



(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 I543983 B

(45)公告日：中華民國 105 (2016) 年 08 月 01 日

(21)申請案號：099110623

(22)申請日：中華民國 99 (2010) 年 04 月 06 日

(51)Int. Cl.：

*C07D491/048(2006.01)**C07D495/04 (2006.01)**C07D221/16 (2006.01)**C07F15/00 (2006.01)**C09K11/06 (2006.01)**H01L51/50 (2006.01)*

(30)優先權：2009/04/06 美國

61/167,014

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

美國

(72)發明人：雷巴布 丹尼希 RAYABARAPU, DINESH (IN)；夏傳軍 XIA, CHUANJUN (CN)；
 鄺志遠 KWONG, RAYMOND (US)；馬斌 MA, BIN (US)；亞吉爾 渥特 YEAGER,
 WALTER (US)；艾里 伯特 ALLEYNE, BERT (TT)

(74)代理人：陳長文

(56)參考文獻：

CN 101076902A

JP 2005-276799A

US 7445857B2

US 2003/0068535A1

US 2005/0119485A1

US 2008/0261076A1

WO 2004/044089A1

審查人員：陳衍任

申請專利範圍項數：30 項 圖式數：4 共 123 頁

(54)名稱

包含新穎配位體結構之金屬錯合物

METAL COMPLEX COMPRISING NOVEL LIGAND STRUCTURES

(57)摘要

本發明提供包括具有新穎配位體之金屬錯合物之化合物。具體言之，該化合物為包含新穎氮雜 DBX 配位體之銨錯合物。該等化合物可用於有機發光裝置中(具體言之作為發光摻雜劑)，提供經提高之效能、低操作電壓、及長使用壽命。

Compounds comprising a metal complex having novel ligands are provided. In particular, the compound is an iridium complex comprising novel aza DBX ligands. The compounds may be used in organic light emitting devices, particularly as emitting dopants, providing improved efficiency, low operating voltage, and long lifetime.

指定代表圖：

符號簡單說明：
(無元件符號說明)

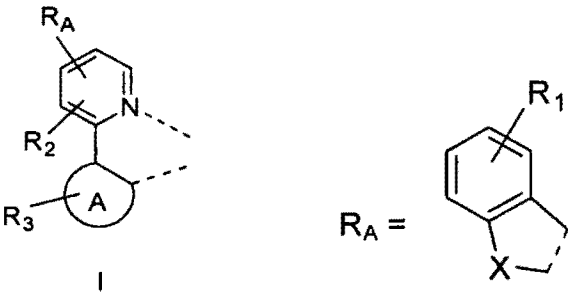
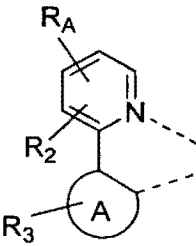


圖 3

特徵化學式：



化學式 I

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：99110623

C01D 49/48 (2006.01)

※ 申請日：99.4.6

※IPC 分類：C01D 49/4 (2006.01)

一、發明名稱：(中文/英文)

C01D 21/16 (2006.01)

包含新穎配位體結構之金屬錯合物

C01F 5/00 (2006.01)

METAL COMPLEX COMPRISING NOVEL LIGAND STRUCTURES

C01K 5/06 (2006.01)

二、中文發明摘要：

H01L 51/00 (2006.01)

本發明提供包括具有新穎配位體之金屬錯合物之化合物。具體言之，該化合物為包含新穎氮雜DBX配位體之銥錯合物。該等化合物可用於有機發光裝置中(具體言之作為發光摻雜劑)，提供經提高之效能、低操作電壓、及長使用壽命。

三、英文發明摘要：

Compounds comprising a metal complex having novel ligands are provided. In particular, the compound is an iridium complex comprising novel aza DBX ligands. The compounds may be used in organic light emitting devices, particularly as emitting dopants, providing improved efficiency, low operating voltage, and long lifetime.

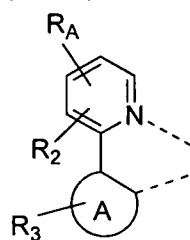
四、指定代表圖：

(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：



化學式 I

六、發明說明：

【發明所屬之技術領域】

本發明係關於可適用於有機發光裝置中之有機材料。更具體言之，本發明係關於包括具有新穎配位體結構之金屬錯合物之化合物及併入該等化合物之裝置。

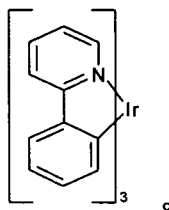
【先前技術】

利用有機材料之光電裝置由於眾多原因而日漸變得值得一提。適用於製造該等裝置之許多材料相對廉價，因此，光電裝置具有超越無機裝置之成本優勢。此外，有機材料之固有性質(諸如其可撓性)可令其極適用於特定設備，諸如於可撓基材上之製品。有機光電裝置之實例包括有機發光裝置(OLED)、有機光電電晶體、有機光電伏特電池、及有機光偵測器。就OLED而言，有機材料可具有超過習知材料之性能優點。例如，有機發光層發光之波長一般可利用合適之摻雜劑極易調諧。

OLED利用有機薄膜，此薄膜在跨裝置之兩端施加電壓時發光。OLED成為適用於裝置(諸如平面顯示器、照明、及背光源)中之日漸優異之技術。數種OLED材料及組態描述於美國專利編號5,844,363、6,303,238、及5,707,745中，該等專利係以引用的方式併入全文。

發磷光分子之其中一種裝置為全彩色顯示器。此種顯示器之工業標準需要適於發射特定色彩之像素，亦稱為「標準」色彩。具體言之，該等標準需要飽和之紅、綠、及藍像素。色彩可採用技術界習知之CIE座標進行測定。

發綠光分子之一個實例為三(2-苯基吡啶)銱，命名為 $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ ，其具有以下結構：



文中，在此、及後來之圖式中，吾們係以直線描繪自氮至金屬(此處為Ir)之配位鍵。

文中所用之短語「有機」包括聚合性材料，以及可適用於製造有機光電裝置之小分子有機材料。「小分子」係指非聚合物之任一有機材料，且實際上，「小分子」可能相當大。在一些情況下，小分子等者可包括重複單元。例如，採用長鏈烷基作為取代基無法使分子從「小分子」類移去。小分子等者亦可例如以聚合物主鏈上之側基或作為該主鏈之部分的形式包含於聚合物中。小分子等者亦可作為由一系列累積於該芯部分上之化學殼組成之樹枝狀聚合物之芯部分。樹枝狀聚合物之該芯部分可為螢光或磷光之小分子發射器。樹脂狀聚合物可為「小分子」，且茲認為，當前，適用於OLED領域中之所有樹枝狀聚合物皆為小分子等者。

文中所用之「頂端」意指離開基材最遠之處，而「底端」意指相對基材最近之處。將第一層描述為「覆置於」第二層上時，則該第一層離基材更遠之處。在介於第一及第二層之間可能有其他層，除非指明第一層係「接觸於」

第二層。例如，即使之間有多層有機層，陰極仍可描述為「覆置於」陽極上。

文中所用之「溶液可處理」意指具有可在流體介質(呈溶液或懸浮液形式)中溶解、分散、或傳輸且/或可自流體介質(呈溶液或懸浮液形式)發生沈積。

當相信一配位體直接促進發光材料之光敏性質時，該配位體可稱為「光敏性」。當相信一配位體無法促進發光材料之光敏性質時，該配位體可稱為「輔助」，但輔助配位體可能改變光敏性配位體之性質。

如文中所用且如熟習此項相關技術之人士大體上所瞭解，假如第一能階較接近於真空能階，則第一「最高佔用分子軌道」(HOMO)或「最低未佔用分子軌道」(LUMO)能階係「大於」或「高於」第二HOMO或LUMO能階。由於離子化電位(IP)係經測定為相對於真空階之負能，故較高HOMO能階對應於具有較小絕對值之IP(負數較小之IP)。類似地，較高LUMO能階對應於具有較小絕對值之電子親和勢(EA)(負數較小之EA)。在習知之能階圖上，真空階在頂端，材料之LUMO能階高於相同材料之HOMO能階。「較高」的HOMO或LUMO能階比「較低」的HOMO或LUMO能階出現在更接近該圖之頂端。

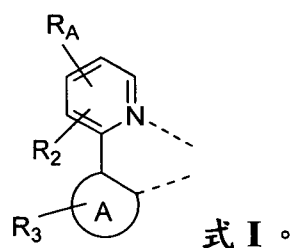
如文中所用且如熟習此項相關技術之人士大體上所瞭解，假如第一功函數具有較高之絕對值，則第一功函數係「大於」或「高於」第二功函數。由於功函數一般係經測定為相對於真空階之負數，故此點意指「較高」功函數之

負數較大。在習知之能階圖上，真空階係在頂端，「較高」功函數係經繪示為在向下方向上離開真空階更遠。因此，HOMO及LUMO能階之定義係遵循不同於功函數之通用法。

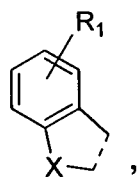
有關於OLED之更多細節及上述之該等定義可於US專利號7,279,704中發現，該專利係以引用的方式併入全文。

【發明內容】

本發明提供包括具有新穎配位體結構之金屬錯合物之化合物。該等化合物可適用於有機發光裝置中。具體言之，該等化合物可於該等裝置中作為發磷光摻雜劑。該等新穎化合物包含具有以下結構之配位體：



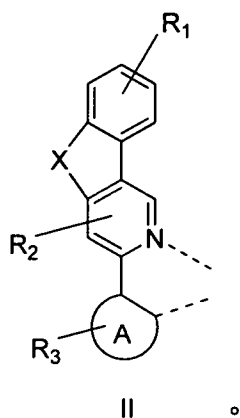
A為5員或6員之芳香環或雜芳環。在一個態樣中，較佳，係A為苯。在另一個態樣中，較佳，係A選自由呋喃、噻吩及吡咯組成之群。R_A為具有以下結構之取代基：



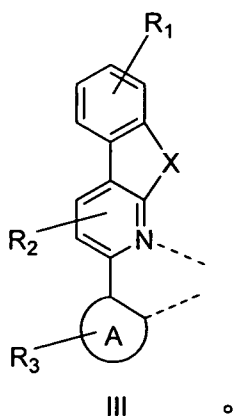
其中該取代基稠合至式I之吡啶環。出現於該結構中之虛線指明該取代基稠合至化學式I之吡啶環之處。X選自由

CRR'、C=O、BR、O、S、及Se組成之群。R及R'獨立地選自氫及烷基。R₁、R₂、及R₃可代表單、二、三、或四取代；R₁、R₂、及R₃各自獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基、及雜芳基組成之群。該配位體係配位至具有大於40之原子量之金屬。較佳，金屬為Ir。

在一個態樣中，提供包含具有以下結構之氮雜二苯并取代之(aza-DBX)配位體之化合物：

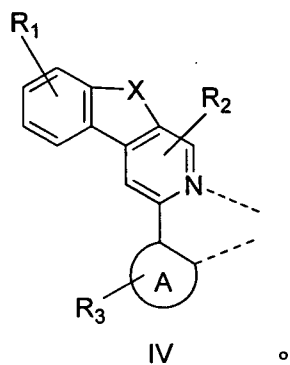


在另一個態樣中，提供其中該等配位體具有以下結構之化合物：

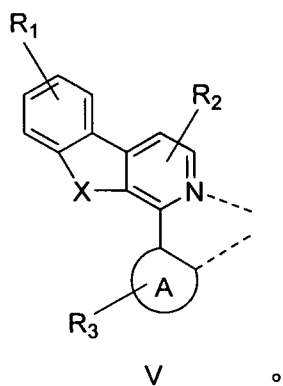


然而，在另一個態樣中，提供其中該等配位體具有以下

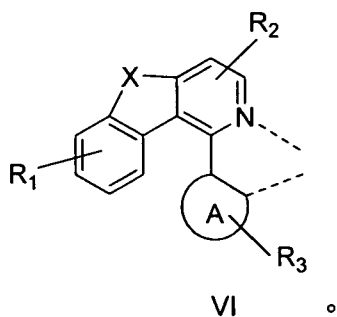
結構之化合物：



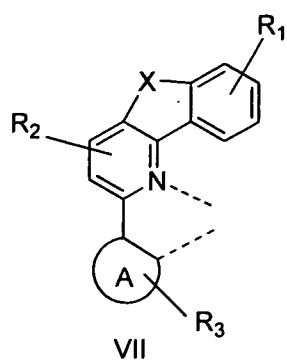
然而，在另一個態樣中，提供其中該等配位體具有以下結構之化合物：



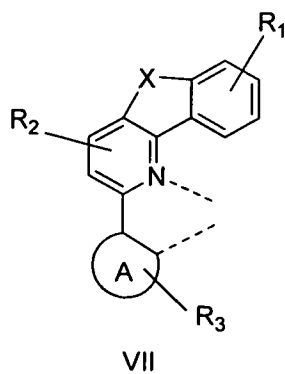
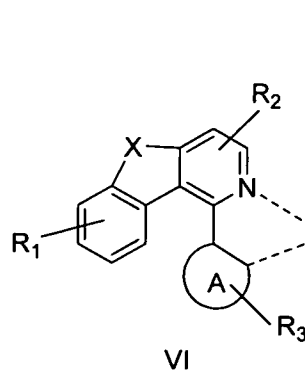
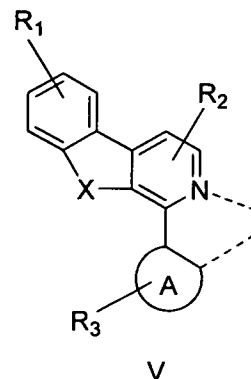
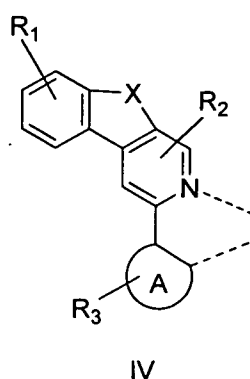
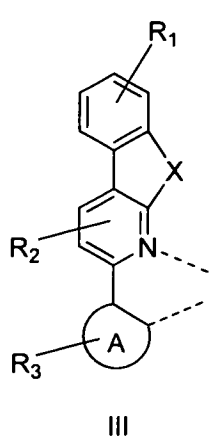
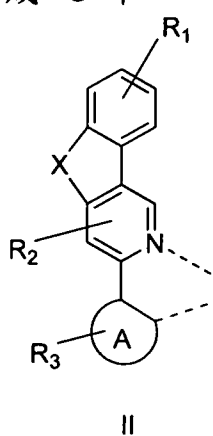
然而，在另一個態樣中，提供其中該等配位體具有以下結構之化合物：



在進一步之態樣中，提供其中該等配位體具有以下結構之化合物：

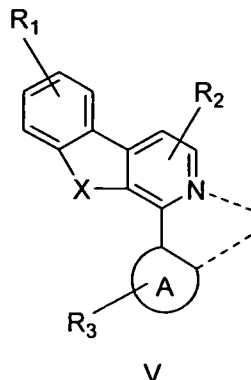
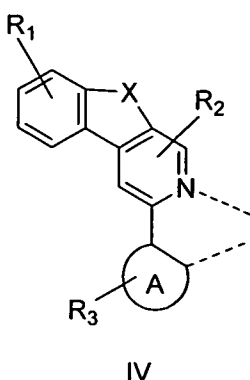
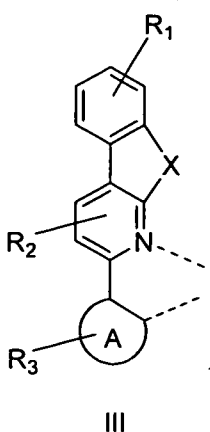
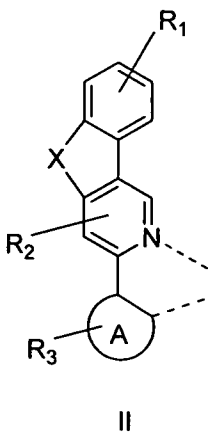


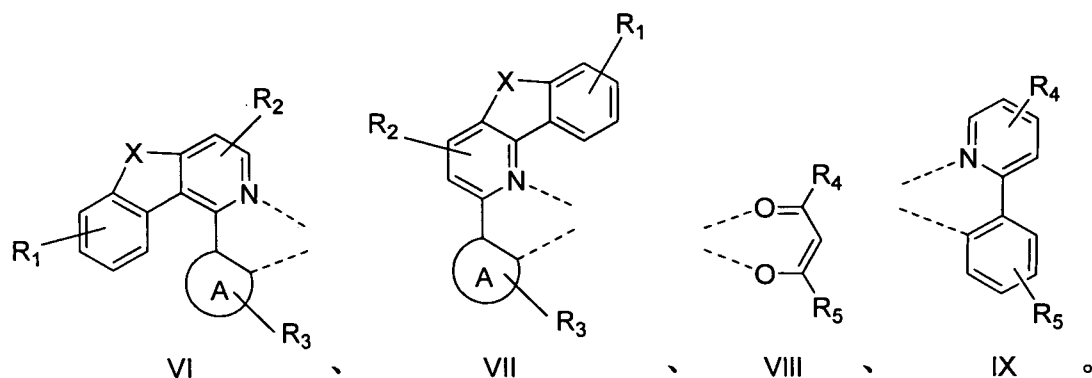
較佳，該化合物具有化學式 $(L)_n(L')_{3-n}Ir$ 。L選自由以下組成之群：



及

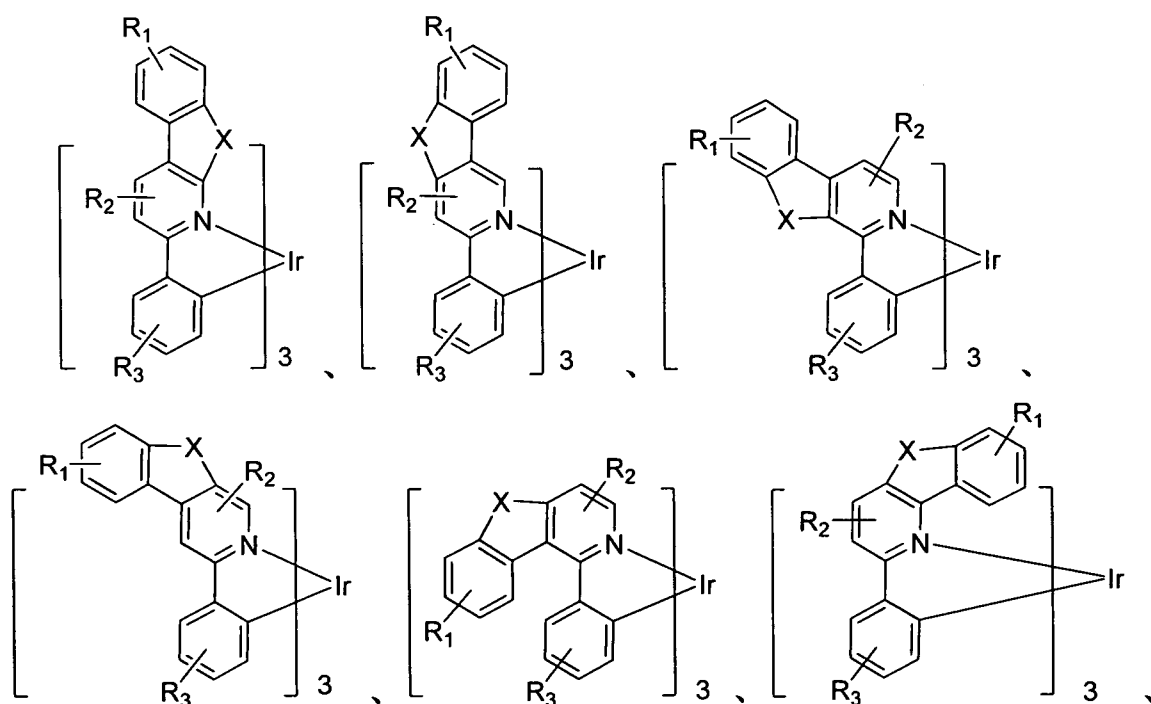
L'選自由以下組成之群：

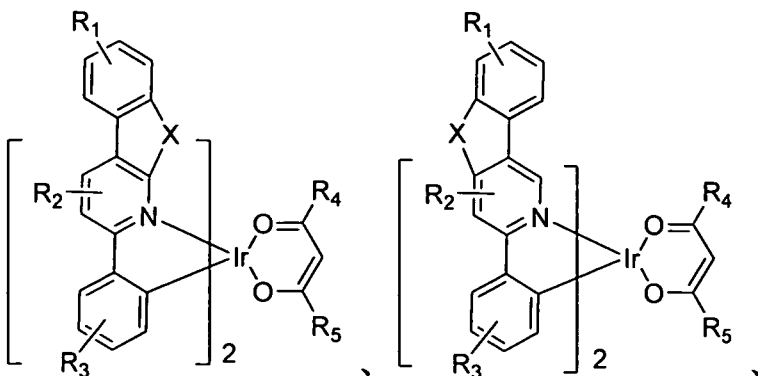
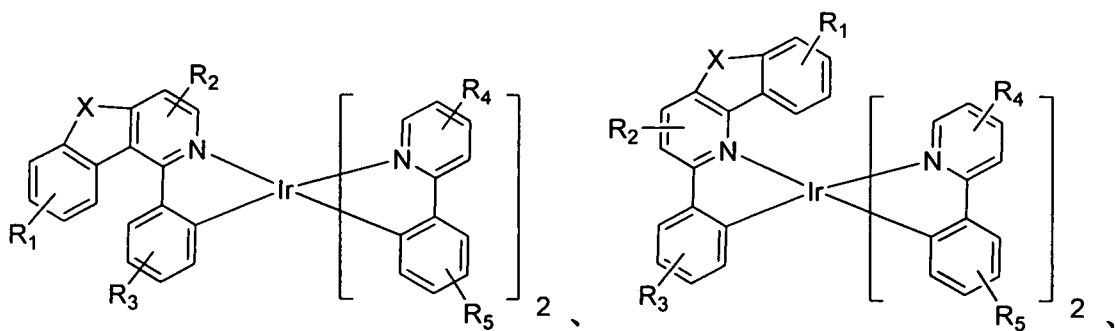
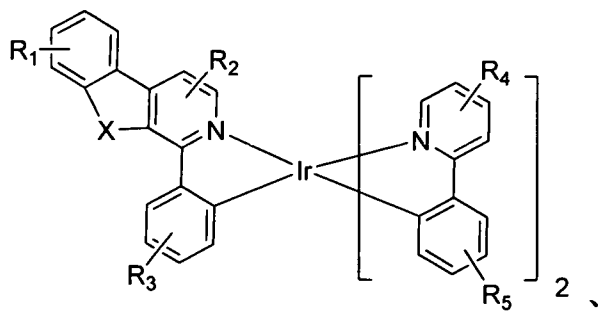
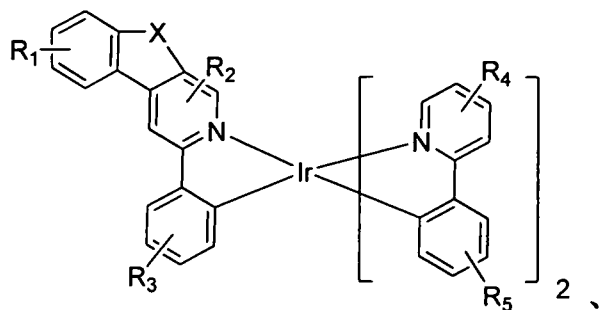
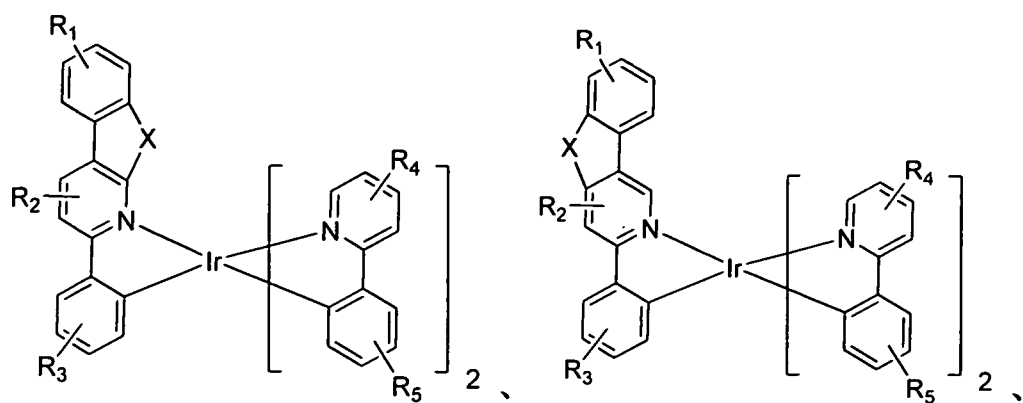


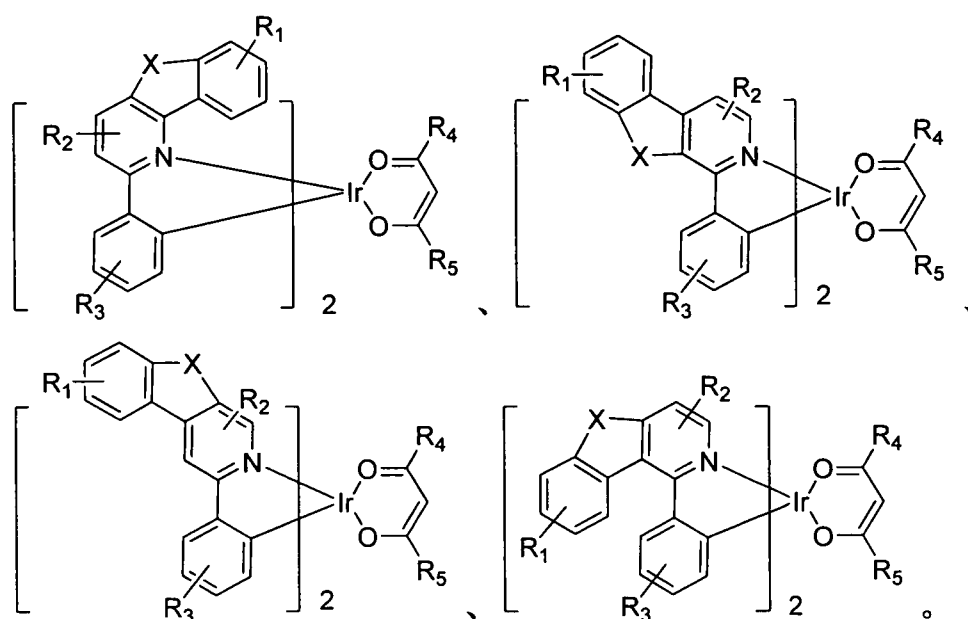


n 為 1、2、或 3。在一個態樣中， n 為 1。在另一個態樣中， n 為 2。然而，在另一個態樣中， n 為 3。 R_4 及 R_5 可代表單、二、三、或四取代；且 R_4 及 R_5 獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基、及雜芳基組成之群。較佳， R_4 及 R_5 獨立地選自氫及烷基。在一個態樣中， R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、及 R_5 各自獨立地選自氫及烷基。

在另一個態樣中，該化合物選自由以下組成之群：





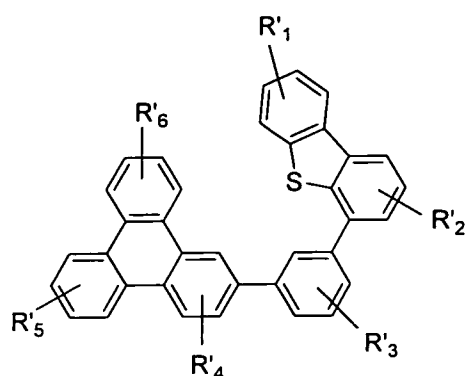


在一個具體態樣中，包含氮雜 DBX 配位體及 / 或苯基吡啶配位體之化合物為較佳。在另一個態樣中，包含氮雜 DBX 及輔助配位體 (諸如乙醯乙酸) 之化合物為較佳。

本發明提供包含具有化學式 I 之配位體之化合物之具體實例，且包括化合物 1 至 24、37 至 96、及 115 至 150。在一個態樣中，提供其中 X 為 O (亦即氮雜二苯并呋喃) 之包括化合物 1 至 12 及 / 或化合物 61 至 78 之化合物。在另一個態樣中，提供其中 X 為 S (亦即氮雜二苯并噻吩) 之包括化合物 13 至 24 及 / 或化合物 79 至 96 之化合物。然而，在另一個態樣中，提供其中 X 為 CRR' (亦即氮雜芴) 之包括化合物 37 至 48 及 / 或化合物 155 至 132 之化合物。然而，在另一個態樣中，提供其中 X 為 C=O (亦即氮雜芴酮) 之包括化合物 49 至 60 及 / 或化合物 133 至 150 之化合物。

此外，本發明提供有機發光裝置。該裝置包括陽極、陰極、及位於該陽極及該陰極之間之有機層。該有機層進一

步包括包含具有上述化學式I之配位體之化合物。具體言之，該有機層包括包含具有上述結構II、III、IV、V、VI或VII之配位體之化合物。特定言之，該有機層包括選自由化合物1至24、37至96、及115至150組成之群之化合物。較佳，該有機層為發光層且該化合物為發光摻雜劑。該發光層可進一步包括主體。較佳，該主體具有以下化學式：



。R₁'、R₂'、R₃'、R₄'、R₅'、及R₆'代表單、二、三、或四取代，且R₁'、R₂'、R₃'、R₄'、R₅'、及R₆'各自獨立地選自由氫、烷基、及芳基組成之群。可較佳用於具有化學式I之化合物之所述雜原子及取代基之選擇亦較佳適用於包括具有化學式I之化合物之裝置。該等選擇包括其等針對X、A、R₁、R₂、R₃、R₄、及R₅而言所描述之彼者。

本發明亦提供消費產品。該產品包括具有陽極、陰極、及位於該陽極及該陰極之間之有機層之裝置。該有機層進一步包括包含具有上述結構式I之配位體之化合物。可較佳用於具有化學式I之化合物之所述雜原子及取代基之選擇亦較佳適用於包括具有化學式I之化合物之裝置。該等選擇包括其等針對X、A、R₁、R₂、R₃、R₄、及R₅而言所

描述之彼者。

【實施方式】

一般，OLED包括位於陽極及陰極之間且電連接至陽極及陰極之至少一種有機層。當施加電流時，陽極使電洞注入該(等)有機層中且陰極使電子注入該(等)有機層中。已注入之電洞及電子各自移向電性相反之電極。當電子及電洞定域於相同分子上時，形成「激子」，其為具有激發態之定域電子-電洞對。當該激子通過光電放射機構弛豫時發射光線。在一些情況下，該激子可定域於受激準分子或激發複合物上。諸如，非輻射機構之熱弛豫亦可產生，然而，吾人一般視為不需要。

例如，最初之OLED採用自其單重態發光(「螢光」)之發光分子，如以引用的方式併入其全文之美國專利編號4,769,292中所揭示。螢光發射一般會在小於10奈秒之時框內發生。

最近，已展示具有自三重態發光之發光材料(「磷光」)之OLED。Baldo等人，「Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices,」Nature, 第395卷, 151-154, 1998年；(「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號, 4-6(1999)(「Baldo-II」)，其係以引用的方式併入其全文。磷光較詳細地描述於US專利號7,279,704中5-6欄，該專利係以引用的方式併

入全文。

圖1顯示有機發光裝置100。圖式未必按比例繪製。裝置100可包括基材110、陽極115、電洞注入層120、電洞傳輸層125、電子阻擋層130、發光層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為具有第一導電層162及第二導電層164之複合式陰極。裝置100可藉由依次沈積所述之該等層製造。該等各種層之性質及功能以及實例材料較詳細地描述於US 7,279,704中第6-10欄，該專利係以引用的方式併入全文。

可得到該等層各者之更多實例。例如，可撓且透明基材-陽極之組合係描述於美國專利編號5,844,363中，該專利係以引用的方式併入其全文。P型摻雜電洞傳輸層之一個實例為揭示於U.S.專利申請公開案第2003/0230980號中之以50:1之莫耳比摻雜有F₄-TCNQ之間-MTDATA，該公開案係以引用的方式併入其全文。發光及主體材料之實例揭示於Thompson等人之美國專利編號6,303,238中，該專利係以引用的方式併入其全文。n型摻雜電子傳輸層之一個實例為揭示於U.S.專利申請公開案第2003/0230980號中之以1:1之莫耳比摻雜有Li之BPhen，該公開案係以引用的方式併入其全文。以引用的方式併入彼者全文之U.S.專利案5,703,436及5,707,745揭示包括複合式陰極之陰極實例，該等複合式陰極含有具有上覆透明、導電、經濺射器沈積之ITO層之金屬(諸如Mg:Ag)薄層。阻擋層之理論及用途較詳細地描述於美國專利編號6,097,147及U.S.專利申請公開案

第 2003/0230980 號中，該等專利係以引用的方式併入彼者之全文。注入層之實例提供於 U.S. 專利申請公開案第 2004/0174116 號中，該公開案係以引用的方式併入其全文。保護層之描述可於 U.S. 專利申請公開案第 2004/0174116 號中發現，該公開案係以引用的方式併入其全文。

圖 2 顯示倒裝 OLED 200。該裝置包括基材 210、陰極 215、發光層 220、電洞傳輸層 225、及陽極 230。裝置 200 可藉由依次沈積所述之該等層製造。因為最常見之 OLED 組態具有位於陽極上方之陰極，而裝置 200 具有位於陽極 230 下方之陰極 215，裝置 200 則可稱為「倒裝」OLED。類似於針對裝置 100 進行描述之材料可用於裝置 200 之對應層中。圖 2 提供如何自裝置 100 結構省略某些層之一個實例。

圖 1 及 2 中所列示之簡單層狀結構係以非限制性實例提供，且應瞭解，本發明之實施例可用於多種其他結構。所述之該等特定材料及結構皆為例示性質，而亦可採用其他材料及結構。功能性 OLED 可藉以不同方式組合所述之各種層，或基於設計、性能、及成本因素以完全省去該等層而得到。亦可包括未經特定描述之其他層。可採用除了其等特定所述之彼者之外之材料。儘管文中提供之許多實例描述包含單一材料之各種層，吾人應瞭解，可採用材料之組合物，諸如主體及摻雜劑之混合物、或較一般之混合物。同樣，該等層可具有各種子層。各種層在文中所給之名稱並非意欲具嚴格限制性。例如，在裝置 200 中，電洞

傳輸層225傳輸電洞並使電洞注入發光層220中，且可稱為電洞傳輸層或電洞注入層。在一個實施例中，OLED可稱為具有位於陰極及陽極之間之「有機層」。該有機層可包括單一層，或例如，可進一步包括相對於圖1及2所描述之不同有機材料之多層。

亦可採用並非特定描述之結構及材料，諸如，藉由諸如揭示於Friend等人之美國專利編號5,247,190中之聚合性材料(PLED)組成之OLED，該專利係以引用的方式併入其全文。通過其他實例，可採用具有單一有機層之OLED。例如，OLED可如Forrest等人之美國專利編號5,707,745中所述般進行堆疊，該專利係以引用的方式併入其全文。OLED結構可偏離圖1及2中所列示之簡單層狀結構。例如，基材可包括傾斜反射表面以改良外耦合，諸如Forrest等人之美國專利編號6,091,195中所述之臺面結構，及/或Bulovic等人之美國專利編號5,834,893中所述之凹陷結構，該等專利係以引用的方式併入彼者之全文。

除非另外特定指明，否則，各個實施例之任何層皆可藉由任一合適之方法沈積。就該等有機層而言，較佳之方法包括諸如描述於以引用的方式全文併入之美國專利編號6,013,982及6,087,196中之熱蒸鍍法、噴墨法，諸如描述於以引用的方式全文併入之Forrest等人之美國專利編號6,337,102中之有機氣相沈積(OVPD)法，及諸如描述於以引用的方式全文併入之U.S.專利申請案序號10/233,470中之藉由有機蒸汽噴印(OVJP)進行之沈積。其他合適之沈積

方法包括旋轉塗佈及其他以溶液為主之處理。以溶液為主之處理較佳係在氮或惰性氛圍中進行。就其他層而言，較佳之方法包括熱蒸鍍法。較佳之圖案化方法包括通過遮罩沈積，諸如描述於以引用的方式全文併入之美國專利編號6,294,398及6,468,819中之冷焊接，及與諸如噴墨法及OVJD之一些沈積方法相關聯之圖案化。亦可採用其他方法。可將待沈積之材料改質以使彼者與特定之沈積方法相容。例如，可以小分子之形式採用支化或不支化、且較佳包含至少3個碳之取代基(諸如烷基及芳基)，以提高彼者經歷溶液處理之能力。可採用具有20個碳或更多個碳之取代基，且較佳之範圍為3至20個碳。具有非對稱結構之材料可具有比該等具有對稱結構者更佳之溶液處理能力，因為非對稱材料可能具有較小之再結晶趨勢。樹枝狀聚合物之取代基可用以提高小分子經歷溶液處理之能力。

根據本發明之實施例製造之裝置可併入多種消費產品中，該等消費產品包括平面顯示器、電腦顯示器、電視機、廣告牌、室內或室外照明用燈及/或發訊號用燈、抬頭顯示器、全透明顯示器、可撓性顯示器、雷射印表機、電話機、行動電話、個人數位助理(PDA)、膝上型電腦、數位相機、攝錄放影機、取景器、微顯示器、交通工具、大面積幕牆、劇場或體育場屏幕、或招牌。可採用包括被動式矩陣及主動式矩陣之不同控制機構以控制根據本發明製造之裝置。許多該等裝置係打算用於令人類舒適之溫度範圍內，諸如18°C至30°C，且更佳為室溫(20至25°C)。

文中所述之該等材料及結構可應用於除了OLED之外之裝置中。例如，其他光電子裝置(諸如有機太陽能電池及有機光偵測器)可採用該等材料及結構。更普遍言之，有機裝置(諸如有機電晶體)可採用該等材料及結構。

術語鹵代、鹵基、烷基、環烷基、烯基、炔基、芳烷基、雜環基團、芳基、芳族基、及雜芳基為技術界所知曉，且定義於US 7,279,704中第31-32欄，其係以引用的方式併入本文。

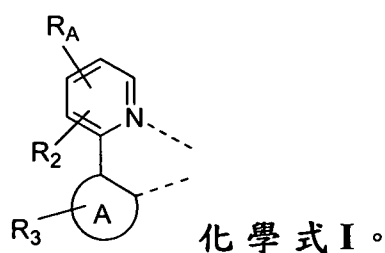
文中提供一類新化合物，該等化合物包含具有新穎結構(列示於圖3中)之配位體。該等化合物可適用於磷光有機發光裝置中。較佳，該等化合物可用作發光層中之發光摻雜劑。具體言之，具有化學式I之該等新穎配位體係由其中吡啶環已藉由芳香族氮雜基團置換之苯基吡啶配位體組成而得到新穎結構(文中亦稱為「氮雜DBX」或「氮雜二苯并取代」之配位體)。氮雜二苯并取代之配位體包括氮雜二苯并呋喃、氮雜二苯并噻吩、氮雜芴、氮雜芴酮、氮雜咔唑、及氮雜二苯并硒吩。文中所提供之該等化合物包括其中X代表氮雜結構內化學基團取代基之氮雜DBX配位體。該取代基可用以調諧該化合物之性質，以提供較可取之性質(例如色彩或穩定性)。例如，藉由雜原子(諸如O、S或N)取代該氮雜DBX配位體可改變該化合物之電化學及光物理性質。

此外，文中所提供之該等化合物可具有以特定配位體結構為基礎之各種性質。具體言之，令配位體具有相同原子

組成，然而不同取向之該配位體之「翻轉」可影響包含該配位體之化合物之總性質(亦即，II比較III，IV比較V，及VI比較VII)。例如，化合物1及化合物8兩者皆包括其中X為O之氮雜DBX配位體(亦即氮雜二苯呋喃)，但是，比較化合物2而言，化合物1中之該等配位體具有不同之取向，及因此，在該等化合物之間有紅位移。

包含氮雜二苯并取代之配位體之銨錯合物可顯示許多值得一提之性質。在無理論的束縛下，茲認為，文中所提供之該等新穎化合物可能為PHOLED中較穩定之發射器。苯基吡啶銨錯合物之LUMO通常會定域於配位體上，然而，文中所提供之該等化合物通過氮雜二苯并取代之配位體可提供較佳之電子去穩定作用。因此，對於在較穩定發射器中得到之電子而言，茲認為該等化合物更穩定。此外，該等化合物亦可提供具有經增加之使用壽命及較低操作電壓之裝置。

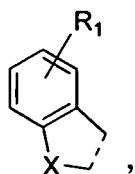
文中所提供之化合物包括具有以下結構之配位體：



A為5員或6員之芳香環或雜芳環。在一個態樣中，A為6員環，其中，較佳，A為苯。在另一個態樣中，A為5員環，其中，較佳，A選自由呋喃、噻吩、及吡咯組成之群。例如，可用作A環之5員環之實例包括呋喃、噻吩、吡

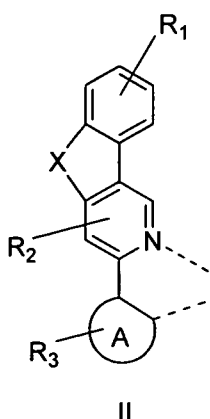
咯、唑、噻唑、二硫雜環戊烷、三唑、二噻唑、及四唑。

R_A 為具有以下結構之取代基：

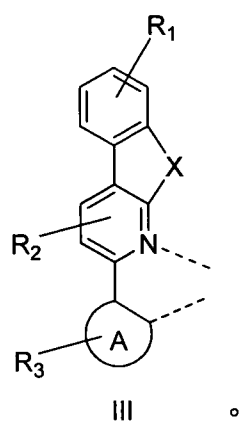


其中該取代基稠合至化學式 I 之吡啶環。出現於該結構中之虛線指明該取代基接合至化學式 I 之吡啶環之處。X 選自由 CRR'、C=O、BR、NR、O、S、及 Se 組成之群。R 及 R' 獨立地選自氫及烷基。R₁、R₂、及 R₃ 可代表單、二、三、或四取代；R₁、R₂、及 R₃ 各自獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基、及雜芳基組成之群。該配位體係配位至具有大於 40 之原子量之金屬。較佳，該金屬為 Ir。

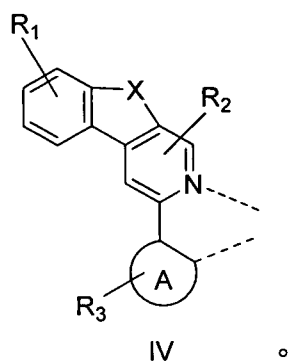
在一個態樣中，所提供之化合物包含具有以下結構之配位體：



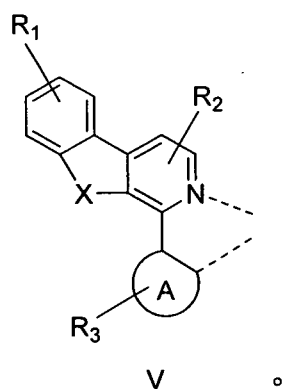
在另一個態樣中，所提供之化合物包含具有以下結構之配位體：



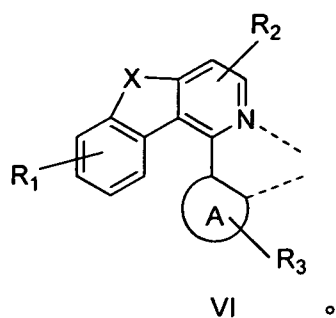
然而，在另一個態樣中，所提供之化合物包含具有以下結構之配位體：



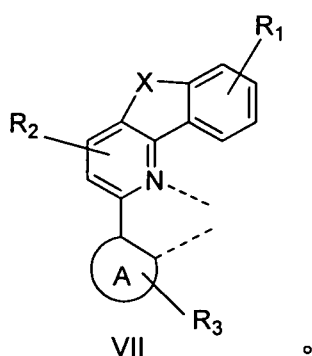
然而，在另一個態樣中，所提供之化合物包含具有以下結構之配位體：



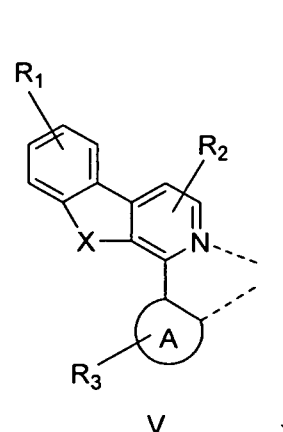
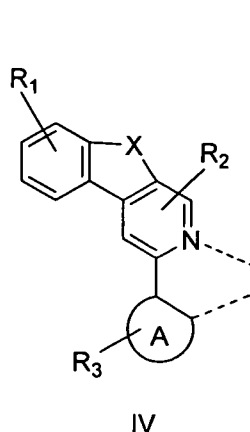
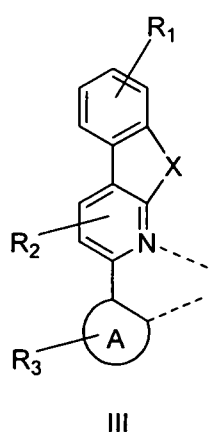
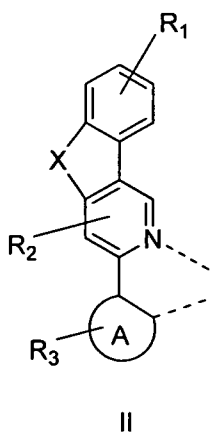
然而，在另一個態樣中，所提供之化合物包含具有以下結構之配位體：

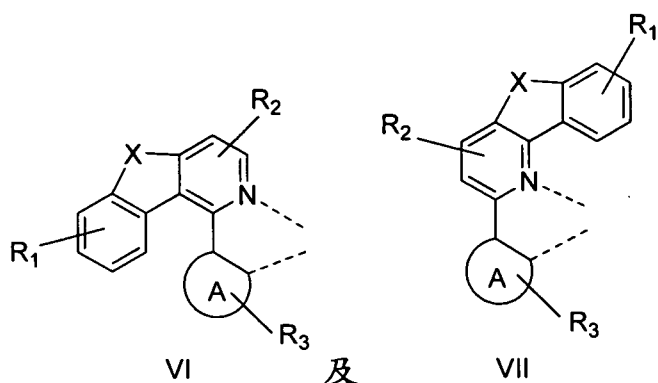


然而，在進一步之態樣中，所提供之化合物包含具有以下結構之配位體：



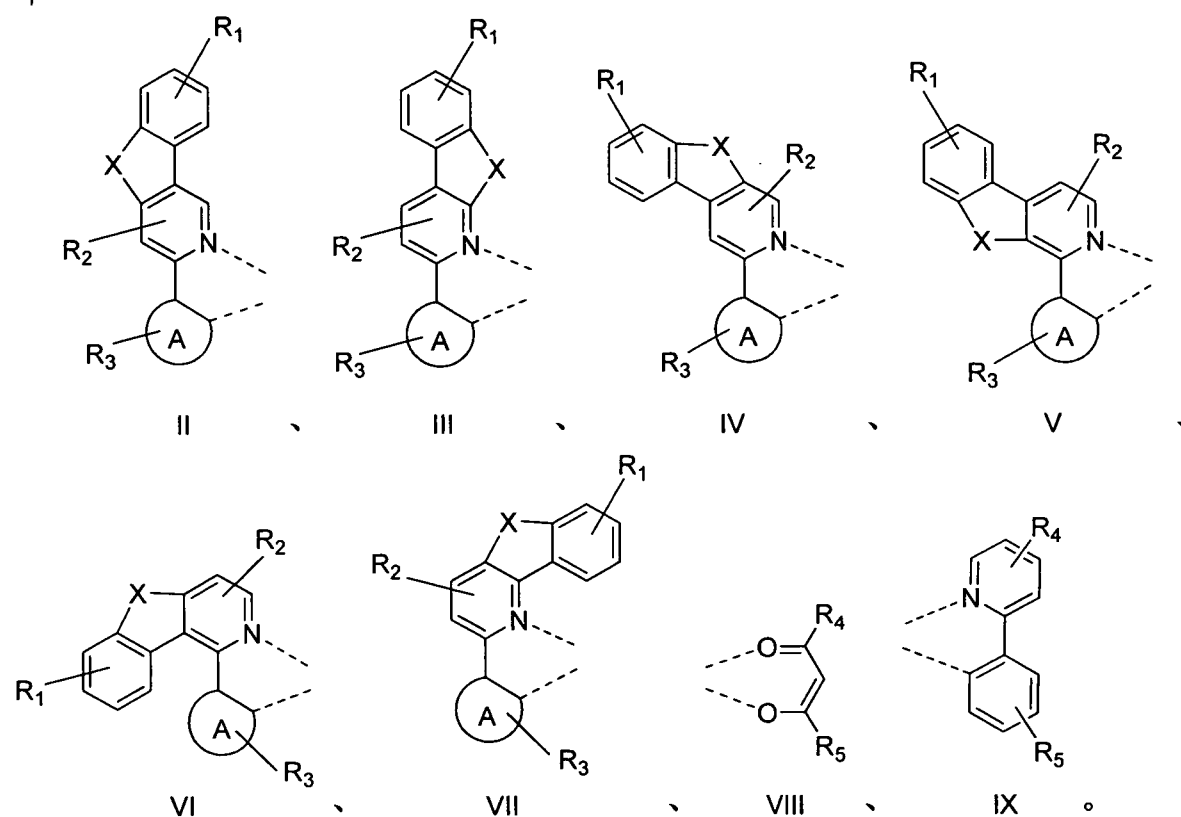
在一個態樣中，該化合物具有化學式 $(L)_n(L')_{3-n}Ir$ 。L 選自由以下組成之群：





。L' 選自由以下組成之

群：

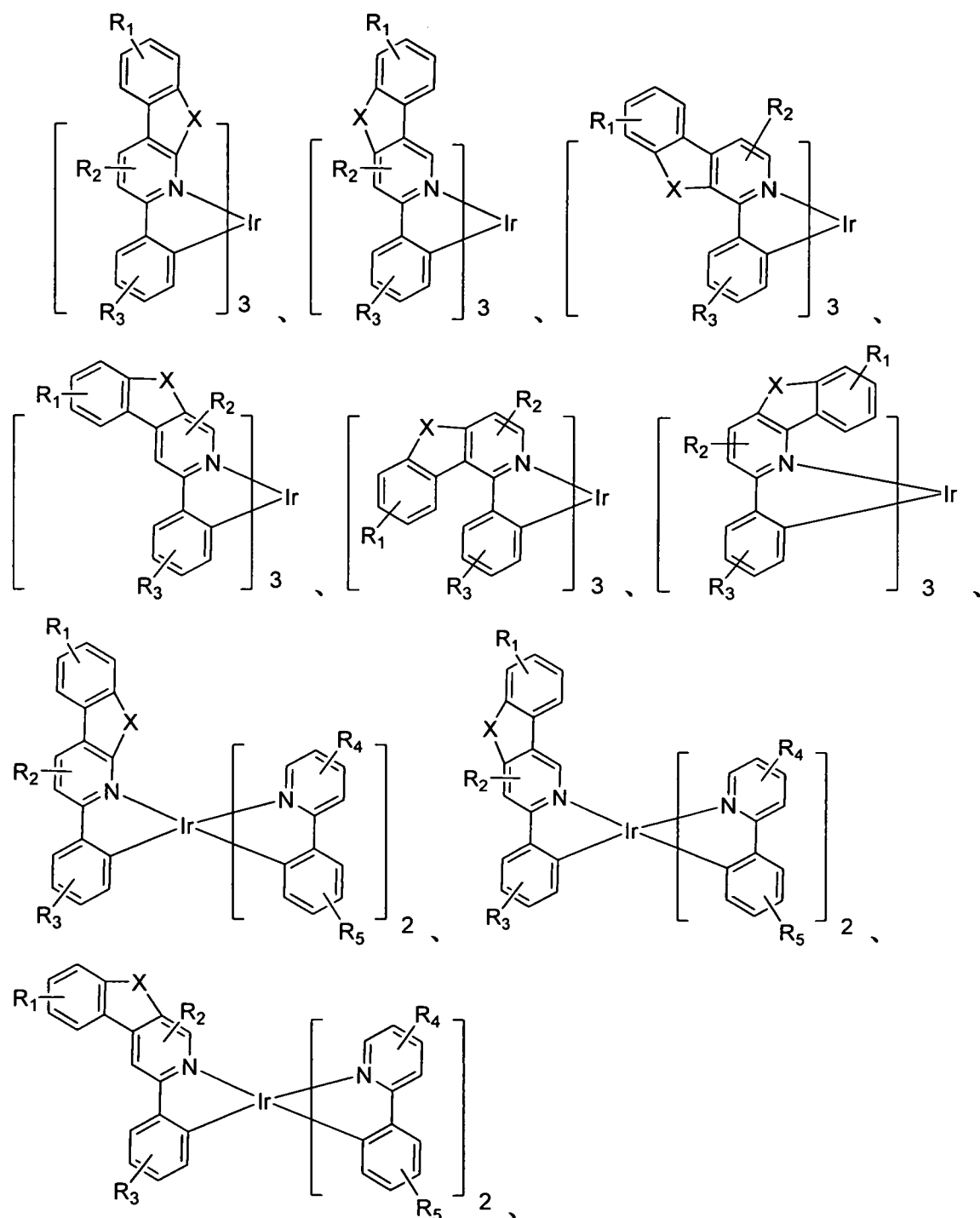


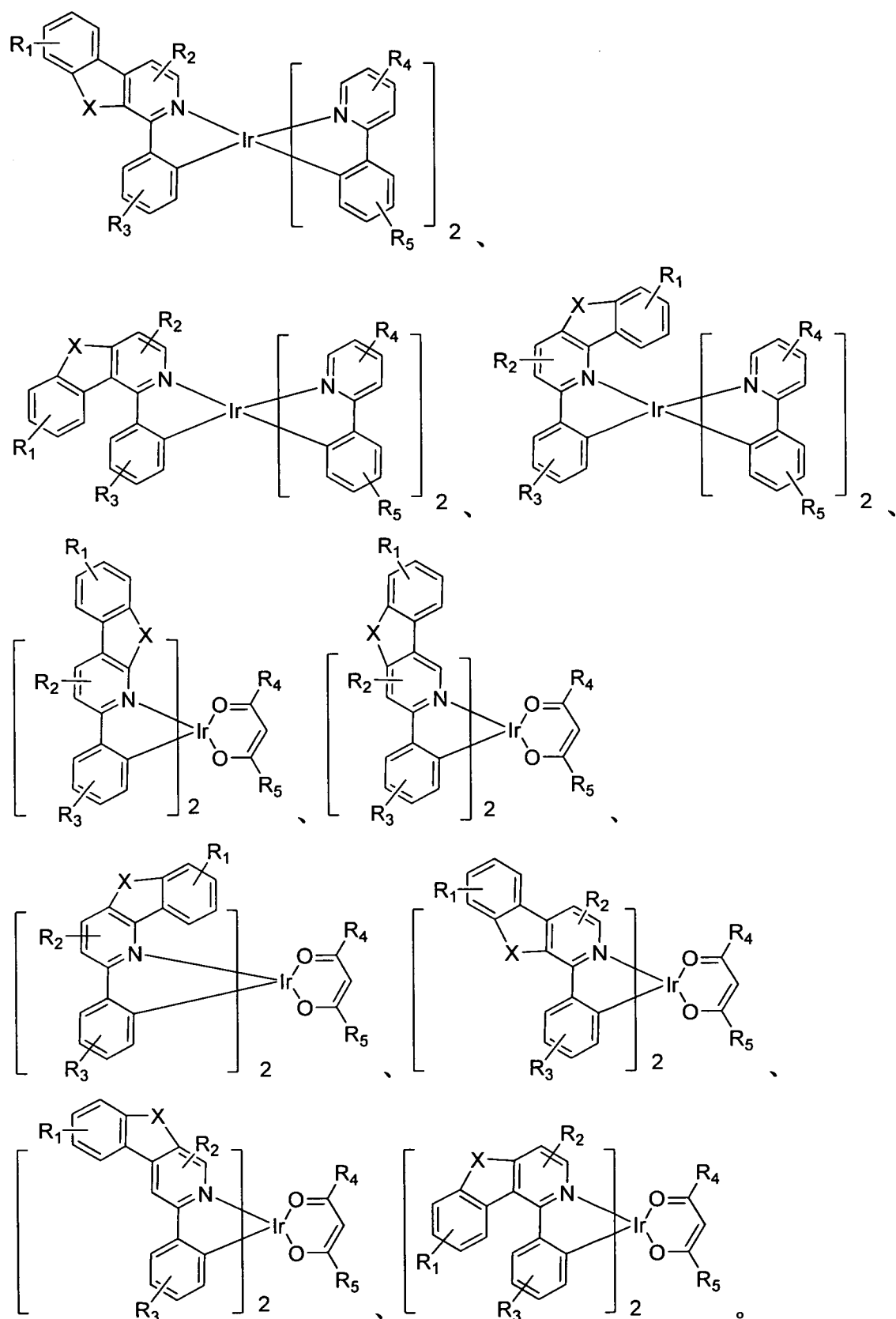
N 為 1、2、或 3。在一個態樣中，n 為 3。當 n 為 3 時，該化合物為同配位基化合物。在另一個態樣中，n 為 2。然而，在另一個態樣中，n 為 1。當 n 為 1 或 2 時，該化合物為異配位基化合物。

R₄ 及 R₅ 可代表單、二、三、或四取代；且 R₄ 及 R₅ 獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基、及雜芳基組成之群。較佳，R₄ 及 R₅ 獨立地選自氫及

烷基。

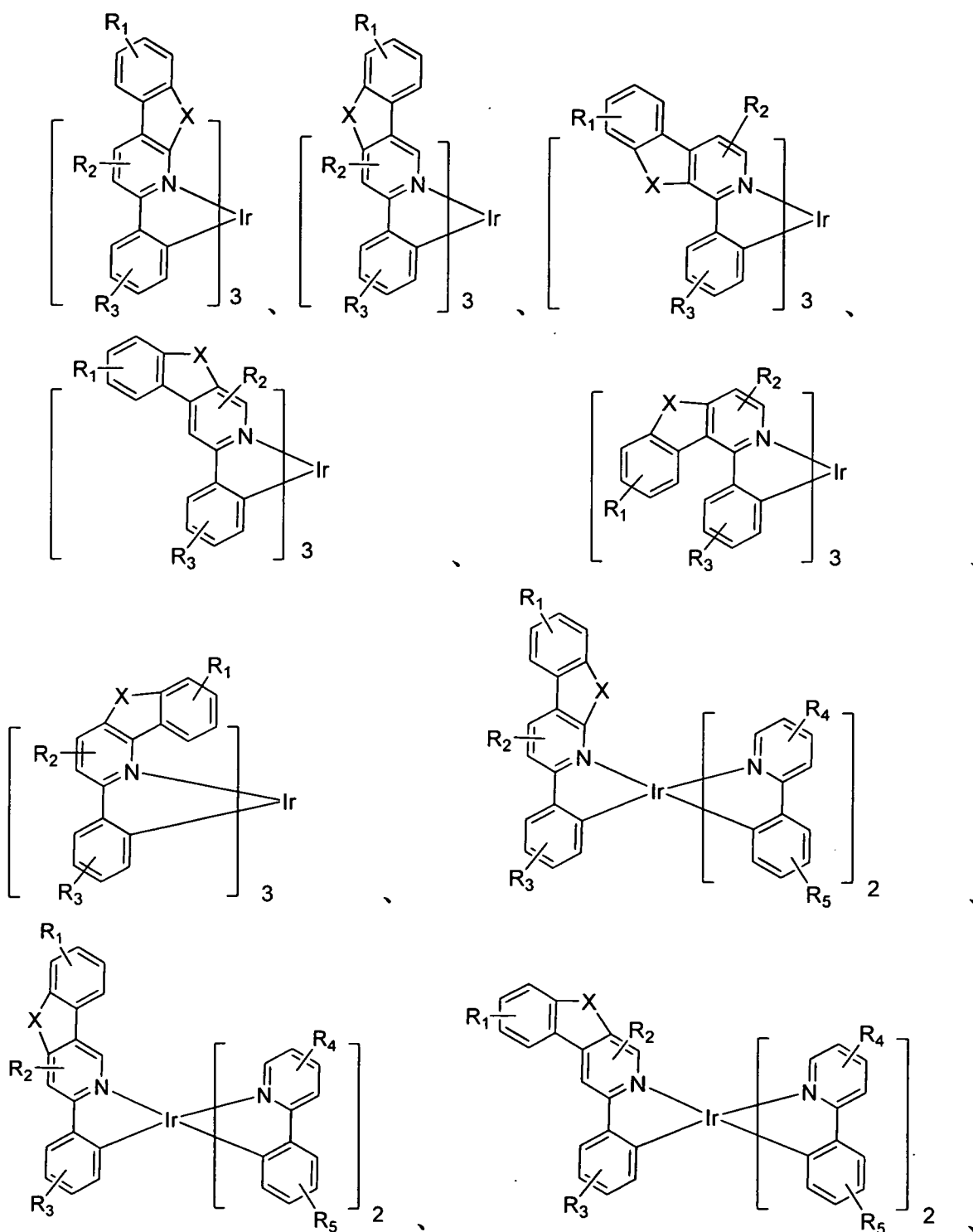
文中所提供之該等新穎化合物包括同配位基及異配位基金屬錯合物。具體言之，本發明提供其中該化合物選自由以下組成之群之化合物等者：

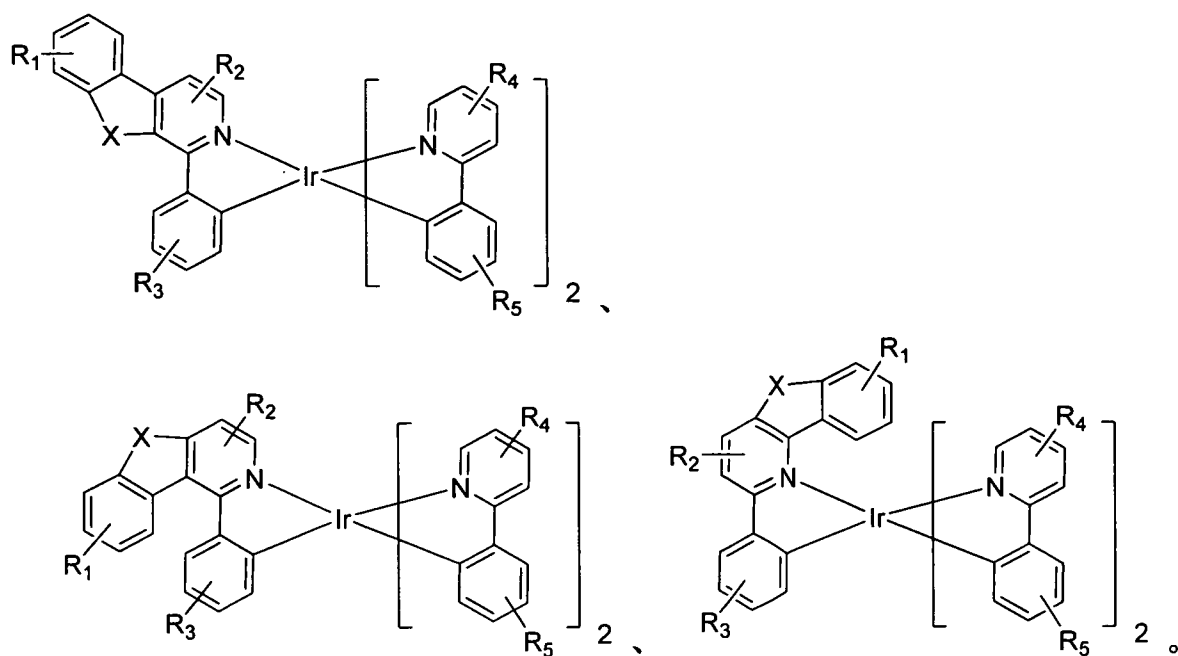




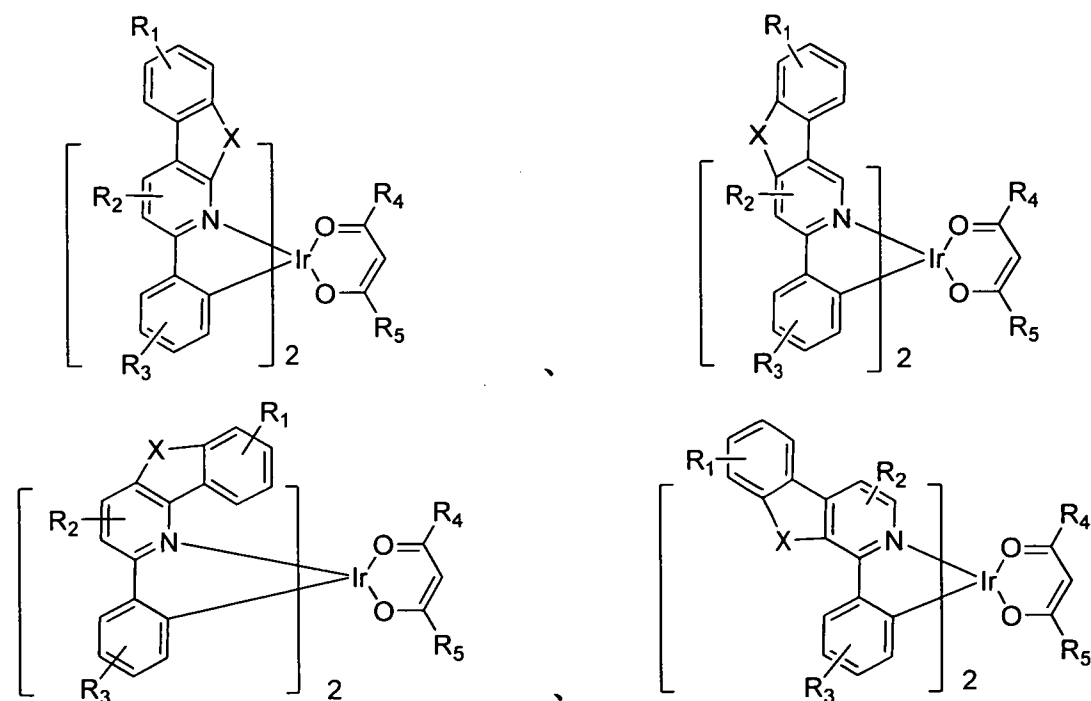
在一個態樣中，包含苯基吡啶配位體、吡啶基氮雜DBX配位體、或兩種配位體之化合物為較佳。該等化合物包括

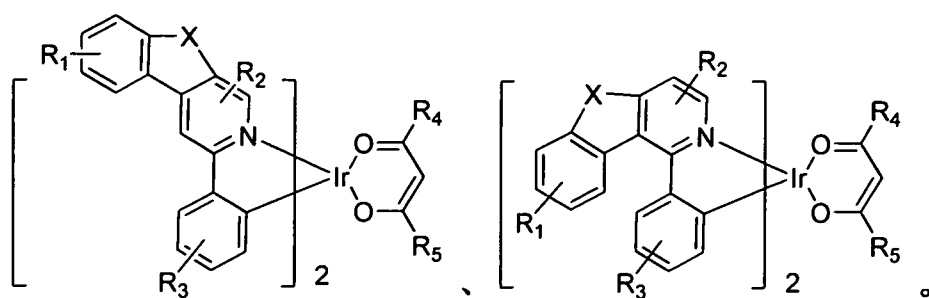
包含新穎配位體之同配位基及異配位基化合物兩者。具體言之，化合物選自由以下組成之群：



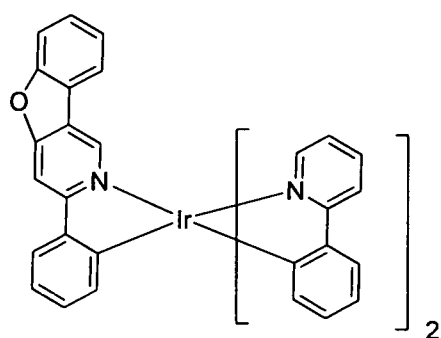


在另一個態樣中，包含經吡啶基氮雜二苯并取代之配位體及輔助配位體(諸如乙醯乙酸)之化合物為較佳。具體言之，化合物選自由以下組成之群：

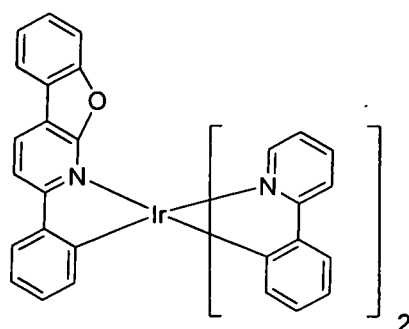




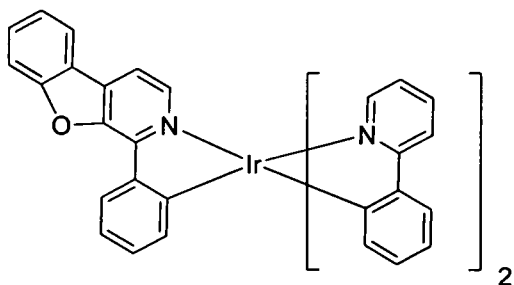
本發明提供包含具有化學式I之配位體之新穎化合物之特定言之實例，且包括選自由以下組成之群之化合物：



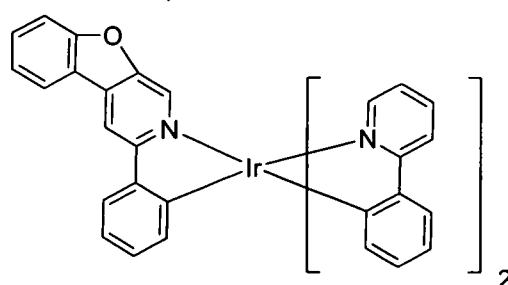
化合物 1



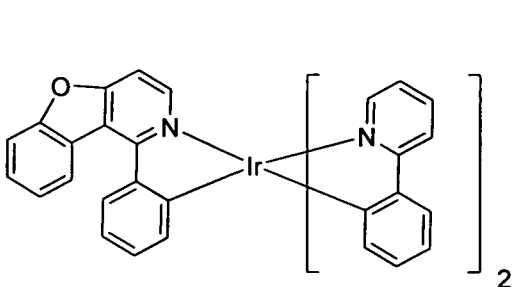
化合物 2



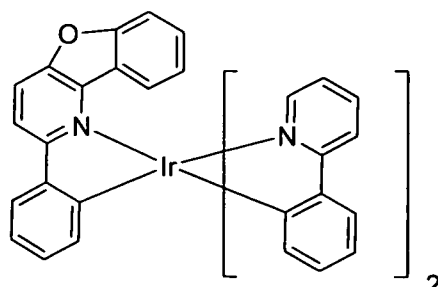
化合物 3



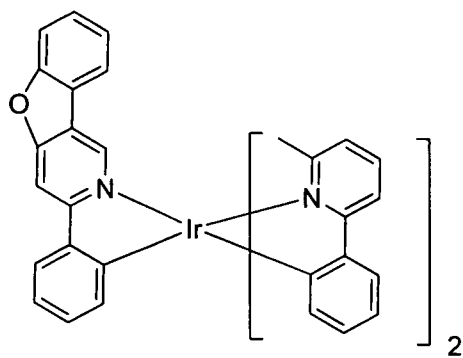
化合物 4



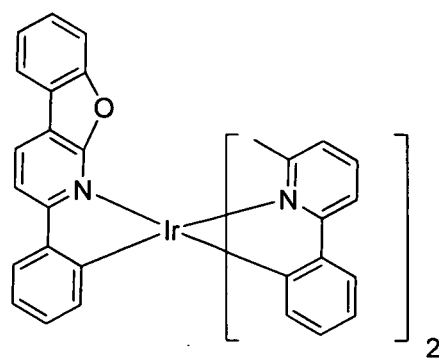
化合物 5



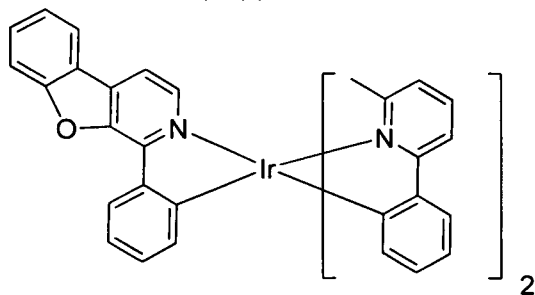
化合物 6



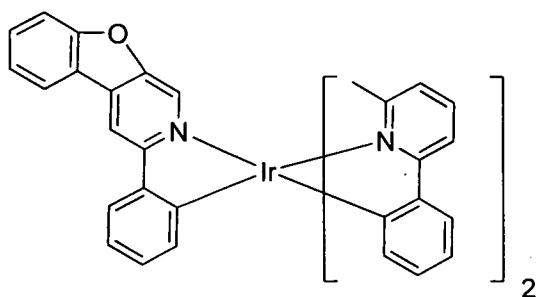
化合物 7



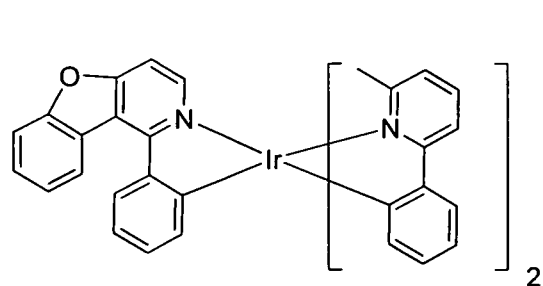
化合物 8



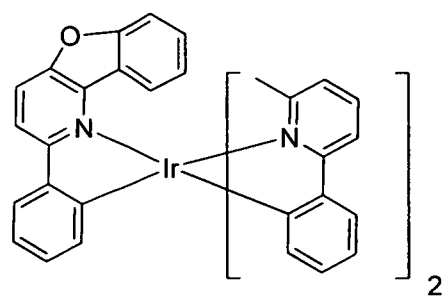
化合物 9



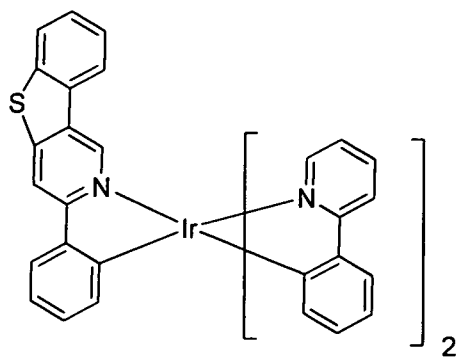
化合物 10



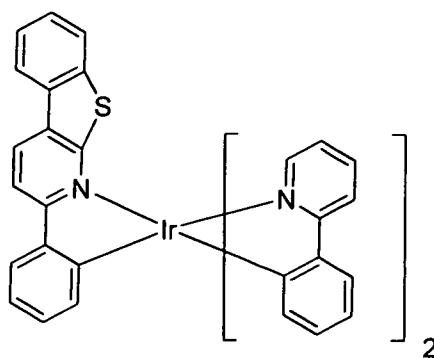
化合物 11



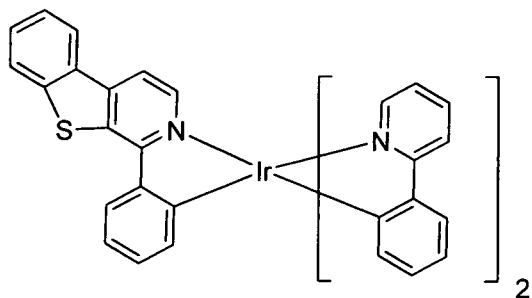
化合物 12



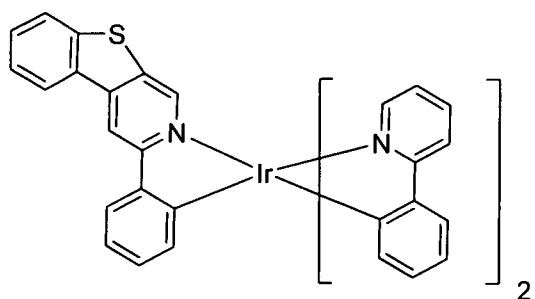
化合物 13



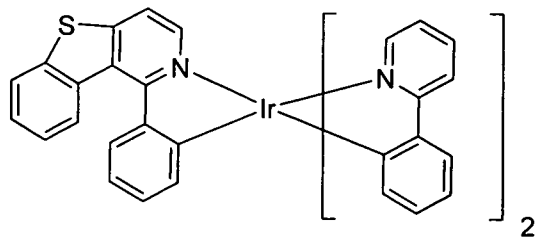
化合物 14



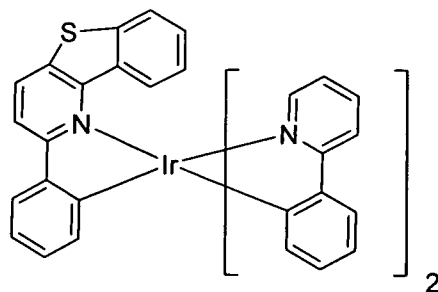
化合物 15



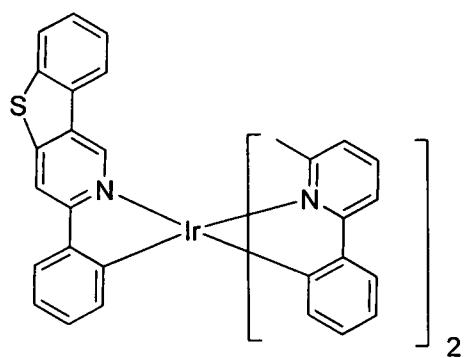
化合物 16



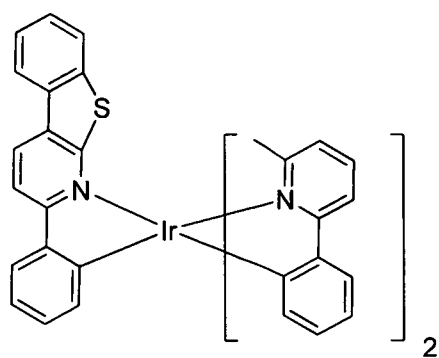
化合物 17



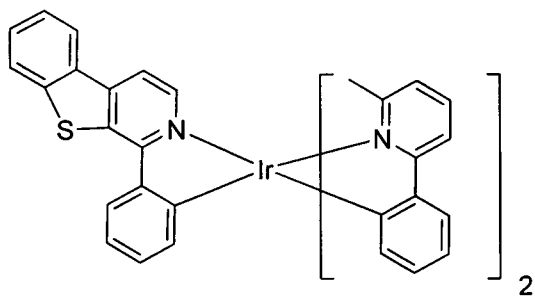
化合物 18



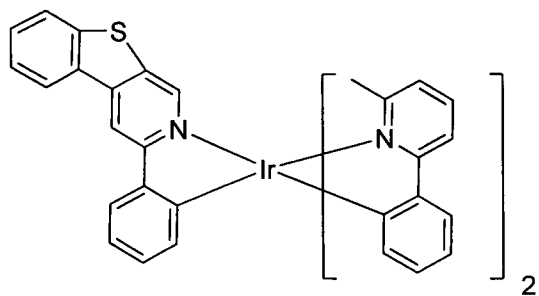
化合物 19



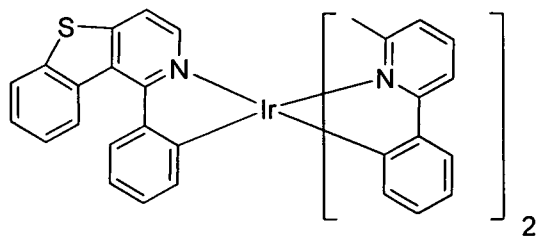
化合物 20



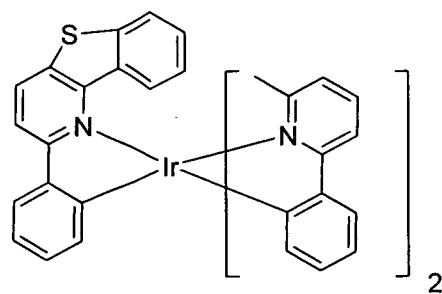
化合物 21



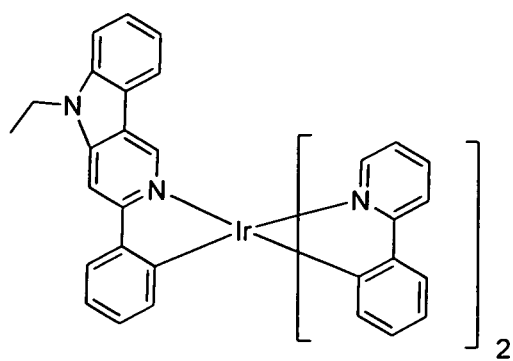
化合物 22



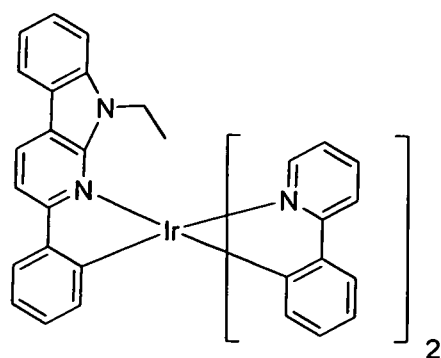
化合物 23



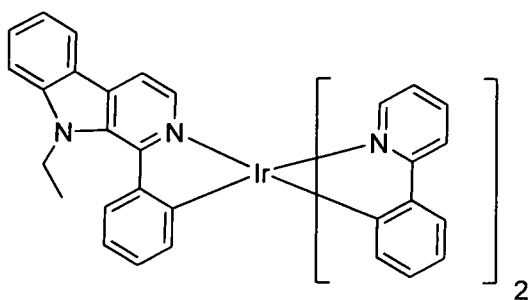
化合物 24



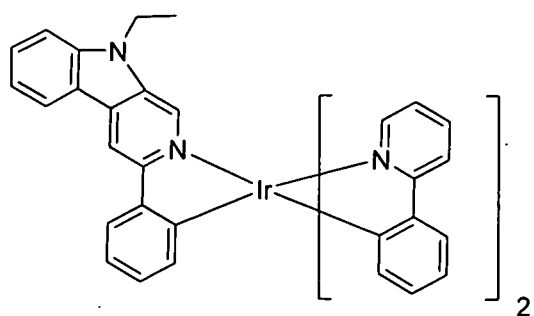
化合物 25



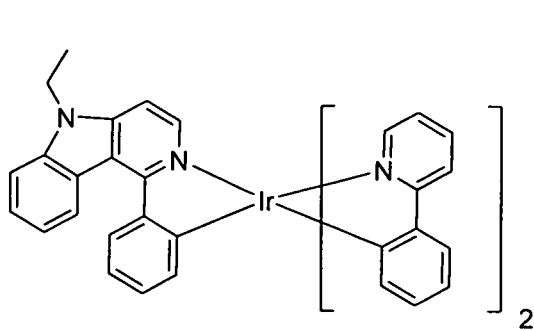
化合物 26



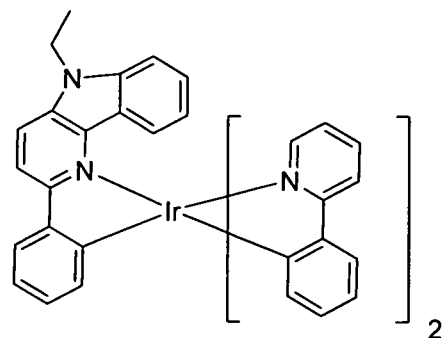
化合物 27



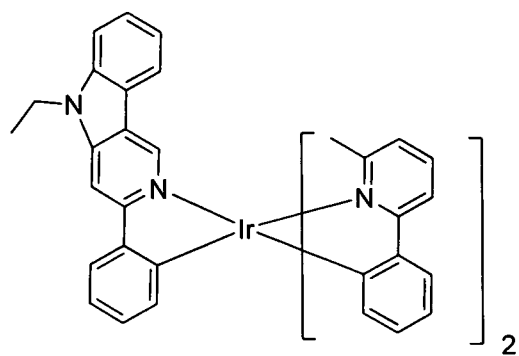
化合物 28



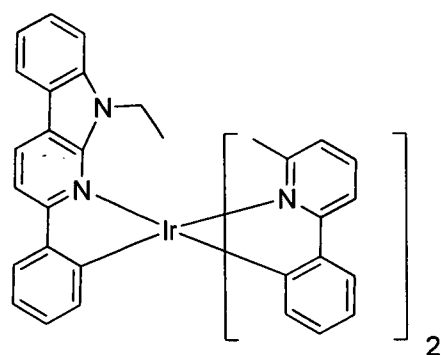
化合物 29



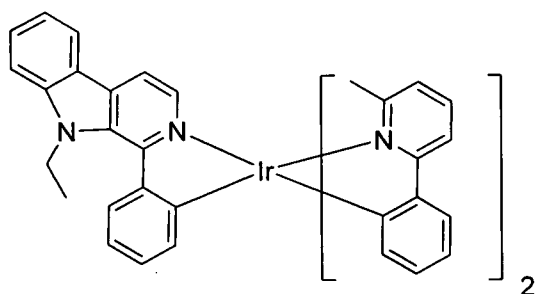
化合物 30



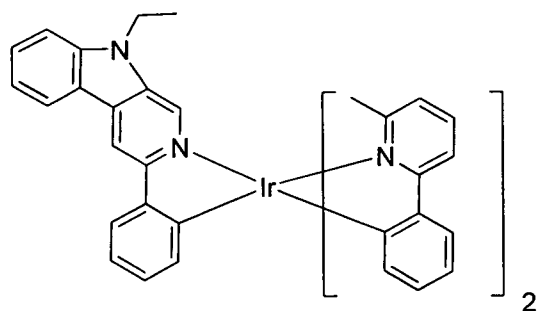
化合物 31



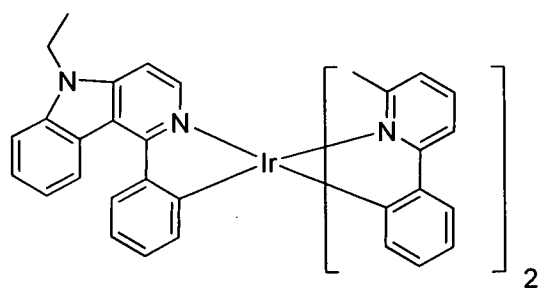
化合物 32



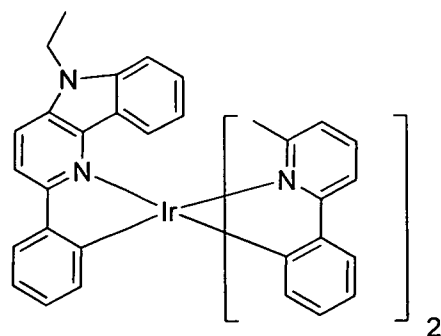
化合物 33



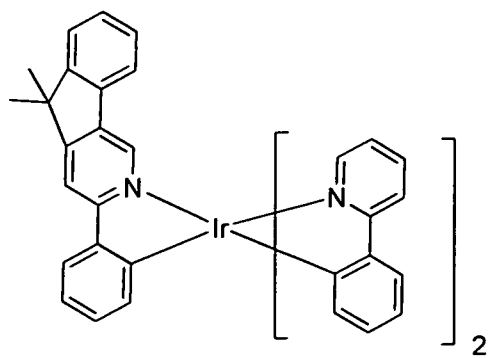
化合物 34



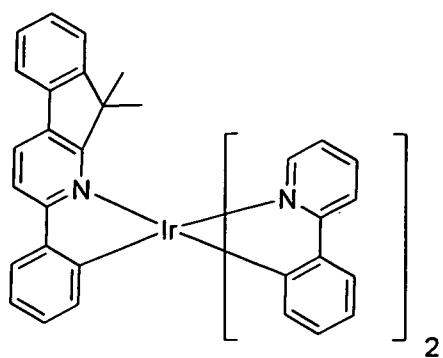
化合物 35



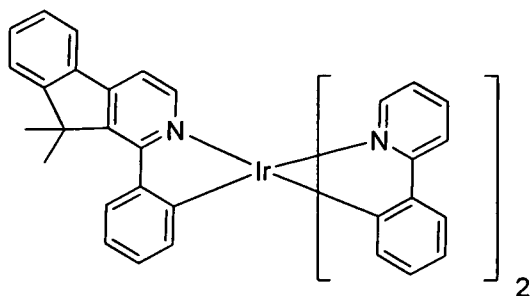
化合物 36



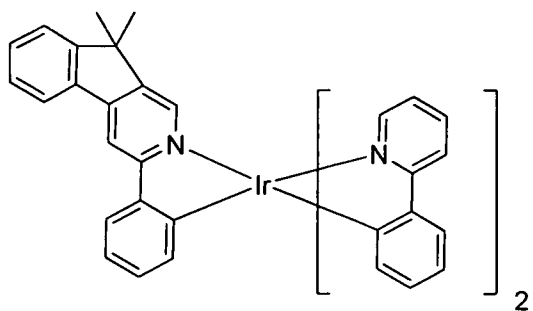
化合物 37



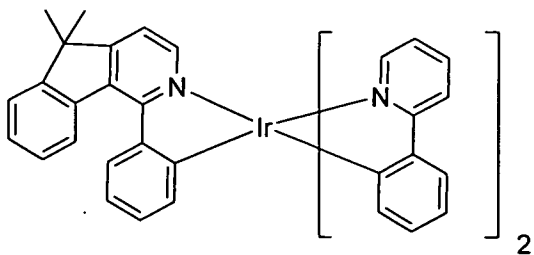
化合物 38



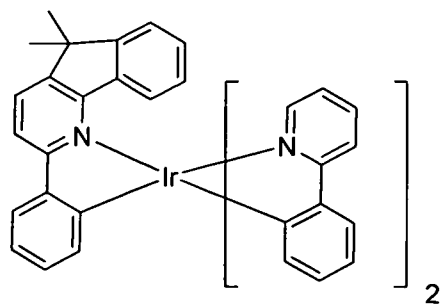
化合物 39



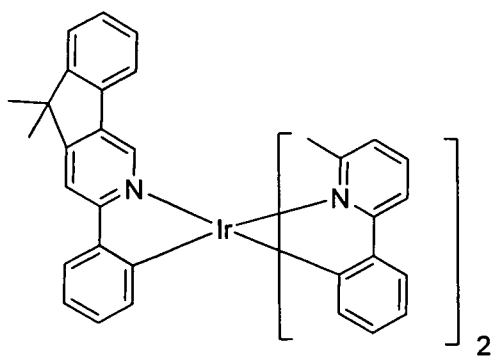
化合物 40



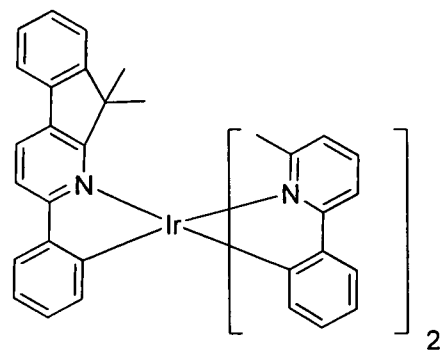
化合物 41



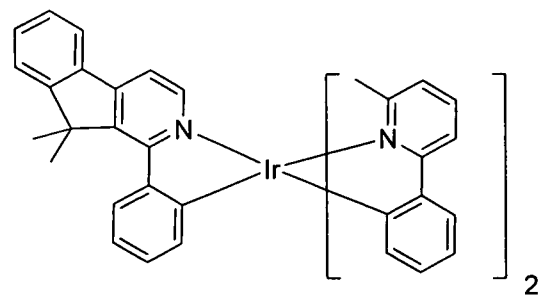
化合物 42



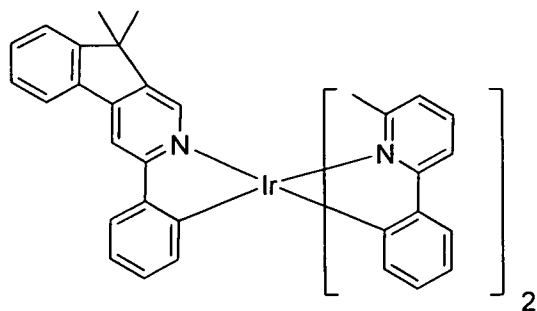
化合物 43



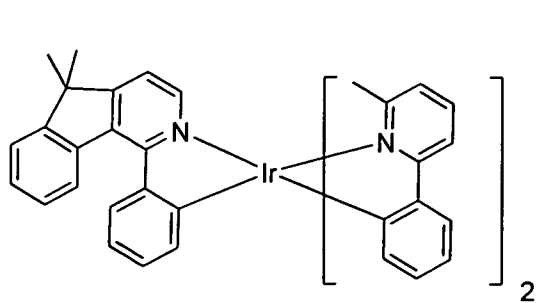
化合物 44



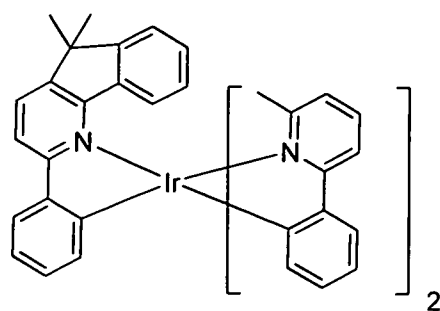
化合物 45



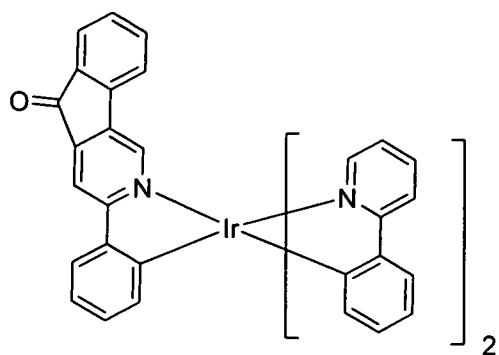
化合物 46



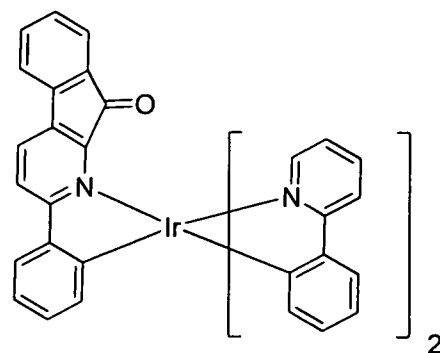
化合物 47



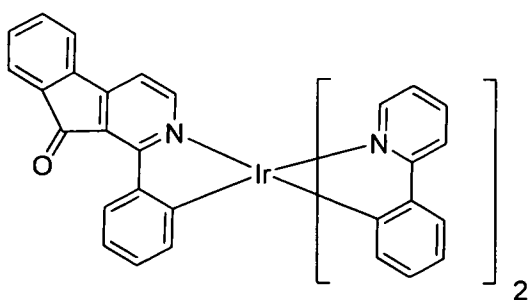
化合物 48



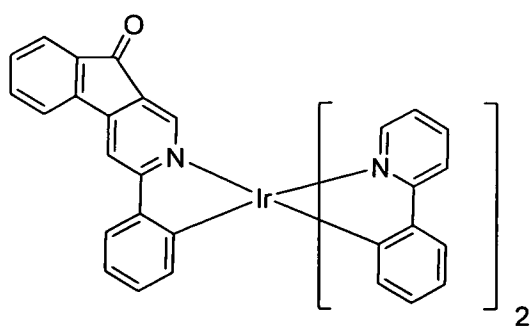
化合物 49



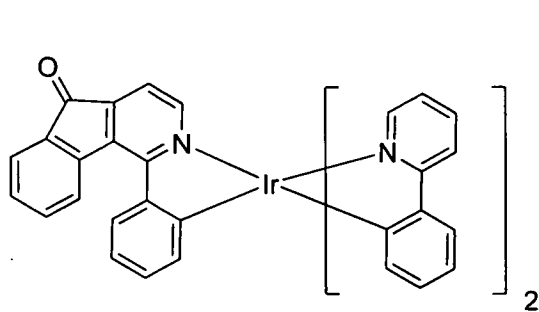
化合物 50



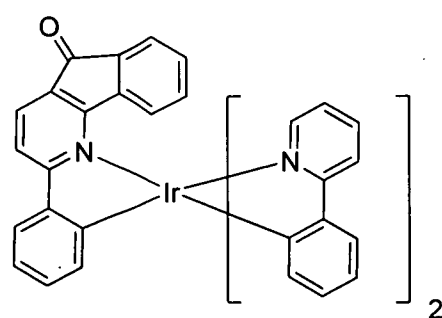
化合物 51



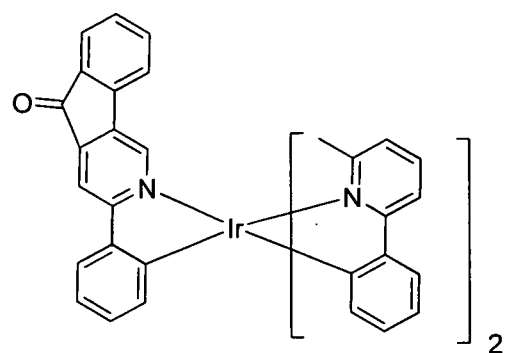
化合物 52



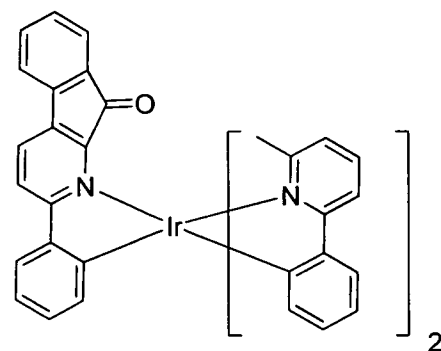
化合物 53



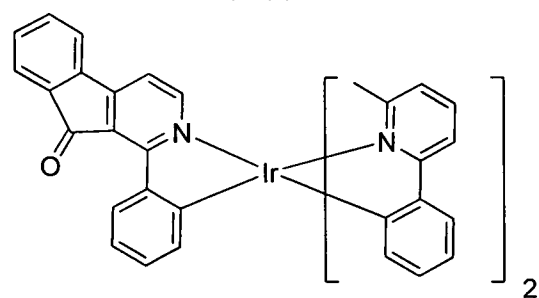
化合物 54



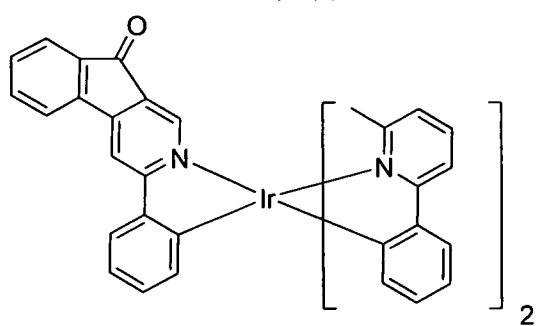
化合物 55



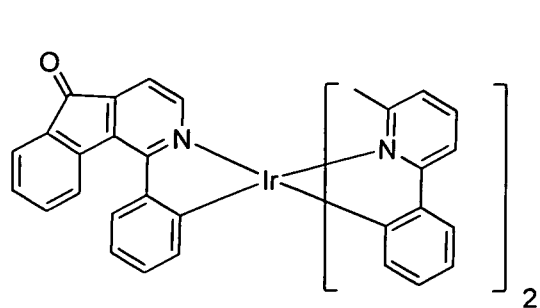
化合物 56



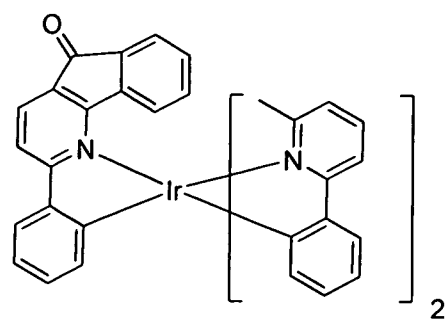
化合物 57



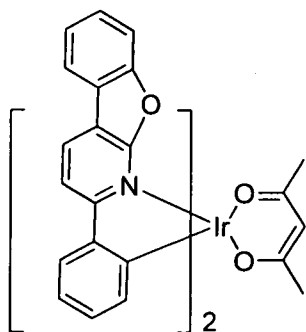
化合物 58



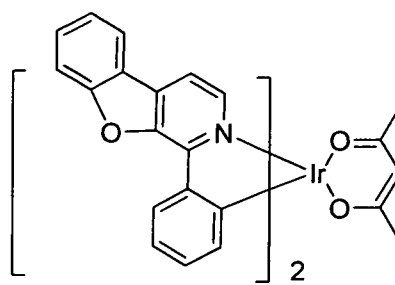
化合物 59



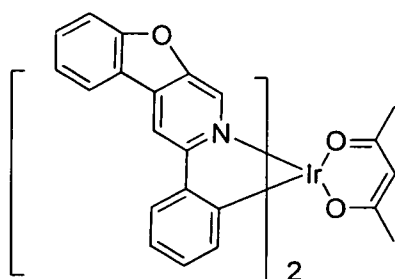
化合物 60



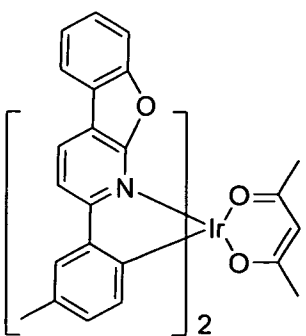
化合物 61



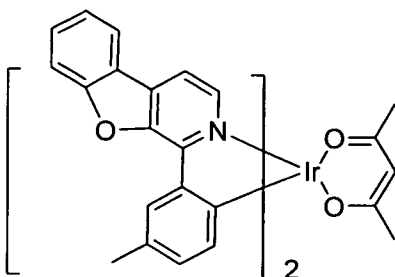
化合物 62



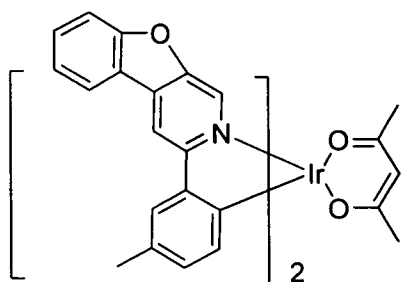
化合物 63



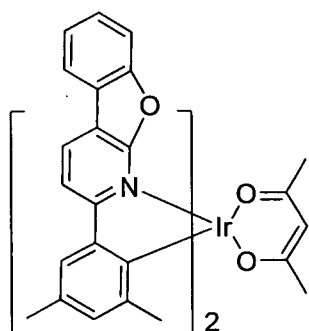
化合物 64



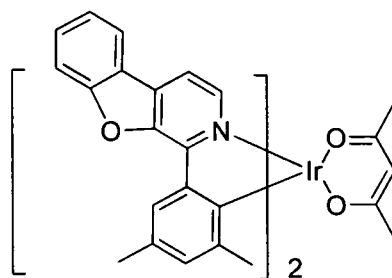
化合物 65



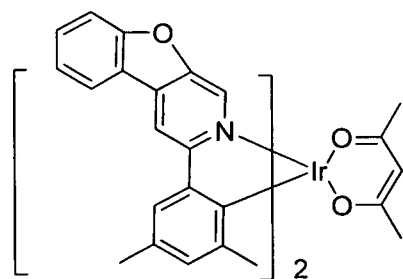
化合物 66



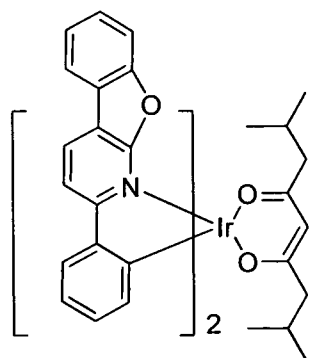
化合物 67



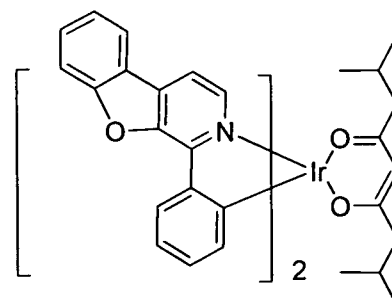
化合物 68



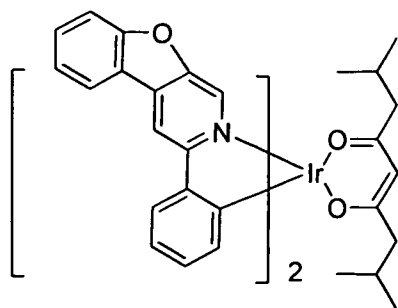
化合物 69



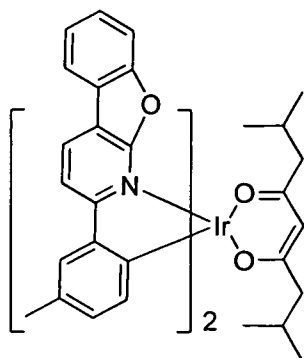
化合物 70



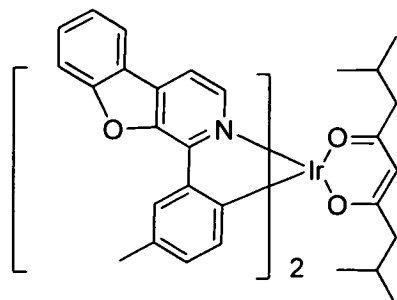
化合物 71



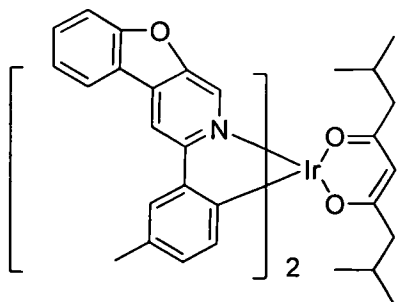
化合物 72



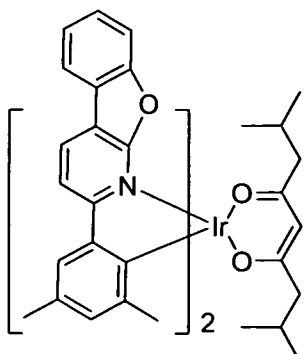
化合物 73



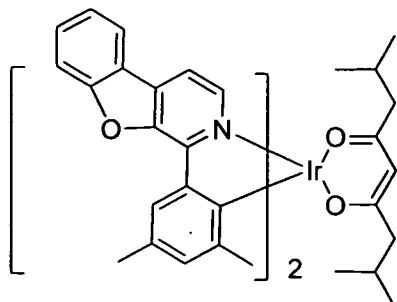
化合物 74



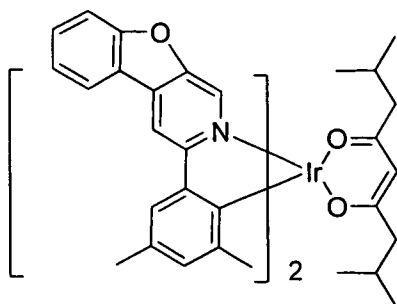
化合物 75



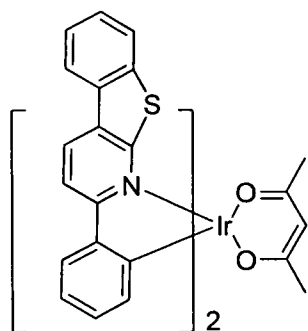
化合物 76



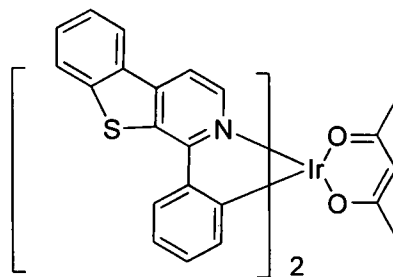
化合物 77



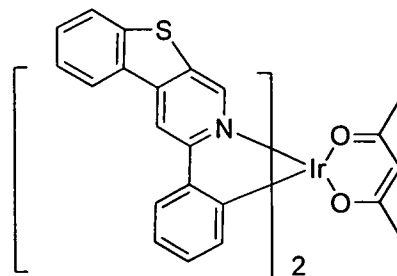
化合物 78



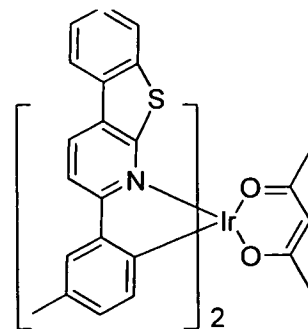
化合物 79



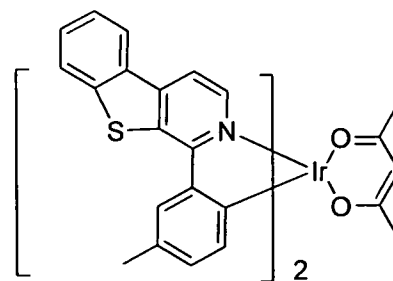
化合物 80



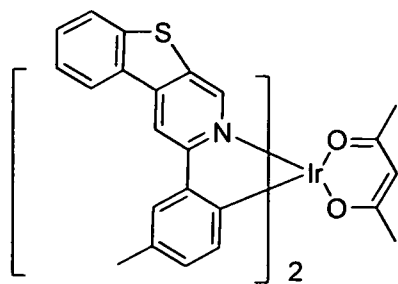
化合物 81



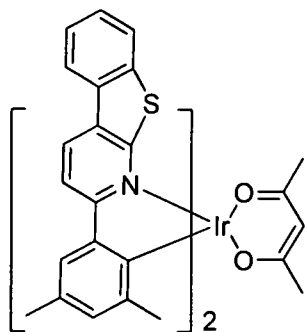
化合物 82



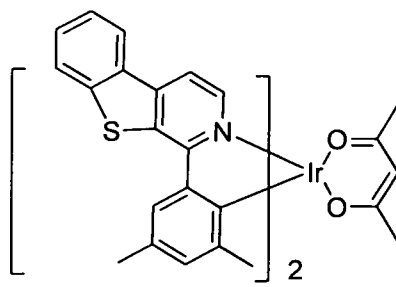
化合物 83



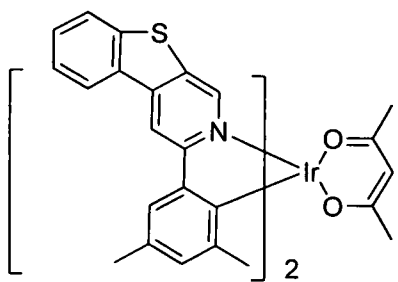
化合物 84



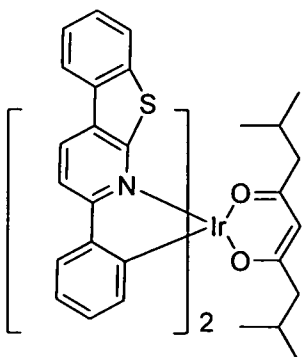
化合物 85



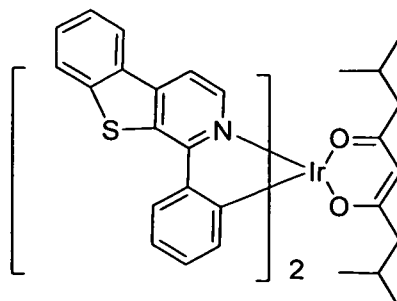
化合物 86



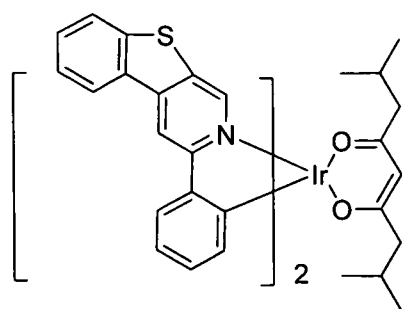
化合物 87



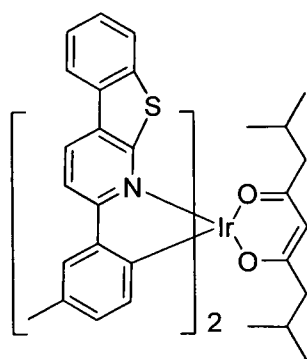
化合物 88



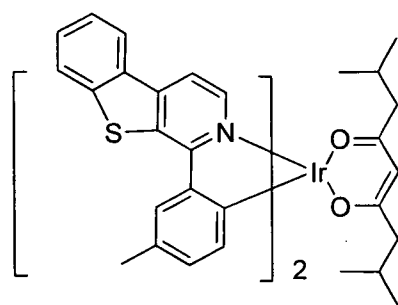
化合物 89



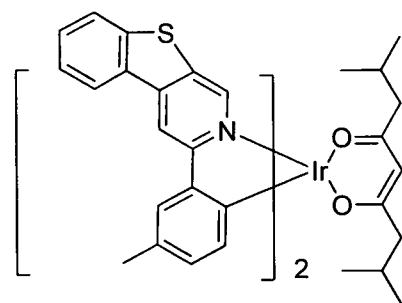
化合物 90



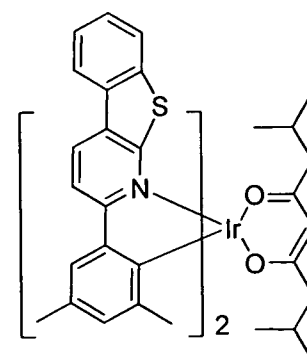
化合物 91



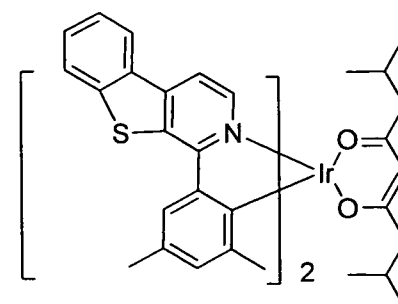
化合物 92



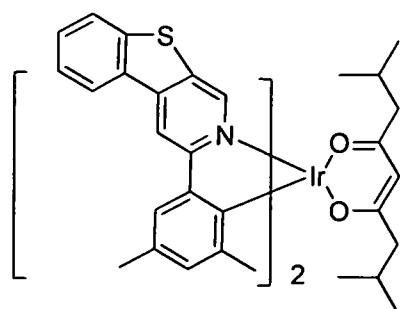
化合物 93



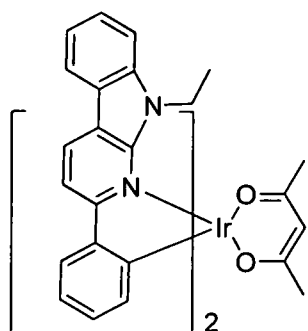
化合物 94



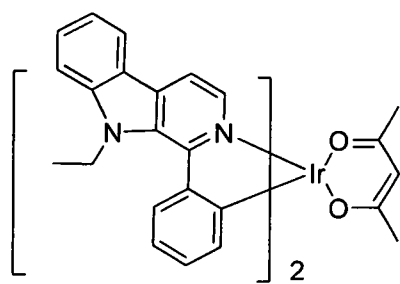
化合物 95



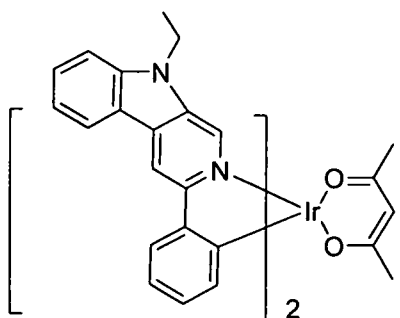
化合物 96



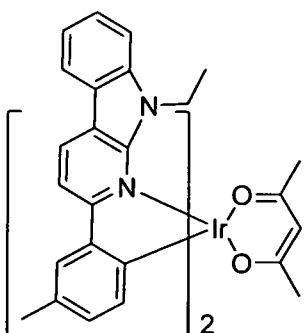
化合物 97



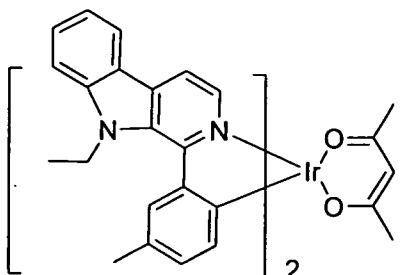
化合物 98



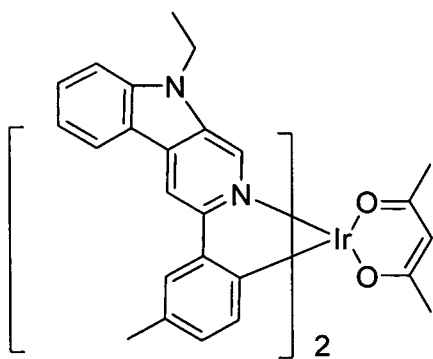
化合物 99



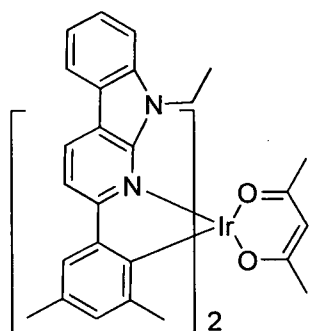
化合物 100



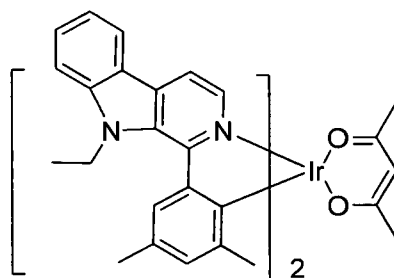
化合物 101



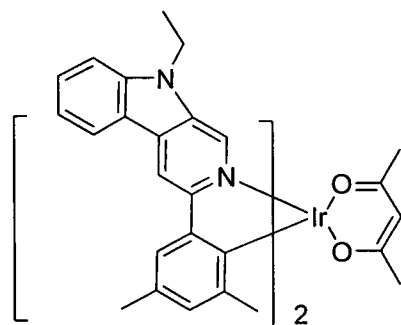
化合物 102



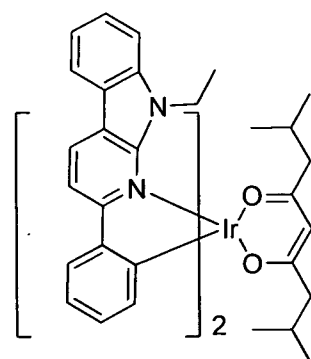
化合物 103



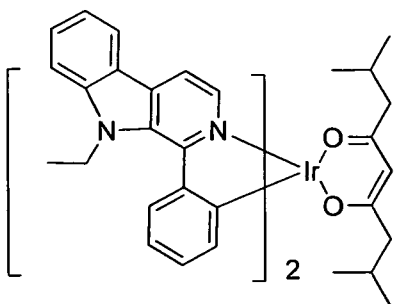
化合物 104



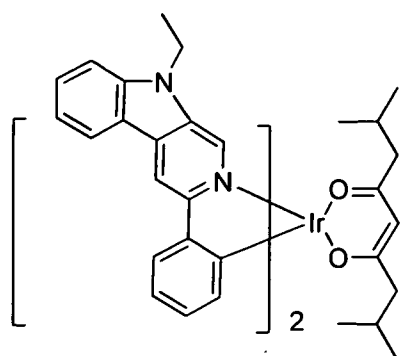
化合物 105



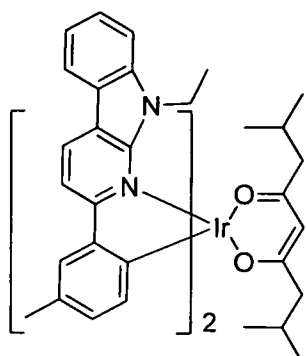
化合物 106



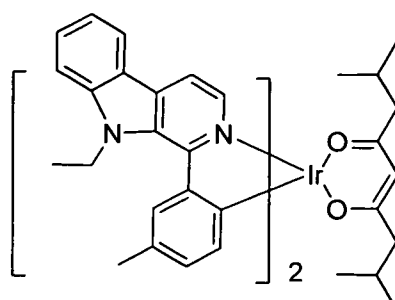
化合物 107



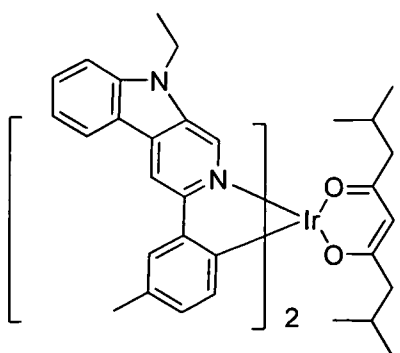
化合物 108



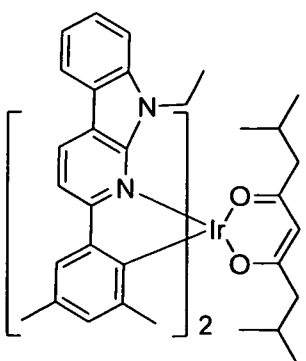
化合物 109



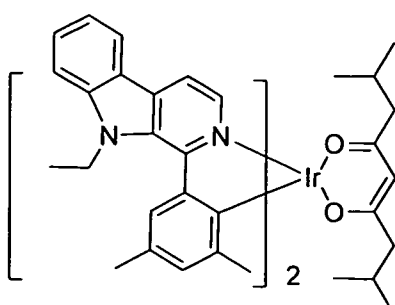
化合物 110



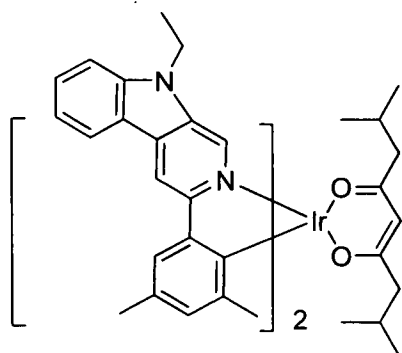
化合物 111



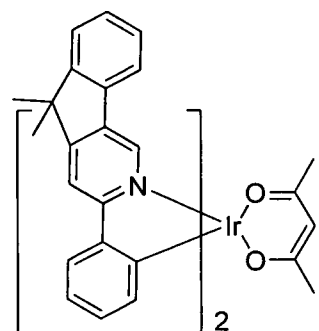
化合物 112



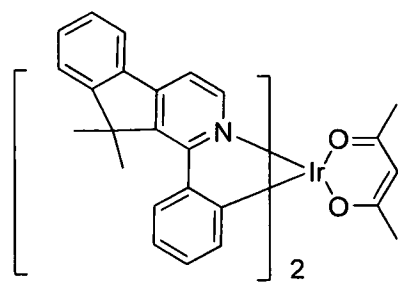
化合物 113



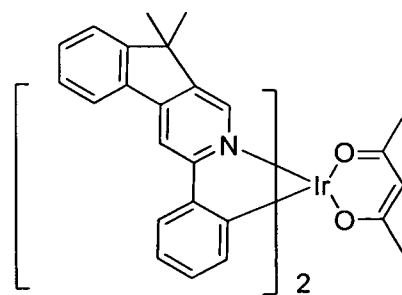
化合物 114



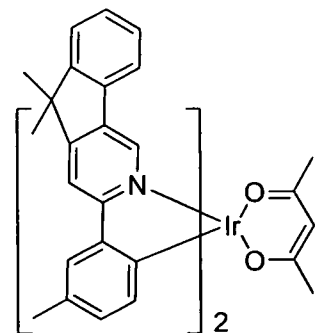
化合物 115



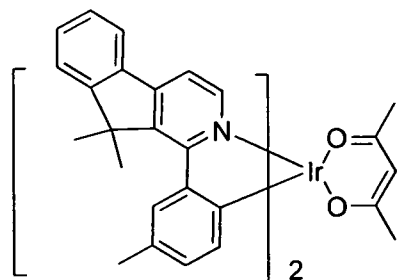
化合物 116



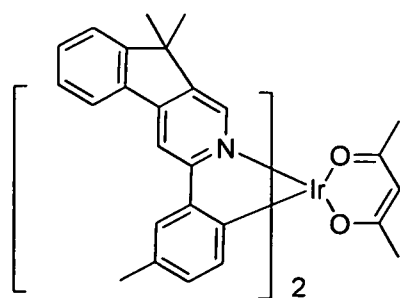
化合物 117



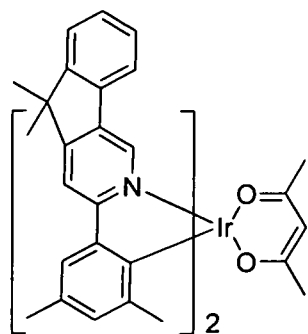
化合物 118



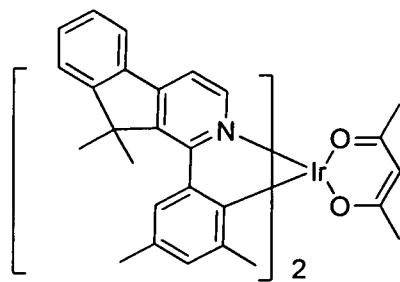
化合物 119



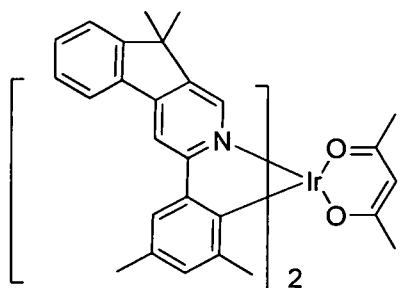
化合物 120



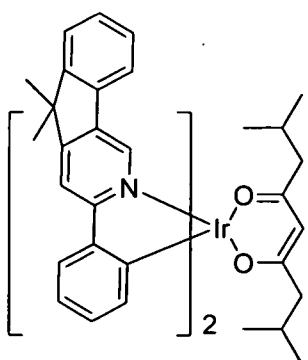
化合物 121



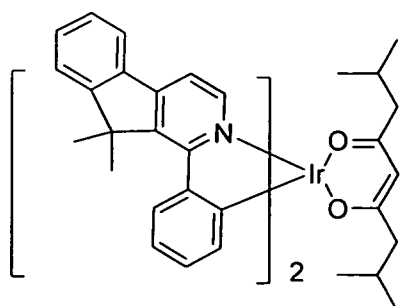
化合物 122



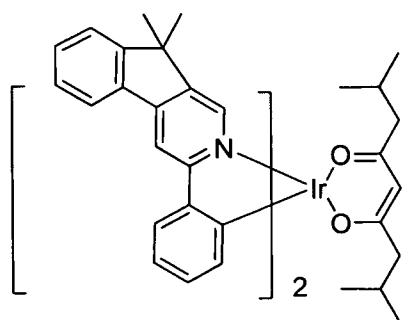
化合物 123



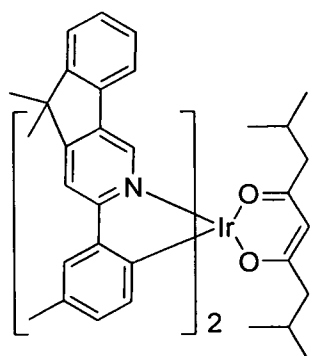
化合物 124



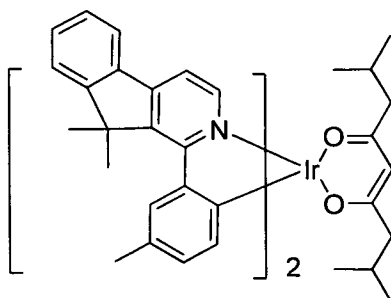
化合物 125



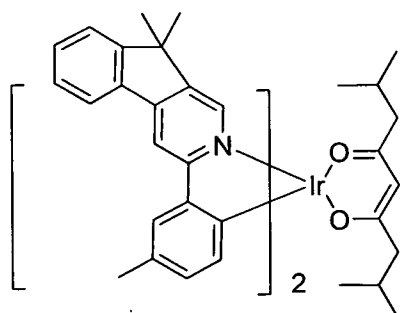
化合物 126



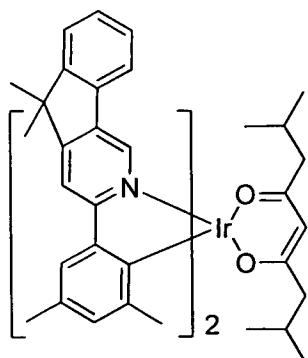
化合物 127



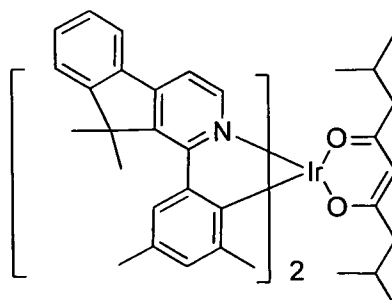
化合物 128



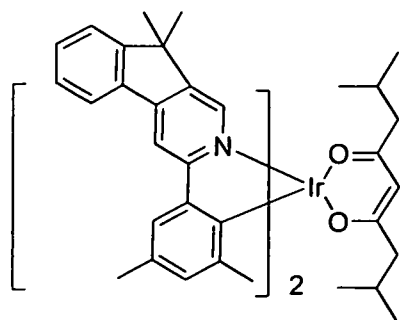
化合物 129



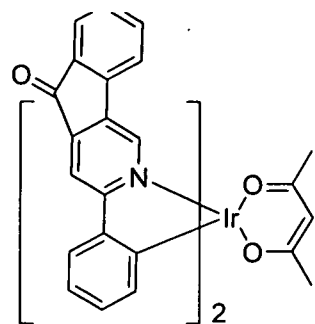
化合物 130



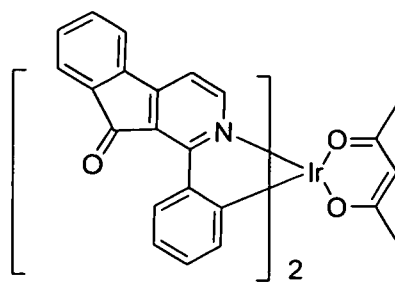
化合物 131



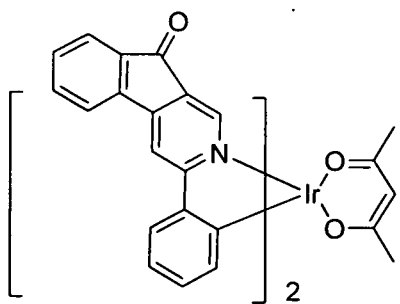
化合物 132



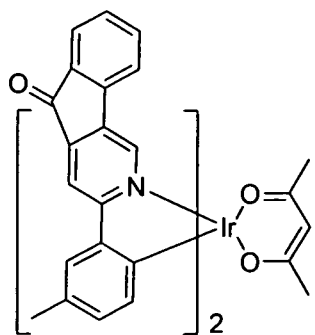
化合物 133



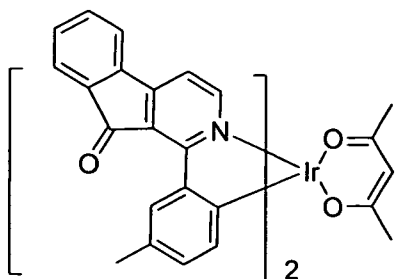
化合物 134



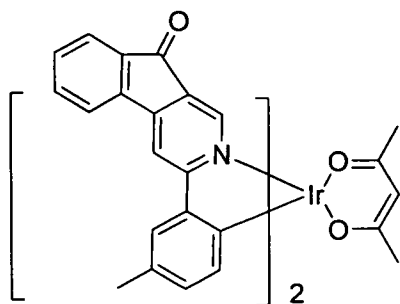
化合物 135



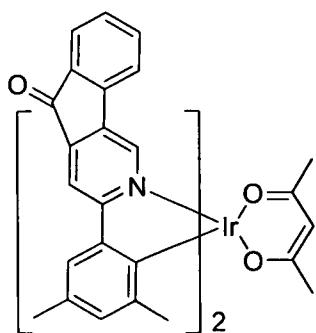
化合物 136



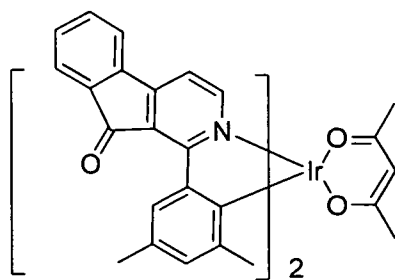
化合物 137



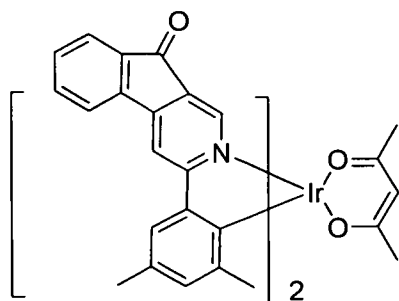
化合物 138



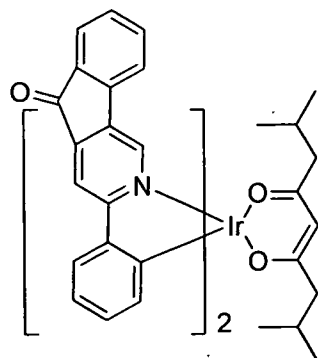
化合物 139



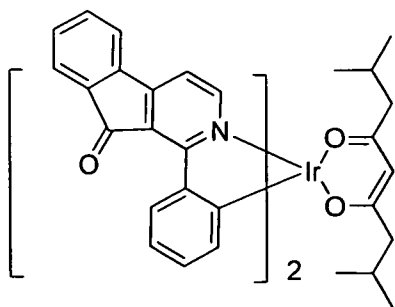
化合物 140



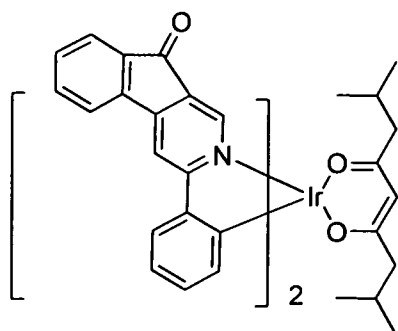
化合物 141



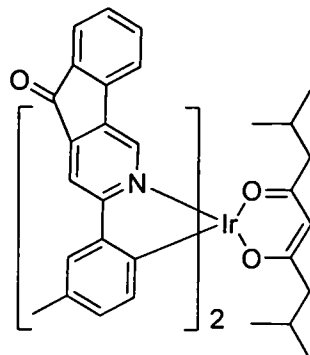
化合物 142



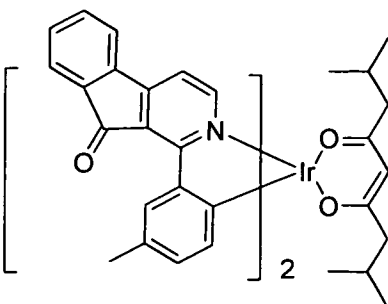
化合物 143



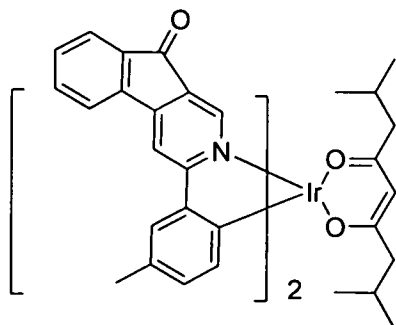
化合物 144



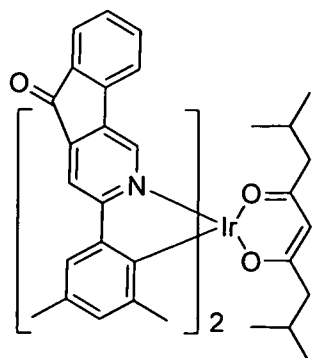
化合物 145



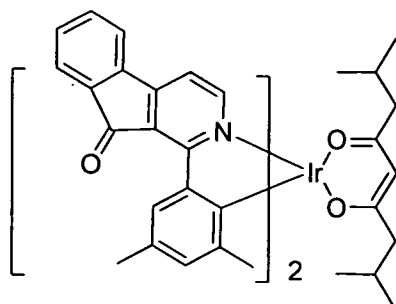
化合物 146



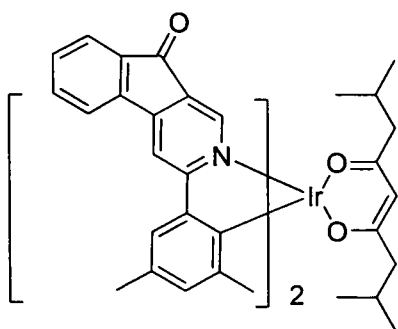
化合物 147



化合物 148



化合物 149



化合物 150

如上所述，用來取代氮雜 DBX 配位體之化學基團可用以調諧可提供具有經改良之性質之化合物及裝置之該化合物之性質。例如，該等氮雜 DBX 配位體可藉由不同雜原子取代。在一個態樣中，提供其中 X 為 O 之化合物。其中 X 為 O 之示例性化合物包括化合物 1 至 12 及化合物 61 至 78。具有氮雜二苯呋喃配位體之該等化合物可具有改善之穩定性及改善之效能。包括其中 X 為 O 之化合物之裝置為尤其佳，因為彼者可提供改善之穩定性及長使用壽命。

在另一個態樣中，提供其中 X 為 S 之化合物。其中 X 為 S 之示例性化合物包括化合物 13 至 24 及化合物 79 至 96。具有氮雜二苯噻吩配位體之該等化合物可具有改善之穩定性、提高之效能、及長使用壽命。採用其中 X 為 S 之化合物之裝置為尤其佳，因為彼者可提供極度值得一提之良好效能與長使用壽命之組合。

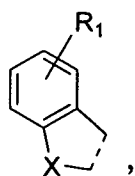
在另一個態樣中，提供其中 X 為 NR 之化合物。其中 X 為 NR 之示例性化合物包括化合物 25 至 36 及化合物 97 至 114。具有氮雜呋唑配位體之該等化合物可具有經改良之效能及穩定性。

氮雜 DBX 配位體亦可藉由含碳化學基團取代。在一個態樣中，提供其中 X 為 CRR' 之化合物。其中 X 為 CRR' 之示例性化合物包括化合物 37 至 48 及化合物 115 至 132。在另一個態樣中，提供其中 X 為 C=O 之化合物。其中 X 為 C=O 之示例性化合物包括化合物 49 至 60 及化合物 133 至 150。

本發明亦提供有機發光裝置。該裝置包括陽極、陰極、及位於該陽極及該陰極之間之有機發光層。該有機發光層包括包含具有上述結構化學式 I 之配位體之化合物。可較佳用於具有化學式 I 之化合物之所述雜原子及取代基之選擇亦較佳適用於包括具有化學式 I 之化合物之裝置。該等選擇包括其等針對 X、A、R₁、R₂、R₃、R₄、及 R₅ 而言所描述之彼者。

A 為 5 員或 6 員之芳香環或雜芳環。在一個態樣中，較佳，A 為苯。在另一個態樣中，較佳，A 選自由呋喃、噻吩、及吡咯組成之群。

R_A 為具有以下結構之取代基：

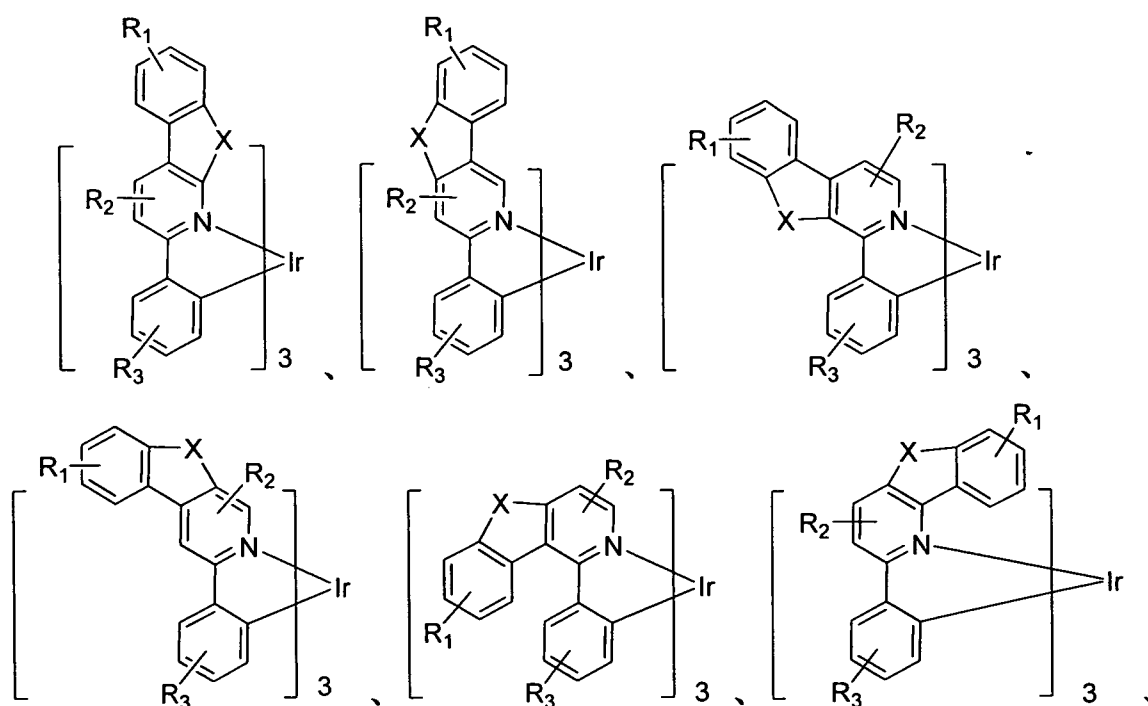


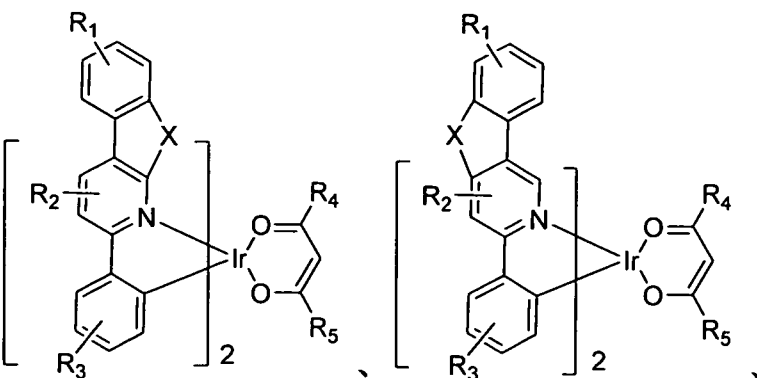
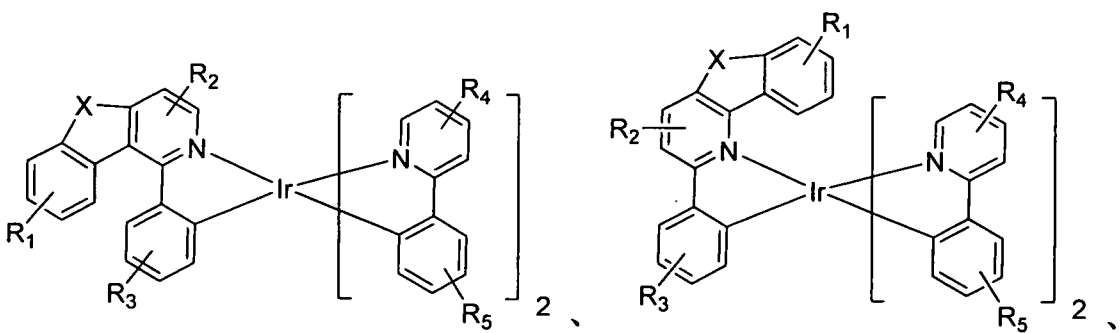
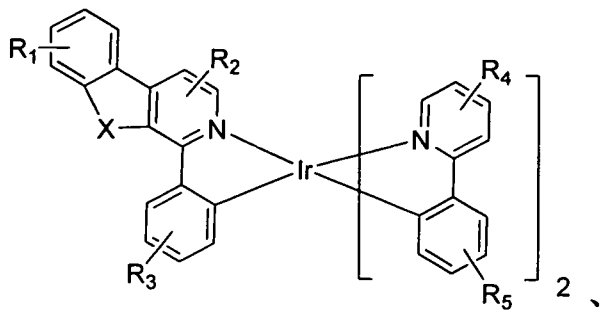
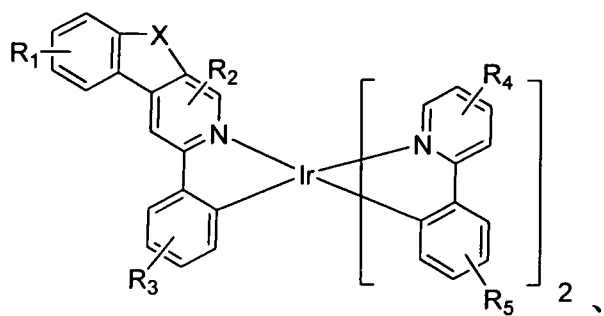
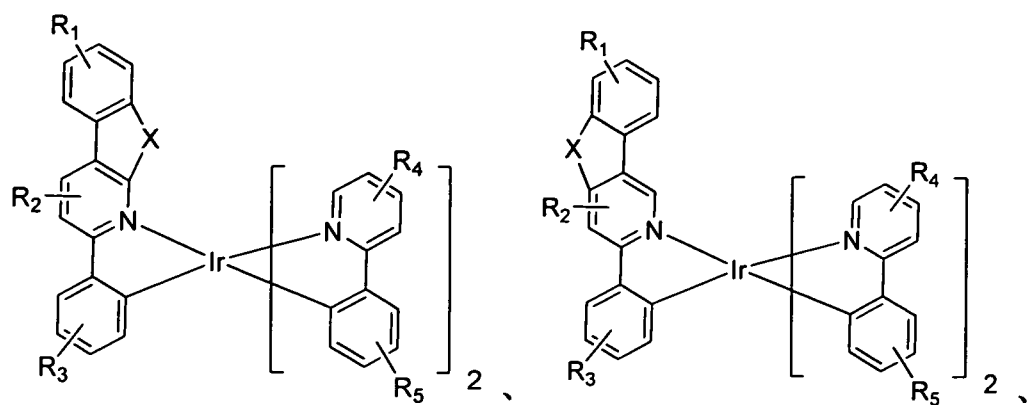
其中該取代基稠合至化學式 I 之吡啶環。X 選自由 CRR'、C=O、BR、NR、O、S、及 Se 組成之群。R 及 R' 獨立地選自氫及烷基。R₁、R₂、及 R₃ 可代表單、二、三、或四取代；R₁、R₂、及 R₃ 各自獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺

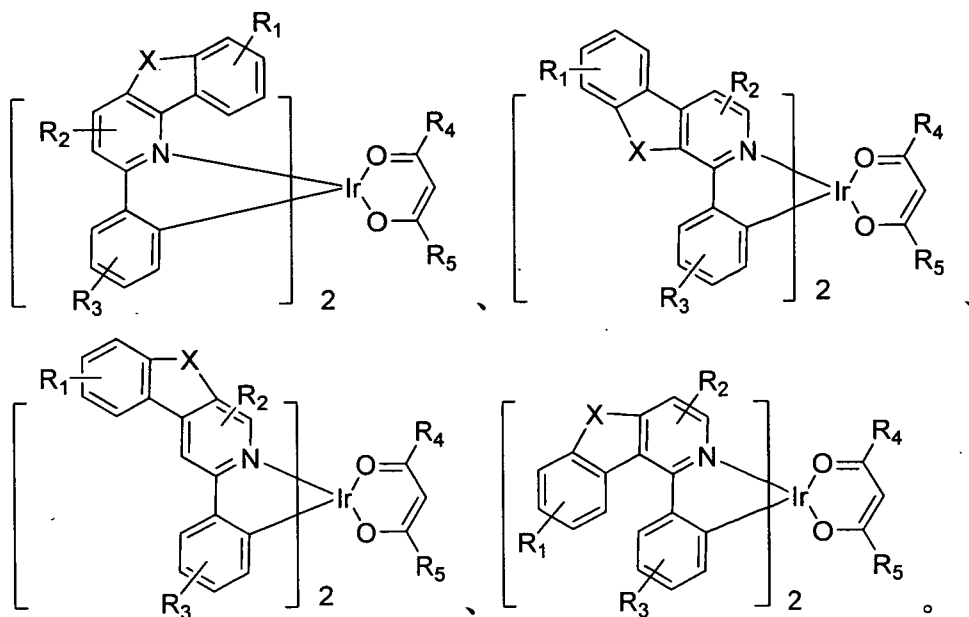
基、烯基、炔基、芳烷基、芳基、及雜芳基組成之群。該配位體係配位至具有大於40之原子量之金屬。較佳，該金屬為Ir。

在一個態樣中，提供其中該化合物包含具有結構II之配位體之裝置。在另一個態樣中，提供其中該化合物包含具有結構III之配位體之裝置。然而，在另一個態樣中，提供其中該化合物包含具有結構IV之配位體之裝置。然而，在另一個態樣中，提供其中該化合物包含具有結構V之配位體之裝置。然而，在另一個態樣中，提供其中該化合物包含具有結構VI之配位體之裝置。在進一步之另一個態樣中，提供其中該化合物包含具有結構VII之配位體之裝置。

在一個態樣中，提供其中該等化合物選自由以下組成之群之裝置：

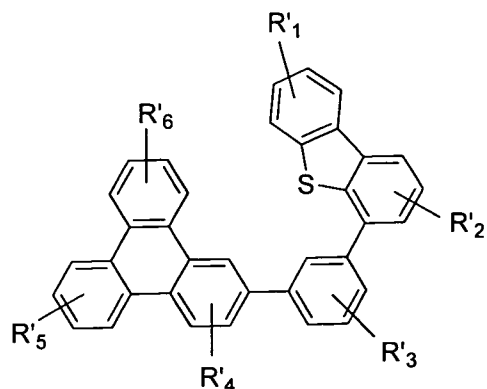






本發明提供具體言之裝置，該裝置包括包含選自由以上所示之化合物1至150組成之群之化合物之有機層。

在一個態樣中，有機發光層為發光層及化合物為發光摻雜劑。該有機層可進一步包括主體。較佳，該主體具有以下化學式：



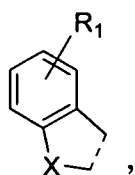
。 R'₁、R'₂、R'₃、R'₄、R'₅、及 R'₆可表示單、二、三、或四取代，且 R'₁、R'₂、R'₃、R'₄、R'₅、及 R'₆各自獨立地選自由氫、烷基、及芳基組成之群。

此外，亦提供包含裝置之消費產品。該裝置進一步包括陽極、陰極、及位於該陽極及該陰極之間之有機層。該有

機層進一步包括包含具有上述化學式I之配位體之化合物。可較佳用於具有化學式I之化合物之所述雜原子及取代基之選擇亦較佳適用於包括具有化學式I之化合物之裝置。該等選擇包括其等針對X、A、R₁、R₂、R₃、R₄、及R₅而言所描述之彼者。

A為5員或6員之芳香環或雜芳環。

R_A為具有以下結構之取代基：



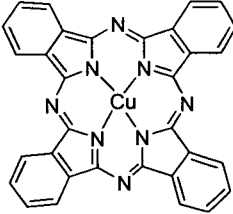
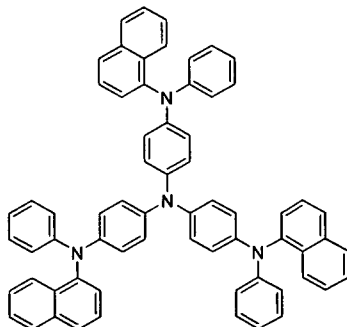
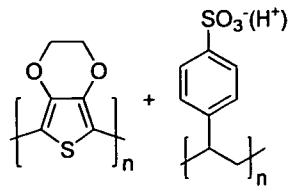
其中該取代基稠合至化學式I之吡啶環。X選自由CRR'、C=O、BR、NR、O、S、及Se組成之群。R及R'獨立地選自氫及烷基。R₁、R₂、及R₃可表示單、二、三、或四取代；R₁、R₂、及R₃各自獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基、及雜芳基組成之群。該配位體係配位至具有大於40之原子量之金屬。

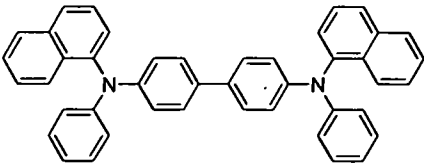
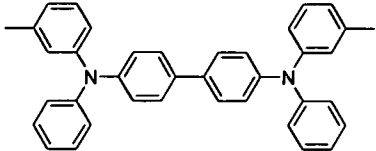
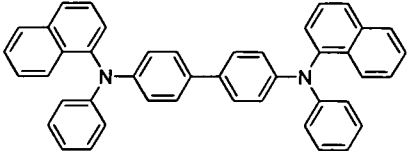
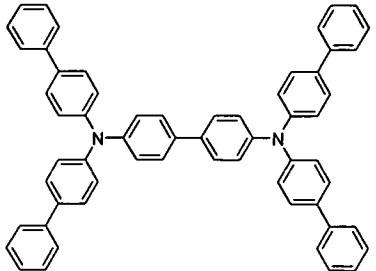
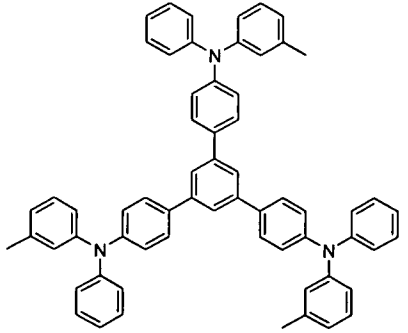
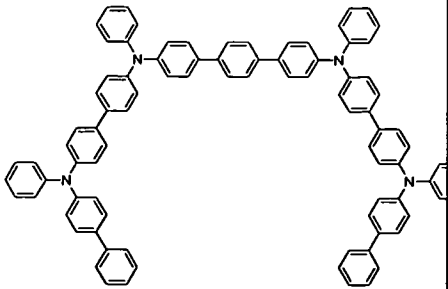
可適用於有機發光裝置中具體言之層之文中所述之該等材料可適用於與多種存於該裝置中之其他材料組合。例如，文中所揭示之發光摻雜劑可適用於與多種可能存在之主體、傳輸層、阻擋層、注入層、電極及其他層接合。以下所述或所提及之材料為適用於與在文中所揭示之該等化合物組合之材料之非限制性實例，且熟習此項相關技術之人士可容易地查閱相關文獻以識別適用於組合之其他材

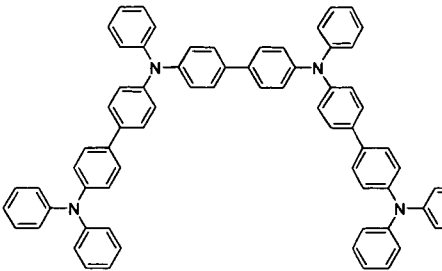
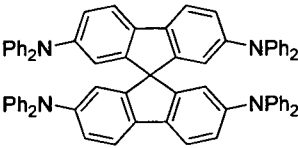
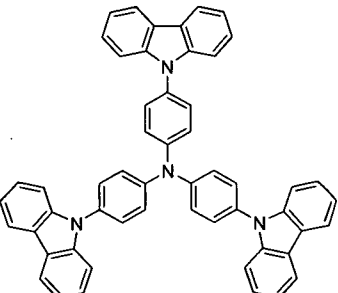
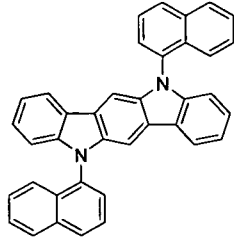
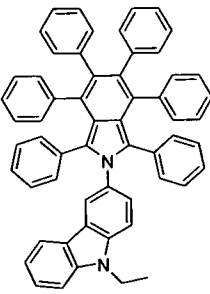
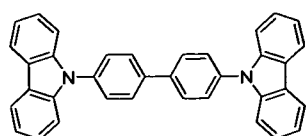
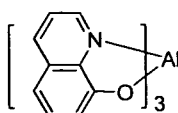
料。

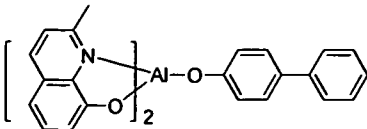
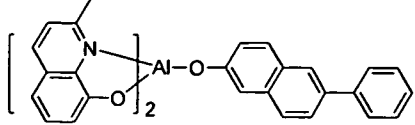
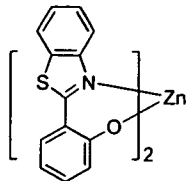
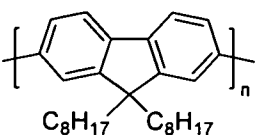
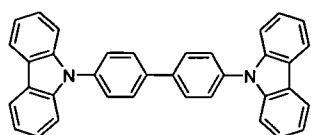
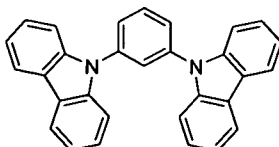
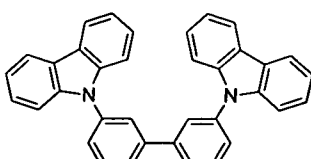
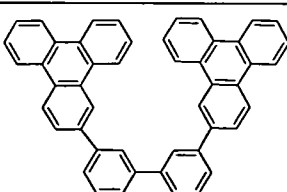
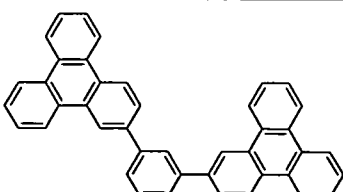
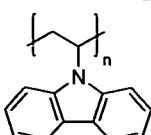
除了在中所揭示之該等材料之外及/或與在中所揭示之該等材料組合下，許多電洞注入材料、電洞傳輸材料、主體材料、摻雜劑、激子/電洞阻擋層材料、電子傳輸及電子注入材料可用於OLED中。可以與在中所揭示之材料組合之形式用於OLED中之該等材料之非限制性實例列於下表1中。表1列舉材料之非限制性種類、各類化合物之非限制性實例、及揭示該等材料之參考文獻。

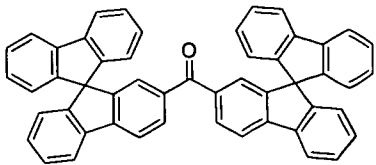
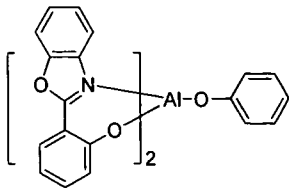
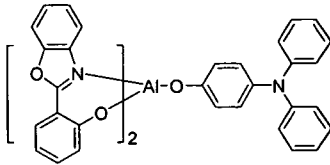
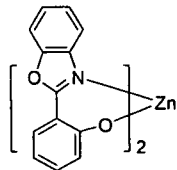
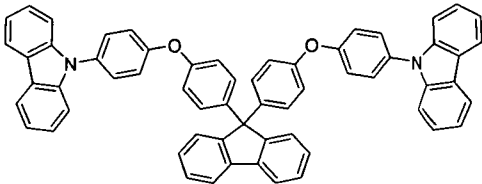
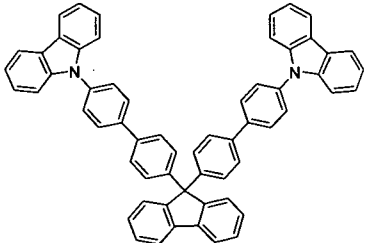
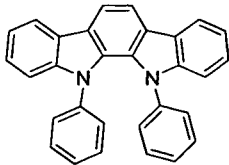
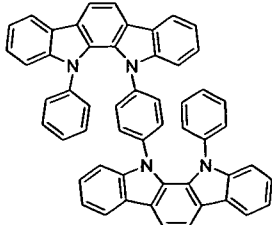
表 1

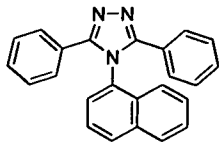
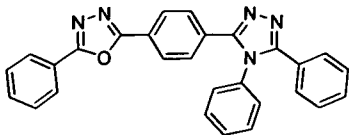
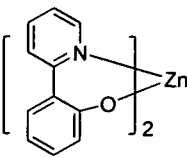
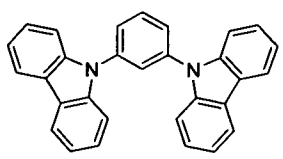
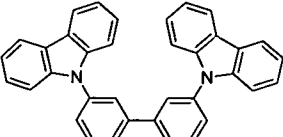
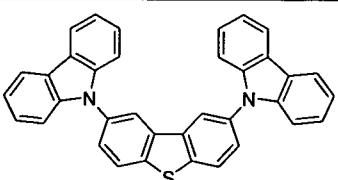
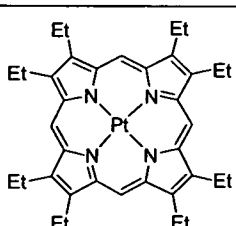
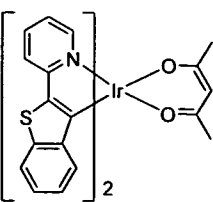
材料	材料之實例	公開案
電洞注入材料		
酞菁及卟啉化合物		Appl.Phys.Lett.6 9,2160(1996)
Starburst三芳胺類		J.Lumin.72- 74,985(1997)
CF _x 含氟烴聚合物	$\left[\text{CH}_x\text{F}_y \right]_n$	Appl.Phys.Lett.7 8,673(2001)
導電聚合物(例如，PEDOT:PSS、聚苯胺、聚噻吩)		Synth.Met.87,171 (1997)

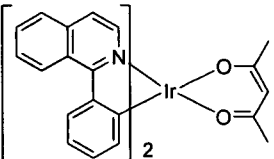
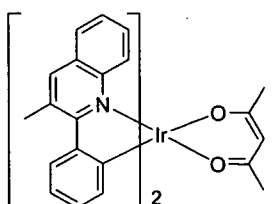
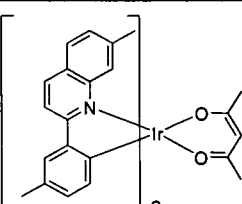
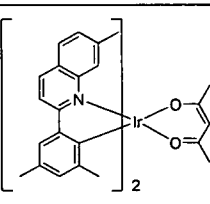
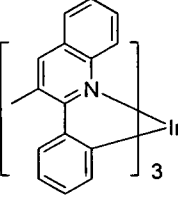
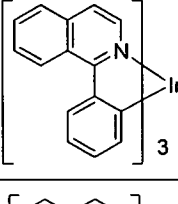
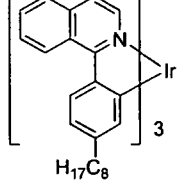
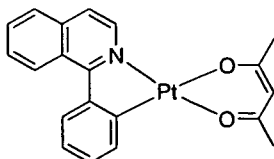
材料	材料之實例	公開案
經錯合有金屬氧化物 (諸如氧化鋁及氧化 鎢)之芳基胺		SID Symposium Digest,37,923 (2006)
電洞傳輸材料		
三芳基胺(例如 TPD、 α -NPD)		Appl.Phys.Lett.5 1,913(1987)
		US5061569
		EP650955
		J.Mater.Chem.3,3 19(1993)
		Appl.Phys.Lett.9 0,183503 (2007)

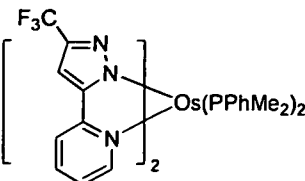
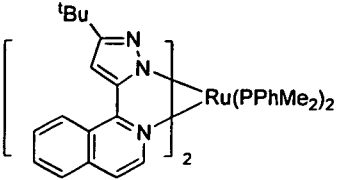
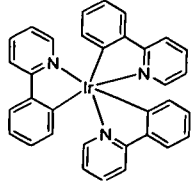
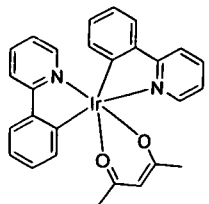
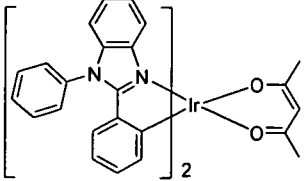
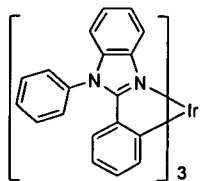
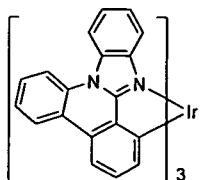
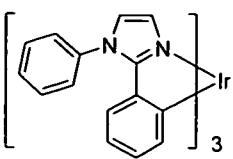
材料	材料之實例	公開案
		Appl.Phys.Lett.9 0,183503 (2007)
螺旋芴殼上之三芳基胺		Synth.Met.91,209 (1997)
芳基胺咔唑化合物		Adv.Mater. 6,677(1994)
吲哚并咔唑		Synth.Met.111,42 1(2000)
異吲哚化合物		Chem.Mater.15,3 148(2003)
螢光OLED主體材料		
紅光主體		
芳基咔唑		Appl.Phys.Lett.7 8,1622(2001)
金屬8-羥基喹啉 (例如 Alq ₃ 、BALq)		Nature 395, 151(1998)

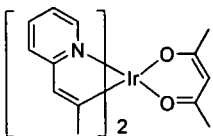
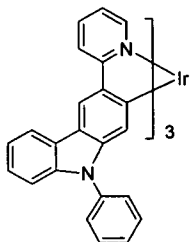
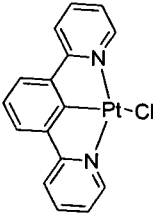
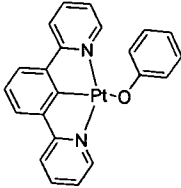
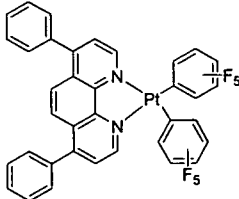
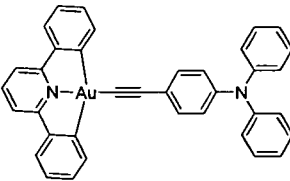
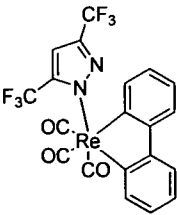
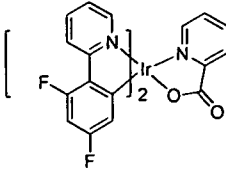
材料	材料之實例	公開案
		US20060202194
		WO2005014551
金屬苯氧基苯并噻唑化合物		Appl.Phys.Lett.9 0,123509(2007)
共軛寡聚物及聚合物 (例如聚芴)		Org.Electron.1,15 (2000)
綠光主體		
芳基咔唑		Appl.Phys.Lett.7 8,1622(2001)
		US2003175553
		WO2001039234
芳基三伸苯基化合物		US20060280965
		US20060280965
聚合物(例如PVK)		Appl.Phys.Lett.7 7,2280(2000)

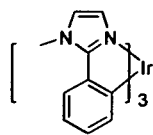
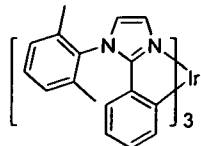
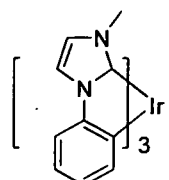
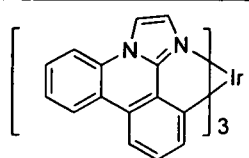
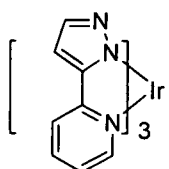
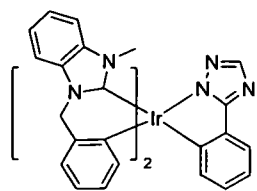
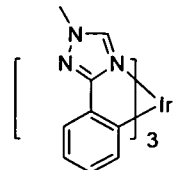
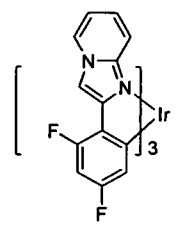
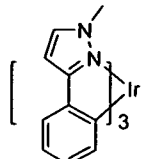
材料	材料之實例	公開案
螺旋芴化合物		WO2004093207
金屬苯氧基苯并噁唑化合物		WO05089025
		WO06132173
		JP200511610
螺旋芴-咔唑化合物		JP2007254297
		JP2007254297
吲哚并咔唑		WO07063796
		WO07063754

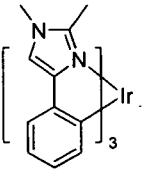
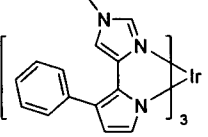
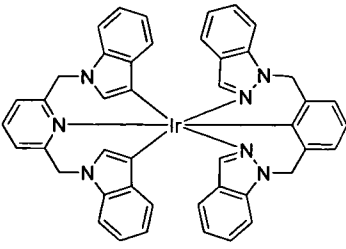
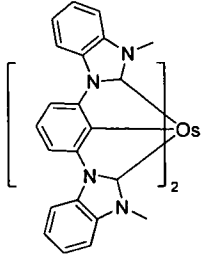
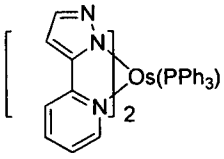
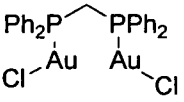
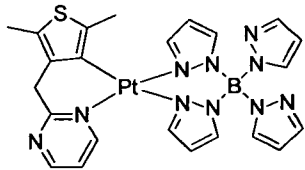
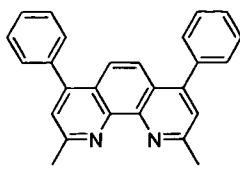
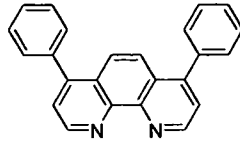
材料	材料之實例	公開案
5員環電子缺乏雜環 (例如三唑、噁二唑)		J.Appl.Phys.90,5 048(2001)
		WO04107822
金屬苯氧基吡啶化 合物		WO05030900
藍光主體		
芳基咔唑		Appl. Phys. Lett, 82, 2422 (2003)
		US20070190359
二苯并噻吩-咔唑化 合物		WO2006114966
螢光摻雜劑		
紅光摻雜劑		
重金屬卟啉(例如 PtOEP)		Nature 395,151(1998)
銦(III)有機金屬錯 合物		Appl.Phys.Lett.7 8,1622(2001)

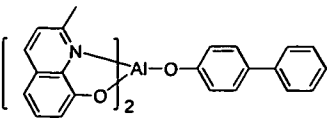
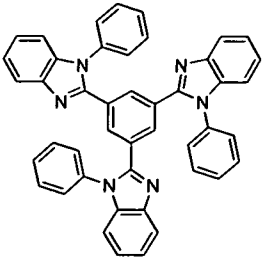
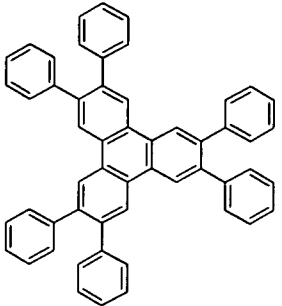
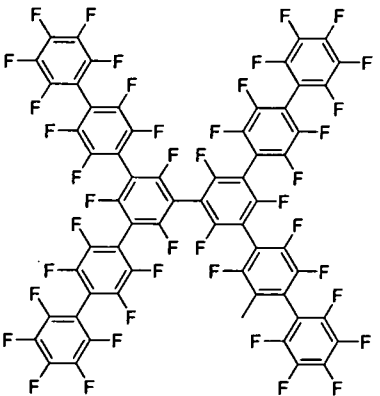
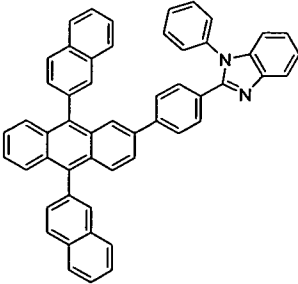
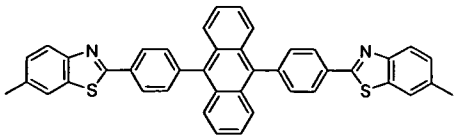
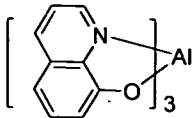
材料	材料之實例	公開案
		US06835469
		US06835469
		US20060202194
		US20060202194
		US07087321
		US07087321
		Adv.Mater.19,73 9(2007)
鉑(II)有機金屬錯合物		WO2003040257

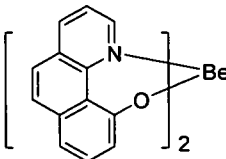
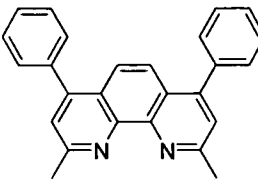
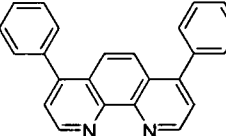
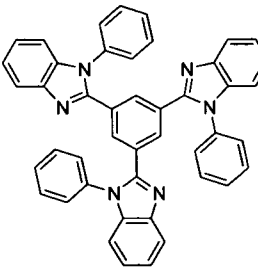
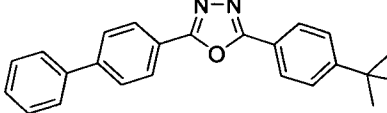
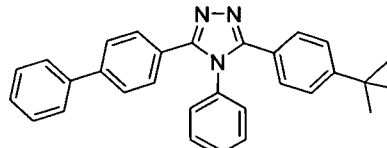
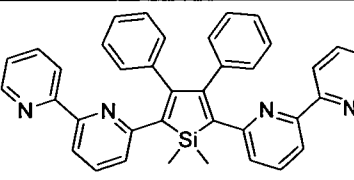
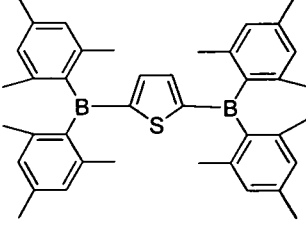
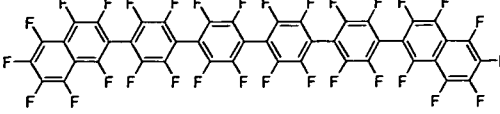
材料	材料之實例	公開案
銱(III)錯合物		Chem.Mater.17,3 532(2005)
鈦(II)錯合物		Adv.Mater.17,10 59(2005)
綠光摻雜劑		
銱(III)有機金屬錯 合物	 及其衍生物	Inorg.Chem.40, 1704 (2001)
		US2002034656
		US06687266
		Chem.Mater.16, 2480(2004)
		US2007190359
		US 2006008670 JP2007123392

材料	材料之實例	公開案
		Adv.Mater.16,2 003(2004)
		Angew.Chem.Int. Ed.2006, 45,7800
Pt(II)有機金屬錯合物		Appl.Phys.Lett. 86,153505 (2005)
		Appl.Phys.Lett. 86,153505 (2005)
		Chem.Lett.34,5 92(2005)
金錯合物		Chem.Commun. 2906(2005)
銠(III)錯合物		Inorg.Chem.42, 1248(2003)
藍光摻雜劑		
銱(III)有機金屬錯合物		WO2002002714

材料	材料之實例	公開案
		WO2006009024
		US2006251923
		WO200605641、 US2005260441
		US2007190359
		US2002134984
		Angew.Chem.Int. Ed.47,1(2008)
		Chem.Mater.18,5 119(2006)
		Inorg.Chem.46, 4308(2007)
		WO05123873

材料	材料之實例	公開案
		WO05123873
		WO07004380
		WO06082742
鐵(II)錯合物		US2005260449
		Organometallics 23,3745 (2004)
金錯合物		Appl.Phys.Lett.7 4,1361(1999)
鉑(II)錯合物		WO06098120,W O06103874
激子/電洞阻擋層材料		
浴銅靈(Bathocuprine) 化合物(例如 BCP、 BPhen等等)		Appl.Phys.Lett.7 5,4(1999)
		Appl.Phys.Lett.7 9,449(2001)

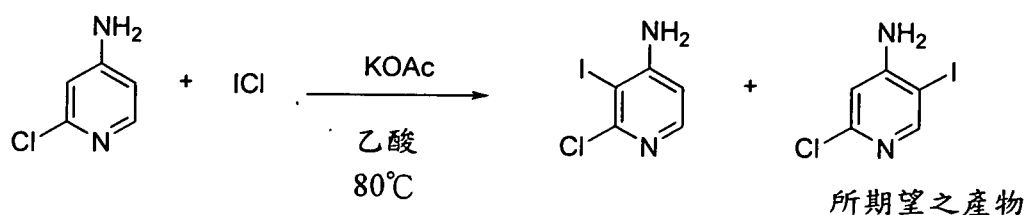
材料	材料之實例	公開案
金屬8-羥基喹啉(例如 BAlq)		Appl.Phys.Lett.8 1,162(2002)
5員環電子缺乏雜環 (諸如三唑、噁二唑、 咪唑、苯并咪唑)		Appl.Phys.Lett.8 1,162(2002)
三伸苯基化合物		US20050025993
氟化芳香族化合物		Appl.Phys.Lett.7 9,156(2001)
電子傳輸材料		
蔥-苯并咪唑化合物		WO03060956
蔥-苯并噻唑化合物		Appl.Phys.Lett.8 9,063504(2006)
金屬8-羥基喹啉(例如 Alq ₃)		Appl.Phys.Lett.5 1,913(1987)

材料	材料之實例	公開案
金屬羥基苯并喹啉		Chem.Lett.5,905(1993)
浴銅靈 (Bathocuprine) 化合物 (諸如 BCP、BPhen 等等)		Appl.Phys.Lett.9 1,263503(2007)
		Appl.Phys.Lett.7 9,449(2001)
5員環電子缺乏雜環 (例如，三唑、噁二唑、咪唑、苯并咪唑)		Appl.Phys.Lett.7 4,865(1999)
		Appl.Phys.Lett.5 5,1489(1989)
		Jpn.J.Apply.Phys. 32,L917(1993)
矽羅(Silole)化合物		Org.Electron.4,11 3(2003)
芳基硼烷化合物		J.Am.Chem.Soc. 120,9714(1998)
氟化芳香族化合物		J.Am.Chem.Soc. 122,1832(2000)

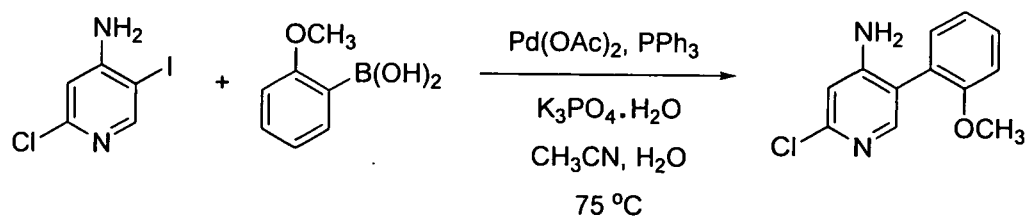
實驗

化合物實例

實例 1. 化合物 1 之合成

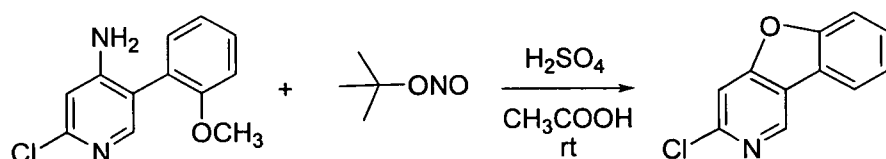


2-氯-5-碘-4-氨基吡啶之合成：使 2-氯-4-氨基吡啶 (25 g, 194 mmol) 及 乙酸鉀 (19.05 g, 194 mmol) 溶於 250 mL 乙酸並加熱至 80°C。逐滴添加在乙酸 (40 mL) 中之 (31.56 g, 194 mmol) 之溶液且使該反應混合物於 80°C 下攪拌 3 h。使該反應混合物冷卻至室溫且藉由飽和 NaHCO₃ 水溶液中中和。沈殿出可溶於二氯甲烷之暗灰白色固體，然後，利用飽和水性 NaHSO₃ 洗滌、經過 Na₂SO₄ 乾燥、濃縮且採用己烷及乙酸乙酯作為洗提液藉由管柱層析純化。分離伴隨著 13.4 g 不期望之異構體之 11.6 g 標題化合物。

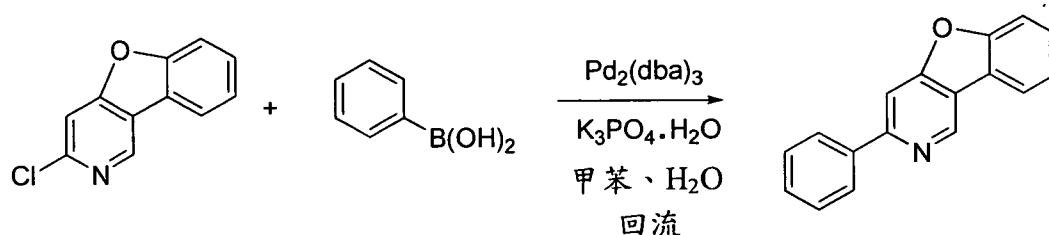


2-氯-5-(2-甲氧基苯基)吡啶-4-胺之合成：在氮氣下，將磷酸鉀 (18.28 g, 79 mmol)、三苯基膦 (1.04 g, 3.97 mmol)、2-氯-5-碘-4-氨基吡啶 (10.1 g, 39. mmol)、2-甲氧基苯基硼酸 (8.44 g, 55.57 mmol) 及 乙酸鉍 (0.45 g, 1.98

mmol)依次添加至脫氯乙腈(300 mL)及水(100 mL)。使該反應混合物在75°C下加熱過夜，然後，冷卻至室溫。分離有機層，且繼而，利用乙酸乙酯萃取水性層。已合併之有機層係經過硫酸鈉進行乾燥、濃縮且採用己烷及乙酸乙酯作為洗提液進行管柱層析。分離7.5 g標題化合物。

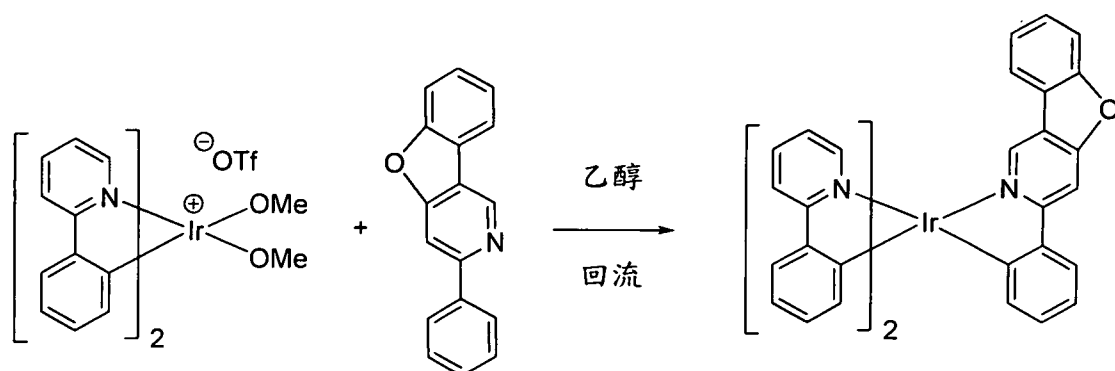


3-氯苯并呋喃并[3,2-c]吡啶之合成:使2-氯-5-(2-甲氧基苯基)吡啶-4-胺(7.5 g, 31.96 mmol)溶於冰乙酸(200 mL)及濃硫酸(1 mL)中。逐滴添加在10 mL乙酸中之亞硝酸第三丁基酯(11.39 mL, 95.87 mmol)之溶液且攪拌30分鐘。減壓濃縮可溶於二氯甲烷之該反應混合物。該反應混合物經過硫酸鈉乾燥、濃縮且殘渣係採用己烷及乙酸乙酯作為洗提液藉由矽膠管柱純化而得到5.0 g標題化合物。



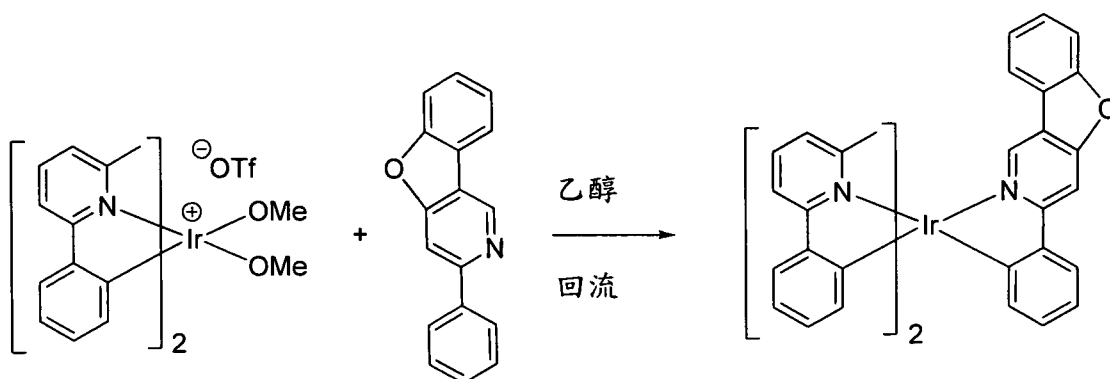
3-苯基苯并呋喃并[3,2-c]吡啶之合成:將3-氯苯并呋喃并[3,2-c]吡啶(2.89 g, 14 mmol)、苯基硼酸(2.56 g, 21 mmol)、磷酸鉀(9.6 g, 42 mmol)、2-二環己基膦基-2',6'-二甲氧基聯苯(0.45 g, 1.12 mmol)及Pd₂(bda)₃ (0.256 g, 0.28 mmol)加至甲苯(100 mL)及水(10 mL)。使氮氣通過該溶液

鼓泡30分鐘，且然後，使該溶液在氮氣氛圍中回流過夜。然後，使該反應物冷卻至室溫並使有機相分離水相。利用乙酸乙酯洗滌水相，繼而合併有機部分並經過硫酸鈉進行乾燥，然後真空移除溶劑。產物係利用乙酸乙酯及己烷作為洗提液採用矽膠進行層析。移除溶劑而得到2.77 g標題化合物。



化合物1之合成:使銥中間體(2.67 g, 3.76 mmol)及3-苯基苯并呋喃并[3,2-c]吡啶(2.77 g, 11.29 mmol)於50 mL無水乙醇中混合。在氮氣下，將該混合物加熱至回流進行24 h。使該反應混合物冷卻至室溫；沈殿物係經由過濾收集。該粗沈殿物(1.9 g)係採用2:3之二氯甲烷及己烷藉由矽膠管柱純化，而在管柱純化之後，可獲得0.9 g所期望之產物。該化合物可在290°C下，進一步藉由高真空昇華純化而得到0.55 g產物(HPLC純度99.7%)。

實例2.化合物7之合成



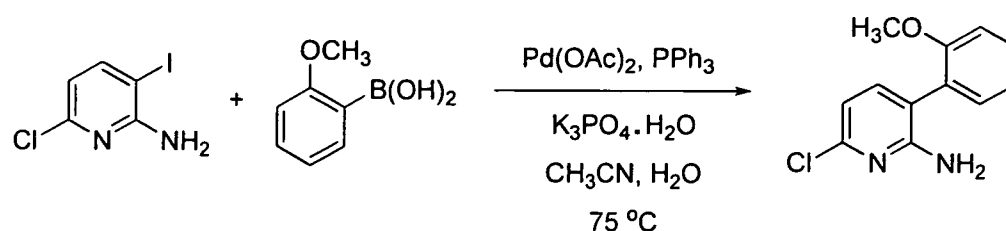
化合物7之合成：使銥中間體(1.82 g, 2.46 mmol)及3-苯基苯并呋喃并[3,2-c]吡啶(1.81 g, 7.38 mmol)於40 mL無水乙醇中混合。在氮氣下，將該混合物加熱至回流進行24 h。使該反應混合物冷卻至室溫；沈殿物係經由過濾收集。該粗沈殿物(1.8 g)係採用熱二氯甲烷藉由短矽膠管柱純化。該化合物可在290°C下，進一步藉由高真空昇華純化而得到0.64 g產物(HPLC純度99%)。

實例3.化合物8之合成

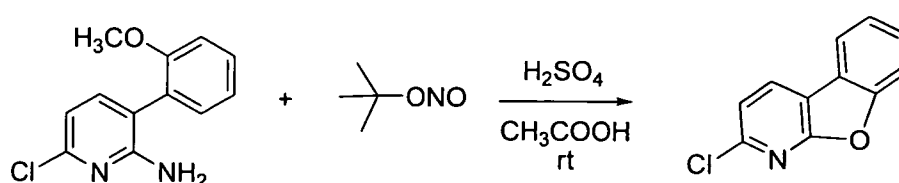


6-氯-5-碘-2-氨基吡啶之合成：使2-氯-6-氨基吡啶(23.0 g, 178 mmol)及乙酸鉀(17.5 g, 178 mmol)溶於200 mL乙酸中且加熱至80°C。逐滴添加在乙酸(40 mL)中之ICl(29.05 g, 178 mmol)之溶液且使該反應混合物於80°C下攪拌4 h。使該反應混合物冷卻至室溫，然後，減壓移除該乙酸。使殘渣溶於乙酸乙酯中且藉由飽和NaHCO₃水溶液中和。有機層係利用飽和水性NaHSO₃洗滌、經過Na₂SO₄乾燥、濃縮

且採用己烷及乙酸乙酯作為洗提液藉由矽膠管柱純化。分離 6.1 g 標題化合物。

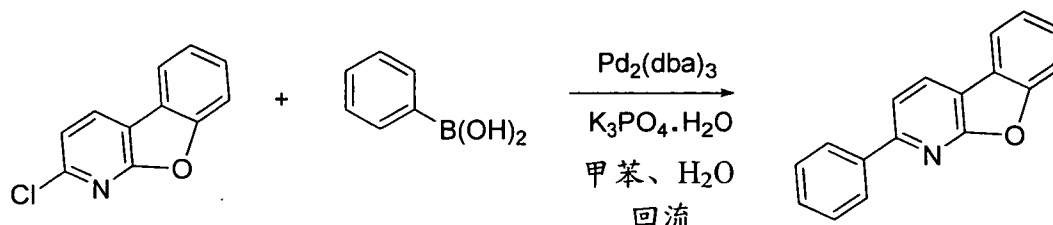


6-氯-3-(2-甲氧基苯基)吡啶-2-胺之合成:在氮氣下,將磷酸鉀 (12.72 g, 60 mmol)、三苯基膦 (0.682 g, 2.40 mmol)、6-氯-5-碘-2-胺基吡啶 (6.1 g, 24 mmol)、2-甲氧基苯基硼酸 (5.10 g, 33.5 mmol) 及乙酸鈾 (0.27 g, 1.20 mmol) 依次添加至脫氣乙腈 (200 mL) 及水 (60 mL)。使該反應混合物在 75°C 下加熱過夜, 然後, 冷卻至室溫。分離有機層, 且繼而利用乙酸乙酯萃取水性層。已合併之有機層經過硫酸鈉乾燥、濃縮且採用己烷及乙酸乙酯作為洗提液藉由矽膠管柱純化而製得 4.05 g 標題化合物。

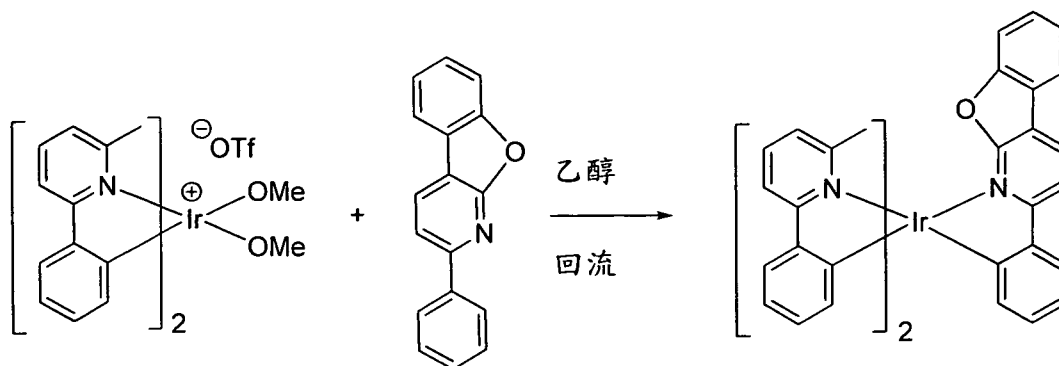


2-氯苯并呋喃并 [2,3-b] 吡啶之合成:使 6-氯-3-(2-甲氧基苯基)吡啶-2-胺 (4.0 g, 17.04 mmol) 溶於冰乙酸 (100 mL) 及濃硫酸 (1 mL) 中。逐滴添加在 6 mL 乙酸中之亞硝酸第三丁基酯 (6.1 mL, 51.2 mmol) 之溶液且攪拌 30 分鐘。減壓濃縮可溶於二氯甲烷之反應混合物。該反應混合物可藉由飽和

NaHCO₃水溶液中中和且使有機相分離水性相。利用二氯甲烷萃取水相，然後，已合併之有機層經過硫酸鈉乾燥、濃縮且殘渣係採用己烷及乙酸乙酯作為洗提液藉由矽膠管柱純化而得到1.85 g標題化合物。

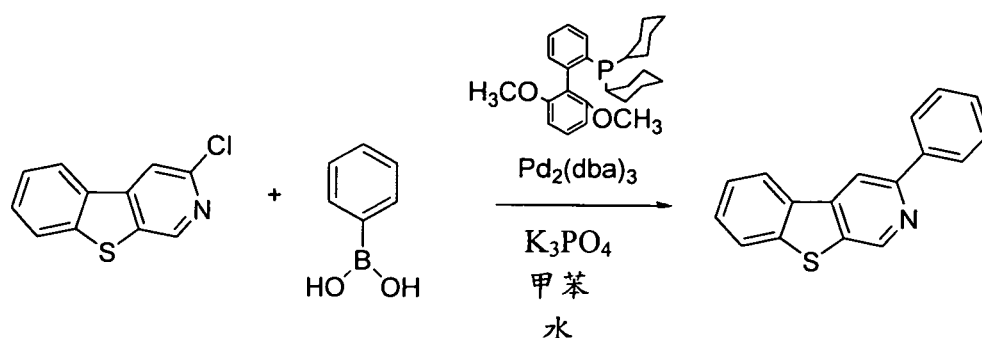


2-苯基苯并呋喃并[2,3-b]吡啶之合成：將2-氯苯并呋喃并[2,3-b]吡啶(1.33 g, 6.53 mmol)、苯基硼酸(1.19 g, 9.80 mmol)、磷酸鉀(4.51 g, 19.59 mmol)、2-二環己基膦基-2',6'-二甲氧基聯苯(0.214 g, 0.522 mmol)及Pd₂(bda)₃(0.119 g, 0.13 mmol)加至甲苯(40 mL)及水(4 mL)。使氮氣通過該溶液鼓泡30分鐘，及然後，在氮氣氛圍中，使該溶液回流過夜。然後，使該反應物冷卻至室溫並使有機相分離水相。利用乙酸乙酯洗滌水相，繼而合併有機部分並經過硫酸鈉乾燥，然後，真空移除溶劑。產物係利用乙酸乙酯及己烷作為洗提液採用矽膠進行層析。移除溶劑而得到1.45 g標題化合物。



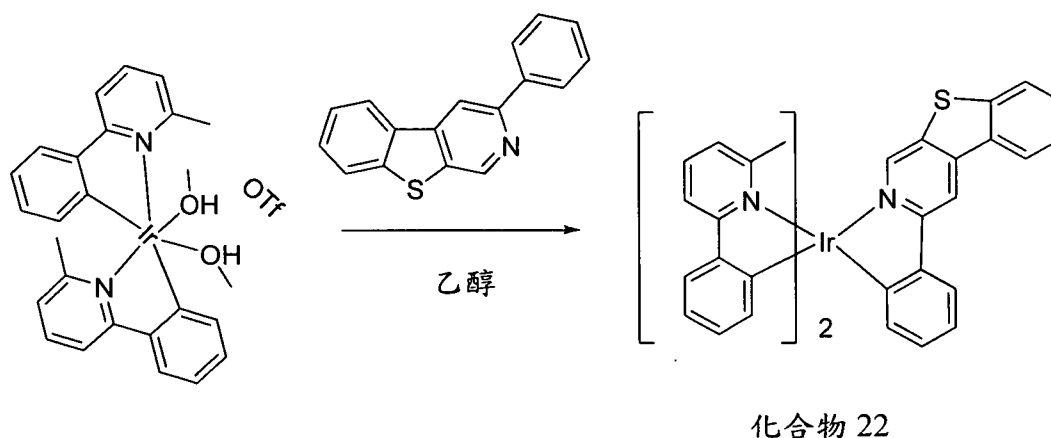
化合物8之合成:使鉍中間體(1.15 g, 1.55 mmol)及2-苯基苯并呋喃并[2,3-b]吡啶(1.14 g, 4.66 mmol)於30 mL無水乙醇中混合。在氮氣下，將該混合物加熱至回流進行24 h。使該反應混合物冷卻至室溫；沈殿物係經由過濾收集。該粗沈殿物(1.0 g)係採用二氯甲烷及己烷作為洗提液藉由矽膠管柱純化。該化合物可在290℃下，進一步藉由高真空昇華純化而得到0.3 g產物(HPLC純度99%)。

實例4.化合物22之合成



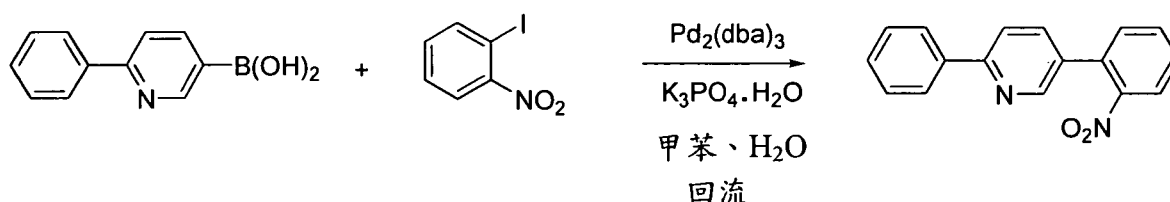
2-苯基-3-氮雜二苯并噻吩之合成:使2-氯-3-氮雜二苯并噻吩(1.3 g, 5.7 mmol)、苯基硼酸(0.87 g, 7.1 mmol)、二環己基(2',6'-二甲氧基聯苯基-2-基)膦(S-Phos)(0.09 g, 0.23 mmol)、及磷酸鉀(3.3 g, 14.3 mmol)於60 mL甲苯及6 mL水中混合。直接使氮氣在該混合物內鼓泡30分鐘。接下來，添加 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.05 g, 0.05 mmol)且使該混合物在氮氣下加熱至回流進行3天。然後，使該反應物冷卻至室溫並使有機相分離水相。利用乙酸乙酯洗滌水相，繼而合併有機部分並經過硫酸鈉進行乾燥，然後真空移除溶劑。產物係利用乙酸乙酯及己烷作為洗提液採用矽膠進行層析。移除溶劑而得到1.45 g標題化合物。使該混合物冷卻，然後，分

離有機層。該有機層係利用鹽水洗滌、經過硫酸鎂乾燥、過濾、且蒸發至殘渣。該殘渣係藉由利用5%乙酸乙酯/己烷洗提之管柱層析純化。純化後，獲得0.4 g所期望之產物。



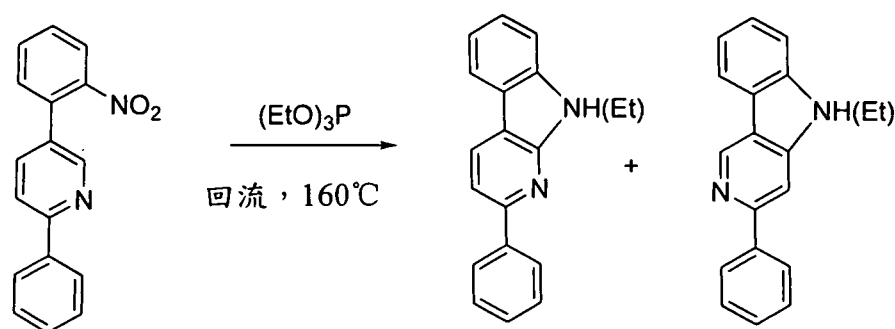
化合物 22 之合成：使三氟甲磺酸銦前驅物 (0.4 g, 1.5 mmol) 及 2-苯基-3-氮雜二苯并噻吩 (0.4 g, 0.5 mmol) 於 20 mL 乙烷中混合。在氮氣下，使該混合物於回流下加熱 24 h。回流期間產生沈殿。使該反應混合物通過矽藻土床過濾。利用甲醇及己烷洗滌產物。使該固體溶於二氯甲烷中且藉由採用 1:1 之二氯甲烷及己烷之管柱純化。在管柱純化之後，獲得 0.34 g 純產物 (HPLC 純度：99.3%)。

實例 5. 化合物 31 之合成



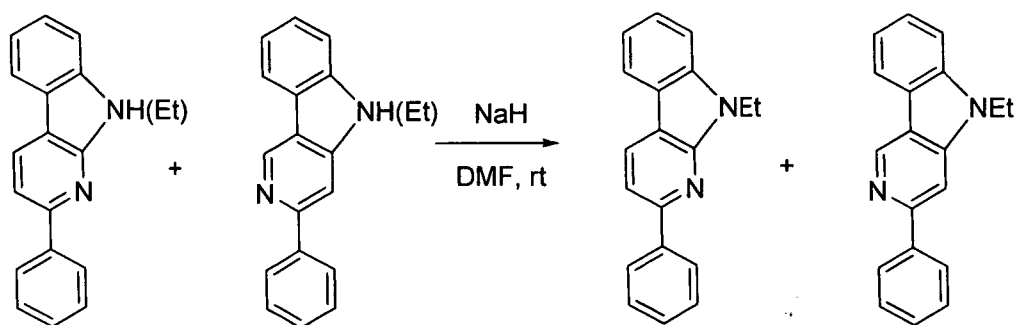
5-(2-硝基苯基)-2-苯基吡啶之合成：將 2-碘-1-硝基苯 (6.88 g, 27.64 mmol)、6-苯基-3-吡啶基硼酸 (5.5 g, 27.64

mmol)、磷酸鉀(17.6 g, 82.91 mmol)、2-二環己基磷基-2',6'-二甲氧基聯苯基(0.451 g, 0.522 mmol)及 $\text{Pd}_2(\text{bda})_3$ (0.119 g, 0.55 mmol)加至甲苯(150 mL)及水(12 mL)。使氮氣泡騰通經該溶液30分鐘，及然後，使該溶液在氮氣氛圍中回流過夜。接著，可使該反應物冷卻至室溫，且使有機相分離水相。利用乙酸乙酯洗滌水相，繼而合併有機部分並經過硫酸鈉進行乾燥，然後，真空移除溶劑。產物係利用乙酸乙酯及己烷作為洗提液採用矽膠進行層析。移除溶劑而得到5.02 g標題化合物。



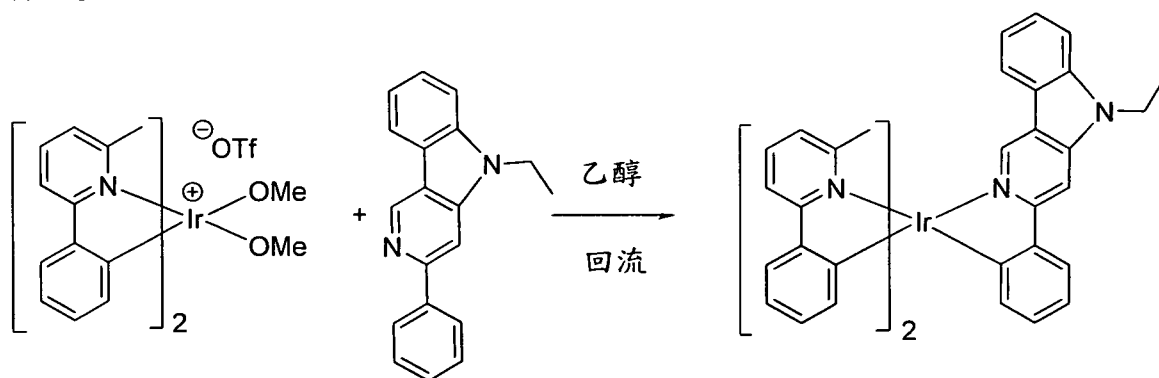
所期望之產物

氮雜咔唑之合成:在氮氣氛圍下，使5-(2-硝基苯基)-2-苯基吡啶(5.0 g, 18.10 mmol)及三乙基亞磷酸酯(30 g, 180.97 mmol)在 160°C 下加熱過夜。在此時間之後，使該反應混合物冷卻至室溫且添加水性6N HCl(60 mL)。利用錠型NaOH中和該酸性溶液至pH為12為止。利用乙酸乙酯萃取該反應混合物且該等已合併之有機部分係經過硫酸鈉乾燥並減壓移除溶劑。產物係利用乙酸乙酯及己烷作為洗提液採用矽膠進行層析。移除溶劑而得到3.0 g咔唑產物。



所期望之產物

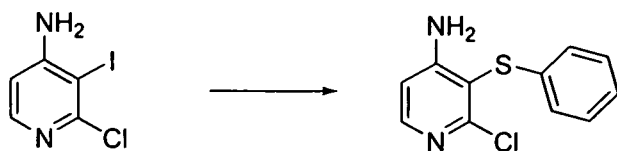
5-乙基-3-苯基-5H-吡啶并[4,3-b]吲哚之合成：將乾燥DMF(50 mL)添加至含有吡啶(1.90 g, 7.78 mmol)及氫化鈉(0.55 g, 23.33 mmol)之燒瓶且使該反應物在室溫下攪拌30分鐘。在此時間之後，添加乙基碘化物且使該反應物攪拌過夜。TLC顯示反應結束，繼而，利用飽和NaCl水溶液使該反應淬火。利用乙酸乙酯萃取該混合物且利用NaCl溶液、LiCl溶液洗滌已合併之有機部分，並經過硫酸鈉乾燥，然後真空移除溶劑。產物係利用乙酸乙酯及己烷作為洗提液採用矽膠進行層析。移除溶劑而得到502 mg所期望之標題化合物。



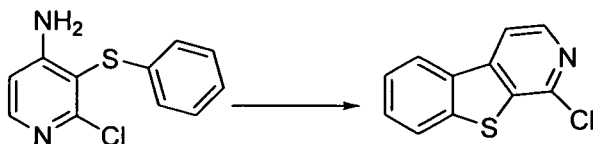
化合31之合成：使銥中間體(0.416 g, 0.563 mmol)及5-乙基-3-苯基-5H-吡啶并[4,3-b]吲哚(0.46 g, 1.69 mmol)在10 mL無水乙醇中混合。在氮氣下，使該混合物加熱至回流

進行 24 h。使該反應混合物冷卻至室溫，然後，藉由過濾收集沈殿物。該粗沈殿物係採用二氯乙烷及己烷作為洗提液藉由矽膠管柱純化而得到 0.35 g 錯合物。

實例 6. 化合物 86 之合成

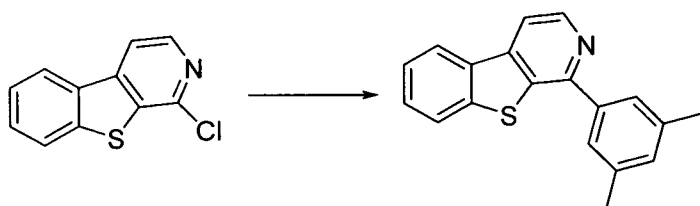


2-氯-3-(苯硫基)吡啶-4-胺之合成:使 2-氯-3-碘-4-胺基吡啶 (3.0 g, 11.8 mmol)、苯硫酚 (1.3 g, 11.8 mmol)、碘化銅 (I) (0.11 g, 0.58 mmol)、乙二醇 (1.5 g, 24 mmol) 及碳酸鉀 (3.3 g, 24 mmol) 置入 250 mL 圓底燒瓶中。然後，將 100 mL 之 2-丙醇添加至該反應混合物，且使該混合物加熱至回流進行 18 h。使該反應混合物冷卻至室溫並真空過濾。利用 200 mL 水稀釋該濾液，然後，利用 150 mL 乙酸乙酯萃取兩次。使萃取物經過硫酸鎂乾燥，然後，過濾並真空移除。產物係利用 2 至 15% 之乙酸乙酯/二氯甲烷作為移動相採用矽膠層析純化。收集 2.0 g (72% 產率) 產物。

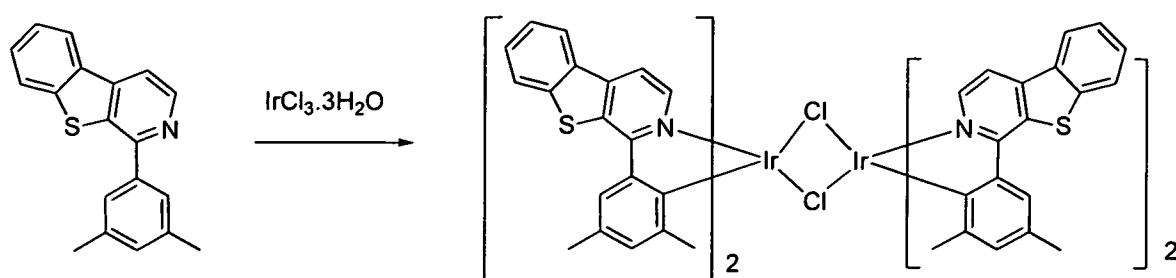


3-氯雜-4-氯二苯并噻吩之合成:使胺基吡啶 (2.0 g, 8.5 mmol) 置入 250 mL 之三頸燒瓶中。使該材料溶於 30 mL 冰乙酸中且在室溫下攪拌。在 15 分鐘時間內將亞硝酸第三丁基酯 (0.87 g, 8.5 mmol) 逐滴添加至該混合物。使該混合物在

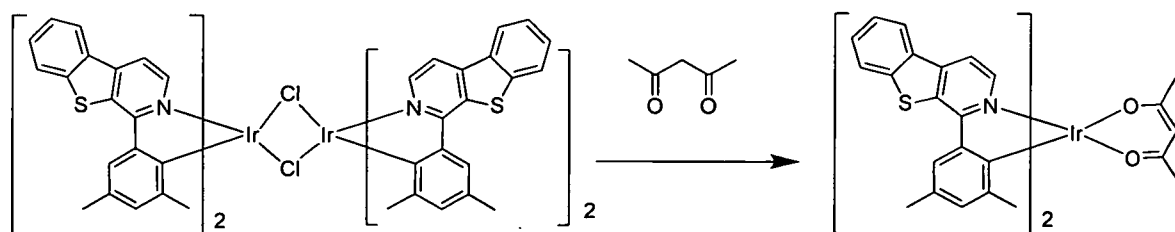
室溫下攪拌 1 h。接下來，又將亞硝酸第三丁基酯 (0.44 g, 0.0043 mol) 添加至該反應混合物且使該反應混合物在室溫下再攪拌 2 h。將該反應混合物轉移至冰上且採用碳酸氫鈉進行鹼化。然後，利用乙酸乙酯萃取該混合物，繼而，使萃取物經過硫酸鎂乾燥。然後，使該等萃取物過濾，且真空移除。產物係利用 10 至 20% 之乙酸乙酯/己烷作為移動相採用矽膠層析純化。收集 1.55 g (83% 產率) 產物。



4-(3',5'-二甲基苯基)-3-氮雜二苯并噻吩之合成：使氯氮雜二苯并噻吩 (1.55 g, 7.1 mmol)、3,5-二甲基苯基硼酸 (1.70 g, 11 mmol)、單水合磷酸三鉀 (7.6 g, 33 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.065 g, 0.071 mmol) 及 2-二環己基膦基-2',6'-二甲氧基聯苯 (0.12 g, 0.28 mmol) 置入 250 mL 圓底燒瓶中。將 200 mL 甲苯及 30 mL 水添加至該混合物。使該混合物真空化並利用氮氣回填。重複該程序總計 3 次。使該反應混合物攪拌並回流加熱 18 h。甲苯層係經分離且經過硫酸鎂乾燥。然後，過濾有機物且真空移除。產物係利用 10 至 20% 之乙酸乙酯/己烷作為移動相採用矽膠層析純化。收集 2.0 g (97% 產率) 產物。



二聚物之合成：使 4-(3',5'-二甲基苯基)-3-氮雜二苯并噻吩 (2.0 g, 6.9 mmol)、2-乙氧基乙醇 (25 mL) 及水 (5 mL) 注入 100 mL 三頸圓底燒瓶中。使氮氣通過該反應混合物起泡 45 分鐘。然後，添加 $\text{IrCl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (0.6 g, 2 mmol)，且在氮氣下，使該反應混合物加熱至回流進行 17 h。使該反應混合物冷卻至周溫且過濾。橙色/紅色殘渣係經收集並先利用甲醇 (2×15 mL)，再利用己烷 (2×15 mL) 洗滌。在真空烘箱中乾燥之後，可獲得 1.0 克二氯橋式銥二聚物。



化合物 86

化合物 86 之合成：使二氯橋式銥二聚物 (1.0 g, 0.7 mmol)、10 莫耳當量 2,4-戊二酮 (1.4 g)、20 莫耳當量 Na_2CO_3 (2.0 g) 及 25 mL 之 2-乙氧基乙醇置入 250 mL 圓底燒瓶中。使該反應混合物在周溫下攪拌 24 h。將 1 g 矽藻土及 100 mL 二氯甲烷添加至該反應混合物以使產物溶解。然後，使該混合物通過矽藻土床過濾。然後，使濾液通過氧化矽/氧化鋁柱塞並利用二氯甲烷洗滌。然後，使澄清液

通過GF/F濾紙過濾，濾液經加熱以移除大部分二氯甲烷。然後，添加10 mL異丙醇，接著，使該漿液冷卻至周溫，繼而，產物係經過濾且利用異丙醇洗滌、然後，乾燥而得到1.0 g粗產物(57%產率)，然後，該產物係採用二氯甲烷及異丙醇再結晶兩次，且然後，昇華。

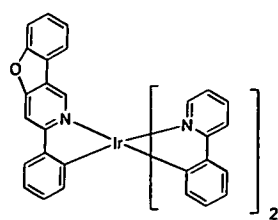
裝置實例

所有裝置係藉由高真空($<10^{-7}$ Torr)熱蒸鍍法製造。陽極電極為800 Å之氧化銦錫(ITO)。陰極係藉由10 Å之LiF及後續1000 Å之Al組成。製造後，所有裝置皆利用以環氧樹脂在氮氣手套箱(<1 ppm之 H_2O 及 O_2)中所密封之玻璃蓋立即封裝，並於該包裝內裝入吸濕劑。

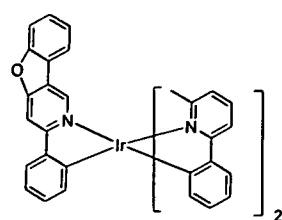
本發明提供特定之裝置，其中該等發明化合物，化合物1、化合物7、化合物8、化合物22、及化合物31，為發光摻雜劑及H1為主體。所有裝置實例具有藉由依次來自ITO表面之以下組成之有機堆疊物：作為電洞注入層(HIL)之100 Å之E1、作為電洞傳輸層(HTL)之300 Å之4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-苯基胺基]聯苯(α -NPD)、作為發光層(EML)之300 Å之H1，摻雜有7%及10%如本發明之化合物(亦即，A%顯示存於EML中之摻雜劑化合物之百分率)之主體材料、作為阻擋層(BL)之50 Å之H1及作為電子傳輸層(ETL)之400 Å之Alq₃(三-8-羥基喹啉鋁)。

對照實例1可類似於該等裝置實例進行製造，除了EML包含H1作為摻雜有7%之E1之主體之外。

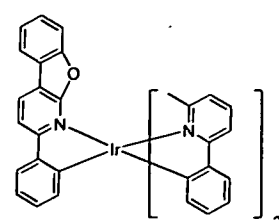
文中所用之以下化合物具有以下結構：



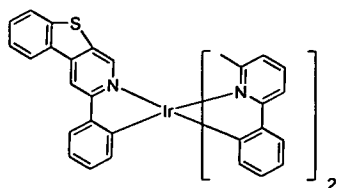
化合物 1



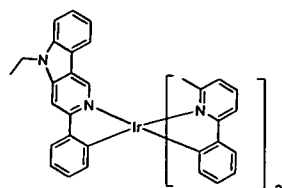
化合物 7



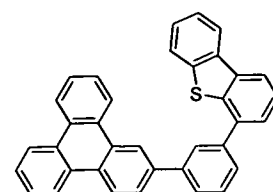
化合物 8



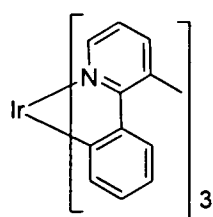
化合物 22



化合物 31



H1



E1

本發明提供適用於 OLED 中之具體言之材料。具體言之，本發明提供可用作 OLED 發光層中之發光摻雜劑之該等材料，其可使裝置具有尤其佳之性質。裝置結構提供於表 2 中及相應之經測定之裝置數據提供於表 3 中。具有包含化合物 1、7、8、22、及 31 之發光層之裝置顯示高裝置效能、較低之操作電壓及長使用壽命。

以下術語用於表 2 及 3 中且在文中加以定義。

Ex. 為實例之縮寫。Comp. Ex. 為對照實例之縮寫詞。LE 為光視效能，其定義為光度除以 OLED 之驅動電流密度。EQE 為外部量子效率，其定義為所測量之通過接點之光子數對所測量之通過接點之電子數之比。PE 為功率效率，其

定義為總發光通量除以總電力輸入。 L_0 為最初之光度，其定義為特定電流密度下之最初亮度。 $RT_{80\%}$ 使用壽命之測定，其定義為在室溫下之 40 mA/cm^2 之固定電流密度下，在最初發光 L_0 衰減至其值80%所需之時間。

表 2

實例	HIL	HTL	Host	A%	BL	ETL
實例1	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物1 7%	H1 50Å	Alq ₃ 400Å
實例2	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物1 10%	H1 50Å	Alq ₃ 400Å
實例3	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物7 7%	H1 50Å	Alq ₃ 400Å
實例4	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物7 10%	H1 50Å	Alq ₃ 400Å
實例5	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物8 7%	H1 50Å	Alq ₃ 400Å
實例6	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物8 10%	H1 50Å	Alq ₃ 400Å
實例7	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物22 7%	H1 50Å	Alq ₃ 400Å
實例8	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物22 10%	H1 50Å	Alq ₃ 400Å
實例9	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物31 7%	H1 50Å	Alq ₃ 400Å
實例10	E1 100Å	NPD 300Å	H1	化合物31 10%	H1 50Å	Alq ₃ 400Å
對照實例1	E1 100Å	NPD 300Å	H1	E1 7%	H1 50Å	Alq ₃ 400Å

表 3：

實例	$\lambda_{\text{最大}}$, nm	CIE		在1000亮度下				At 40mA/cm ²	
		X	Y	V (V)	LE (cd/A)	EQE (%)	PE (lm/W)	Lo, 亮度	RT _{80%} , h
實例1	526	0.336	0.618	5.9	60.9	16.7	32.2	16,756	42
實例2	524	0.346	0.614	5.5	59.3	16.3	34.0	17,225	28
實例3	522	0.336	0.619	5.6	68.9	18.9	38.7	18,954	31
實例4	522	0.344	0.616	5.1	71.7	19.6	44.1	21,234	16
實例5	562	0.488	0.507	5.3	66.9	20.7	39.9	21,511	68
實例6	564	0.493	0.503	5.1	67.1	21	41.7	22,767	44
實例7	540	0.376	0.596	5.6	69.2	18.8	38.8	18,869	120
實例8	546	0.396	0.583	5.1	66.9	18.4	41.2	20,471	120
實例9	520	0.333	0.618	5.6	55.8	15.4	31.3	15,085	71
實例10	526	0.344	0.614	5.1	65.6	18	40.8	20,055	52
對照實例1	527	0.344	0.614	6.4	56.7	15.6	27.6	15,436	155

從裝置實例1至10可得知，作為綠色磷光OLED中之發光摻雜劑之如本發明之化合物，化合物1、7、8、22、及31提供高裝置效能(亦即，在1000 cd/m²下，LE>60 cd/A)。此點顯示，該等新穎配位體結構具有針對綠色電致磷光而言之足夠高之三重態能。亦值得吾人注意的為包含本發明之化合物作為發光摻雜劑之裝置具高穩定性。就化合物22而言，使用壽命(RT_{80%})為120 h。因此，本發明之化合物可提供具有改良之效能及長使用壽命之裝置。

此外，包含本發明之化合物之裝置顯示經減少之操作電壓。例如，對照具有1000 cd/m²下6.4 V之E1而言，化合物

1、化合物7、化合物8、化合物22、及化合物31全部可分別得到較低之裝置電壓如下：1000 cd/m²下之5.5 V、1000 cd/m²下之5.1 V、1000 cd/m²下之5.1 V、1000 cd/m²下之5.1 V、及1000 cd/m²下之5.1 V。

數據顯示，包含氮雜DBX配位體之該等新穎金屬錯合物可為用於磷光OLED之優秀發光摻雜劑，提供具有低電壓、高效能及長使用壽命之裝置。綜觀言之，此點指明，所提供之該等新穎化合物可為超越顯示工業標準性質之通常所用發光摻雜劑諸如Ir(ppy)₃的改良。

應瞭解，文中所述之各個實施例僅僅供例示用，而皆非用以限制本發明之申請專利範圍。例如，在不偏離本發明之主旨下，文中所述之許多材料及結構可由其他材料及結構取代。因此，所主張之本發明可包括文中所述之具體實例及較佳實施例之變化，此變化欲為熟習此項相關技術之人士清晰可見。吾人可瞭解，有關為什麼創作本發明之各種理論皆非具限制性。

【圖式簡單說明】

圖1顯示有機發光裝置。

圖2顯示不具有分離電子傳輸層之倒裝有機發光裝置。

圖3顯示配位體。

圖4顯示氮雜DBX配位體之示例。

【主要元件符號說明】

100 有機發光裝置

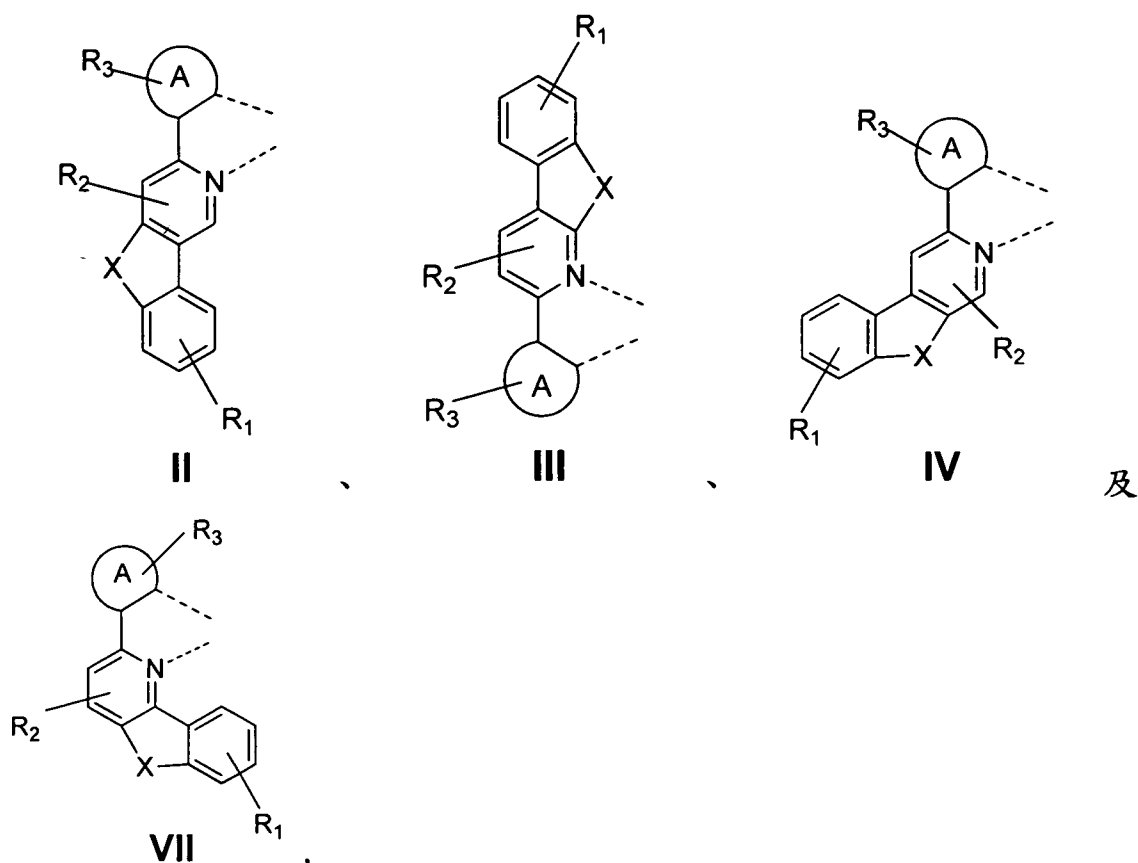
110 基材

115	陽 極
120	電 洞 注 入 層
125	電 洞 傳 輸 層
130	電 子 阻 擋 層
135	發 光 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 裝 OLED
210	基 材
215	陰 極
220	發 光 層
225	電 洞 傳 輸 層
230	陽 極

七、申請專利範圍：

104年9月24日修正
對照頁(本)

1. 一種包含選自於以下組合之群的結構之配位體之化合物：



其中 A 為 5 員或 6 員芳香環或雜芳環；

其中 X 係選自由 O 及 S 組成之群；

其中 R_1 及 R_3 可代表單、二、三、或四取代；

其中 R_2 可代表單或二取代；

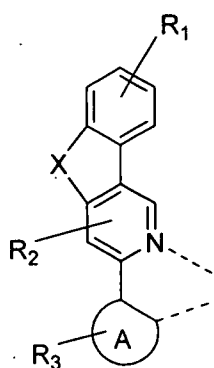
其中 R_1 、 R_2 、及 R_3 各自獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基、及雜芳基組成之群；及

其中該配位體係配位至銱。

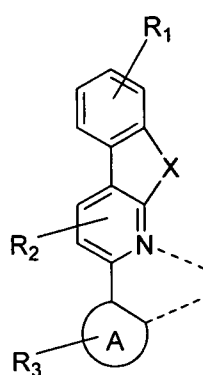
2. 如請求項 1 之化合物，其中該化合物具有化學式 $(L)_n(L')_{3-n}Ir$ ：

其中 n 為 1、2、或 3；

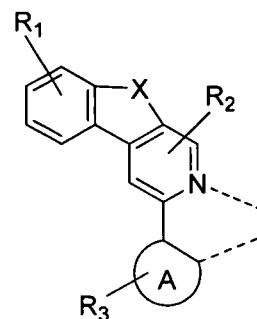
其中 L 係選自由以下組成之群：



II

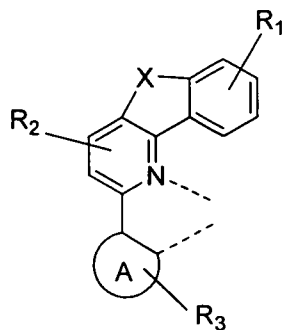


III



IV

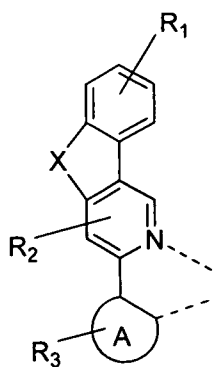
及



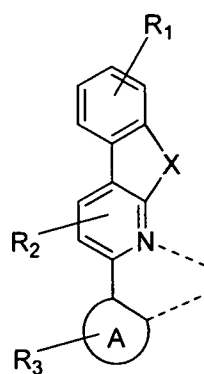
VII

；

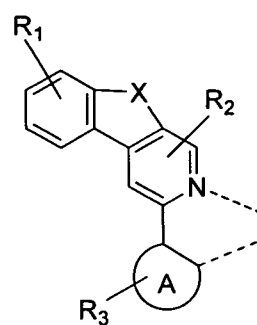
其中 L' 係選自由以下組成之群：



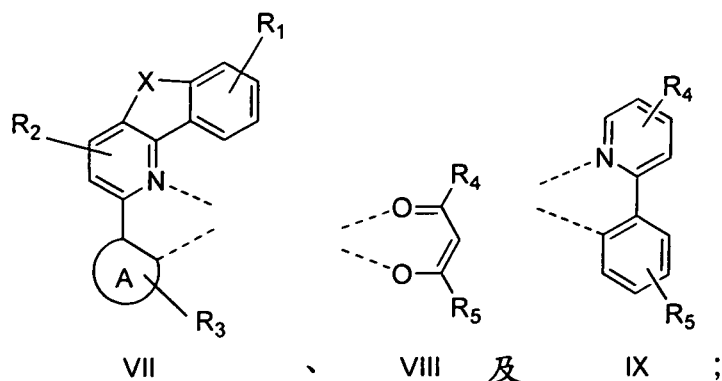
II



III



IV



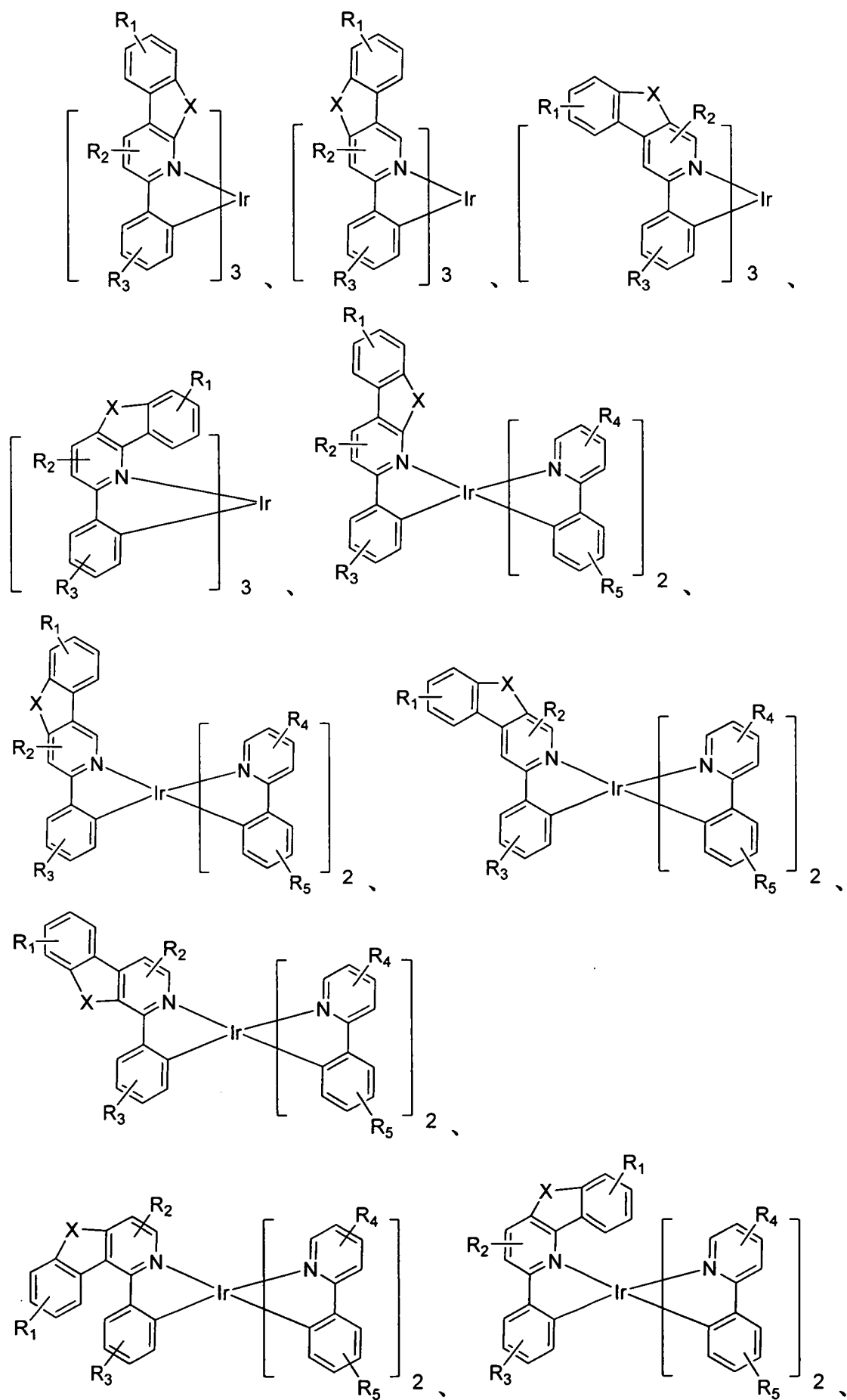
其中X係選自由O及S組成之群；

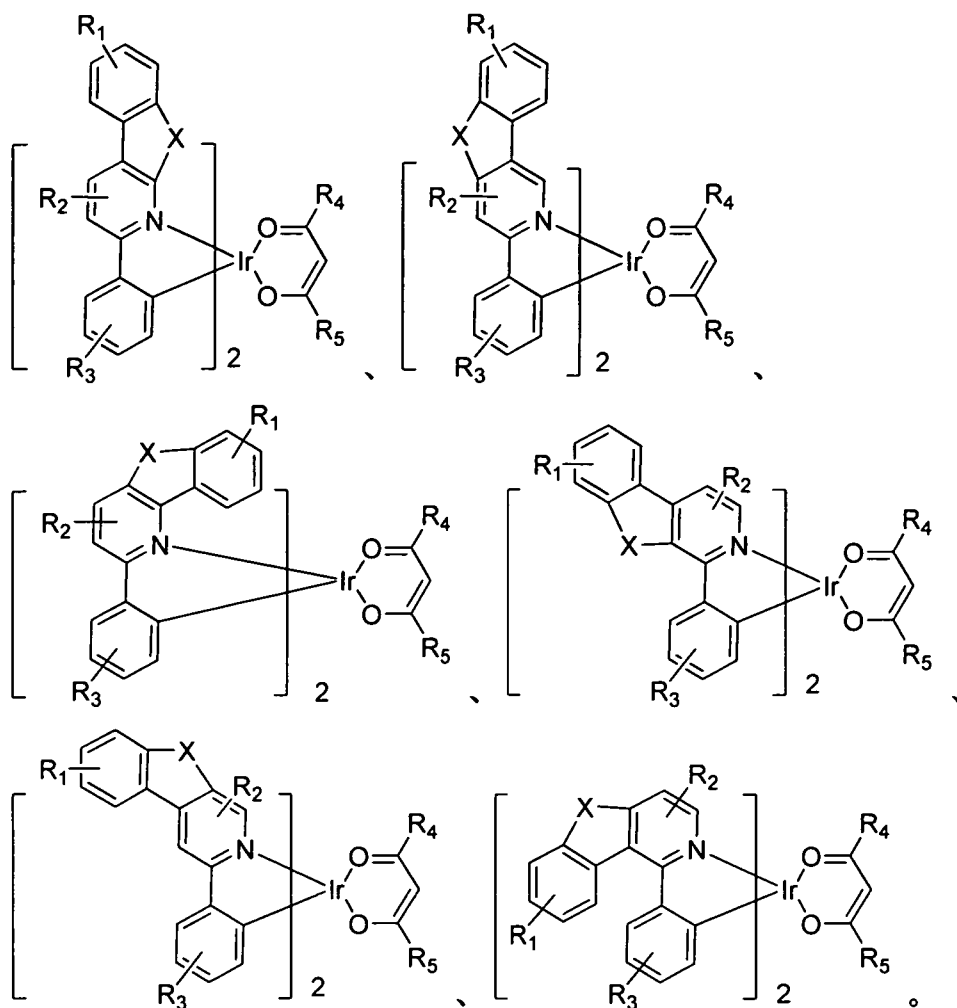
其中A為5員或6員芳香環或雜芳環；

其中R₄及R₅可代表單、二、三、或四取代；且

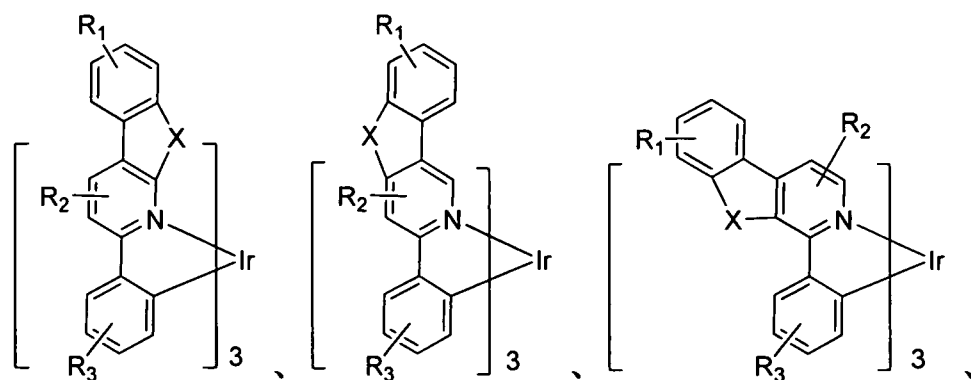
其中R₄及R₅係獨立地選自由氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、芳基、及雜芳基組成之群。

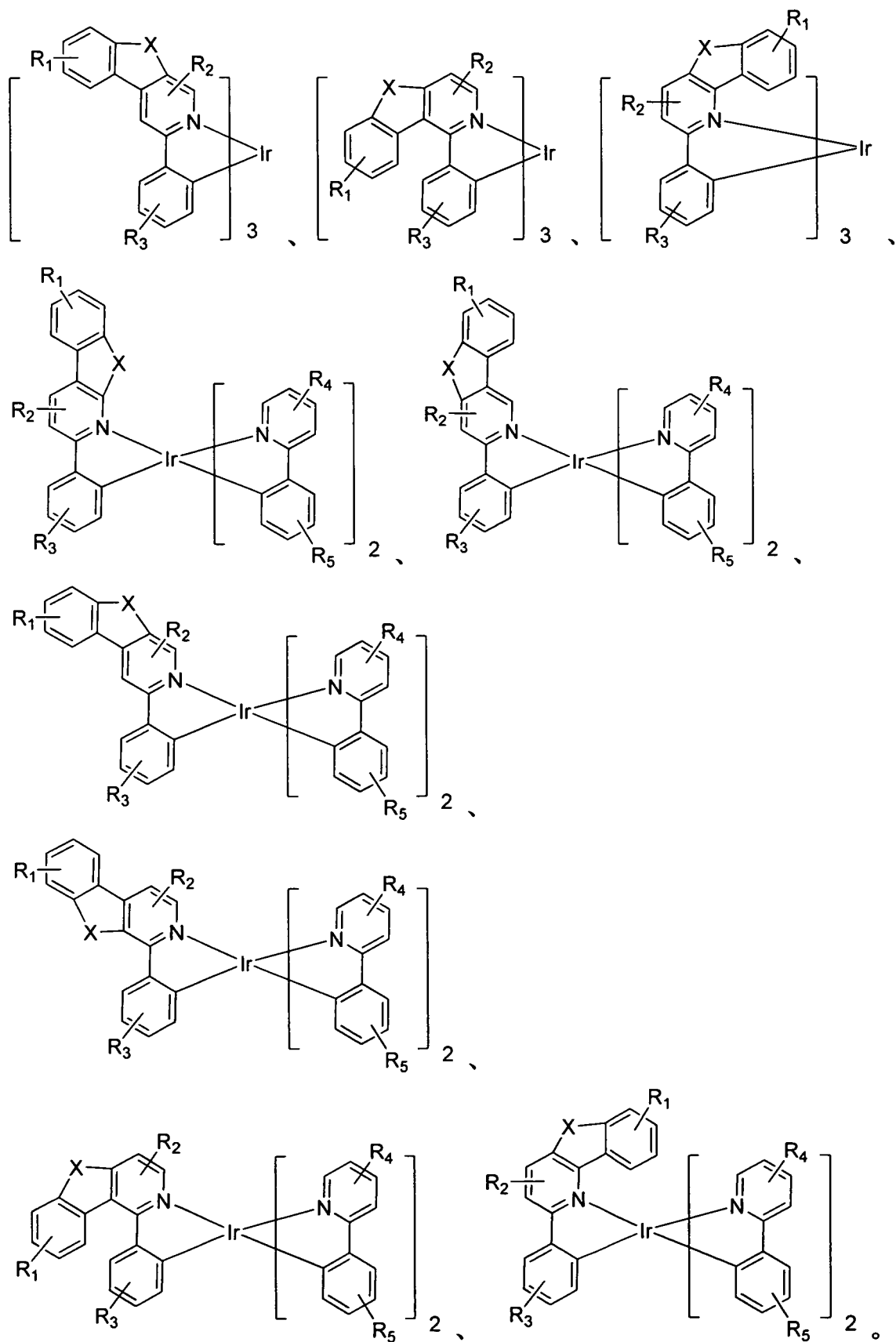
3. 如請求項2之化合物，其中R₁、R₂、R₃、R₄、及R₅各自獨立地選自氫及烷基。
4. 如請求項1之化合物，其中A為苯。
5. 如請求項1之化合物，其中A係選自由呋喃、噻吩及吡咯組成之群。
6. 如請求項2之化合物，其中n為3。
7. 如請求項2之化合物，其中n為2。
8. 如請求項2之化合物，其中n為1。
9. 如請求項2之化合物，其中該化合物係選自由以下組成之群：



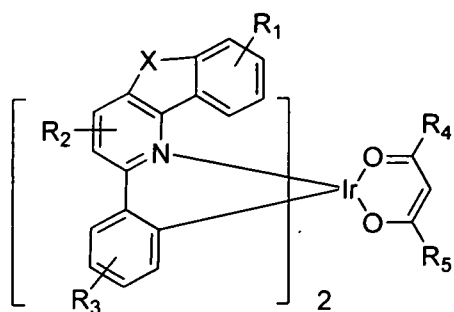
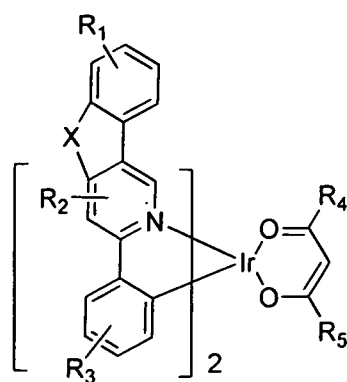
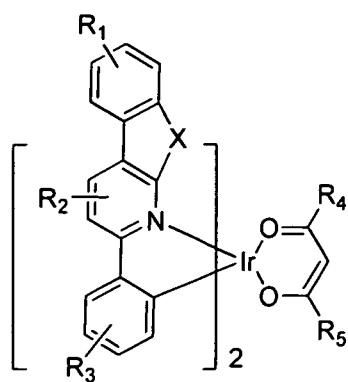


10. 如請求項2之化合物，其中該化合物係選自由以下組成之群：

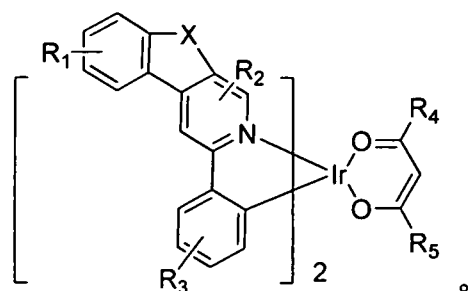




11. 如請求項2之化合物，其中該化合物係選自由以下組成之群：



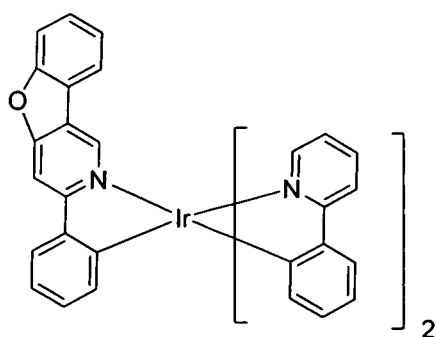
、及



12. 如請求項1之化合物，其中X為O。

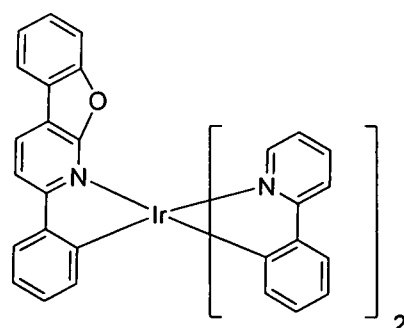
13. 如請求項1之化合物，其中X為S。

14. 一種選自由以下組成之群之化合物：



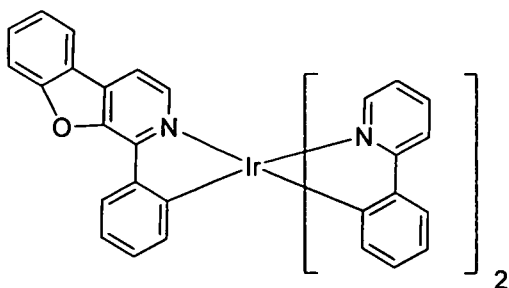
化合物 1

、



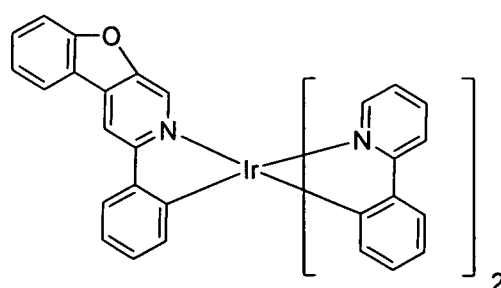
化合物 2

、



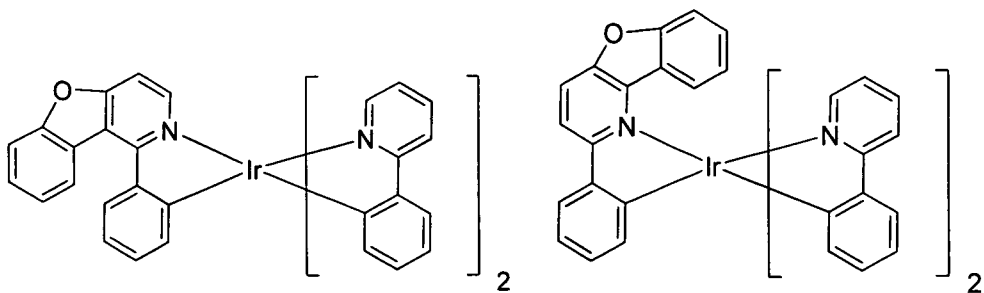
化合物 3

、



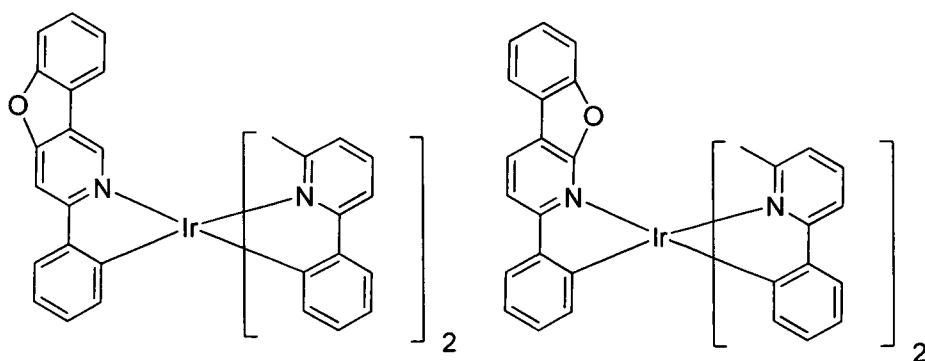
化合物 4

、



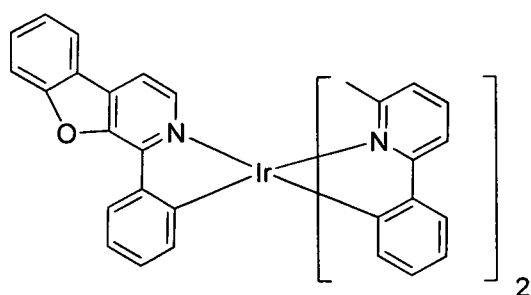
化合物 5

化合物 6

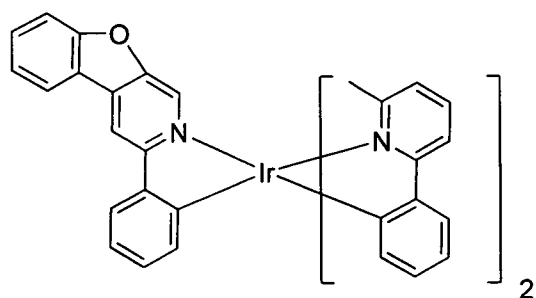


化合物 7

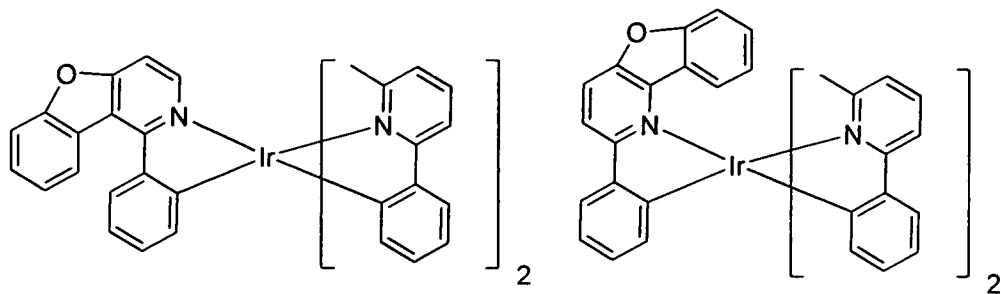
化合物 8



化合物 9

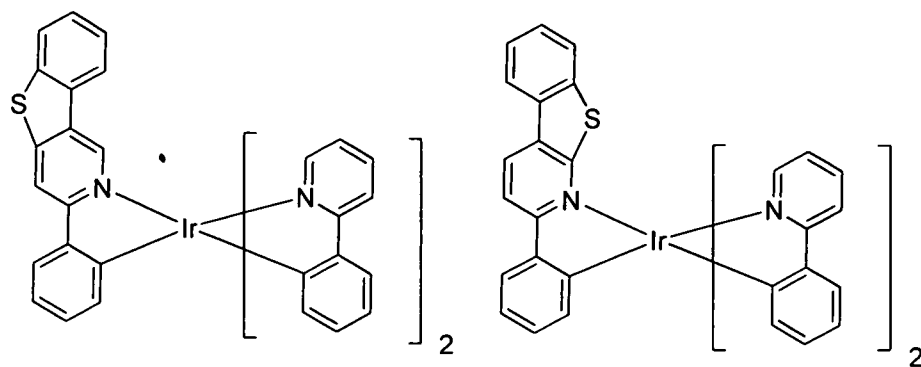


化合物 10



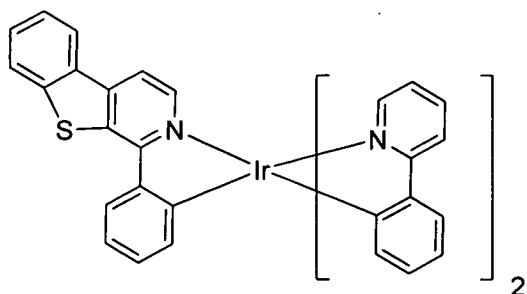
化合物 11

化合物 12

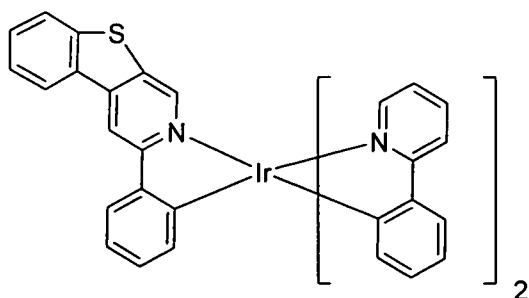


化合物 13

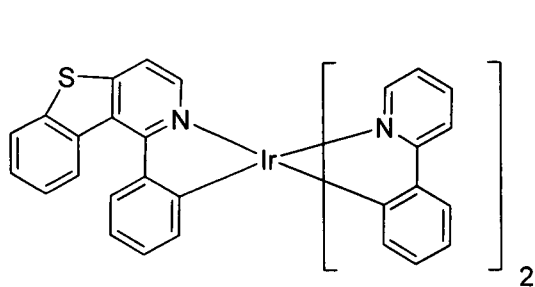
化合物 14



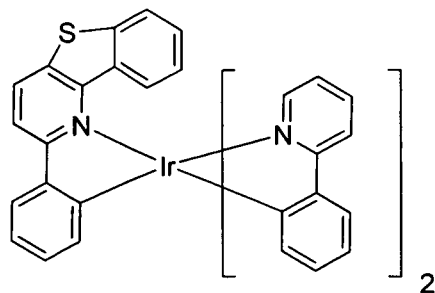
化合物 15



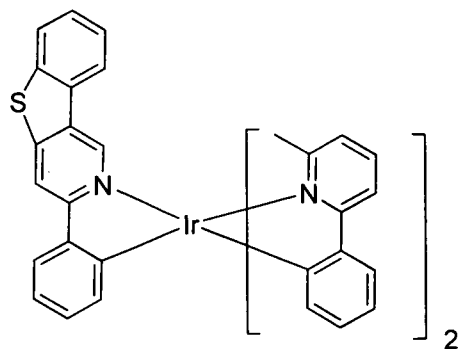
化合物 16



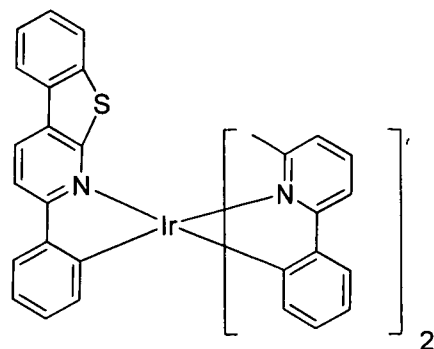
化合物 17



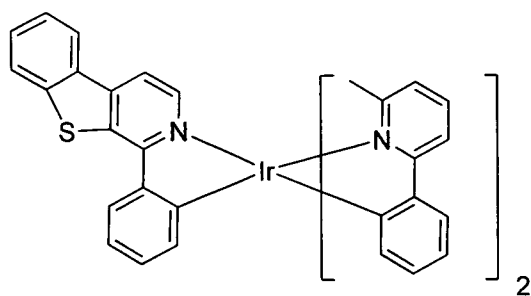
化合物 18



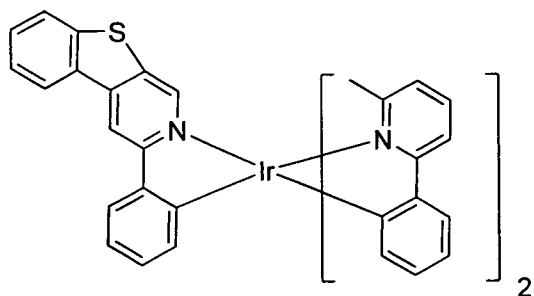
化合物 19



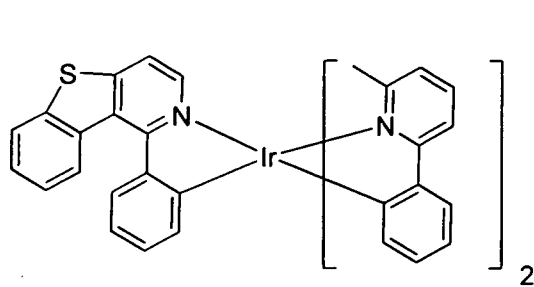
化合物 20



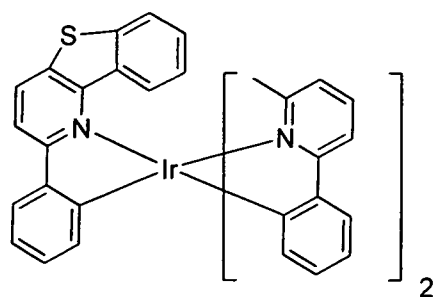
化合物 21



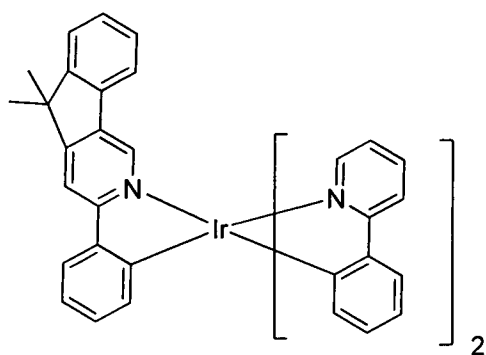
化合物 22



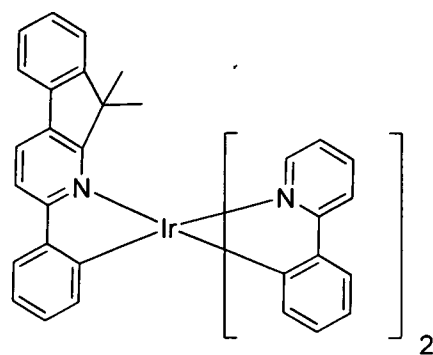
化合物 23



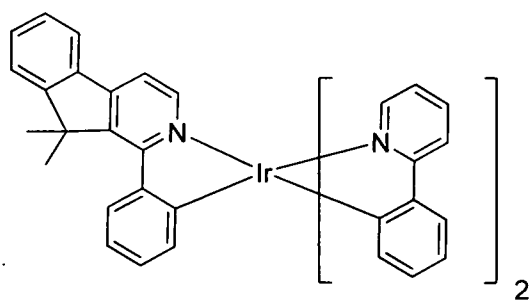
化合物 24



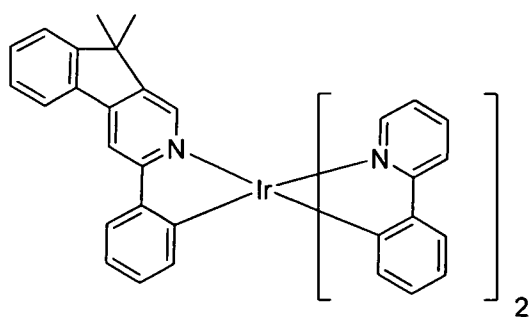
化合物 37



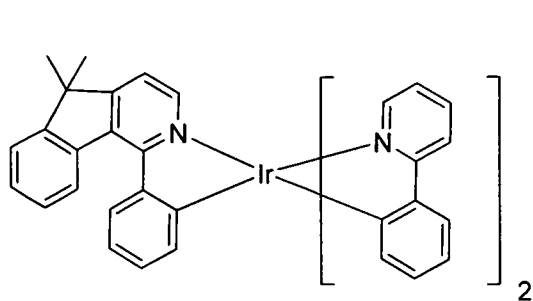
化合物 38



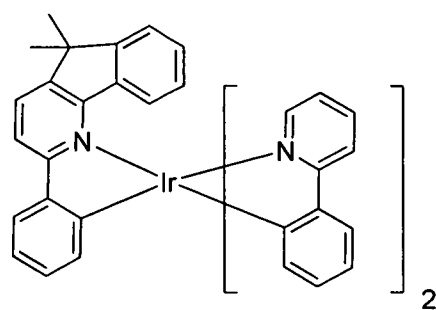
化合物 39



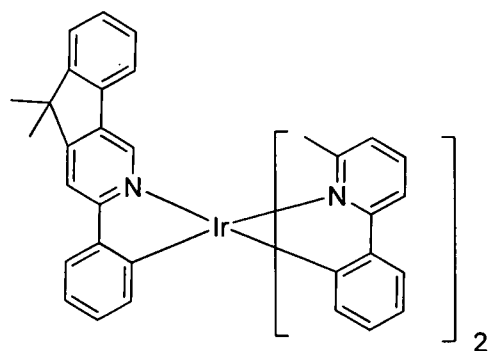
化合物 40



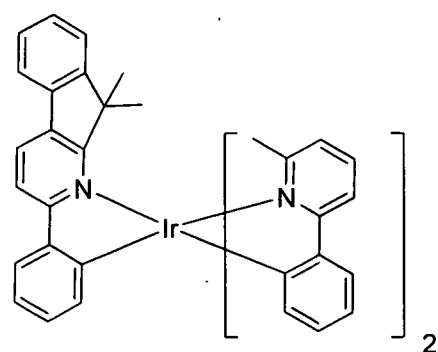
化合物 41



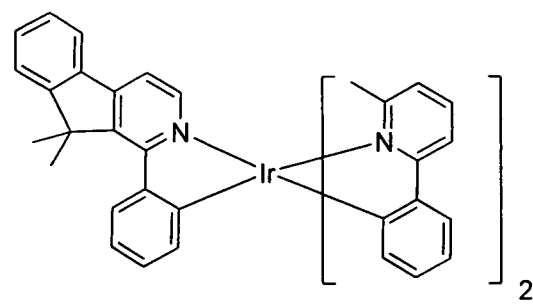
化合物 42



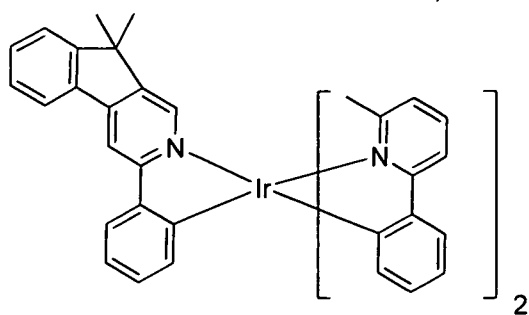
化合物 43



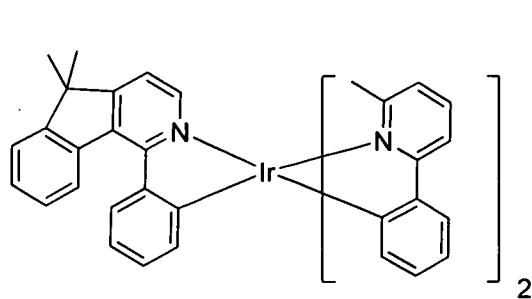
化合物 44



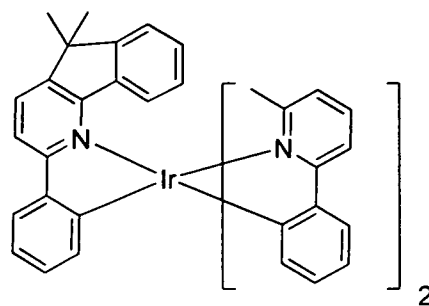
化合物 45



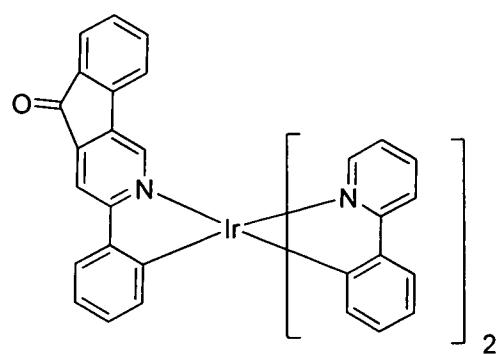
化合物 46



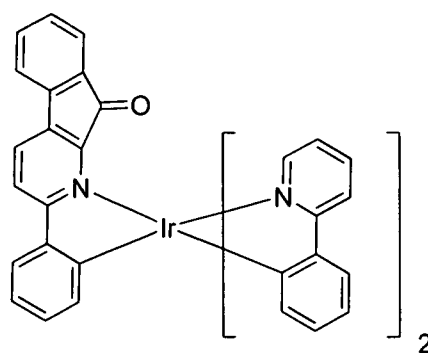
化合物 47



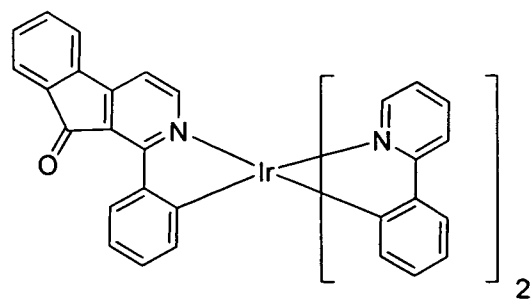
化合物 48



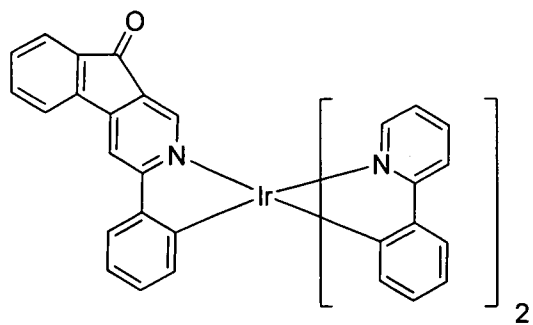
化合物 49



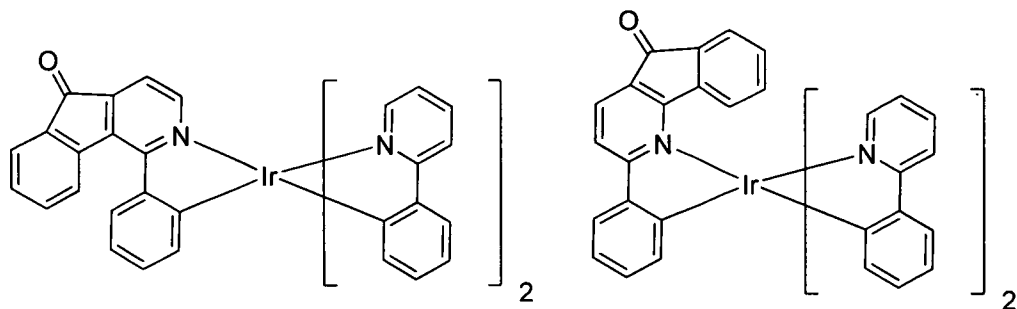
化合物 50



化合物 51

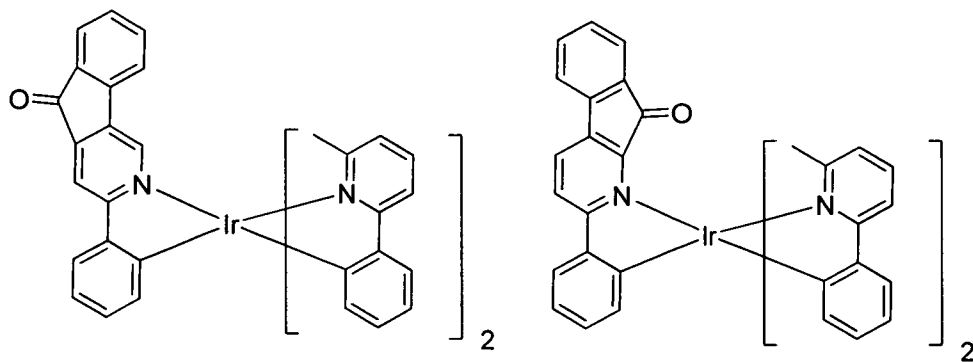


化合物 52



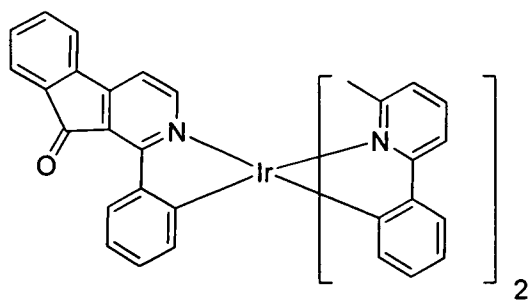
化合物 53

化合物 54

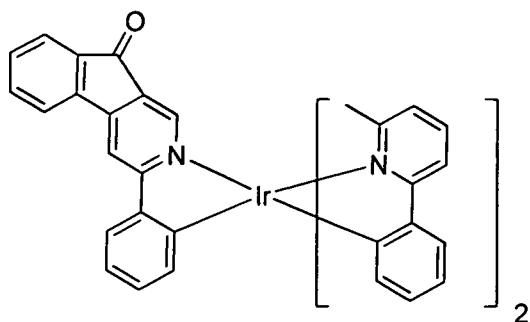


化合物 55

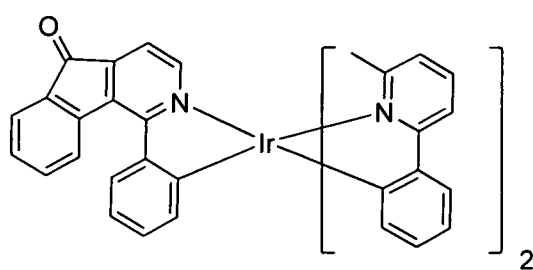
化合物 56



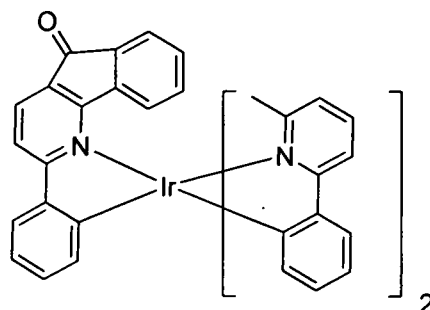
化合物 57



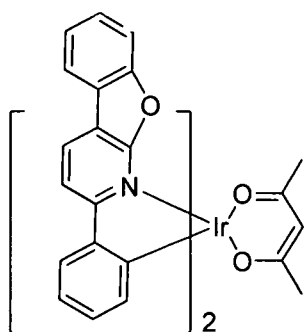
化合物 58



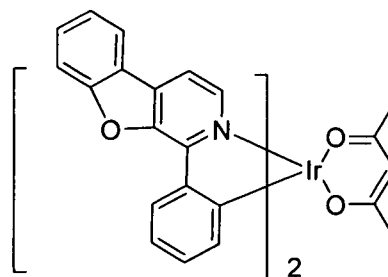
化合物 59



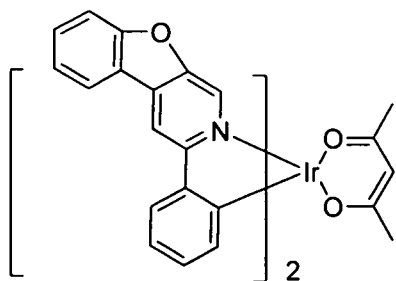
化合物 60



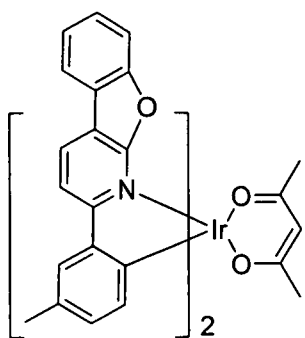
化合物 61



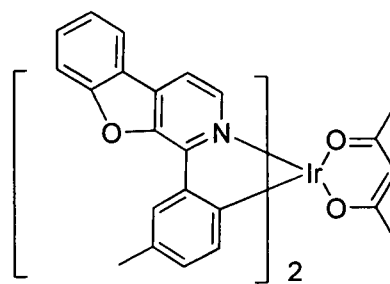
化合物 62



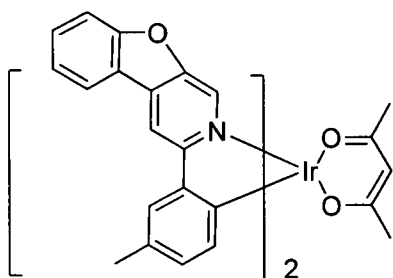
化合物 63



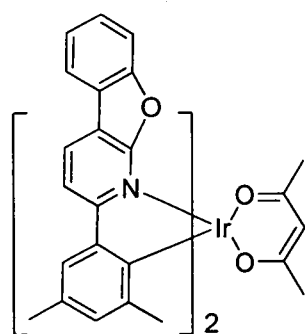
化合物 64



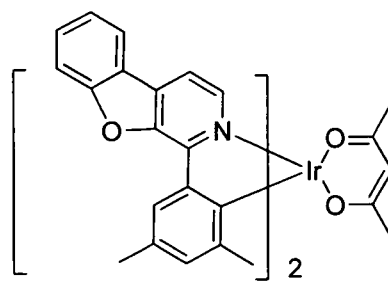
化合物 65



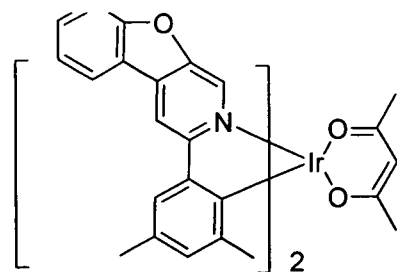
化合物 66



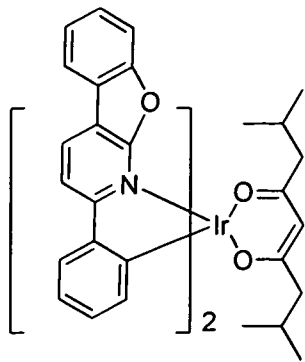
化合物 67



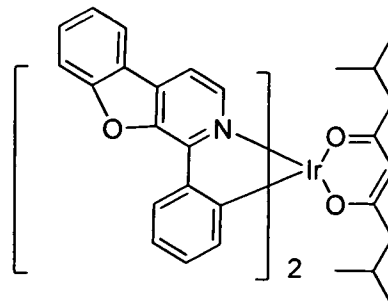
化合物 68



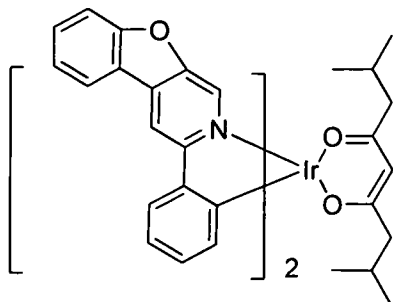
化合物 69



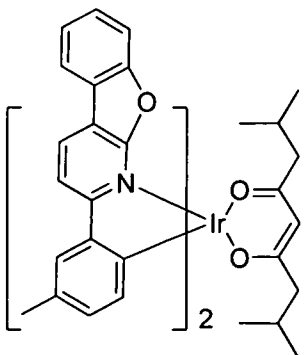
化合物 70



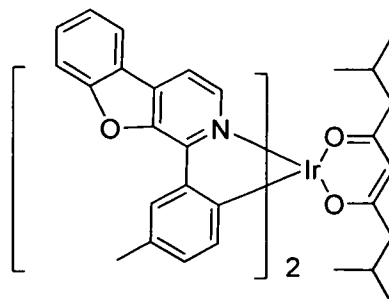
化合物 71



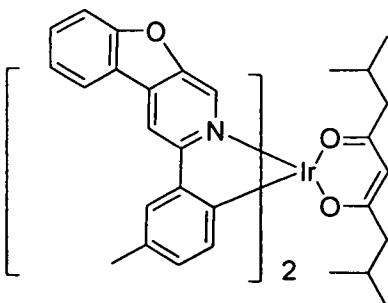
化合物 72



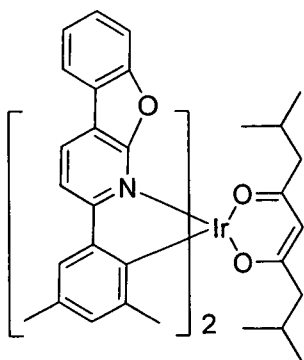
化合物 73



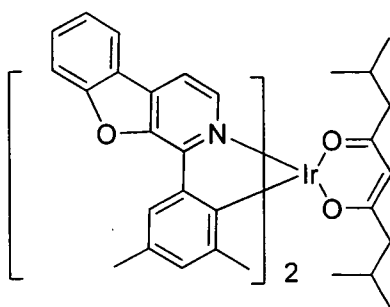
化合物 74



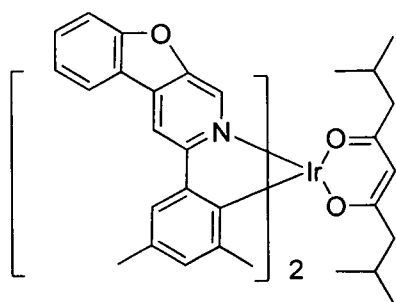
化合物 75



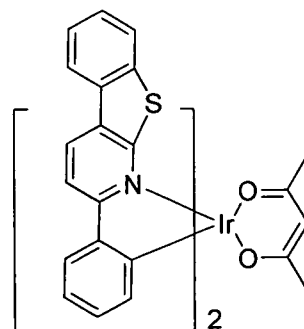
化合物 76



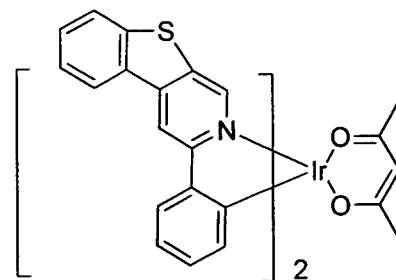
化合物 77



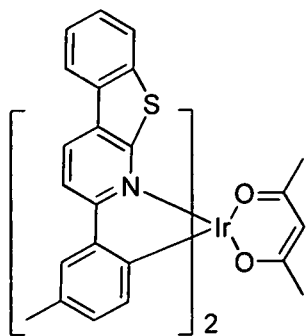
化合物 78



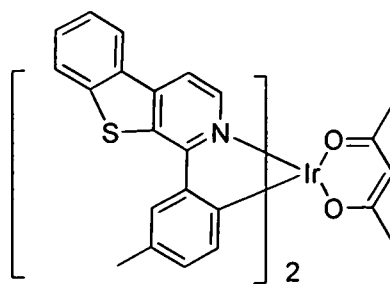
化合物 79



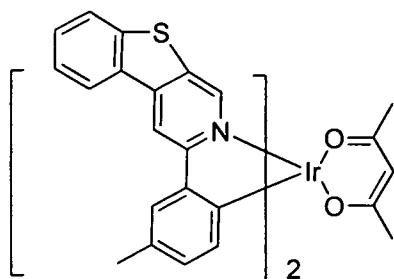
化合物 81



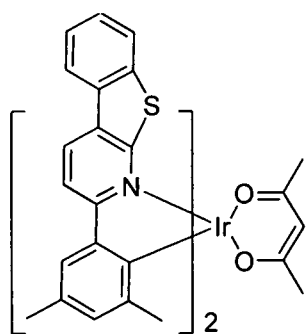
化合物 82



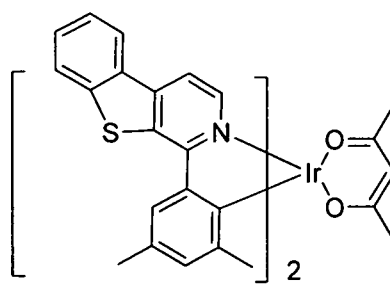
化合物 83



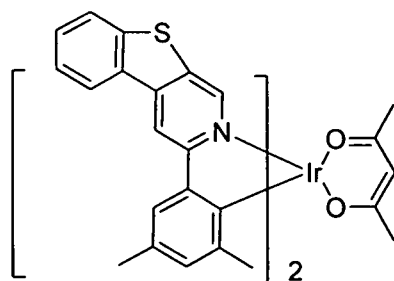
化合物 84



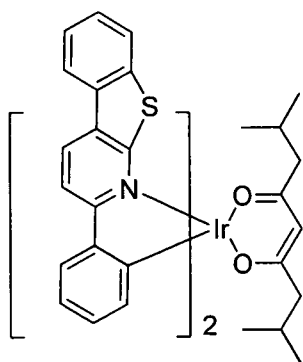
化合物 85



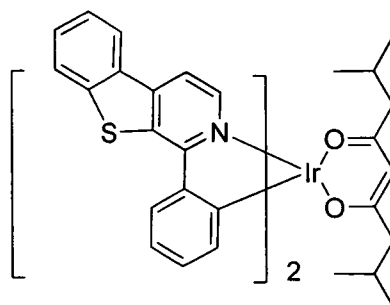
化合物 86



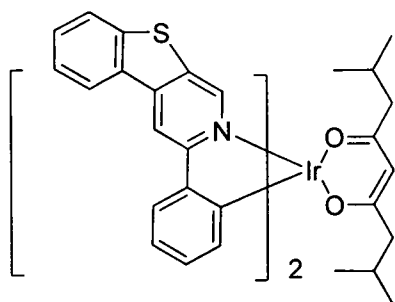
化合物 87



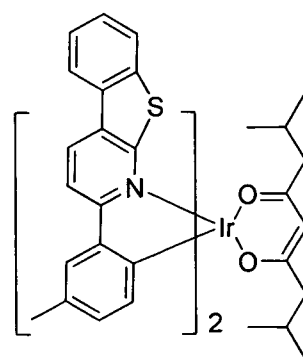
化合物 88



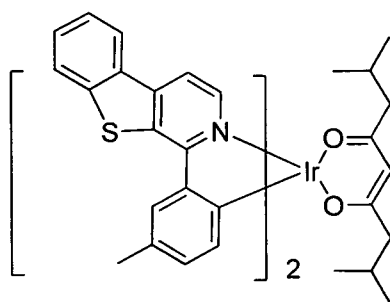
化合物 89



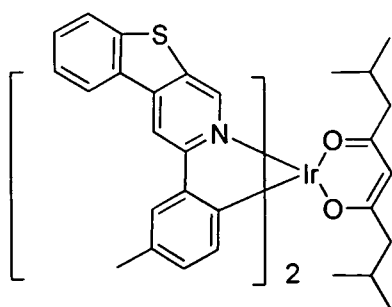
化合物 90



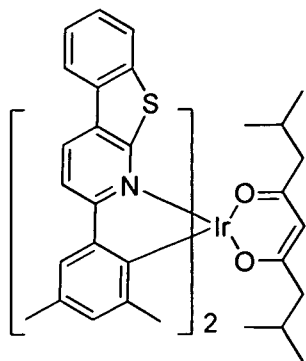
化合物 91



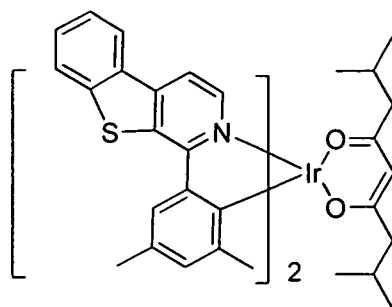
化合物 92



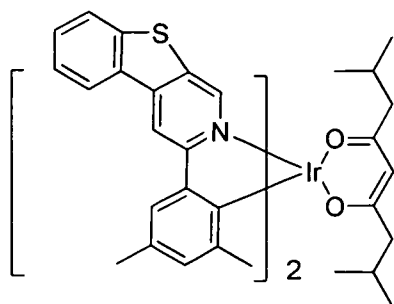
化合物 93



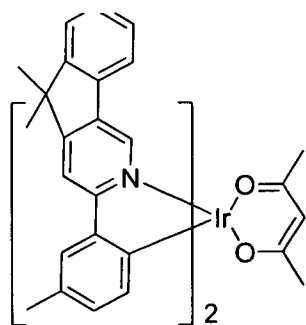
化合物 94



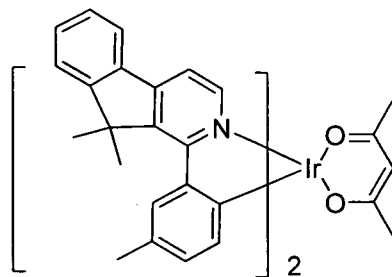
化合物 95



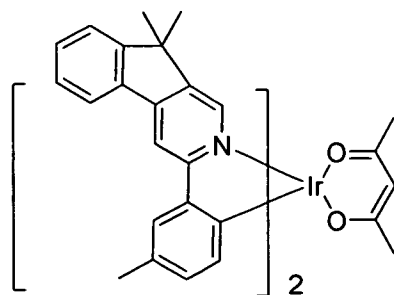
化合物 96



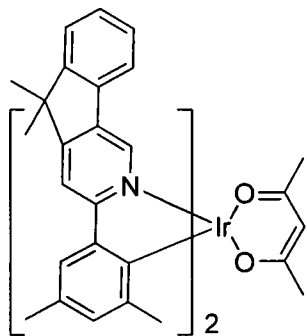
化合物 118



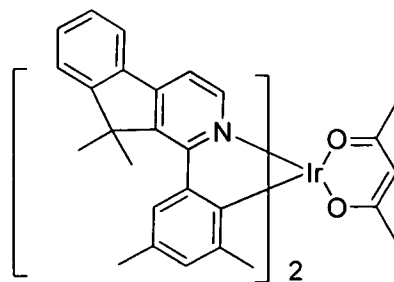
化合物 119



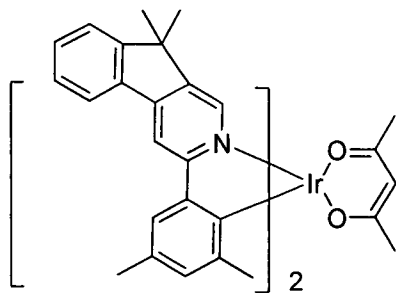
化合物 120



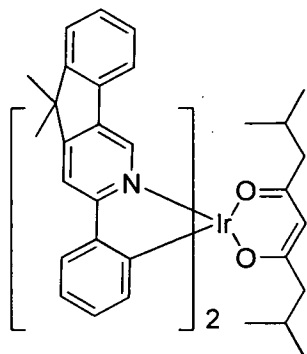
化合物 121 、



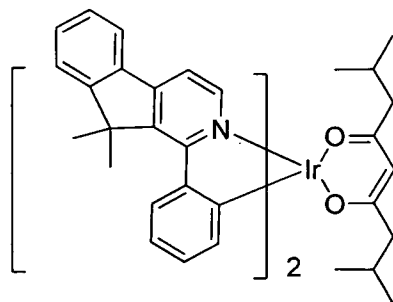
化合物 122 、



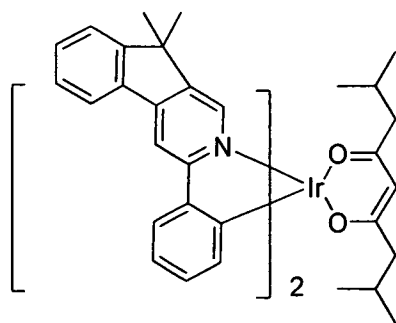
化合物 123 、



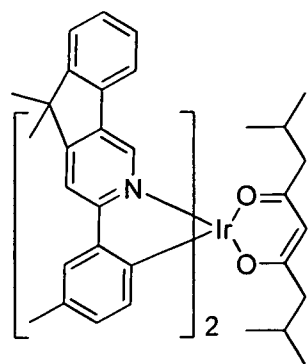
化合物 124 、



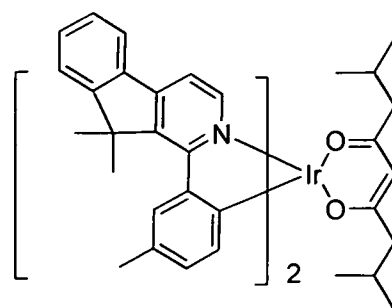
化合物 125 、



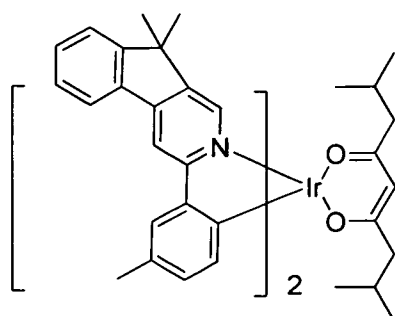
化合物 126 、



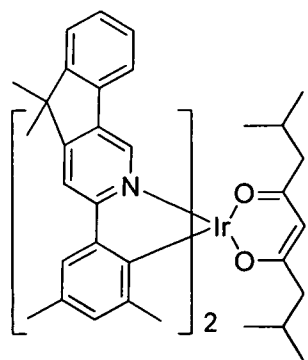
化合物 127



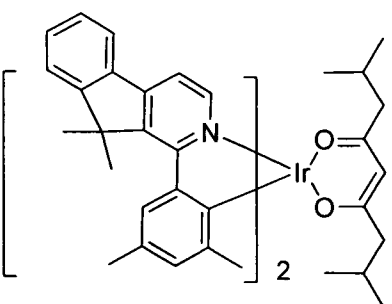
化合物 128



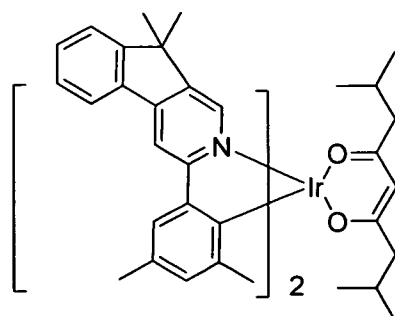
化合物 129



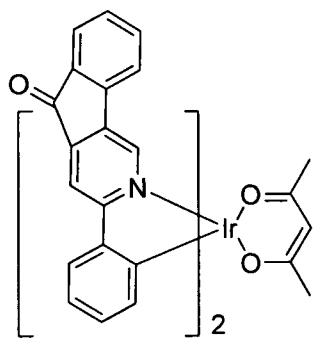
化合物 130



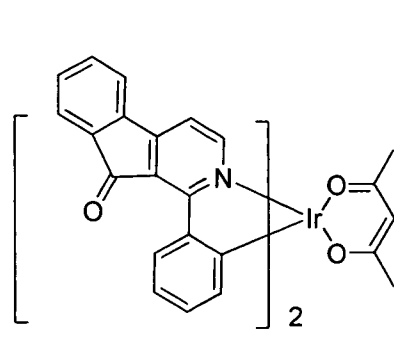
化合物 131



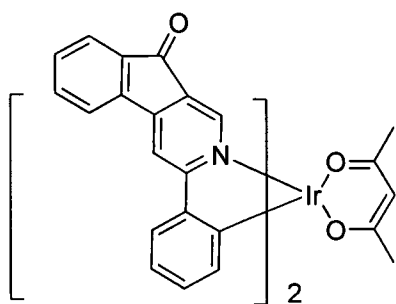
化合物 132



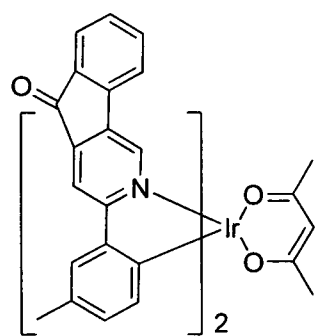
化合物 133



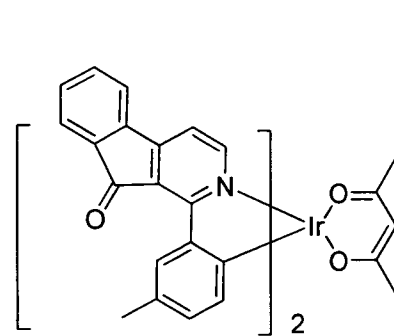
化合物 134



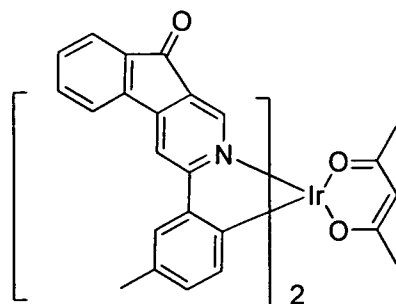
化合物 135



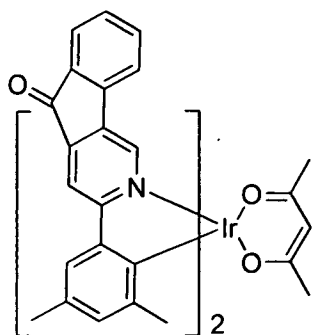
化合物 136



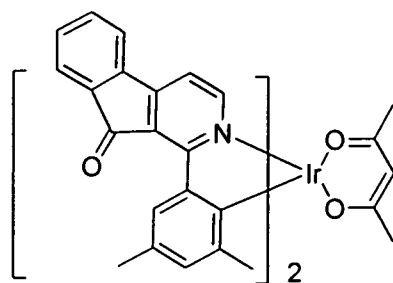
化合物 137



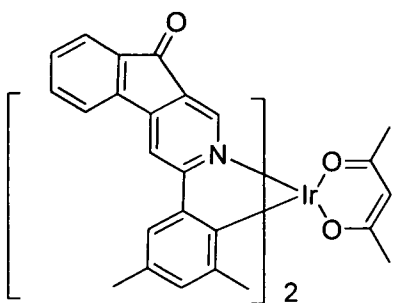
化合物 138



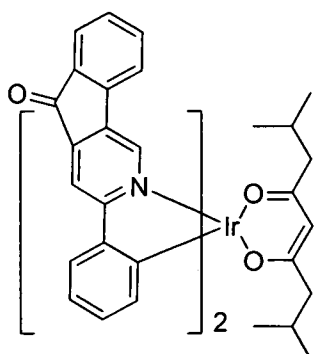
化合物 139



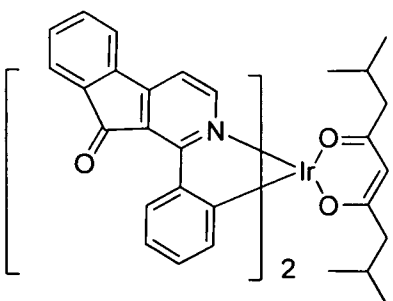
化合物 140



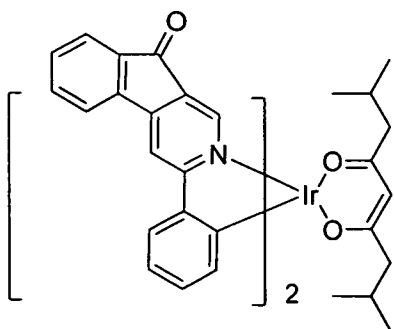
化合物 141



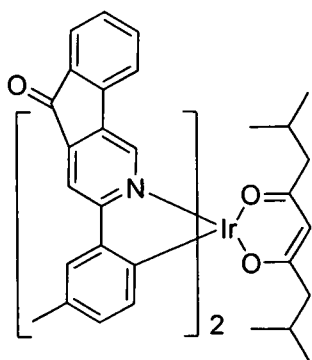
化合物 142



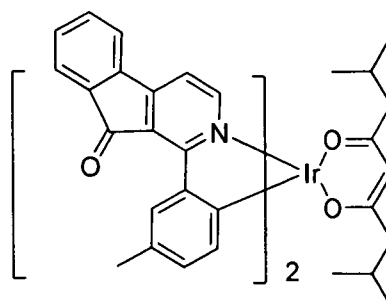
化合物 143



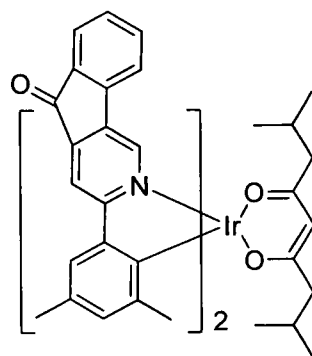
化合物 144



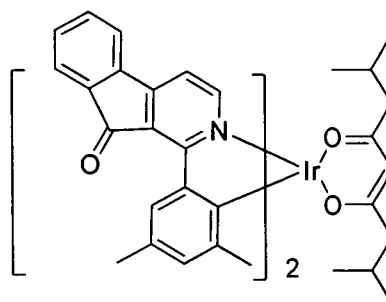
化合物 145



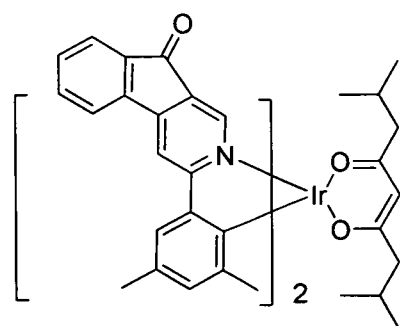
化合物 146



化合物 148



化合物 149



化合物 150

15. 如請求項14之化合物，其中該化合物係選自由化合物1至化合物12及化合物61至化合物78組成之群。
16. 如請求項14之化合物，其中該化合物係選自由化合物1至化合物12組成之群。

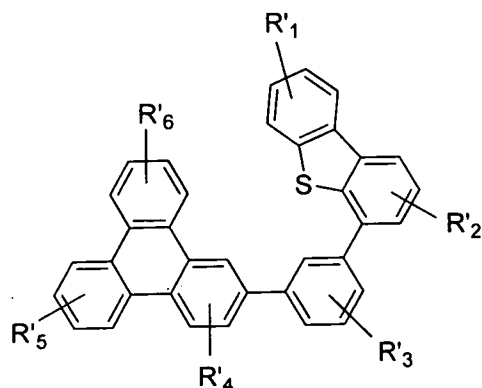
17. 如請求項14之化合物，其中該化合物係選自由化合物61及化合物63至化合物78組成之群。
18. 如請求項14之化合物，其中該化合物係選自由化合物13至化合物24、化合物79及化合物81至化合物96組成之群。
19. 如請求項14之化合物，其中該化合物係選自由化合物13至化合物24組成之群。
20. 如請求項14之化合物，其中該化合物選自由化合物79及化合物81至化合物96組成之群。
21. 如請求項14之化合物，其中該化合物係選自由化合物37至化合物48及化合物115至化合物132組成之群。
22. 如請求項14之化合物，其中該化合物係選自由化合物37至化合物48組成之群。
23. 如請求項14之化合物，其中該化合物係選自由化合物115至化合物132組成之群。
24. 如請求項14之化合物，其中該化合物係選自由化合物49至化合物60及化合物133至化合物146及化合物148至化合物150組成之群。
25. 如請求項14之化合物，其中該化合物係選自由化合物49至化合物60組成之群。
26. 如請求項14之化合物，其中該化合物係選自由化合物133至化合物150組成之群。
27. 一種有機發光裝置，其包括：
一陽極；

一陰極；及

一位於該陽極及該陰極之間之有機層，該有機層進一步包括如請求項1至26中任一項之化合物。

28. 如請求項27之裝置，其中該有機層進一步包括一主體。

29. 如請求項28之裝置，其中該主體具有以下化學式：



其中 R'_1 、 R'_2 、 R'_3 、 R'_4 、 R'_5 、及 R'_6 可代表單、二、三、或四取代；且

其中 R'_1 、 R'_2 、 R'_3 、 R'_4 、 R'_5 、及 R'_6 各自獨立地選自由氫、烷基及芳基組成之群。

30. 一種包括一裝置之消費產品，該裝置進一步包括：

一陽極；

一陰極；及

一位於該陽極及該陰極之間之有機層，該有機層進一步包括如請求項1至26中任一項之化合物。

八、圖式：

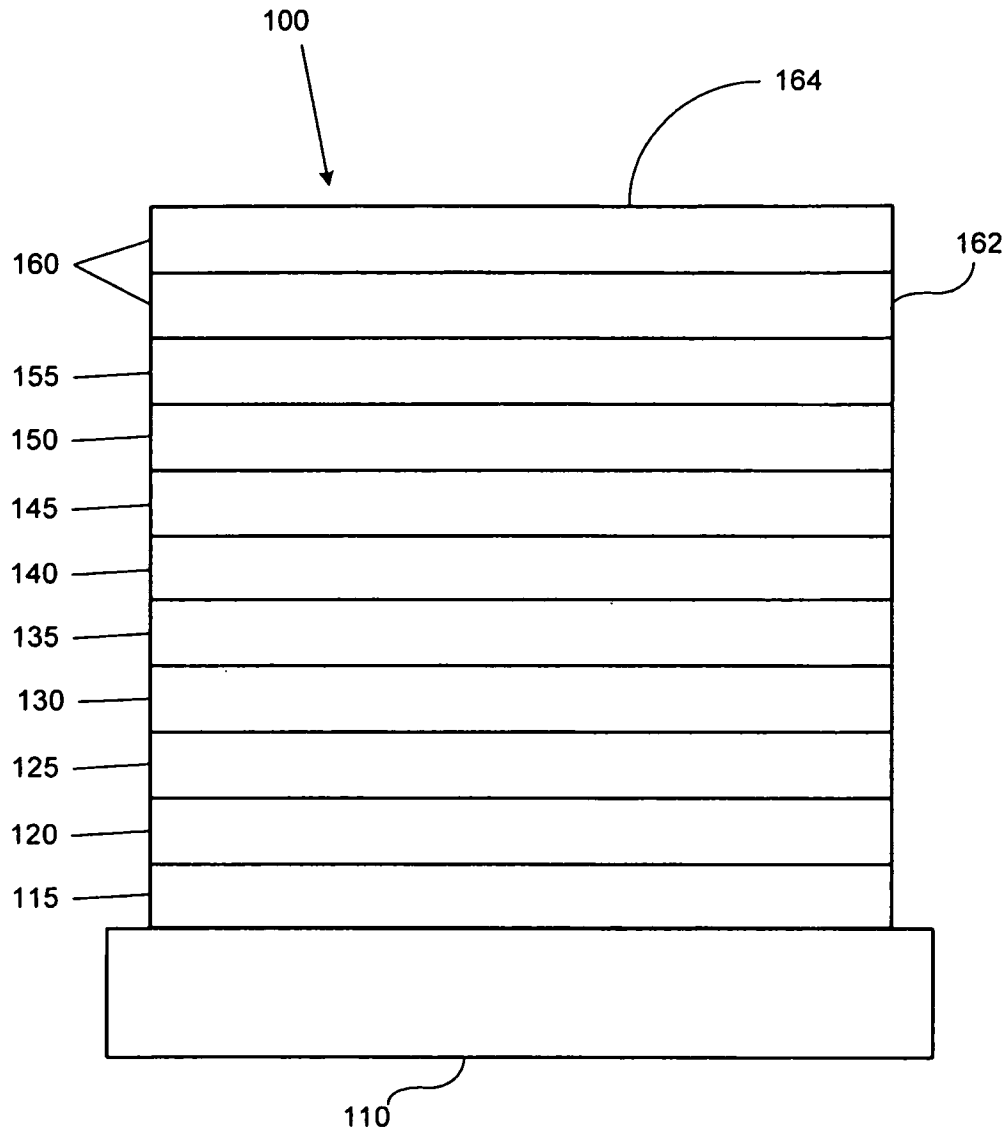


圖 1

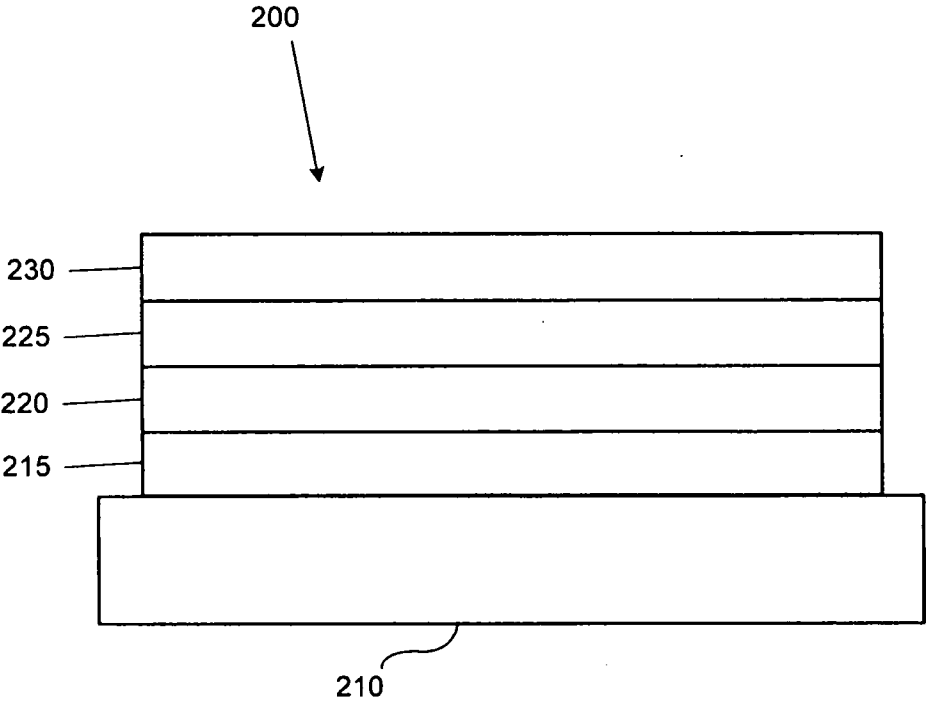


圖 2

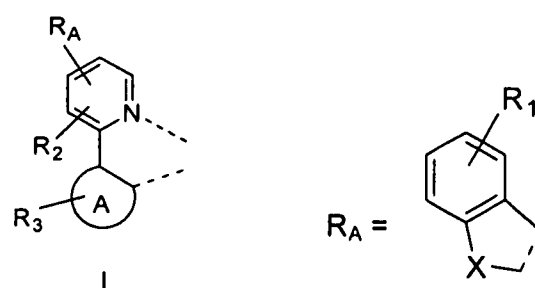


圖 3

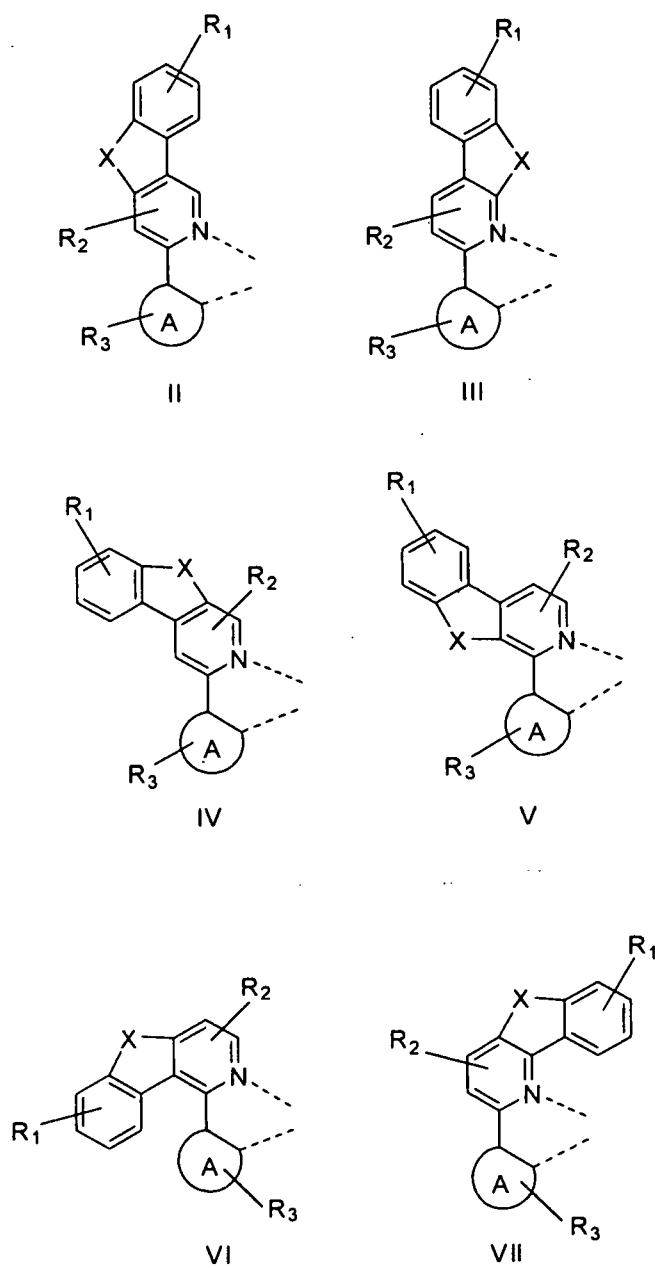


圖 4