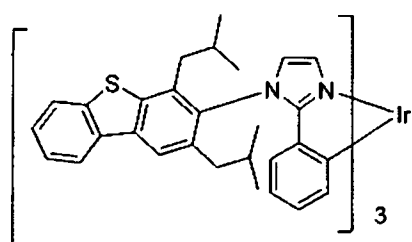
化合物 14



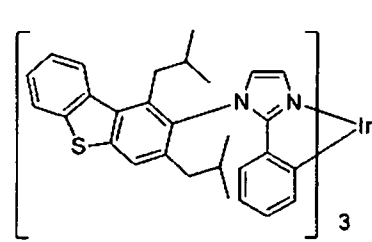
化合物 15



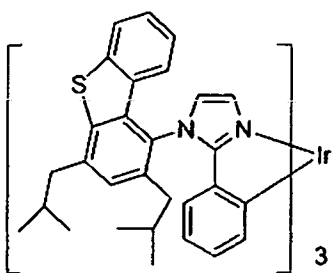
化合物 16



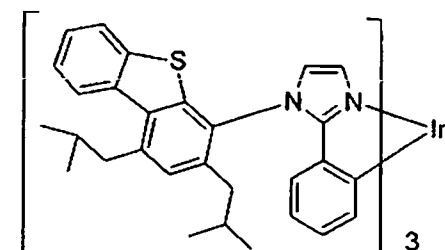
化合物 17



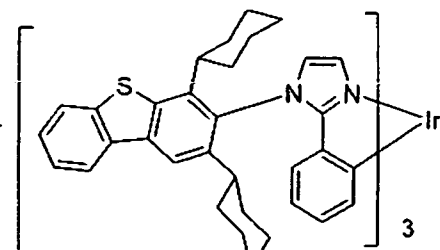
化合物 18



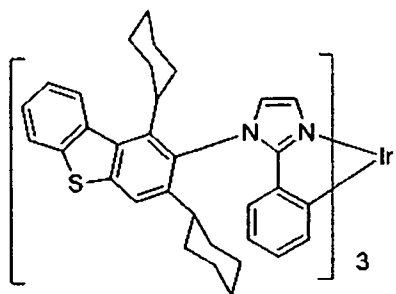
化合物 19



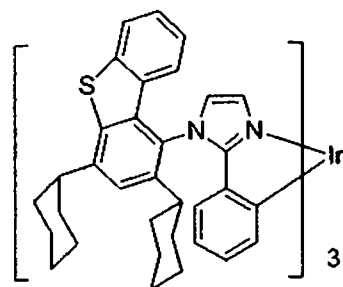
化合物 20



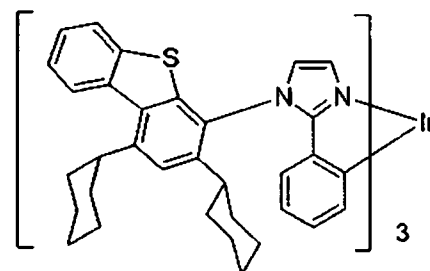
化合物 21



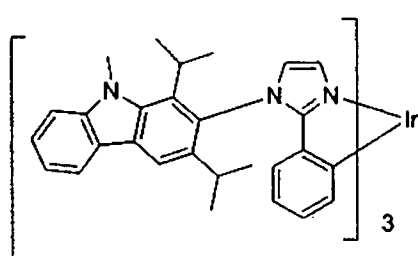
化合物 22



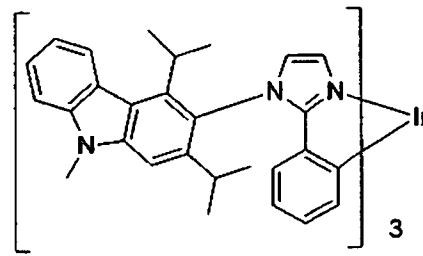
化合物 23



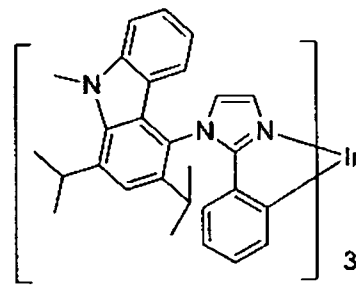
化合物 24



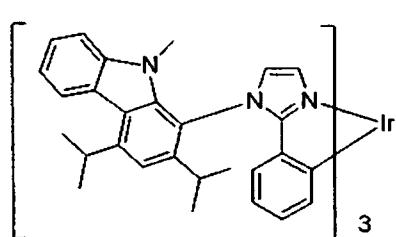
化合物 25



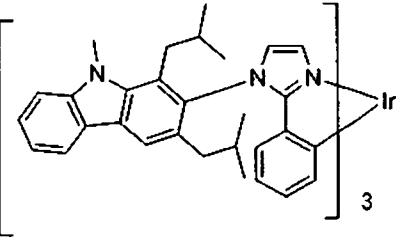
化合物 26



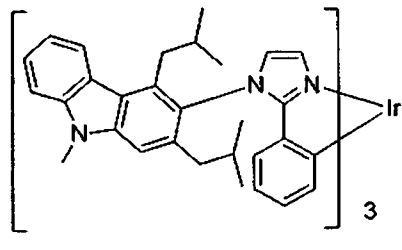
化合物 27



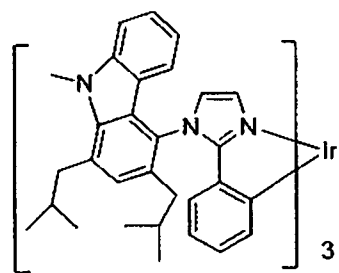
化合物 28



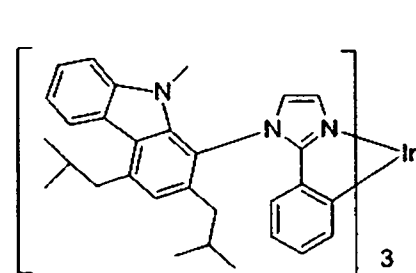
化合物 29



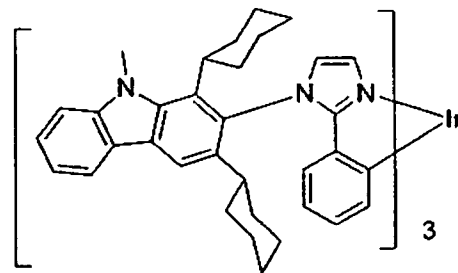
化合物 30



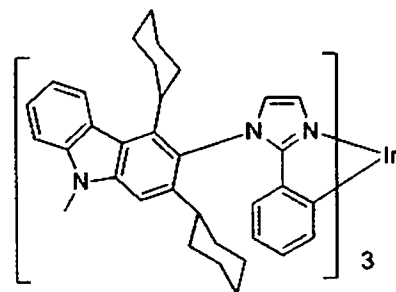
化合物 31



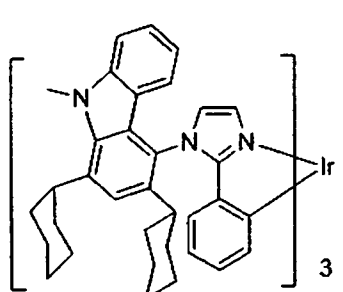
化合物 32



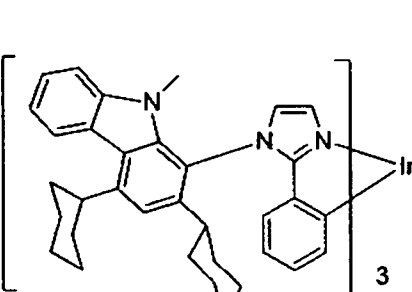
化合物 33



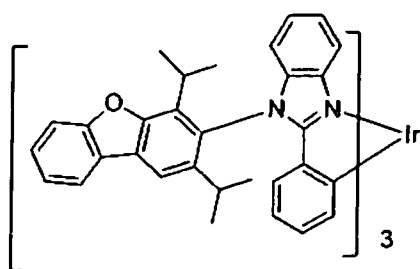
化合物 34



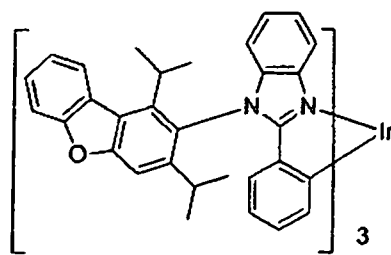
化合物 35



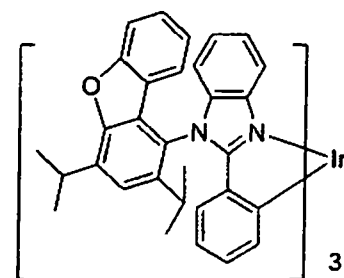
化合物 36



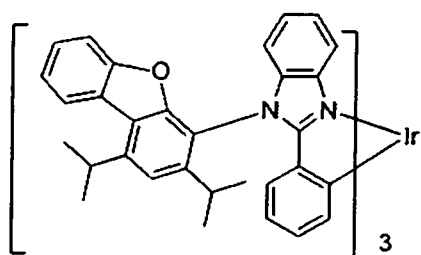
化合物 37



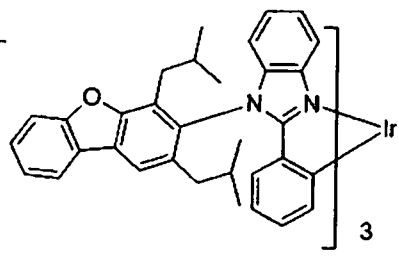
化合物 38



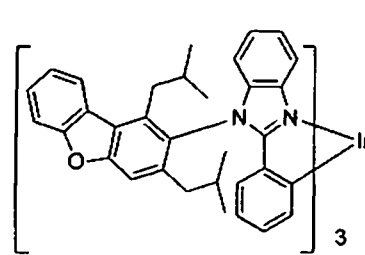
化合物 39



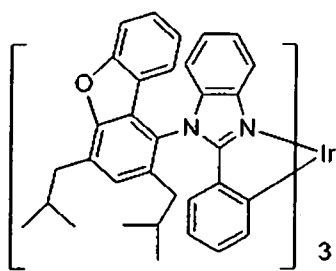
化合物 40



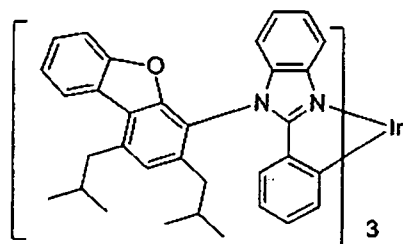
化合物 41



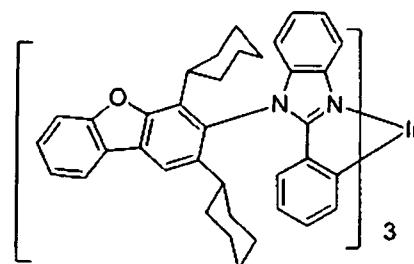
化合物 42



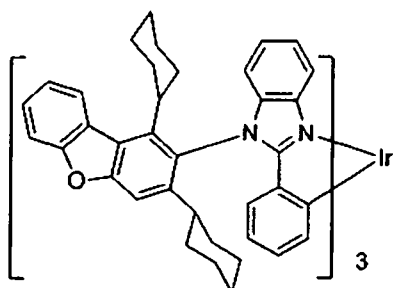
化合物 43



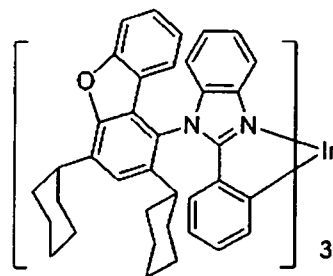
化合物 44



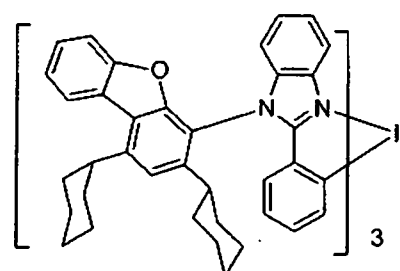
化合物 45



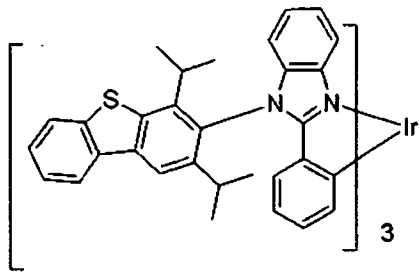
化合物 46



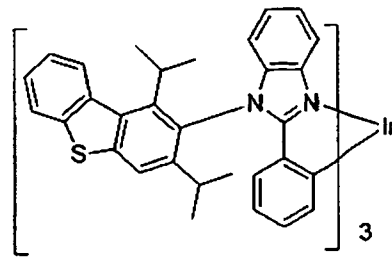
化合物 47



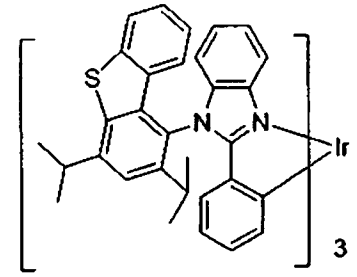
化合物 48



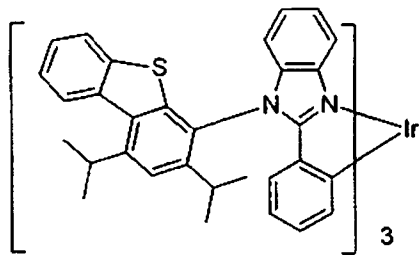
化合物 49



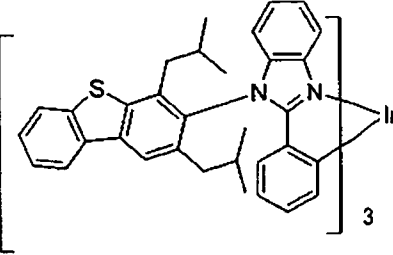
化合物 50



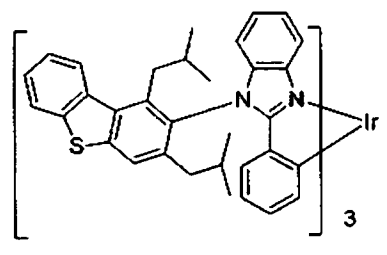
化合物 51



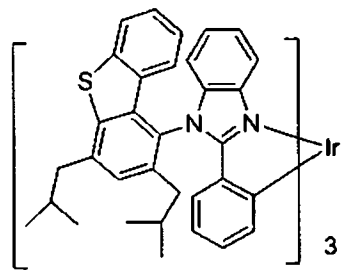
化合物 52



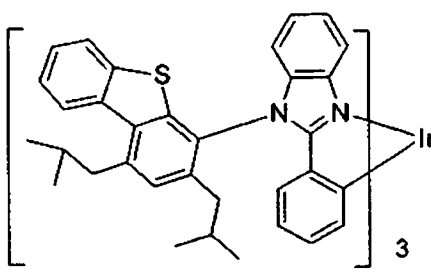
化合物 53



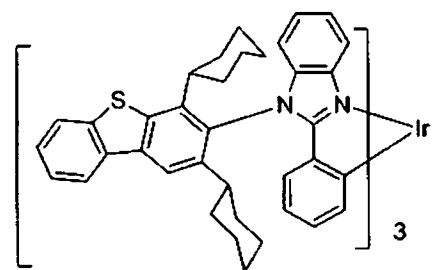
化合物 54



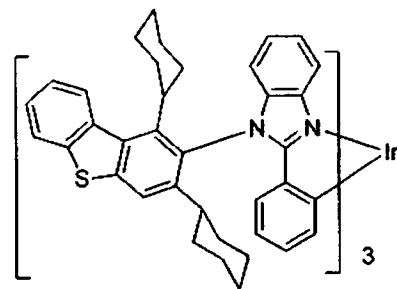
化合物 55



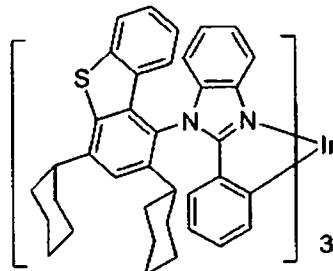
化合物 56



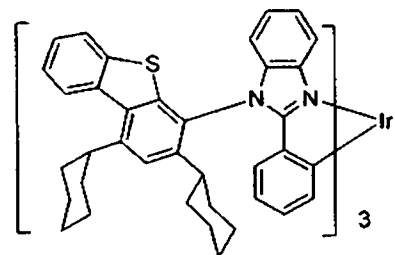
化合物 57



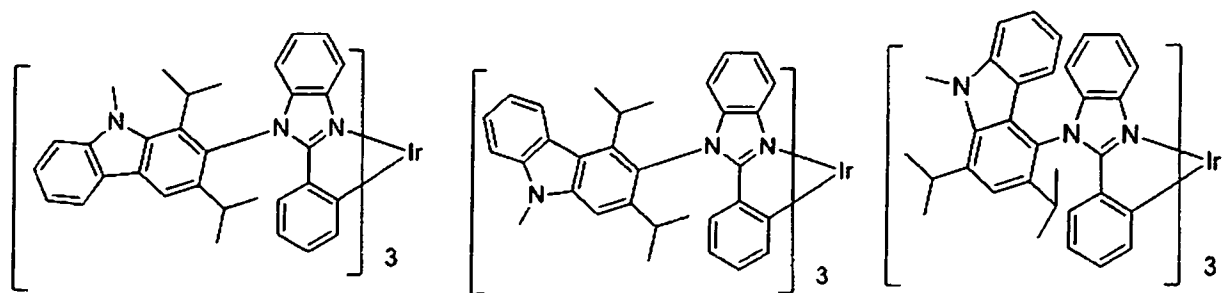
化合物 58



化合物 59



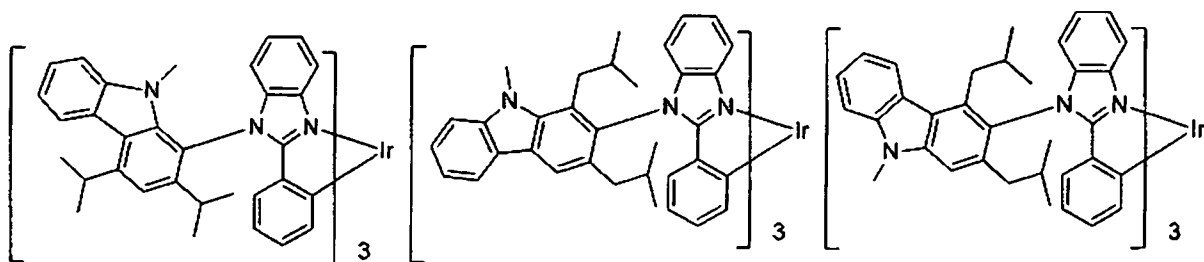
化合物 60



化合物 61

化合物 62

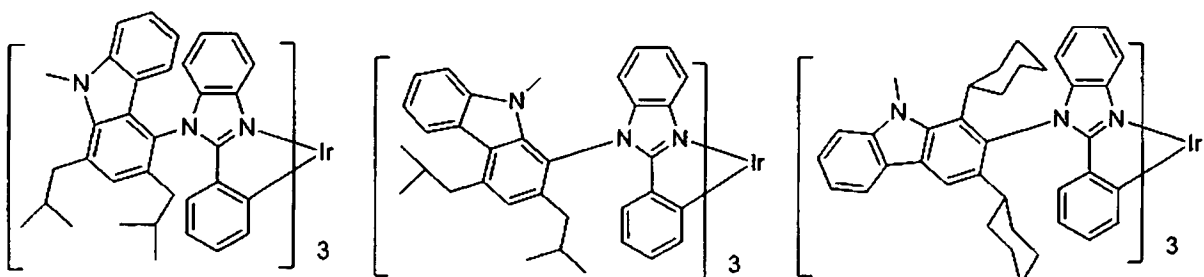
化合物 63



化合物 64

化合物 65

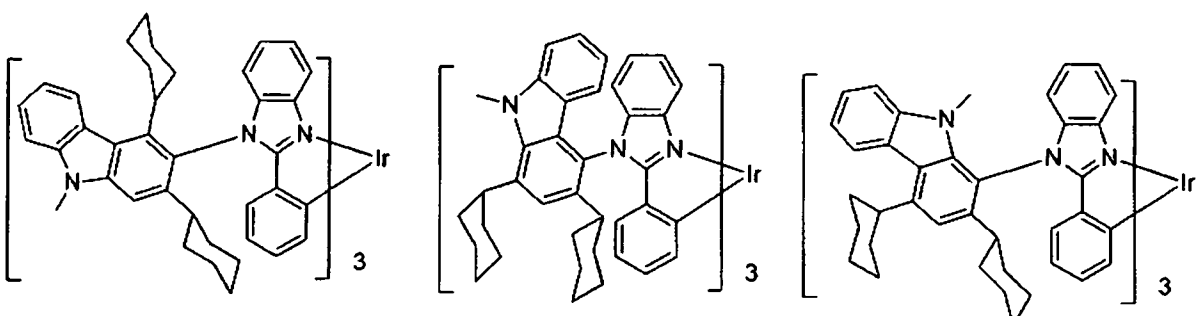
化合物 66



化合物 67

化合物 68

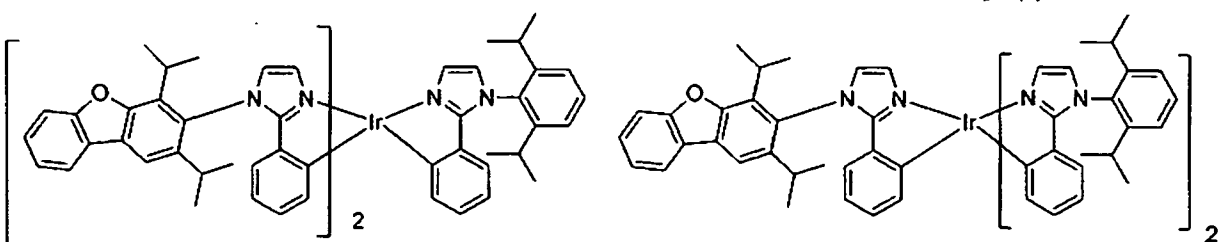
化合物 69



化合物 70

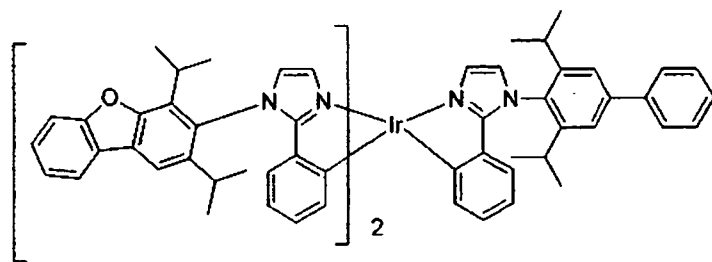
化合物 71

化合物 72

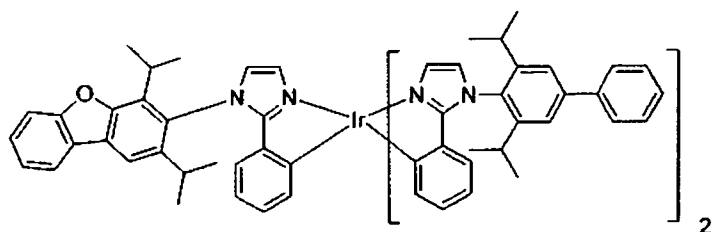


化合物 73

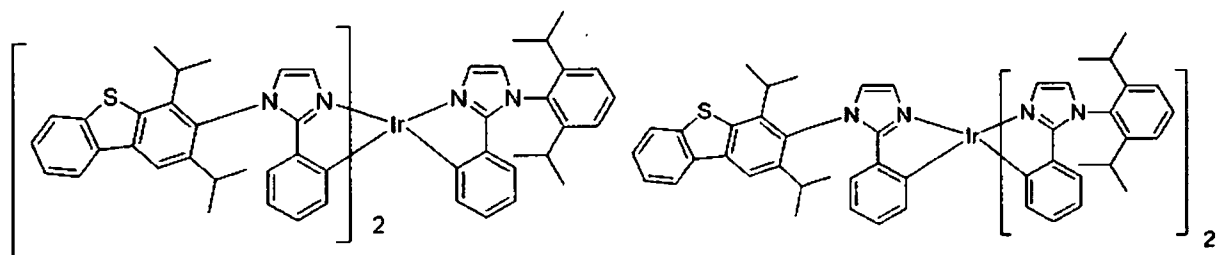
化合物 74



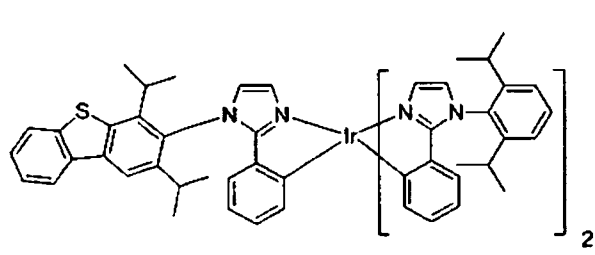
化合物 75



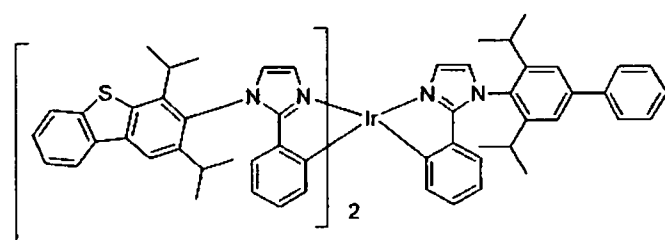
化合物 76



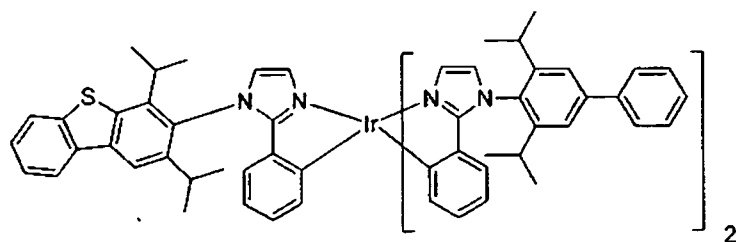
化合物 77



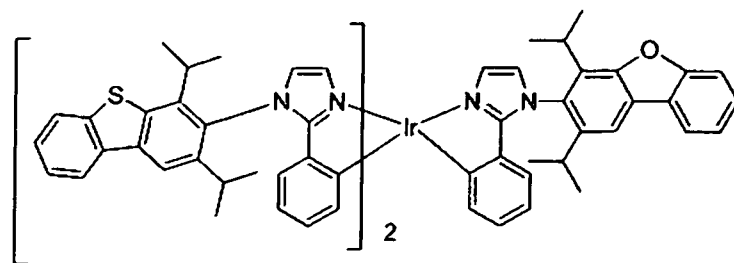
化合物 78



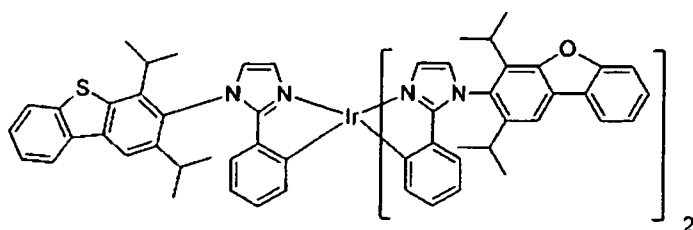
化合物 79



化合物 80



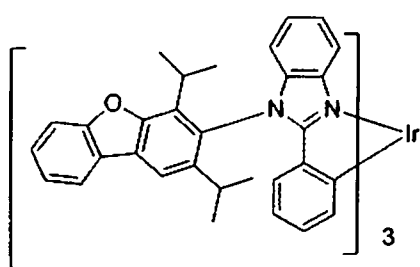
化合物 81



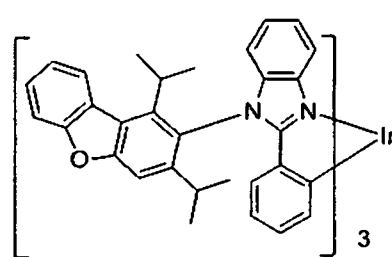
化合物 82

11. 如請求項1之化合物，其中 R_A 稠合至A。

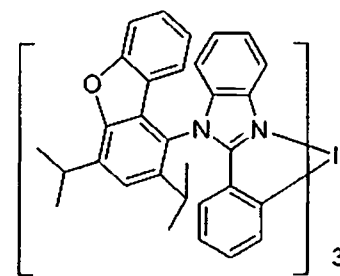
12. 如請求項11之化合物，其中該化合物選自由以下組成之群：



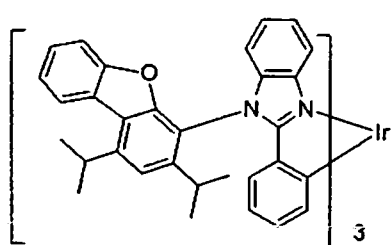
化合物 37



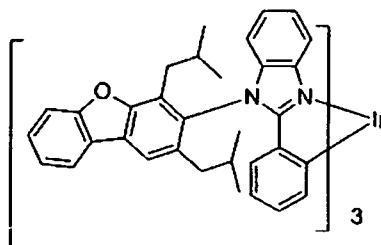
化合物 38



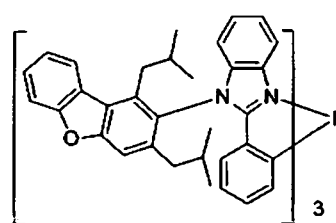
化合物 39



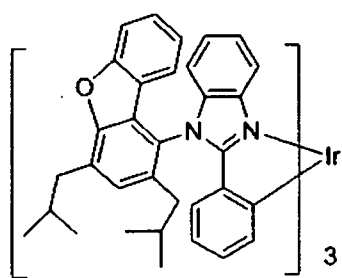
化合物 40



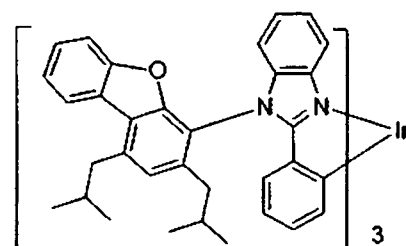
化合物 41



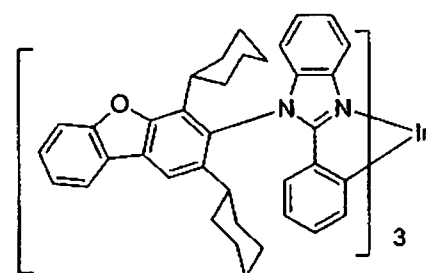
化合物 42



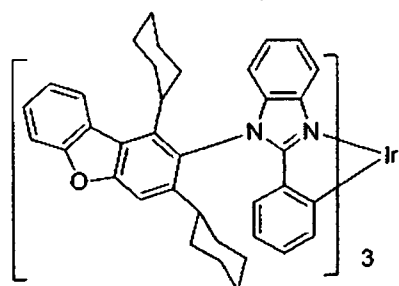
化合物 43



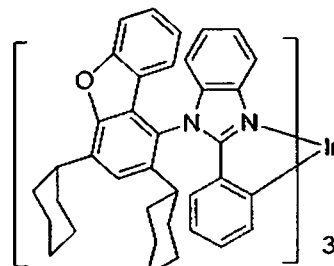
化合物 44



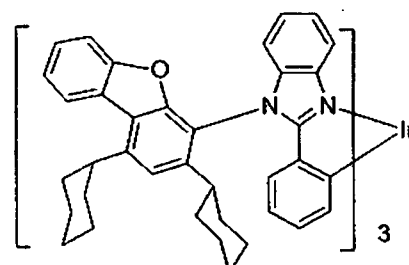
化合物 45



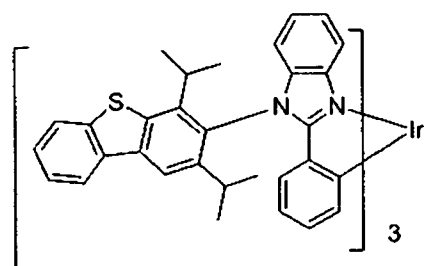
化合物 46



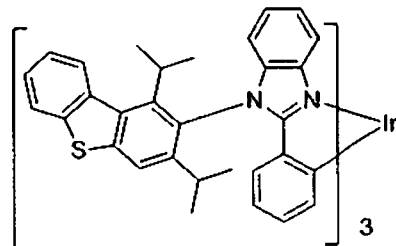
化合物 47



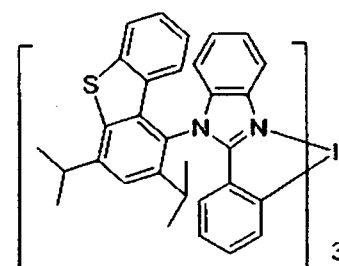
化合物 48



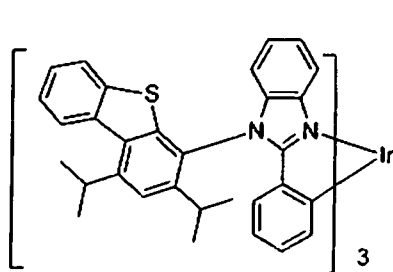
化合物 49



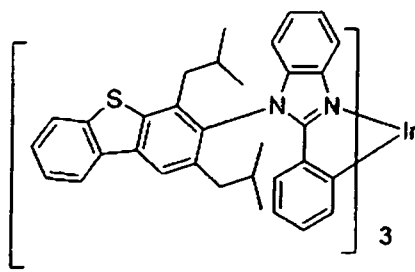
化合物 50



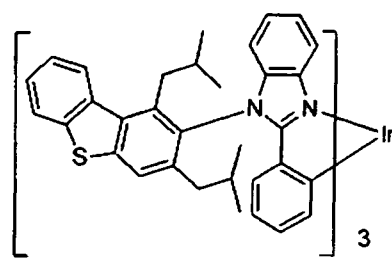
化合物 51



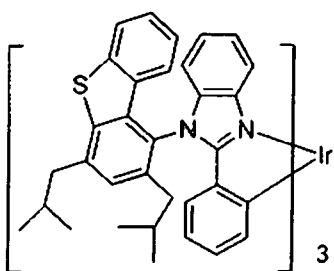
化合物 52



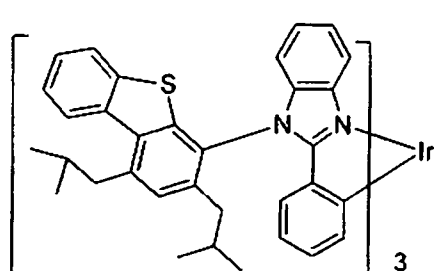
化合物 53



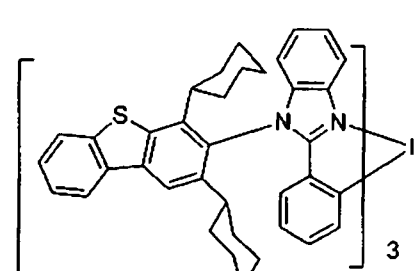
化合物 54



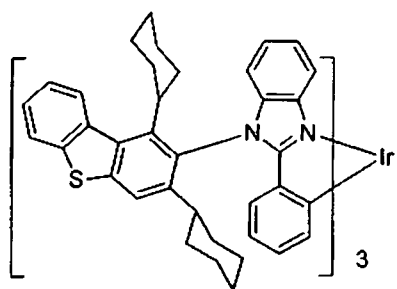
化合物 55



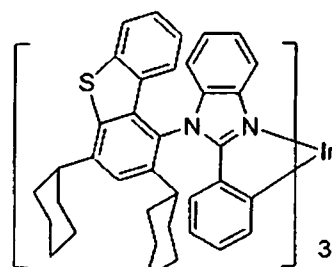
化合物 56



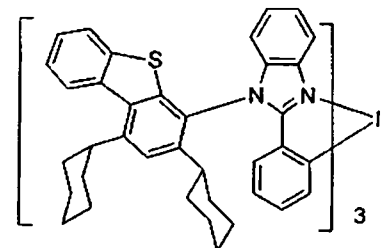
化合物 57



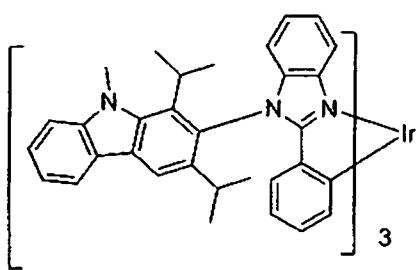
化合物 58



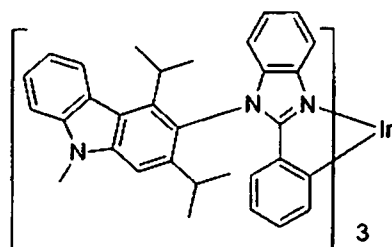
化合物 59



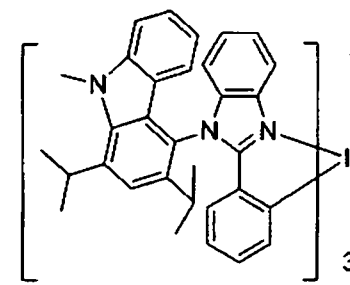
化合物 60



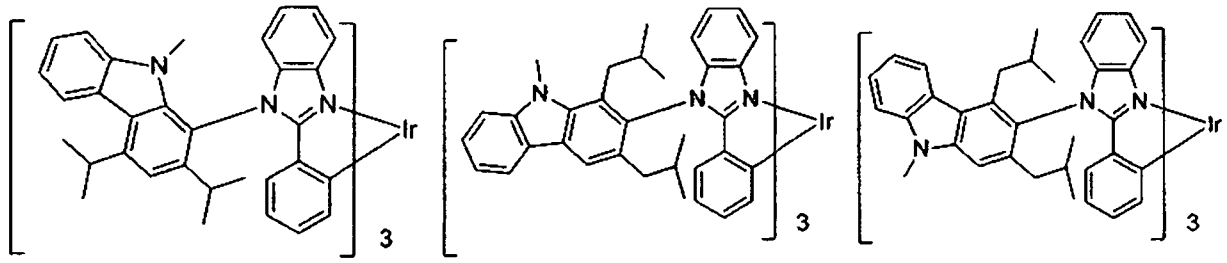
化合物 61



化合物 62



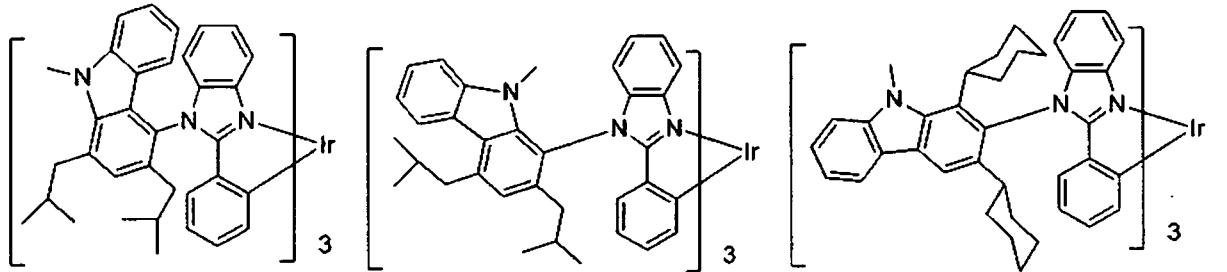
化合物 63



化合物 64

化合物 65

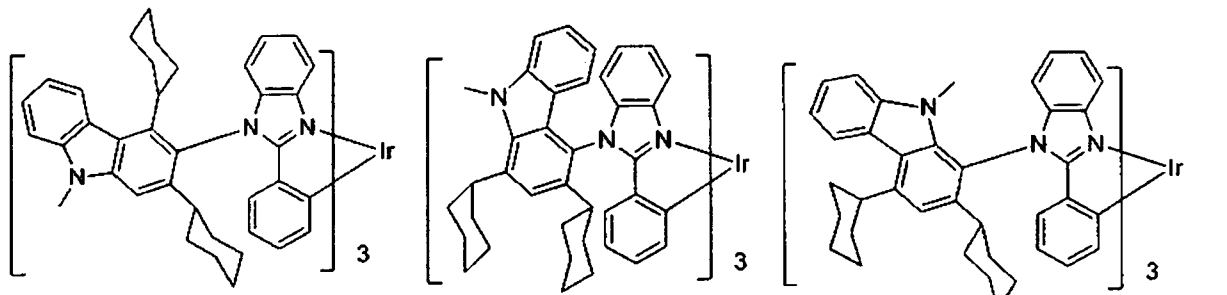
化合物 66



化合物 67

化合物 68

化合物 69



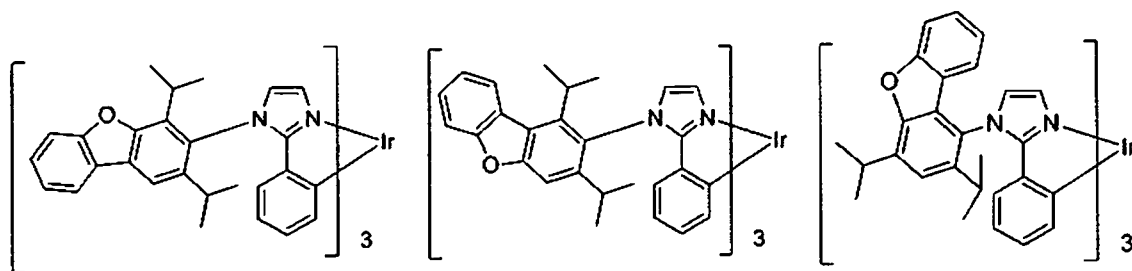
化合物 70

化合物 71

化合物 72

13. 如請求項1之化合物，其中X係O。

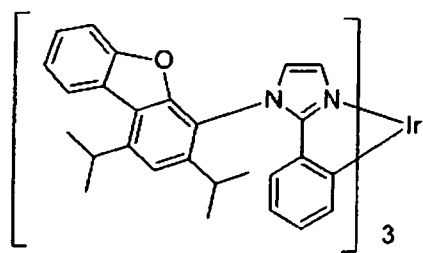
14. 如請求項13之化合物，其中該化合物選自由以下組成之群：



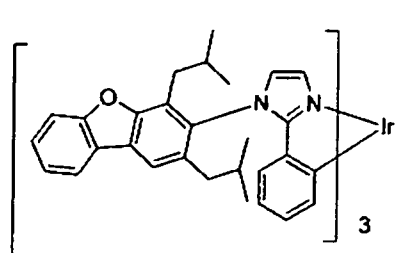
化合物 1

化合物 2

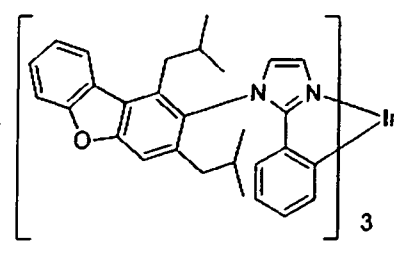
化合物 3



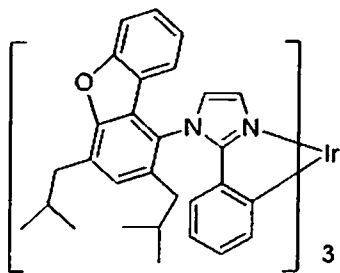
化合物 4



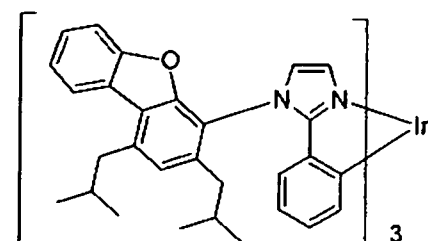
化合物 5



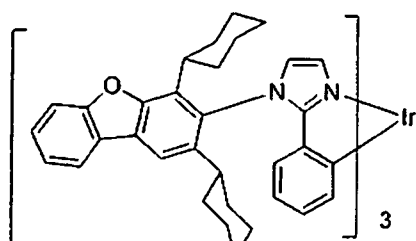
化合物 6



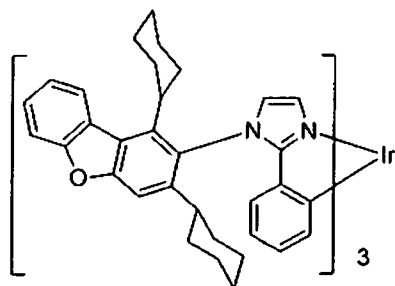
化合物 7



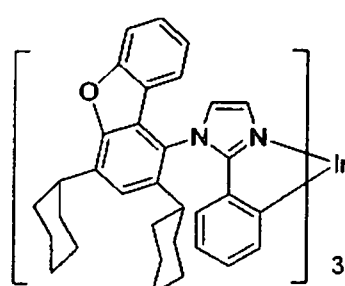
化合物 8



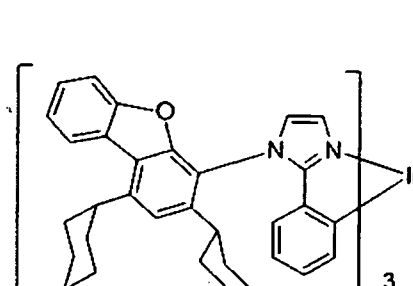
化合物 9



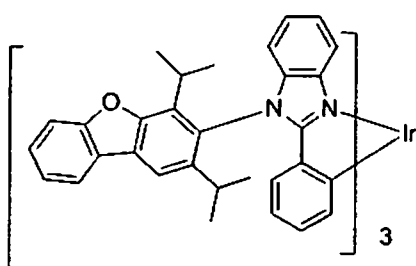
化合物 10



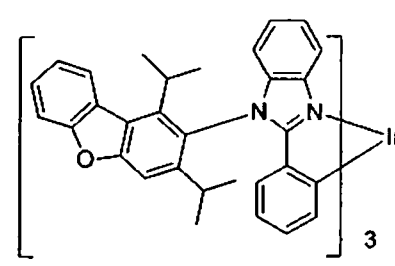
化合物 11



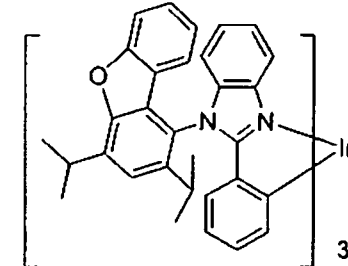
化合物 12



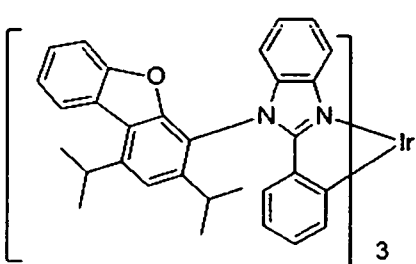
化合物 37



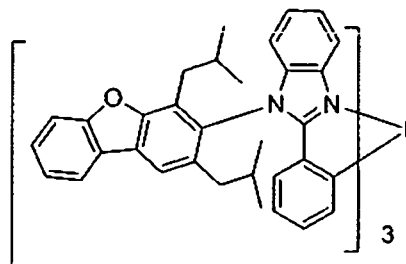
化合物 38



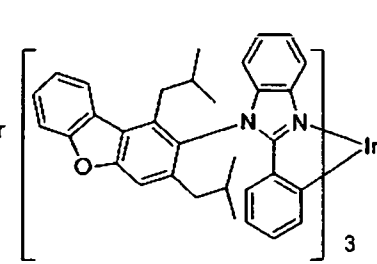
化合物 39



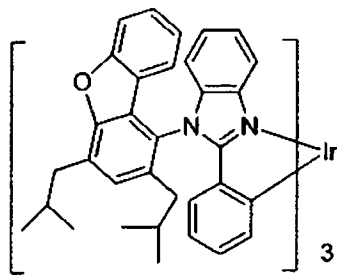
化合物 40



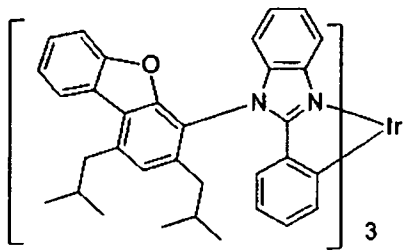
化合物 41



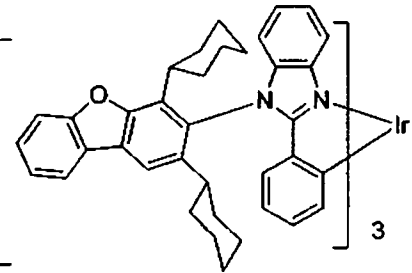
化合物 42



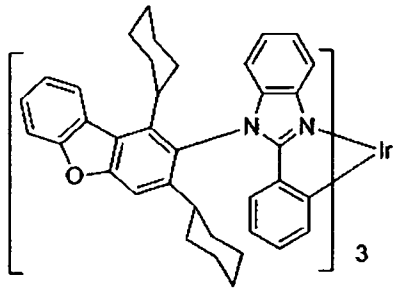
化合物 43



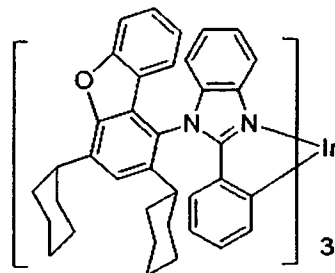
化合物 44



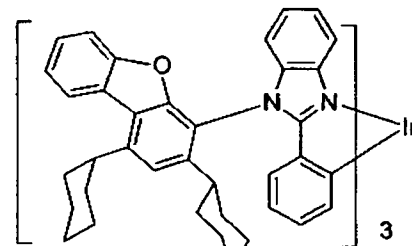
化合物 45



化合物 46



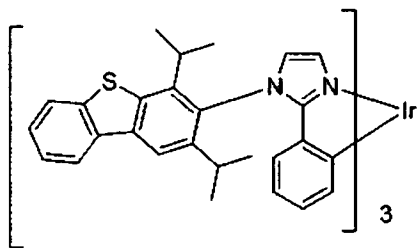
化合物 47



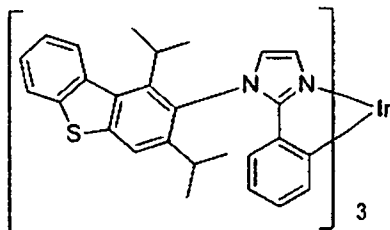
化合物 48

15. 如請求項1之化合物，其中X係S。

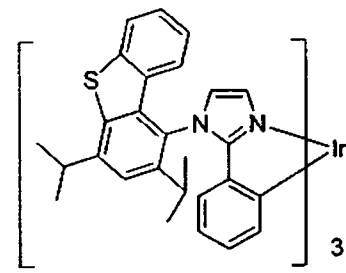
16. 如請求項15之化合物，其中該化合物選自由以下組成之群：



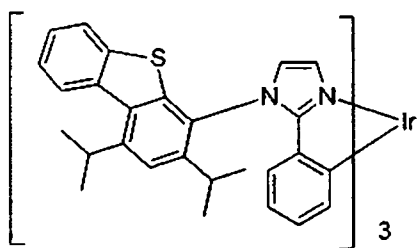
化合物 13



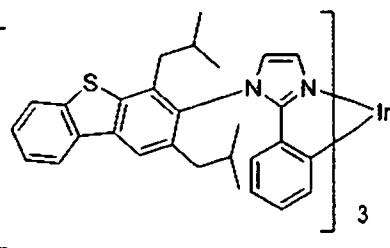
化合物 14



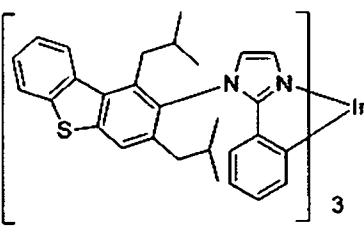
化合物 15



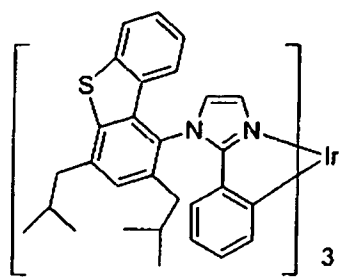
化合物 16



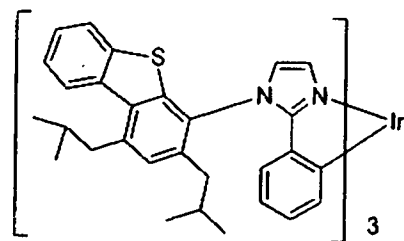
化合物 17



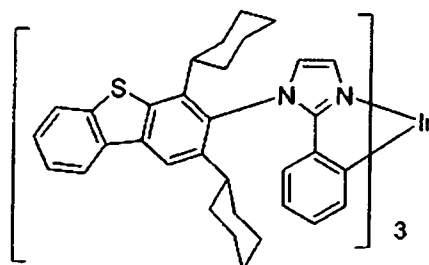
化合物 18



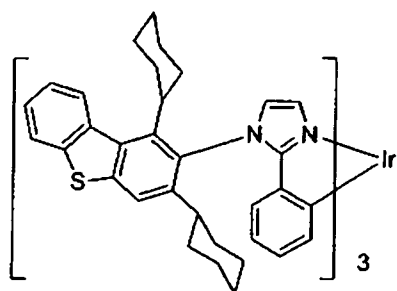
化合物 19



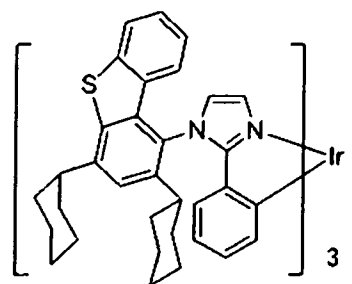
化合物 20



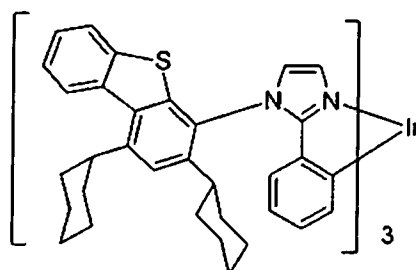
化合物 21



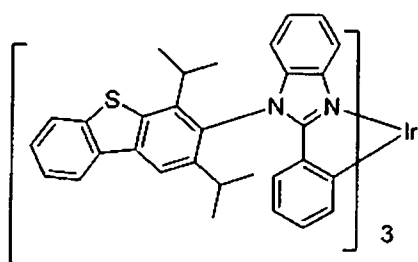
化合物 22



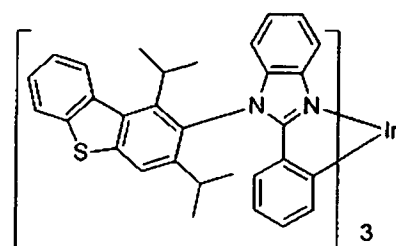
化合物 23



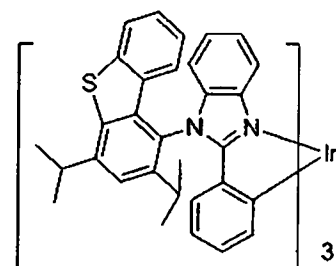
化合物 24



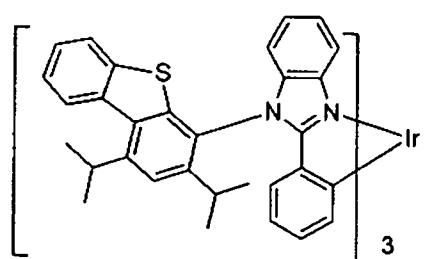
化合物 49



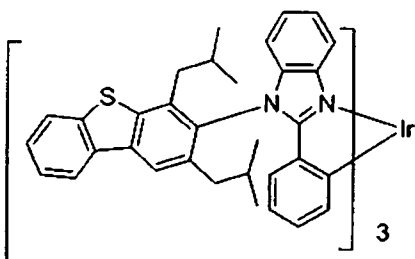
化合物 50



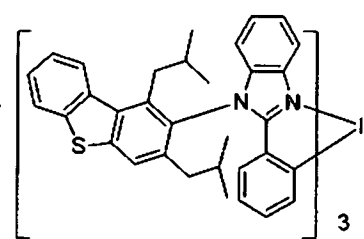
化合物 51



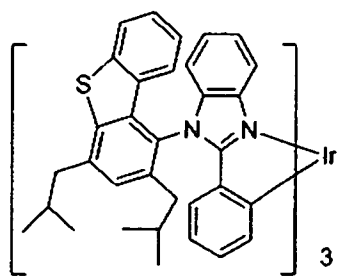
化合物 52



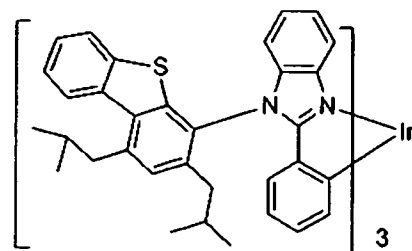
化合物 53



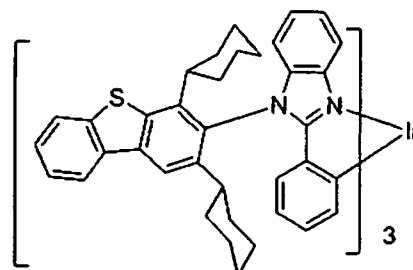
化合物 54



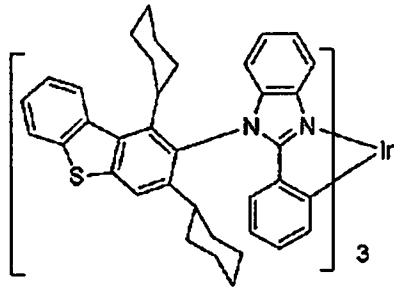
化合物 55



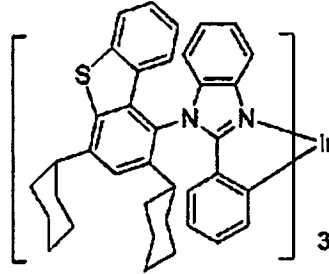
化合物 56



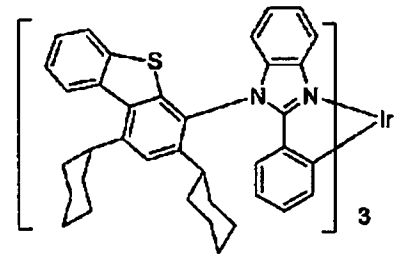
化合物 57



化合物 58



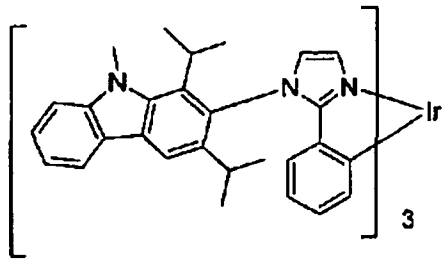
化合物 59



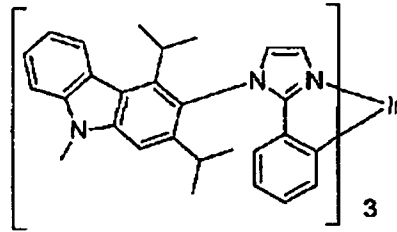
化合物 60

17. 如請求項1之化合物，其中X係NR。

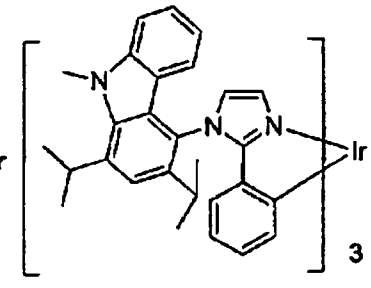
18. 如請求項17之化合物，其中該化合物選自由以下組成之群：



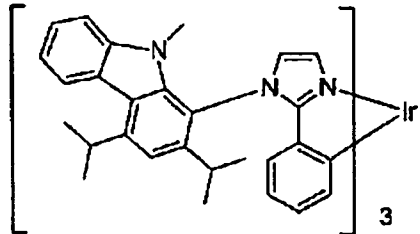
化合物 25



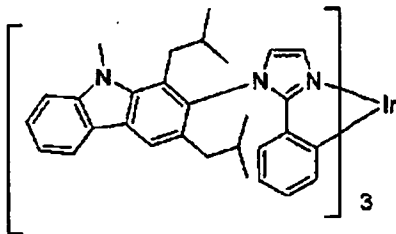
化合物 26



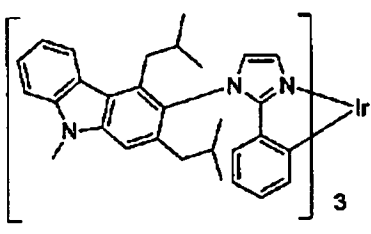
化合物 27



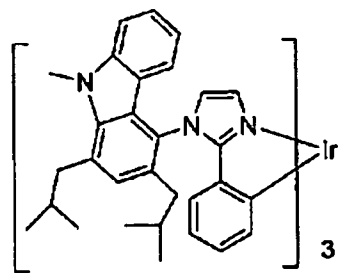
化合物 28



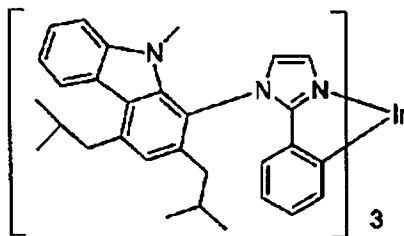
化合物 29



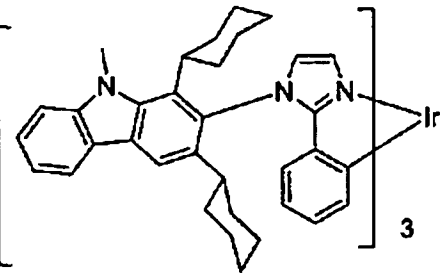
化合物 30



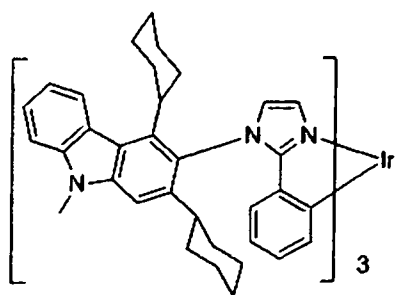
化合物 31



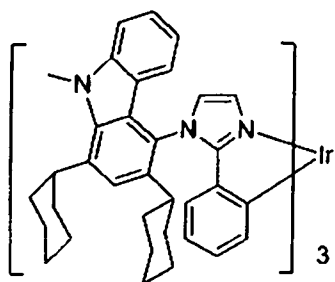
化合物 32



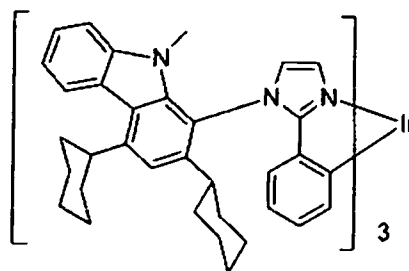
化合物 33



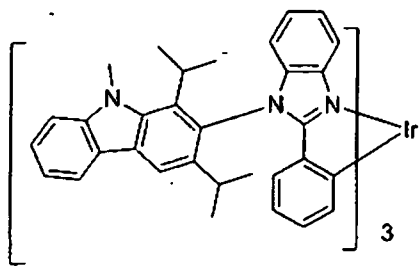
化合物 34



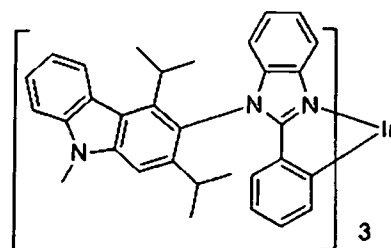
化合物 35



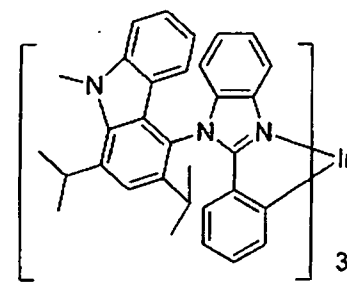
化合物 36



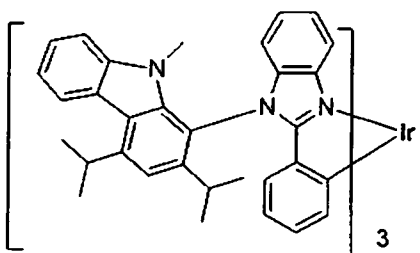
化合物 61



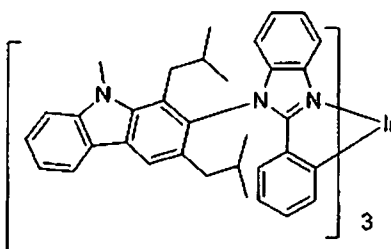
化合物 62



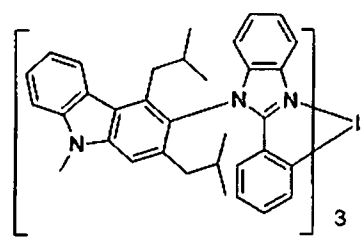
化合物 63



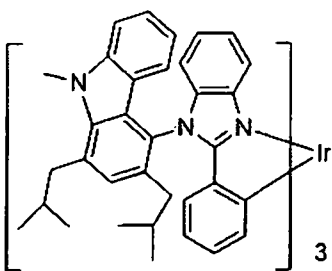
化合物 64



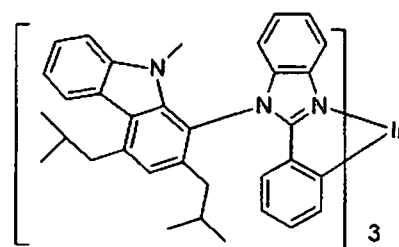
化合物 65



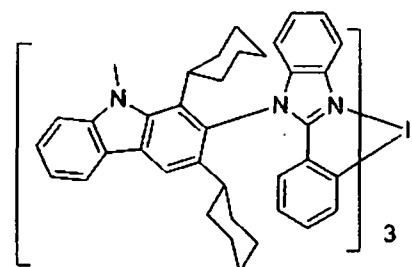
化合物 66



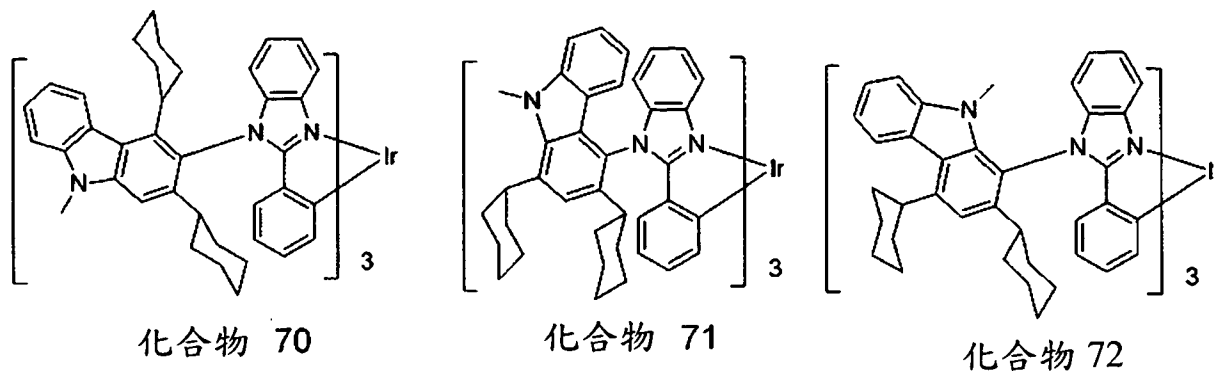
化合物 67



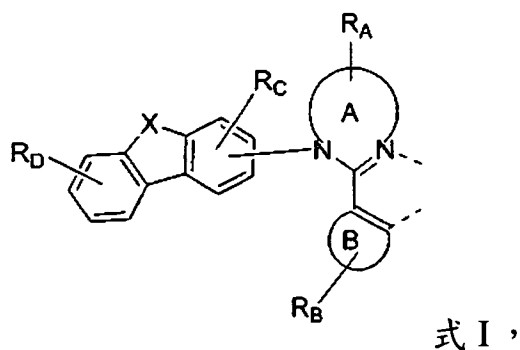
化合物 68



化合物 69



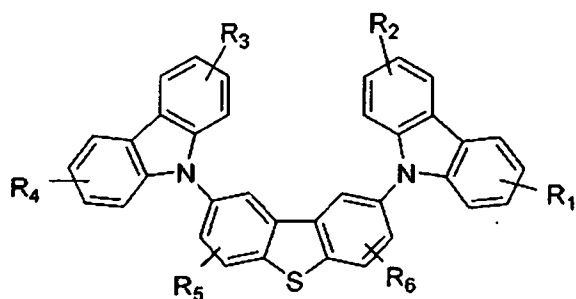
19. 一種包含有機發光裝置之第一裝置，其進一步包含：
 陽極；陰極；及
 有機層，其佈置於該陽極與該陰極之間，該有機層包含含有下式之配體L之化合物：



- 其中 A 為 5 員或 6 員雜環及 B 為 5 員或 6 員碳環；
 其中 R_A 、 R_B 及 R_D 代表單、二、三或四取代；
 其中 R_A 、 R_B 及 R_D 獨立地選自氫、鹵素、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳基及雜芳基；
 其中 X 選自由 CRR'、NR、O 及 S 組成之群；
 其中 R 及 R' 獨立地選自由烷基及芳基組成之群；
 其中該配體 L 係配位至 Ir；且
 其中 R_C 係兩個烷基取代基。

20. 如請求項 19 之第一裝置，其中該第一裝置係消費產品。

21. 如請求項19之第一裝置，其中該有機層係發射層且該化合物係發射摻雜物。
22. 如請求項21之第一裝置，其中該有機層進一步包含具有下式之主體材料：



其中 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 獨立地選自由氫、烷基及芳基組成之群。

八、圖式：

公告本

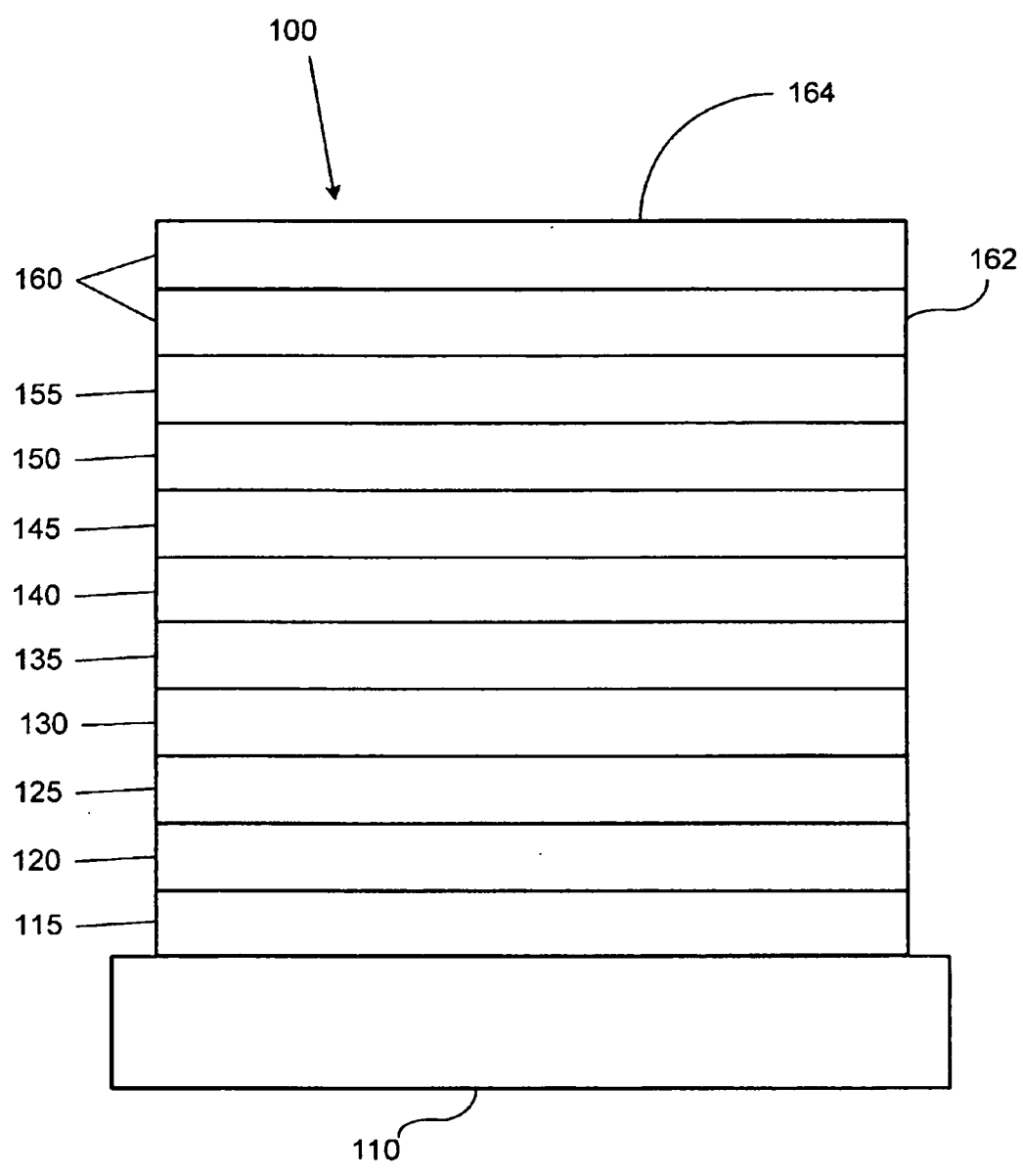


圖 1

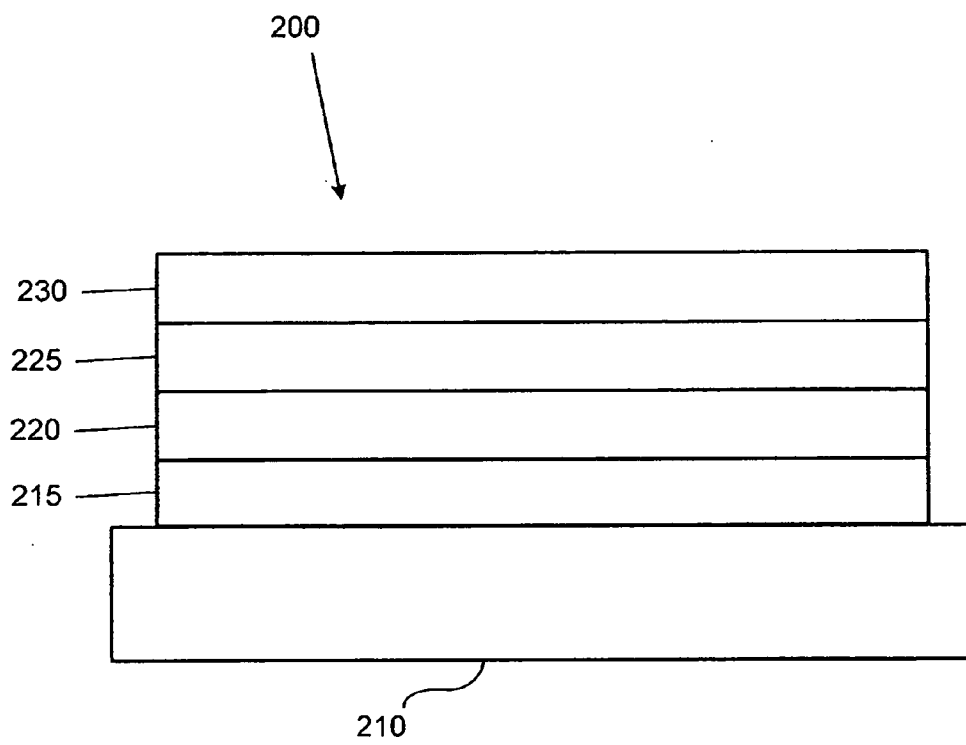


圖 2

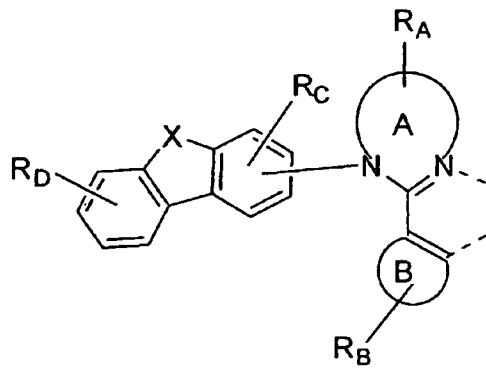


圖 3