



(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 I639609 B

(45)公告日：中華民國 107 (2018) 年 11 月 01 日

(21)申請案號：105124877

(22)申請日：中華民國 101 (2012) 年 05 月 25 日

(51)Int. Cl. : *C07F15/00 (2006.01)* *C07D213/89 (2006.01)*
C09K11/06 (2006.01) *H01L51/50 (2006.01)*
H05B33/14 (2006.01)

(30)優先權：2011/05/27 美國 61/572,276

(71)申請人：環球展覽公司 (美國) UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION (US)
美國(72)發明人：蔡久宜 TSAI, JUI YI (TW)；夏傳軍 XIA, CHUANJUN (CN)；艾榭納維 傑納柏
ELSHENAWY, ZEINAB (US)；安沙理 耐斯林 ANSARI, NASRIN (US)；艾里
伯特 ALLEYNE, BERT (US)

(74)代理人：陳長文

(56)參考文獻：

TW 201100384A

審查人員：魏鳳鳳

申請專利範圍項數：33 項 圖式數：3 共 87 頁

(54)名稱

用於有機發光裝置之高效能黃光發射器

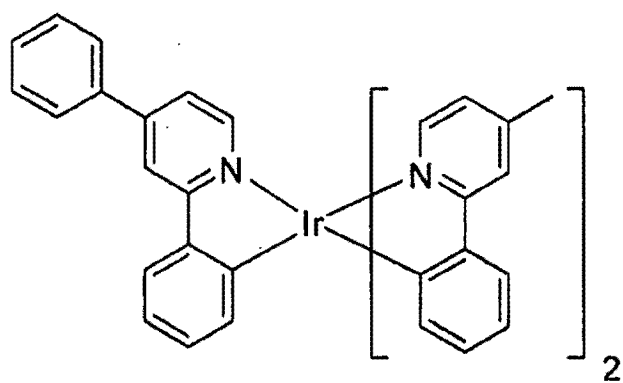
HIGH EFFICIENCY YELLOW LIGHT EMITTERS FOR OLED DEVICES

(57)摘要

本發明闡述新穎的雜配位銦錯合物。該等銦化合物含有經烷基取代之苯基吡啶配位體，當將該等銦錯合物納入 OLED 裝置中時，其向該等化合物提供有益性質。

Novel heteroleptic iridium complexes are described. These iridium compounds contain alkyl substituted phenylpyridine ligands, which provide these compounds with beneficial properties when the iridium complexes are incorporated into OLED devices.

指定代表圖：

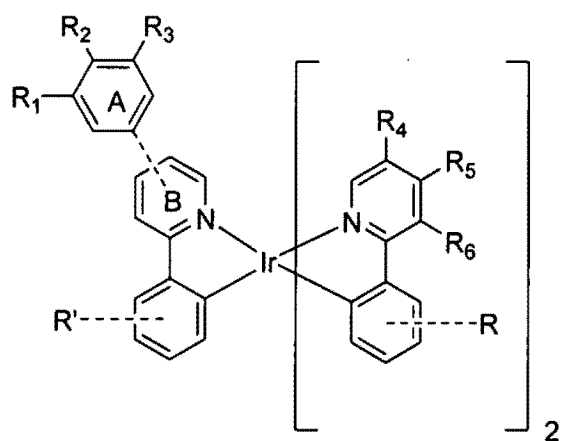


化合物 2

式I

圖 3

特徵化學式：



※ 申請案號：105124877 (由 101118829 合署)

※ 申請日：101.5.25

※ IPC 分類：C07F 15/00, C07D 213/89
C09K 11/06, H01L 51/50,
H05B 33/14

【發明名稱】

用於有機發光裝置之高效能黃光發射器

HIGH EFFICIENCY YELLOW LIGHT EMITTERS FOR OLED
DEVICES

【中文】

本發明闡述新穎的雜配位銱錯合物。該等銱化合物含有經烷基取代之苯基吡啶配位體，當將該等銱錯合物納入OLED裝置中時，其向該等化合物提供有益性質。

【英文】

Novel heteroleptic iridium complexes are described. These iridium compounds contain alkyl substituted phenylpyridine ligands, which provide these compounds with beneficial properties when the iridium complexes are incorporated into OLED devices.

圖式

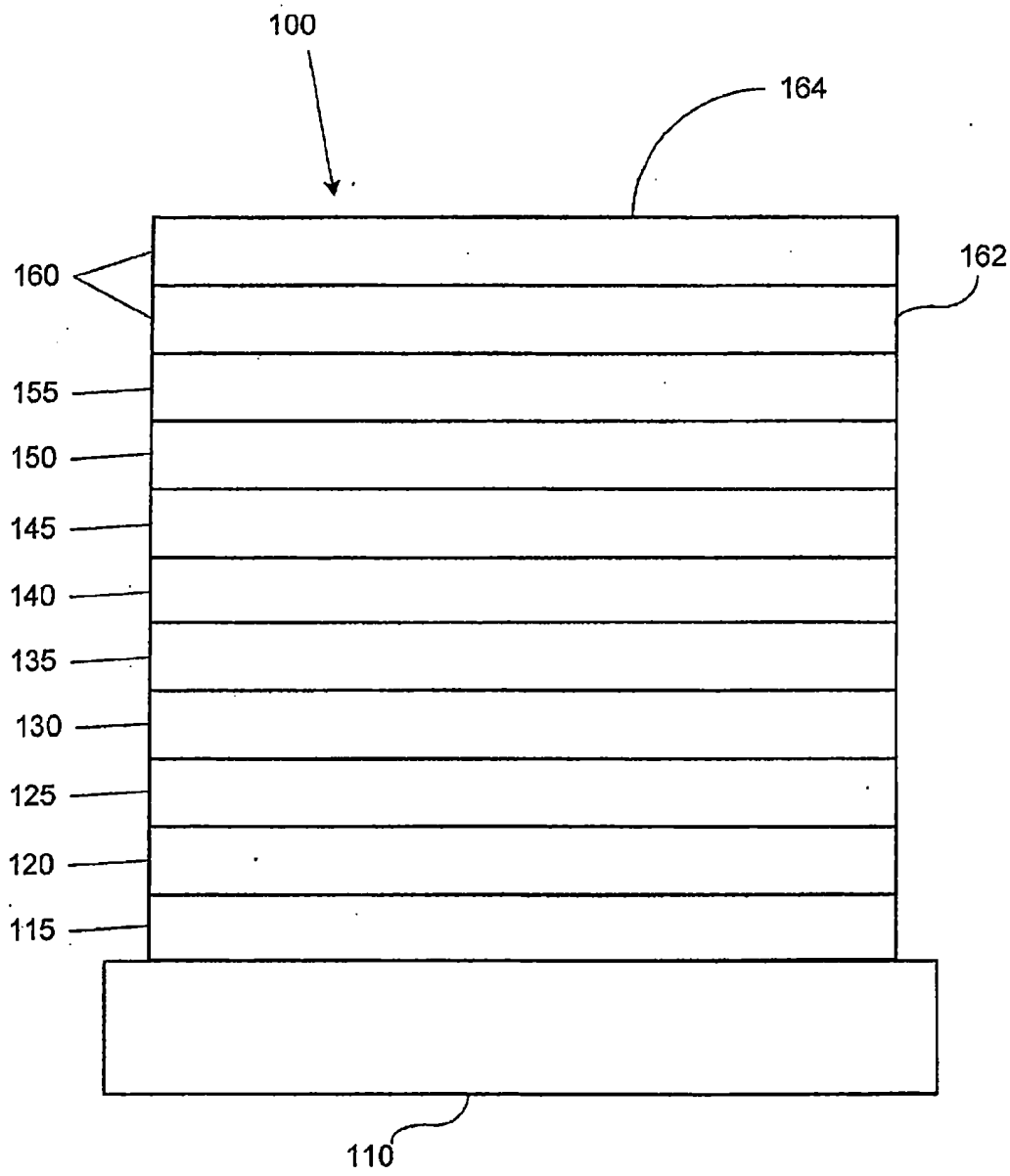


圖 1

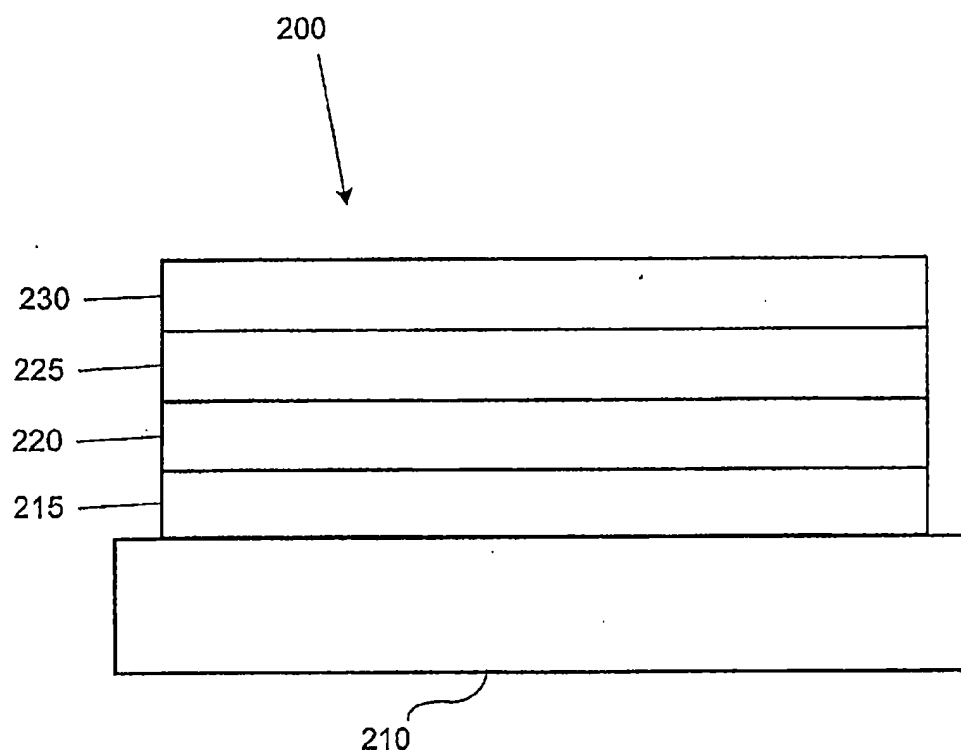
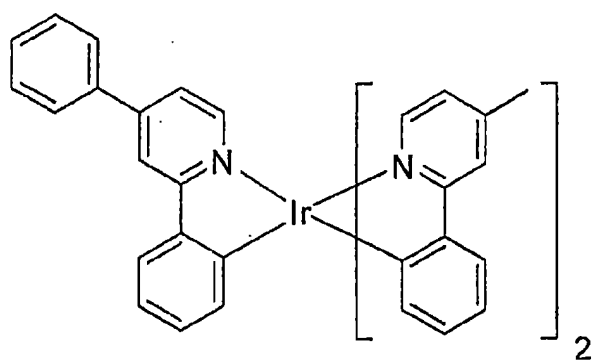


圖 2



化合物 2

式I

圖 3

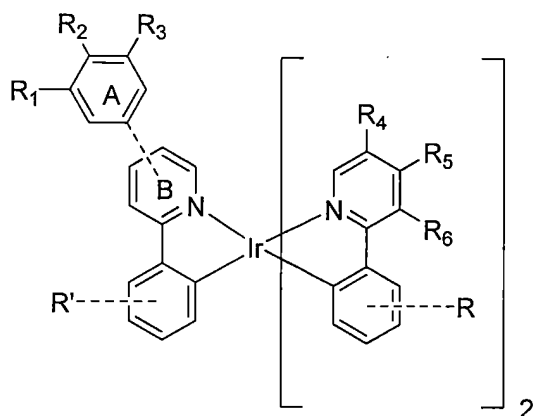
【代表圖】

【本案指定代表圖】：第（3）圖。

【本代表圖之符號簡單說明】：

無

【本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式】：



發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動)

【發明名稱】

用於有機發光裝置之高效能黃光發射器

HIGH EFFICIENCY YELLOW LIGHT EMITTERS FOR OLED
DEVICES

【技術領域】

本發明係關於含有苯基吡啶配位體之雜配位銻錯合物。該等雜配位銻錯合物在OLED裝置中係用作摻雜劑。

本申請案主張對2011年5月27日申請之美國申請案第61/572,276號之優先權，其揭示內容以引用的方式明確全文併入本文中。

所主張之發明係由聯合大學協作研究協定之以下各方中之一方或多方、代表其及/或結合其來完成：密歇根大學校董會(Regents of the University of Michigan)、普林斯頓大學(Princeton University)、南加州大學(The University of Southern California)及Universal Display公司。該協定在作出所主張之發明之日期時及其之前有效，且所主張之發明係作為在該協定之範疇內所採取之活動的結果而作出。

【先前技術】

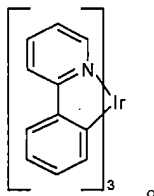
由於多種原因，使用有機材料之光電子裝置變得愈加合意。用於製造該等裝置之許多材料價格相對較低廉，故有機光電子裝置較無機裝置具有成本優勢之潛力。此外，有機材料之固有性質(例如其撓性)使其極適用於特定應用，例如於撓性基板上之製造。有機光電子裝置之實例包括有機發光裝置(OLED)、有機光電晶體、有機光伏電池及有機光檢測器。對於OLED，有機材料可具有優於習用材料之性能優勢。例如，有機發射層所發射光之波長通常可容易地用適當摻

雜劑來調諧。

OLED使用當在裝置兩端施加電壓時發光之薄有機膜。OLED正變成在諸如平板顯示器、照明及背光等應用中使用之愈加令人感興趣之技術。若干OLED材料及組態係闡述於美國專利第5,844,363號、第6,303,238號及第5,707,745號中，其以引用的方式全文併入本文中。

磷光發射分子之一種應用係全色彩顯示器。此一顯示器之工業標準要求適於發射特定色彩(稱為「飽和」色彩)之像素。特定而言，此等標準要求飽和紅色、綠色及藍色像素。色彩可使用CIE座標量測，其為業內所熟知。

綠色發射分子之一實例係叁(2-苯基吡啶)銱(表示為Ir(ppy)₃)，其具有以下結構：



在此圖及本文隨後圖中，吾人將自氮至金屬(此處為Ir)之配位鍵繪示為直線。

本文所用術語「有機」包括可用於製造有機光電子裝置之聚合物材料以及小分子有機材料。「小分子」係指任一不為聚合物之有機材料，且「小分子」實際上可相當大。在一些情況下，小分子可包括重複單元。例如，使用長鏈烷基作為取代基不會將分子排除在「小分子」類別外。小分子亦可納入聚合物中，例如作為聚合物主鏈上之側基或作為主鏈之一部分。小分子亦可充當樹枝狀聚合物之核心部分，該樹枝狀聚合物係由一系列化學殼層構築於核心部分上組成。樹枝狀聚合物之核心部分可為螢光或磷光小分子發射器。樹枝狀聚合物可為

「小分子」，且據信當前用於OLED領域之所有樹枝狀聚合物均為小分子。

本文所用「頂部」意指距基板最遠處，而「底部」意指最靠近基板處。當第一層闡述為「安置於」第二層之上時，則第一層係遠離基板而安置。除非指明第一層與第二層「接觸」，否則在第一層與第二層之間可存在其他層。例如，陰極可闡述為「安置於」陽極之上，即使其間存在各種有機層。

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

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

如本文所用且如熟習此項技術者通常所理解，若第一「最高佔據分子軌道」(HOMO)或「最低未佔據分子軌道」(LUMO)能階更接近真空能階，則該第一能階「大於」或「高於」第二HOMO或LUMO能階。由於電離電位(IP)係量測為相對於真空能階之負能量，故較高HOMO能階對應於具有較小絕對值之IP(負性較低之IP)。類似地，較高LUMO能階對應於具有較小絕對值之電子親和力(EA)(負性較低之EA)。在真空能階位於頂部之習用能階圖上，材料之LUMO能階高於同一材料之HOMO能階。「更高」HOMO或LUMO能階似乎較「更低」HOMO或LUMO能階更接近此一圖之頂部。

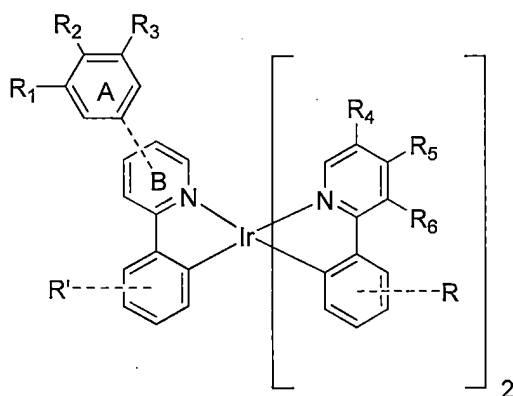
如本文所用且如熟習此項技術者通常所理解，若第一功函數具有較高絕對值，則該第一功函數「大於」或「高於」第二功函數。因功函數通常係量測為相對於真空能階之負數，故此意指功函數「愈高」則負性愈高。在真空能階位於頂部之習用能階圖上，「較高」功

函數係圖解說明為沿向下方向遠離真空能階。因此，HOMO及LUMO能階之定義遵循不同於功函數之慣例。

關於OLED及上述定義之更多細節可參見美國專利第7,279,704號，其以引用的方式全文併入本文中。

【發明內容】

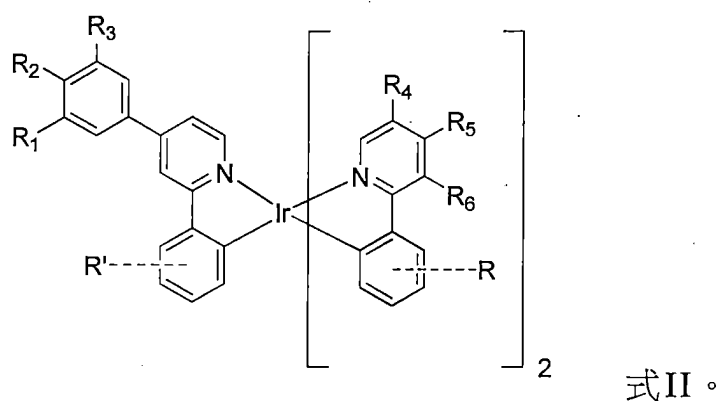
提供包含雜配位銥錯合物之化合物。在一態樣中，該化合物係式I化合物。



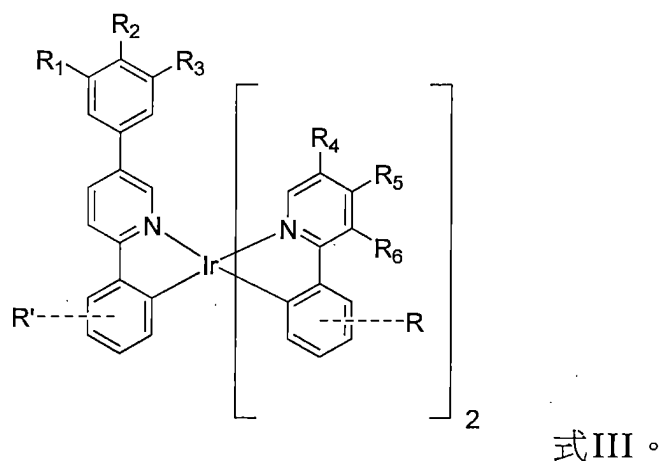
式I；

在式I化合物中， R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 係獨立地選自由氫、氘、環烷基、氘化環烷基、烷基及氘化烷基組成之群。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 中之至少一者係環烷基、氘化環烷基、烷基或氘化烷基，且任何兩個相鄰 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 視情況連接在一起以形成環。環A係附接至環B之4位或5位。 R 及 R' 代表單取代、二取代、三取代或四取代，且係獨立地選自由以下組成之群：氫、氘、鹵基、烷基、環烷基、雜烷基、芳基烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、甲矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸基、酯基、腈基、異腈基、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

在一態樣中，該化合物係式II化合物。



在另一態樣中，該化合物係式III化合物。



在一態樣中， R_1 係烷基。在一態樣中， R_2 係烷基。在一態樣中， R_3 係烷基。在一態樣中， R_4 係烷基。在一態樣中， R_5 係烷基。在一態樣中， R_6 係烷基。在一態樣中， R_1 、 R_2 及 R_3 中之至少一者係烷基。在一態樣中， R_4 、 R_5 及 R_6 中之至少一者係烷基。在另一態樣中， R_1 、 R_2 及 R_3 中之至少一者係烷基且 R_4 、 R_5 及 R_6 中之至少一者係烷基。

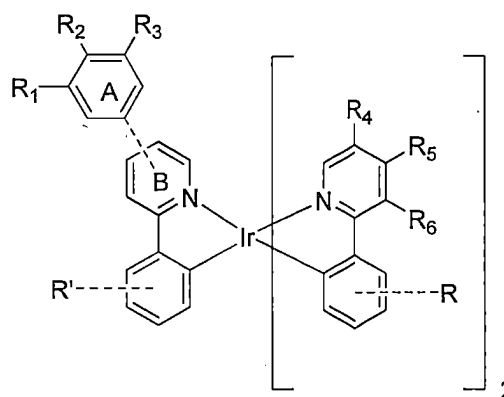
在一態樣中，烷基含有至少2個碳、至少3個碳或最多6個碳。在另一態樣中，烷基含有大於10個碳。

在一態樣中，該化合物發射如下黃光：當該光具有介於約530 nm至約580 nm之間之峰值波長時，其半峰全幅值介於約70 nm至約110 nm之間。

提供具體非限制性化合物。在一態樣中，該化合物係選自化合

物1至化合物89。

在一態樣中，提供第一裝置。該第一裝置包含第一有機發光裝置，且含有陽極、陰極及有機層，該有機層安置於該陽極與該陰極之間且包含具有式I之式之化合物：



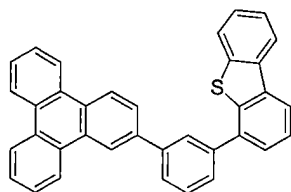
式I。

在式I化合物中， R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 係獨立地選自由氫、氘、環烷基、氘化環烷基、烷基及氘化烷基組成之群。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 中之至少一者係環烷基、氘化環烷基、烷基或氘化烷基，且任何兩個相鄰 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 視情況連接在一起以形成環。環A係附接至環B之4位或5位。 R 及 R' 代表單取代、二取代、三取代或四取代，且係獨立地選自由以下組成之群：氫、氘、鹵基、烷基、環烷基、雜烷基、芳基烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、甲矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸基、酯基、腈基、異腈基、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

在一態樣中，該有機層係發射層且該化合物係發射摻雜劑。在另一態樣中，該有機層係發射層且該化合物係非發射摻雜劑。

在另一態樣中，該有機層進一步包含主體。在一態樣中，該主體包含含有聯三伸苯之苯并稠合噻吩或苯并稠合呋喃，其中該主體中之任一取代基係獨立地選自由以下組成之群之未經稠合取代基：

C_nH_{2n+1} 、 OC_nH_{2n+1} 、 OAr_1 、 $N(C_nH_{2n+1})_2$ 、 $N(Ar_1)(Ar_2)$ 、 $CH=CH-C_nH_{2n+1}$ 、 $C\equiv CHC_nH_{2n+1}$ 、 Ar_1 、 Ar_1-Ar_2 、 $C_nH_{2n}-Ar_1$ ，或未經取代。 Ar_1 及 Ar_2 係獨立地選自由苯、聯苯、萘、聯三伸苯、呋啞及其雜芳香族類似物組成之群，且 n 係自1至10。在一態樣中，該主體具有下式：



化合物 1H。

在一態樣中，該主體係金屬錯合物。

在另一態樣中，該第一裝置係消費產品。在一態樣中，該第一裝置係有機發光裝置。在另一態樣中，該第一裝置包含發光面板。

在一態樣中，該第一裝置進一步包含峰值波長介於400奈米至500奈米之間之第二發射摻雜劑。在一態樣中，該第二發射摻雜劑係螢光發射器。在另一態樣中，該第二發射摻雜劑係磷光發射器。

在一態樣中，該第一裝置進一步包含第一有機發光裝置及與該第一有機發光裝置分開之第二發光裝置，該第一有機發光裝置包含式I化合物，該第二發光裝置包含峰值波長介於400奈米至500奈米之間之發射摻雜劑。在另一態樣中，該第一裝置包含具有第一發射層及第二發射層之有機發光裝置，該第一發射層包含式I化合物，該第二發射層包含峰值波長介於400奈米至500奈米之間之發射摻雜劑。

【圖式簡單說明】

圖1顯示有機發光裝置。

圖2顯示不具有單獨電子傳輸層之倒置有機發光裝置。

圖3顯示式I化合物。

【實施方式】

通常，OLED包含至少一個安置於陽極與陰極之間且與其電連接

之有機層。當施加電流時，陽極將電洞注入有機層中，且陰極將電子注入有機層中。所注入電洞及電子各自朝向帶相反電荷之電極遷移。在電子與電洞位於同一分子上時，形成「激子」，其係具有激發態之定域電子-電洞對。當激子經由光電發射機制弛豫時，發射光。在一些情形中，激子可定位於準分子或激基複合物上。亦可存在非輻射機制(例如熱弛豫)，但通常認為其不合意。

初始OLED使用自其單重態發光(「螢光」)之發射分子，如(例如)美國專利第4,769,292號中所揭示，其以引用的方式全文併入。螢光發射通常在小於10奈秒之時段內發生。

最近，已證實具有自三重態發光(「磷光」)之發射材料之OLED。Baldo等人，「Highly Efficient Phosphorescent Emission from Organic Electroluminescent Devices」，Nature，第395卷，151-154，1998；(「Baldo-I」)及Baldo等人，「Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence」，Appl. Phys. Lett.，第75卷，第3期，4-6 (1999) (「Baldo-II」)，其以引用的方式全文併入。磷光係更詳細地闡述於美國專利第7,279,704號之第5行至第6行中，其以引用的方式併入。

圖1顯示有機發光裝置100。該等圖式不必按比例繪製。裝置100可包括基板110、陽極115、電洞注入層120、電洞傳輸層125、電子阻擋層130、發射層135、電洞阻擋層140、電子傳輸層145、電子注入層150、保護層155及陰極160。陰極160係具有第一導電層162及第二導電層164之複合陰極。裝置100可藉由依序沈積所述各層來製作。該等各種層之性質及功能以及實例材料係更詳細地闡述於US 7,279,704之第6行至第10行中，其以引用的方式併入。

可利用該等層中每一者之更多實例。例如，撓性及透明基板-陽極組合係揭示於美國專利第5,844,363號中，其以引用的方式全文併

入。p摻雜電洞傳輸層之實例係經F₄-TCNQ以50:1之莫耳比摻雜之m-MTDATA，如美國專利申請公開案第2003/0230980號中所揭示，其以引用的方式全文併入。發射及主體材料之實例係揭示於頒予Thompson等人之美國專利第6,303,238號中，其以引用的方式全文併入。n摻雜電子傳輸層之實例係經Li以1:1之莫耳比摻雜之BPhen，如美國專利申請公開案第2003/0230980號中所揭示，其以引用的方式全文併入。美國專利第5,703,436號及第5,707,745號(其以引用的方式全文併入)揭示陰極實例，其包括具有薄金屬層(例如Mg:Ag)與上覆透明導電、濺鍍沈積之ITO層之複合陰極。阻擋層之理論及用途係更詳細地闡述於美國專利第6,097,147號及美國專利申請公開案第2003/0230980號中，其以引用的方式全文併入。注入層之實例係提供於美國專利申請公開案第2004/0174116號中，其以引用的方式全文併入。保護層之闡述可參見美國專利申請公開案第2004/0174116號，其以引用的方式全文併入。

圖2顯示倒置OLED 200。該裝置包括基板210、陰極215、發射層220、電洞傳輸層225及陽極230。裝置200可藉由依序沈積所述各層來製作。由於最常用之OLED組態具有安置於陽極上之陰極，且裝置200具有安置於陽極230下之陰極215，故裝置200可稱為「倒置」OLED。與彼等參照裝置100所闡述者類似之材料可用於裝置200之相應層中。圖2提供一個如何自裝置100之結構省略一些層之實例。

以非限制性實例之方式提供圖1及2中所圖解說明之簡單分層結構，且應理解，本發明實施例可與眾多種其他結構結合使用。所述具體材料及結構實際上係例示性的，且亦可使用其他材料及結構。基於設計、性能及成本因素，可藉由以不同方式組合所述各種層來達成功能OLED，或可完全省略多個層。亦可包括未具體闡述之其他層。可使用除彼等具體闡述材料以外之材料。儘管本文所提供之許多實例闡

述各種層為包含單一材料，但應理解，可使用材料之組合(例如主體與摻雜劑之混合物)，或更通常可使用混合物。此外，該等層可具有各種子層。本文中給定用於各種層之名稱不意欲具有嚴格限制性。例如，在裝置200中，電洞傳輸層225傳輸電洞並將電洞注入發射層220中，且可闡述為電洞傳輸層或電洞注入層。在一實施例中，OLED可闡述為具有安置於陰極與陽極之間之「有機層」。該有機層可包含單層，或可進一步包含(例如)參照圖1及2所述之不同有機材料之多個層。

亦可使用未具體闡述之結構及材料，例如由聚合物材料組成之OLED，例如頒予Friend等人之美國專利第5,247,190號中所揭示者，其以引用的方式全文併入。進一步舉例而言，可使用具有單一有機層之OLED。OLED可經堆疊，例如頒予Forrest等人之美國專利第5,707,745號中所述者，其以引用的方式全文併入。OLED結構可不同於圖1及2中所圖解說明之簡單分層結構。例如，基板可包括成角度之反射表面以改良輸出耦合，例如頒予Forrest等人之美國專利第6,091,195號中所述之臺面結構及/或頒予Bulovic等人之美國專利第5,834,893號中所述之凹坑結構，其以引用之方式全文併入。

除非另有說明，否則各種實施例之任何層均可藉由任一適宜方法來沈積。對於有機層，較佳方法包括熱蒸發、噴墨(例如在美國專利第6,013,982號及第6,087,196號中所述者，其以引用的方式全文併入)、有機氣相沈積(OVPD)(例如頒予Forrest等人之美國專利第6,337,102號中所述者，其以引用的方式全文併入)及藉由有機蒸氣噴射印刷(OVJP)沈積(例如在美國專利申請案第10/233,470號中所述者，其以引用的方式全文併入)。其他適宜沈積方法包括旋轉塗佈及其他基於溶液之製程。基於溶液之製程較佳於氬氣或惰性氣氛中實施。對於其他層，較佳方法包括熱蒸發。較佳圖案化方法包括經由遮罩沈積、冷焊(例如在美國專利第6,294,398號及第6,468,819號中所述者，

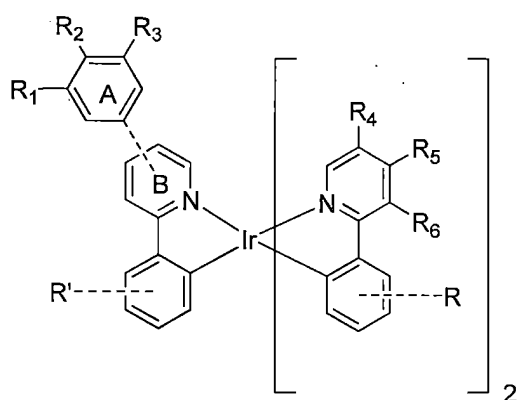
其以引用的方式全文併入)及與一些沈積方法(例如噴墨及OVJD)相關之圖案化。亦可使用其他方法。欲沈積之材料可經改質以使其能適合特定沈積方法。例如，在小分子中可使用諸如具支鏈或無支鏈且較佳含有至少3個碳之烷基及芳基等取代基，以增強其經受溶液處理之能力。可使用具有20個碳或更多個碳之取代基，且3個至20個碳係較佳範圍。具有不對稱結構之材料可較彼等具有對稱結構者具有更佳之溶液可處理性，此乃因不對稱材料可具有更低之重結晶傾向。樹枝狀聚合物取代基可用於增強小分子經受溶液處理之能力。

依照本發明之實施例所製作之裝置可納入眾多種消費產品中，其包括平板顯示器、電腦監測器、電視、廣告牌、內部或外部照明燈及/或信號燈、抬頭顯示器、全透明顯示器、撓性顯示器、雷射印刷機、電話、行動電話、個人數位助理(PDA)、膝上型電腦、數位相機、攝錄影機、取景器、微顯示器、車輛、大面積牆壁、電影院或運動場螢幕或招牌。可使用各種控制機制來控制依照本發明所製作之裝置，其包括被動矩陣及主動矩陣。許多裝置意欲在使人感覺舒適之溫度範圍(例如18攝氏度至30攝氏度)內且更佳在室溫(20攝氏度至25攝氏度)下使用。

本文所述之材料及結構可應用於除OLED以外之裝置中。例如，其他光電子裝置(例如有機太陽能電池及有機光檢測器)可採用該等材料及結構。更一般而言，有機裝置(例如有機電晶體)可採用該等材料及結構。

術語鹵基、鹵素、烷基、環烷基、烯基、炔基、芳烷基、雜環基團、芳基、芳香族基團及雜芳基為業內已知，且係定義於US 7,279,704之第31行至第32行中，其以引用的方式併入本文中。

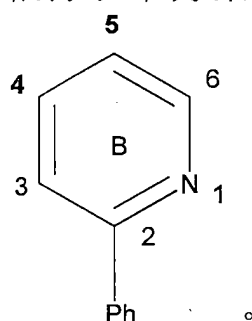
提供包含雜配位銻錯合物之化合物。在一實施例中，該化合物係式I化合物。



式I；

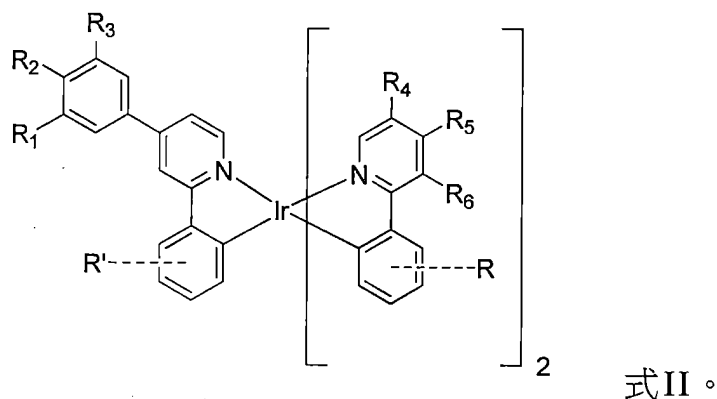
在式I化合物中， R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 係獨立地選自由氫、氘、環烷基、氘化環烷基、烷基及氘化烷基組成之群。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 中之至少一者係環烷基、氘化環烷基、烷基或氘化烷基，且任何兩個相鄰 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 視情況連接在一起以形成環。因此， R_1 及 R_2 、 R_2 及 R_3 、 R_3 及 R_4 、 R_4 及 R_5 或 R_5 及 R_6 中之任一者可連接以形成環。環A係附接至環B之4位或5位。 R 及 R' 代表單取代、二取代、三取代或四取代，且係獨立地選自由以下組成之群：氫、氘、鹵基、烷基、環烷基、雜烷基、芳基烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、甲矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸基、酯基、腈基、異腈基、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

根據以下方案給環B編號：

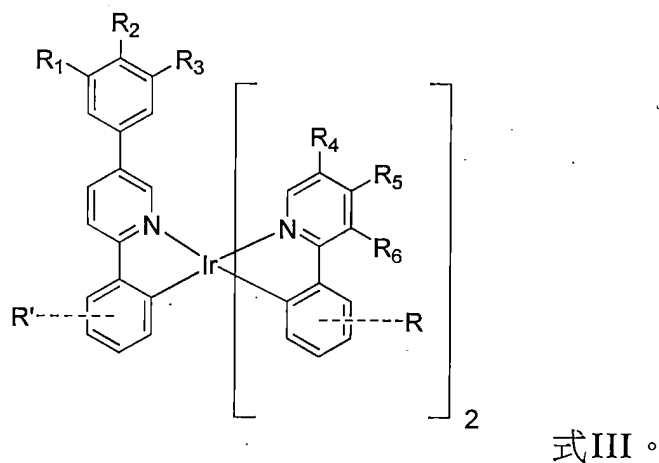


因此，4位係環B中吡啶氮之對位，且5位係環B所附接之苯基環之對位。

在一實施例中，該化合物係式II化合物。



在另一實施例中，該化合物係式III化合物。



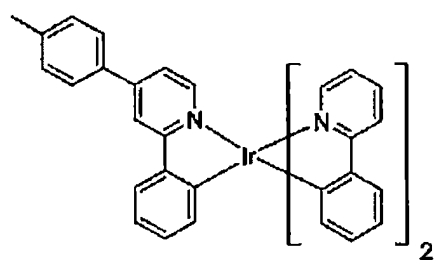
在一實施例中， R_1 係烷基。在一實施例中， R_2 係烷基。在一實施例中， R_3 係烷基。在一實施例中， R_4 係烷基。在一實施例中， R_5 係烷基。在一實施例中， R_6 係烷基。在一實施例中， R_1 、 R_2 及 R_3 中之至少一者係烷基。在一實施例中， R_4 、 R_5 及 R_6 中之至少一者係烷基。在另一實施例中， R_1 、 R_2 及 R_3 中之至少一者係烷基且 R_4 、 R_5 及 R_6 中之至少一者係烷基。在前述實施例中之任一者中，烷基可經氘化烷基部分或完全替代。

在一實施例中，烷基含有至少2個碳、至少3個碳或最多6個碳。具有至少2個碳、至少3個碳或最多6個碳使得式I化合物在光譜之黃色部分中有效發射，而不升高化合物之昇華溫度。升高之昇華溫度可使

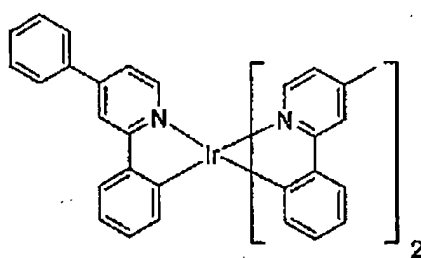
得難以純化化合物。在另一實施例中，烷基含有大於10個碳。具有含有大於10個碳之烷基在式I化合物之溶液處理中係有用的，其使得OLED裝置之製造價格低廉。

在一實施例中，該化合物發射如下黃光：當該光具有介於約530 nm至約580 nm之間之峰值波長時，其半峰全幅值介於約70 nm至約110 nm之間。當式I化合物具有上述範圍之半峰全幅值(FWHM)且伴隨具有上述範圍之峰值波長時，其係具有寬線形狀之有效黃色發射器，此在白光應用中合意。

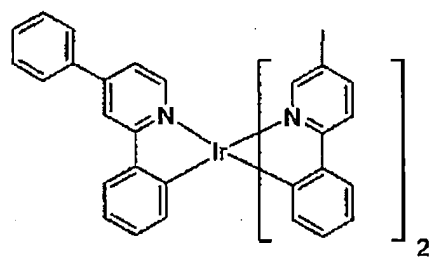
提供具體非限制性化合物。在一實施例中，該化合物係選自由以下組成之群：



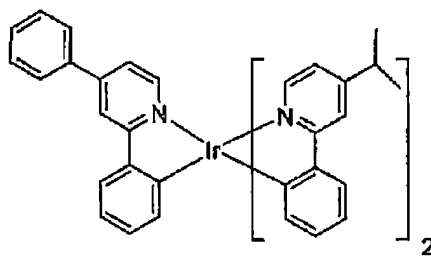
化合物 1



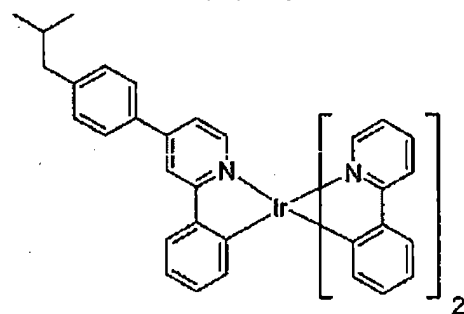
化合物 2



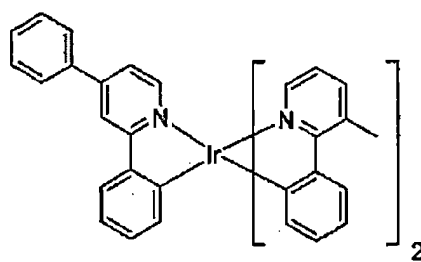
化合物 3



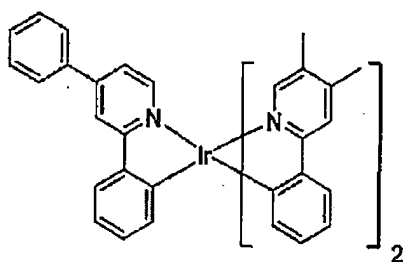
化合物 4



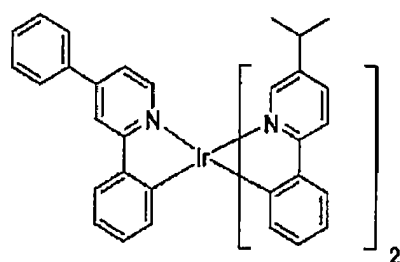
化合物 5



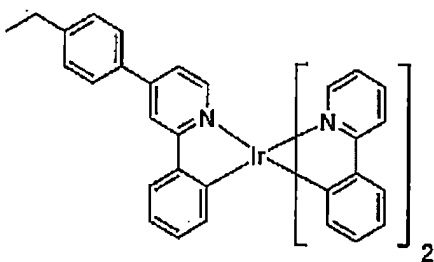
化合物 6



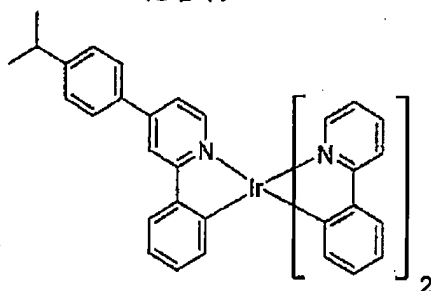
化合物 7



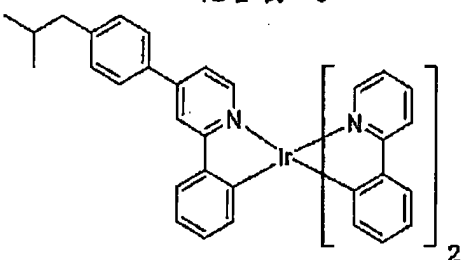
化合物 8



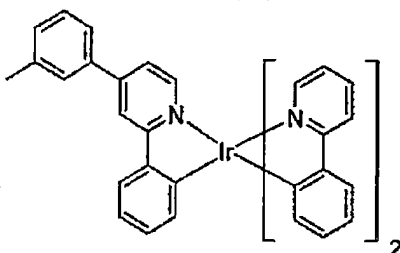
化合物 9



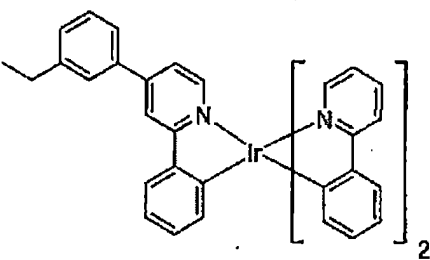
化合物 10



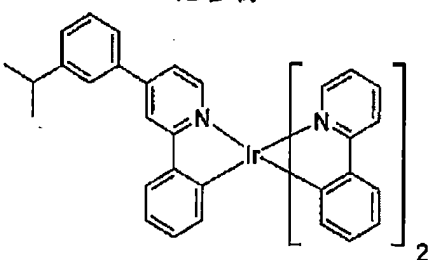
化合物 11



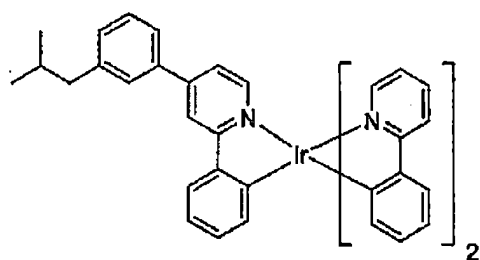
化合物 12



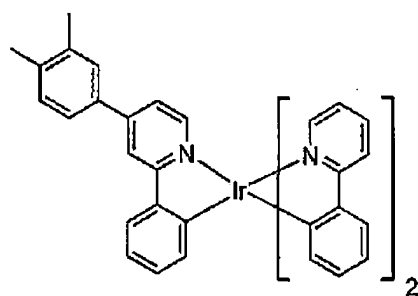
化合物 13



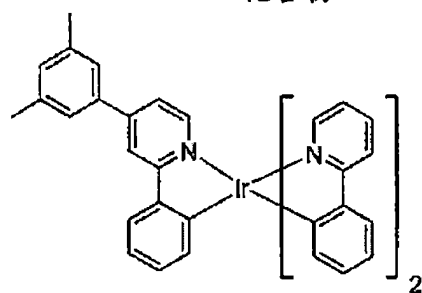
化合物 14



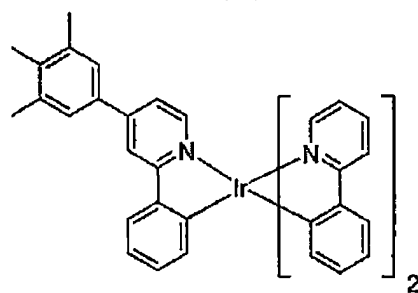
化合物 15



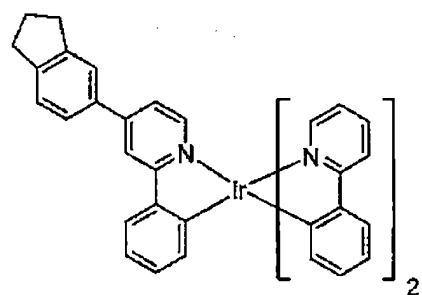
化合物 16



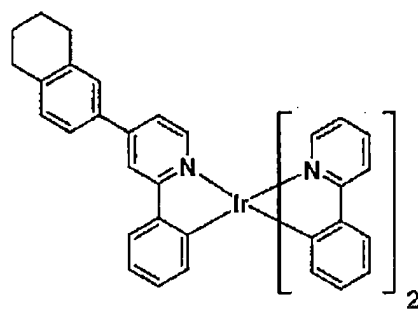
化合物 17



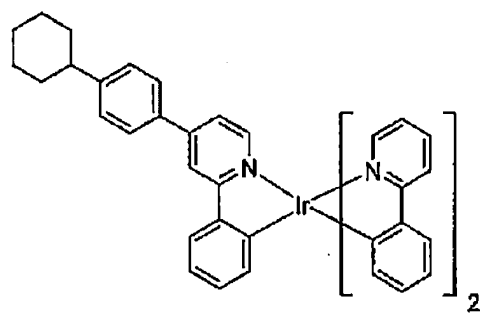
化合物 18



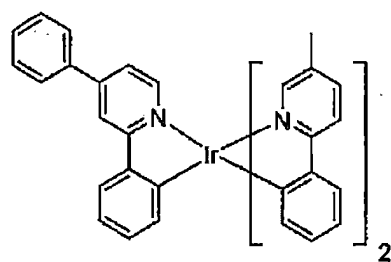
化合物 19



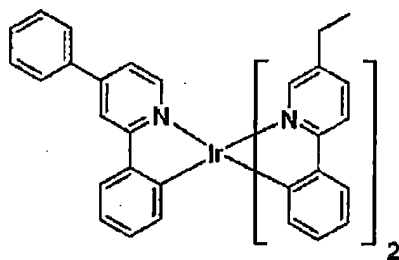
化合物 20



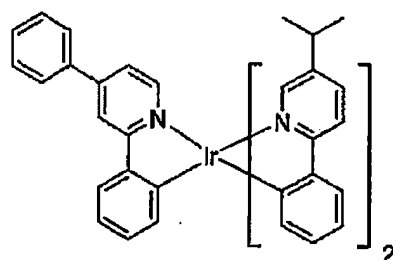
化合物 21



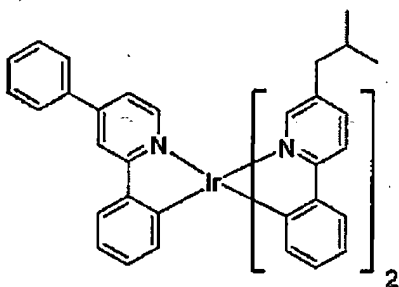
化合物 22



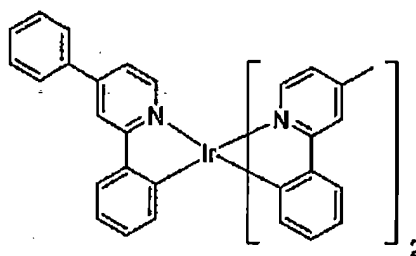
化合物 23



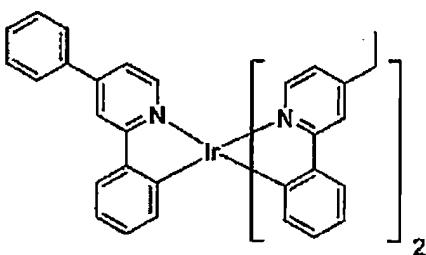
化合物 24



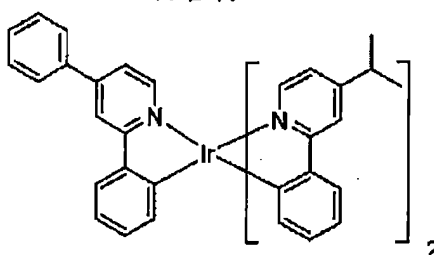
化合物 25



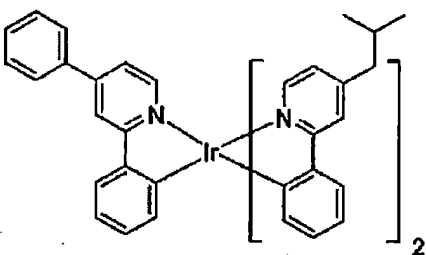
化合物 26



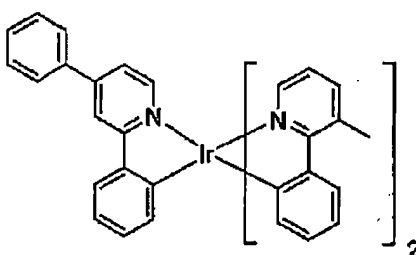
化合物 27



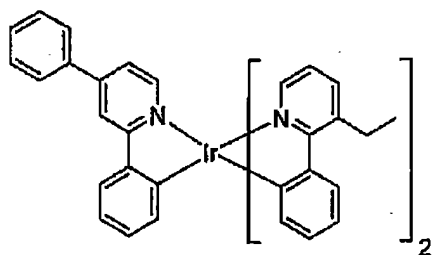
化合物 28



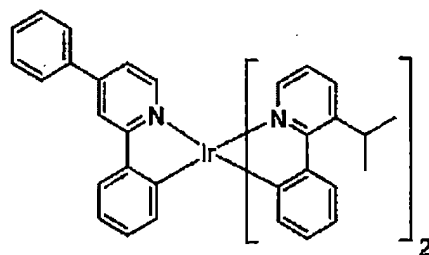
化合物 29



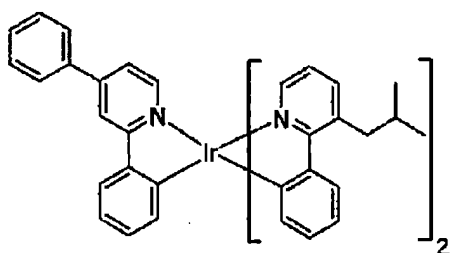
化合物 30



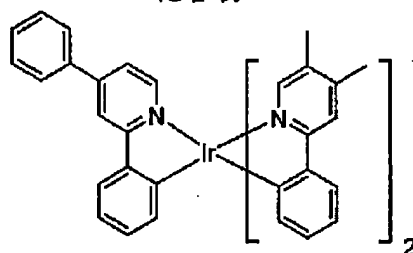
化合物 31



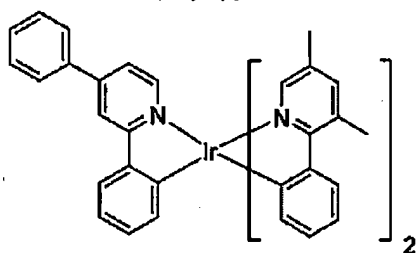
化合物 32



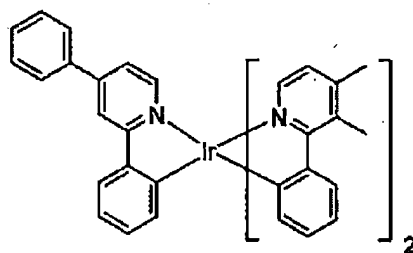
化合物 33



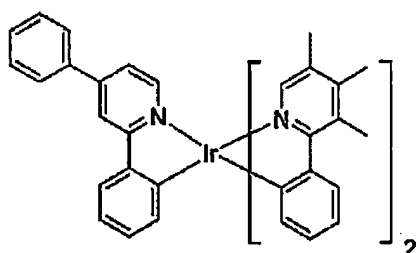
化合物 34



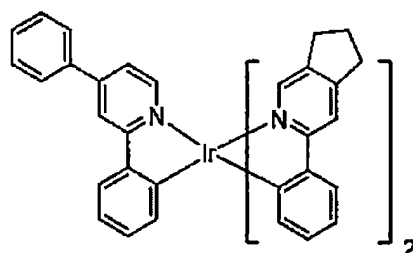
化合物 35



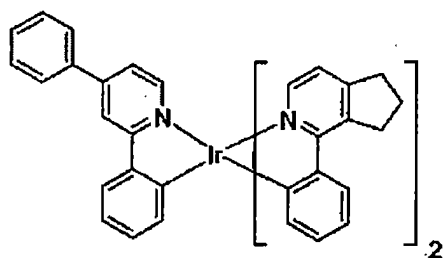
化合物 36



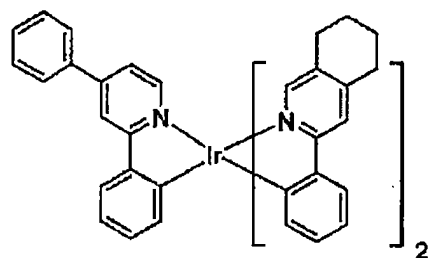
化合物 37



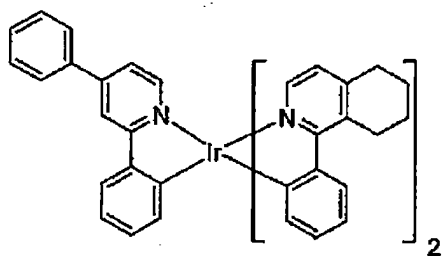
化合物 38



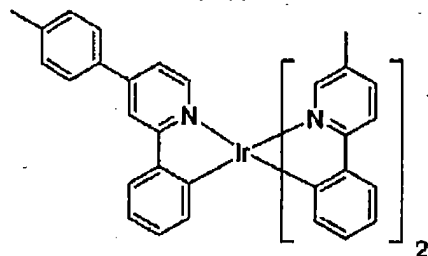
化合物 39



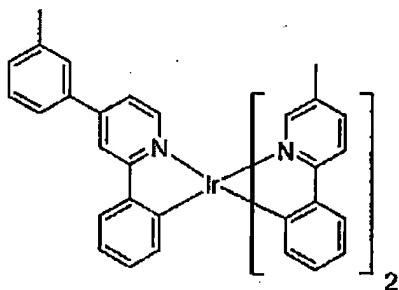
化合物 40



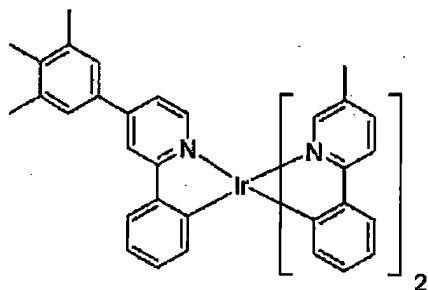
化合物 41



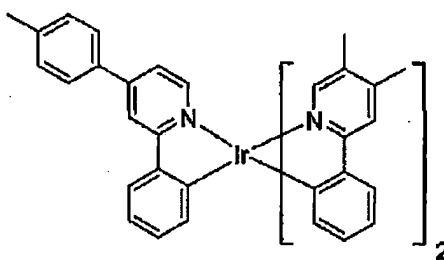
化合物 42



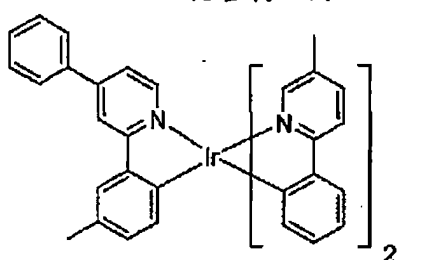
化合物 43



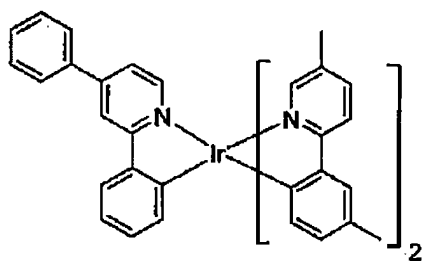
化合物 44



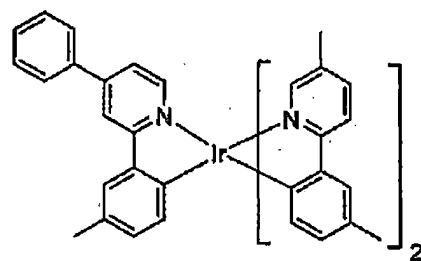
化合物 45



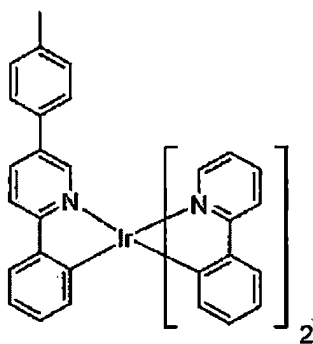
化合物 46



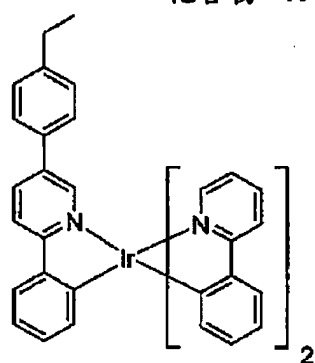
化合物 47



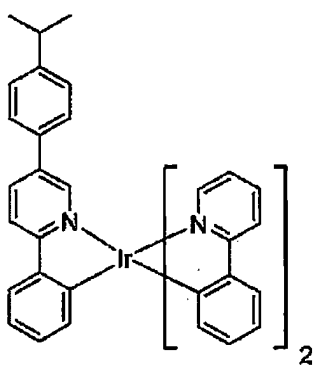
化合物 48



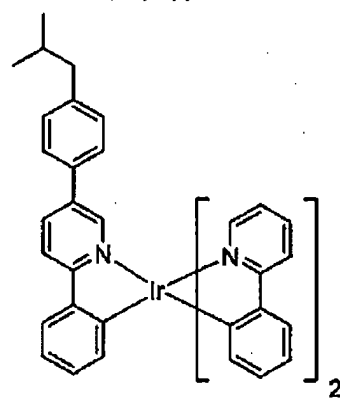
化合物 49



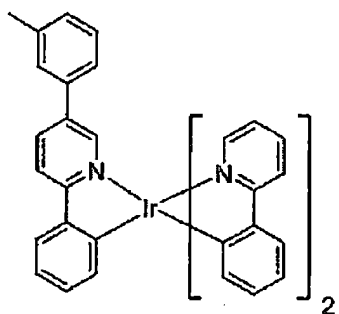
化合物 50



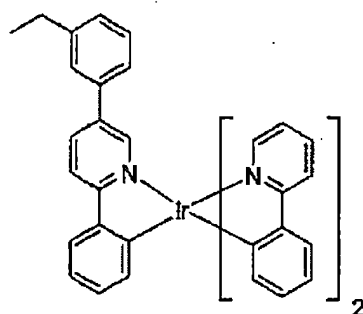
化合物 51



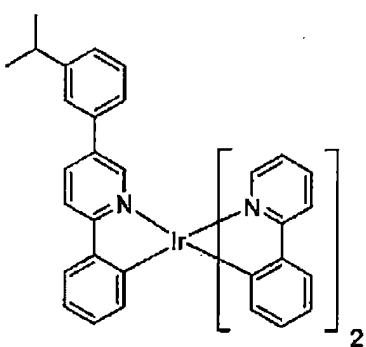
化合物 52



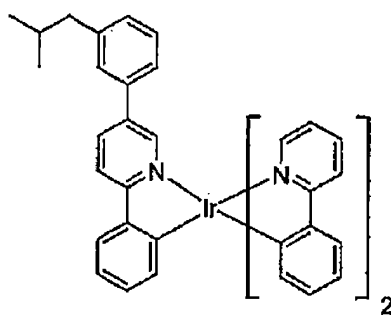
化合物 53



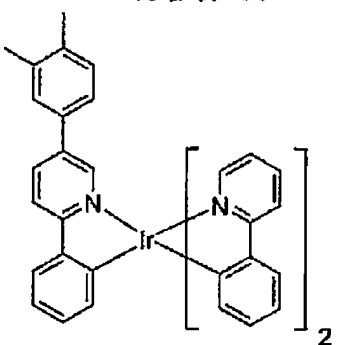
化合物 54



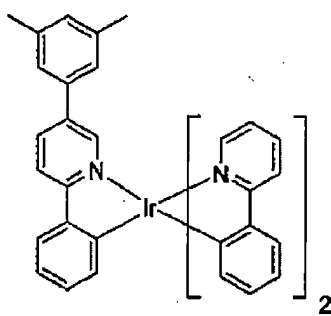
化合物 55



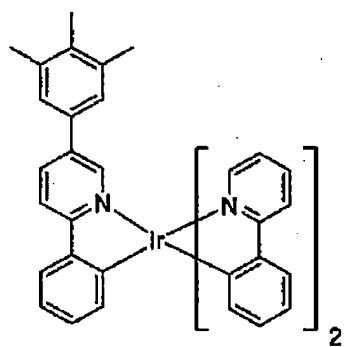
化合物 56



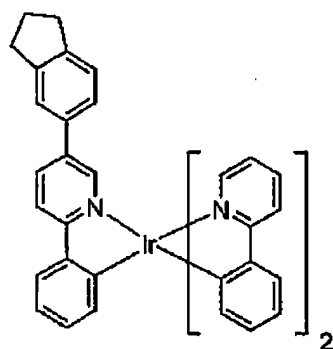
化合物 57



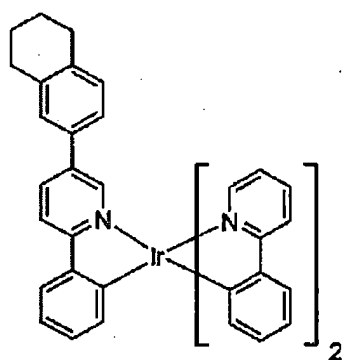
化合物 58



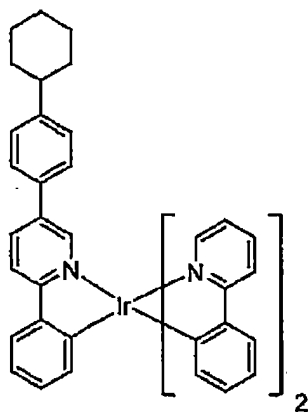
化合物 59



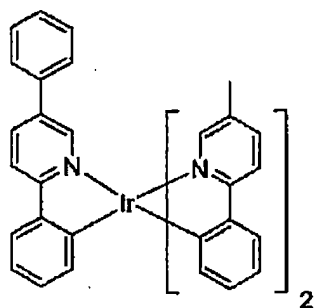
化合物 60



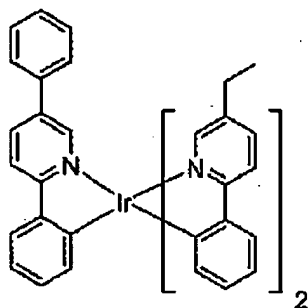
化合物 61



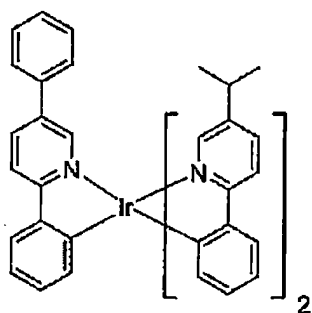
化合物 62



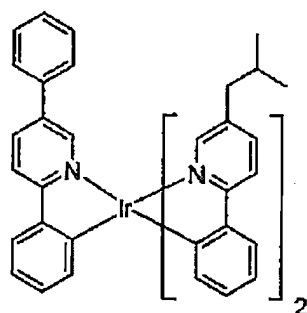
化合物 63



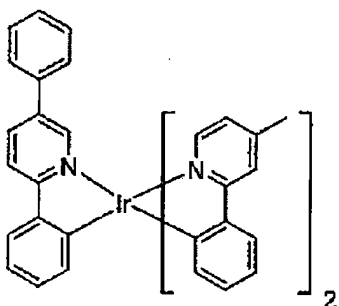
化合物 64



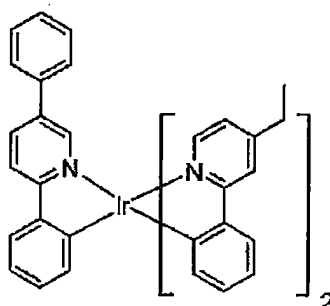
化合物 65



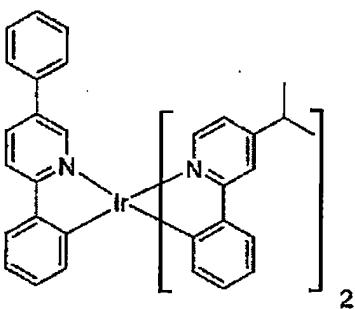
化合物 66



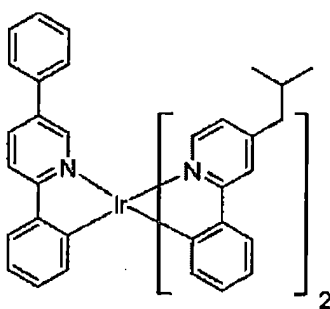
化合物 67



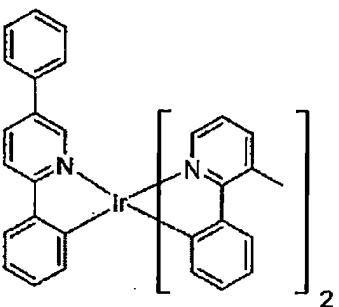
化合物 68



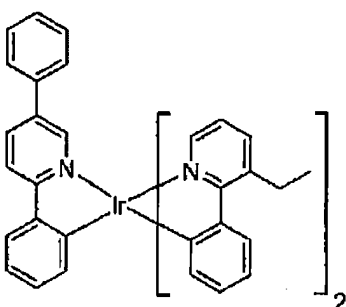
化合物 69



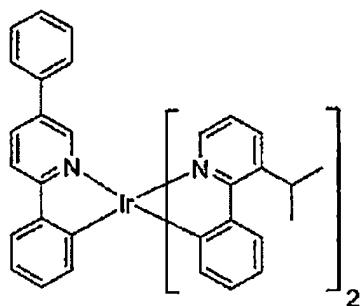
化合物 70



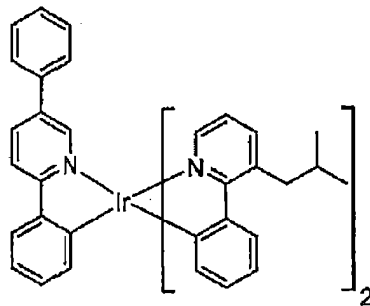
化合物 71



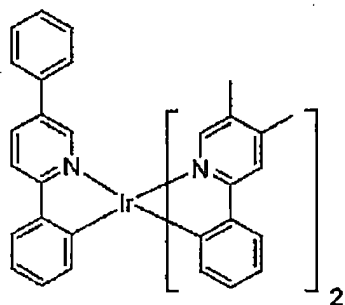
化合物 72



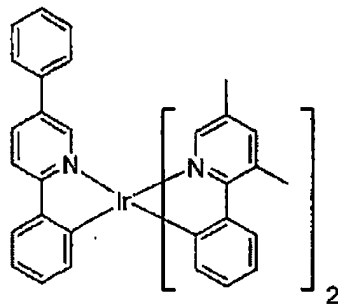
化合物 73



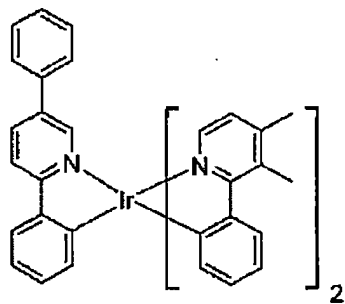
化合物 74



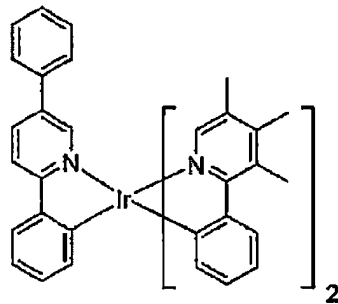
化合物 75



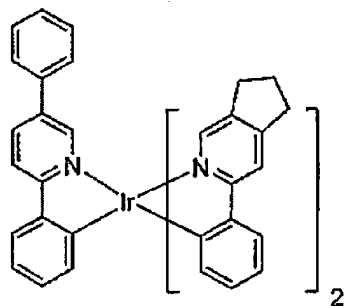
化合物 76



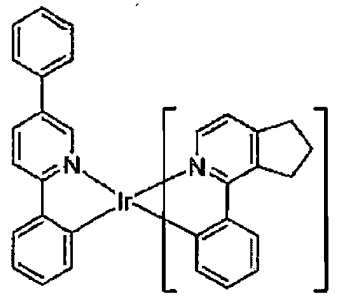
化合物 77



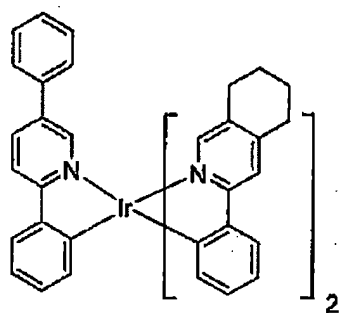
化合物 78



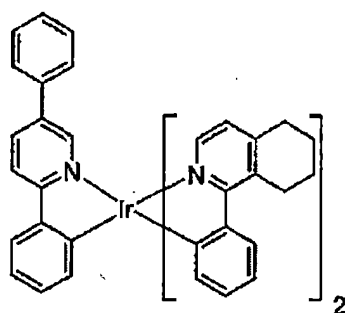
化合物 79



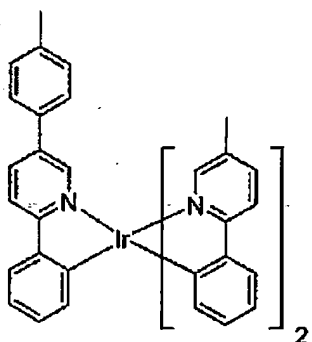
化合物 80



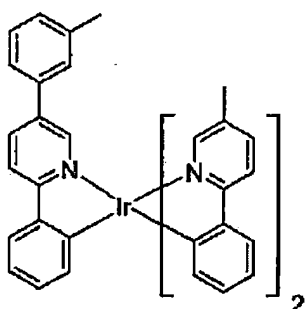
化合物 81



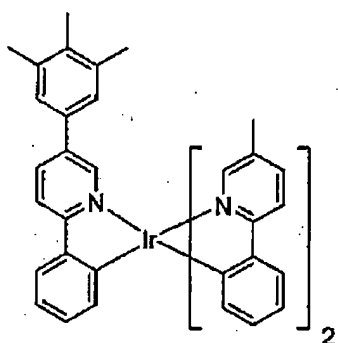
化合物 82



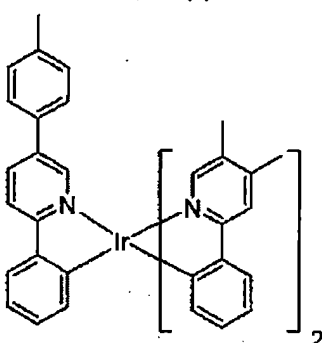
化合物 83



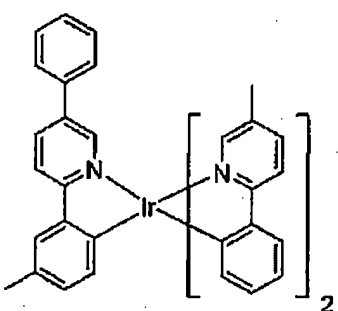
化合物 84



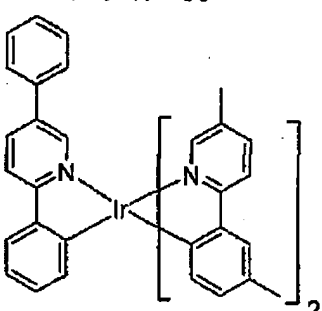
化合物 85



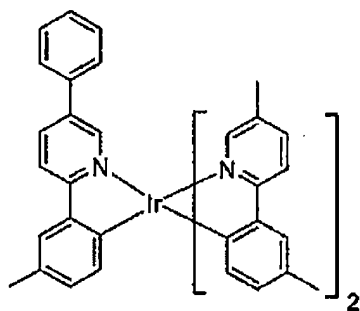
化合物 86



化合物 87

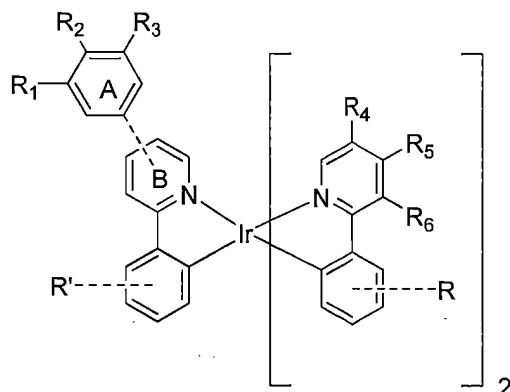


化合物 88



化合物 89

在一實施例中，提供第一裝置。該第一裝置包含第一有機發光裝置，且含有陽極、陰極及有機層，該有機層安置於該陽極與該陰極之間且包含具有式I之式之化合物：

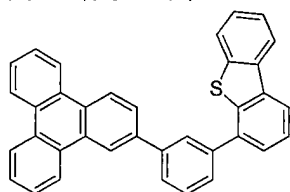


式I。

在式I化合物中， R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 係獨立地選自由氫、氘、環烷基、氘化環烷基、烷基及氘化烷基組成之群。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 中之至少一者係環烷基、氘化環烷基、烷基或氘化烷基，且任何兩個相鄰 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 視情況連接在一起以形成環。環A係附接至環B之4位或5位。 R 及 R' 代表單取代、二取代、三取代或四取代，且係獨立地選自由以下組成之群：氫、氘、鹵基、烷基、環烷基、雜烷基、芳基烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、甲矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、鹽基、羰基、羧酸基、酯基、腈基、異腈基、硫烷基、亞磺鹽基、磺鹽基、膦基及其組合。

在一實施例中，該有機層係發射層且該化合物係非發射摻雜劑。
在另一實施例中，該有機層係發射層且該化合物係非發射摻雜劑。

在另一實施例中，該有機層進一步包含主體。在一實施例中，該主體包含含有聯三伸苯之苯并稠合噻吩或苯并稠合呋喃，其中該主體中之任一取代基係獨立地選自由以下組成之群之未經稠合取代基： C_nH_{2n+1} 、 OC_nH_{2n+1} 、 OAr_1 、 $N(C_nH_{2n+1})_2$ 、 $N(Ar_1)(Ar_2)$ 、 $CH=CH-C_nH_{2n+1}$ 、 $C\equiv CHC_nH_{2n+1}$ 、 Ar_1 、 Ar_1-Ar_2 、 $C_nH_{2n}-Ar_1$ ，或未經取代。 Ar_1 及 Ar_2 係獨立地選自由苯、聯苯、萘、聯三伸苯、呋喃及其雜芳香族類似物組成之群，且 n 係自1至10。在一實施例中，該主體具有下式：



化合物

在一實施例中，該主體係金屬錯合物。本文所述金屬錯合物中之任一者係適宜主體。

納入式I化合物之OLED具有寬黃色發射分佈(emission profile)以及高量子效能及長商業壽命。能夠產生寬黃色發射之裝置在白色照明源中尤其合意。

白色照明源之品質可藉由一組簡單參數來充分描述。光源之色彩係藉由其CIE色度座標 x 及 y (1931 2度標準觀察者CIE色度)給出。通常於二維圖上表示CIE座標。單色落在馬蹄形曲線之周長上，該曲線自左下角之藍色起始，沿順時針方向穿過光譜之色彩，到達右下角之紅色。具有給定能量及光譜形狀之光源之CIE座標將落在該曲線之面積內。將所有波長之光匯合起來一致地提供白色點或中性點，此存於圖之中心(CIE x,y 座標，0.33, 0.33)處。混合來自兩個或更多個源之光所給出之光的色彩係由獨立源之CIE座標之強度加權平均表示。因

此，混合來自兩個或更多個源之光可用於產生白光。

在考慮使用該等白色光源用於照明時，除源之CIE座標以外可考慮CIE色彩再現指數(CRI)。CRI指示光源將在多大程度上再現其所照明之物體之色彩。所給源與標準施照體之完全匹配提供100之CRI。儘管至少70之CRI值對某些應用係可接受的，但較佳白色光源可具有約80或更高之CRI。

式I化合物具有含有大量紅色及綠色分量之黃色發射分佈。在納入式I化合物之OLED上添加藍色發射器(即，峰值波長介於400奈米至500奈米之間之發射器)以及適當過濾器使得再產生RGB光譜。在一些實施例中，納入式I化合物之OLED係用於僅使用兩種類型之發射化合物：式I之黃色發射器及藍色發射器之色彩顯示器(或發光應用)。僅使用兩種類型之發射化合物：式I之寬黃色發射器及藍色發射器之色彩顯示器可採用濾色器來選擇性地通過顯示器之紅色、綠色及藍色分量。紅色及綠色分量均可來自式I之寬黃色發射器。

在一實施例中，該第一裝置係消費產品。在另一實施例中，該第一裝置係有機發光裝置。在另一態樣中，該第一裝置包含發光面板。

在一實施例中，該第一裝置進一步包含峰值波長介於400奈米至500奈米之間之第二發射摻雜劑。在一實施例中，該第二發射摻雜劑係螢光發射器。在另一實施例中，該第二發射摻雜劑係磷光發射器。

在一實施例中，該第一裝置進一步包含第一有機發光裝置及與該第一有機發光裝置分開之第二發光裝置，該第一有機發光裝置包含式I化合物，該第二發光裝置包含峰值波長介於400奈米至500奈米之間之發射摻雜劑。該等第一及第二發光裝置可置於任一適宜佈置中，此取決於合意顯示器或發光應用之需要。

在另一實施例中，該第一裝置包含具有第一發射層及第二發射層之有機發光裝置，該第一發射層包含式I化合物，該第二發射層包

含峰值波長介於400奈米至500奈米之間之發射摻雜劑。該第一發射層及該第二發射層可在其之間具有一或多個其他層。

裝置實例

所有裝置實例係藉由高真空($<10^{-7}$ 托(Torr))熱蒸發(VTE)來製作。陽極電極係約800 Å之氧化銦錫(ITO)。陰極係由10 Å之LiF隨後1,000 Å之Al組成。製作後立即用經環氧樹脂密封之玻璃蓋將所有裝置囊封於氮氣手套箱(<1 ppm之 H_2O 及 O_2)中，且將水分吸收劑納入包裝內。

裝置實例之有機堆疊自ITO表面依序由以下組成：100 Å化合物A作為電洞注入層(HIL)、300 Å 4,4'-雙[N-(1-萘基)-N-苯基胺基]聯苯(α -NPD)作為電洞傳輸層(HTL)、經化合物H (作為主體)摻雜之300 Å 7 wt%至15 wt%之式I化合物作為發射層(EML)、50 Å或100 Å化合物H作為阻擋層(BL)、450 Å或500 Å Alq (叁-8-羥基喹啉鋁)作為電子傳輸層(ETL)。比較實例在EML中使用8重量%之化合物X。來自該等裝置之裝置結果及數據係概述於表1及表2中。本文所用NPD、Alq、化合物A、化合物H及化合物X具有以下結構：

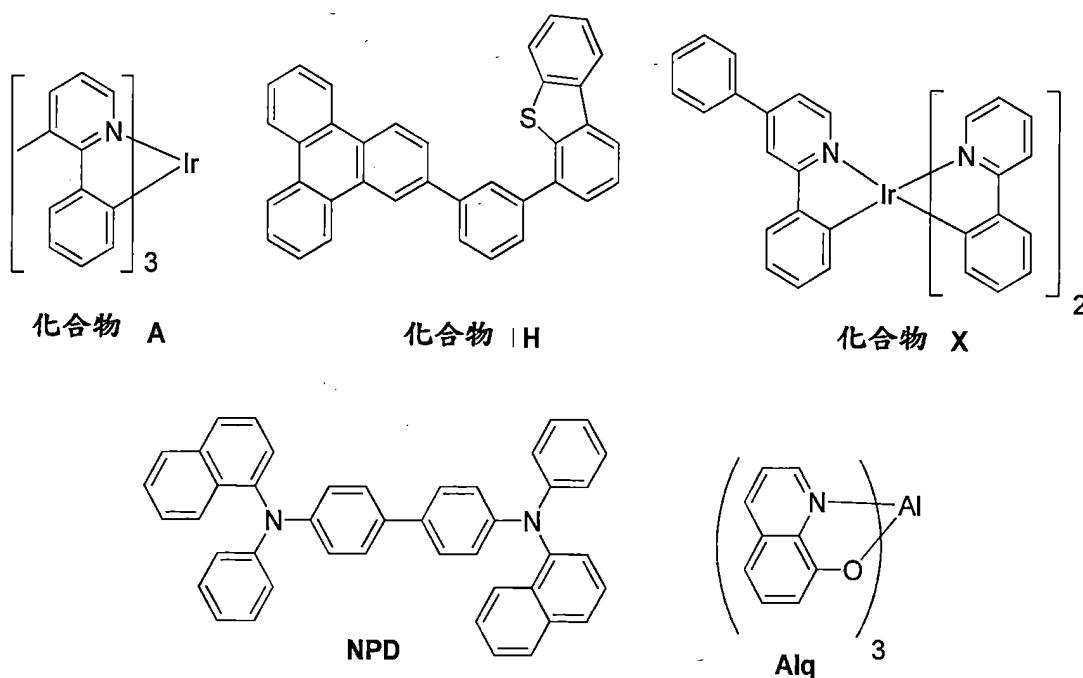


表2：VTE磷光OLED

實例	HIL	HTL	EML (300 Å, 摻雜 %)		BL	ETL
比較實例1	化合物A 100 Å	NPD 300 Å	化合物H	化合物X 8%	化合物H 50 Å	Alq 450 Å
實例1	化合物A 100 Å	NPD 300 Å	化合物H	化合物3 12%	化合物H 50 Å	Alq 450 Å
實例2	化合物A 100 Å	NPD 300 Å	化合物H	化合物4 12%	化合物H 50 Å	Alq 450 Å
實例3	化合物A 100 Å	NPD 300 Å	化合物H	化合物5 10%	化合物H 50 Å	Alq 450 Å
實例4	化合物A 100 Å	NPD 300 Å	化合物H	化合物6 7%	化合物H 50 Å	Alq 450 Å
實例5	化合物A 100 Å	NPD 300 Å	化合物H	化合物7 10%	化合物H 50 Å	Alq 500 Å
實例6	化合物A 100 Å	NPD 300 Å	化合物H	化合物8 7%	化合物H 50 Å	Alq 450 Å

表3. VTE裝置數據

實例	x	y	λ_{max} nm	FWHM (nm)	電壓 (V)	LE (Cd/A)	EQE (%)	PE (lm/W)	LT80 % (h)
比較實例1	0.435	0.550	556	84	5.9	58.3	17.3	31.3	510
實例1	0.458	0.532	562	82	5.0	66.8	20.5	42.2	900
實例2	0.460	0.530	562	82	5.1	61.6	19.0	38.2	1250
實例3	0.428	0.556	552	84	5.6	77.2	22.6	43.0	630
實例4	0.461	0.528	566	86	6.2	61.5	19.3	31.0	540
實例5	0.485	0.508	570	84	5.0	64.6	21.2	40.4	4300
實例6	0.462	0.528	564	82	5.7	52.4	16.2	28.9	830

裝置數據顯示，式I化合物係具有寬線形狀(用於白光裝置係合意的)、高效能及商業可用壽命之有效黃色發射器。利用式I化合物製造之裝置(實例1至6)所顯示之照明效能(LE)、外部量子效能(EQE)及功率效能(PE)通常比比較實例高。不欲受限於理論，據信烷基取代降低裝置中摻雜劑之聚集，改變電荷傳輸性質，且導致與缺乏烷基之比較實例相比較高之效能。此外，化合物3至5、化合物7及化合物8在裝置

中所顯示之開啟電壓均比比較化合物X低。最後，實例1至6中之式I化合物所顯示之裝置壽命比比較實例長。例如，化合物4及化合物7之裝置壽命分別係比較化合物X之約2.5倍及8倍。

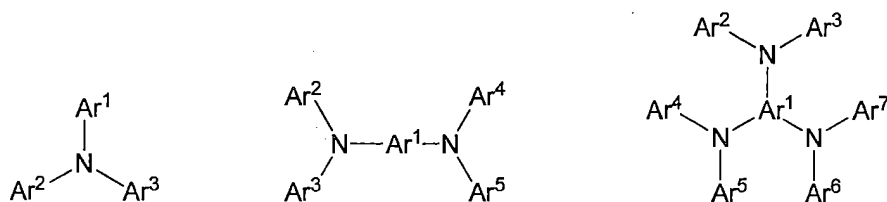
與其他材料之組合

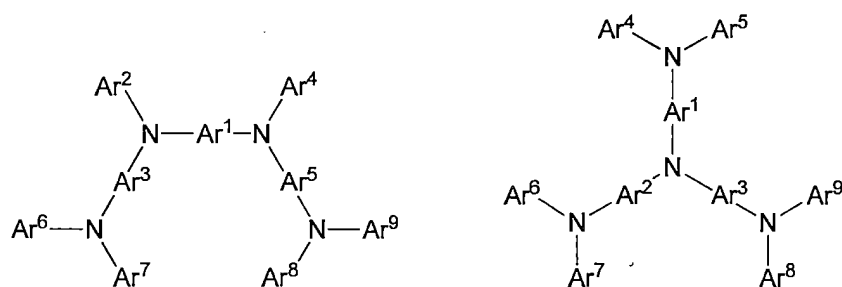
本文所述用於有機發光裝置中特定層之材料可與眾多種存在於該裝置中之其他材料組合使用。例如，本文所揭示發射摻雜劑可與眾多種主體、傳輸層、阻擋層、注入層、電極及可存在之其他層結合使用。下文所述或所提及材料係可與本文所揭示化合物組合使用之材料之非限制性實例，且熟習此項技術者可容易地查閱文獻來鑑別可組合使用之其他材料。

HIL/HTL：

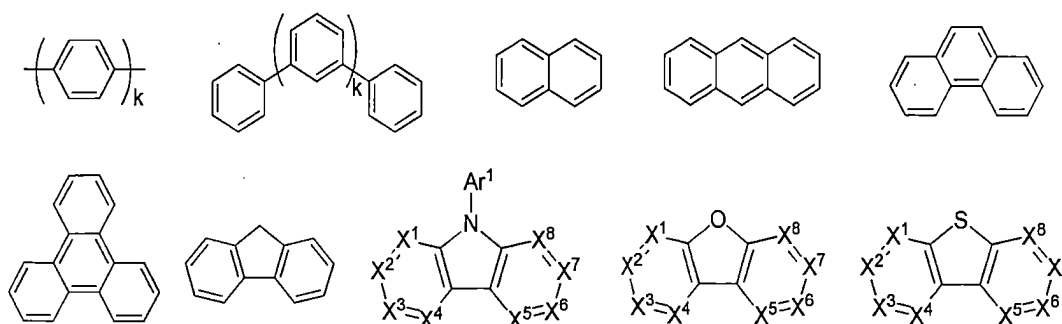
對欲用於本發明之電洞注入/傳輸材料沒有特別限制，且可使用任一化合物，只要該化合物通常用作電洞注入/傳輸材料即可。該材料之實例包括(但不限於)：酞青素或卟啉衍生物；芳香族胺衍生物；吡啶并咪唑衍生物；含有氟代烴之聚合物；具有導電性摻雜劑之聚合物；導電聚合物，例如PEDOT/PSS；衍生自諸如膦酸及矽烷衍生物等化合物之自組裝單體；金屬氧化物衍生物，例如 MoO_x ；p型半導體有機化合物，例如1,4,5,8,9,12-六氮雜聯三伸苯六甲腈；金屬錯合物及可交聯化合物。

用於HIL或HTL之芳香族胺衍生物之實例包括(但不限於)以下一般結構：



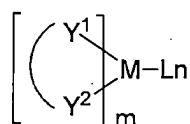


1073219486-0



K係1至20之整數； X^1 至 X^8 係C（包括CH）； Ar^1 具有與上文所定義相同之基團。

用於HIL或HTL之金屬錯合物之實例包括(但不限於)以下一般結構：



M係原子量大於40之金屬； (Y^1-Y^2) 係二齒配位體， Y^1 及 Y^2 係獨立地選自C、N、O、P及S；L係輔助配位體；m係1至可附接至金屬之配位體之最大個數之整數值；且 $m+n$ 係可附接至金屬之配位體之最大個數。

在一態樣中， (Y^1-Y^2) 係2-苯基吡啶衍生物。

在另一態樣中， (Y^1-Y^2) 係碳烯配位體。

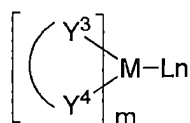
在另一態樣中，M係選自Ir、Pt、Os及Zn。

在又一態樣中，金屬錯合物相對於 Fc^+/Fc 對在溶液中具有最小氧化電位(小於約0.6 V)。

主體：

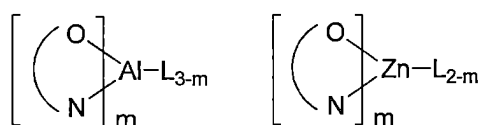
本發明之有機EL裝置之發光層較佳至少含有金屬錯合物作為發光材料，且可含有使用金屬錯合物作為摻雜劑材料之主體材料。對主體材料之實例沒有特別限制，且可使用任何金屬錯合物或有機化合物，只要主體之三重態能量大於摻雜劑之三重態能量即可。

用作主體之金屬錯合物之實例較佳具有以下通式：



M係金屬；(Y³-Y⁴)係二齒配位體，Y³及Y⁴係獨立地選自C、N、O、P及S；L係輔助配位體；m係1至可附接至金屬之配位體之最大個數之整數；且m+n係可附接至金屬之配位體之最大個數。

在一態樣中，金屬錯合物係：



(O-N)係二齒配位體，其具有配位至原子O及N之金屬。

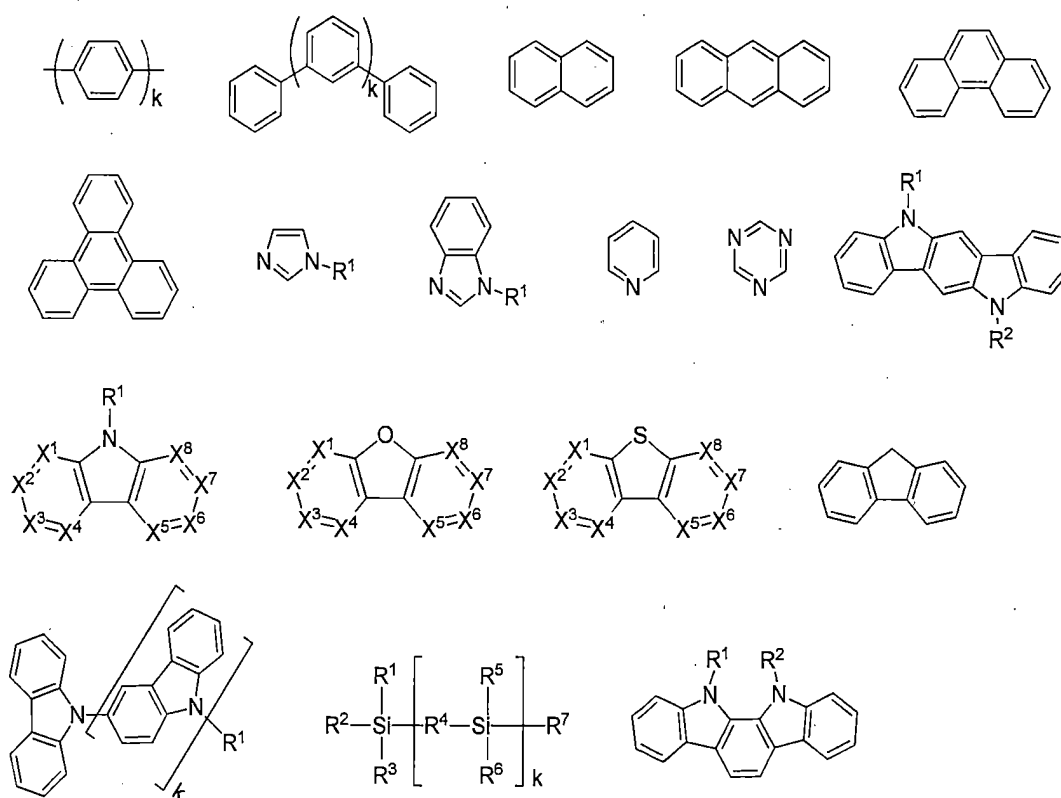
在另一態樣中，M係選自Ir及Pt。

在又一態樣中，(Y³-Y⁴)係碳烯配位體。

用作主體之有機化合物之實例係選自：由芳香族烴環狀化合物組成之群，例如苯、聯苯、三聯苯、聯三伸苯、蔡、蒽、萘、菲、蒾、芘、蒹、芴、甘菊藍；由芳香族雜環化合物組成之群，例如二苯并噻吩、二苯并呋喃、二苯并硒吩、呋喃、噻吩、苯并呋喃、苯并噻吩、苯并硒吩、呋唑、吡啶并呋唑、吡啶基吡啶、吡咯并二吡啶、吡啶、咪唑、三唑、噁唑、噻唑、噁二唑、噁三唑、二噁唑、噻二唑、吡啶、噻嗪、嘧啶、吡嗪、三嗪、噁嗪、噁噻嗪、噁二嗪、吡啶、苯并咪唑、吡啶、吡啶噻嗪(indoxazine)、苯并噁唑、苯并異噁唑、苯并噻唑、喹啉、異喹啉、吡啶、喹啉、喹啉、蔡啶、吡嗪、噻啶、咕啉、吡啶、啡嗪、啡噻嗪、啡噁嗪、苯并呋喃并吡啶、呋喃并二吡啶、苯并噻吩并吡啶、噻吩并二吡啶、苯并硒吩并吡啶及硒吩并二吡啶；及由2個至10個環狀結構單元組成之群，該等環狀結構單元係選自芳香族烴環狀基團及芳香族雜環基團之相同類型或不同類型之基

團，且彼此直接鍵結或經由以下中之至少一者鍵結：氧原子、氮原子、硫原子、矽原子、磷原子、硼原子、鍵結構單元及脂肪族環狀基團。其中每一基團進一步經選自由以下組成之群之取代基取代：氫、氘、鹵基、烷基、環烷基、雜烷基、芳基烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、甲矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸基、酯基、腈基、異腈基、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

在一態樣中，主體化合物分子中含有以下基團中之至少一者：



R^1 至 R^7 係獨立地選自由以下組成之群：氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、雜烷基、芳基及雜芳基，當其係芳基或雜芳基時，其具有類似於上文所提及Ar之定義之定義。

K係0至20之整數。

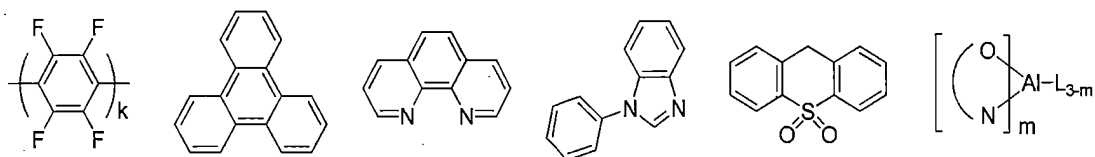
X^1 至 X^8 係選自C (包括CH)或N。

HBL：

電洞阻擋層(HBL)可用於減少離開發射層之電洞及/或激子之數量。與缺少阻擋層之類似裝置相比，在裝置中存在此一阻擋層可產生實質上更高之效能。此外，阻擋層可用於將發射限制在OLED之期望區域內。

在一態樣中，用於HBL中之化合物含有與上文所述用作主體之分子相同之分子。

在另一態樣中，用於HBL中之化合物分子中含有以下基團中之至少一者：

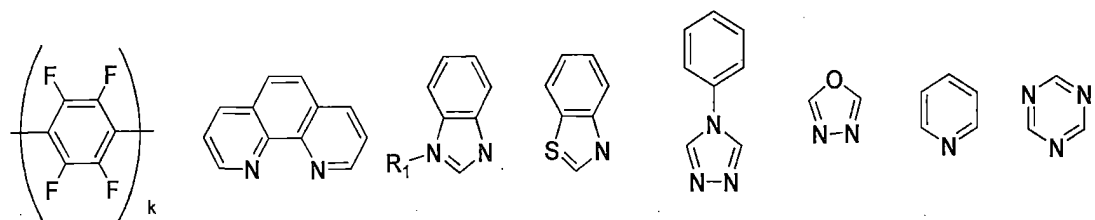


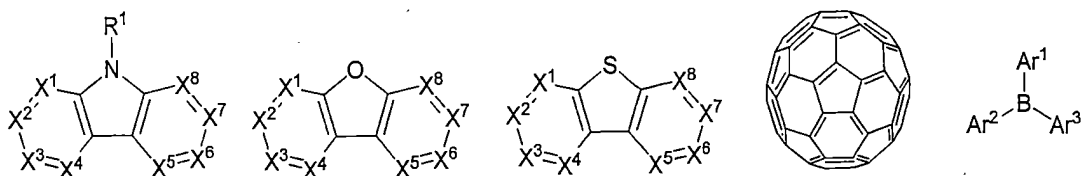
k 係0至20之整數； L 係輔助配體， m 係1至3之整數。

ETL：

電子傳輸層(ETL)可包括能傳輸電子之材料。電子傳輸層可係本質(未經摻雜)或經摻雜的。摻雜可用於增強導電性。對ETL材料之實例沒有特別限制，且可使用任何金屬錯合物或有機化合物，只要其通常用於傳輸電子即可。

在一態樣中，用於ETL中之化合物分子中含有以下基團中之至少一者：





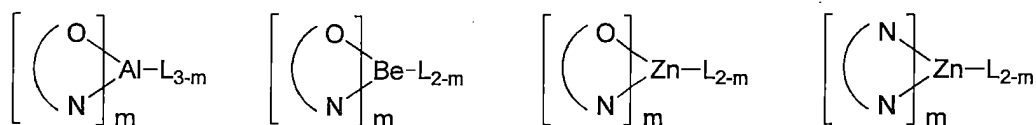
R^1 係獨立地選自由以下組成之群：氫、烷基、烷氧基、胺基、烯基、炔基、芳烷基、雜烷基、芳基及雜芳基，當其係芳基或雜芳基時，其具有類似於上文所提及Ar之定義之定義。

Ar^1 至 Ar^3 具有類似於上文所提及Ar之定義之定義。

K係0至20之整數。

X^1 至 X^8 係選自C (包括CH)或N。

在另一態樣中，用於ETL中之金屬錯合物含有(但不限於)以下通式：

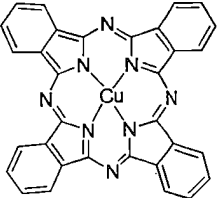
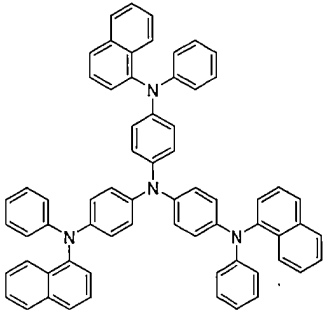
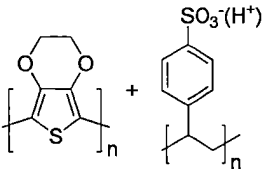
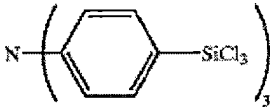


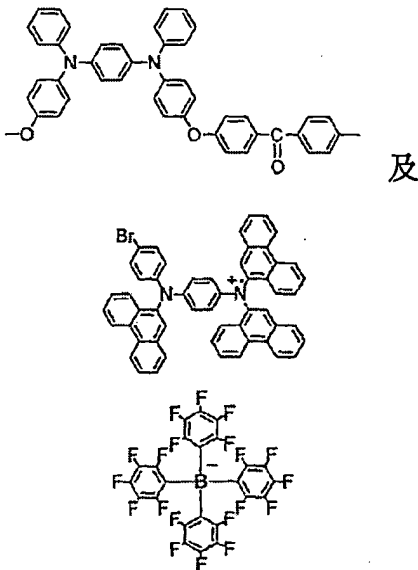
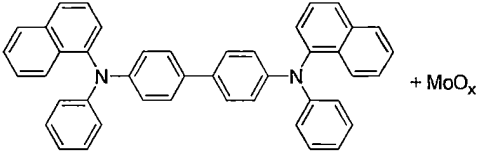
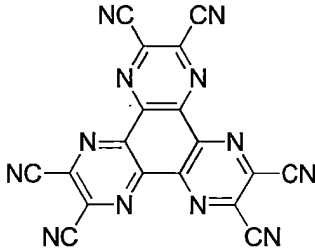
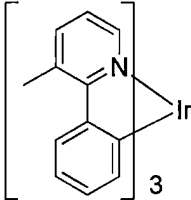
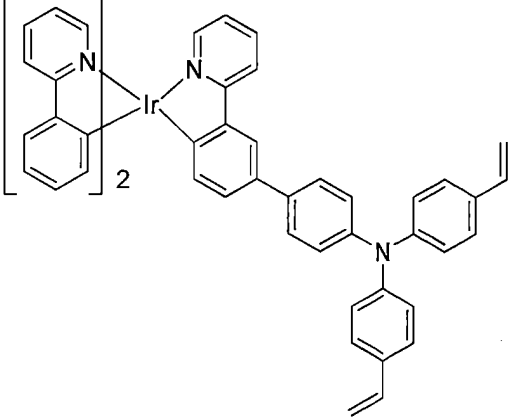
(O-N)或(N-N)係二齒配位體，其具有配位至原子O、N或N、N之金屬；L係輔助配位體；m係1至可附接至金屬之配位體之最大個數之整數值。

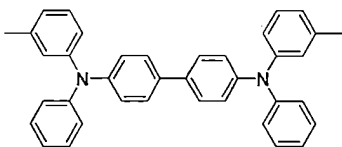
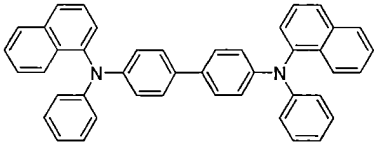
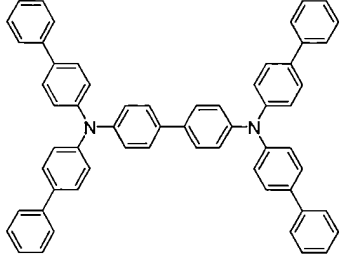
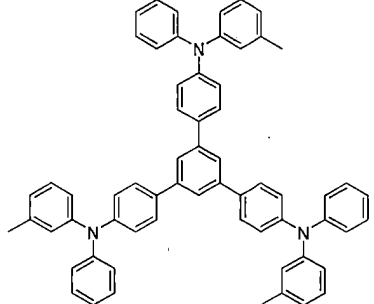
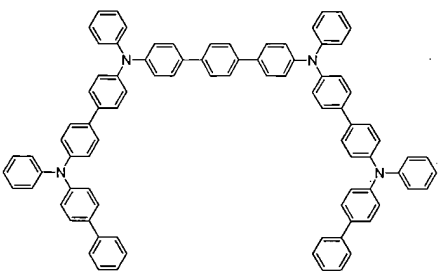
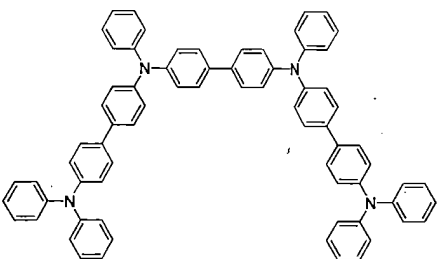
在用於OLED裝置之每一層之任何上文所提及化合物中，氫原子可部分或全部氘化。

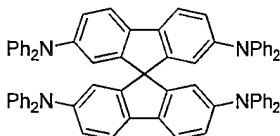
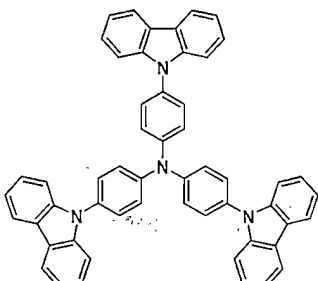
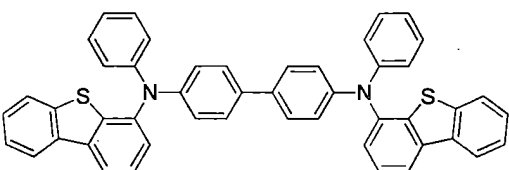
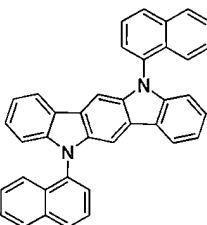
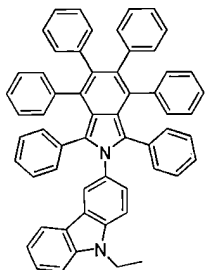
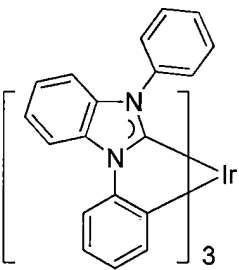
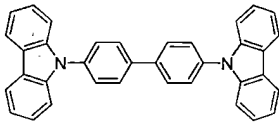
除本文所揭示材料以外及/或與其組合，在OLED中可使用許多電洞注入材料、電洞傳輸材料、主體材料、摻雜劑材料、激子/電洞阻擋層材料、電子傳輸及電子注入材料。可與本文所揭示材料組合用於OLED中之材料之非限制性實例係列示於下表4中。表4列示非限制性材料類別、用於每一類別材料之化合物之非限制性實例及揭示該等材料之參考文獻。

表 4

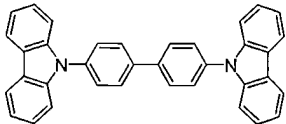
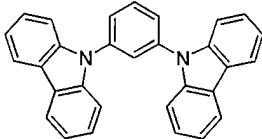
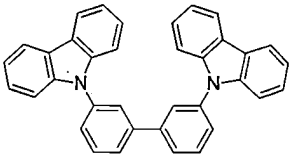
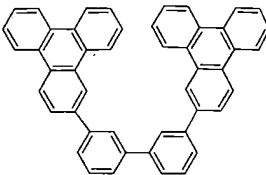
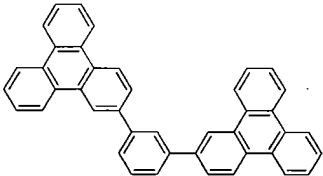
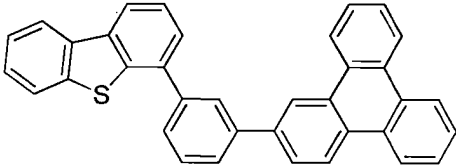
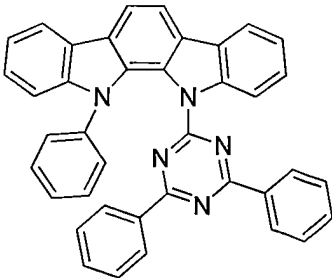
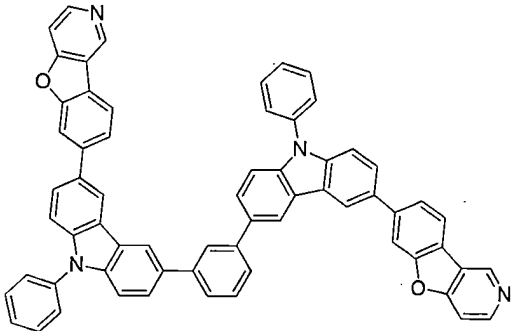
材料	材料實例	出版物
電洞注入材料		
酞青素及卟啉化合物		Appl. Phys. Lett. 69, 2160 (1996)
星放射型 (starburst) 三芳基胺		J. Lumin. 72-74, 985 (1997)
CF _x 氟代烴聚合物	$\left[\text{CH}_x\text{F}_y \right]_n$	Appl. Phys. Lett. 78, 673 (2001)
導電聚合物(例如 PEDOT:PSS、聚苯胺、聚噻吩)		Synth. Met. 87, 171 (1997) WO2007002683
膦酸及矽烷SAM		US20030162053

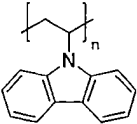
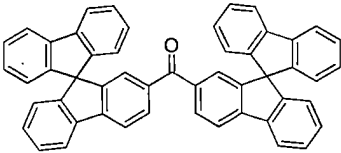
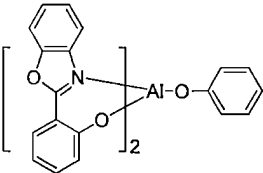
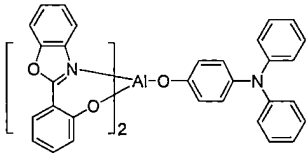
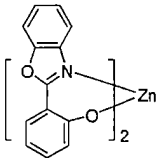
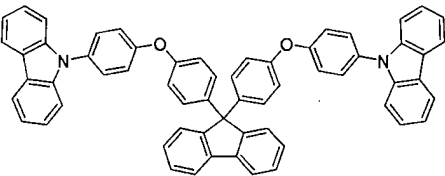
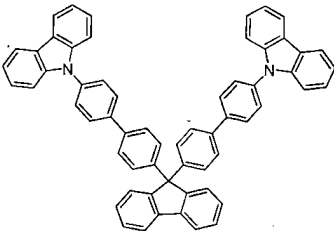
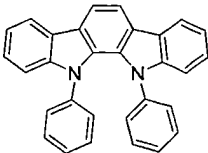
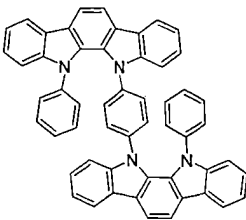
三芳基胺或聚噻吩聚合物與導電性摻雜劑		EP1725079A1
與諸如氧化鋁及氧化鎢等金屬氧化物錯合之芳基胺		SID Symposium Digest, 37, 923 (2006) WO2009018009
p型半導體有機錯合物		US20020158242
金屬有機金屬錯合物		US20060240279
可交聯化合物		US20080220265
電洞傳輸材料		

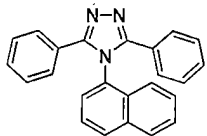
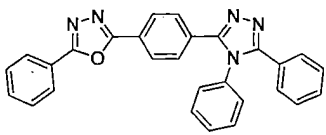
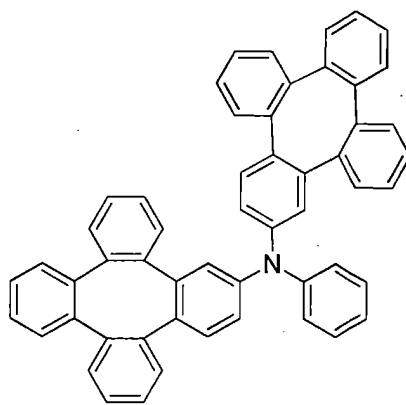
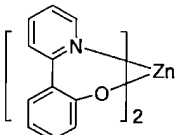
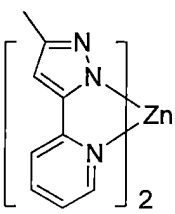
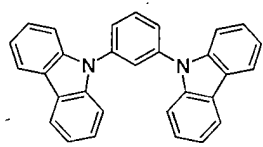
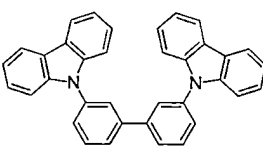
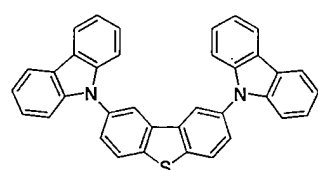
三芳基胺(例如， TPD、α-NPD)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)
		US5061569
		EP650955
		J. Mater. Chem. 3, 319 (1993)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 90, 183503 (2007)

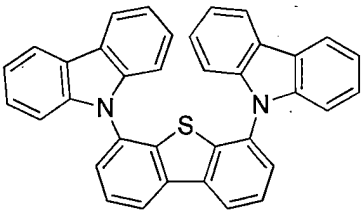
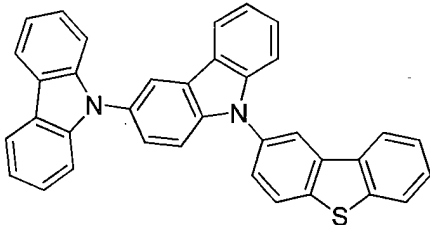
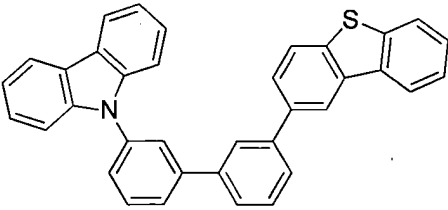
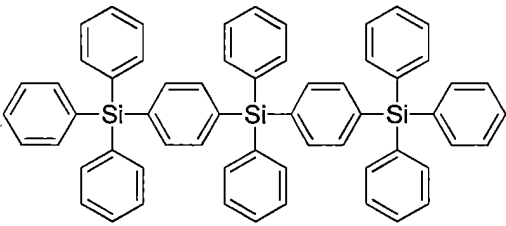
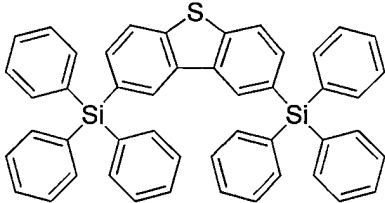
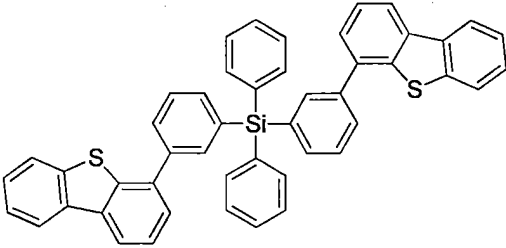
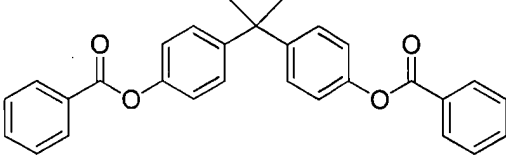
螺環茱核心上之 三芳基胺		Synth. Met. 91, 209 (1997)
芳基胺吡啶 化合物		Adv. Mater. 6, 677 (1994) 、 US20080124572
具有(二)苯并噻吩/ (二)苯并呋喃之 三芳基胺		US20070278938 、 US20080106190
吡啶并吡啶		Synth. Met. 111, 421 (2000)
異吡啶化合物		Chem. Mater. 15, 3148 (2003)
金屬碳烯錯合物		US20080018221
磷光OLED主體材料		
紅色主體		
芳基吡啶		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)

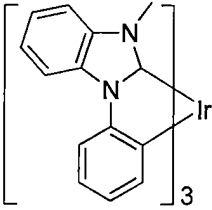
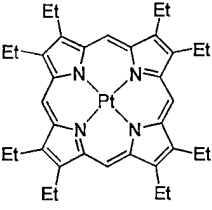
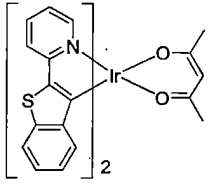
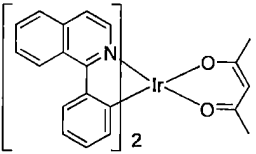
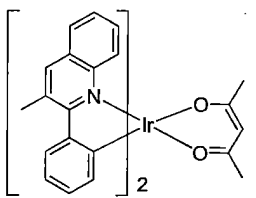
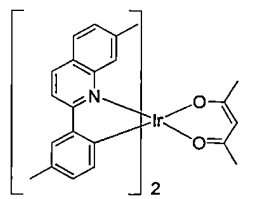
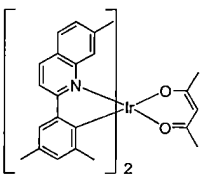
金屬8-羥基喹啉鹽 (例如，Alq ₃ 、 BALq)		Nature 395, 151 (1998)
		US20060202194
		WO2005014551
		WO2006072002
金屬苯氧基苯并 噻唑化合物		Appl. Phys. Lett. 90, 123509 (2007)
共軛寡聚物及 聚合物 (例如，聚萘)		Org. Electron. 1, 15 (2000)
芳香族稠合環		WO2009066779、 WO2009066778、 WO2009063833、 US20090045731、 US20090045730、 WO2009008311、 US20090008605、 US20090009065
鋅錯合物		WO2009062578
綠色主體		

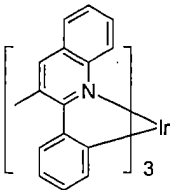
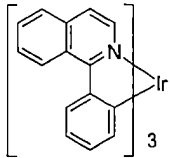
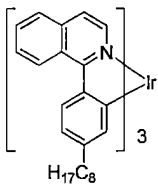
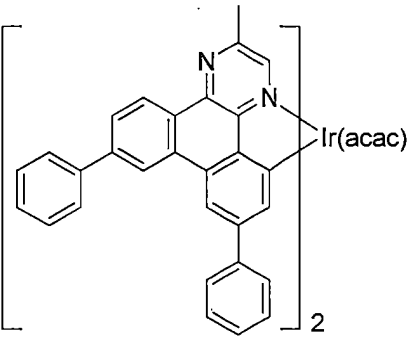
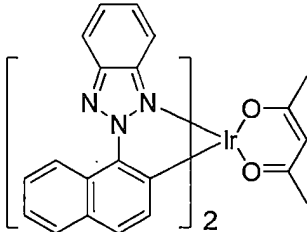
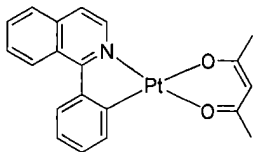
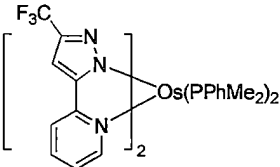
芳基咔唑		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US20030175553
		WO2001039234
芳基聯三伸苯 化合物		US20060280965
		US20060280965
		WO2009021126
供體受體型分子		WO2008056746
氮雜-咔唑 /DBT/DBF		JP2008074939

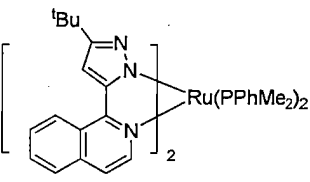
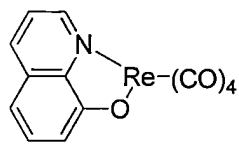
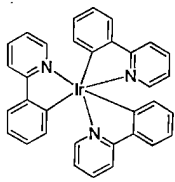
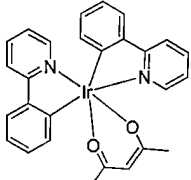
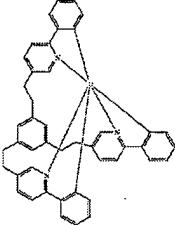
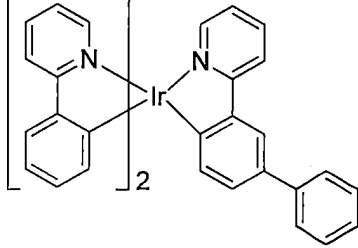
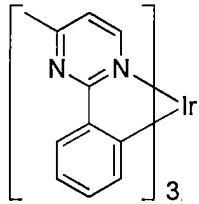
聚合物 (例如，PVK)		Appl. Phys. Lett. 77, 2280 (2000)
螺環萸化合物		WO2004093207
金屬苯氧基苯并 惡唑化合物		WO2005089025
		WO2006132173
		JP200511610
螺環萸-咔唑 化合物		JP2007254297
		JP2007254297
吡啶并咔唑		WO2007063796
		WO2007063754

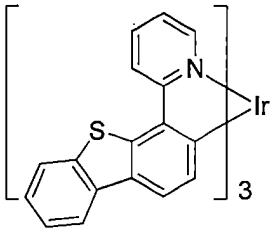
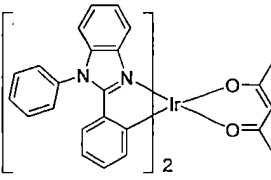
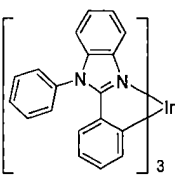
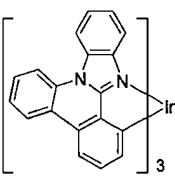
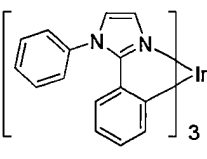
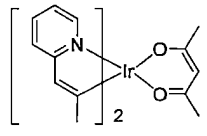
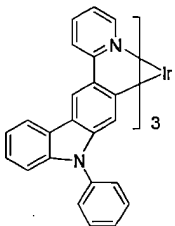
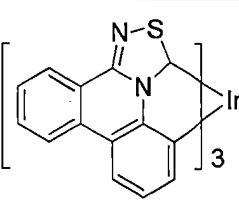
5員環缺電子雜環 (例如，三唑、噁二唑)		J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001)
		WO2004107822
四伸苯錯合物		US20050112407
金屬苯氧基吡啶化合物		WO2005030900
金屬配位錯合物 (例如，Zn、Al 與N^N配位體)		US20040137268、 US20040137267
藍色主體		
芳基咪唑		Appl. Phys. Lett, 82, 2422 (2003)
		US20070190359
二苯并噻吩/二苯并呋喃-咪唑化合物		WO2006114966、 US20090167162

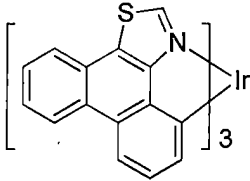
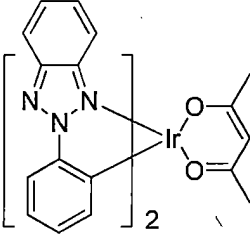
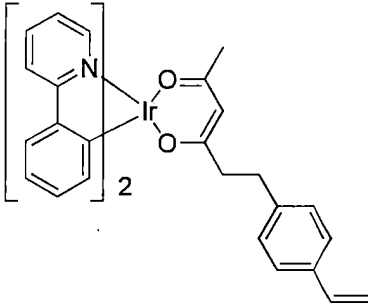
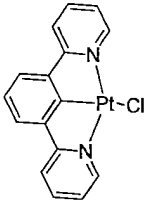
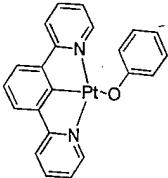
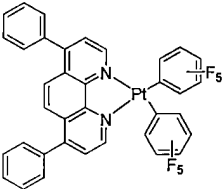
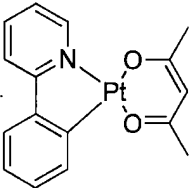
		US20090167162
		WO2009086028
		US20090030202 、 US20090017330
矽芳基化合物		US20050238919
		WO2009003898
矽/鎢芳基化合物		EP2034538A
芳基苯甲醯基酯		WO2006100298

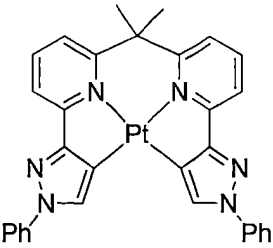
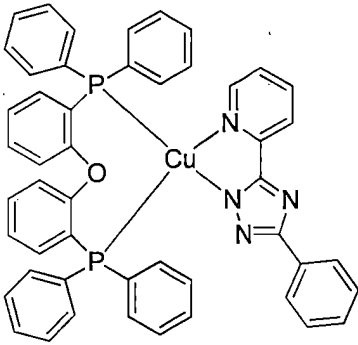
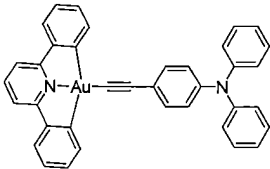
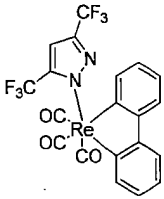
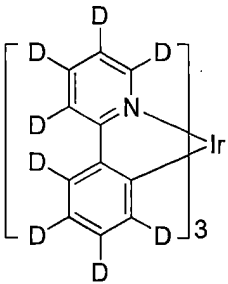
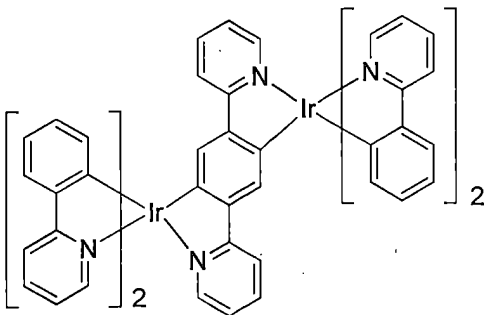
高三重態金屬有機金屬錯合物		US7154114
磷光摻雜劑		
紅色摻雜劑		
重金屬卟啉(例如，PtOEP)		Nature 395, 151 (1998)
銱(III)有機金屬錯合物		Appl. Phys. Lett. 78, 1622 (2001)
		US2006835469
		US2006835469
		US20060202194
		US20060202194

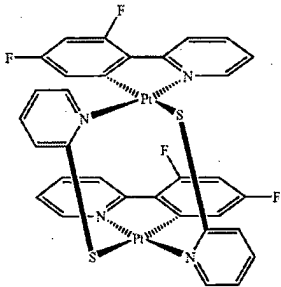
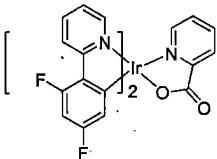
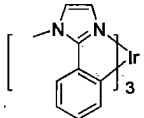
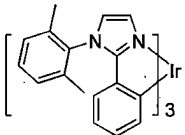
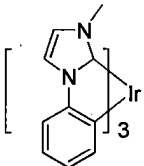
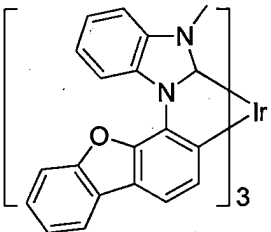
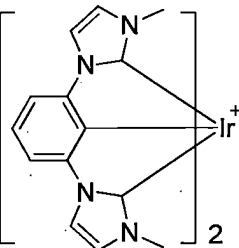
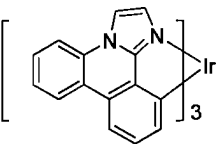
		US20070087321
		US20070087321
		Adv. Mater. 19, 739 (2007)
		WO2009100991
		WO2008101842
鉑(II)有機金屬錯合物		WO2003040257
鐵(III)錯合物		Chem. Mater. 17, 3532 (2005)

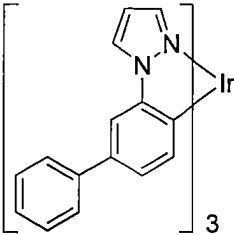
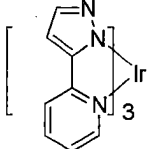
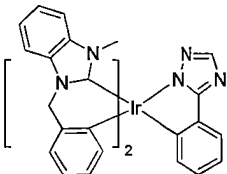
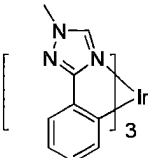
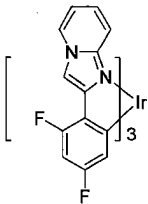
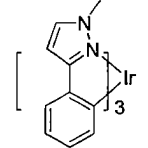
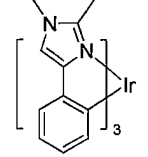
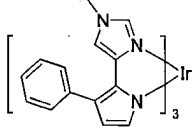
鈥(II)錯合物		Adv. Mater. 17, 1059 (2005)
銩(I)、(II)及(III)錯合物		US20050244673
綠色摻雜劑		
銩(III)有機金屬錯合物	 及其衍生物	Inorg. Chem. 40, 1704 (2001)
		US20020034656
		US7332232
		US20090108737
		US20090039776

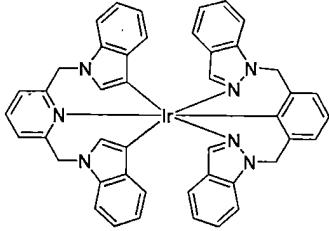
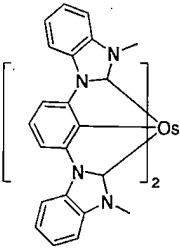
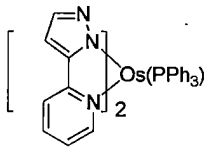
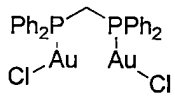
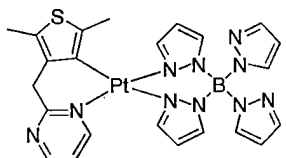
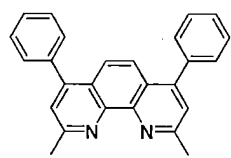
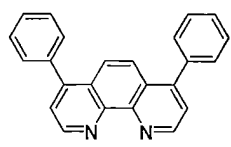
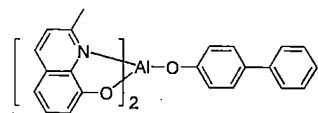
		US6921915
		US6687266
		Chem. Mater. 16, 2480 (2004)
		US20070190359
		US 20060008670 JP2007123392
		Adv. Mater. 16, 2003 (2004)
		Angew. Chem. Int. Ed. 2006, 45, 7800
		WO2009050290

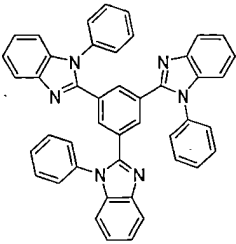
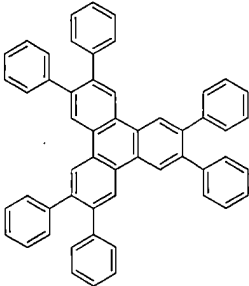
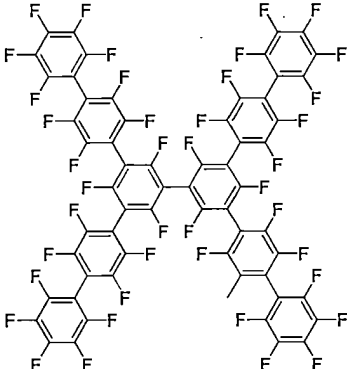
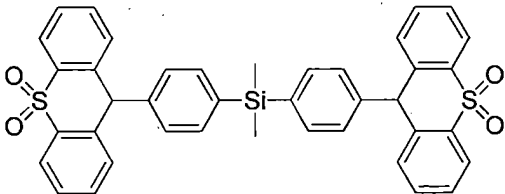
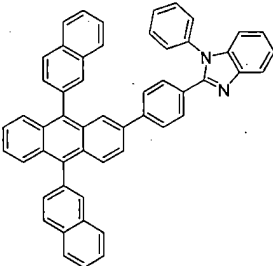
		US20090165846
		US20080015355
聚合金屬有機金屬化合物之單體		US7250226 、 US7396598
包括多齒狀配位體之Pt(II)有機金屬錯合物		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Appl. Phys. Lett. 86, 153505 (2005)
		Chem. Lett. 34, 592 (2005)
		WO2002015645

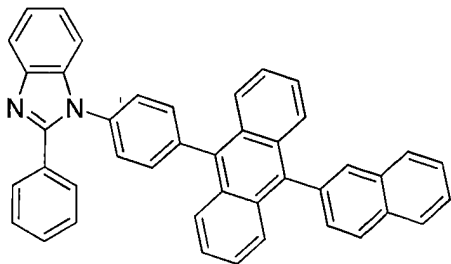
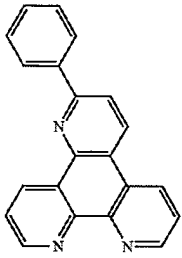
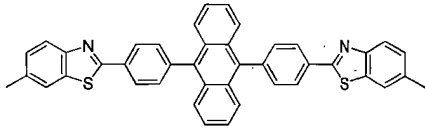
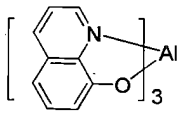
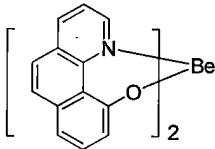
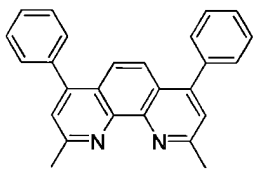
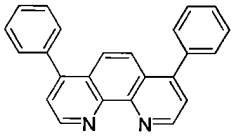
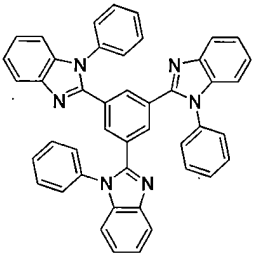
		US20060263635
Cu錯合物		WO2009000673
金錯合物		Chem. Commun. 2906 (2005)
銠(III)錯合物		Inorg. Chem. 42, 1248 (2003)
氘化有機金屬錯合物		US20030138657
具有兩個或更多個金屬中心之有機金屬錯合物		US20030152802

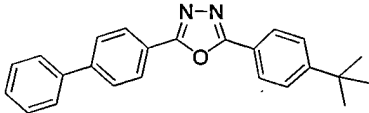
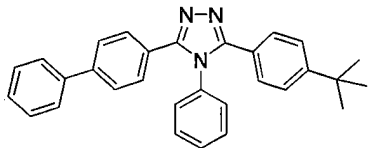
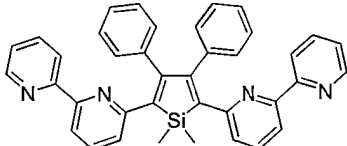
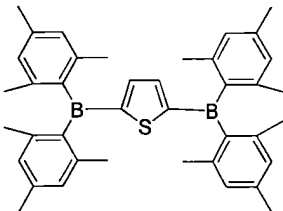
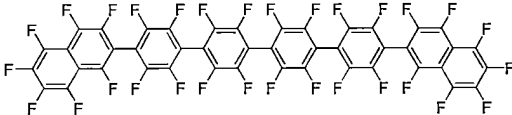
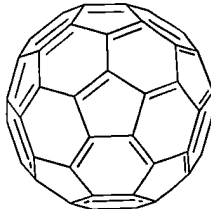
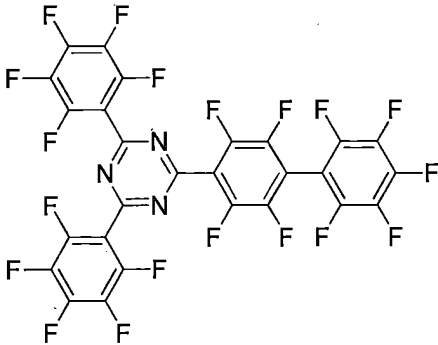
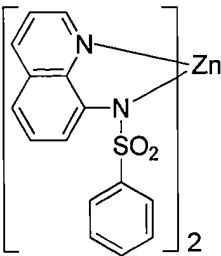
		US7090928
藍色摻雜劑		
銱(III)有機金屬 錯合物		WO2002002714
		WO2006009024
		US20060251923
		US7393599 、 WO2006056418 、 US20050260441 、 WO2005019373
		US7534505
		US7445855
		US20070190359 、 US20080297033

		US7338722
		US20020134984
		Angew. Chem. Int. Ed. 47, 1 (2008)
		Chem. Mater. 18, 5119 (2006)
		Inorg. Chem. 46, 4308 (2007)
		WO2005123873
		WO2005123873
		WO2007004380

		WO2006082742
鐵(II)錯合物		US7279704
		Organometallics 23, 3745 (2004)
金錯合物		Appl. Phys. Lett. 74, 1361 (1999)
鉑(II)錯合物		WO2006098120、 WO2006103874
激子/電洞阻擋層材料		
浴銅靈 (Bathocuproine) 化合物(例如， BCP、BPhen)		Appl. Phys. Lett. 75, 4 (1999)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
金屬8-羥基喹啉鹽 (例如，BALq)		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)

5員環缺電子雜環，例如三唑、噁二唑、咪唑、苯并咪唑		Appl. Phys. Lett. 81, 162 (2002)
聯三伸苯化合物		US20050025993
氟化芳香族化合物		Appl. Phys. Lett. 79, 156 (2001)
啡噻嗪-S-氧化物		WO2008132085
電子傳輸材料		
蔥-苯并咪唑化合物		WO2003060956

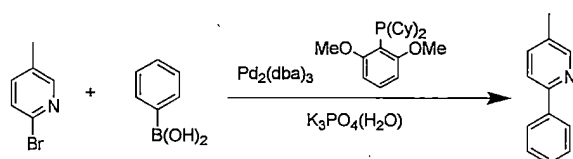
		US20090179554
氮雜聯三伸苯 衍生物		US20090115316
蒽-苯并噻唑 化合物		Appl. Phys. Lett. 89, 063504 (2006)
金屬8-羥基喹啉鹽 (例如, Alq ₃ 、 Zrq ₄)		Appl. Phys. Lett. 51, 913 (1987)、 US7230107
金屬羥基苯并 喹啉鹽		Chem. Lett. 5, 905 (1993)
浴銅靈化合物， 例如BCP、Bphen 等		Appl. Phys. Lett. 91, 263503 (2007)
		Appl. Phys. Lett. 79, 449 (2001)
5員環缺電子雜環 (例如, 三唑、噁 二唑、咪唑、苯 并咪唑)		Appl. Phys. Lett. 74, 865 (1999)

		Appl. Phys. Lett. 55, 1489 (1989)
		Jpn. J. Apply. Phys. 32, L917 (1993)
矽雜環戊二烯 (silole)化合物		Org. Electron. 4, 113 (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)
富勒烯(Fulleren) (例如, C60)		US20090101870
三嗪錯合物		US20040036077
Zn (N^N)錯合物		US6528187

實驗

本文件通篇所用化學縮寫係如下：Cy係環己基，dba係二亞苺基丙酮，EtOAc係乙酸乙酯，S-Phos係二環己基(2',6'-二甲氧基-[1,1'-聯苯]-3-基)膦，THF係四氫呋喃，DCM係二氯甲烷，PPh₃係三苯基膦。

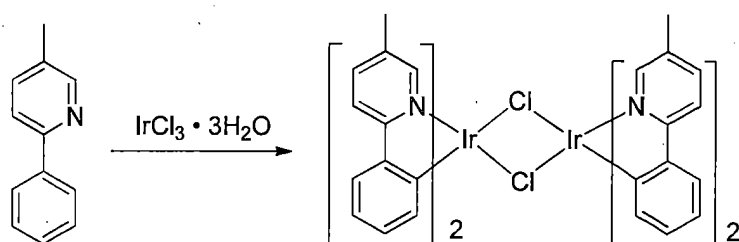
化合物3之合成



步驟1

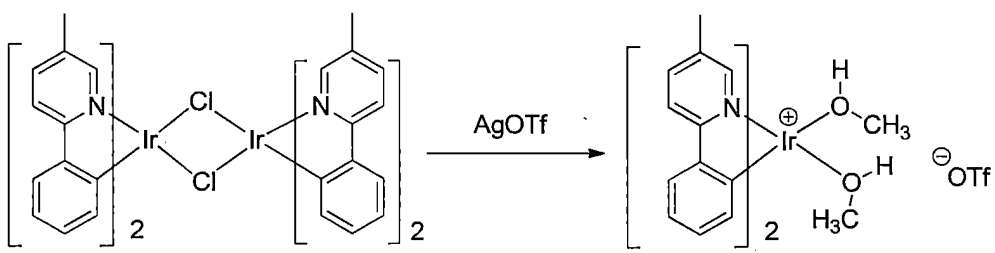
5-甲基-2-苯基吡啶之合成

在1 L圓底燒瓶中添加2-溴-5-甲基吡啶(30 g, 174 mmol)、苯基硼酸(25.5 g, 209 mmol)、二環己基(2',6'-二甲氧基-[1,1'-聯苯]-2-基)膦(2.86 g, 6.98 mmol)及磷酸三鉀單水合物(120 g, 523 mmol)與甲苯(600 mL)及水(60 mL)。利用N₂使反應混合物脫氣20 min。添加Pd₂(dba)₃(3.19 g, 3.49 mmol)，並使反應混合物回流18 h。冷卻反應混合物，移除水層，並將有機層濃縮至乾燥以留下殘餘物。將殘餘物溶解於EtOAc:己烷(1:3)中，並穿過小矽膠塞，並利用EtOAc:己烷(1:3)溶析。移除溶劑，並在150°C下藉由Kugelrohr純化粗產物，從而得到26 g之5-甲基-2-苯基吡啶，其作為白色固體而獲得(HPLC純度：99.2%)。

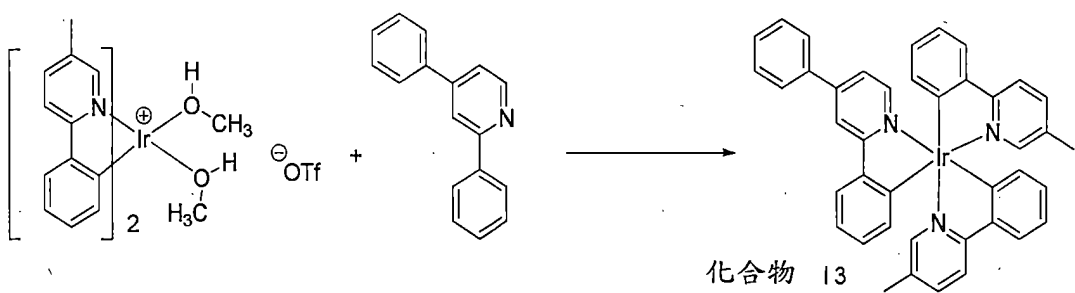


步驟2

氯橋連之銥二聚體之合成：在氮氣氣氛下在500 mL圓底燒瓶中添加5-甲基-2-苯基吡啶(12 g, 70.9 mmol)及氯化銥(III)水合物(7.14 g, 20.2 mmol)與2-乙氧基乙醇(100 mL)及水(33.3 mL)。在130℃下使所得反應混合物回流18 h。將所得沈澱物過濾，並用甲醇(3次至4次)及己烷(3次至4次)洗滌。乾燥所獲得之產物，從而得到11.0 g (96%產率)之期望產物。



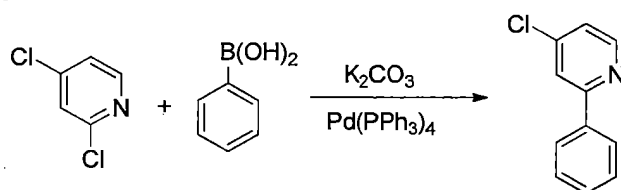
三氟甲烷磺酸銥鹽之合成：將上文步驟2中所獲得之銥二聚體(11 g, 9.75 mmol)懸浮於600 mL之二氯甲烷中。在單獨燒瓶中，將三氟甲烷磺酸銀(I) (5.26 g, 20.48 mmol)溶解於MeOH (300 mL)中，並在室溫下緩慢添加至二氯甲烷懸浮液中，同時連續攪拌。在黑暗中將反應混合物攪拌過夜。經緊密填充之Celite®床過濾反應混合物，並在真空下移除溶劑，從而得到15 g (100%產率)呈褐綠色固體之產物。不進一步純化即使用該產物。



步驟3

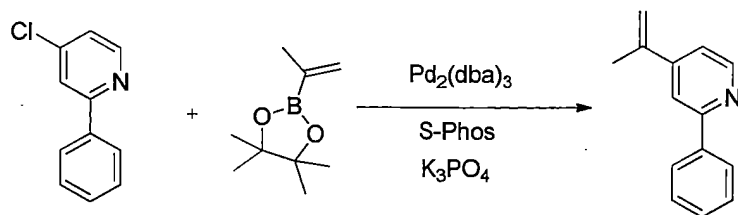
化合物3之合成：在惰性氣氛下使存於EtOH (30 mL)及MeOH (30 mL)中之自上文步驟2所獲得三氟甲烷磺酸銦錯合物(3.0 g, 4.04 mmol)與2,4-二苯基吡啶(3.11 g, 13.45 mmol)之混合物回流20 h。將反應混合物冷卻至室溫，用乙醇稀釋，添加Celite®，並將混合物攪拌10 min。將混合物在玻璃料上之小矽膠塞上過濾，並用乙醇(3次至4次)及己烷(3次至4次)洗滌。丟棄濾液。然後用二氯甲烷洗滌Celite®/二氧化矽塞以溶析粗產物。在矽膠上利用1/1 (v/v)二氯甲烷/己烷且隨後4/1 (v/v)二氯甲烷/己烷對粗產物進行層析，從而得到0.9 g之化合物3 (28%產率)，其係藉由HPLC (99.9%純)及LC/MS來證實。

化合物4之合成



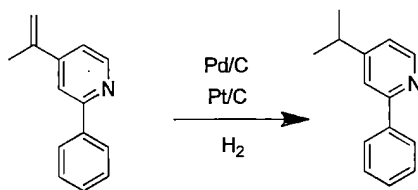
步驟1

4-氯-2-苯基吡啶之合成：用2,4-二氯吡啶(30 g, 203 mmol)、苯基硼酸(24.7 g, 203 mmol)、碳酸鉀(84 g, 608 mmol)、Pd(PPh₃)₄ (2.3 g, 2.0 mmol)、二甲氧基乙烷(500 mL)及水(150 mL)裝填1 L圓底燒瓶。使反應混合物脫氣，並加熱以回流20 h。冷卻並分離各層後，用EtOAc (2×100 mL)萃取水層。移除溶劑後，使粗產物經受管柱層析法(SiO₂，存於己烷中之5% EtOAc至存於己烷之10% EtOAc)，從而獲得34 g (88%產率)之純產物。



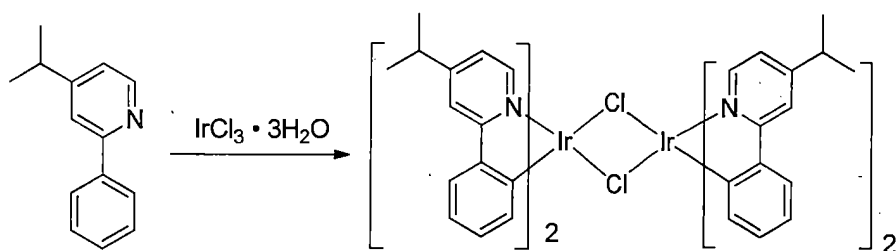
步驟2

2-苯基-4-(丙-1-烯-2-基)吡啶之合成：將4-氯-2-苯基吡啶(14.0 g, 73.8 mmol)及磷酸鉀(51.0 g, 221 mmol)溶解於300 mL之甲苯及30 mL之水中。將反應用氮氣吹洗20分鐘，且然後添加4,4,5,5-四甲基-2-(丙-1-烯-2-基)-1,3,2-二氧雜戊硼烷(16.65 mL, 89 mmol)、 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.35 g, 1.48 mmol)及S-Phos (2.42 g, 5.91 mmol)。使反應回流18 h。冷卻後，添加100 mL之水，分離各層，並用100 mL之乙酸乙酯將水層萃取兩次。使有機層穿過利用DCM溶析之矽膠塞。將溶劑蒸發後，使粗產物經受管柱層析法(SiO_2 ，存於己烷中之5% EtOAc至存於己烷中之10% EtOAc)，從而獲得13.5 g之純產物(90%產率)。



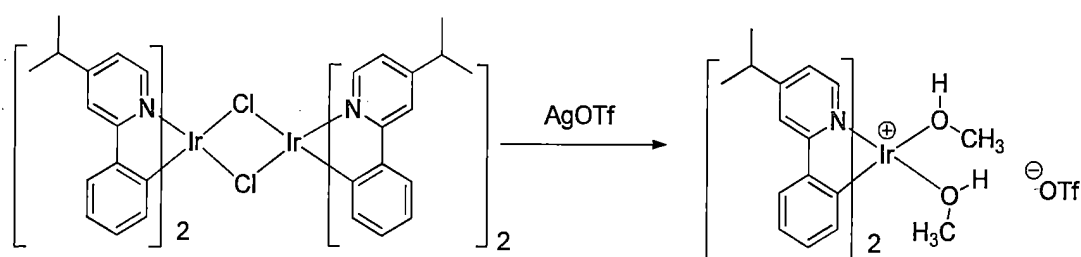
步驟3

2-苯基-4-丙基吡啶之合成：將2-苯基-4-(丙-1-烯-2-基)吡啶(13.5 g, 69.1 mmol)添加至含有EtOH (150 mL)之氫化器瓶中。藉由鼓泡之 N_2 使反應混合物脫氣10 min。添加Pd/C (0.736 g, 6.91 mmol)及Pt/C (0.674 g, 3.46 mmol)。將反應混合物置於Parr氫化器上2 h (H_2 約為84 psi，根據理論計算)。將反應混合物在緊密填充之Celite®床上過濾，並用二氯甲烷洗滌。蒸發溶劑，且GC/MS證實氫化完全。將粗產物吸附於Celite®上用於管柱層析法。在矽膠上利用存於己烷中之10% EtOAc對粗產物進行層析，從而得到10 g (75%產率)之期望產物(HPLC純度：99.8%)。藉由GC/MS證實該產物。



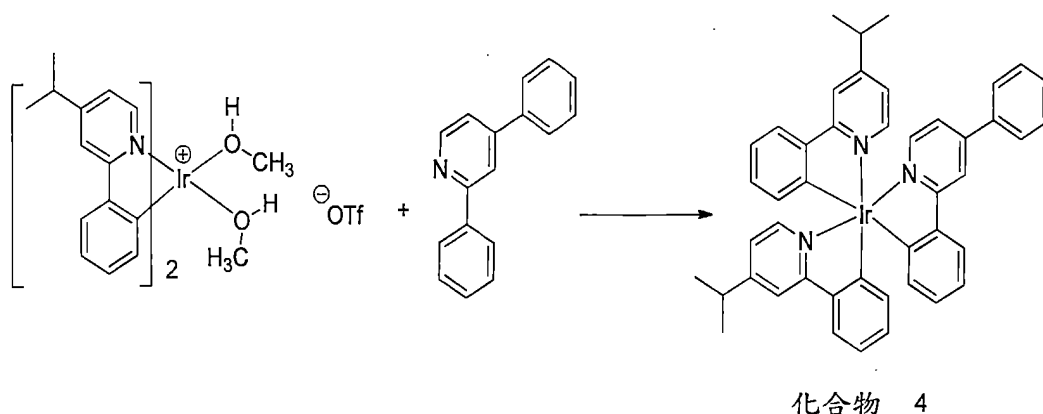
步驟4

氯橋連之銱二聚體之合成：在氮氣氣氛下向500 mL圓底燒瓶中添加4-異丙基-2-苯基吡啶(8.0 g, 40.6 mmol)及氯化銱(III)水合物(7.4 g, 20.28 mmol)與2-乙氧基乙醇(90 mL)及水(30 mL)。在130℃下使所得反應混合物回流18 h。將所得沈澱物過濾，並用甲醇(3次至4次)及己烷(3次至4次)洗滌。乾燥所獲得之產物，從而得到6.1 g (95%產率)之期望產物。



步驟5

三氟甲烷磺酸銱鹽之合成：將上文步驟4中所獲得之銱二聚體(6.2 g, 4.94 mmol)溶解於500 mL之二氯甲烷中。在單獨燒瓶中，將三氟甲烷磺酸銀(I) (2.66 g, 10.37 mmol)溶解於MeOH (250 mL)中，並在室溫下緩慢添加至二氯甲烷溶液中，同時連續攪拌。在黑暗中將反應混合物攪拌過夜。經緊密填充之Celite®床過濾反應混合物，並在真空下移除溶劑，從而得到7.8 g (100%產率)呈褐綠色固體之產物。不進一步純化即使用該產物。

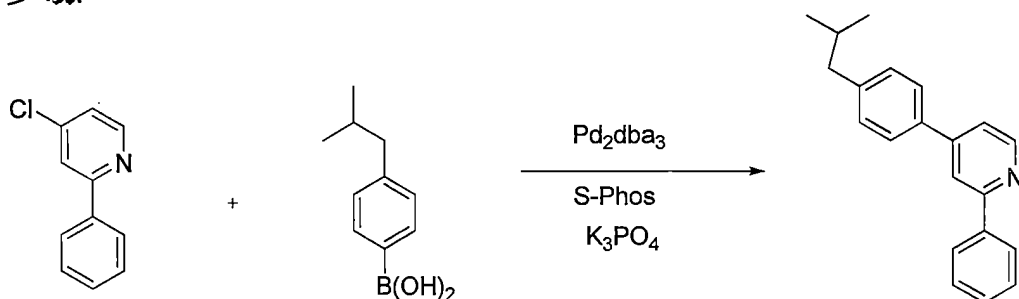


步驟6

化合物4之合成：在N₂氣氛下使存於EtOH (30 mL)及MeOH (30 mL)中之上文步驟5中所獲得三氟甲烷磺酸銦錯合物(2.4 g, 3.01 mmol)與2,4-二苯基吡啶(2.4 g, 10.38 mmol)之混合物回流20 h。將反應混合物冷卻至室溫，用乙醇稀釋，添加Celite®，並將混合物攪拌10 min。將混合物在小矽膠塞上過濾，並用乙醇(3次至4次)及用己烷(3次至4次)洗滌。丟棄濾液。然後用二氯甲烷洗滌Celite®/二氧化矽塞以溶析產物。在矽膠上利用存於己烷中之30% THF對粗產物進行層析，從而得到1.24 g (51%產率)呈黃色固體之化合物4。藉由HPLC (99.9%純)及LC/MS證實該產物。

化合物5之合成

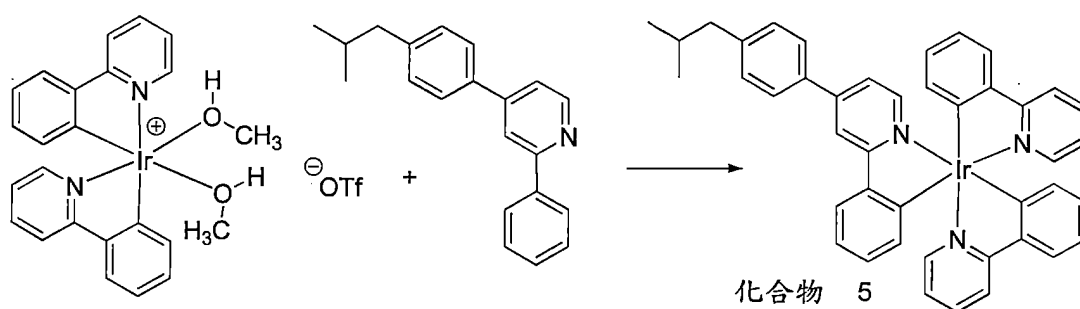
步驟1



4-(4-異丁基苯基)-2-苯基吡啶之合成：用4-氯-2-苯基吡啶(5 g, 26.4 mmol)、(4-異丁基苯基)硼酸(7.04 g, 39.5 mmol)、Pd₂(dba)₃(0.483 g, 0.527 mmol)、二環己基(2',6'-二甲氧基-[1,1'-聯苯]-3-基)膦

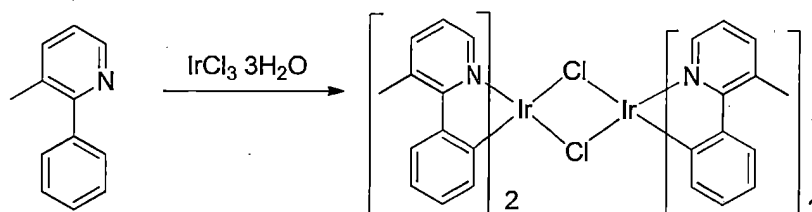
(S-Phos) (0.866 g, 2.109 mmol)、 K_3PO_4 (16.79 g, 79 mmol)、甲苯(100 mL)及水(10 mL)裝填250 mL圓底燒瓶，從而得到黃色懸浮液。加熱懸浮液以回流21 hr。將反應混合物傾倒至水中，並用EtOAc萃取。將有機層合併，並使其經受管柱層析法(SiO_2 ，存於己烷中之10% EtOAc)，從而得到4-(4-異丁基苯基)-2-苯基吡啶(6 g, 20.9 mmol, 79%產率)。

步驟2



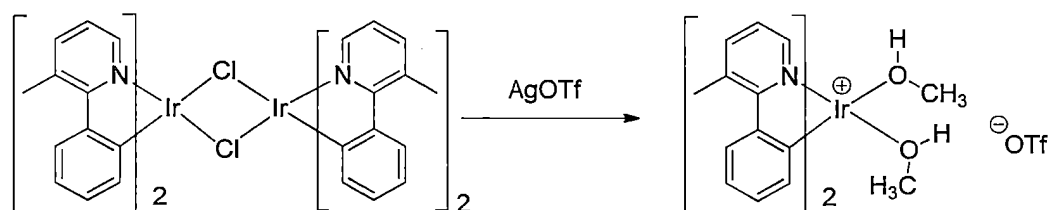
化合物5之合成：在惰性氣氛下使存於EtOH (30 mL)及MeOH (30 mL)中之三氟甲磺酸銦錯合物(3.0 g, 3.76 mmol)與4-(4-異丁基苯基)-2-苯基吡啶(3.0 g, 10.44 mmol)之混合物回流20 h。將反應混合物冷卻至室溫，用乙醇稀釋，添加Celite®，並將混合物攪拌10 min。將混合物在玻璃料上之小矽膠塞上過濾，並用乙醇(3次至4次)及用己烷(3次至4次)洗滌。丟棄濾液。然後用二氯甲烷洗滌Celite®/二氧化矽塞以溶析產物。在矽膠上利用1/1二氯甲烷/己烷對粗產物進行層析，從而得到2.0 g (65%產率)呈黃色固體之化合物5。藉由HPLC (99.8%純)及LC/MS證實化合物5。

化合物6之合成



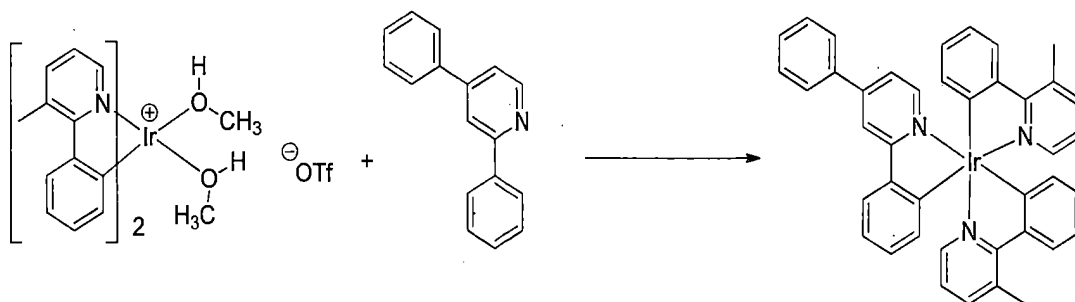
步驟1

氯橋連之銥二聚體之合成：向500 mL圓底燒瓶中添加3-甲基-2-苯基吡啶(5.7 g, 33.7 mmol)及氯化銥(III)水合物(5.94 g, 16.84 mmol)、2-乙氧基乙醇(100 mL)及水(33.3 mL)。在氮氣氣氛下在130℃下使所得反應混合物回流18 h。將所得沈澱物過濾，並用甲醇(3次至4次)及己烷(3次至4次)洗滌。乾燥所獲得之產物，從而得到6.35 g (66%產率)之期望產物。



步驟2

三氟甲烷磺酸銥鹽之合成：將銥二聚體(4.33 g, 3.84 mmol)溶解於500 mL之二氯甲烷中。在單獨燒瓶中，將三氟甲烷磺酸銀(I) (2.07 g, 8.06 mmol)溶解於MeOH (250 mL)中，並在室溫下緩慢添加至二氯甲烷溶液中，同時連續攪拌。在黑暗中將反應混合物攪拌過夜。經緊密填充之Celite®床過濾反應混合物，並在真空下移除溶劑，從而得到5.86 g (100%產率)呈褐色固體之產物。不進一步純化即使用該產物。

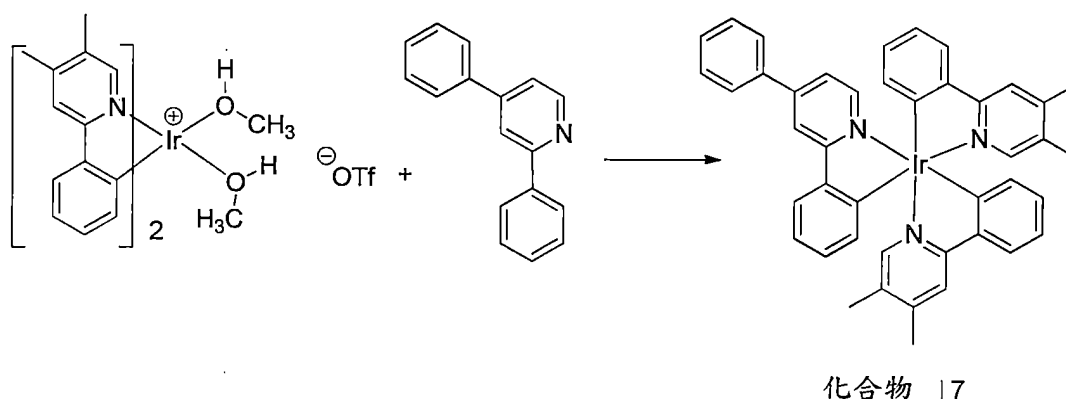


化合物 6

步驟3

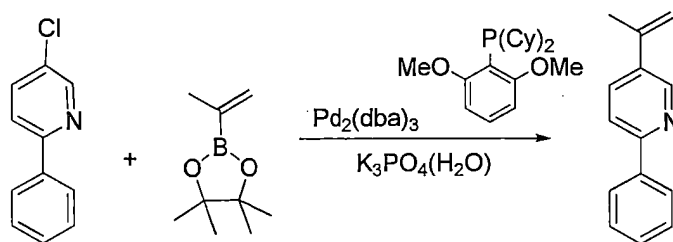
化合物6之合成：在惰性氣氛下使存於EtOH (30 mL)及MeOH (30 mL)中之三氟甲烷磺酸銦錯合物(2.85 g, 3.84 mmol)與2-(二苯并[*b,d*]呋喃-4-基)-4,5-二甲基吡啶(2.85 g, 12.33 mmol)之混合物回流20 h。將反應混合物冷卻至室溫，用乙醇稀釋，添加Celite®，並將混合物攪拌10 min。將混合物在玻璃料上之小矽膠塞上過濾，並用乙醇(3次至4次)及用己烷(3次至4次)洗滌。丟棄濾液。然後用二氯甲烷洗滌Celite®/二氧化矽塞以溶析產物。在矽膠上利用1/1 (v/v)二氯甲烷/己烷對粗產物進行層析，從而得到0.5 g (17%產率)呈黃色固體之化合物6。藉由HPLC (99.8%純)及LC/MS證實化合物6。

化合物7之合成



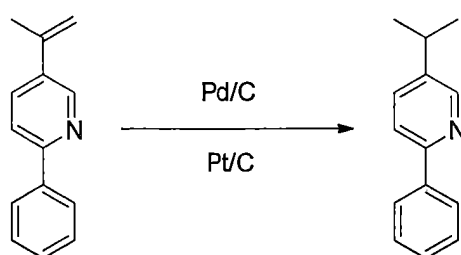
在惰性氣氛下使存於EtOH (30 mL)及MeOH (30 mL)中之三氟甲烷磺酸銦錯合物(3.0 g, 3.76 mmol)與4-(4-異丁基苯基)-2-苯基吡啶(3.0 g, 10.44 mmol)之混合物回流20 h。將反應混合物冷卻至室溫，用乙醇稀釋，添加Celite®，並將混合物攪拌10 min。將混合物在玻璃料上之小矽膠塞上過濾，並用乙醇(3次至4次)及用己烷(3次至4次)洗滌。丟棄濾液。然後用二氯甲烷洗滌Celite®/二氧化矽塞以溶析產物。在矽膠上利用甲苯對粗產物進行層析，從而得到1.35 g (44%產率)呈黃色固體之化合物7。藉由HPLC (99.9%純)及LC/MS證實化合物7。

化合物8之合成



步驟1

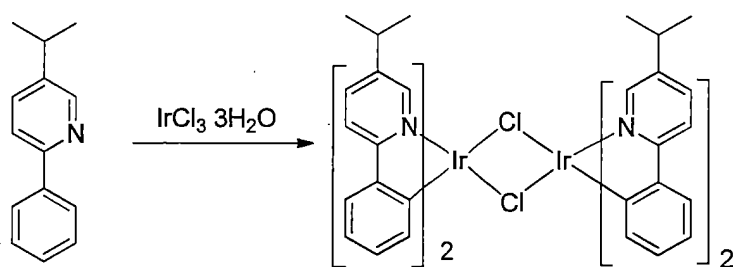
2-苯基-5-(丙-1-烯-2-基)吡啶之合成：向1 L圓底燒瓶中添加5-氯-2-苯基吡啶(10.15 g, 53.5 mmol)、二環己基(2',6'-二甲氧基-[1,1'-聯苯]-2-基)膦(1.8 g, 4.3 mmol)、磷酸三鉀單水合物(37.0 g, 161 mmol)與甲苯(200 mL)及水(20 mL)。利用N₂使反應混合物脫氣20分鐘，然後添加4,4,5,5-四甲基-2-(丙-1-烯-2-基)-1,3,2-二氧雜戊硼烷(12.07 mL, 64.2 mmol)及Pd₂(dba)₃ (0.980 g, 1.070 mmol)，並使反應混合物回流18 h。移除水層，並將有機層濃縮至乾燥。在矽膠上利用存於己烷中之0%至20% EtOAc對粗產物進行層析，從而得到11 g之期望產物(HPLC純度：95%)。藉由GC/MS證實該產物。



步驟2

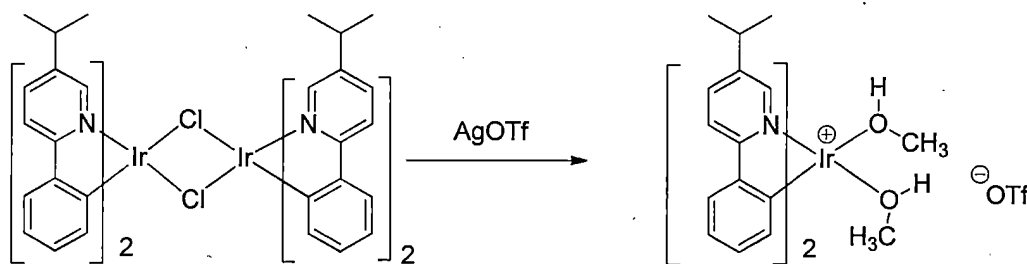
2-苯基-5-異丙基吡啶之合成：將2-苯基-5-(丙-1-烯-2-基)吡啶(11 g, 56.3 mmol)添加至含有EtOH (150 mL)之氫化器瓶中。藉由鼓泡之N₂使反應混合物脫氣10 min，其後，添加Pd/C (0.60 g, 5.63 mmol)及Pt/C (0.55 g, 2.82 mmol)。將反應混合物置於Parr氫化器上1.5 h (H₂約

為70 psi，根據理論計算)。將反應混合物在緊密填充之Celite®床上過濾，並用二氯甲烷洗滌。在旋轉蒸發器上移除溶劑且GC/MS證實轉化完全。將粗產物吸附於Celite®上用於管柱層析法。在矽膠上利用存於己烷中之10% EtOAc對粗產物進行層析，從而得到6 g (54%產率)之期望產物(HPLC純度：100%)。藉由GC/MS證實該產物。



步驟3

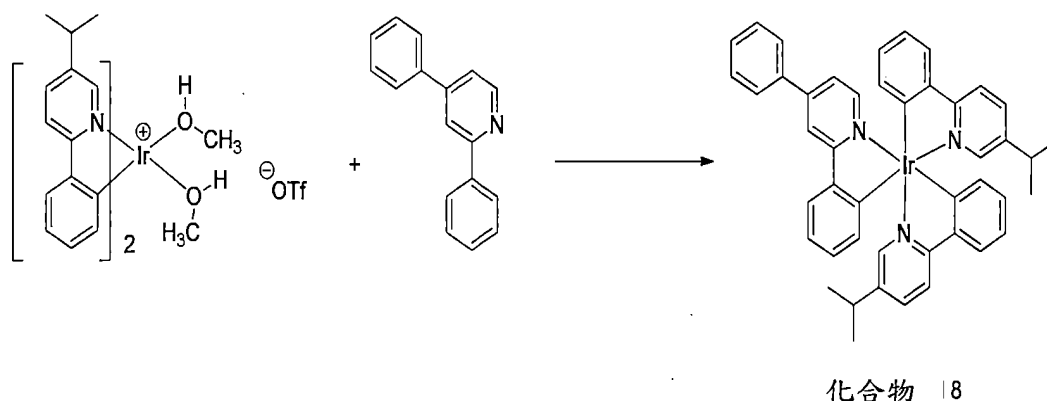
氯橋連之銱二聚體之合成：在氮氣氣氛下向500 mL圓底燒瓶中添加5-異丙基-2-苯基吡啶(6.0 g, 30.4 mmol及氯化銱(III)水合物(3.57 g, 10.14 mmol)與2-乙氧基乙醇(100 mL)及水(33.3 mL)。在130℃下使所得反應混合物回流18 h。將所得沈澱物過濾，並用甲醇(3次至4次)及己烷(3次至4次)洗滌。乾燥所獲得之產物，從而得到7 g (100%產率)之期望產物。



步驟4

三氟甲烷磺酸銱鹽之合成：將銱二聚體(5.3 g, 4.27 mmol)溶解於

500 mL之二氯甲烷中。在單獨燒瓶中，將三氟甲烷磺酸銀(I) (2.3 g, 8.97 mmol)溶解於MeOH (250 mL)中，並在室溫下緩慢添加至二氯甲烷溶液中，同時連續攪拌。在黑暗中將反應混合物攪拌過夜。經緊密填充之Celite®床過濾反應混合物，並在真空下移除溶劑，從而得到6.9 g (100%產率)呈褐色固體之產物。不進一步純化即使用該產物。



步驟5

化合物8之合成

在惰性氣氛下使存於EtOH (30 mL)及MeOH (30 mL)中之三氟甲烷磺酸銦錯合物(3.0 g, 3.76 mmol)與2-(二苯并[b,d]呋喃-4-基)-4,5-二甲基吡啶(3.0 g, 10.98 mmol)之混合物回流20 h。將反應混合物冷卻至室溫，用乙醇稀釋，添加Celite®，並將混合物攪拌10 min。將混合物在玻璃料上之小矽膠塞上過濾，並用乙醇(3次至4次)及用己烷(3次至4次)洗滌。丟棄濾液。然後用二氯甲烷洗滌Celite®/二氧化矽塞以溶析產物。在矽膠上利用1/1二氯甲烷/己烷對粗產物進行層析，從而得到2.1 g (65%產率)呈黃色固體之化合物8。藉由HPLC (99.8%純)及LC/MS證實該產物。

應瞭解，本文所述之各種實施例僅用於舉例說明，且其不意欲限制本發明之範圍。例如，本文所述之許多材料及結構可用其他材料及結構代替，而不背離本發明之精神。因此，所主張之本發明可包括本

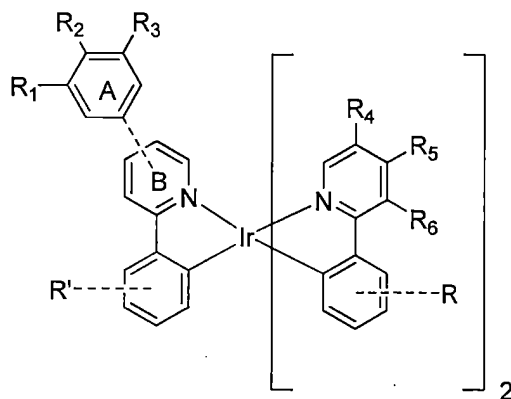
文所述之特定實例及較佳實施例之變化形式，如熟習此項技術者將顯而易見。應瞭解，關於本發明為何可行之各種理論不意欲具有限制性。

【符號說明】

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

申請專利範圍

1. 一種化合物，其係具有下式之雜配位銥錯合物：



式I；

其中 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 係獨立地選自由氫、氘、環烷基、氘化環烷基、烷基及氘化烷基組成之群；

其中 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 中之至少一者係環烷基、氘化環烷基、烷基或氘化烷基；

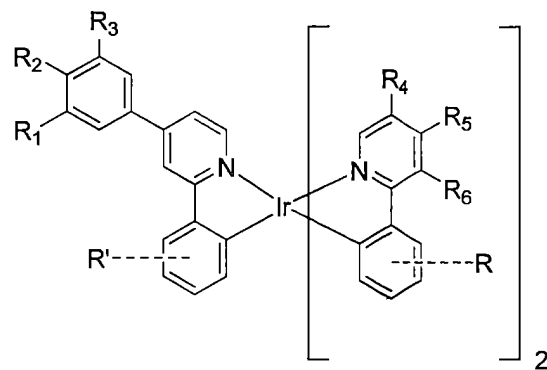
其中任何兩個相鄰 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 視情況連接在一起以形成環；

其中環A係附接至環B之4位或5位；且

其中R及R'代表單取代、二取代、三取代或四取代且係獨立地選自由以下組成之群：

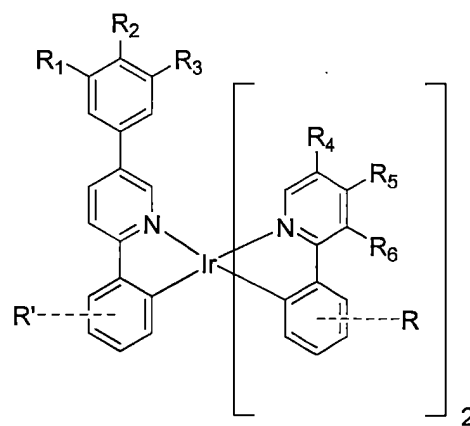
氫、氘、鹵基、烷基、環烷基、雜烷基、芳基烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、甲矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸基、酯基、腈基、異腈基、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

2. 如請求項1之化合物，其中該化合物具有下式之結構：



式II。

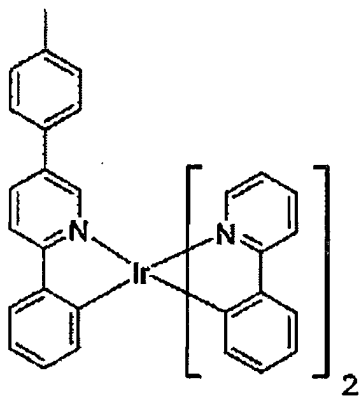
3. 如請求項1之化合物，其中該化合物具有下式之結構：



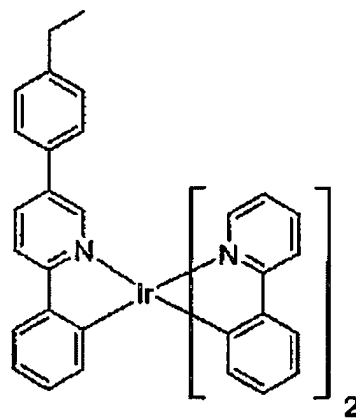
式III。

4. 如請求項1之化合物，其中R₁係烷基。
5. 如請求項1之化合物，其中R₂係烷基。
6. 如請求項1之化合物，其中R₃係烷基。
7. 如請求項1之化合物，其中R₄係烷基。
8. 如請求項1之化合物，其中R₅係烷基。
9. 如請求項1之化合物，其中R₆係烷基。
10. 如請求項1之化合物，其中R₁、R₂及R₃中之至少一者係烷基。
11. 如請求項1之化合物，其中R₄、R₅及R₆中之至少一者係烷基。
12. 如請求項1之化合物，其中R₁、R₂及R₃中之至少一者係烷基且R₄、R₅及R₆中之至少一者係烷基。
13. 如請求項1之化合物，其中該烷基含有至少2個碳。
14. 如請求項1之化合物，其中該烷基含有至少3個碳。

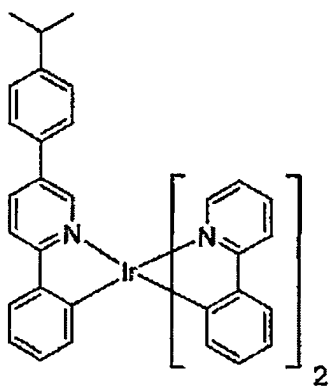
15. 如請求項1之化合物，其中該烷基含有最多6個碳。
16. 如請求項1之化合物，其中該烷基含有多於10個碳。
17. 如請求項1之化合物，其中該化合物發射如下黃光：當該光具有介於約530 nm至約580 nm之間之峰值波長時，其半峰全幅值介於約70 nm至約110 nm之間。
18. 如請求項1之化合物，其中該化合物係選自由以下組成之群：



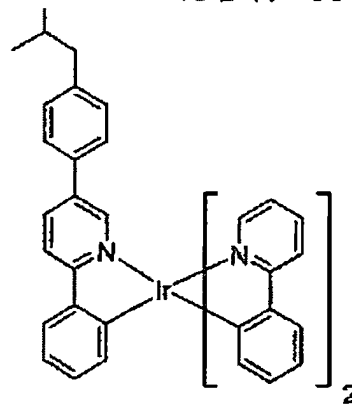
化合物 49



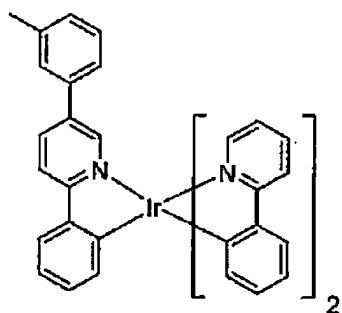
化合物 50



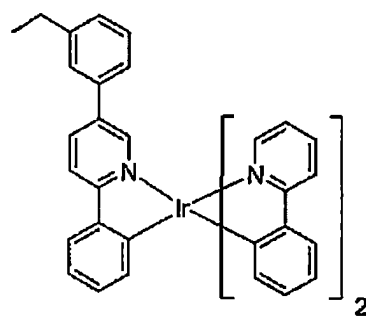
化合物 51



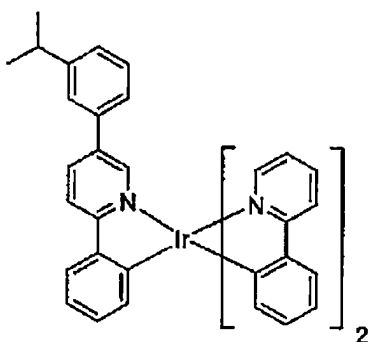
化合物 52



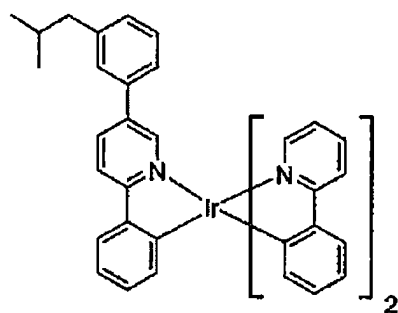
化合物 53



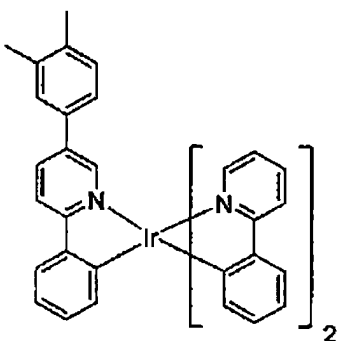
化合物 54



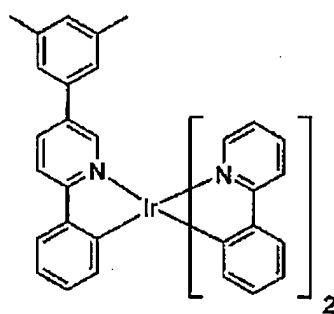
化合物 55



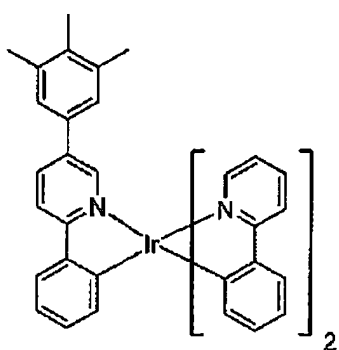
化合物 56



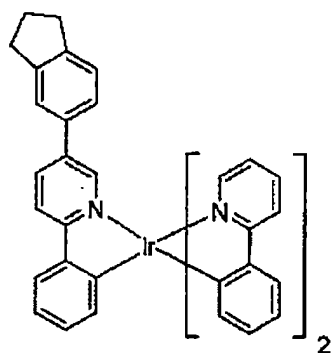
化合物 57



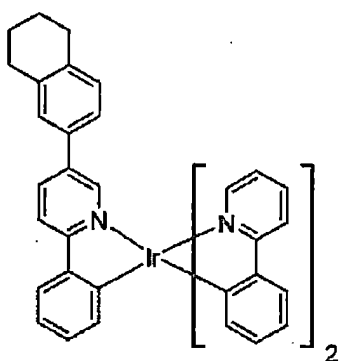
化合物 58



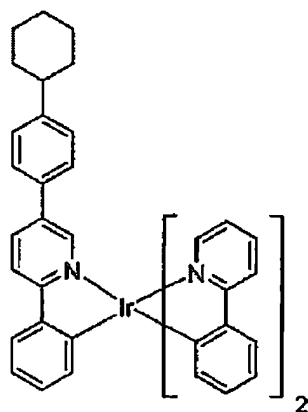
化合物 59



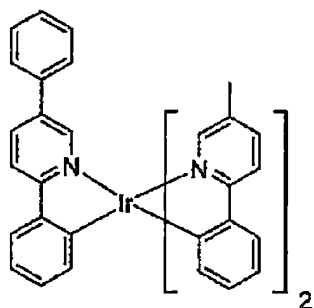
化合物 60



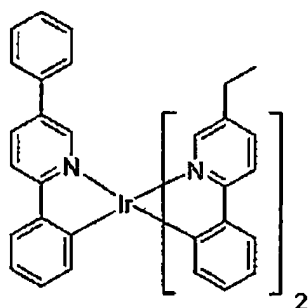
化合物 61



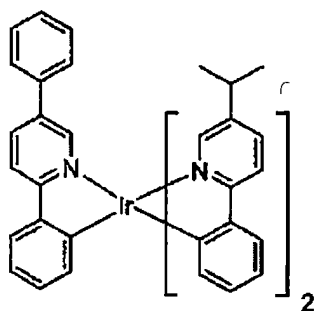
化合物 62



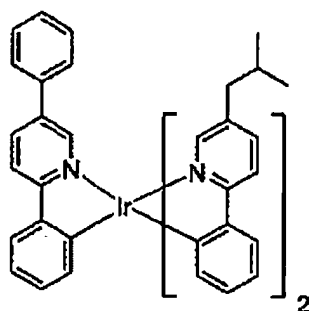
化合物 63



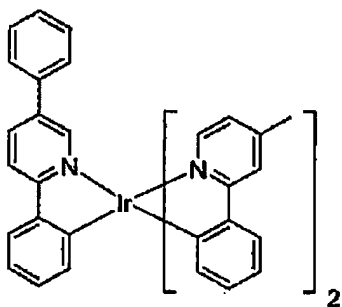
化合物 64



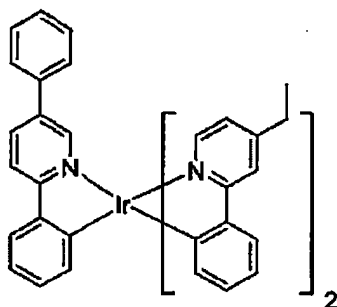
化合物 65



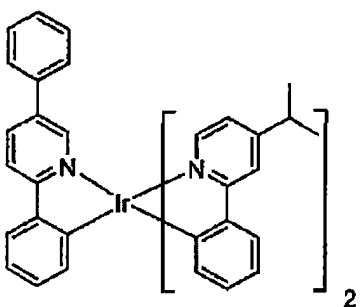
化合物 66



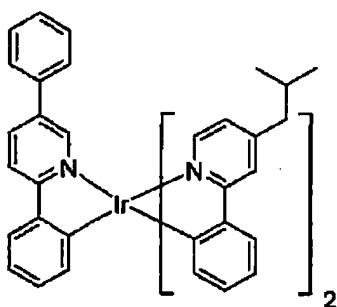
化合物 67



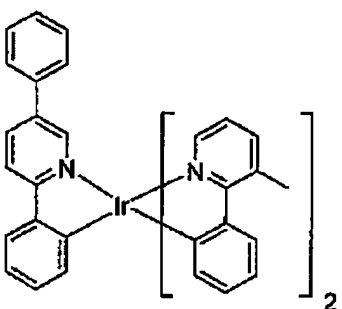
化合物 68



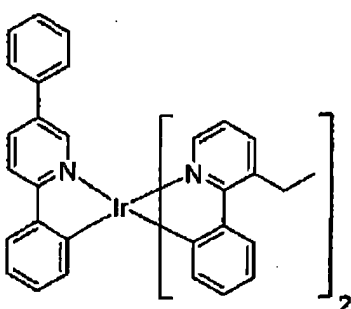
化合物 69



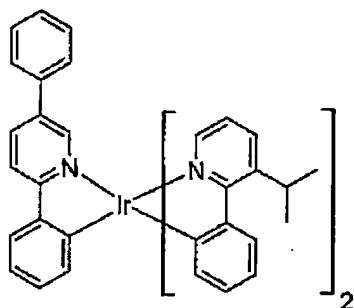
化合物 70



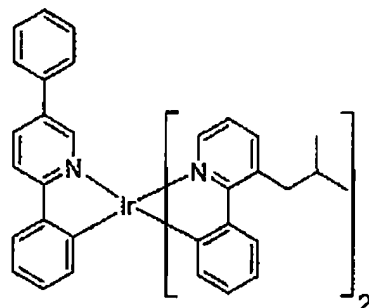
化合物 71



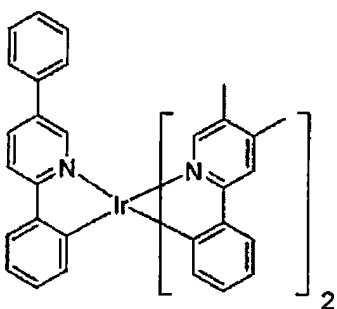
化合物 72



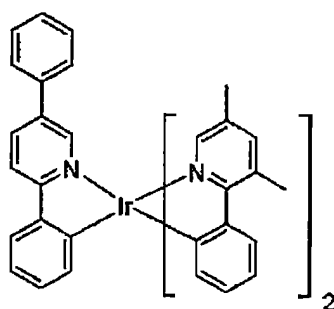
化合物 73



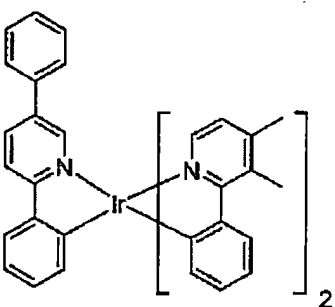
化合物 74



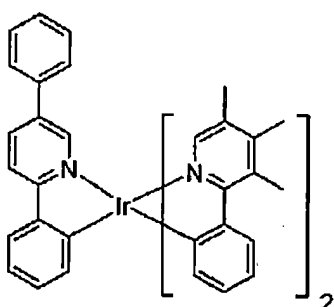
化合物 75



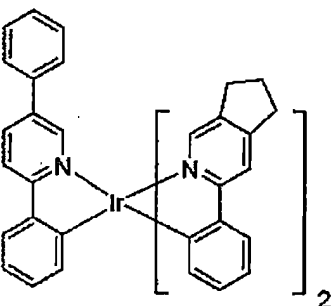
化合物 76



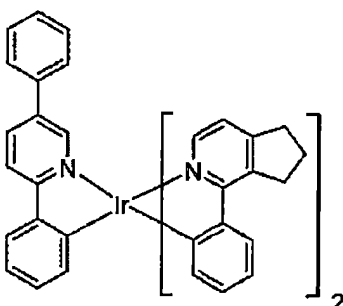
化合物 77



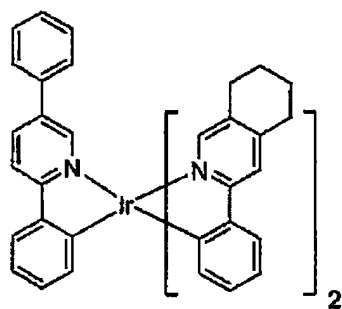
化合物 78



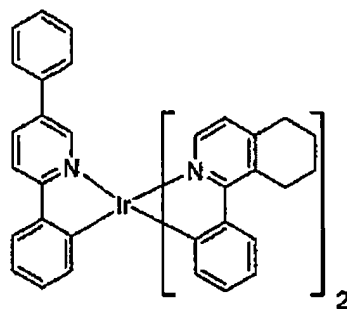
化合物 79



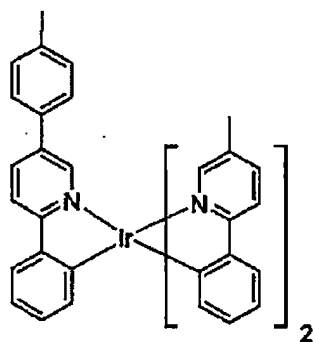
化合物 80



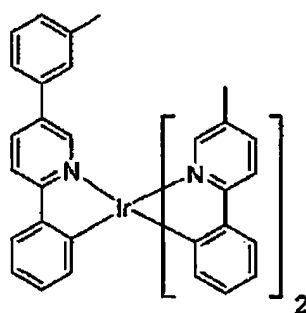
化合物 81



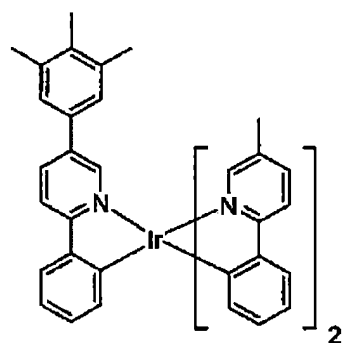
化合物 82



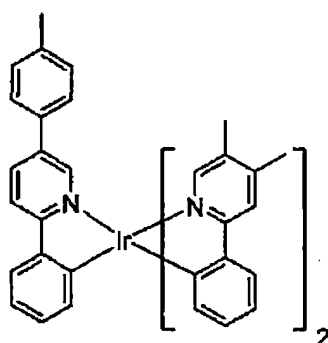
化合物 83



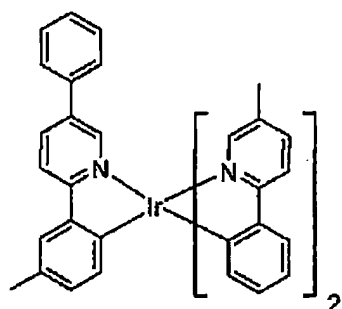
化合物 84



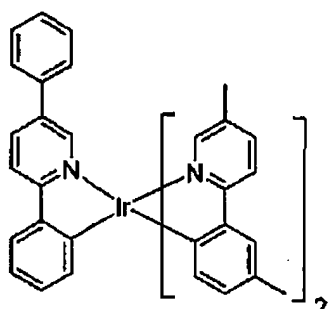
化合物 85



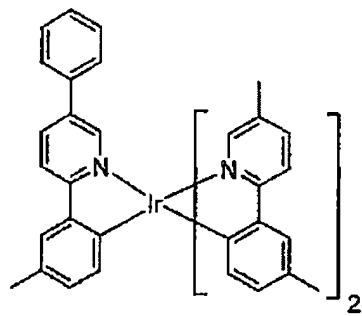
化合物 86



化合物 87



化合物 88



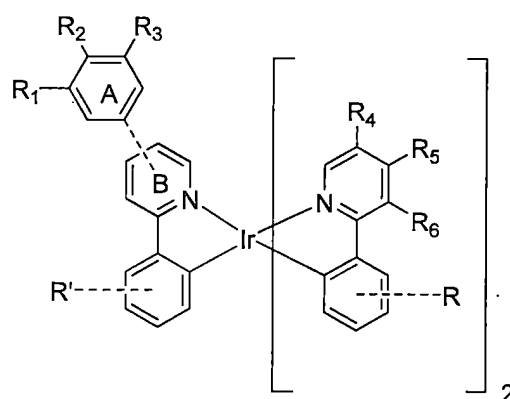
化合物 89

19. 一種第一裝置，其包含第一有機發光裝置，其進一步包含：

陽極；

陰極；及

有機層，其安置於該陽極與該陰極之間且包含具有下式之化合物：



式I；

其中 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 係獨立地選自由氫、氘、環烷基、氘化環烷基、烷基及氘化烷基組成之群；

其中 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 中之至少一者係環烷基、氘化環烷基、烷基或氘化烷基；

其中任何兩個相鄰 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 、 R_5 及 R_6 視情況連接在一起以形成環；

其中環A係附接至環B之4位或5位；且

其中R及R'代表單取代、二取代、三取代或四取代且係獨立地選自由以下組成之群：

氫、氖、鹵基、烷基、環烷基、雜烷基、芳基烷基、烷氧基、芳氧基、胺基、甲矽烷基、烯基、環烯基、雜烯基、炔基、芳基、雜芳基、醯基、羰基、羧酸基、酯基、腈基、異腈基、硫烷基、亞磺醯基、磺醯基、膦基及其組合。

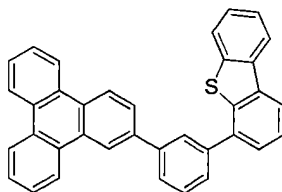
20. 如請求項19之第一裝置，其中該有機層係發射層且該化合物係發射摻雜劑。
21. 如請求項19之第一裝置，其中該有機層係發射層且該化合物係非發射摻雜劑。
22. 如請求項19之第一裝置，其中該有機層進一步包含主體。
23. 如請求項22之第一裝置，其中該主體包含含有聯三伸苯之苯并稠合噻吩或苯并稠合呋喃；

其中該主體中之任一取代基係獨立地選自由以下組成之群之未經稠合取代基： C_nH_{2n+1} 、 OC_nH_{2n+1} 、 OAr_1 、 $N(C_nH_{2n+1})_2$ 、 $N(Ar_1)(Ar_2)$ 、 $CH=CH-C_nH_{2n+1}$ 、 $C\equiv CHC_nH_{2n+1}$ 、 Ar_1 、 Ar_1-Ar_2 、 $C_nH_{2n}-Ar_1$ ，或未經取代；

其中n係1至10；且

其中 Ar_1 及 Ar_2 係獨立地選自由苯、聯苯、萘、聯三伸苯、呋喃及其雜芳香族類似物組成之群。

24. 如請求項23之第一裝置，其中該主體具有下式：



化合物 H。

25. 如請求項22之第一裝置，其中該主體係金屬錯合物。

26. 如請求項19之第一裝置，其中該第一裝置係消費產品。
27. 如請求項19之第一裝置，其中該第一裝置係有機發光裝置。
28. 如請求項19之第一裝置，其中該第一裝置進一步包含峰值波長介於400奈米至500奈米之間之第二發射摻雜劑。
29. 如請求項28之第一裝置，其中該第二發射摻雜劑係螢光發射器。
30. 如請求項28之第一裝置，其中該第二發射摻雜劑係磷光發射器。
31. 如請求項19之第一裝置，其中該第一裝置包含發光面板。
32. 如請求項19之第一裝置，其中該第一裝置進一步包含第一有機發光裝置及與該第一有機發光裝置分開之第二發光裝置，該第一有機發光裝置包含式I化合物，該第二發光裝置包含峰值波長介於400奈米至500奈米之間之發射摻雜劑。
33. 如請求項19之第一裝置，其中該第一裝置包含具有第一發射層及第二發射層之有機發光裝置；
其中該第一發射層包含式I化合物；且
其中該第二發射層包含峰值波長介於400奈米至500奈米之間之發射摻雜劑。