



(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 I495635 B

(45) 公告日：中華民國 104 (2015) 年 08 月 11 日

(21) 申請案號：102117327

(22) 申請日：中華民國 102 (2013) 年 05 月 16 日

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

C07D239/26 (2006.01)

C07D401/04 (2006.01)

C07D213/06 (2006.01)

H01L51/50 (2006.01)

(30) 優先權：2012/07/13 南韓

10-2012-0076493

2013/05/13 南韓

10-2013-0053966

(71) 申請人：L G 化學股份有限公司 (南韓) LG CHEM, LTD. (KR)

大韓民國 105-721 首爾特別市永登浦汝矣大路 LG 雙子大樓 128

(72) 發明人：李相彬 LEE, SANGBIN (KR)；李東勳 LEE, DONG HOON (KR)；李浩勇 LEE,

HOYONG (KR)；金公謙 KIM, KONGKYEOM (KR)；張俊起 JANG, JUNGI

(KR)；洪性侁 HONG, SUNG KIL (KR)；申昌桓 SHIN, CHANGHWAN (KR)；李

炯珍 LEE, HYUNGJIN (KR)

(74) 代理人：葉璟宗；詹富閔；鄭婷文

(56) 參考文獻：

JP 2006-225322A

US 6352791B1

審查人員：官速貞

申請專利範圍項數：24 項 圖式數：2 共 99 頁

(54) 名稱

雜環化合物及包含其之有機電子裝置

HETERO-CYCLIC COMPOUND AND ORGANIC ELECTRONIC DEVICE USING THE SAME

(57) 摘要

本發明提供一種新穎化合物，其能夠顯著改善有機電子裝置之使用壽命、效率、電化學穩定性及熱穩定性，以及包括含有該化合物有機化合物層之有機電子裝置。

The present disclosure provides a novel compound capable of greatly improving the lifetime, efficiency, electrochemical stability and thermal stability of an organic electronic device, and an organic electronic device including an organic compound layer containing the compound.

- 1 . . . 基材
- 2 . . . 陽極
- 3 . . . 發光層
- 4 . . . 陰極

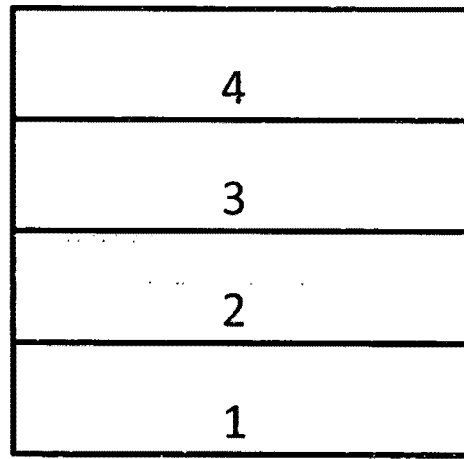
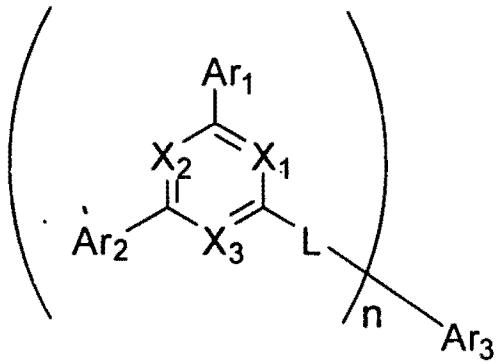


圖 1



發明摘要

※ 申請案號：102117327

※ 申請日：102.5.16

※IPC 分類：

C07D 251/54 (2006.01)
 C07D 239/16
 401/64
 H01L 51/50

【發明名稱】(中文/英文)

雜環化合物及包含其之有機電子裝置/HETERO-CYCLIC COMPOUND
 AND ORGANIC ELECTRONIC DEVICE USING THE SAME

【中文】

本發明提供一種新穎化合物，其能夠顯著改善有機電子裝置之使用壽命、效率、電化學穩定性及熱穩定性，以及包括含有該化合物有機化合物層之有機電子裝置。

【英文】

The present disclosure provides a novel compound capable of greatly improving the lifetime, efficiency, electrochemical stability and thermal stability of an organic electronic device, and an organic electronic device including an organic compound layer containing the compound.

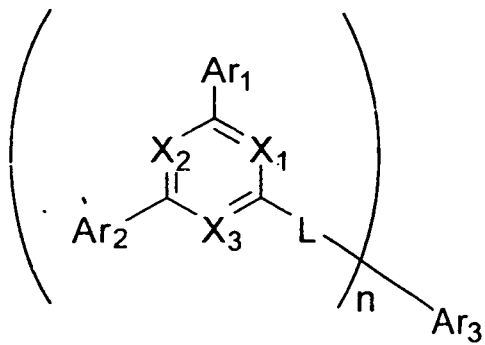
【代表圖】

【本案指定代表圖】：圖 1。

【本代表圖之符號簡單說明】：

- | | |
|---|-----|
| 1 | 基材 |
| 2 | 陽極 |
| 3 | 發光層 |
| 4 | 陰極 |

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：



其中，Ar₁、Ar₂、Ar₃、X₁、X₂、X₃、L 及 n 從說明書內容之定義。

發明專利說明書

【發明名稱】(中文/英文)

雜環化合物及包含其之有機電子裝置
/HETERO-CYCLIC COMPOUND AND ORGANIC
ELECTRONIC DEVICE USING THE SAME

【技術領域】

【0001】 本發明係關於一種新穎雜環化合物以及包含其之有機電子裝置。

【0002】 本發明主張於 2012 年 7 月 13 日提交韓國智慧財產局之韓國專利公開號第 10-2012-0076493 號之優先權。本發明亦主張於 2013 年 5 月 13 日提交韓國智慧財產局之韓國專利公開號第 10-2013-0053966 號之優先權，其所揭露之全部內容在此併入本文中作為參考。

【先前技術】

【0003】 此處所使用之術語「有機電子裝置」係指需利用電洞及/或電子於電極與有機材料之間進行電荷交換之裝置。該有機電子裝置可依據其操作原理大致分為下列兩種類型。一種類型為：透過由外部光源進入該裝置之光子，於有機材料層中形成激子，該激子接著分離為電子及電洞被傳輸至不同電極以作為電流來源(電壓來源)之電子裝置；而另一類型為：施加電壓或電流於兩個或以上之電極以注入一電洞及/或電子至設置於該電極間界面之有機半導體之電子裝置，且該裝置係使用該注入之電子及電洞運作。

【0004】 有機電子裝置之例子包括有機發光裝置、有機太陽能電池、有機電晶體及其類似物，上述之裝置均需要一電洞注入或電洞傳輸材料、電子注入或電子傳輸材料、或發光材料以驅動該裝置。以下，將主要並具體地描述該有機發光裝置，但於上述有機電子裝置中，該電洞注入或電洞傳輸材料、該電子注入或電子傳輸材料、或發光材料之功能係依據類似的原理引入。

【0005】 一般而言，術語「有機發光現象」係指利用有機材料將電能轉換為光能之現象。該利用有機發光現象之有機發光裝置通常具有包括陽極、陰極及插置於陽極和陰極之間之有機材料層之結構。於此，為了提高有機發光裝置之效率及穩定性，該有機層常常具有包括由不同材料所製得之複數層之多層結構。舉例而言，該有機材料可由電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層、電子注入層及其類似層所組成。於具有上述結構之有機發光裝置中，當施加電壓於兩個電極間時，來自陽極之電洞及來自陰極之電子注入該有機材料層中，且該電洞與電子彼此結合形成激子。當該激子依序落至基態，便發射光線。

【0006】 用於上述有機發光裝置之新穎材料之發展之需求持續不斷，且用於上述其他有機電子裝置之材料之發展亦有其需求。

【0007】 先前技術文件

【0008】 專利文件

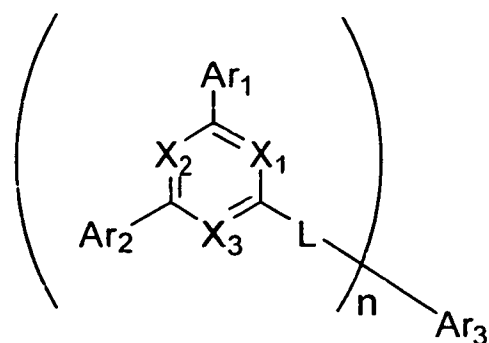
【0009】 國際專利公開號 WO 2003/012890。

【發明內容】

【0010】 據此，本發明之主要目的係提供一具有一化學結構之雜環化合物，根據其取代基，可提供有機電子裝置所需之各種功能，且可提供一包含其之有機電子裝置。

【0011】 本發明提供一如式 1 所示之化合物

【0012】 [式 1]



【0013】 其中，

【0014】 n 為 2；

【0015】 X₁ 至 X₃ 為相同或不同，且各自獨立為一三價雜原子或 CH，且 X₁ 至 X₃ 之至少一者為一三價雜原子；

【0016】 Ar₁ 及 Ar₂ 為相同或不同，且各自獨立為一經取代或未經取代之芳基或雜環基；

【0017】 L 為一直接鍵結、一經取代或未經取代之亞芳基、一經取代或未經取代之亞烯基、一經取代或未經取代之伸苐基、或一經取代或未經取代且具有一選自由 O、N、S 及 P 之雜原子之雜環基；以及

【0018】 Ar₃ 選自由一經取代或未經取代之 2,7-萘基、一經取代或未經取代之 1,2-萘基、一經取代或未經取代之 1,3-萘基、一經取代或未經取代之 1,6-萘基、一經取代或未經取

代之 1,7-萘基、一經取代或未經取代之 1,8-萘基、一經取代或未經取代之 2,3-萘基、一經取代或未經取代之 3,6-芴基、及一經取代或未經取代之 1,8-芴基所組成之群組。

【0019】 本發明亦提供一種有機電子裝置，包括：一第一電極；一第二電極；以及一層或多層有機材料層，其係插置於該第一電極及該第二電極之間；其中，該一層或多層有機材料層包括該式 1 雜環化合物。

【0020】 優異的效果

【0021】 依據本發明之新穎化合物可使用作為一用於有機電子裝置有機材料層之材料，該有機電子裝置包括有機發光裝置。使用依據本發明之新穎化合物可改善包括有機發光裝置在內的有機電子裝置之效率，降低該裝置之驅動電壓，及/或增加裝置使用壽命。

【圖式簡單說明】

【0022】

圖 1 係顯示一有機發光裝置之實施例，係由基材 1、陽極 2、發光層 3 及陰極 4 所組成。

圖 2 係顯示一有機發光裝置之實施例，係由基材 1、陽極 2、電洞注入層 5、電洞傳輸層 6、發光層 7、電子傳輸層 8 及陰極 4 所組成。

【實施方式】

【0023】 本發明提供如式 1 所示之化合物。

【0024】 於本發明中，三價雜原子的例子包括，但不限於，N及P。

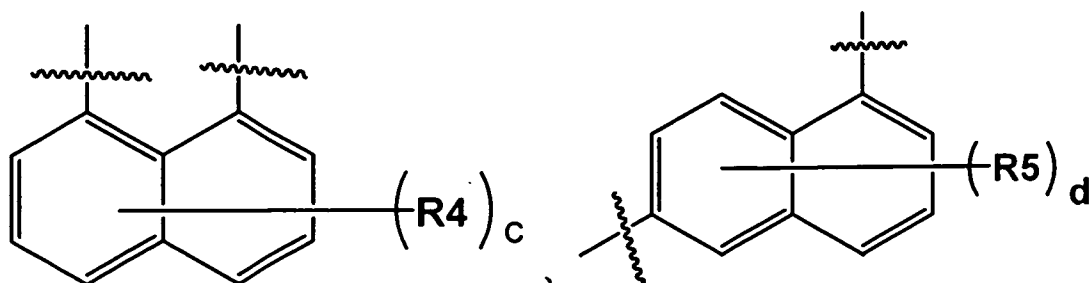
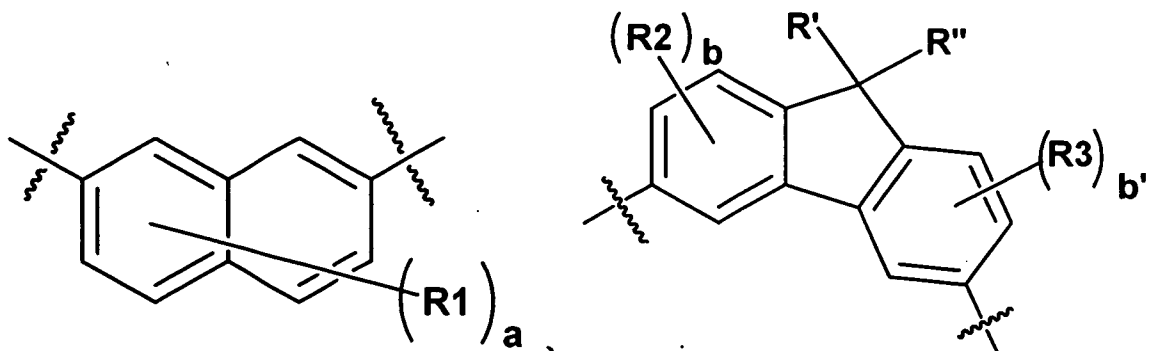
【0025】 於本發明之一實施例中，三價雜原子為N。

【0026】 於本發明之一實施例中， X_1 至 X_3 為相同或不同，且各自獨立為N或CH，且 X_1 至 X_3 之至少一者為N。

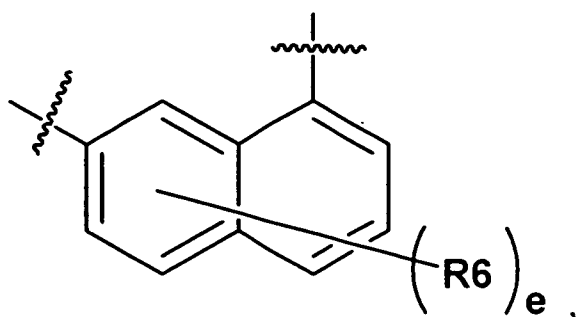
【0027】 於本發明之一實施例中， n 為2。

【0028】 於本發明之一實施例中，當 n 為2， X_1 至 X_3 、 Ar_1 至 Ar_3 及L可為相同或不同。

【0029】 於本發明之一實施例中， Ar_3 選自由下列結構：



、及

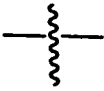
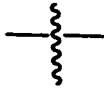


【0030】 其中， a 、 c 、 d 及 e 係各自為一1至6之正整

數， b 及 b' 係各自為一 1 至 3 之正整數， R_1 至 R_6 係為相同或不同，且各自獨立為氫、氖、鹵素基團、腈基、硝基、羥基、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之環烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳氧基、經取代或未經取代之烷硫氧基、經取代或未經取代之芳硫氧基、經取代或未經取代之烷基碲基、經取代或未經取代之芳基碲基、經取代或未經取代之烯基、經取代或未經取代之矽烷基、經取代或未經取代之硼基、經取代或未經取代之胺基、經取代或未經取代之烷胺基、經取代或未經取代之芳胺基、經取代或未經取代之芳基胺基、經取代或未經取代之雜芳基胺基、經取代或未經取代之芳基、經取代或未經取代之芴基、經取代或未經取代之咪唑基、或經取代或未經取代且含有至少一選自由 N、O、S 及 P 之雜原子之雜環基。

【0031】 R' 及 R'' 係為相同或不同，且各自獨立選自由：氫、氖、鹵素基團、腈基、硝基、羥基、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之環烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳氧基、經取代或未經取代之烷硫氧基、經取代或未經取代之芳硫氧基、經取代或未經取代之烷基碲基、經取代或未經取代之芳基碲基、經取代或未經取代之烯基、經取代或未經取代之矽烷基、經取代或未經取代之硼基、經取代或未經取代之胺基、經取代或未經取代之烷胺基、經取代或未經取代之芳胺基、經取代或未經取代之芳基胺基、經取代或未經取代之雜芳

基胺基、經取代或未經取代之芳基、經取代或未經取代之苄基、經取代或未經取代之咪唑基、或經取代或未經取代且含有至少一選自由 N、O、S 及 P 之雜原子之雜環基所組成之群組，或可與脂族環、芳香環、脂族雜環或芳香雜環形成一縮合環，或形成一螺旋連結。

【0032】 於本發明中，「」意指一連接其他取代基之部分。於一實施例中，可連接至式 1 之 L。於另一實施例中，當 L 為一直接鍵結，其可連接至一含有 X₁ 至 X₃ 之雜環。

【0033】 於本發明一實施例中，Ar₁ 及 Ar₂ 為相同或不同，且各自獨立為經取代或未經取代之苯基、經取代或未經取代之萘基、或經取代或未經取代之吡啶基。

【0034】 於另一實施例中，L 為一直接鍵結或一經取代或未經取代之伸苄基。

【0035】 取代基之例子將描述如下，但不以此為限。

【0036】 於本發明中，該烷基可為直鏈狀或分枝狀，且其碳原子數量並不特別限制，但較佳範圍可為 1 至 50。烷基之具體例子包括，但不限於：甲基、乙基、丙基、異丙基、丁基、叔丁基、戊基、己基及庚基。

【0037】 於本發明中，烯基可為直鏈狀或分枝狀，且其碳原子數量並不特別限制，但較佳範圍可為 2 至 50。烯基

之具體例子包括，但不限於：芳基取代之烯基，例如 stylybenyl 基及苯乙烯基(styrenyl)。

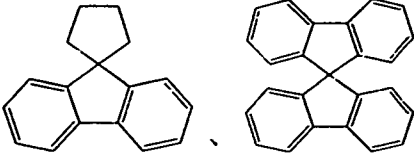
【0038】 於本發明中，烷氧基可為直鏈狀或分枝狀，且其碳原子數量並不特別限制，但較佳範圍可為 1 至 50。

【0039】 於該化合物中的烷基、烯基及烷氧基之長度不影響該化合物之組態長度，而僅影響用以塗佈該化合物至有機電子裝置之方法，例如真空沉積法或溶液塗佈法，且因此該些基團的碳原子數並不特別受限。

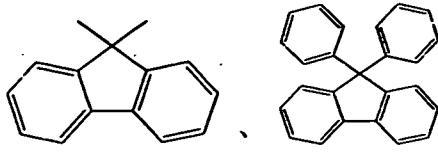
【0040】 於本發明中，該環烷基並不特別受限，但較佳含有 3 至 60 個碳原子。環烷基之較佳例包括環戊基及環己基。

【0041】 於本發明中，鹵素基團的例子包括氟、氯、溴或碘。

【0042】 於本發明中，芴基(fluorenyl)具有一結構，其中，兩個環狀有機化合物透過一原子彼此連接，且其例子

包括  及其類似物。

【0043】 於本發明中，該芴基包括一具有透過一原子彼此相連之兩個環化合物之一者被斷鍵之結構之開放式芴基。

該開放式芴基之例子包括  及其類似物。

【0044】 於本發明中，胺基之碳原子數並不特別受限，但較佳範圍可為 1 至 50。胺基之具體例子包括，但不限於：甲胺基(methylamine)、二甲胺基(dimethylamine)、乙胺基(ethylamine)、二乙胺基(diethylamine)、戊胺基(phenylamine)、萘胺基(naphthylamine)、聯苯胺基(biphenylamine)、蔥胺基(anthracenylamine)、9-甲基-蔥胺基(9-methyl-anthracenylamine)、雙苯胺基(diphenylamine)、苯基萘胺基(phenylnaphthylamine)、二甲苯胺基(ditolylamine)、苯基甲苯胺基(phenyltolylamine)及三苯胺基(triphenylamine)。

【0045】 於本發明中，芳胺基的例子包括經取代或未經取代之單芳胺基(monoarylamine)、經取代或未經取代之二芳胺基(diarylamine)、或經取代或未經取代之三芳胺基(triarylamine)。芳胺基之芳基可為單環或多環芳基。該含有兩個或以上芳基之芳胺基可包括一單環芳基、一多環芳基、或該單環芳基及該多環芳基兩者。

【0046】 芳胺基的具體例子包括，但不限於：苯胺基(phenylamine)、萘胺基(naphthylamine)、聯苯胺基(biphenylamine)、蔥胺基(anthracenylamine)、3-甲基-苯胺基(3-methyl-phenylamine)、4-甲基-萘胺基(4-methyl-naphthylamine)、2-甲基-聯苯胺基(2-methyl-biphenylamine)、9-甲基-蔥胺基(9-methyl-

anthracenylamine)、二苯胺基(diphenylamine)、苯基萘胺基(phenylnaphthylamine)、二甲苯胺基(ditolylamine)、苯基甲苯胺基(phenyltolylamine)、咔唑基(carbazole)及三苯胺基(triphenylamine)。

【0047】 於本發明中，芳氧基(aryloxy)、芳硫氧基(arylthioxy)、芳基磺基(arylsulfoxy)及芳胺基(aralkylamine)各自之碳原子數並不特別受限，但較佳範圍為 6 至 50。芳氧基(aryloxy)、芳硫氧基(arylthioxy)、芳基磺基(arylsulfoxy)及芳胺基(aralkylamine)各自之芳基如上述所定義。

【0048】 於本發明中，烷硫氧基(alkylthioxy)、烷基磺基(alkylsulfoxy)、烷胺基(alkylamine)及芳胺基各自之烷基係如上述所定義。

【0049】 於本發明中，雜芳胺基之雜芳基可選自上述所舉例之雜環基。

【0050】 於本發明中，亞芳基(arylene)、伸烯基(alkenylene)、伸芴基(fluorenylene)及雜亞芳基(heteroarylene)分別為二價芳基、烯基、芴基及雜芳基(heteroaryl)。該些基團除了為二價基團外，係如上述對芳基、烯基、芴基及雜芳基之定義。

【0051】 當使用於此時，術語「經取代或未經取代」意指其係經一個或多個取代基所取代，該取代基選自由下列基團所組成之群組：氘(deuterium)、鹵素基團(halogen)、烷

基(alkyl)、烯基(alkenyl)、烷氧基(alkoxy)、環烷基(cycloalkyl)、矽烷基(silyl)、芳烯基(arylalkenyl)、芳基(aryl)、芳氧基(aryloxy)、芳硫氧基(alkylthioxy)、烷基磺基(alkylsulfoxy)、芳基磺基(arylsulfoxy)、硼基(boron)、烷胺基(alkylamine)、芳烷胺基(aralkylamine)、芳胺基(arylamine)、雜芳基(heteroaryl)、咔唑基(carbazole)、芳胺基(arylamine)、芴基(fluorenyl)、腈基(nitrile)、硝基(nitro)、烴基(hydroxyl)、氰基(cyano)及含有至少一選自 N、O、S 及 P 之雜原子之雜環基(heterocyclic)。

【0052】 本發明提供一如上述式 1 所示化合物之新穎雜環化合物。該化合物因其結構特殊性可使用於一有機電子裝置中的有機材料層。

【0053】 於一實施例中，Ar₃ 為一經取代或未經取代之 2,7-萘基、一經取代或未經取代之 1,8-萘基、一經取代或未經取代之 1,6-萘基、一經取代或未經取代之 1,7-萘基、或一經取代或未經取代之 3,6-芴基。

【0054】 於本發明一實施例中，Ar₃ 為一 2,7-萘基。

【0055】 於另一實施例中，Ar₃ 為一 1,8-萘基。

【0056】 於又一實施例中，Ar₃ 為一 1,7-萘基。

【0057】 於又一實施例中，Ar₃ 為一 1,6-萘基。

【0058】 於本發明一實施例中，Ar₃ 為一 3,6-芴基。在此情況中，作為電子施體之化合物之功效可進一步提高以改

善電子傳輸及注入一發光層之效率。據此，該化合物可具有優異的電壓及效率之特性。

【0059】 於本發明一實施例中，Ar₃ 為一經芳基取代之2,7-萘基。

【0060】 於本發明一實施例中，Ar₃ 為一經苯基取代之2,7-萘基。

【0061】 於本發明一實施例中，Ar₃ 為一經芳基取代之1,8-萘基。

【0062】 於本發明一實施例中，Ar₃ 為一經苯基取代之1,8-萘基。

【0063】 於本發明一實施例中，Ar₃ 為一經芳基取代之1,7-萘基。

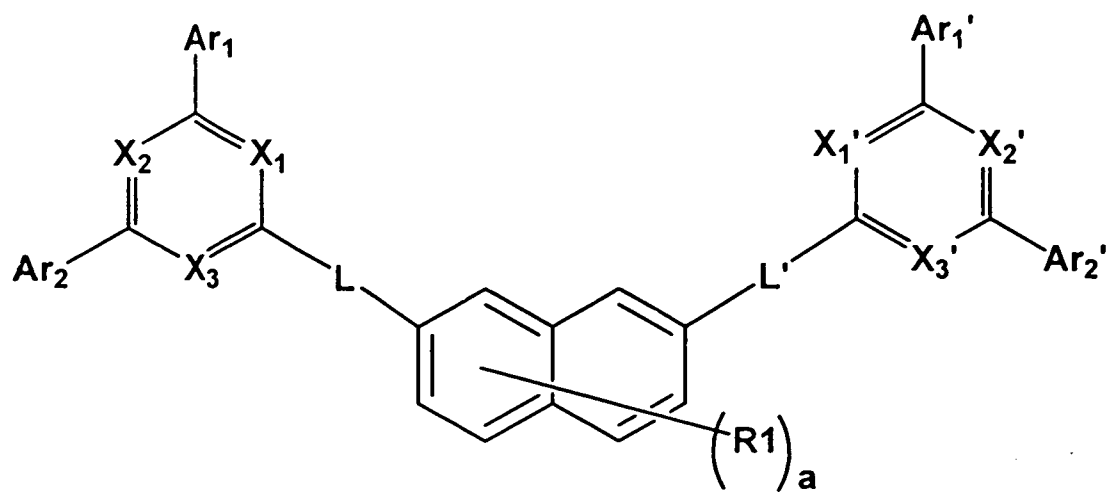
【0064】 於本發明一實施例中，Ar₃ 為一經苯基取代之1,7-萘基。

【0065】 於本發明一實施例中，Ar₃ 為一經芳基取代之1,6-萘基。

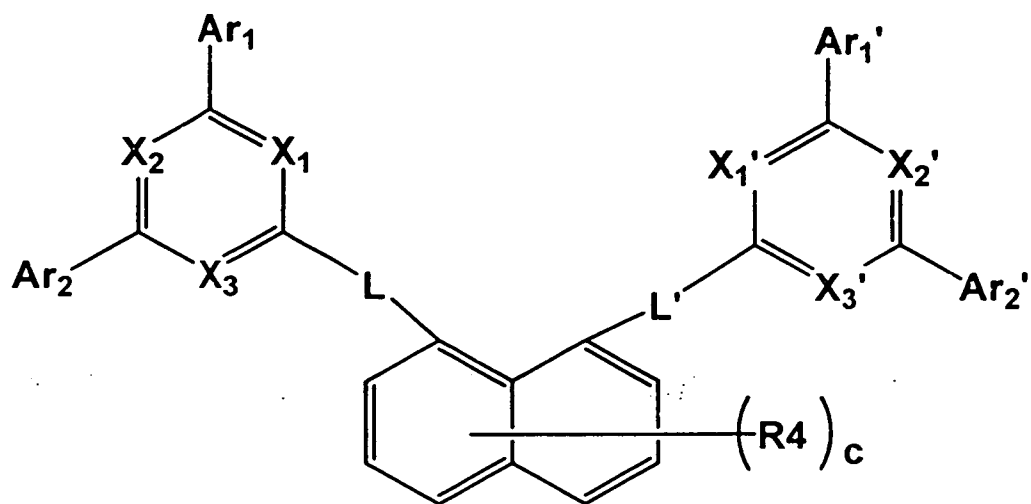
【0066】 於本發明一實施例中，Ar₃ 為一經苯基取代之1,6-萘基。

【0067】 於本發明一實施例中，式 1 所示化合物為下式 1-a、1-b、1-c、1-d 及 1-e 所示任一者：

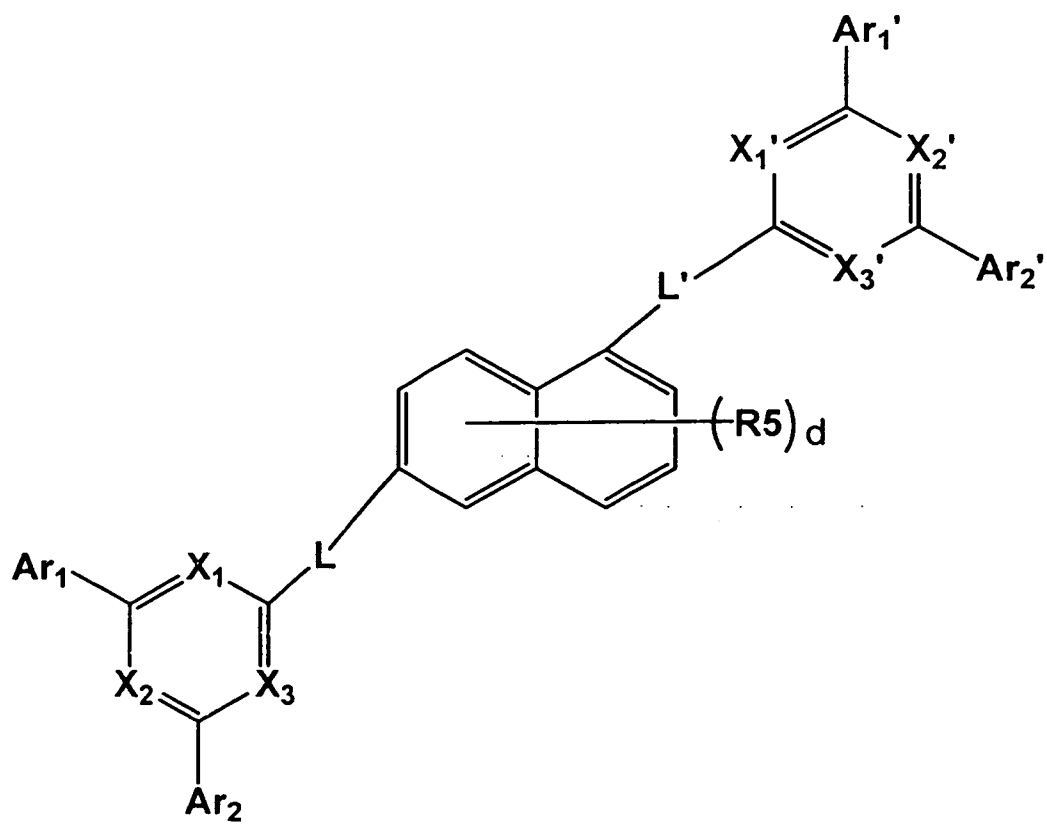
【0068】 式 1-a



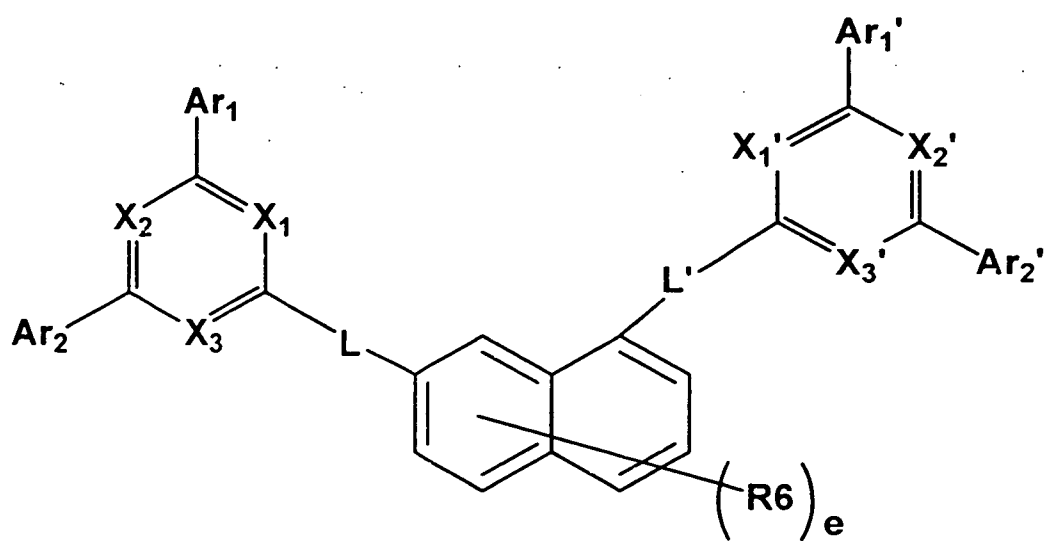
【0069】 式 1-b



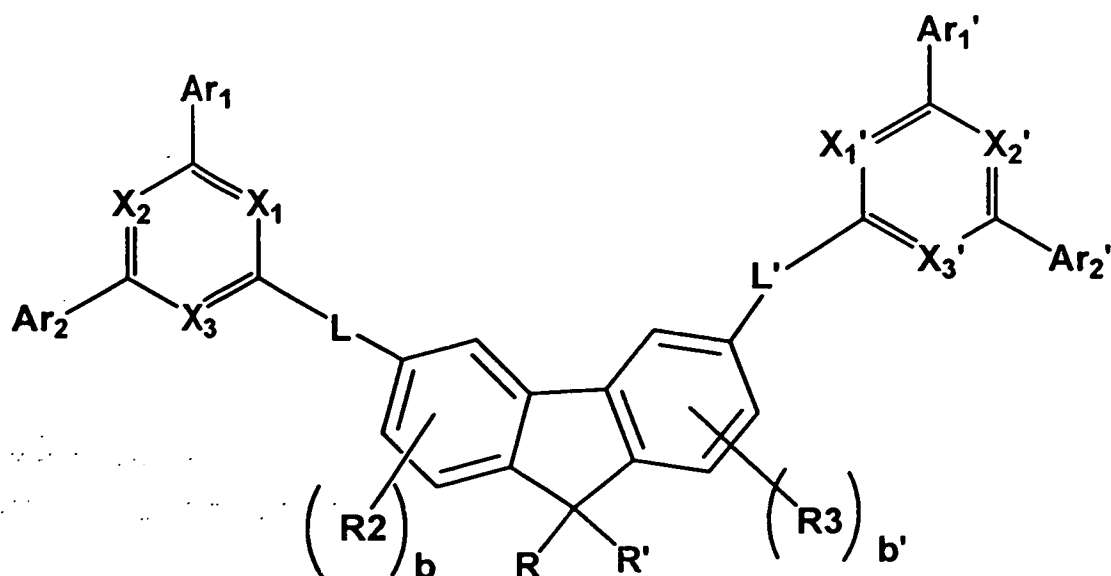
【0070】 式 1-c



【0071】 式 1-d



【0072】 式 1-e



【0073】 其中，

【0074】 Ar_1 、 Ar_2 、 L 及 X_1 至 X_3 如式 1 所定義，

【0075】 Ar_1' 、 Ar_2' 、 L' 及 X_1' 至 X_3' 分別與 Ar_1 、 Ar_2 、 L 及 X_1 至 X_3 之定義相同，且

【0076】 R_1 至 R_6 、 a 、 b 、 b' 、 c 、 d 及 e 如上述定義。

【0077】 於本發明一實施例中， X_1 至 X_3 之至少一者係為一三價雜原子。

【0078】 具體而言，於本發明一實施例中， X_1 至 X_3 之至少一者係為 N 或 P 。

【0079】 於本發明一實施例中， X_1 至 X_3 可全部為 N 。

【0080】 於本發明一實施例中， X_1 可為 N ，且 X_2 及 X_3 可為 CH 。

【0081】 於本發明一實施例中， X_2 可為 N ，且 X_1 及 X_3 可為 CH 。

【0082】 於本發明一實施例中， X_3 可為 N ，且 X_1 及 X_2

可為 CH。

【0083】 於本發明一實施例中， X_1 及 X_2 可為 N。在此情況下， X_3 為 CH。

【0084】 於本發明一實施例中， X_1 及 X_3 可為 N。在此情況下， X_2 為 CH。

【0085】 於本發明一實施例中， X_2 及 X_3 可為 N。在此情況下， X_1 為 CH。

【0086】 於本發明一實施例中，當式 1 中的 n 為 2 時，連接至 Ar_3 之結構可為相同或不同。

【0087】 於本發明另一實施例中，式 1 中的 Ar_1 及 Ar_2 可為經取代或未經取代之芳基或雜芳基。

【0088】 具體而言， Ar_1 及 Ar_2 可為相同或不同，且可各自獨立為經取代或未經取代之苯基、經取代或未經取代之聯苯基、經取代或未經取代之吡啶基、或經取代或未經取代之萘基。

【0089】 於本發明一實施例中， Ar_1 及 Ar_2 可為相同或不同，且可各自獨立為經烷基取代之苯基、經烷氧基取代之苯基、經鹵素取代之苯基或經三氟取代之苯基。

【0090】 於本發明一實施例中， Ar_1 及 Ar_2 可為相同或不同，且可各自獨立為經烷基取代之聯苯基、經烷氧基取代之聯苯基、經鹵素取代之聯苯基或經三氟取代之聯苯基。

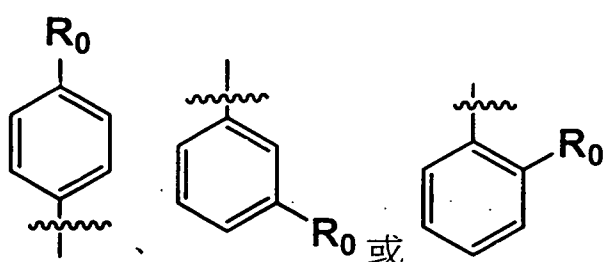
【0091】 於本發明一實施例中， Ar_1 及 Ar_2 可為相同或不

同，且可各自獨立為經烷基取代之吡啶基、經烷氧基取代之吡啶基、經鹵素取代之吡啶基或經三氟取代之吡啶基。

【0092】 於本發明一實施例中， Ar_1 及 Ar_2 可為相同或不同，且可各自獨立為經烷基取代之苯基、經烷氧基取代之萘基、經鹵素取代之萘基或經三氟取代之萘基。

【0093】 於本發明一實施例中， Ar_1 及 Ar_2 可為相同或不同，且可各自獨立為經甲基取代之苯基、經甲氧基取代之苯基、經氟取代之苯基或經三氟取代之苯基。

【0094】 於本發明一實施例中， Ar_1 及 Ar_2 可為相同或不

同，且可各自獨立為 ，其中 R_0 可為選自由烷基、烷氧基、鹵素及三氟基所組成之群組。

【0095】 於本發明一實施例中， Ar_1 及 Ar_2 可為相同或不同，且可各自獨立為經甲基取代之聯苯基、經甲氧基取代之聯苯基、經氟取代之聯苯基或經三氟取代之聯苯基。

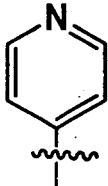
【0096】 於本發明一實施例中， Ar_1 及 Ar_2 可為相同或不同，且可各自獨立為經甲基取代之吡啶基、經甲氧基取代之吡啶基、經氟取代之吡啶基或經三氟取代之吡啶基。

【0097】 於本發明一實施例中， Ar_1 及 Ar_2 可為相同或不同，且可各自獨立為經甲基取代之萘基、經甲氧基取代之

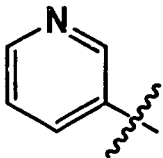
萘基、經氟取代之萘基或經三氟取代之萘基。

【0098】 於本發明一實施例中，Ar₁及 Ar₂可為相同或不同，且可各自獨立為苯基、聯苯基、吡啶基、或萘基。

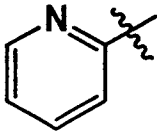
【0099】 於本發明一實施例中，Ar₁及 Ar₂可為相同或不

同，且可各自獨立為 。

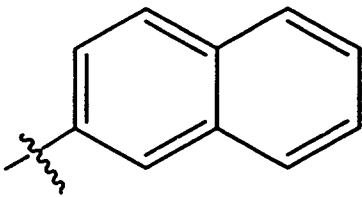
【0100】 於本發明一實施例中，Ar₁及 Ar₂可為相同或不

同，且可各自獨立為 。

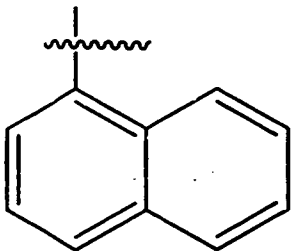
【0101】 於本發明一實施例中，Ar₁及 Ar₂可為相同或不

同，且可各自獨立為 。

【0102】 於本發明一實施例中，Ar₁及 Ar₂可為相同或不

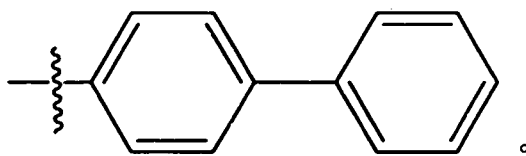
同，且可各自獨立為 。

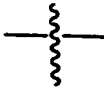
【0103】 於本發明一實施例中，Ar₁及 Ar₂可為相同或不

同，且可各自獨立為 。

【0104】 於本發明一實施例中，Ar₁及 Ar₂可為相同或不

同，且可各自獨立為



【0105】 於本發明中，「」意指 Ar₁ 及 Ar₂ 連接至包含式 1 之 X₁ 至 X₃ 之雜環。

【0106】 於本發明另一實施例中，L 可為一直接鍵結、一經取代或未經取代之亞芳基、一經取代或未經取代之伸烯基、一經取代或未經取代之伸苄基、或一經取代或未經取代且具有一選自由 O、N、S 及 P 之雜原子之雜環基。

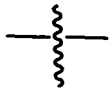
【0107】 具體而言，L 可為一直接鍵結、一經取代或未經取代之亞苯基、一經取代或未經取代之萘基(naphthalene)、一經取代或未經取代之伸苄基、一經取代或未經取代之亞吡啶基(pyridylene)、或一經取代或未經取代之亞聯苯基(biphenylene)。

【0108】 於本發明一實施例中，L 可為亞苯基、萘基、伸苄基、亞吡啶基、或亞聯苯基。

【0109】 於本發明一實施例中，L 可為直接鍵結。

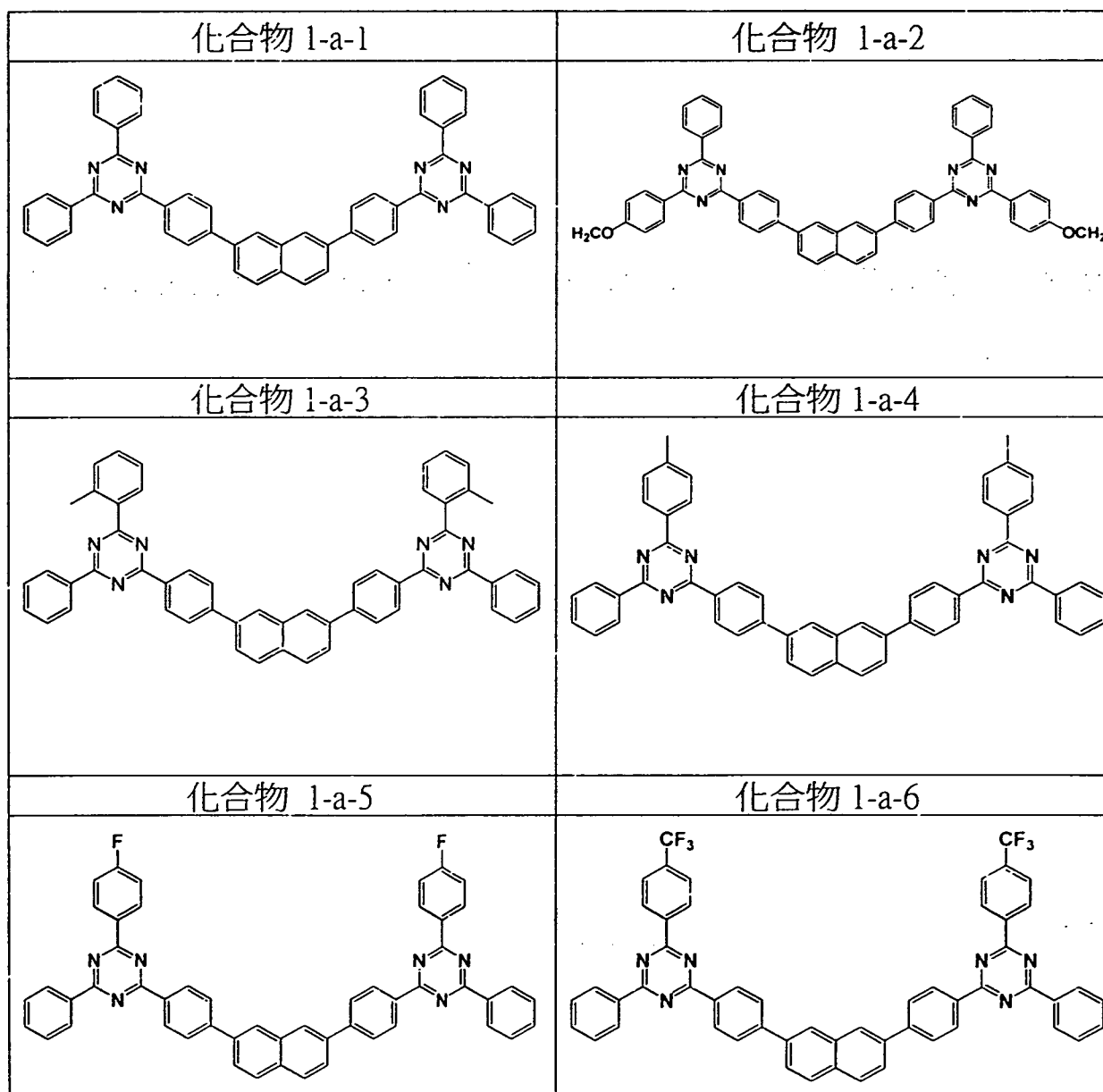
【0110】 於本發明一實施例中，L 可為亞苯基。具體而

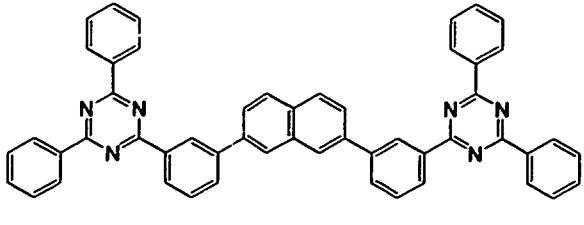
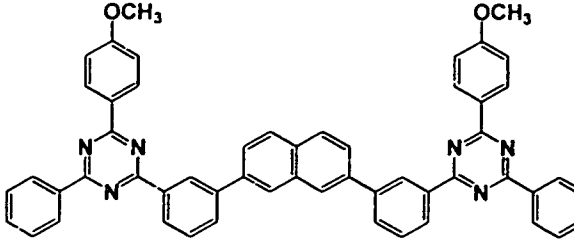
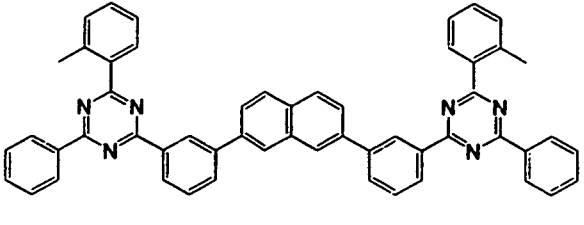
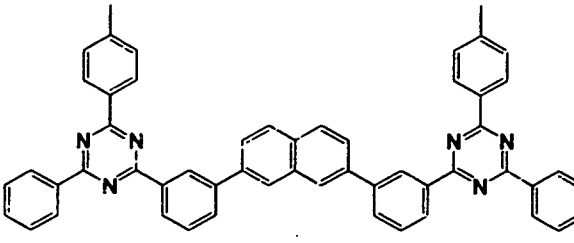
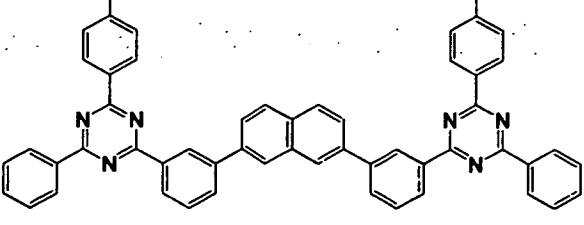
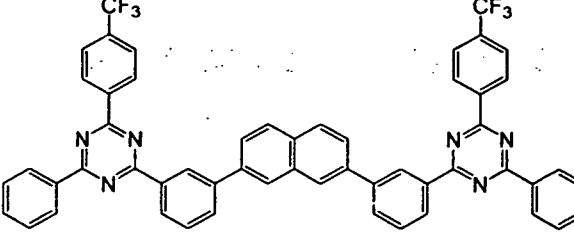
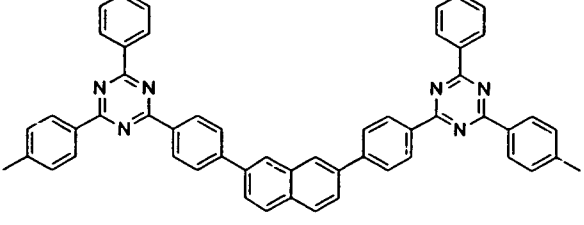
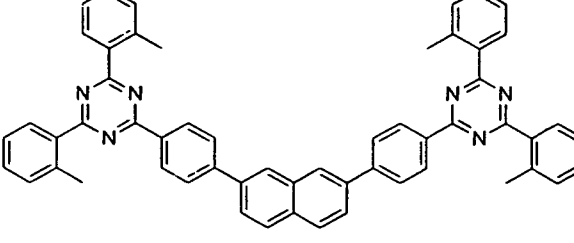
言，L 可為 。於另一實施例中，L 可為 。於此，

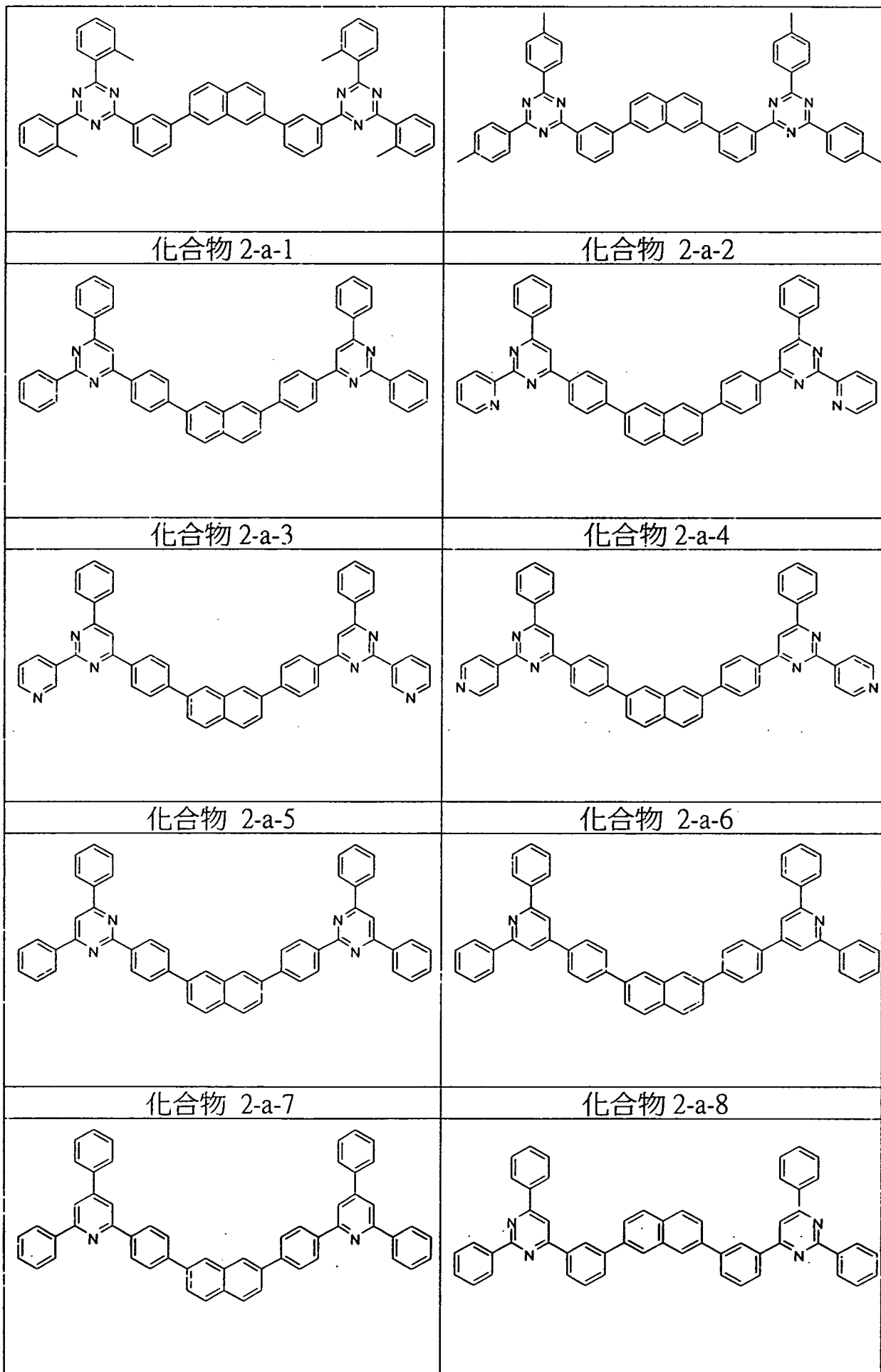
「」意指 L 連接至包含式 1 之 X₁ 至 X₃ 之雜環或 Ar₃。

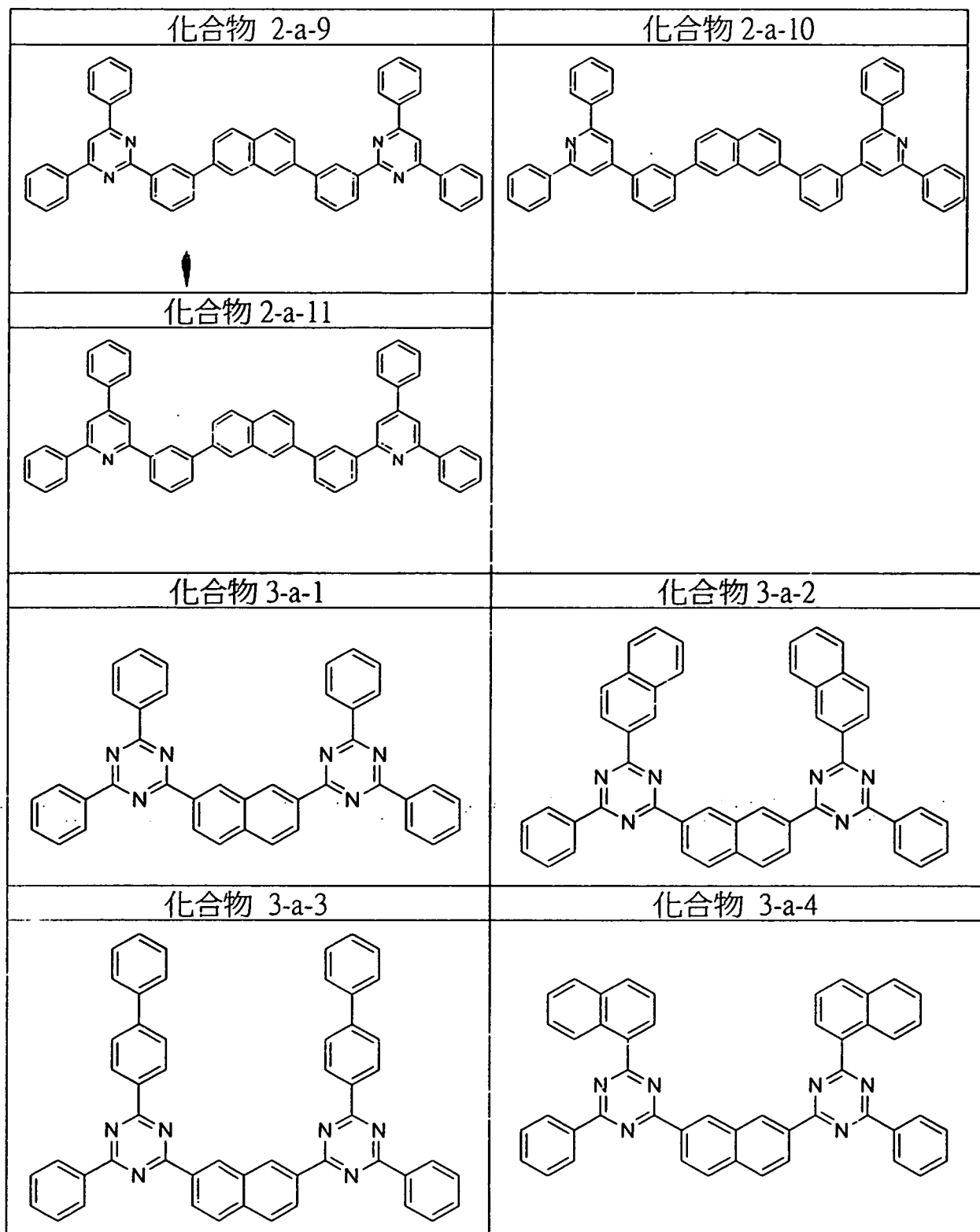
【0111】 於本發明一實施例中，式 1 所示化合物為下列化合物 1-a-1 至 1-a-16、2-a-1 至 2-a-11、3-a-1 至 3-a-4、1-b-1 至 1-b-16、2-b-1 至 2-b-11、3-b-1 至 3-b-4、1-c-1 至 1-c-16、2-c-1 至 2-c-11、3-c-1 至 3-c-4、1-d-1 至 1-d-16、2-d-1 至 2-d-11、3-d-1 至 3-d-4、1-e-1 至 1-e-10、及 2-e-1 至 2-e-8 之任一者。

【0112】 於本發明一實施例中，式 1-a 所示化合物為下列化合物 1-a-1 至 1-a-16、2-a-1 至 2-a-11 及 3-a-1 至 3-a-4 之任一者：

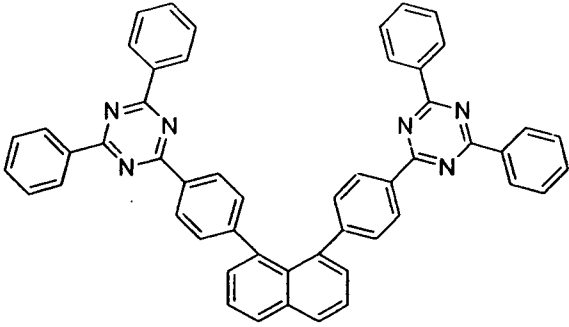
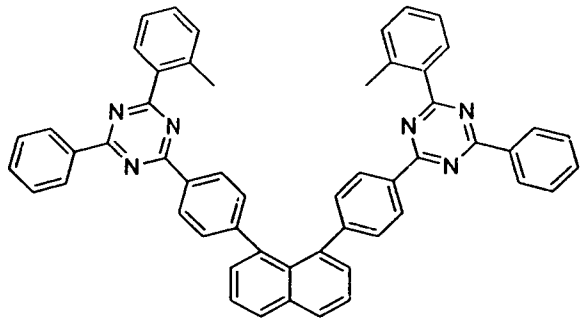
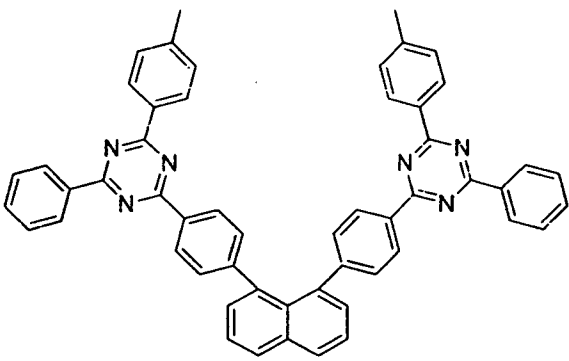
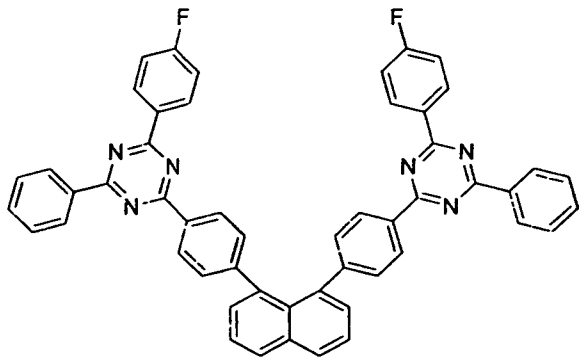
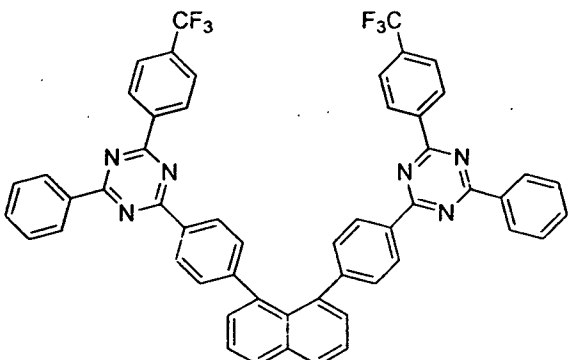
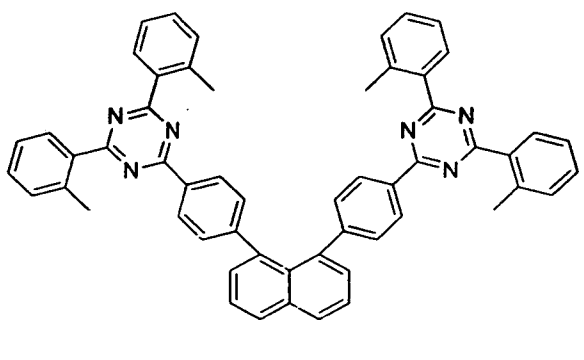
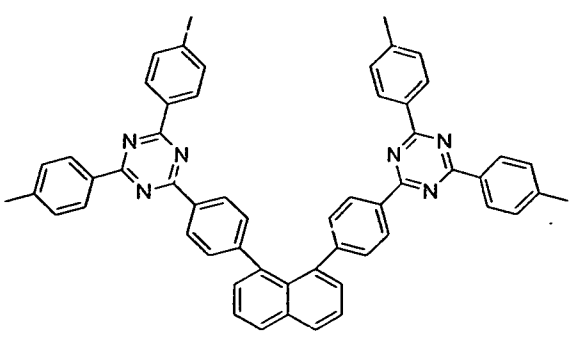
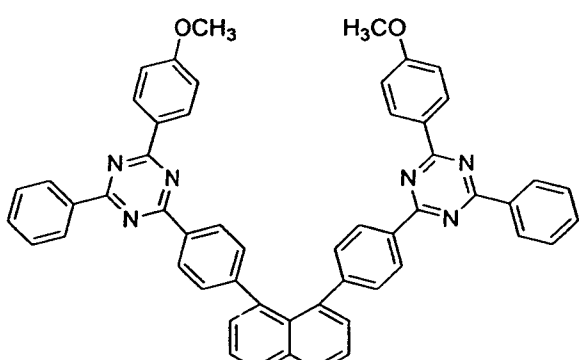
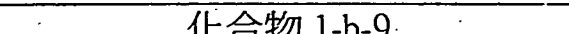
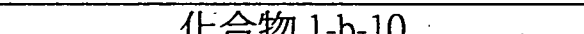


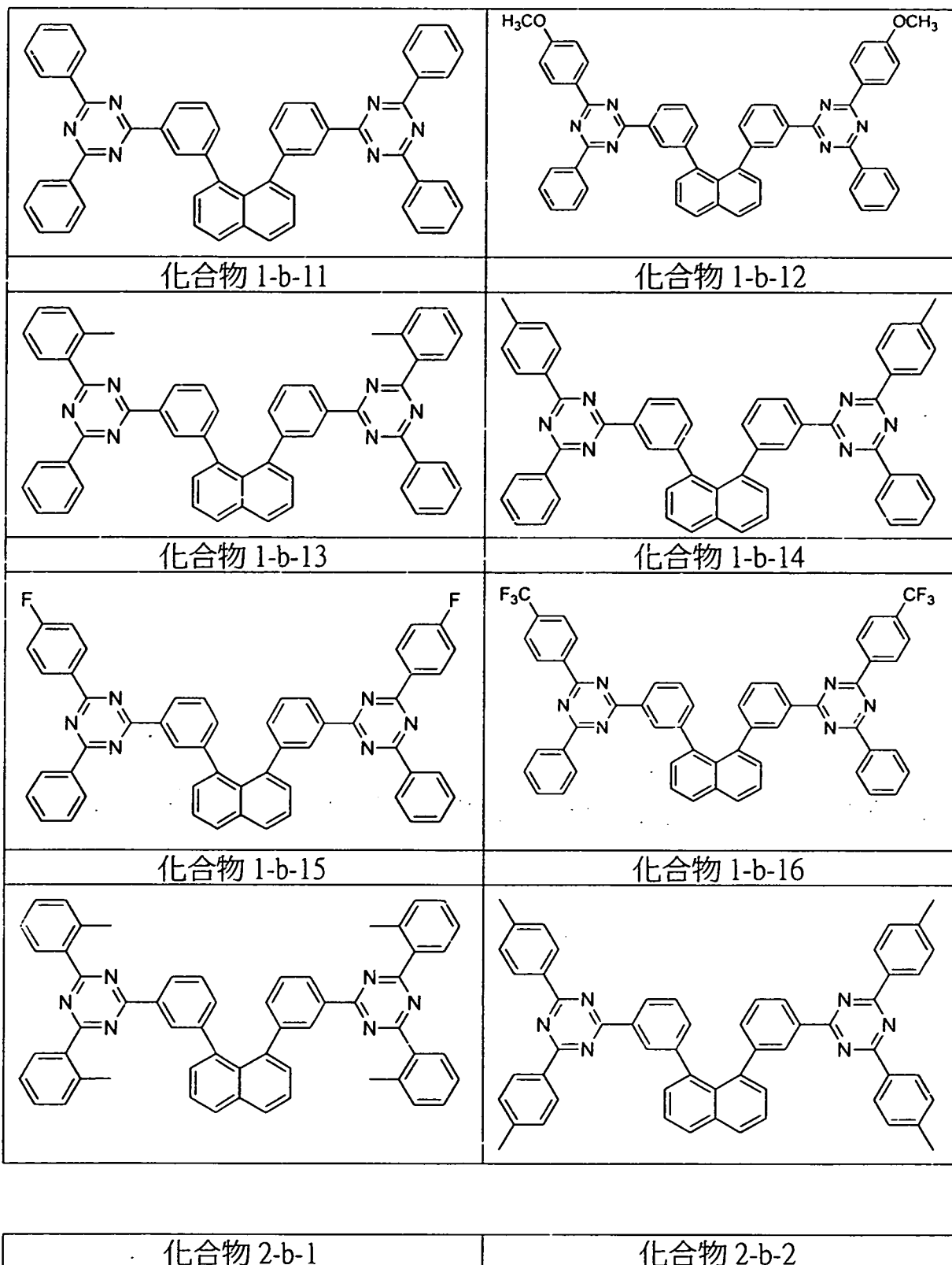
化合物 1-a-7	化合物 1-a-8
	
化合物 1-a-9	化合物 1-a-10
	
化合物 1-a-11	化合物 1-a-12
	
化合物 1-a-13	化合物 1-a-14
	
化合物 1-a-15	化合物 1-a-16

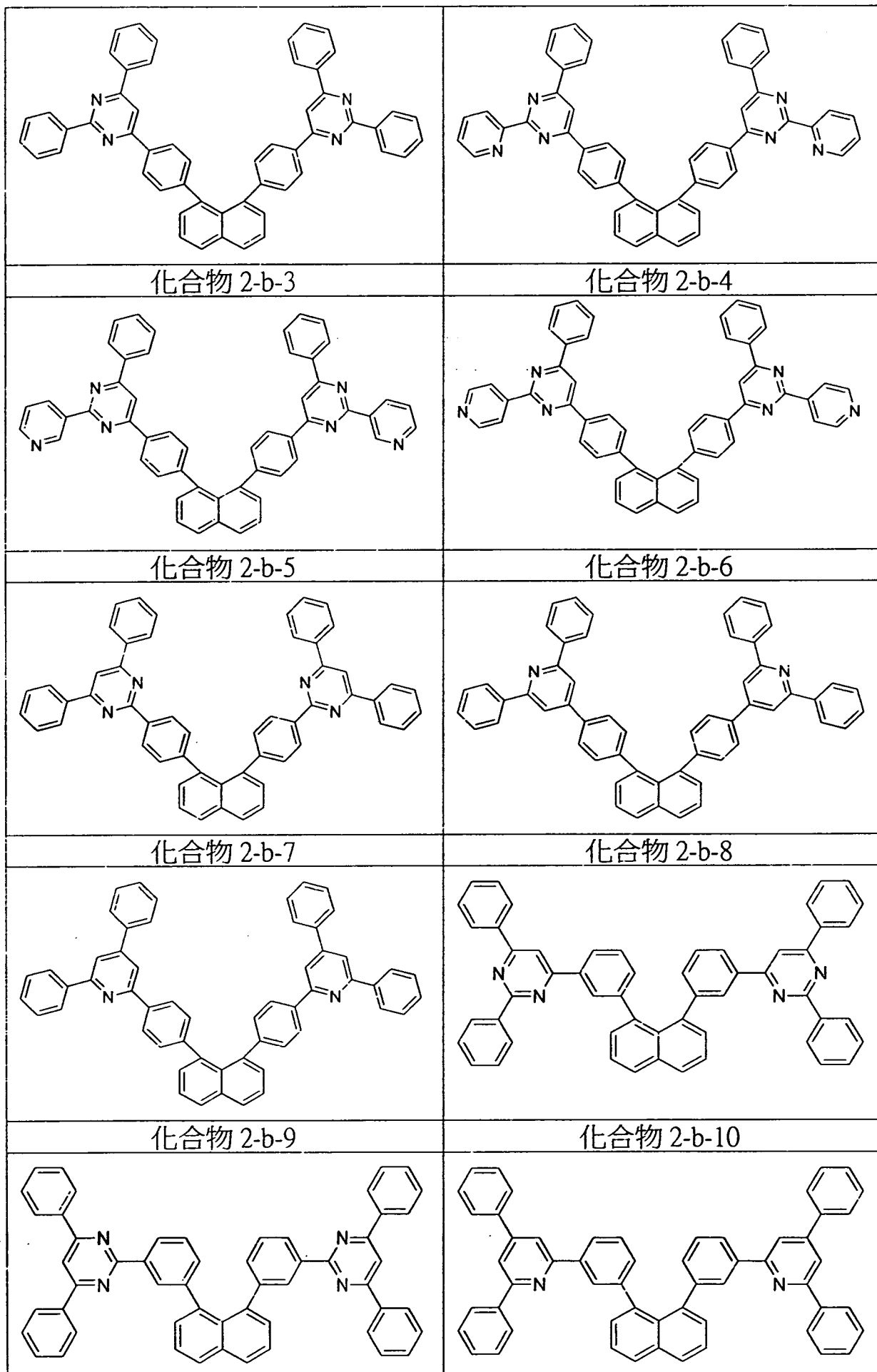


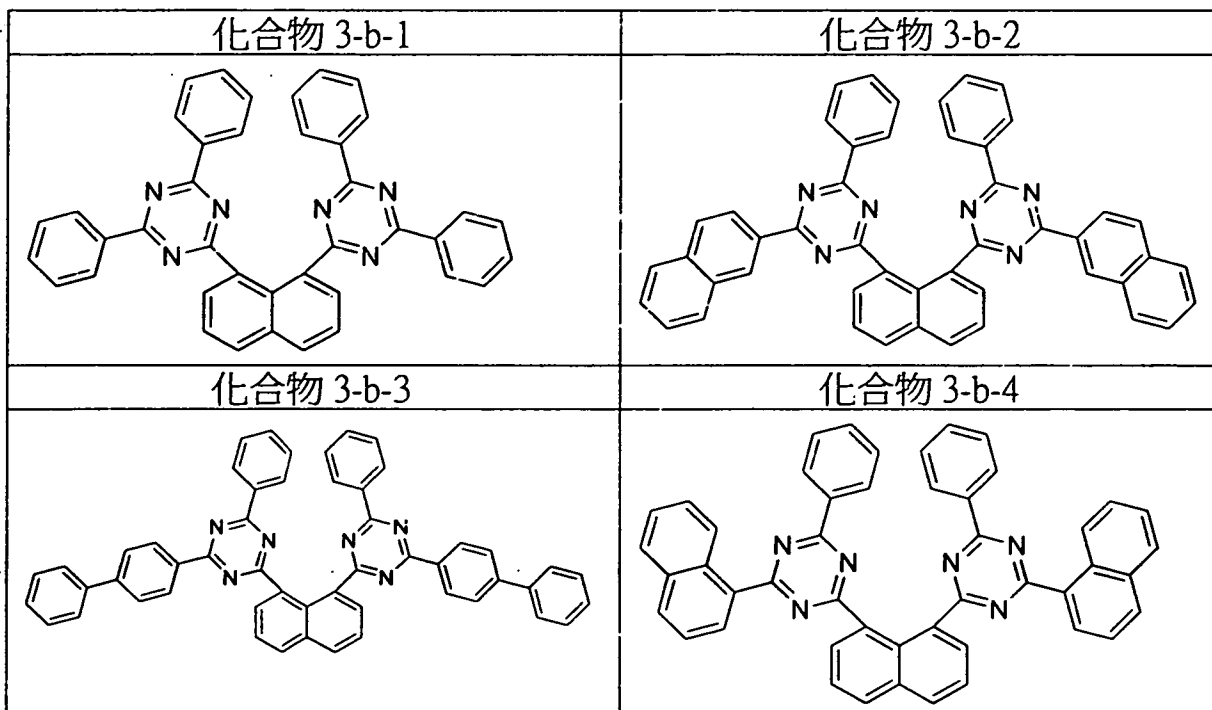
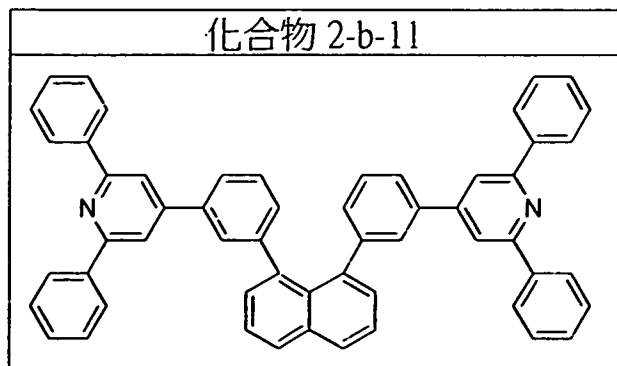


【0113】 於本發明一實施例中，式 1-b 所示化合物為下列化合物 1-b-1 至 1-b-16、2-b-1 至 2-b-11 及 3-b-1 至 3-b-4 之任一者：

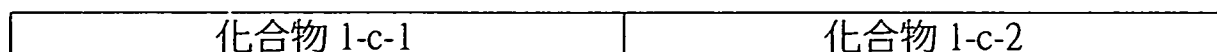
化合物 1-b-1	化合物 1-b-2
	
化合物 1-b-3	化合物 1-b-4
	
化合物 1-b-5	化合物 1-b-6
	
化合物 1-b-7	化合物 1-b-8
	
化合物 1-b-9	化合物 1-b-10
	

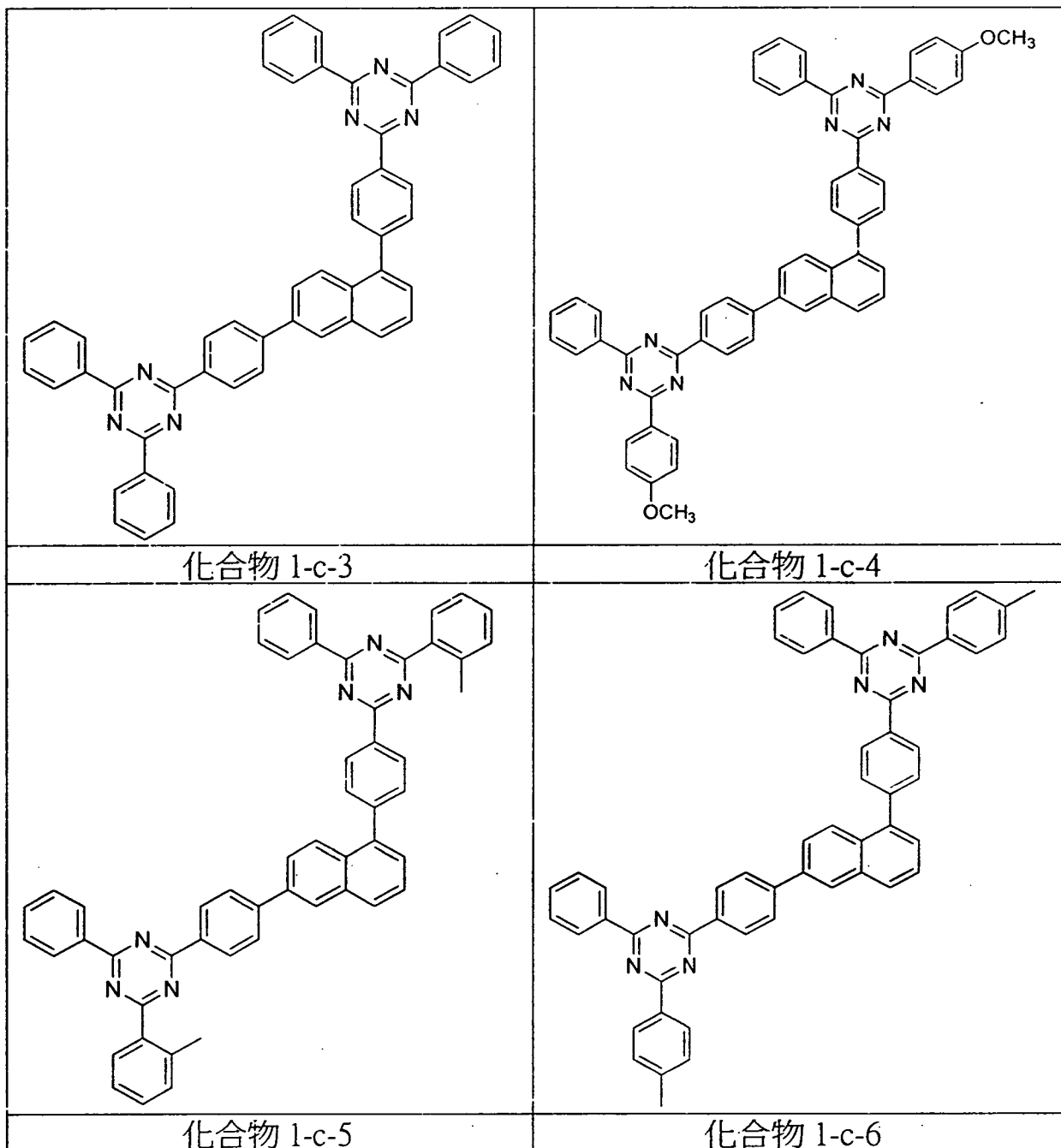




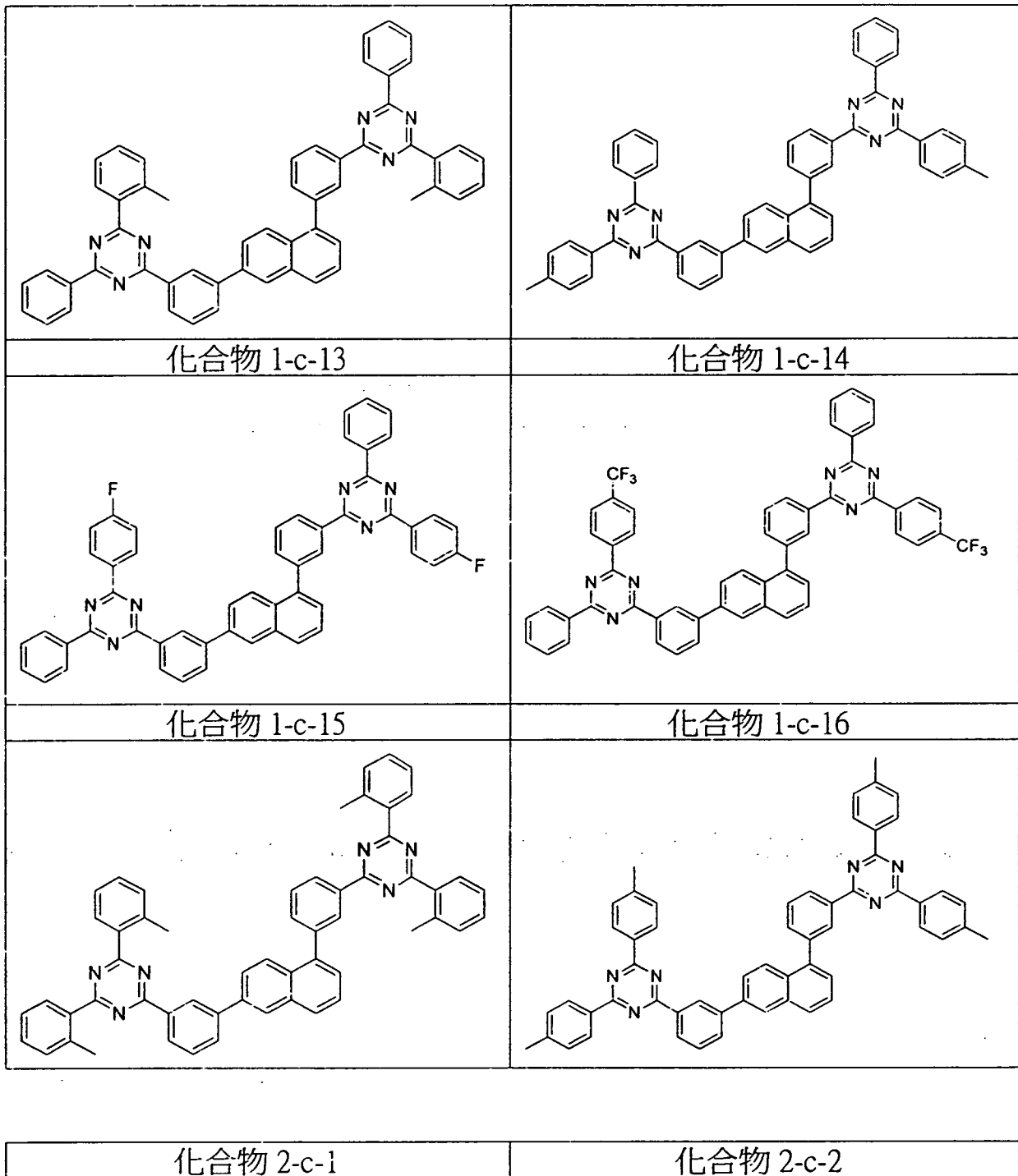


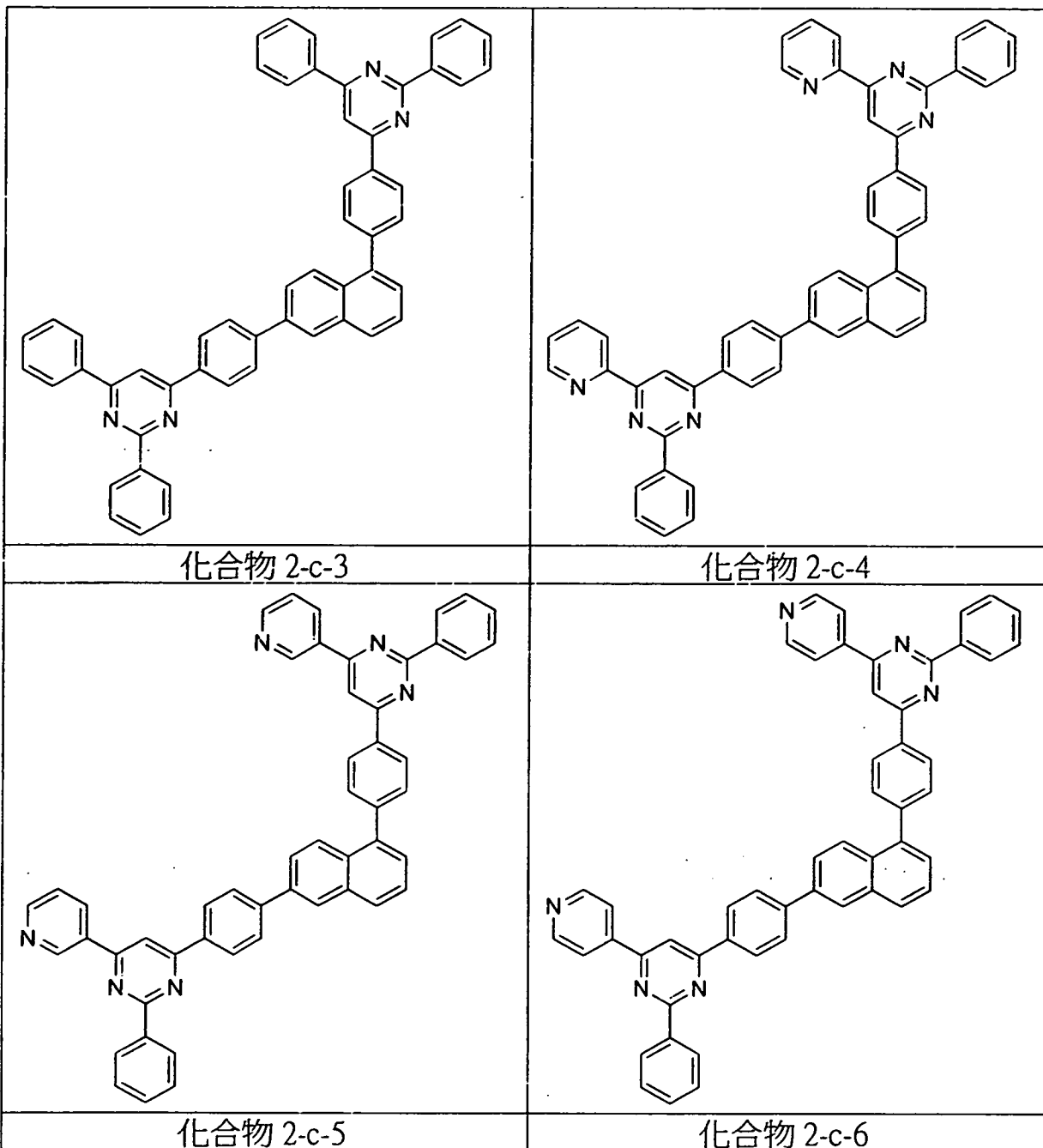
【0114】 於本發明一實施例中，式 1-c 所示化合物為下列化合物 1-c-1 至 1-c-16、2-c-1 至 2-c-11 及 3-c-1 至 3-c-4 之任一者：

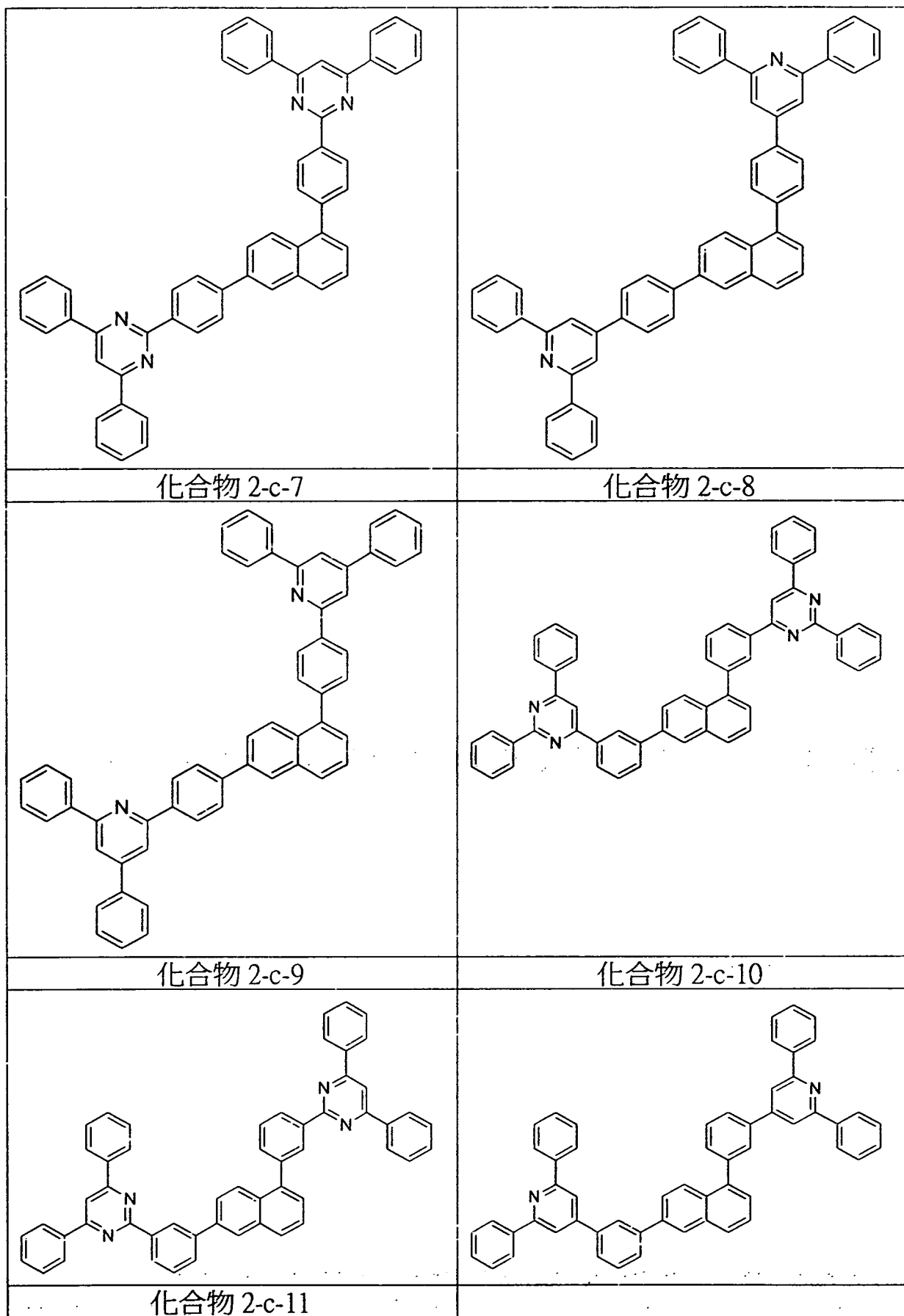


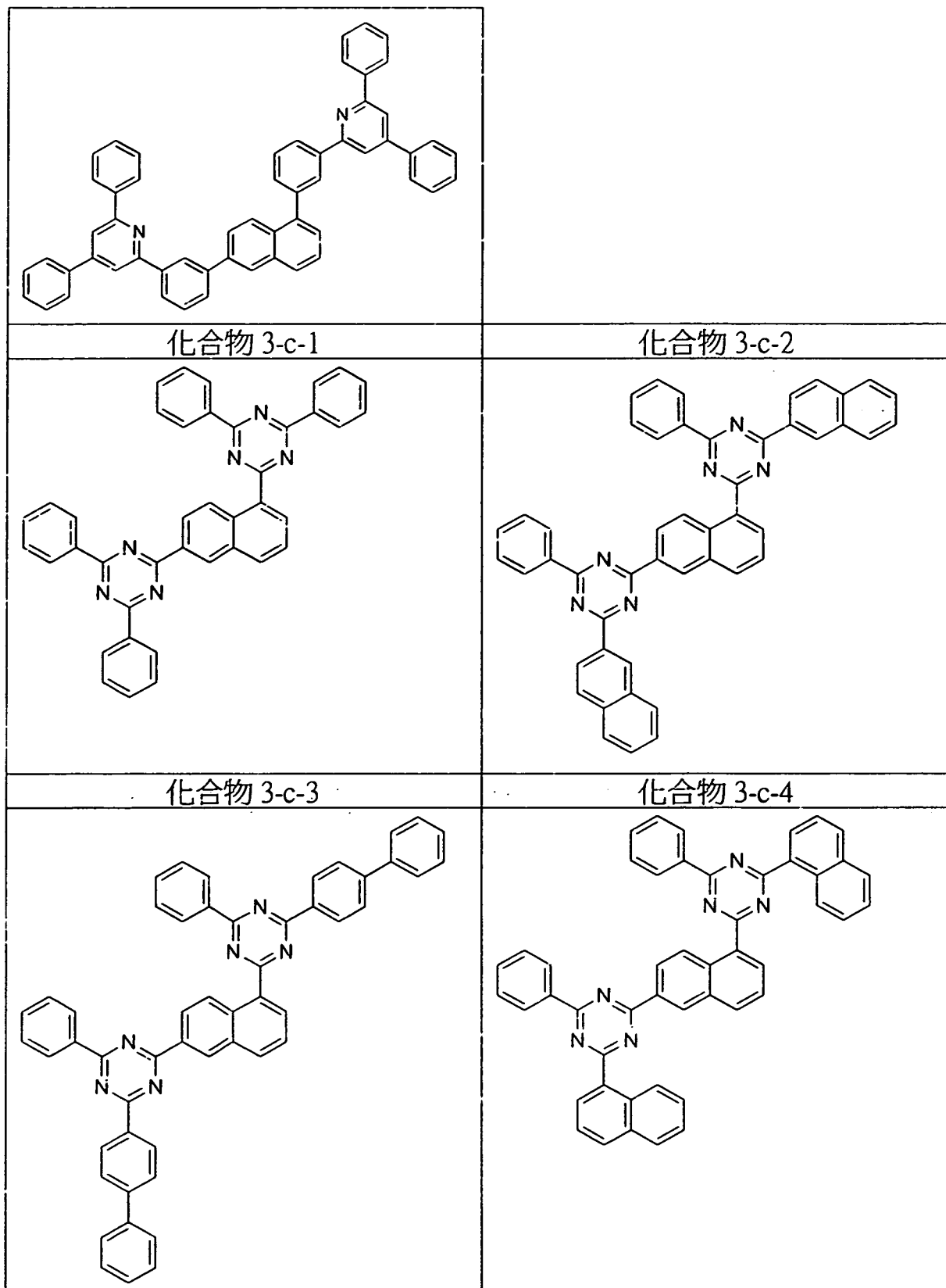






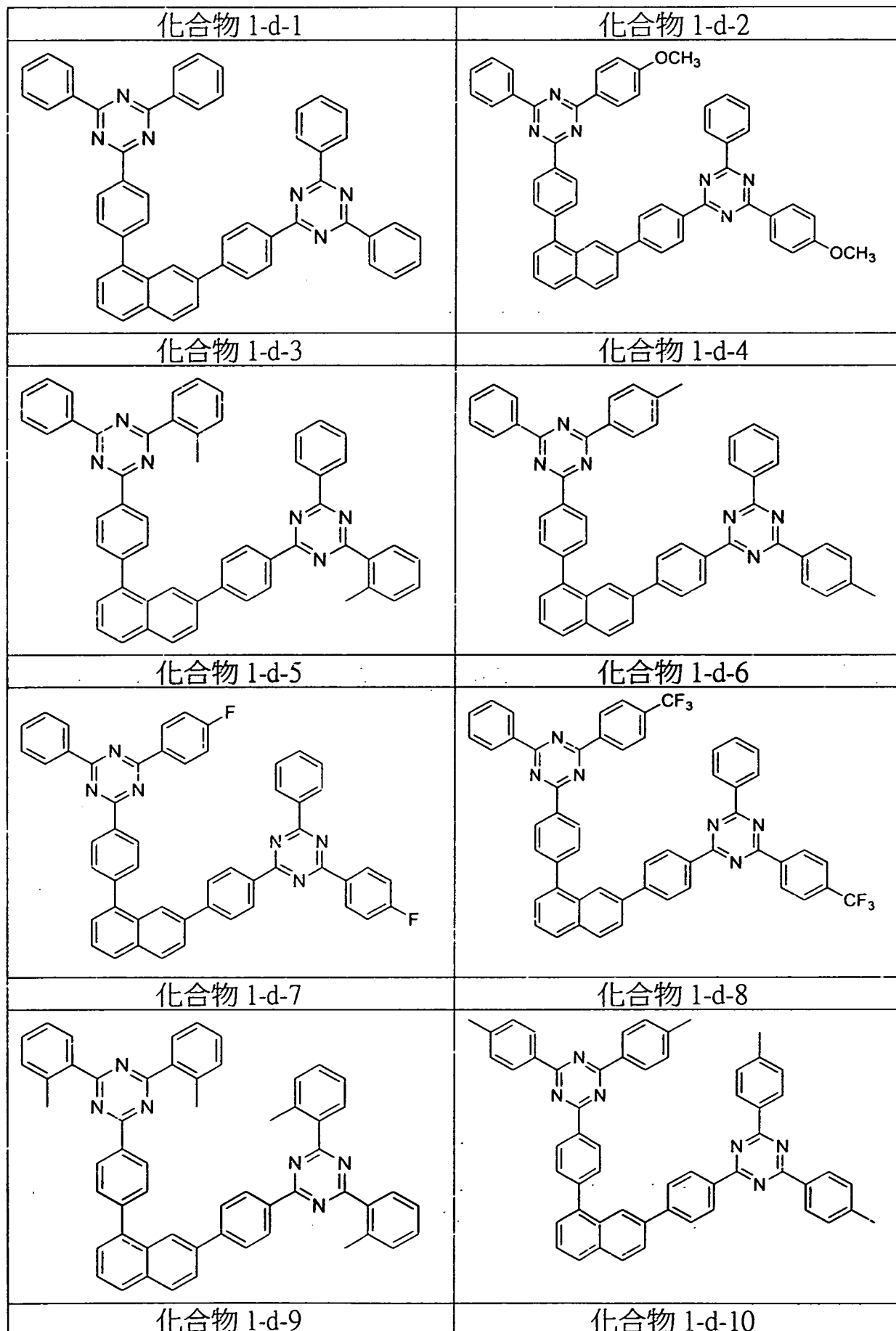


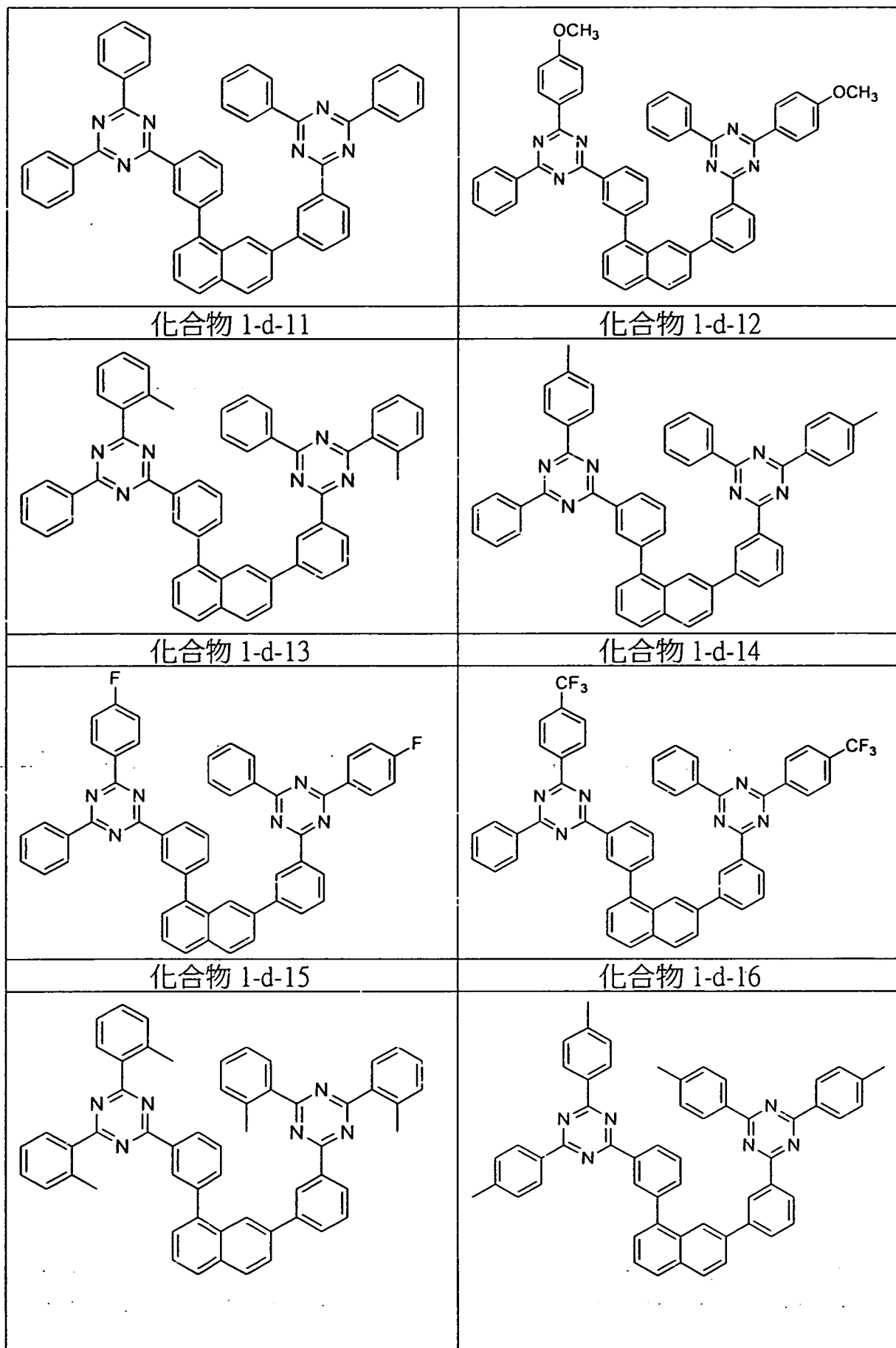


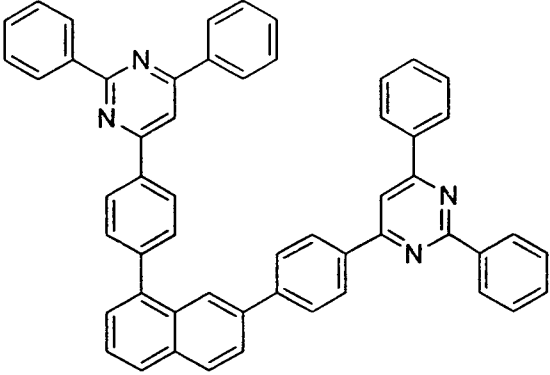
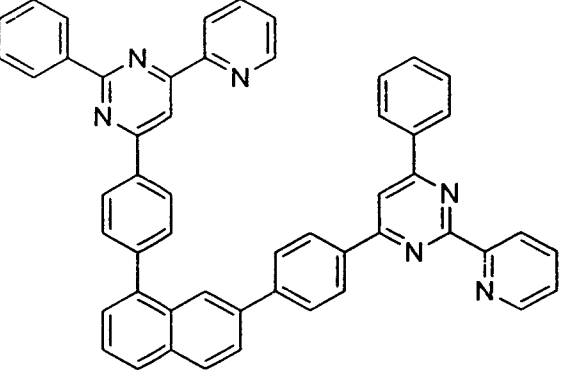
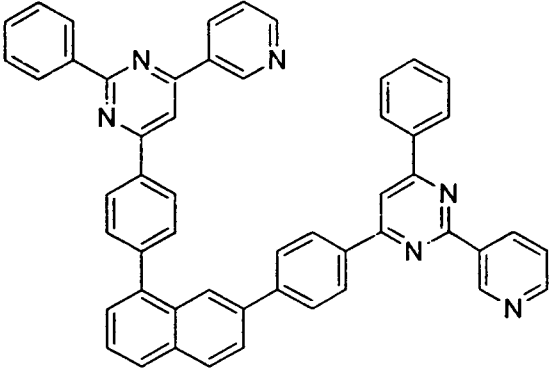
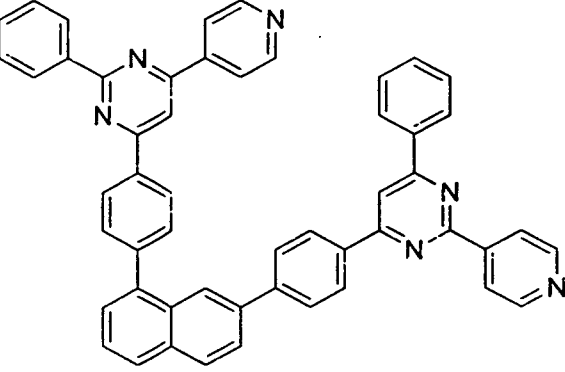
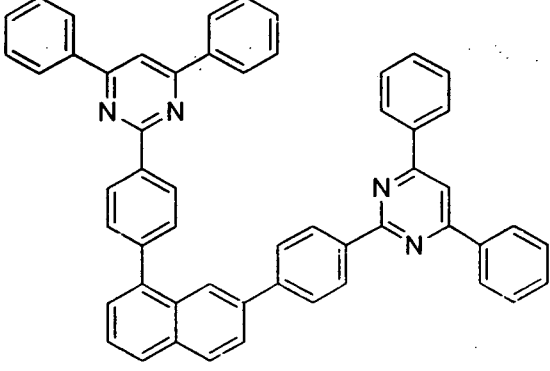
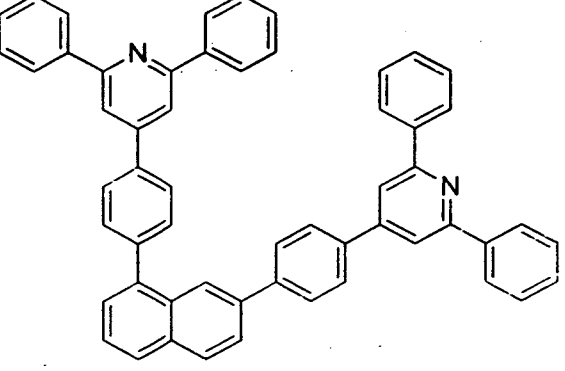
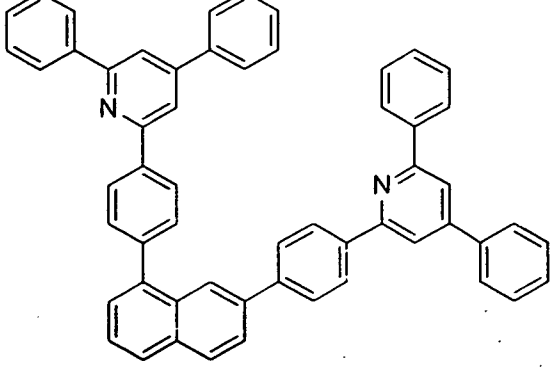
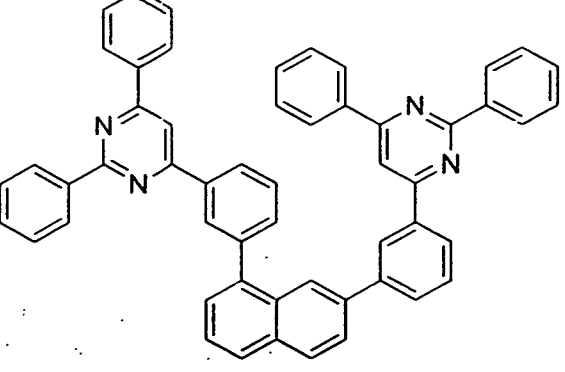


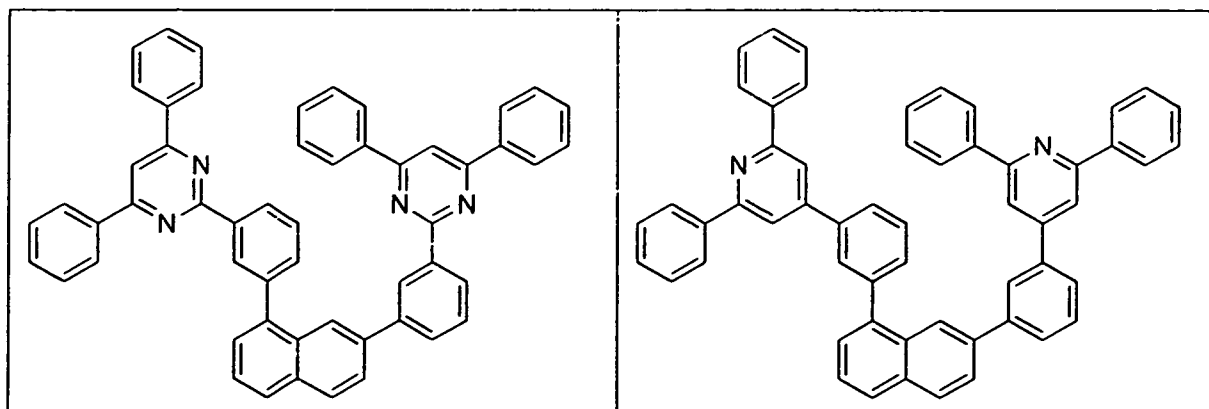
【0115】 於本發明一實施例中，式 1-d 所示化合物為下列化合物 1-d-1 至 1-d-16、2-d-1 至 2-d-11 及 3-d-1 至 3-d-4

之任一者：

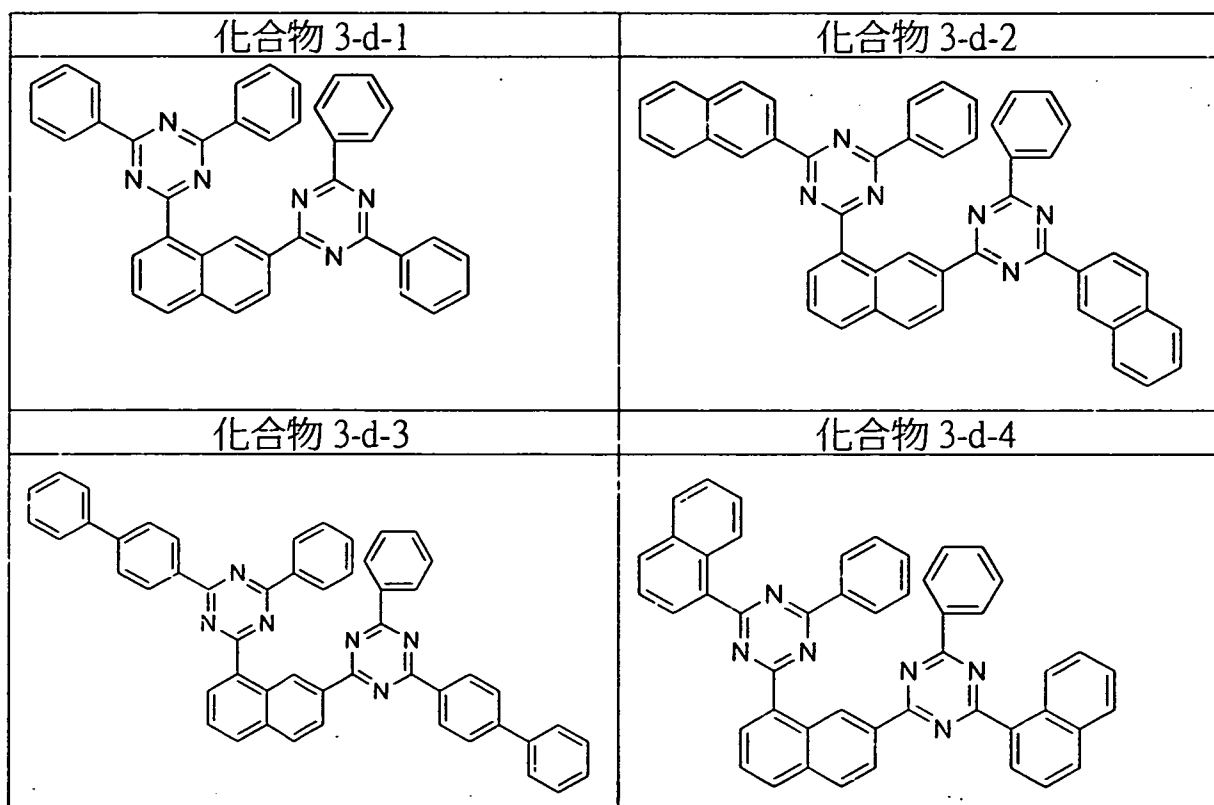
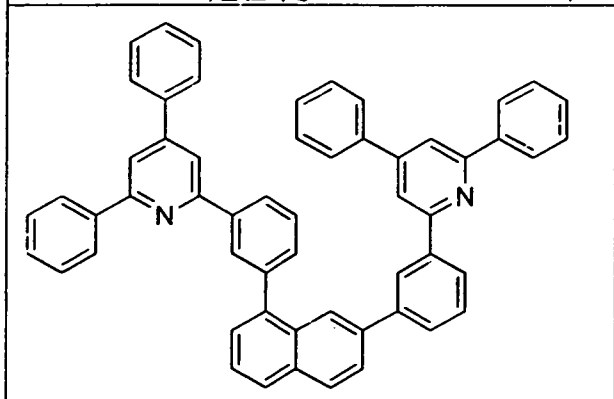




<p>化合物 2-d-1</p> 	<p>化合物 2-d-2</p> 
<p>化合物 2-d-3</p> 	<p>化合物 2-d-4</p> 
<p>化合物 2-d-5</p> 	<p>化合物 2-d-6</p> 
<p>化合物 2-d-7</p> 	<p>化合物 2-d-8</p> 
<p>化合物 2-d-9</p>	<p>化合物 2-d-10</p>

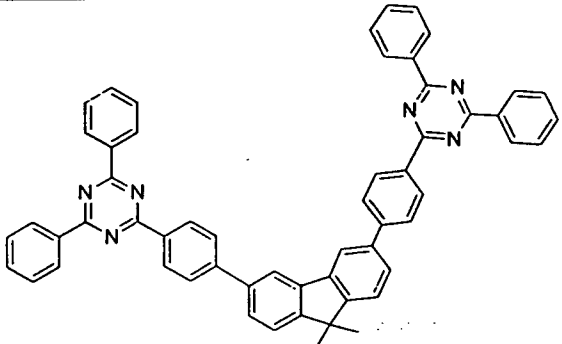
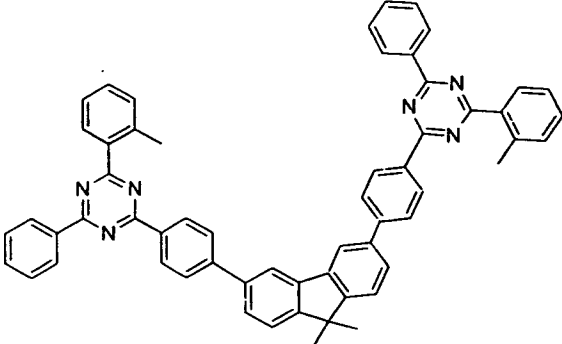
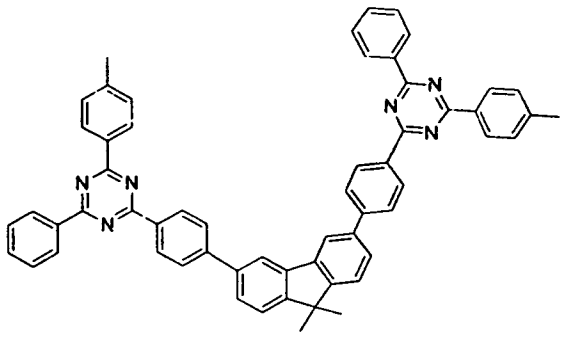
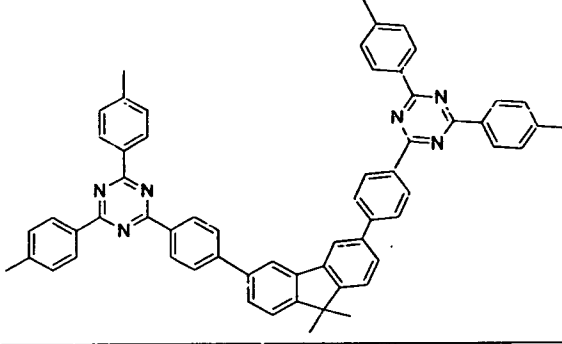
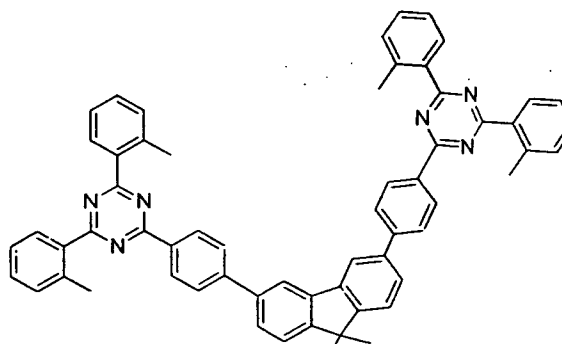
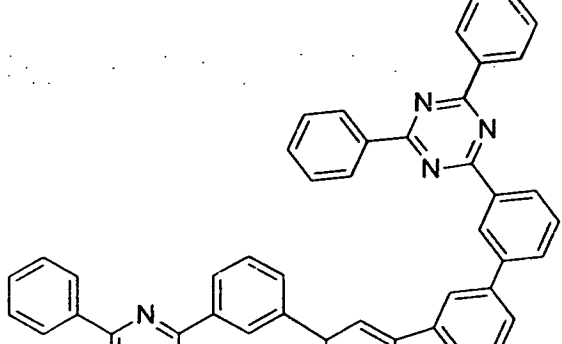
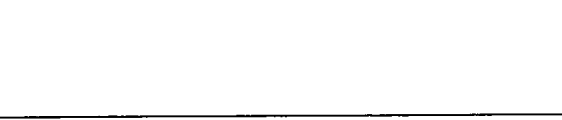
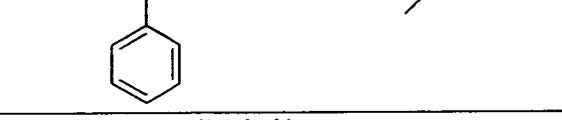


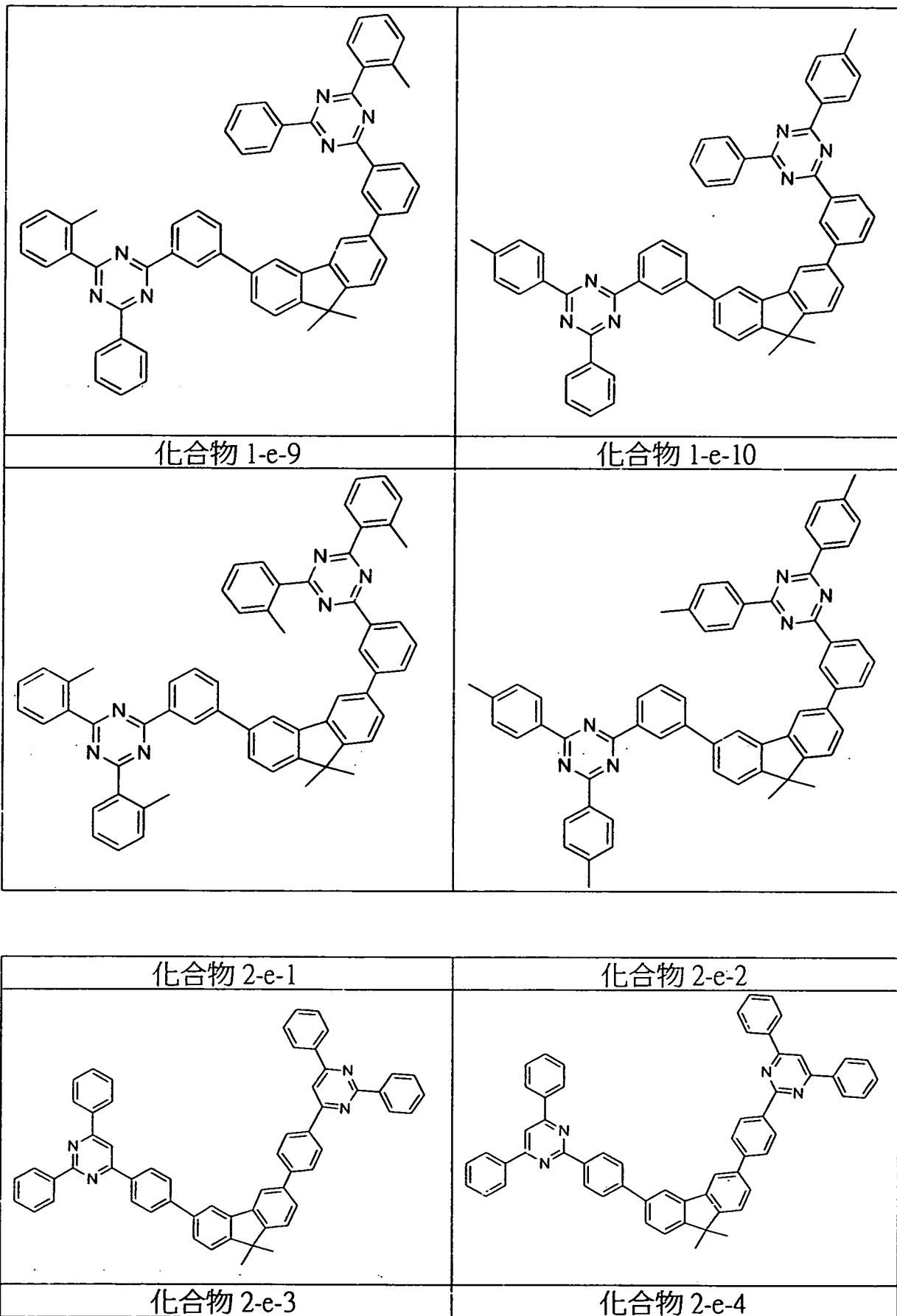
化合物 2-d-11

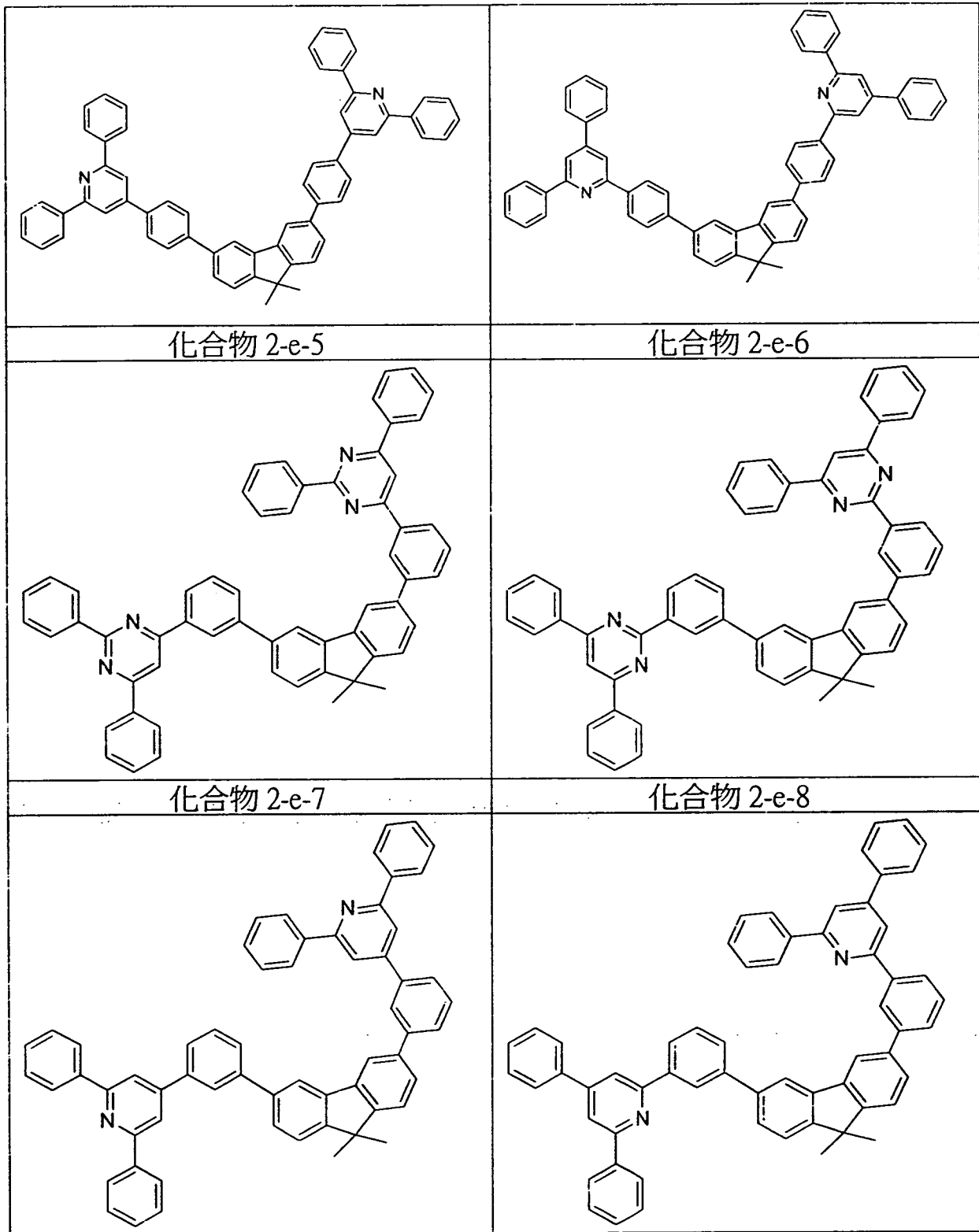


【0116】 於本發明一實施例中，式 1-e 所示化合物為下

列化合物 1-e-1 至 1-e-10 及 2-e-1 至 2-e-8 之任一者：

<p style="text-align: center;">化合物 1-e-1</p> 	<p style="text-align: center;">化合物 1-e-2</p> 
<p style="text-align: center;">化合物 1-e-3</p> 	<p style="text-align: center;">化合物 1-e-4</p> 
<p style="text-align: center;">化合物 1-e-5</p> 	<p style="text-align: center;">化合物 1-e-6</p> 
<p style="text-align: center;">化合物 1-e-7</p> 	<p style="text-align: center;">化合物 1-e-8</p> 





【0117】 由於導入各種取代基至如式 1 所示之核心結構之雜環結構中，式 1 化合物可具有適當的特性以使用作為有機電子裝置中的一有機材料層。

【0118】 化合物之組態長度及能帶間隙彼此具有密切的關係。具體而言，當化合物組態長度增加時，能帶間隙係減少。如上所述，式 1 化合物之核心結構具有一限定的組態長度，從而具有一高的能帶間隙。

【0119】 於本發明中，可透過導入各種取代基於如上所述之具有高能帶間隙之核心結構之 Ar₁ 至 Ar₃ 及 R1 至 R6 之位置以合成具有各種能帶間隙之化合物。一般而言，可輕易地透過於具有高能帶間隙之核心結構導入取代基以控制能帶間隙。然而，當核心結構具有低能帶間隙時，其將難以透過將取代基導入該核心結構以控制能帶間隙而達到一高能階。此外，於本發明中，也可透過導入各種取代基至上述核心結構之 Ar₁ 至 Ar₃ 及 R1 至 R6 之位置以控制該化合物之 HOMO 及 LUMO 能階。

【0120】 再者，當各種取代基被導入上述核心結構，可合成具有被導入之取代基之本質特性之化合物。舉例而言，當主要使用於作為有機電子裝置之電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層之材料之取代基被導入上述核心結構時，可合成滿足作為每一有機材料層所需條件之材料。

【0121】 因為式 1 化合物在該核心結構中包括該雜環結構，其可具有適當的能階以使用於一有機發光裝置中作為一電洞注入材料及/或電洞傳輸材料。於本發明中，當由導

入其中之取代基貢獻而使選自由式 1 之化合物具有適當能階並使用於一有機發光裝置時，該裝置可具有低驅動電壓及高光學效率。

【0122】 此外，當各種取代基，特別是氫或氬，被導入該核心結構中，其能帶間隙可被精確地控制，同時有機電子裝置中的有機材料間的介面之特性可被改善且式 1 化合物可使用於各種應用中。

【0123】 同時，因式 1 化合物具有高玻璃轉移溫度(T_g)而具有優異的熱安定性。熱安定性之提高係為提供一裝置驅動穩定性之重要因子。

【0124】 式 1 化合物可基於下述準備例而製得。

【0125】 式 1 雜環化合物可透過以 Ar_1 、 Ar_2 及 L 取代包括 X_1 至 X_3 之式 1 雜環，接著將兩個經取代包括 X_1 至 X_3 的雜環鍵結至 Ar_3 而準備。

【0126】 除了式 1-a-1 至 1-a-16、2-a-1 至 2-a-11、3-a-1 至 3-a-4、1-b-1 至 1-b-16、2-b-1 至 2-b-11、3-b-1 至 3-b-4、1-c-1 至 1-c-16、2-c-1 至 2-c-11、3-c-1 至 3-c-4、1-d-1 至 1-d-16、2-d-1 至 2-d-11、3-d-1 至 3-d-4、1-e-1 至 1-e-10 及 2-e-1 至 2-e-8 所示化合物，其他式 1 所示化合物可透過改變 X_1 至 X_3 之雜原子數及 Ar_1 至 Ar_3 及 L 之取代基而製備。

【0127】 本發明也提供一包含式 1 化合物之有機電子裝置。

【0128】 於本發明一實施例中，該有機電子裝置可具有包括第一電極、第二電極及插置於該第一電極及該第二電極之間之一或多層有機材料層之結構。

【0129】 該有機電子裝置可選自由有機發光裝置、有機太陽能電池、及有機電晶體所組成之群組。

【0130】 於本發明一實施例中，該有機電子裝置可為有機發光裝置。

【0131】 於本發明一實施例中提供一有機發光裝置，其包括：第一電極；第二電極；以及插置於該第一電極及該第二電極之間之一層或多層有機材料層；其中，該一層或多層有機材料層包括式 1 所示之雜環化合物。

【0132】 依據本發明之有機發光裝置之有機材料層可具有一單層結構或一由兩層以上組成之多層結構。舉例而言，依據本發明之有機發光裝置可具有包括有機材料層之結構，該有機材料層包含電洞注入層、電洞傳輸層、發光層、電子傳輸層及電子注入層。然而，該有機發光裝置之結構並不僅限於此，且可包含一較少數量之有機材料層。

【0133】 因此，於本發明另一實施例中，該有機發光裝置之有機材料層可包括一或多層之電洞注入層、電洞傳輸層及一同時進行電洞注入及電洞傳輸之層，且該一或多層可包括如式 1 所示化合物。

【0134】 具體而言，該有機發光裝置之有機材料層可包

括有如式 1 所示化合物之一電洞注入層。於另一實施例中，該有機發光裝置之有機材料層可包括有如式 1 所示化合物之一電洞傳輸層。於又一實施例中，該有機發光裝置之有機材料層可包括一電洞傳輸層及一電洞注入層，其中，該電洞傳輸層及該電洞注入層可包括如式 1 所示化合物。

【0135】 此外，該有機材料層可包括一發光層，其中，該發光層可包含式 1 所示化合物。於一實施例中，式 1 所示化合物可被包含於該發光層中以作為主發光體。於另一實施例中，包含式 1 所示化合物之有機材料層可包括作為主發光體之式 1 化合物，且可包括其他作為摻雜劑之有機化合物、金屬或金屬化合物。

【0136】 此外，該有機材料層包括一或多層之電子傳輸層、電子注入層或一同時進行電子傳輸及電子注入之層，其中該一或多層可包括式 1 所示化合物。

【0137】 具體而言，該有機發光裝置之有機材料層可包括一電子注入層，其中，該電子注入層可包括式 1 所示化合物。於另一實施例中，該有機發光裝置之有機材料層可包括一電子傳輸層，其中，該電子傳輸層可包括式 1 所示化合物。於又一實施例中，該有機發光裝置之有機材料層可包括一電子傳輸層及一電子注入層，其中，該電子傳輸層及該電子注入層可包括式 1 所示化合物。

【0138】 在此多層有機層結構中，式 1 所示化合物可包

含於該發光層、同時進行電洞注入、電洞傳輸及發光之層、同時進行電洞傳輸及發光之層、或同時進行電子傳輸及發光之層。

【0139】 於另一實施例中，除了包含式 1 所示雜環組成物之外，該有機發光裝置之有機材料層可包括一電洞注入層或電洞傳輸層，且其中該電洞注入層或電洞傳輸層包括一含有芳胺基(arylamino)、咔唑基(carbazole)或苯並咔唑基(benzcarbazole)。

【0140】 於本發明一實施例中，該有機電子裝置可為有機太陽能電池。

【0141】 於本發明一實施例中，提供一有機太陽能電池，其包括：第一電極；第二電極；以及一層或多層有機材料層，其包括插置於該第一電極及該第二電極之間之一光敏層；其中，該一層或多層之有機材料層包括式 1 所示雜環化合物。

【0142】 於本發明一實施例中，該有機太陽能電池可包括一電子傳輸層，其中，該電子傳輸層可包括如式 1 所示化合物。

【0143】 於另一實施例中，該光敏層可包括如式 1 所示化合物。

【0144】 於又一實施例中，該有機太陽能電池可包括一光敏層、一電子施體及一電子受體，其中，該光敏層、該

電子施體及該電子受體可包括如式 1 所示化合物。

【0145】 於本發明一實施例中，當該有機太陽能電池接收一來自外部光源的光子時，於電子施體及電子受體間產生一電子及一電洞。所產生的電洞穿過電子受體層被傳輸至陽極。

【0146】 於本發明一實施例中，該有機太陽能電池可更包括一額外的有機材料層。該有機太陽能電池可包括一具有各種功能之材料以降低其中的有機材料層之數量。

【0147】 於本發明一實施例中，該有機電子裝置可為一有機電晶體。

【0148】 於本發明一實施例中，提供一有機電晶體，其包括：一源極；一汲極；一閘極；以及一層或多層有機材料層。

【0149】 於本發明一實施例中，該有機電晶體可包括一電荷產生層，其中，該電荷產生層可包括式 1 所示化合物。

【0150】 於本發明另一實施例中，該有機電晶體可包括一絕緣層，其中，該絕緣層可設置於一基材及閘極上。

【0151】 當有機電子裝置包括有多層有機材料層時，該些有機材料層可利用相同或是不同的材料形成。

【0152】 於本發明一實施例中，該有機電子裝置可具有如圖 1 及圖 2 所示之結構，但不以此為限。

【0153】 圖 1 係具有一基材 1、一陽極 2、一發光層 3

及一陰極 4 依序設置之結構之有機電子裝置示意圖。在此結構中，式 1 化合物可包含於該發光層 3 中。

【0154】 圖 2 係具有一基材 1、一陽極 2、一電洞注入層 5、一電洞傳輸層 6、一發光層 7、一電子傳輸層 8 及一陰極 4 係依序設置之結構之有機電子裝置示意圖。在此結構中，式 1 所示化合物可包含於電洞注入層 5、電洞傳輸層 6、發光層 7、及電子傳輸層 8 之一或多層中。

【0155】 依據本發明之有機電子裝置，除了其中之有機材料層之一層或多層可包括本發明之化合物(即，式 1 化合物)外，可使用本領域習知的材料及方法製造。

【0156】 舉例而言，依據本發明之有機電子裝置可透過依序設置第一電極、一或多層有機材料層及第二電極於一基材上而製得。具體而言，該有機電子裝置可透過：使用物理氣相沉積法(如濺鍍或電子束蒸鍍)沉積一金屬、一導電金屬氧化物或其合金於一基材上以形成一陽極；形成有機材料層於該陽極上，該發光層包括電洞注入層、電洞傳輸層、發光層及電子傳輸層；接著，於其上沉積可用以形成一陰極之材料。此外，該有機電子裝置也可透過依序設置一陰極材料、一或多層有機材料層及一陽極材料於該基材上而製造。

【0157】 此外，於該有機電子裝置之製造過程中，除了物理氣相沉積法之外，式 1 化合物可透過溶液塗佈法形成

於一有機材料層中。在此術語「溶液塗佈法」意指旋塗、浸塗、刮刀塗佈、噴墨印刷、網版印刷、噴灑、輥塗佈或其類似方式，但並不以此為限。

【0158】 此外，該有機電子裝置也可透過於一基材上依序沉積一陰極材料、有機材料層及陽極材料而製得(國際專利案公開號 WO2003/012890)。然而，該製造方法並不限於上述方法。

【0159】 該陽極材料較佳為一具有高功函數之材料，從而電洞可輕易地注入該有機材料層。可使用於本發明之陽極材料之具體例子包括，但不限於：金屬，如釩(vanadium)、鉻(chromium)、銅(copper)、鋅(zinc)或金(gold)或其合金；金屬氧化物，如氧化鋅(zinc oxide)、氧化銦(indium oxide)、氧化銦錫(indium tin oxide, ITO)或氧化銦鋅(indium zinc oxide, IZO)；金屬/氧化物組合物(metal/oxide combinations)，如 ZnO:Al 或 $\text{SnO}_2:\text{Sb}$ ；及導電高分子，如聚(3-甲基噻吩)(poly(3-methylthiophene))、聚[3,4-(亞乙基-1,2-二氧基)噻吩](poly[3,4-(ethylene-1,2-dioxy)thiophene]，PEDOT)、聚吡咯(polypyrrole)和聚苯胺(polyaniline)。

【0160】 該陰極材料較佳可為一具有低功函數之材料，從而電子可輕易注入該有機材料層。陰極材料之具體例子包括，但不限於：金屬，如鎂(magnesium)、鈣(calcium)、鈉(sodium)、鉀(potassium)、鈦(titanium)、銦(indium)、鉕(yttrium)、

鋰(lithium)、釷(gadolinium)、鋁(aluminum)、銀(silver)、錫(tin)和鉛(lead)，或其合金；及多層材料，如 LiF/Al 或 LiO₂/Al。

【0161】 該電洞注入材料可為一可在一低電壓下輕易接收從來自陽極之電洞，並且該電洞注入材料之 HOMO(最高佔據分子軌域)較佳界於該陽極材料之功函數及周圍有機材料層之 HOMO 間。該電洞注入材料之具體例子包括，但不限於：金屬卟啉(metal porphyrin)、低聚噻吩(oligothiophene)、基於芳基胺的有機材料、六腈六氮雜苯並菲(hexanitride hexaazatriphenylene)、和喹吖啶酮(quinacridone)系有機材料，二萘嵌苯(perylene)系有機材料，蒽醌(anthraquinone)，基於聚苯胺(polyaniline)系或聚噻吩(polythiophene)導電高分子及其類似物。

【0162】 該電洞傳輸材料較佳為一具有高電洞遷移性之材料，其係能夠將電洞從該陽極或該電洞注入層轉移至該發光層。該電洞傳輸材料之具體例子包括，但不限於：基於芳基胺的有機材料、導電高分子、及具有共軛部分及非共軛部分之嵌段共聚物。

【0163】 該發光材料為一能夠輕易接收來自電洞傳輸層及來自電子傳輸層之電子及電洞並結合所接收的電洞及電子而能夠發射可見光之材料，且較佳為一具有對於螢光及磷光之高量子效率之材料。該發光材料之具體例子包括，

但不限於：8-羥基喹啉鋁複合物 (8-hydroxyquinoline aluminum complex, Alq₃)；咔唑(carbazole)系化合物；二聚化(dimerized)的苯乙烯基(styryl)化合物；BAIq；10-羥基苯並喹啉(10-hydroxybenzoquinoline)金屬化合物；苯並噁唑(benzoxazole)系、苯並噻唑(benzthiazole)系和苯並咪唑(benzimidazole)系化合物；聚(對亞苯基亞乙烯基)(poly(p-phenylenevinylene), PPV)系高分子；螺環化合物(spiro compounds)，如聚芴(polyfluorene)和紅熒烯(rubrene)的化合物。

【0164】 電子傳輸材料為一能夠輕易接收來自陰極的電子並傳輸所接收的墊子至該發光層之材料。其較佳為一具有高電子遷移性之材料。電子傳輸材料的具體例子包括，但不限於：8-羥基喹啉鋁複合物 (8-hydroxyquinoline aluminum complex, Alq₃)；含有 Alq₃ 之複合物；有機自由基化合物；及羥基黃酮金屬複合物 (hydroxyflavone-metal complexes)。

【0165】 根據所使用的材料，依據本發明之有機電子裝置可為一前側發光型、一後側發光型或一兩側發光型。

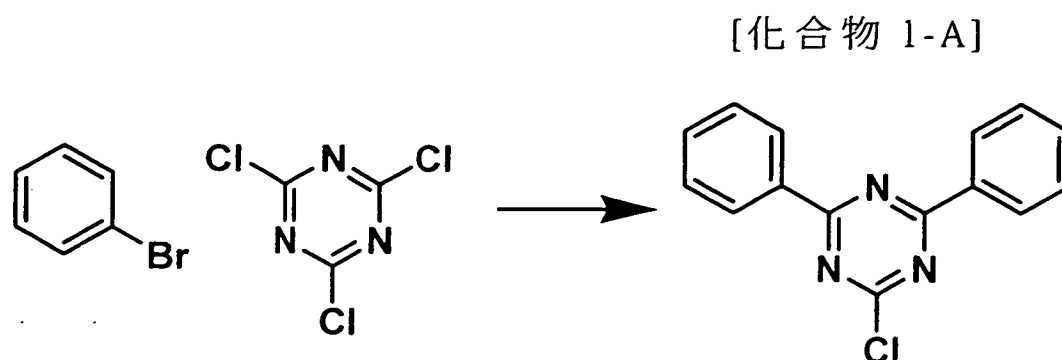
【0166】 實施例

【0167】 以下，將參照準備例及實驗例更詳細描述本發明，但本發明之範疇並不限於該準備例及該實驗例。

【0168】 準備例

【0169】 準備例 1：化合物 1-a-1 之製備

【0170】 1) 化合物 1-A 之合成



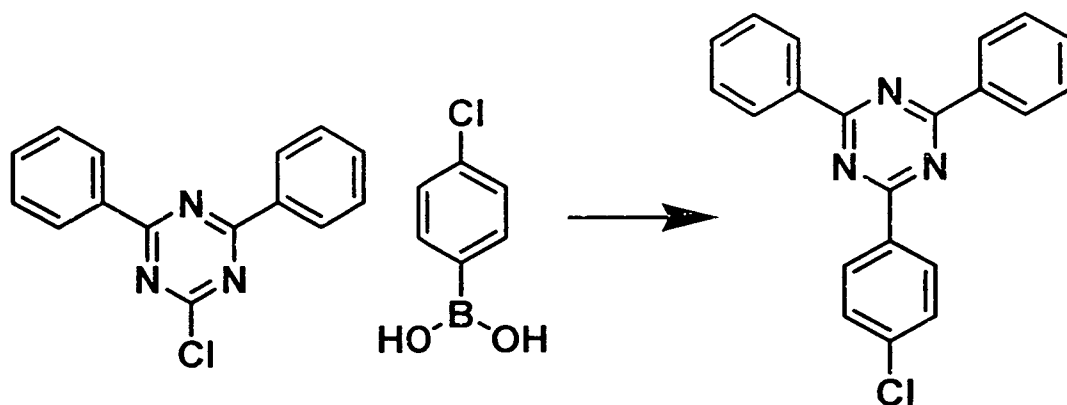
【0171】 在氮氣氣氛下，懸浮鎂(9.7 g, 0.40 mol)及碘(1.02 g, 8 mmol)於 80ml 之無水四氫呋喃溶劑中以準備一懸浮液，並將於 150ml 無水四氫呋喃溶劑之溴苯(bromobenzene, 62.8 g, 0.4 mol)溶液緩慢地滴入至該懸浮液 1 小時以上。加熱迴流該混合物 3 小時。冷卻該混合物至室溫，接著在迴流下攪拌該混合物並緩慢滴入一於 150ml 無水四氫呋喃溶劑之 1,3,5-三氯三嗪(1,3,5-trichlorotriazine, 27.6 g, 0.15 mol)溶液至該混合物約 5 小時。於該反應完成後，透過在減壓下蒸餾以移除反應溶液中的有機溶劑，並且從乙醇中再結晶該殘餘物，從而獲得化合物 1-A(39 g, 產率：73.5%)。

【0172】 MS[M+H]⁺ = 268

【0173】 2) 化合物 1-B 之合成

[化合物 1-A]

[化合物 1-B]



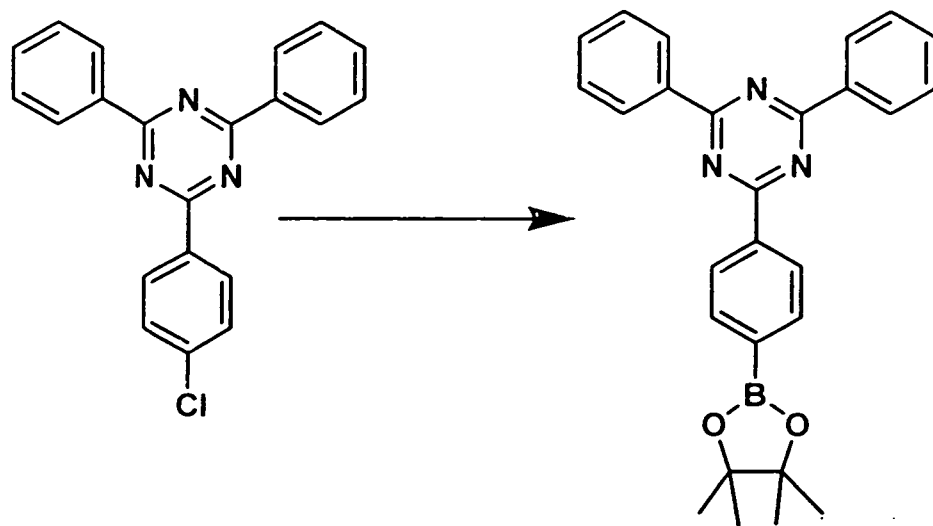
【0174】 在氮氣氣氛下，化合物 1-A(37.1 g, 0.14 mol) 及 4-氯苯基硼酸(4-chlorophenylboronic acid, 23.8 g, 0.15 mol) 完全地溶解於 150ml 四氫呋喃中，接著將 80ml 之 2M 碳酸鉀水溶液加入其中並且加入四(三苯基磷)鈀(tetrakis-(triphenylphosphine)palladium, 3.2 g, 2.7 mmol)。然後，加熱攪拌該混合物 5 小時。降低該混合物溫度至室溫，並移除水相層。以無水硫酸鎂乾燥並減壓濃縮該殘餘物，並且使用四氫呋喃：己烷 = 1：6，透過管柱層析法純化以獲得化合物 1-B(34 g, 產率：72%)。

【0175】 MS[M+H]⁺ = 344

【0176】 3) 化合物 1-C 之合成

[化合物 1-B]

[化合物 1-C]



【0177】 在氮氣氣氛下，化合物 1-B(34 g, 98.9 mmol)、雙(頻哪醇)二硼(bis(pinacolate)diboron, 27.6 g, 108 mmol)及醋酸鉀(29.1 g, 296 mmol)彼此混合，並且將該混合物加入 100ml 之二惡烷中，加熱攪拌。雙(二亞苄基丙酮)鈀(Bis(dibenzylideneacetone)palladium, 1.7 g, 2.94 mmol)和三環己基膦(tricyclohexylphosphine, 1.6 g, 5.9 mmol)係在迴流及加熱攪拌下加入至該混合物 10 小時。於該反應完成後，冷卻該反應溶液至室溫並過濾。濾液係加至水中並以氯仿萃取，該有機層係以無水硫酸鎂乾燥。將上述製得的材料於減壓下蒸餾並於乙醇中再結晶，從而獲得化合物 1-C(35 g, 產率：81%)。

【0178】 MS[M+H]⁺ = 436

【0179】 4) 化合物 1-a-1 之合成

[化合物 1-C]

[化合物 1-a-1]

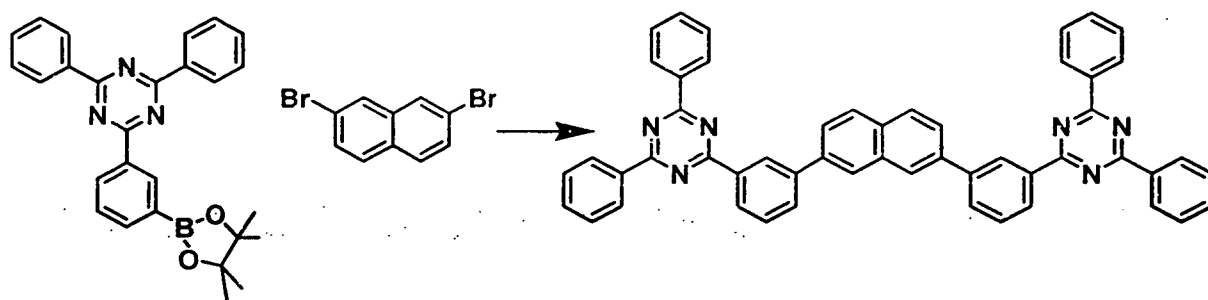
mmol)和三環己基磷(tricyclohexylphosphine, 709 mg, 2.52 mmol)於迴流及加熱攪拌下加入至該混合物中持續 10 小時。於該反應完成後，使該反應溶液冷卻至室溫並過濾。濾液係加至水中並以氯仿萃取，該有機層係以無水硫酸鎂乾燥。將上述製得的材料於減壓下蒸餾，並接著於乙醇中再結晶，從而獲得化合物 2-B(17 g, 產率：94%)。

【0188】 MS[M+H]⁺ = 436

【0189】 3) 化合物 1-a-7 之合成

[化合物 2-B]

[化合物 1-a-7]

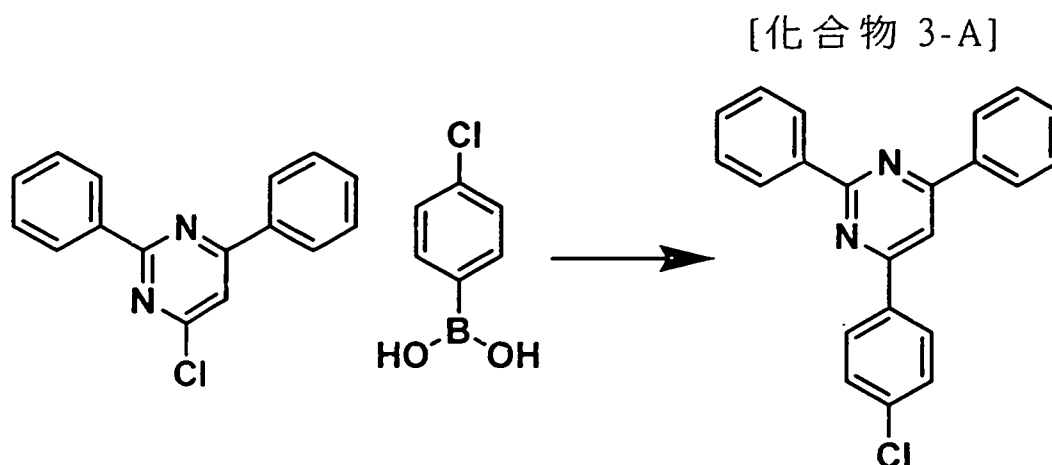


【0190】 將化合物 2-B(17.3 g, 39.7 mmol)及 2,7-二溴萘(2,7-dibromonaphthalene, 5.4 g, 18.9 mmol)完全溶解於 50 ml 四氫呋喃中，然後將 2M 碳酸鉀水溶液(30 ml)及四(三苯基磷)鈀(tetrakis(triphenyl-phosphine) palladium, 436mg, 0.37 mmol)加入其中。加熱攪拌該混合物 2 小時。接著將該混合物冷卻至室溫以完成該反應，然後移除碳酸鉀溶液並濾出白色固體。利用四氫呋喃及乙醇將該白色固體各清洗一次，從而獲得化合物 1-a-7(12.2 g, 產率：87%)。

【0191】 MS[M+H]⁺ = 743

【0192】 準備例 3：化合物 2-a-1 之製備

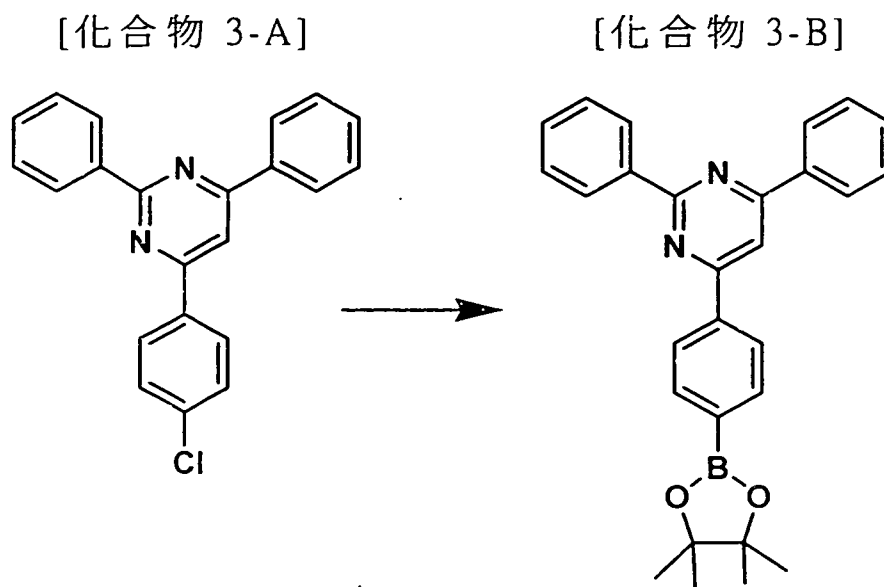
【0193】 1) 化合物 3-A 之合成



【0194】 除了以 4-氯-2,6-二苯基嘓啶 (4-chloro-2,6-diphenylpyrimidine) 取代化合物 1-A 之外，化合物 3-A 係以如化合物 1-B 之相同方式準備。

【0195】 MS[M+H]⁺ = 343

【0196】 2) 化合物 3-B 之合成



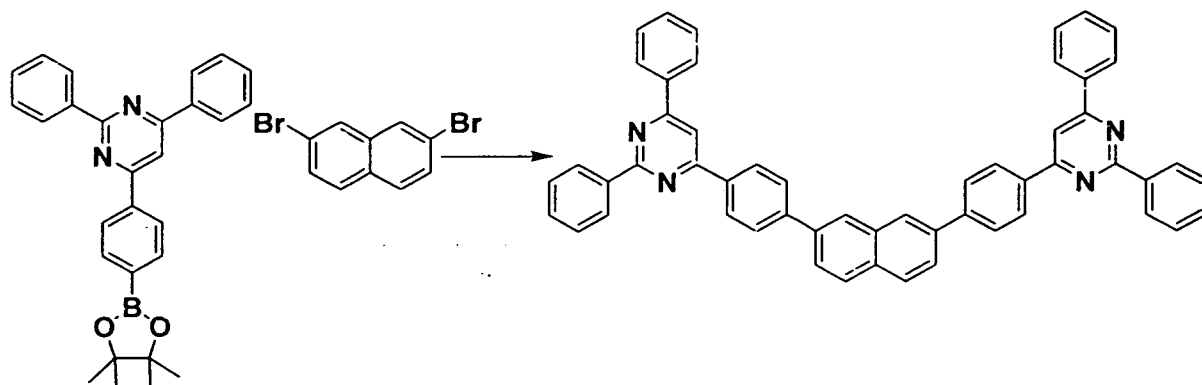
【0197】 除了以化合物 3-A 取代化合物 1-A 之外，化合物 3-B 係以如化合物 1-C 之相同方式準備。

【0198】 MS[M+H]⁺= 435

【0199】 3) 化合物 2-a-1 之合成

[化合物 3-B]

[化合物 2-a-1]



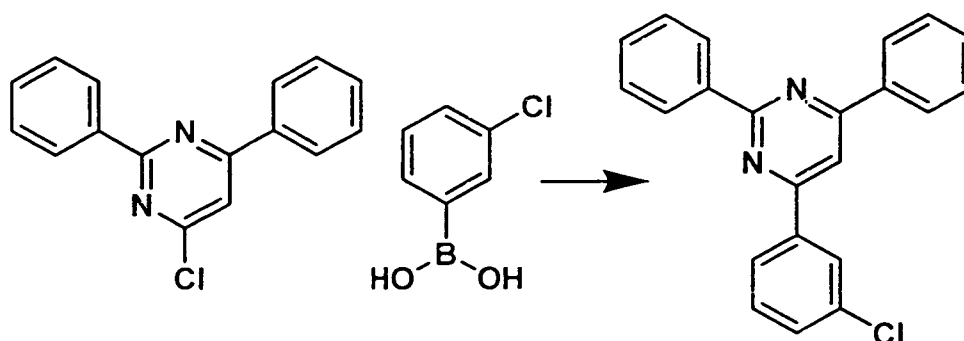
【0200】 除了以化合物 3-B 取代化合物 1-C 之外，化合物 2-a-1 係以如化合物 1-a-1 之相同方式準備。

【0201】 MS[M+H]⁺= 741

【0202】 準備例 4：化合物 2-a-8 之製備

【0203】 1) 化合物 4-A 之合成

[化合物 4-A]



【0204】 除了以 3-氯-2,6-二苯基嘧啶 (3-chloro-2,6-diphenylpyrimidine) 取代化合物 1-A 之外，化合物 4-A 係以如化合物 1-B 之相同方式準備。

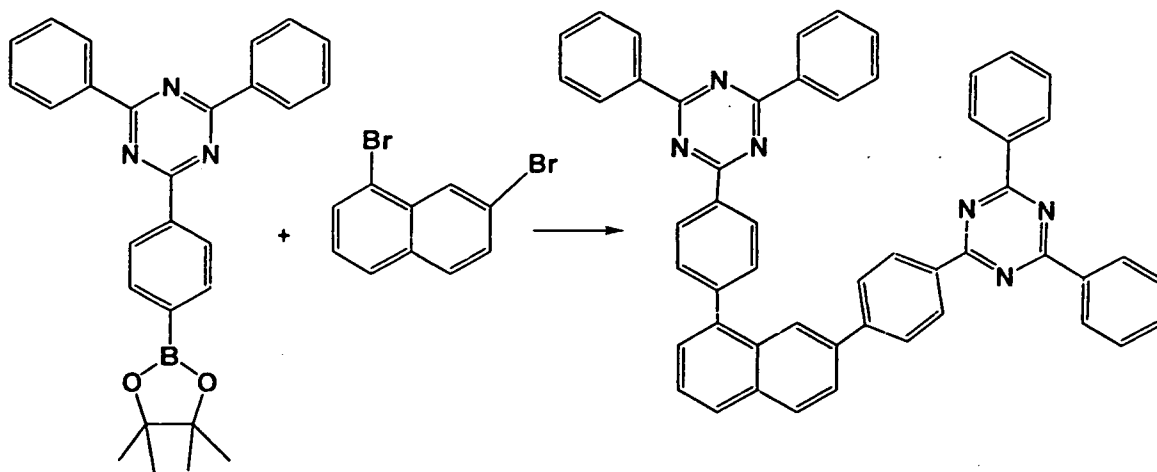
【0205】 MS[M+H]⁺= 341

同方式準備。

【0219】 MS[M+H]⁺= 743

【0220】 準備例 7：化合物 1-d-1 之製備

【0221】 1) 化合物 1-d-1 之合成



【0222】 除了以 1,7-二溴萘 (1,7-dibromonaphthalene) 取代 2,7-二溴萘之外，化合物 1-d-1 係以如化合物 1-a-1 之相同方式準備。

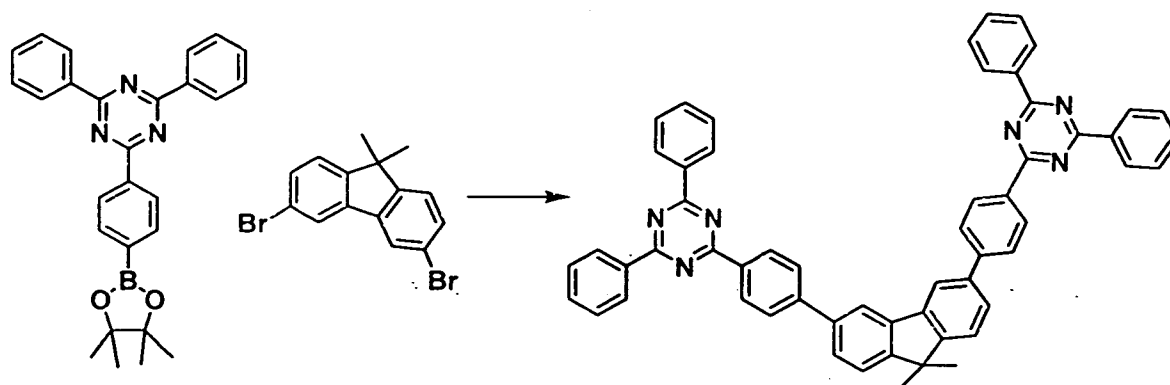
【0223】 MS[M+H]⁺= 743

【0224】 準備例 8：化合物 1-e-1 之製備

【0225】 1) 化合物 1-e-1 之合成

[化合物 1-C]

[化合物 1-e-1]



【0226】 除了以 3,6-二溴-9,9-二甲基-9H-芴

(3,6-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)取代 2,7-二溴萘之外，化合物 1-e-1 係以如化合物 1-a-1 之相同方式準備。

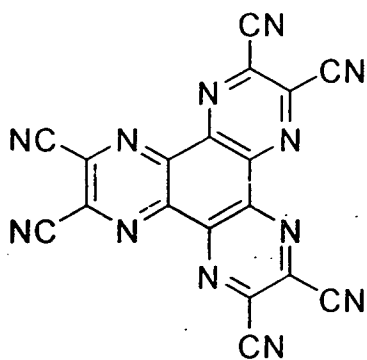
【0227】 MS[M+H]⁺ = 809

【0228】 實驗例 1

【0229】 將一塗佈有 1000 Å 厚度之氧化銦錫(ITO, indium tin oxide)之玻璃置於含有洗滌劑之二次水中並以超音波清洗。於此，洗滌劑係為 Fisher 公司所製造之產品，且該二次水係經一過濾器(Millipore 公司)過濾兩次。於持續清洗該 ITO 30 分鐘後，再於二次水中以超音波清洗 10 分鐘並重覆此步驟兩次。於二次水清洗完成後，以一溶劑(如異丙醇、丙酮、甲醇或其類似物)超音波清洗該基材並接著乾燥之，之後將其送入一電漿清洗器。接著，該基材係以氧氣電漿清洗 5 分鐘，然後輸送至一真空蒸鍍機。

【0230】 如上述所製造之透明 ITO 電極上，具有如下式之六氮雜苯並菲(hexaazatriphenylene, HAT)係透過熱蒸鍍沉積法沉積 500 Å 之厚度以形成一電洞注入層。

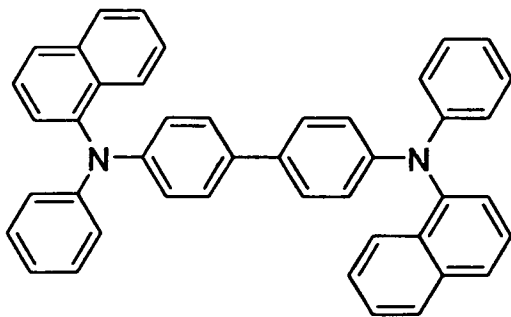
【0231】 [HAT]



【0232】 於該電洞注入層上，作為一電洞傳輸材料且具

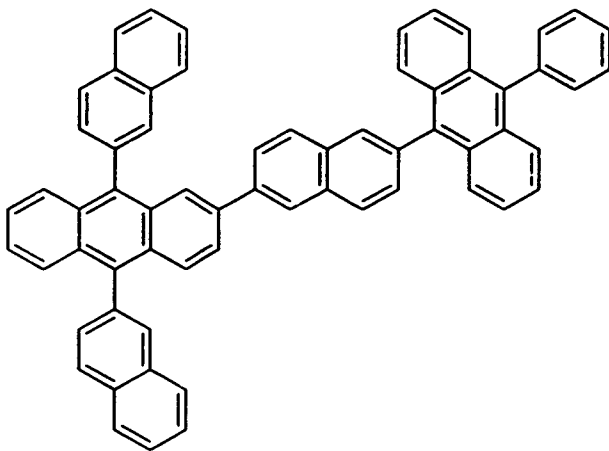
有下式之 4-4'- 雙 [N-(1-萘基)-N-苯基氨基] 聯苯 (4-4'-bis[N-(1-naphthyl)-N-phenylamino]biphenyl)，係利用真空沉積 400 Å 之厚度已形成一電洞傳輸層。

【0233】 [NPB]

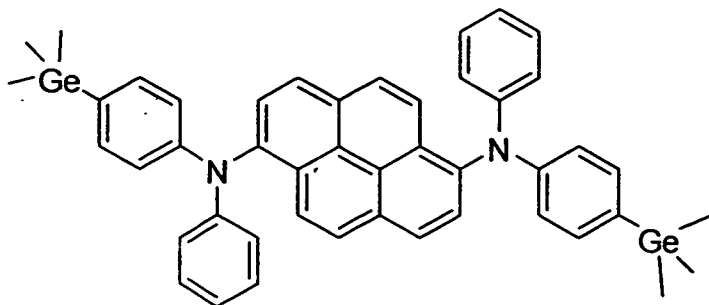


【0234】 於該電洞傳輸層上，將具有下式之 BH 及 BD 之 25 : 1(w/w)混合物真空沉積 300 Å 之厚度以形成一發光層。

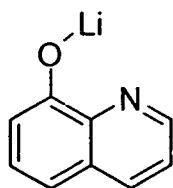
【0235】 [BH]



【0236】 [BD]



【0237】 [LiQ]



【0238】 於該發光層上，如上所示準備例 1 準備之化合物 1-a-1 及喹啉鋰(lithium quinolate, LiQ)之 1:1(w/w)混合物係利用真空沉積 300 Å 之厚度以形成一電子注入及電子傳輸層。於該電子注入及電子傳輸層上，氟化鋰(lithium fluoride, LiF)及鋁係依序分別沉積 12 Å 及 2,000 Å 之厚度以形成一陰極。

【0239】 於上述有機發光裝置之製造過程中，有機材料之沉積速率係保持在 0.4-0.7 Å/sec，用於陰極之氟化鋰及鋁的沉積速率係分別保持在 0.3 Å/sec 及 2 Å/sec，且於沉積過程之真空強度係保持在 2×10^{-7} 至 5×10^{-6} torr。

【0240】 實驗例 2

【0241】 除了以化合物 1-a-7 取代化合物 1-a-1 之外，係以如實驗例 1 所述相同方法製造一有機發光裝置。

【0242】 實驗例 3

【0243】 除了以化合物 2-a-1 取代化合物 1-a-1 之外，係以如實驗例 1 所述相同方法製造一有機發光裝置。

【0244】 實驗例 4

【0245】 除了以化合物 2-a-8 取代化合物 1-a-1 之外，係

以如實驗例 1 所述相同方法製造一有機發光裝置。

【0246】 實驗例 5

【0247】 除了以化合物 1-b-1 取代化合物 1-a-1 之外，係以如實驗例 1 所述相同方法製造一有機發光裝置。

【0248】 實驗例 6

【0249】 除了以化合物 1-c-1 取代化合物 1-a-1 之外，係以如實驗例 1 所述相同方法製造一有機發光裝置。

【0250】 實驗例 7

【0251】 除了以化合物 1-d-1 取代化合物 1-a-1 之外，係以如實驗例 1 所述相同方法製造一有機發光裝置。

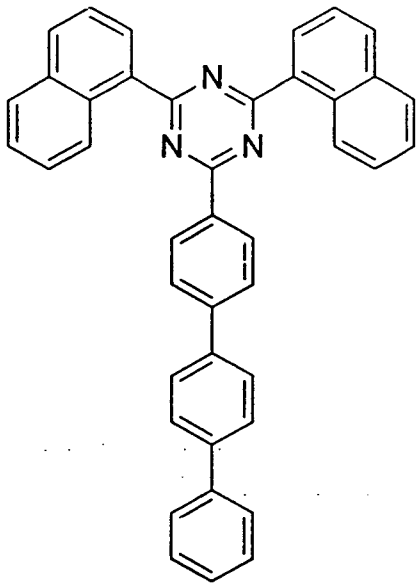
【0252】 實驗例 8

【0253】 除了以化合物 1-e-1 取代化合物 1-a-1 之外，係以如實驗例 1 所述相同方法製造一有機發光裝置。

【0254】 比較例 1

【0255】 除了以下式化合物 ET1 取代化合物 1-a-1 之外，係以如實驗例 1 所述相同方法製造一有機發光裝置。

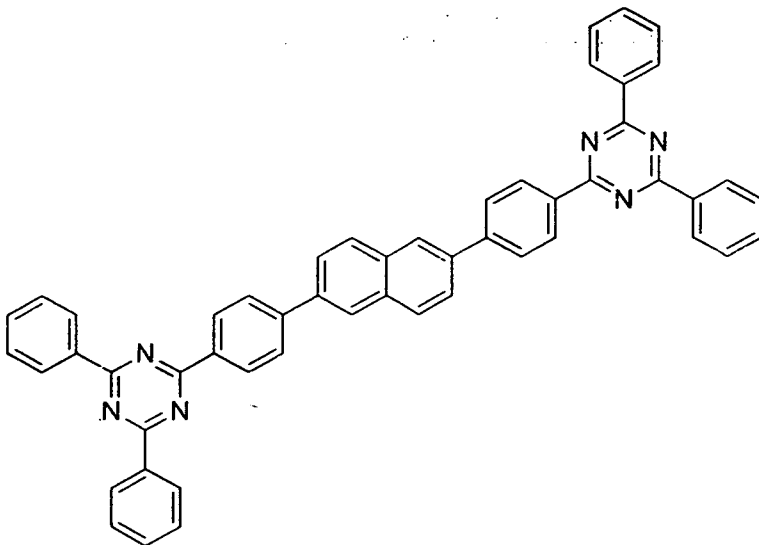
【0256】 [ET1]



【0257】 比較例 2

【0258】 除了以下式化合物 ET2 取代化合物 1-a-1 之外，
係以如實驗例 1 所述相同方法製造一有機發光裝置。

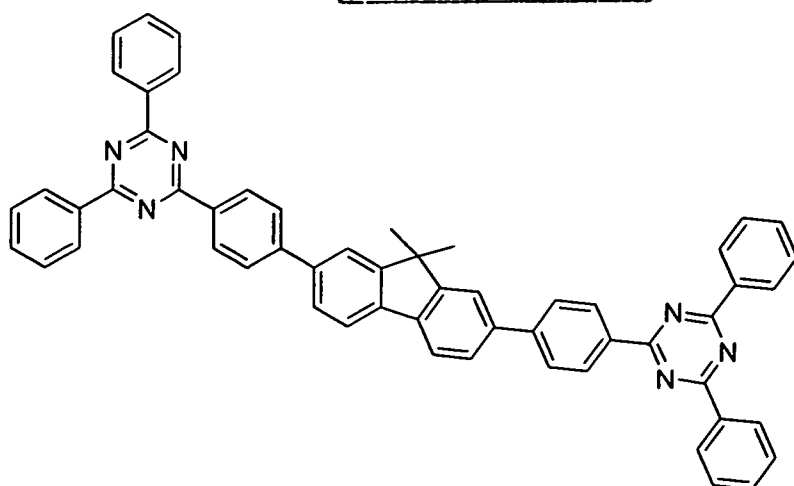
【0259】 [ET2]



【0260】 比較例 3

【0261】 除了以下式化合物 ET3 取代化合物 1-a-1 之外，
係以如實驗例 1 所述相同方法製造一有機發光裝置。

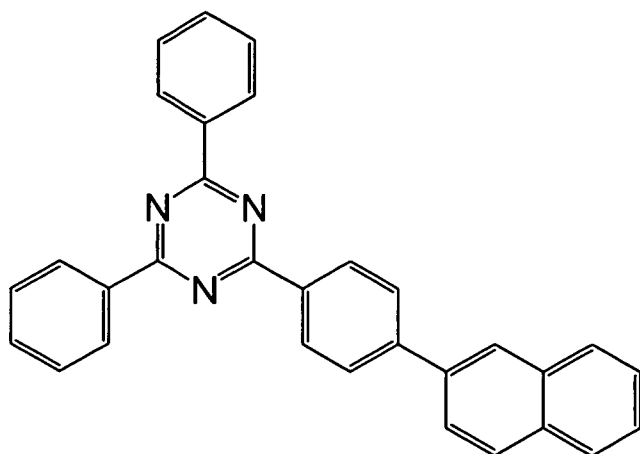
【0262】 [ET3]



【0263】 比較例 4

【0264】 除了以下式化合物 ET4 取代化合物 1-a-1 之外，係以如實驗例 1 所述相同方法製造一有機發光裝置。

【0265】 [ET4]



【0266】 當將電流施加於實驗例 1 至 8 及比較例 1 至 4 中所製造之有機發裝置時，係獲得如下表 1 所示之結果。

【0267】 表 1

	化合物	電壓 (V@10mA/cm ²)	效率 (cd/A@10mA/cm ²)	彩色座標 (x, y)
實驗例 1	化合物 1-a-1	3.98	4.23	(0.138, 0.127)
實驗例 2	化合物 1-a-7	3.75	5.15	(0.139, 0.122)

實驗例 3	化合物 2-a-1	3.86	5.04	(0.138, 0.126)
實驗例 4	化合物 2-a-8	3.85	5.51	(0.138, 0.127)
實驗例 5	化合物 1-b-1	3.77	5.22	(0.137, 0.125)
實驗例 6	化合物 1-c-1	3.83	5.19	(0.136, 0.127)
實驗例 7	化合物 1-d-1	3.82	5.18	(0.136, 0.127)
實驗例 8	化合物 1-e-1	3.84	5.27	(0.136, 0.125)
比較例 1	ET1	4.02	3.95	(0.136, 0.130)
比較例 2	ET2	4.13	3.87	(0.136, 0.126)
比較例 3	ET3	4.05	4.01	(0.135, 0.125)
比較例 4	ET4	4.07	3.89	(0.135, 0.130)

【0268】 如上述表 1 所示，實驗例 1 至 4 及比較例 2 間的比較結果顯示：相較於當 Ar₃ 為 2,6-萘基之時，於 Ar₃ 為 2,7-萘基的情況下具有優異的傳輸及注入電子的能力。

【0269】 如上述表 1 所示，實驗例 5 及比較例 2 間的比較結果顯示：相較於當 Ar₃ 為 2,6-萘基之時，於 Ar₃ 為 1,8-萘基的情況下具有優異的傳輸及注入電子的能力。

【0270】 如上述表 1 所示，實驗例 6 及比較例 2 間的比較結果顯示：相較於當 Ar₃ 為 2,6-萘基之時，於 Ar₃ 為 1,6-萘基的情況下具有優異的傳輸及注入電子的能力。

【0271】 如上述表 1 所示，實驗例 7 及比較例 2 間的比較結果顯示：相較於當 Ar₃ 為 2,6-萘基之時，於 Ar₃ 為 1,7-萘基的情況下具有優異的傳輸及注入電子的能力。

【0272】 如上述表 1 所示，實驗例 8 及比較例 3 間的比

102年12月17日修(更)正替換頁

較結果顯示：相較於當 Ar₃ 為 2,7-芴基之時，於 Ar₃ 為 3,6-芴基的情況下具有優異的傳輸及注入電子的能力。

【0273】 上述表 1 中的結果指出依據本發明之化合物具有優異的傳輸及注入電子之能力，建議其可應用於一有機發光裝置中。

【符號說明】

【0274】

1	基材
2	陽極
3	發光層
4	陰極
5	電洞注入層
6	電洞傳輸層
7	發光層
8	電子傳輸層

【生物材料寄存】

無

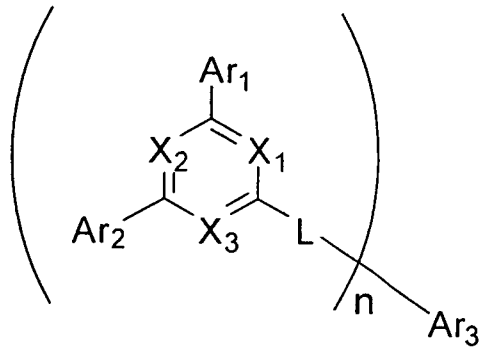
【序列表】(請換頁單獨記載)

無

申請專利範圍

1. 一種雜環化合物，係如下式1所示：

[式1]



其中，

n 為2；

X_1 至 X_3 係為相同或不同，且各自獨立為一三價雜原子或CH，且 X_1 至 X_3 之至少一者係為一三價雜原子；

Ar_1 及 Ar_2 係為相同或不同，且各自獨立為一經取代或未經取代之芳基或雜環基；

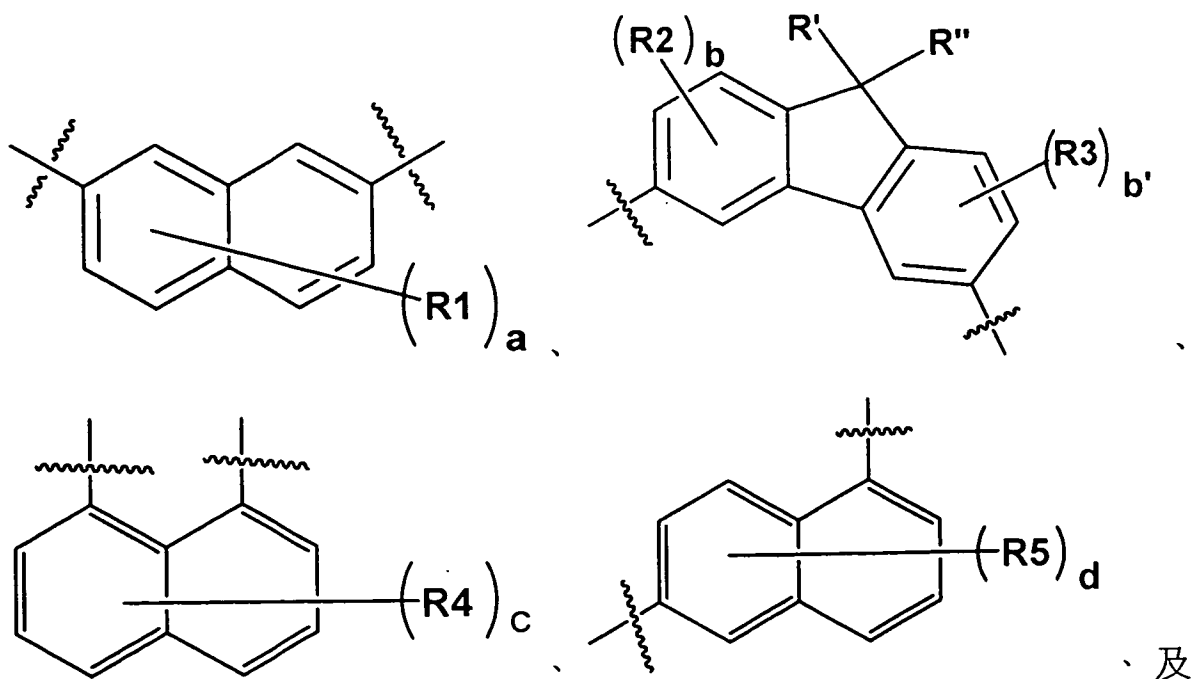
L 係為一直接鍵結、一經取代或未經取代之亞芳基、一經取代或未經取代之伸烯基、一經取代或未經取代之伸苄基、或一經取代或未經取代且具有一選自由O、N、S及P之雜原子之雜環基；以及

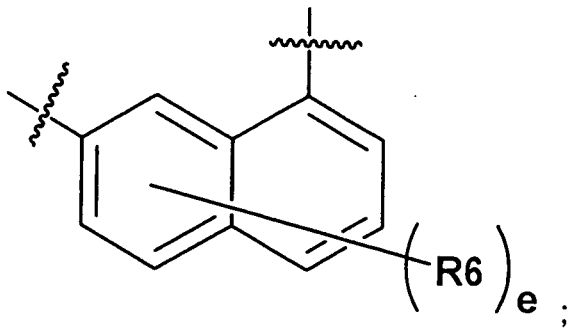
Ar_3 係選自由一經取代或未經取代之2,7-萘基、一經取代或未經取代之1,2-萘基、一經取代或未經取代之1,3-萘基、一經取代或未經取代之1,6-萘基、一經取代或未經取代之1,7-萘基、一未經取代之1,8-萘基、一經取代或未經取代之2,3-萘基、一經取代或未經取代之3,6-苄基、及一經取代或未經取代之1,8-苄基所組成之群組；以及

當 Ar_3 係選自由一經取代或未經取代之 2,7-萘基、一經取代或未經取代之 1,2-萘基、一經取代或未經取代之 1,3-萘基、一經取代或未經取代之 1,6-萘基、一經取代或未經取代之 1,7-萘基、一未經取代之 1,8-萘基、及一經取代或未經取代之 2,3-萘基所組成之群組，且 X_1 至 X_3 係為三價雜原子時，L 係為一經取代或未經取代之亞芳基、一經取代或未經取代之伸烯基、一經取代或未經取代之伸苳基、或一經取代或未經取代且具有一選自由 O、N、S 及 P 之雜原子之雜環基。

2. 如申請專利範圍第 1 項所述之雜環化合物，其中， X_1 至 X_3 係為相同或不同，且各自獨立為 N 或 CH，且 X_1 至 X_3 之至少一者係為 N。

3. 如申請專利範圍第 1 項所述之雜環化合物，其中， Ar_3 係選自由下列結構之任一者：





其中，a、c、d及e係各自為一1至6之正整數，b及b'係各自為一1至3之正整數，R1至R6係為相同或不同，且各自獨立為氫、氖、鹵素基團、腈基、硝基、羥基、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之環烷基、經取代或未經取代之烷氧基、經取代或未經取代之芳氧基、經取代或未經取代之烷硫氧基、經取代或未經取代之芳硫氧基、經取代或未經取代之烷基硼基、經取代或未經取代之芳基硼基、經取代或未經取代之烯基、經取代或未經取代之矽烷基、經取代或未經取代之硼基、經取代或未經取代之胺基、經取代或未經取代之烷胺基、經取代或未經取代之芳胺基、經取代或未經取代之芳基胺基、經取代或未經取代之雜芳基胺基、經取代或未經取代之芳基、經取代或未經取代之苄基、經取代或未經取代之咪唑基、或經取代或未經取代且含有至少一選自由N、O、S及P之雜原子之雜環基，

R'及R''係為相同或不同，且各自獨立選自由：氫、氖、鹵素基團、腈基、硝基、羥基、經取代或未經取代之烷基、經取代或未經取代之環烷基、經取代或未經取代之烷氧基、

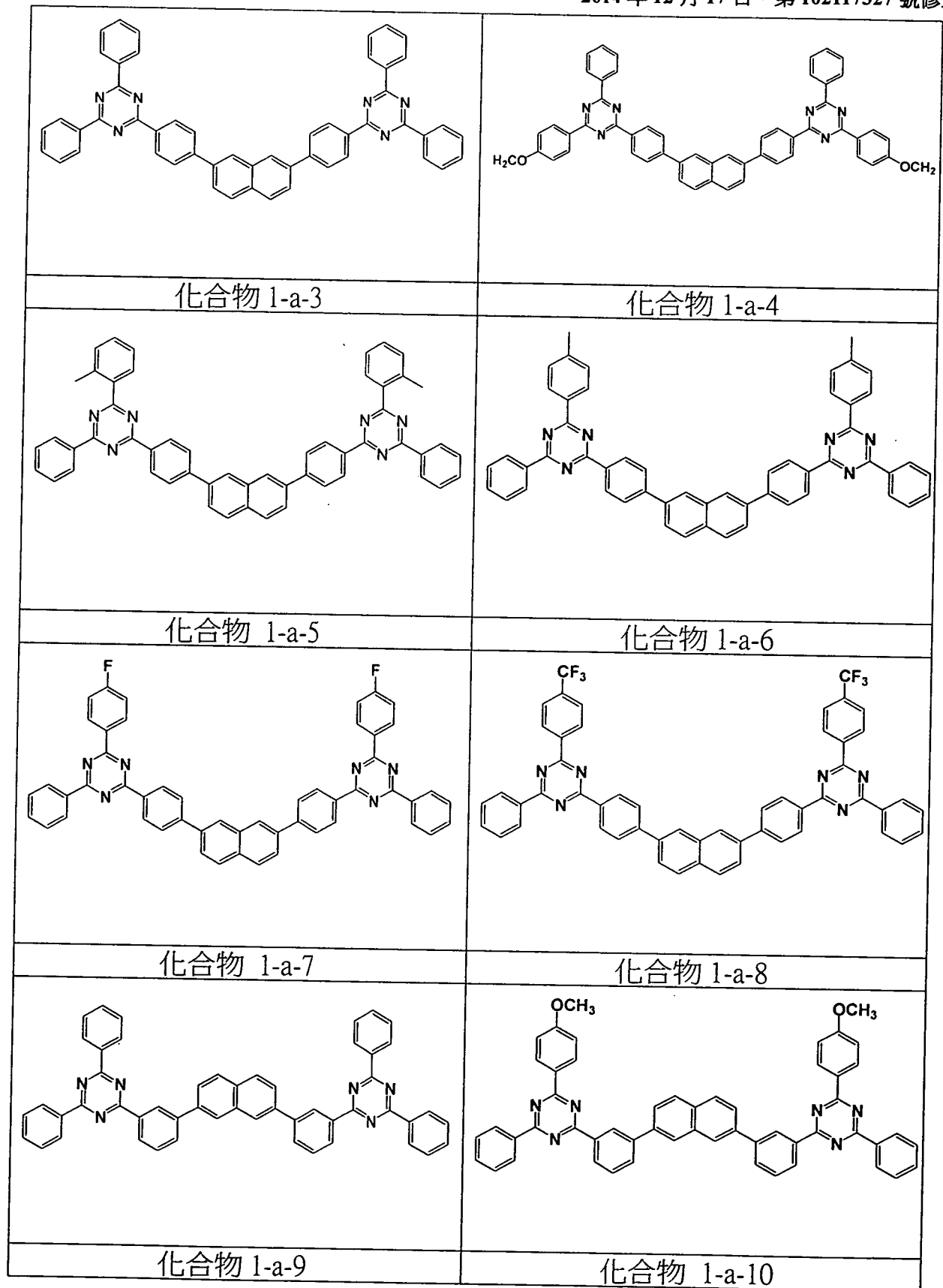
經取代或未經取代之芳氧基、經取代或未經取代之烷硫氧基、經取代或未經取代之芳硫氧基、經取代或未經取代之烷基磺基、經取代或未經取代之芳基磺基、經取代或未經取代之烯基、經取代或未經取代之矽烷基、經取代或未經取代之硼基、經取代或未經取代之胺基、經取代或未經取代之烷胺基、經取代或未經取代之芳胺基、經取代或未經取代之芳基胺基、經取代或未經取代之雜芳基胺基、經取代或未經取代之芳基、經取代或未經取代之苄基、經取代或未經取代之咪唑基、或經取代或未經取代且含有至少一選自由 N、O、S 及 P 之雜原子之雜環基所組成之群組，或可與脂族環、芳香環、脂族雜環或芳香雜環形成一縮合環，或形成一螺旋連結。

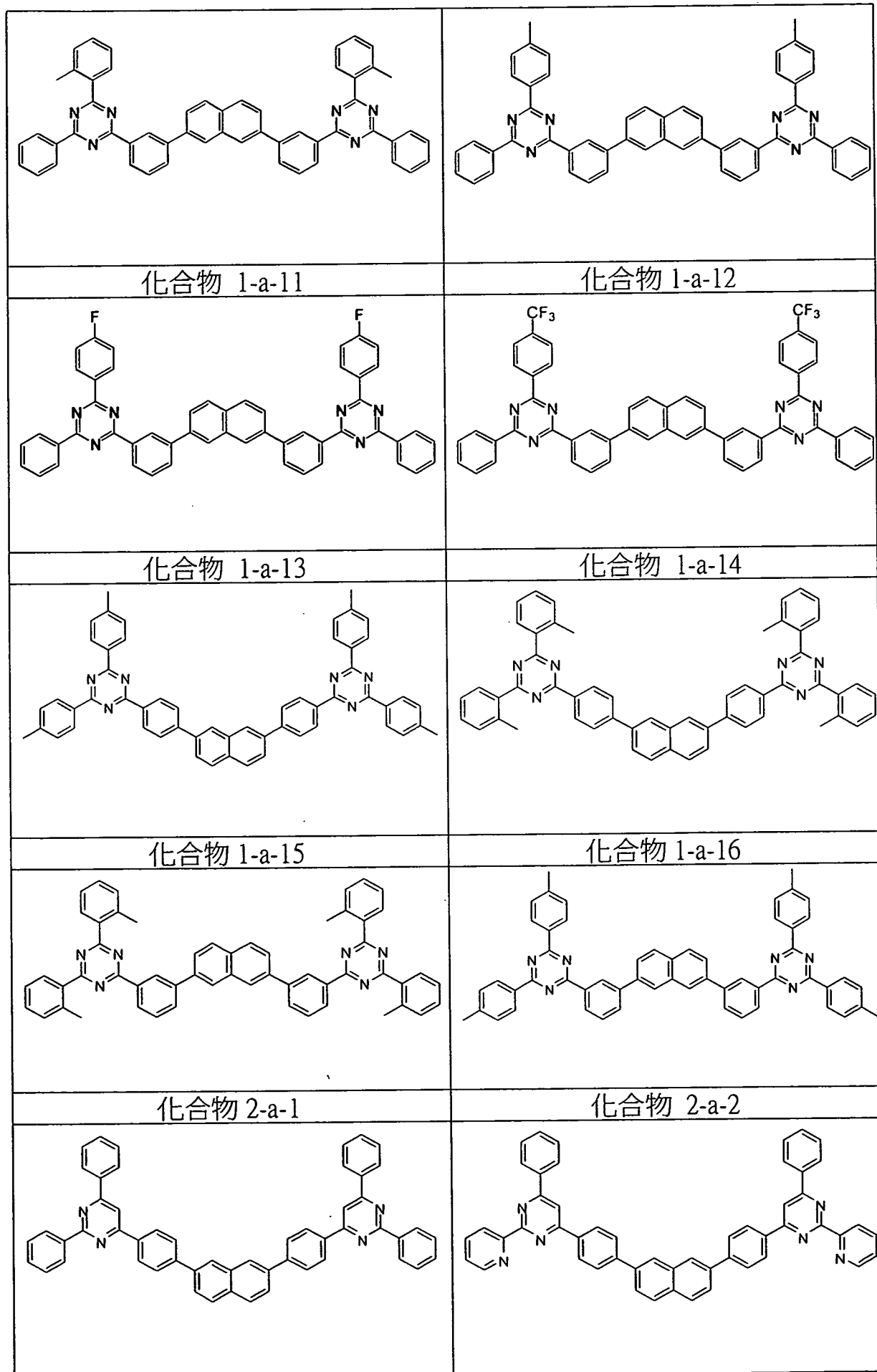
4. 如申請專利範圍第1項所述之雜環化合物，其中， Ar_1 及 Ar_2 係為相同或不同，且各自獨立為經取代或未經取代之苯基、經取代或未經取代之萘基、經取代或未經取代之聯苯基、或經取代或未經取代之吡啶基。

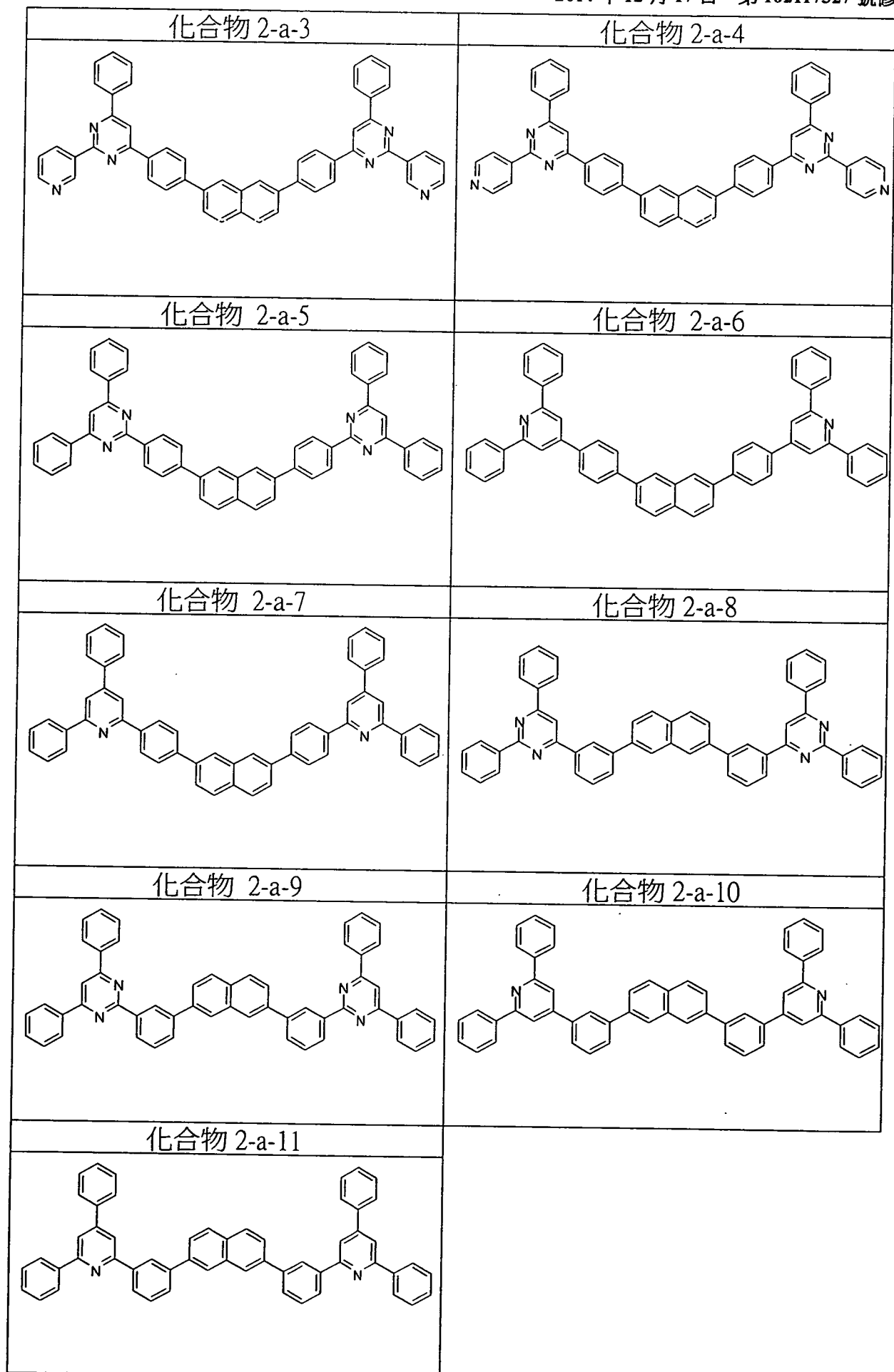
5. 如申請專利範圍第1項所述之雜環化合物，其中，L係為一直接鍵結或一經取代或未經取代之伸苄基。

6. 如申請專利範圍第1項所述之雜環化合物，其中，式1所示化合物係為下列化合物1-a-1至1-a-16、及2-a-1至2-a-11化合物之任一者：

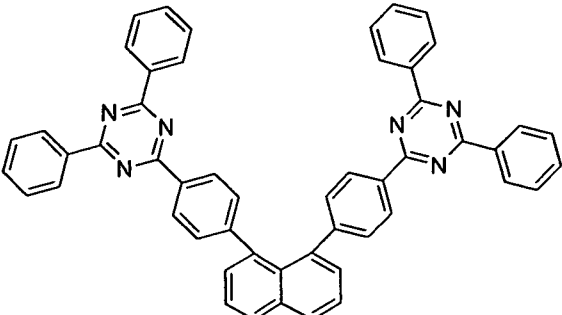
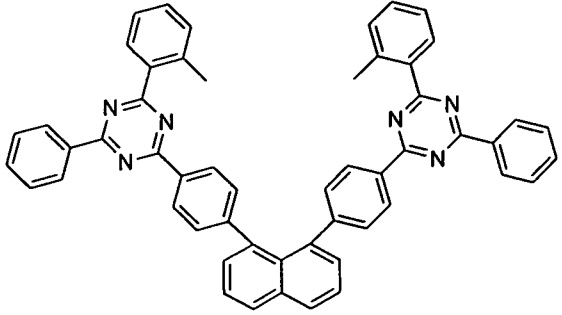
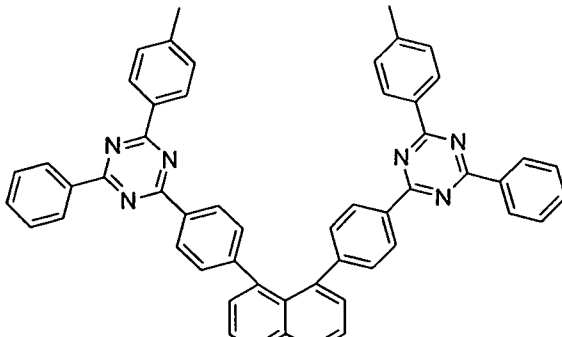
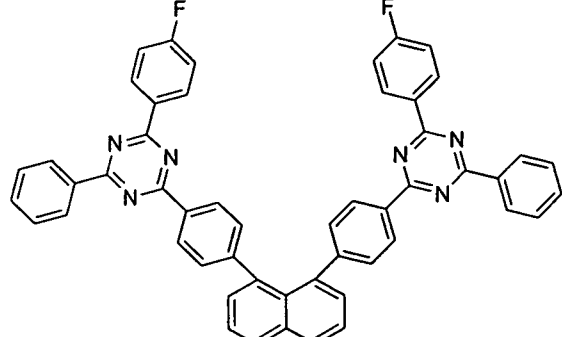
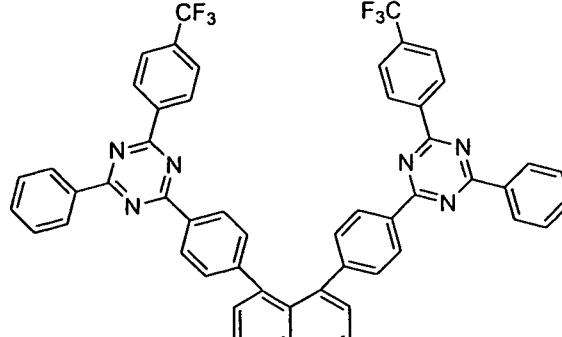
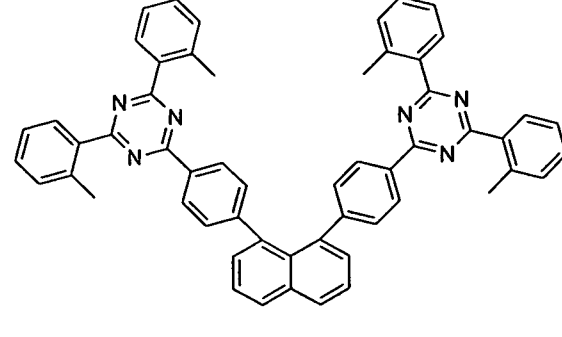
化合物 1-a-1	化合物 1-a-2
-----------	-----------

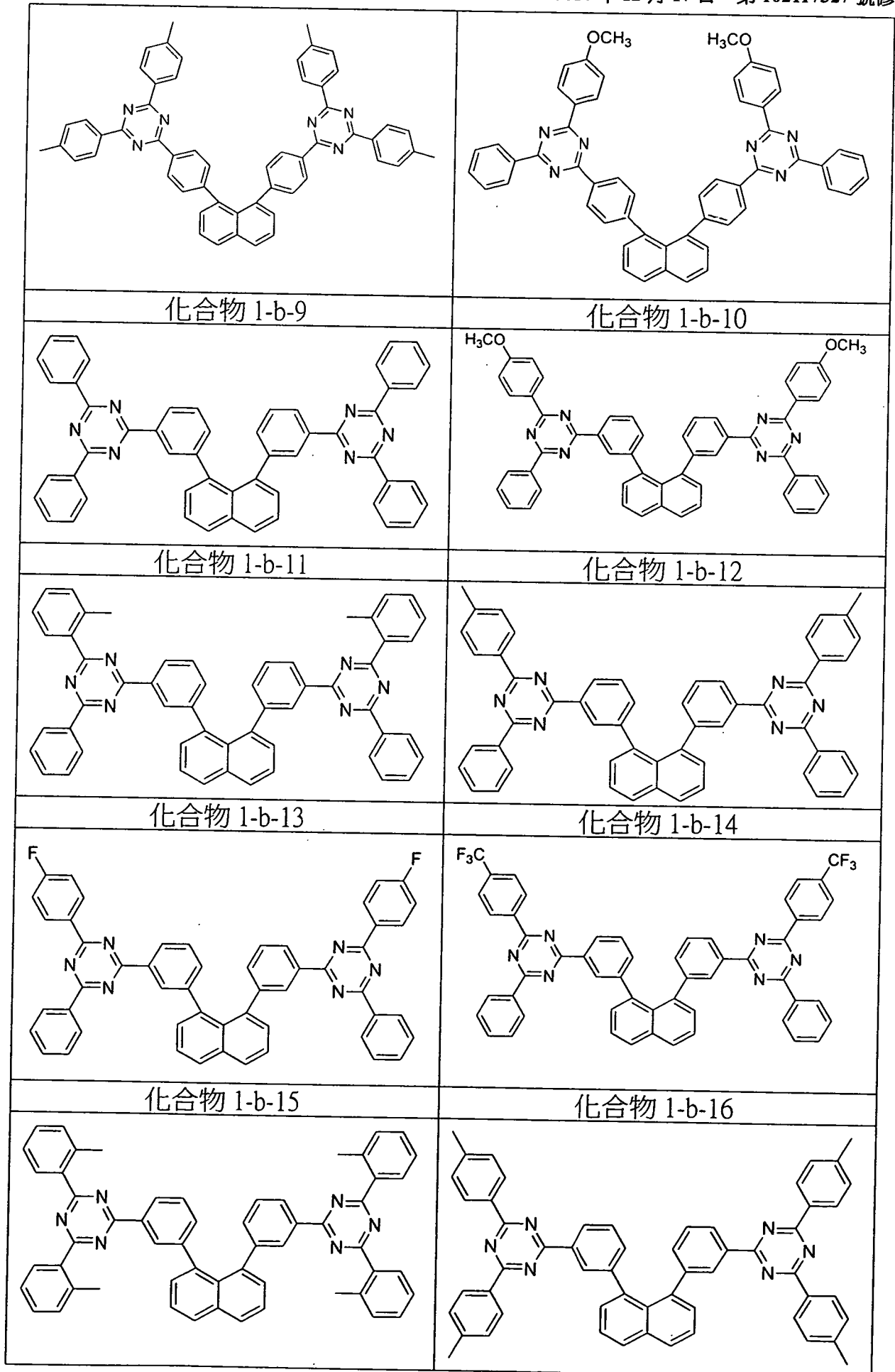


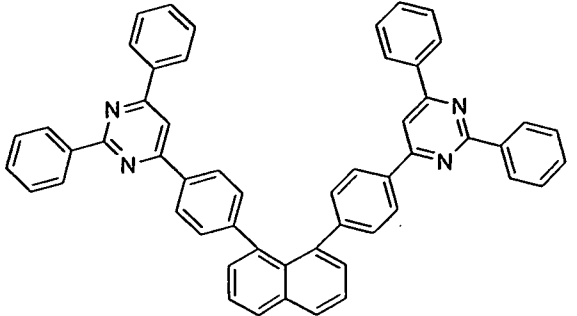
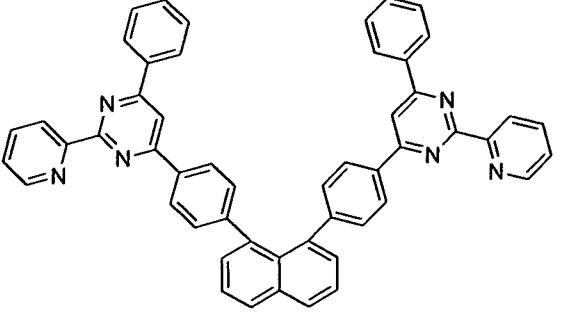
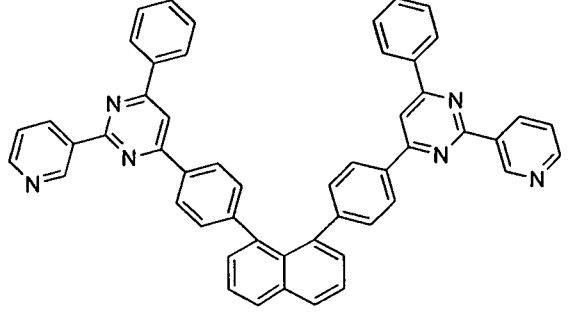
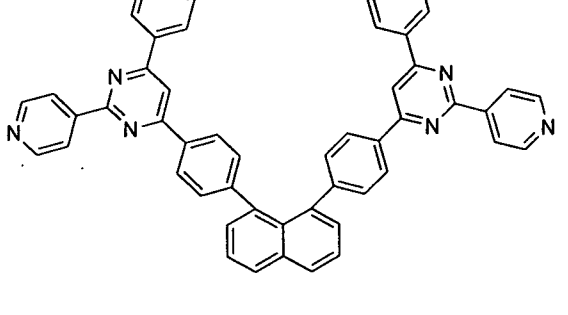
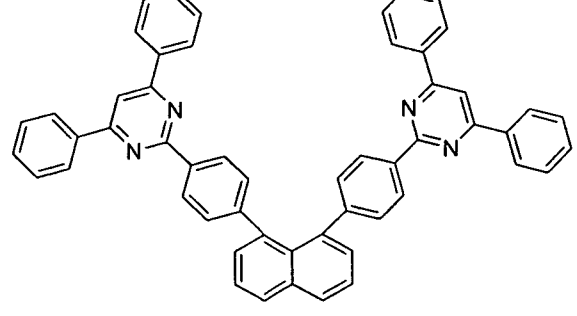
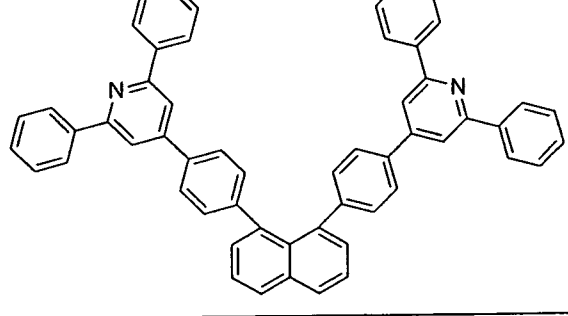
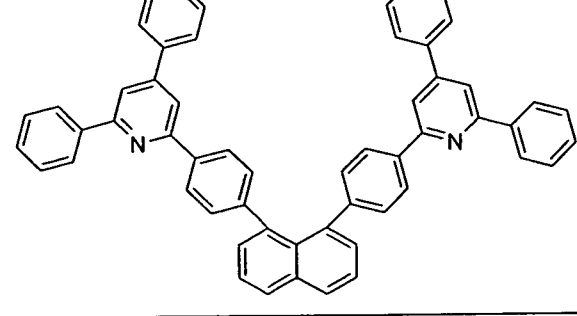
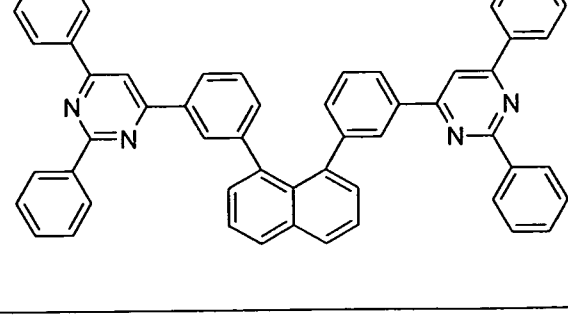


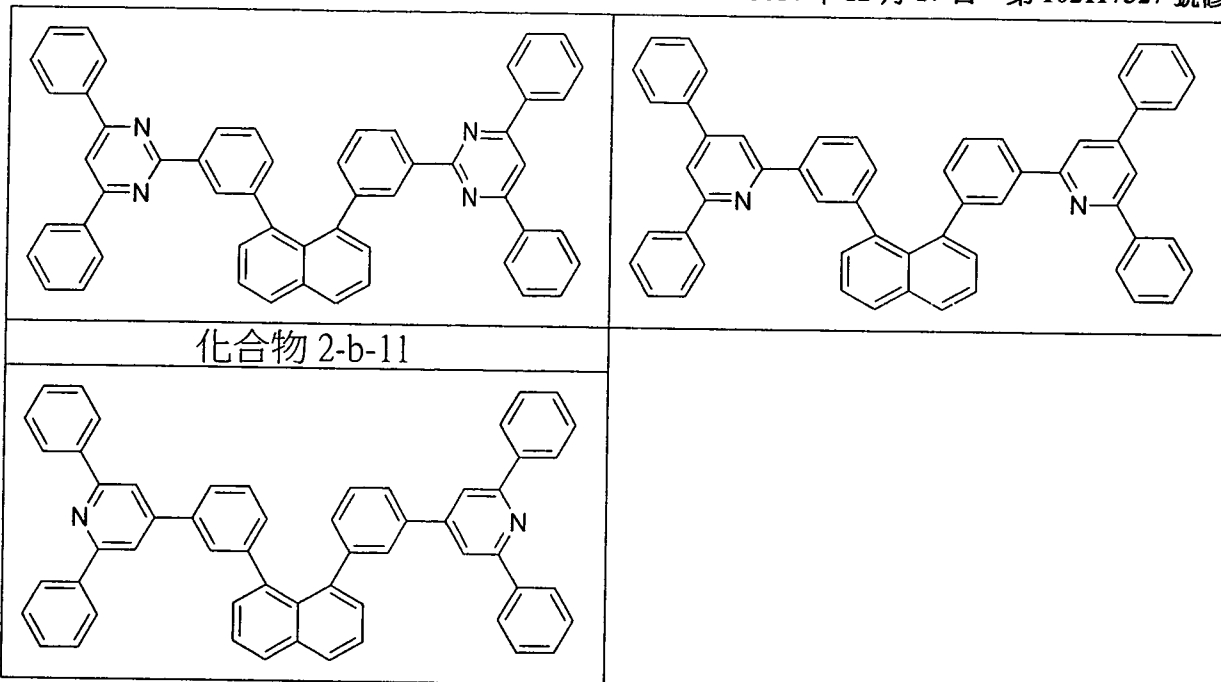


7. 如申請專利範圍第1項所述之雜環化合物，其中，式1所示化合物係為下列化合物1-b-1至1-b-16、及2-b-1至2-b-11化合物之任一者：

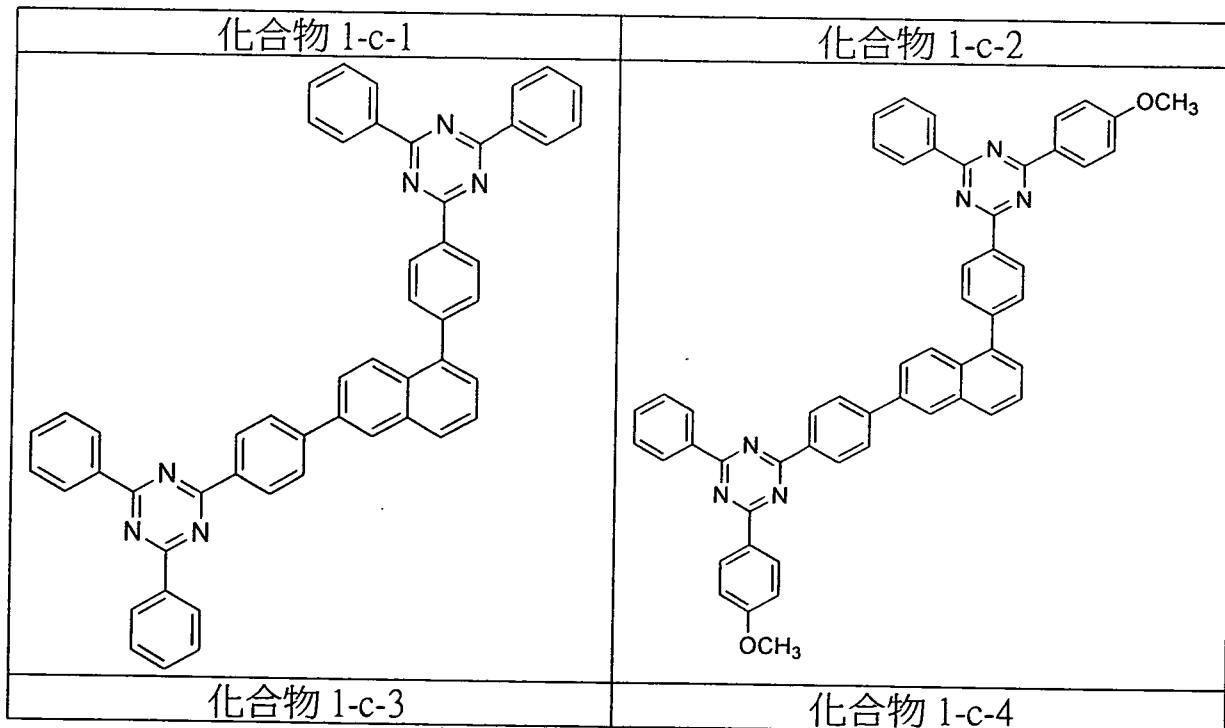
<p style="text-align: center;">化合物 1-b-1</p> 	<p style="text-align: center;">化合物 1-b-2</p> 
<p style="text-align: center;">化合物 1-b-3</p> 	<p style="text-align: center;">化合物 1-b-4</p> 
<p style="text-align: center;">化合物 1-b-5</p> 	<p style="text-align: center;">化合物 1-b-6</p> 
<p style="text-align: center;">化合物 1-b-7</p>	<p style="text-align: center;">化合物 1-b-8</p>

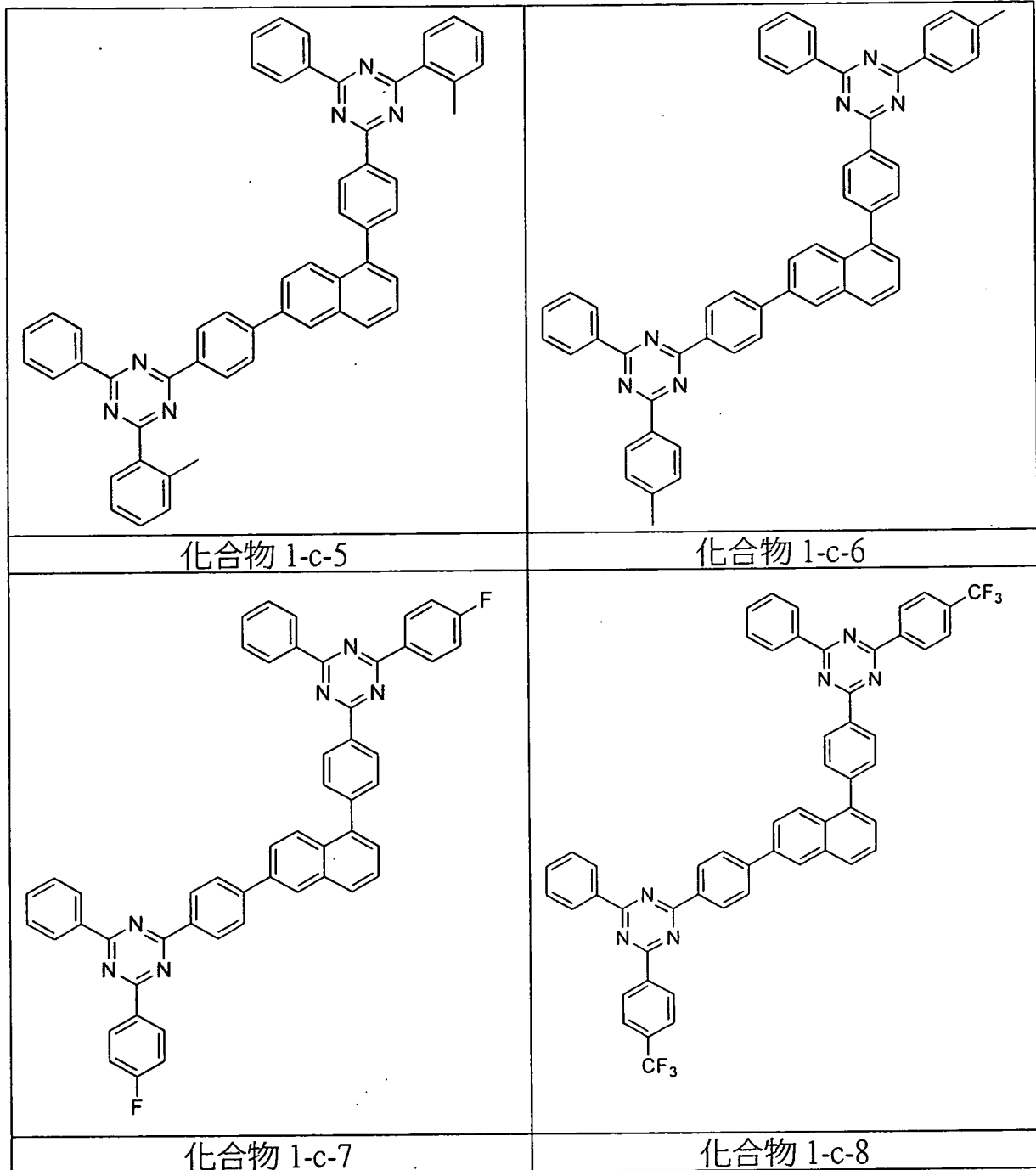


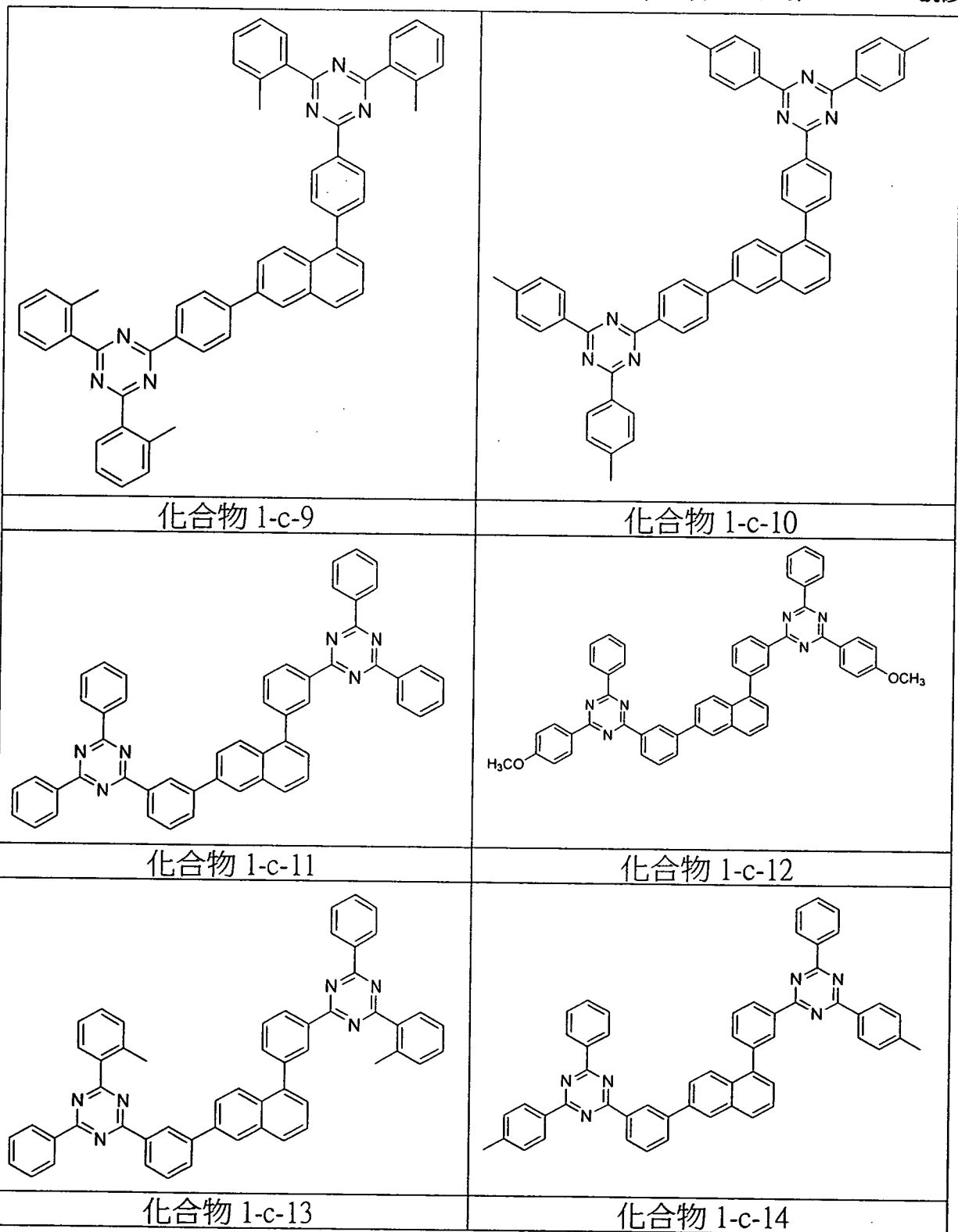
化合物 2-b-1	化合物 2-b-2
	
化合物 2-b-3	化合物 2-b-4
	
化合物 2-b-5	化合物 2-b-6
	
化合物 2-b-7	化合物 2-b-8
	
化合物 2-b-9	化合物 2-b-10

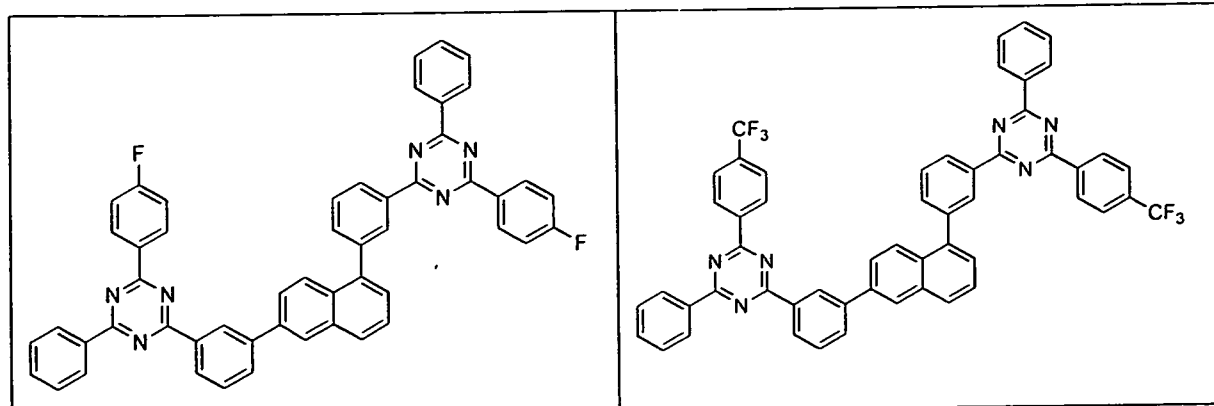


8. 如申請專利範圍第1項所述之雜環化合物，其中，式1所示化合物係為下列化合物1-c-1至1-c-16、2-c-1至2-c-11及3-c-1至3-c-4化合物之任一者：



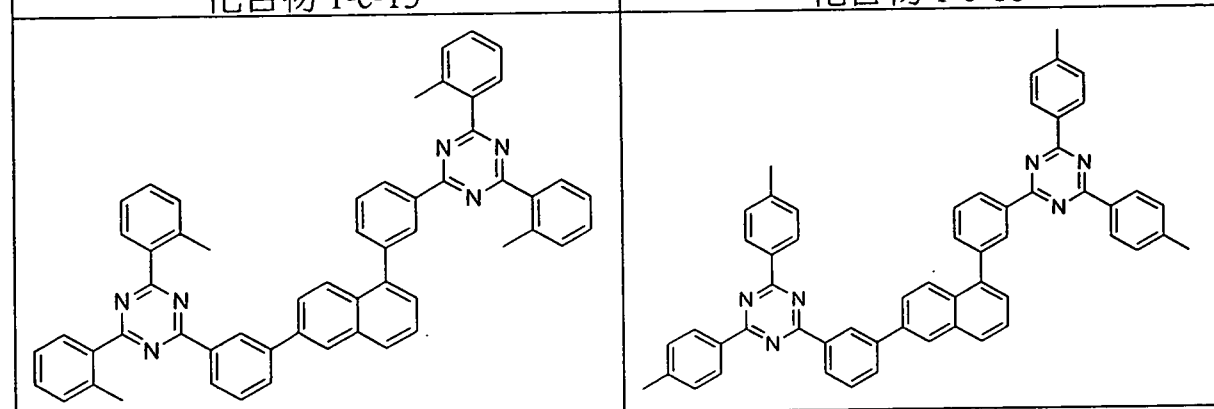






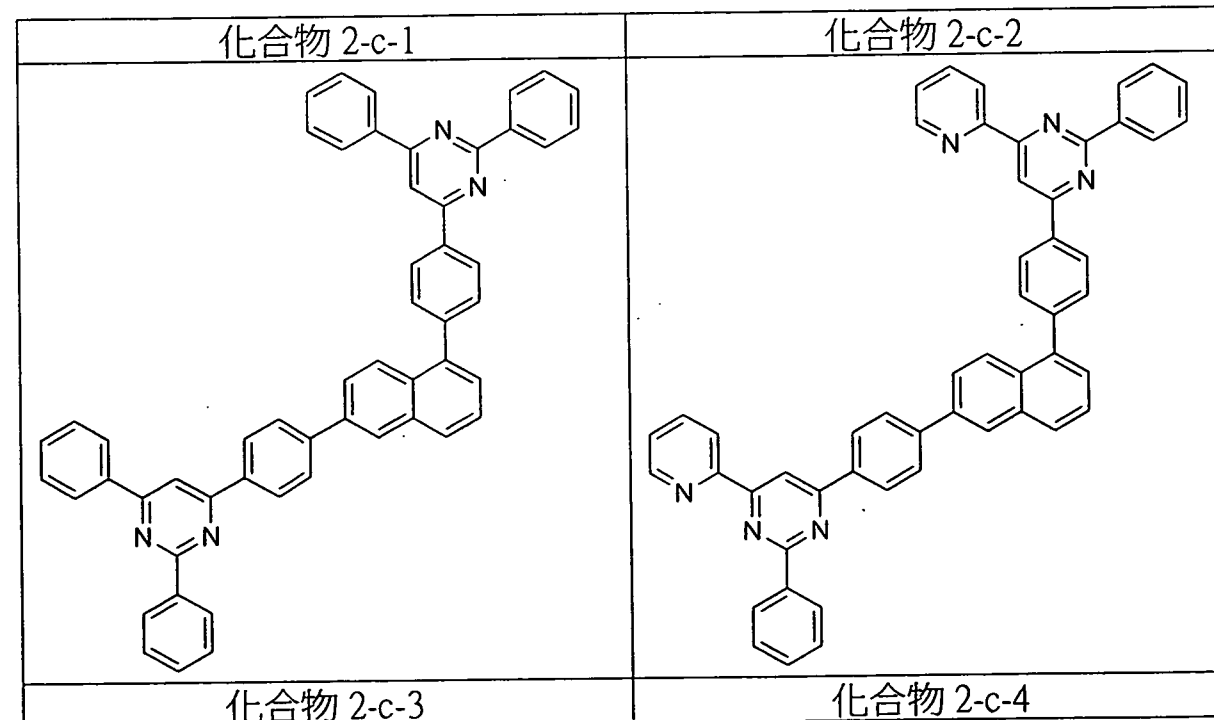
化合物 1-c-15

化合物 1-c-16



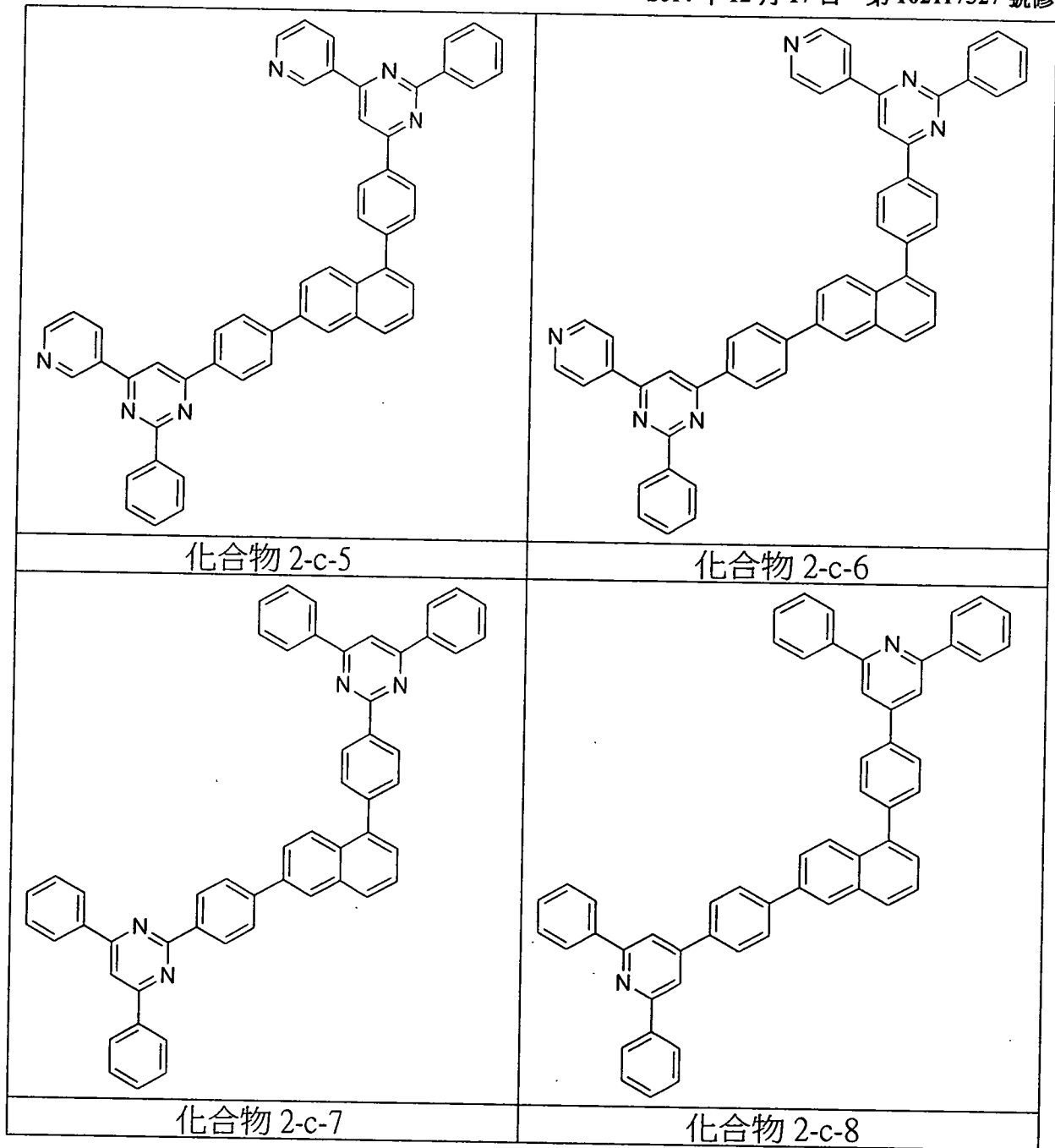
化合物 2-c-1

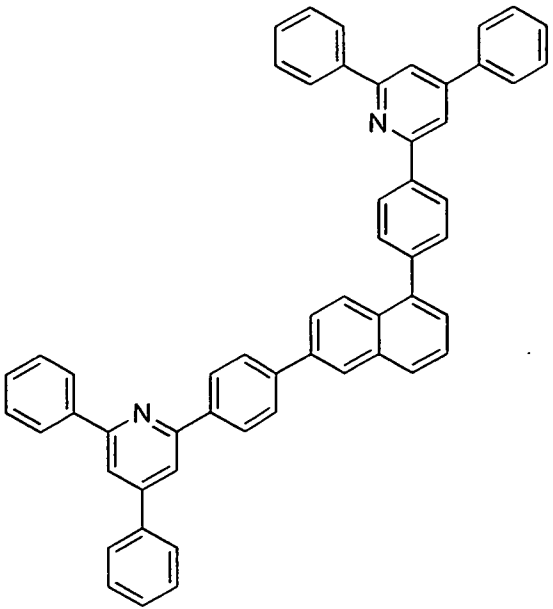
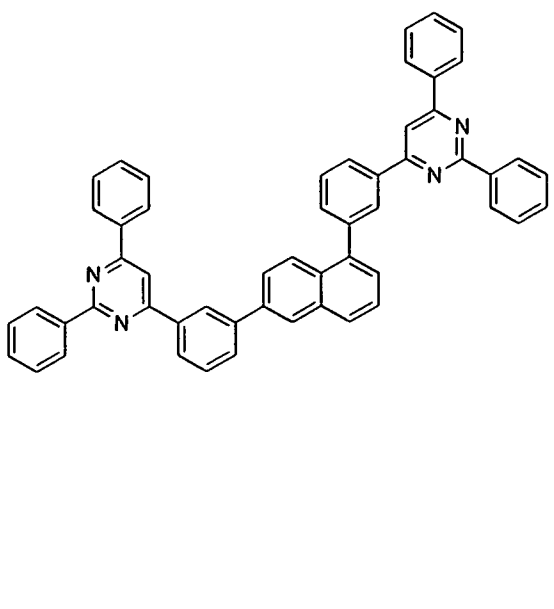
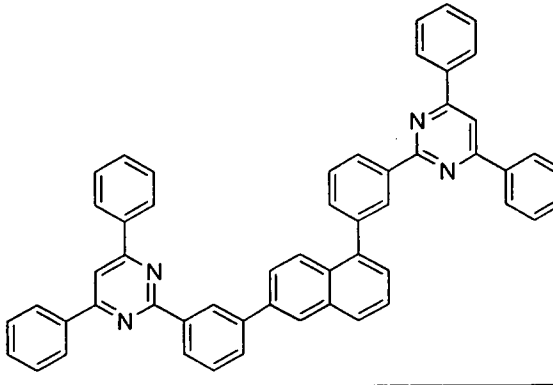
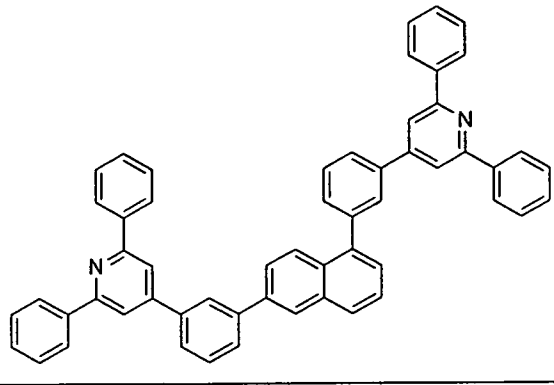
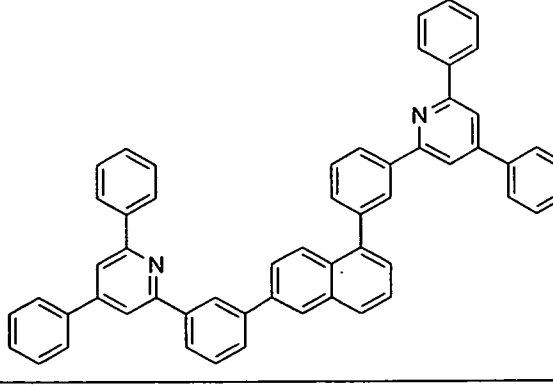
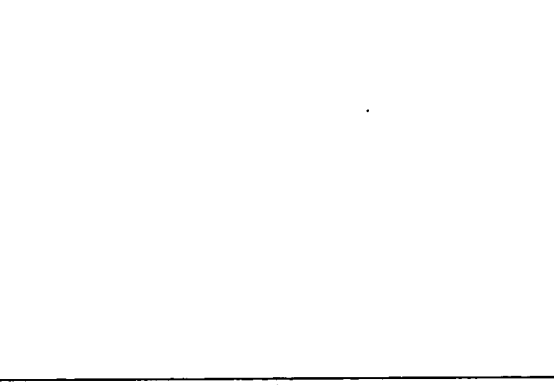
化合物 2-c-2

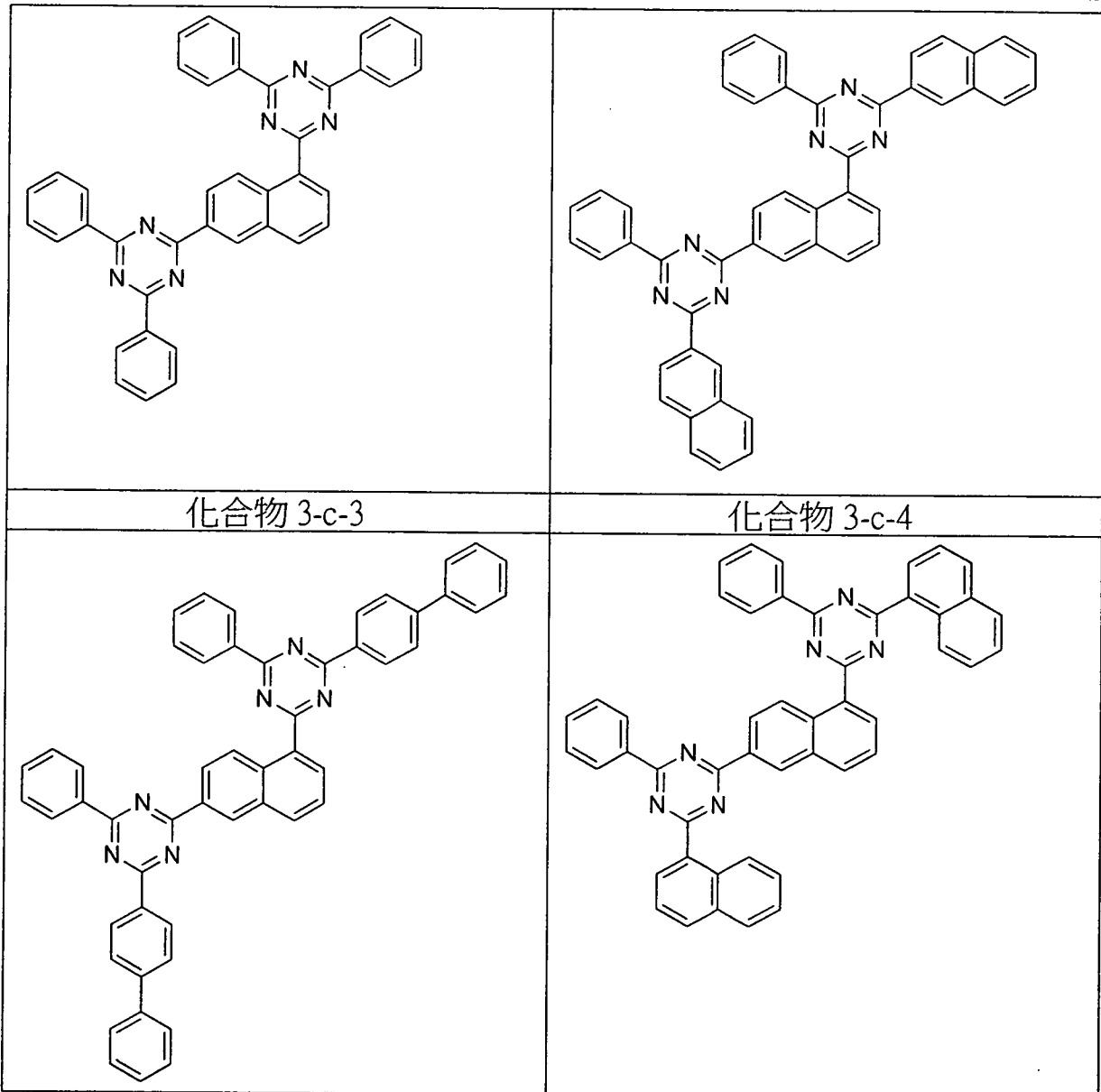


化合物 2-c-3

化合物 2-c-4

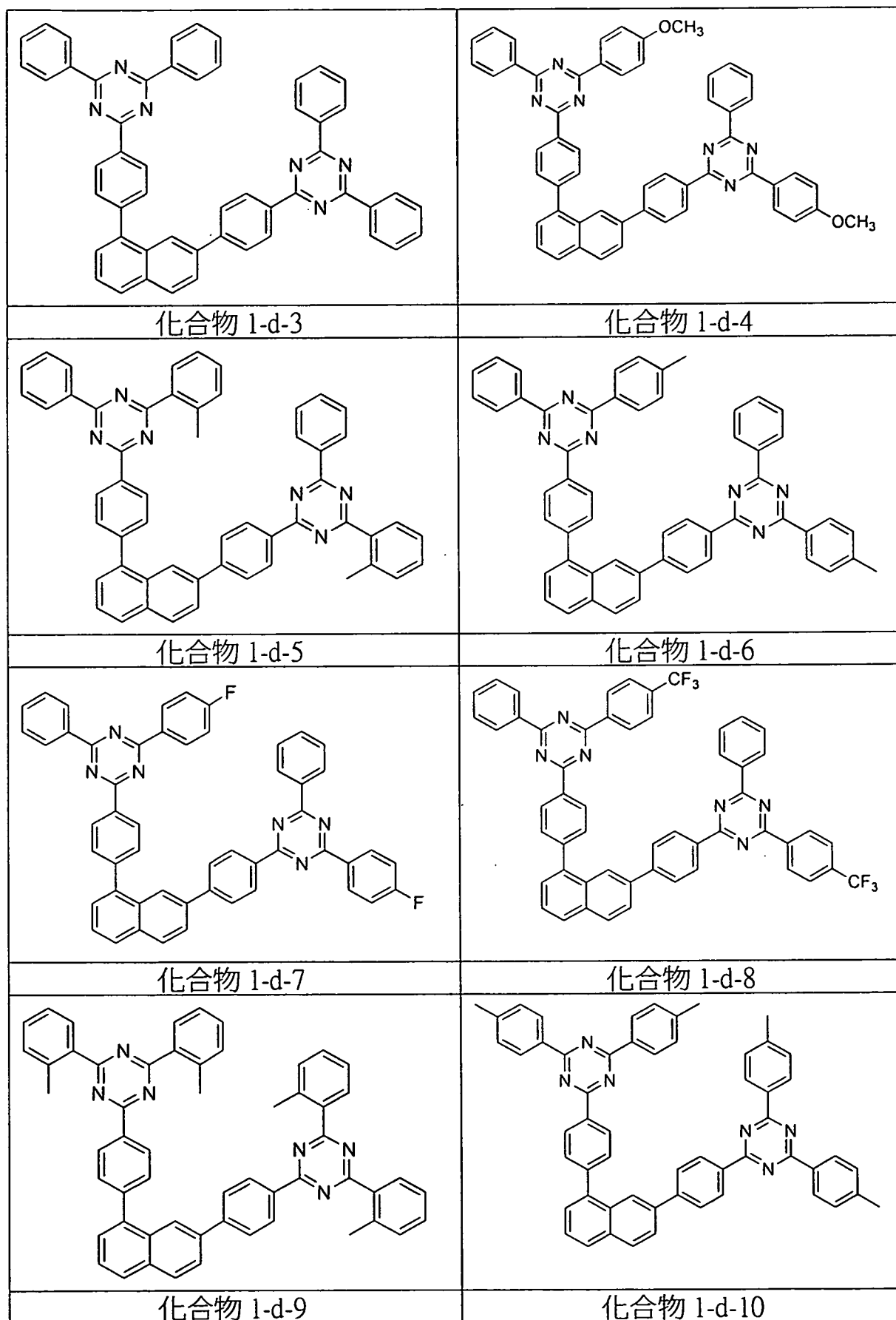


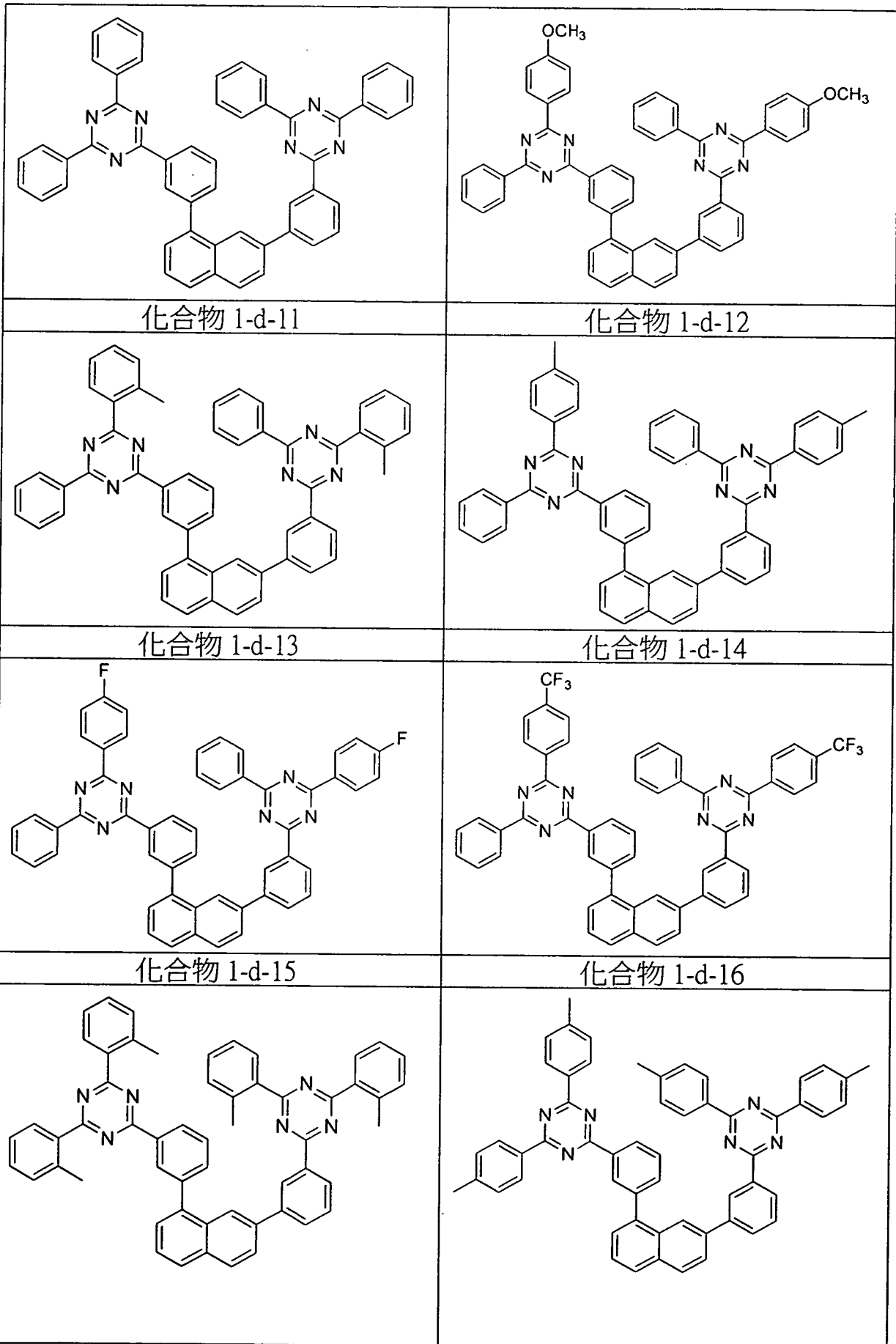
	
化合物 2-c-9	化合物 2-c-10
	
化合物 2-c-11	
	
化合物 3-c-1	化合物 3-c-2

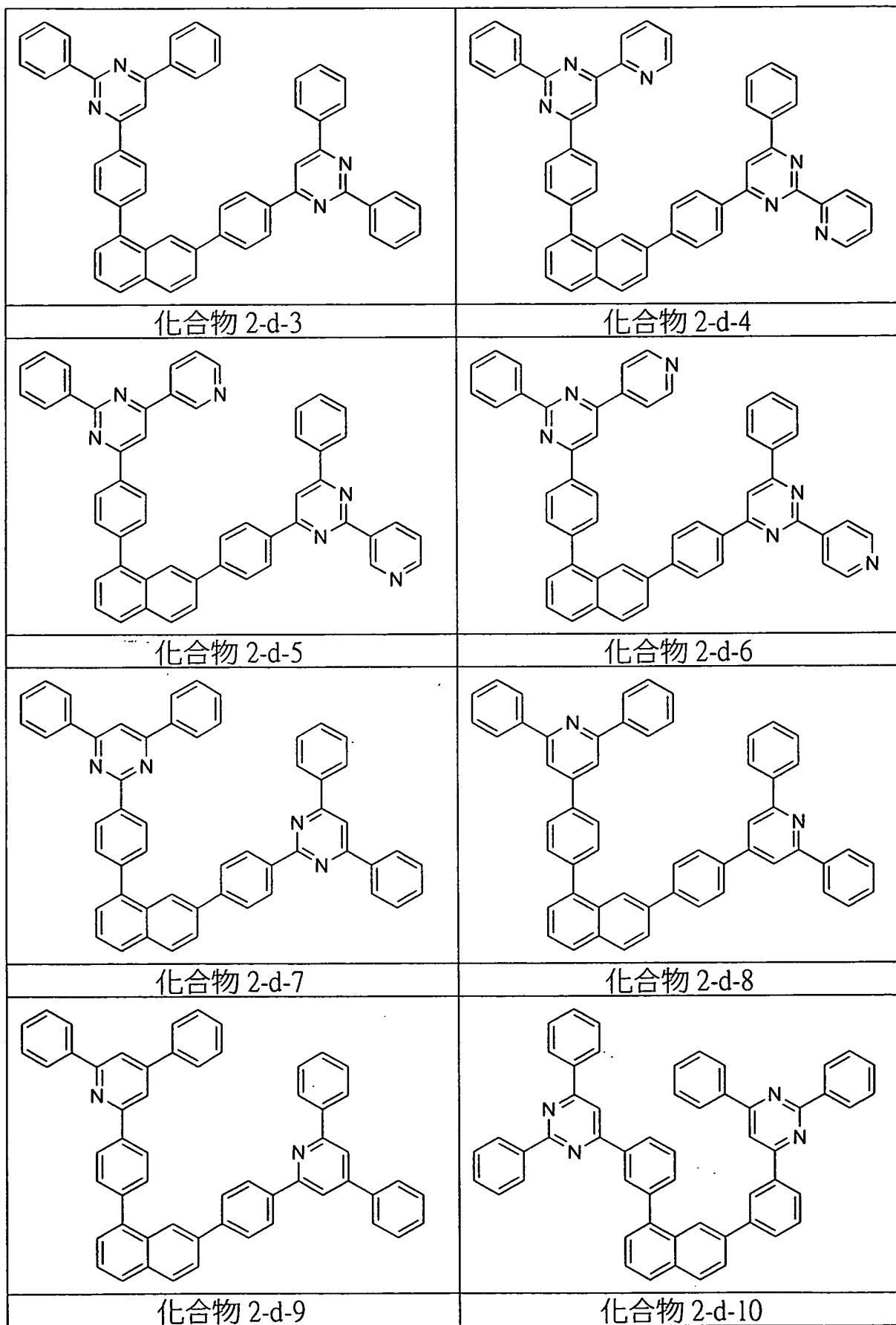


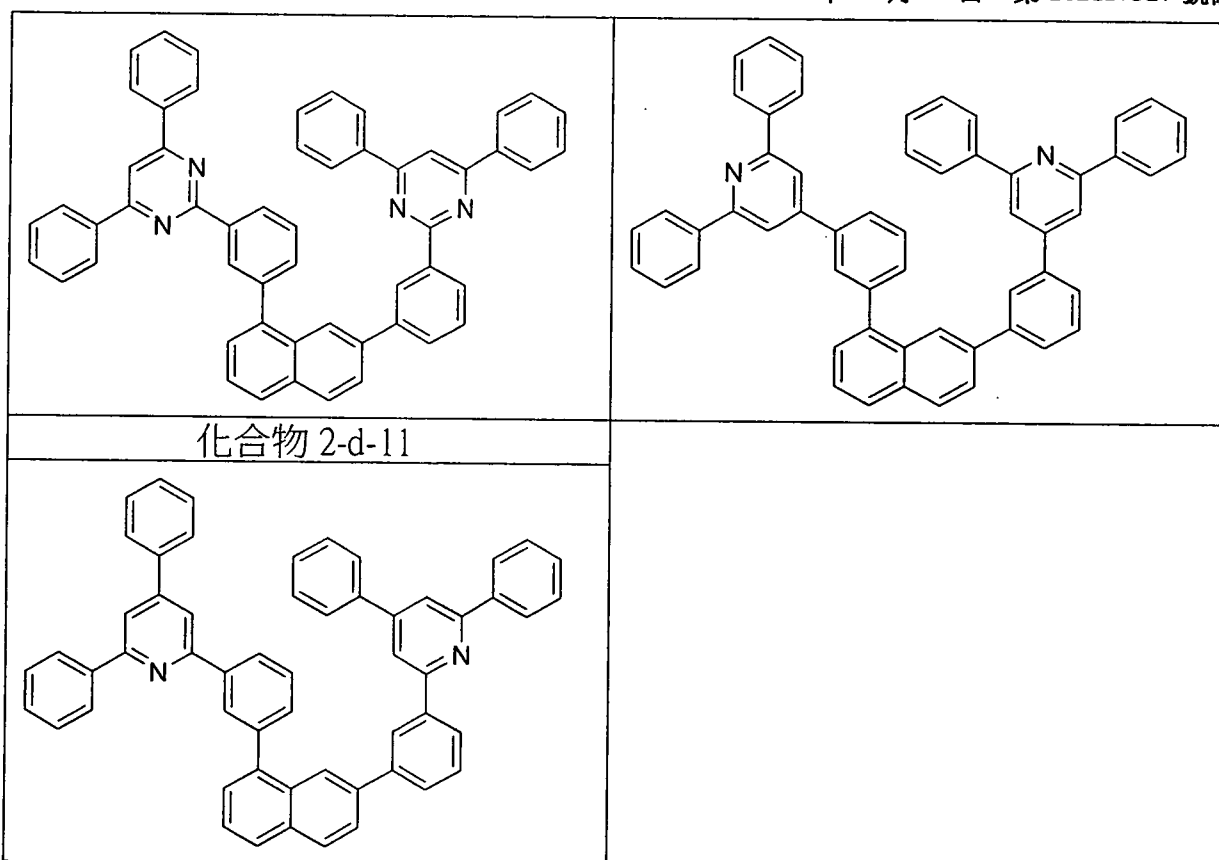
9. 如申請專利範圍第1項所述之雜環化合物，其中，式1所示化合物係為下列化合物 1-d-1 至 1-d-16、及 2-d-1 至 2-d-11 化合物之任一者：

<p>化合物 1-d-1</p>	<p>化合物 1-d-2</p>
------------------	------------------

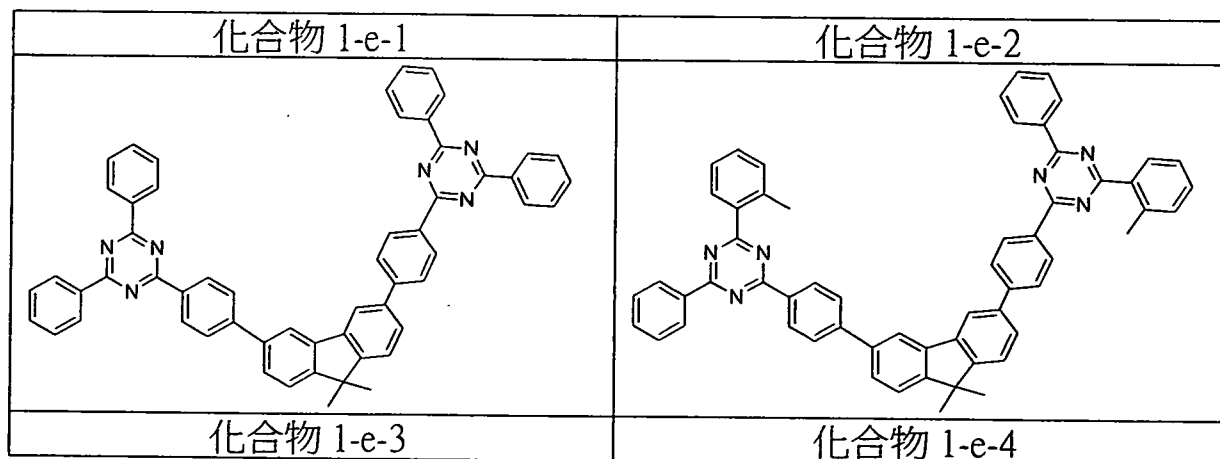


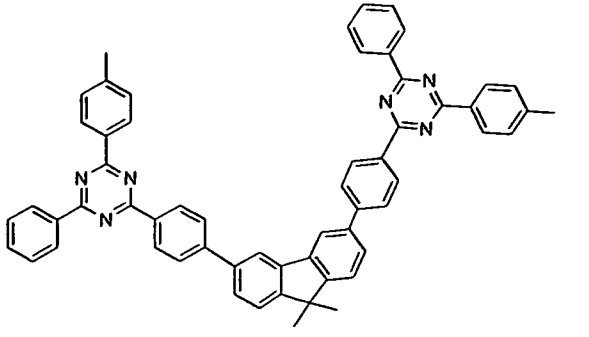
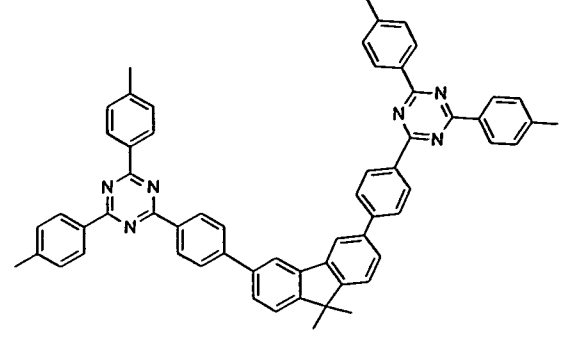
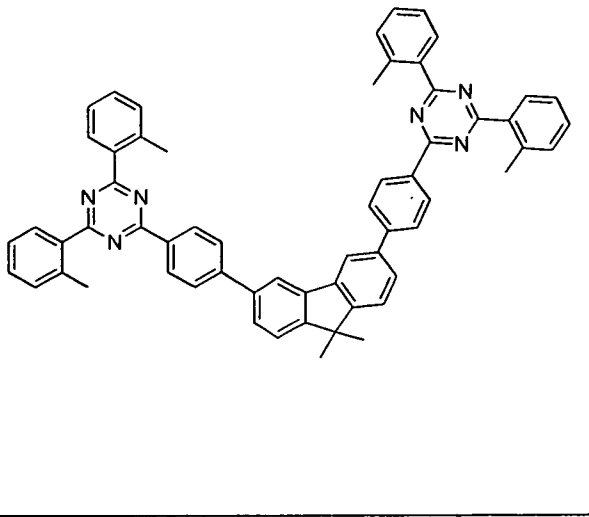
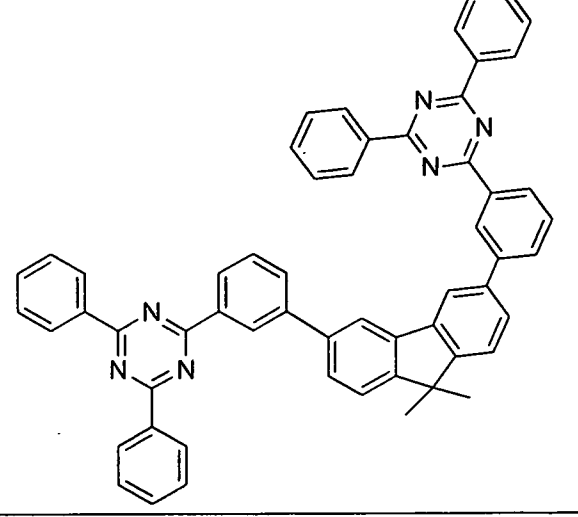
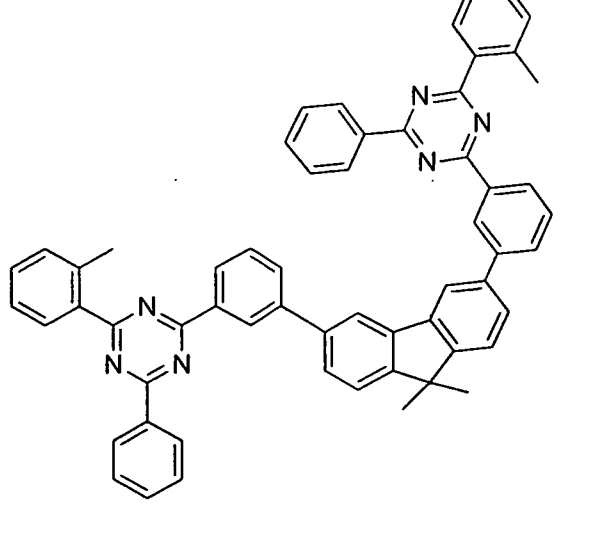
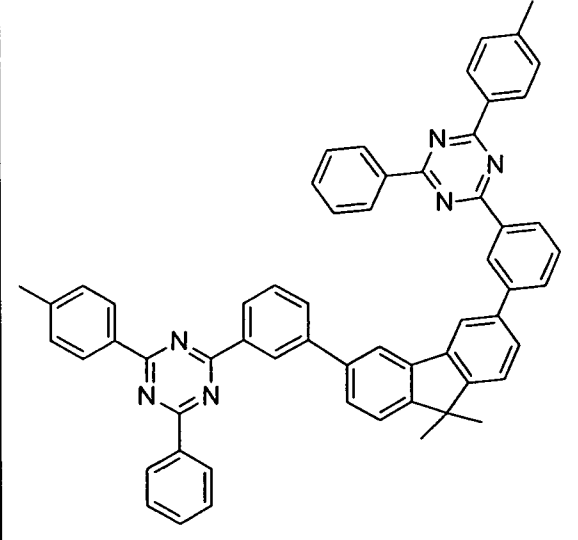


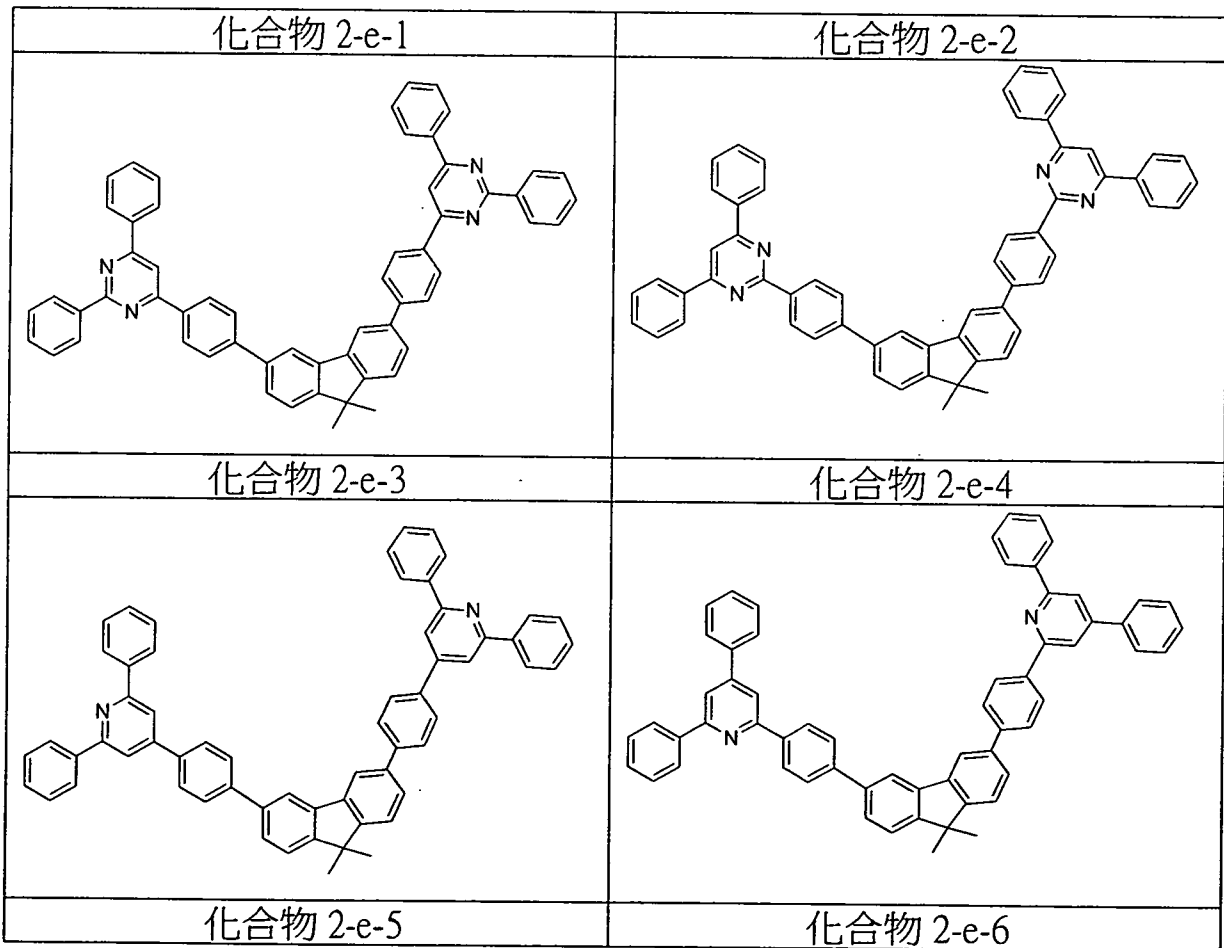
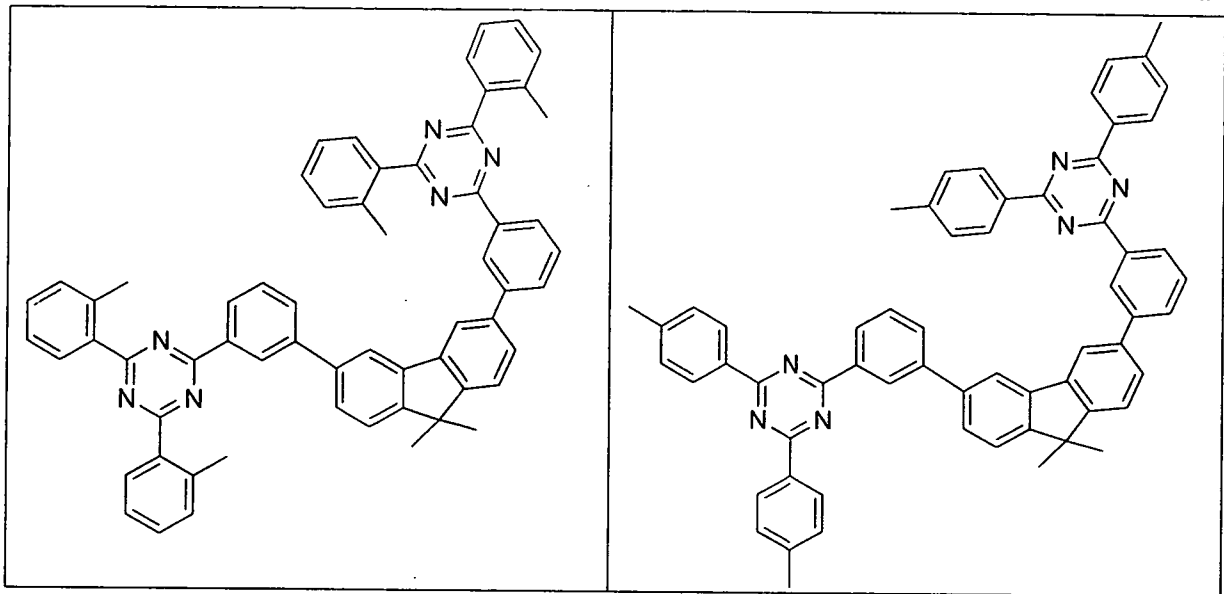


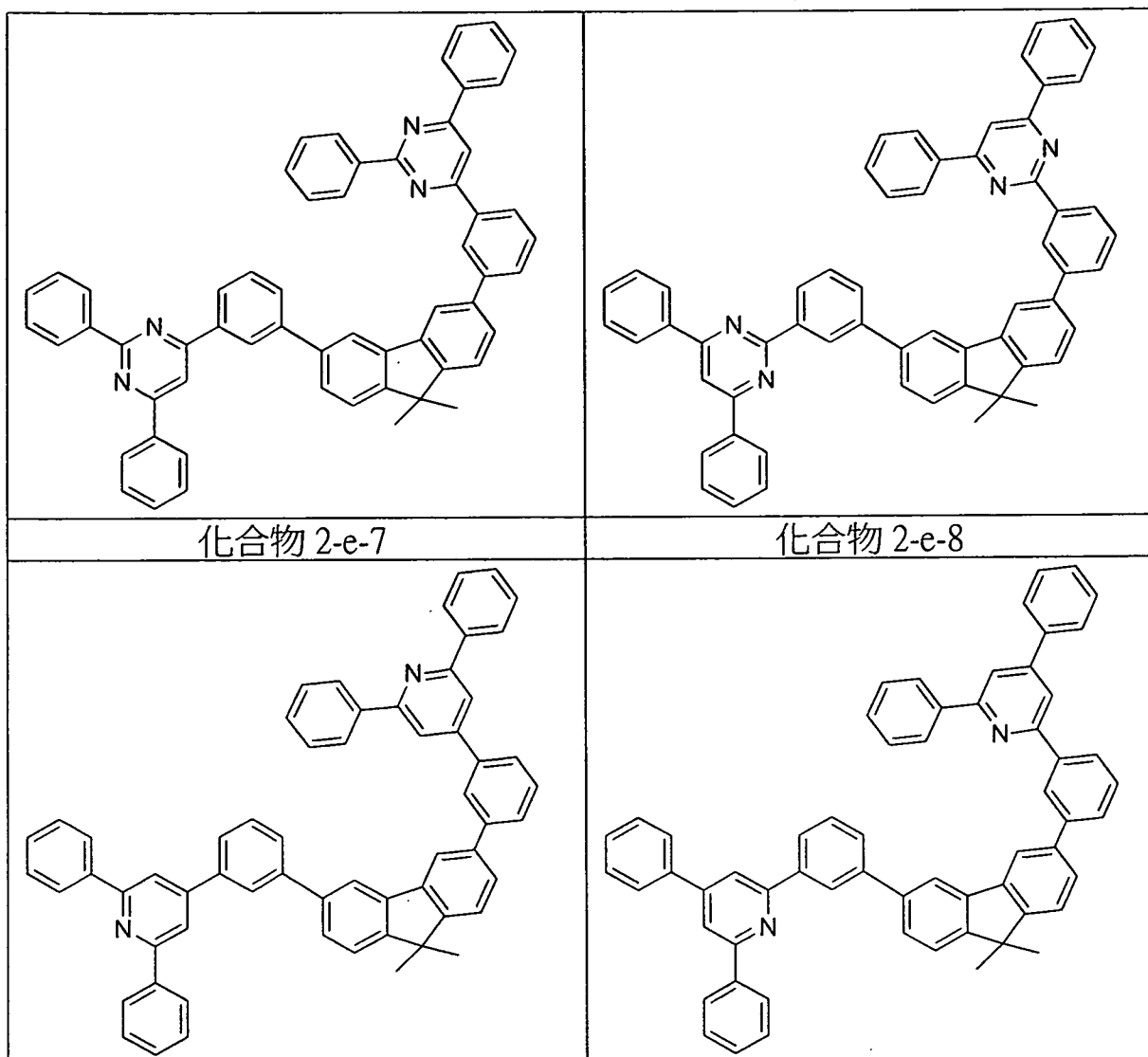


10. 如申請專利範圍第1項所述之雜環化合物，其中，式1所示化合物係為下列化合物1-e-1至1-e-10及2-e-1至2-e-8之任一者：



	
化合物 1-e-5	化合物 1-e-6
	
化合物 1-e-7	化合物 1-e-8
	
化合物 1-e-9	化合物 1-e-10





11. 一種有機電子裝置，包括：一第一電極；一第二電極；以及一層或多層有機材料層，其係插置於該第一電極及該第二電極之間；其中，該一層或多層有機材料層包括如申請專利範圍第1至10項任一項所述之雜環化合物。

12. 如申請專利範圍第11項所述之有機電子裝置，其中，該有機電子裝置係選自由有機發光裝置、有機太陽能電池、及有機電晶體所組成之群組。

13. 如申請專利範圍第11項所述之有機電子裝置，其中，該有機電子裝置係為一有機發光裝置，其包括：該第一電

極；該第二電極；以及一層或多層有機材料層，其係插置於該第一電極及該第二電極之間；其中，該一層或多層有機材料層包括該雜環化合物。

14. 如申請專利範圍第13項所述之有機電子裝置，其中，該有機材料層包括一電洞注入層或一電洞傳輸層，其係包含該雜環化合物。

15. 如申請專利範圍第13項所述之有機電子裝置，其中，該有機材料層包括一發光層，且該發光層包含作為主發光體之該雜環化合物。

16. 如申請專利範圍第13項所述之有機電子裝置，其中，該有機材料層包括一電子傳輸層，且該電子傳輸層包含該雜環化合物。

17. 如申請專利範圍第13項所述之有機電子裝置，其中，除了包含該雜環化合物之該有機材料層，該有機材料層包括一電洞注入層或一電洞傳輸層，其包含芳胺基、咪唑基或苯並咪唑基。

18. 如申請專利範圍第13項所述之有機電子裝置，其中，該包含該雜環化合物之有機材料層包括該作為主發光體之該雜環化合物，且包括其他作為摻雜劑之有機化合物、金屬或金屬化合物。

19. 如申請專利範圍第11項所述之有機電子裝置，其中，該有機電子裝置係為一有機太陽能電池，其包括：該第一電極；該第二電極；以及一層或多層有機材料層，其包括

一光敏層且插置於該第一電極及該第二電極之間；其中，該一層或多層有機材料層包括該雜環化合物。

20. 如申請專利範圍第19項所述之有機電子裝置，其中，該有機材料層包括一包含該雜環化合物之電子傳輸層。

21. 如申請專利範圍第19項所述之有機電子裝置，其中，該有機材料層包括一包含該雜環化合物之光敏層。

22. 如申請專利範圍第19項所述之有機電子裝置，其中，該有機材料層包括一電子施體及一電子受體，該電子施體或該電子受體包括該雜環化合物。

23. 如申請專利範圍第11項所述之有機電子裝置，其中，該有機電子裝置係為一有機電晶體，其包括：一源極；一汲極；一閘極；以及一層或多層有機材料層；其中，該一層或多層有機材料層包括該雜環化合物。

24. 如申請專利範圍第23項所述之有機電子裝置，其中，該有機材料層包括一包含該雜環化合物之電荷產生層。

圖式

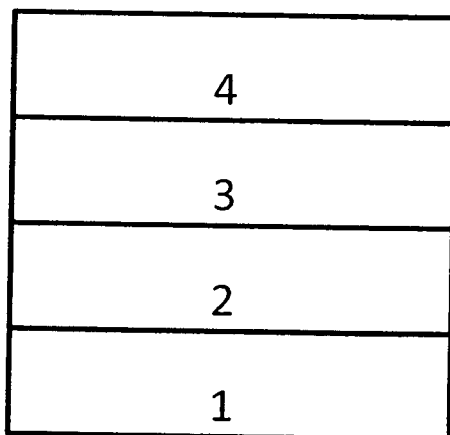


圖 1

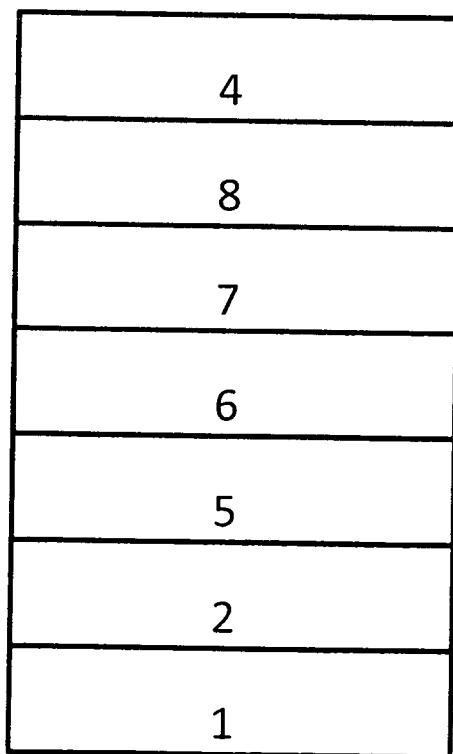


圖 2