



(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本

(11)公開編號：TW 201204687 A1

(43)公開日：中華民國 101 (2012) 年 02 月 01 日

(21)申請案號：100120840

(22)申請日：中華民國 100 (2011) 年 06 月 15 日

(51)Int. Cl.：

C07C211/56 (2006.01)

C08G73/02 (2006.01)

H01L51/54 (2006.01)

H05B33/22 (2006.01)

(30)優先權：2010/06/17

美國

61/355,614

(71)申請人：杜邦股份有限公司 (美國) E. I. DU PONT DE NEMOURS AND COMPANY (US)
美國

(72)發明人：帕克羌和 PARK, KYUNG-HO (KR)；拉杜 羅拉 莎賓那 RADU, NORA SABINA (US)；強漢森 蓋瑞 A JOHANSSON, GARY A. (US)；菲尼摩 亞當 FENNIMORE, ADAM (US)；德拉尼 威廉 J DELANEY, WILLIAM J. (US)；雷克勞斯 丹尼爾 大衛 LECLOUX, DANIEL DAVID (US)

(74)代理人：陳傳岳；郭雨嵐

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：16 項 圖式數：2 共 101 頁

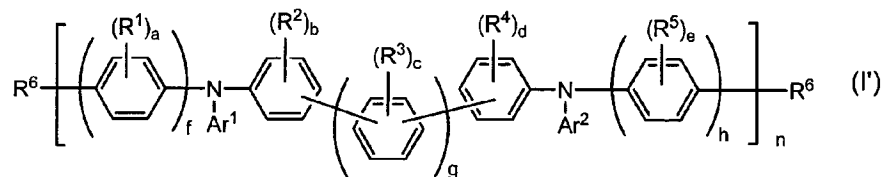
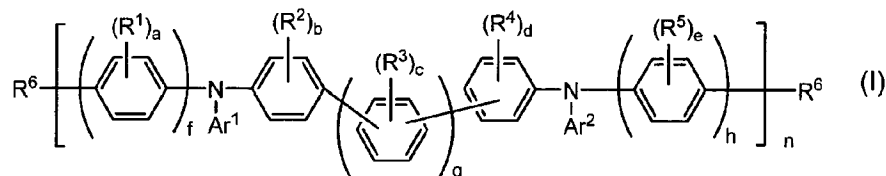
(54)名稱

電活性材料

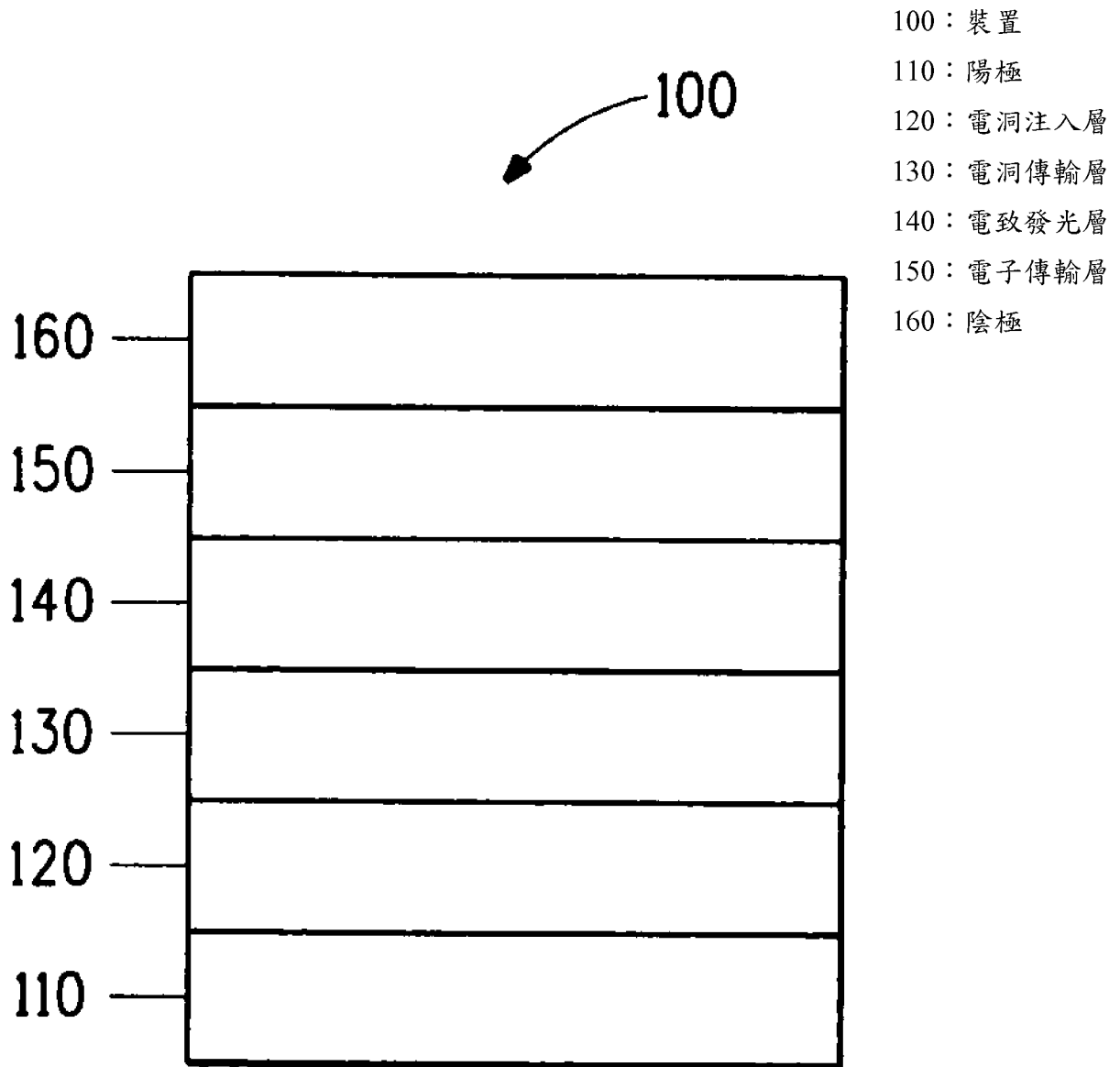
ELECTROACTIVE MATERIALS

(57)摘要

所揭露者為一具有式 I 或式 I' 之化合物：



於式 I 及式 I' 中：Ar¹ 與 Ar² 係相同或不同且為芳基；R¹ 至 R⁵ 於每次出現時係獨立為相同或不同，且為 D、F、烷基、芳基、烷氧基、矽基或可交聯基；R⁶ 為 H、D 或鹵素；a 至 e 係各自獨立為 0 到 4 之一整數；f 為 1 或 2；g 為 0、1 或 2；h 為 1 或 2；以及 n 係大於 0 的整數。





(19)中華民國智慧財產局

(12)發明說明書公開本

(11)公開編號：TW 201204687 A1

(43)公開日：中華民國 101 (2012) 年 02 月 01 日

(21)申請案號：100120840

(22)申請日：中華民國 100 (2011) 年 06 月 15 日

(51)Int. Cl.：

C07C211/56 (2006.01)

C08G73/02 (2006.01)

H01L51/54 (2006.01)

H05B33/22 (2006.01)

(30)優先權：2010/06/17

美國

61/355,614

(71)申請人：杜邦股份有限公司 (美國) E. I. DU PONT DE NEMOURS AND COMPANY (US)
美國

(72)發明人：帕克羌和 PARK, KYUNG-HO (KR)；拉杜 羅拉 莎賓那 RADU, NORA SABINA (US)；強漢森 蓋瑞 A JOHANSSON, GARY A. (US)；菲尼摩 亞當 FENNIMORE, ADAM (US)；德拉尼 威廉 J DELANEY, WILLIAM J. (US)；雷克勞斯 丹尼爾 大衛 LECLOUX, DANIEL DAVID (US)

(74)代理人：陳傳岳；郭雨嵐

申請實體審查：無 申請專利範圍項數：16 項 圖式數：2 共 101 頁

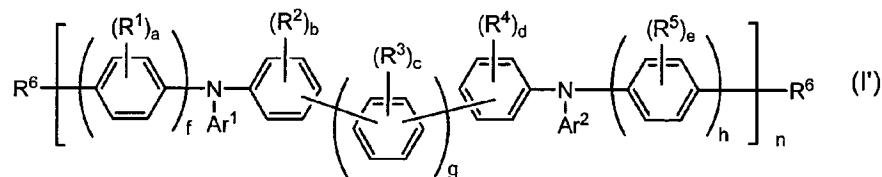
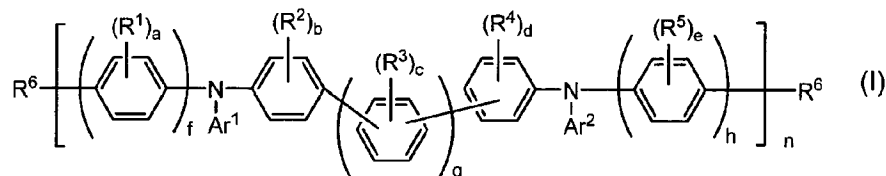
(54)名稱

電活性材料

ELECTROACTIVE MATERIALS

(57)摘要

所揭露者為一具有式 I 或式 I' 之化合物：



於式 I 及式 I' 中：Ar¹ 與 Ar² 係相同或不同且為芳基；R¹ 至 R⁵ 於每次出現時係獨立為相同或不同，且為 D、F、烷基、芳基、烷氧基、矽基或可交聯基；R⁶ 為 H、D 或鹵素；a 至 e 係各自獨立為 0 到 4 之一整數；f 為 1 或 2；g 為 0、1 或 2；h 為 1 或 2；以及 n 係大於 0 的整數。

六、發明說明：

本申請案根據 35 U.S.C. § 119(e)主張於 2010 年 6 月 17 日申請之美國臨時申請案第 61/355,614 號的優先權，其以引用方式全文併入本文中。

5

【發明所屬之技術領域】

本文所揭露者係關於新穎之電活性化合物。本文所揭露者亦關於具有至少一活性層之電子裝置，該活性層包括一種前述之電活性化合物。

10

【先前技術】

於有機光活性電子裝置中，例如構成 OLED 顯示器之有機發光二極體(「OLED」)，有機活性層係夾設於兩電接觸層之間。在一 OLED 中，在施加一電壓於該等電接觸層兩端時，該有機光活性層立即發射光，穿過該透光電接觸層。

15

已知可使用有機電致發光化合物作為發光二極體中的光活性成分。已使用簡單的有機分子、共軛聚合物及有機金屬錯合物。使用電致發光材料的裝置通常包括一或多個附加的電活性層，其係介於該電致發光層與一接觸層之間。一電洞傳輸層可介於該電致發光層與該電洞注入接觸層之間。該電洞注入接觸層亦可以稱為陽極。一電子傳輸層可介於該電致發光層與該電子注入接觸層之間。該電子注入接觸層亦可以稱為陰極。

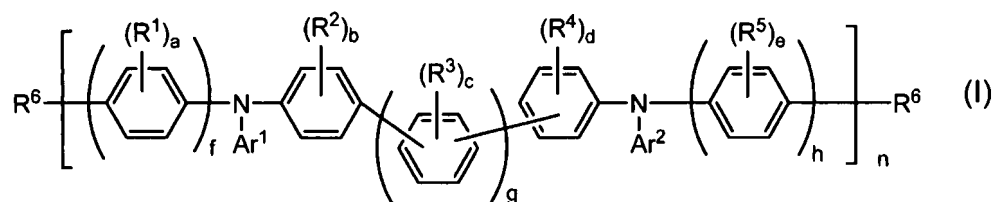
20

對於用於電子裝置之電活性材料仍持續有需求。

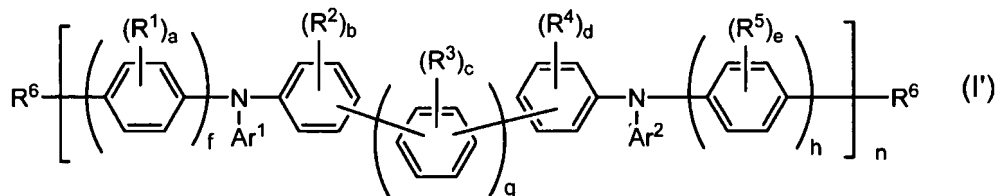
25

【發明內容】

所提供者為一種具有式 I 或式 I' 之化合物：



5



其中：

Ar^1 與 Ar^2 係相同或不同且為芳基；

10 R^1 至 R^5 於每次出現時係獨立為相同或不同，且係選自於由 D、F、烷基、芳基、烷氧基、矽基及一可交聯基所組成之群組；

R^6 於每次出現時係相同或不同，且係選自於由 H、D 及鹵素所組成之群組；

15 a 至 e 係獨立為 0 到 4 之一整數；

f 為 1 或 2；

g 為 0、1 或 2；

h 為 1 或 2；以及

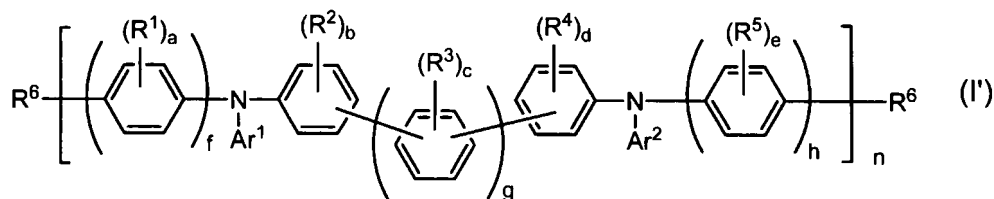
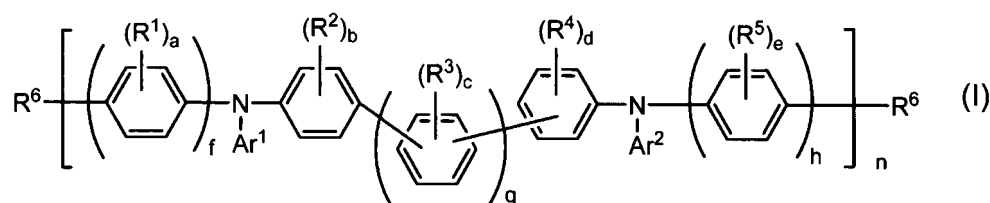
n 為大於 0 的整數。

20 本發明亦提供一種具有至少一包括上述化合物之層的電子裝置。

前述一般性描述及以下詳細描述僅為例示性及說明性的，且不限制如隨附申請專利範圍所定義之本發明。

【實施方式】

所提供者為一種具有式 I 或式 I' 之化合物：



其中：

Ar^1 與 Ar^2 係相同或不同且為芳基；

R^1 至 R^5 於每次出現時係獨立為相同或不同，且係選自於由 D、F、烷基、芳基、烷氧基、矽基及一可交聯基所組成之群組；

R^6 於每次出現時係相同或不同，且係選自於由 H、D 及鹵素所組成之群組；

a 至 e 係獨立為 0 到 4 之一整數；

f 為 1 或 2；

g 為 0、1 或 2；

h 為 1 或 2；以及

n 為大於 0 的整數。

本發明亦提供一種具有至少一包括上述化合物之層的電子裝置。

上述所描述各種態樣與實施例僅為例示性且非
5 限制性。在閱讀本說明書後，熟習此項技術者瞭解在不
偏離本發明之範疇下，亦可能有其他態樣與實施例。

根據下述之詳細說明與申請專利範圍，易使該等實
施例中之一個或多個實施例的其他特徵及益處更加彰
顯。本發明的詳細描述首先著重在解釋術語的定義和闡
10 明，接著依序說明電活性化合物、電子裝置及最後提出
實例。

1. 術語的定義和闡明

在提出下述實施例之細節前，先定義或闡明一些術
15 語。

如本文所用術語「烷基(alkyl)」包括支鏈及直鏈飽
和脂肪族烴基(branched and straight-chain saturated
aliphatic hydrocarbon groups)。除非有其它說明，該術
語亦欲包括環基(cyclic groups)。烷基之實例包括甲基、
20 乙基、丙基、異丙基、丁基、異丁基、二級丁基、三級
丁基、戊基、異戊基、新戊基、環戊基、己基、環己基、
異己基及類似物。該術語「烷基」進一步包括取代烴基
及非取代烴基(substituted and unsubstituted hydrocarbon
groups)兩者。在某些實施例中，該烷基可以為單、雙及
25 三取代的。一取代烷基之實例係三氟甲基
(trifluoromethyl)。其它取代烷基係由在此所述之取代基

中之一個或多個取代基所形成。在某些實施例中，烷基具有 1 至 20 個碳原子。在其它實施例中，該基團具有 1 至 6 個碳原子。該術語意指包括雜烷基(heteroalkyl groups)。異烷基可具有 1-20 個碳原子。

5 術語「芳基」表示芳香族碳環部分(aromatic carbocyclic moiety)，該芳香族碳環部分可以是一單環(單環)或者熔合在一起或共價鏈結之多環(雙環或更多環)。該芳基部分之任何適當環位置皆可以共價鍵連接至經定義之化學結構。芳基部分之實例包括但不限於苯基、1-萘基、2-萘基、二氫萘基、四氫萘基、聯苯。蒽基、菲基、蒾基、二氫蒾基、伸聯苯基、二氫蒾基、蒾基及類似物。在某些實施例中，芳基具有 6 至 60 個碳原子；在某些實施例中，則具有 6 至 30 個碳原子。該術語意指包括雜芳基(heteroaryl groups)。雜芳基可具有
10 4-50 個碳原子；在某些實施例中，則具有 4-30 個碳原子。
15 子。

術語「烷氧基(alkoxy)」意指表示基團-OR，其中 R 係烷基。

20 術語「芳氧基(aryloxy)」意指表示基團-OR，其中 R 係芳基。

除有另行指示，所有的基團可為未取代的或取代的。

當術語「電荷傳輸」指一層、材料、構件或結構時，術語「電荷傳輸」係為了表示該層、材料、構件或結構有助於電荷以相對效率及小電荷損失穿過該層、材料、
25 構件或結構的厚度來遷移。電洞傳輸材料傳導正電荷；

電子傳輸材料傳導負電荷；雖然發光材料亦可以具有某些電荷傳輸特性，但是術語「電荷傳輸層、材料、構件或結構」沒有意欲包括其主要功能為發光之層、材料、構件或結構。

5 術語「化合物」意指表示一由分子(該分子還更包括有原子)所製成之不帶電荷的材料，其中沒有使化學鍵斷裂，該等原子無法藉由物理方式與它們對應之分子分離。該術語意指包括寡聚物及聚合物。

10 術語「可交聯基」或「交聯基」意指表示一種藉由熱處理或暴露於輻射而導致交聯的基團。在某些實施例中，該輻射係 UV 或可見光。

 當術語「電活性」係指一層或材料時，該術語「電活性」意指電性上有助於該裝置之操作的一層或材料。活性材料之實例包括但不限於可傳導、注入、傳輸或阻擋電荷之材料，其中該電荷可為一電子或電洞，或可於接受輻射時展現電子-電洞對濃度改變或發射輻射之材料。非活性材料之實例包括但不侷限於平坦化材料、絕緣材料及環境隔絕材料。

15

20 字首「氟(fluoro)」意指表示已以氟取代在一基團中之一個或多個氫。

 字首「雜」表示一或多個碳原子已被不同原子置換。在某些實施中，該雜原子係 O、N、S 或其組合。

 術語「液體組成物」係意指一材料已溶解於其中而形成一溶液之液體介質、一材料已散布於其中而形成一分散液之液體介質或一材料已懸浮於其中而形成一懸浮液或一乳化液之液體介質。

25

術語「矽基」係指基團 R_3Si- ，其中 R 為 H、D、C1-20 烷基、氟烷基或芳基。在某些實施例中，在一 R 烷基中之一個或以上之碳係經矽所置換。在某些實施例中，該等矽基係 (己基) $_2Si(Me)CH_2CH_2Si(Me)_2-$ 及 $[CF_3(CF_2)_6CH_2CH_2]_2SiMe-$ 。

術語「矽氧烷」係指 $(RO)_3Si-$ 基團，其中 R 係氫(H)、氘(D)、烷基(碳數 1-20)或氟烷基。

片語「鄰近(adjacent to)」(當用以提及在一裝置中之層時)沒有必要表示一層直接緊鄰另一層。另一方面，片語「相鄰 R 基」係用以表示在一化學式中彼此鄰接之 R 基。換言之，相鄰 R 基係位於以一鍵結鄰接之數原子上。

如本文中所用者，術語「包含」、「包括」、「具有」或其任何其它變型均旨在涵蓋非排他性的包括。舉例而言，包括一系列要素的製程、方法、製品或裝置不一定僅限於該些要素，而是可包括未明確列出或該製程、方法、製品或裝置所固有的其他要素。此外，除非有相反的明確說明，「或」是指包含性的「或」，而不是指排他性的「或」。例如，可由下列之任一者滿足條件 A 或 B：A 成立（或存在）且 B 不成立（或不存在）、A 不成立（或不存在）且 B 成立（或存在）以及 A 和 B 兩者皆成立（或存在）。

又，使用「一」或「一個」來描述本文所述的元件和組分。此舉僅僅是為了方便，以及對本發明的範圍提供一般性的意義。這種描述應被理解為包括一個或至少

一個，並且該單數也同時包括複數，除非很明顯地另指他意。

在本專利說明書中，除非以他種方式明白陳述或指出異於使用之背景，其中說明書標的物實施例以包含、
5 包含、含有、具有、組成或構成或部分特性或要素陳述或說明，除了明白陳述或說明，一或多種特性或要素可能會存於實施例中。本文所揭露之標的之另一實施例係描述為主要由某些特徵或元件所組成，其中並不存在會
10 本質上改變該實施例之操作原理或的區別性特點的特徵或元件。本文所記載之標的之又一實施例係描述為由某些特徵或元件所組成，在此實施例或其非實質變化中，僅存在明確指出或描述的特徵或元件。

對應於元素週期表中之行的族編號使用如 *CRC Handbook of Chemistry and Physics*，第 81 版(2000-2001)
15 中記載之「新符號」慣用語。

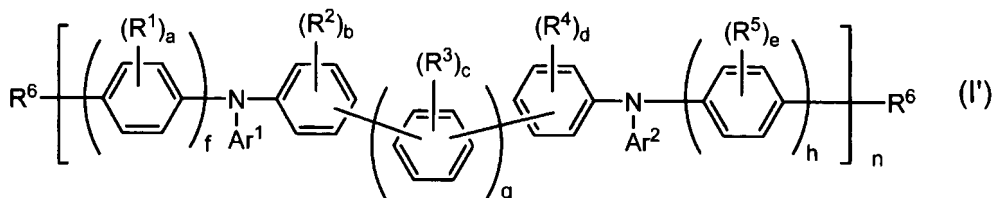
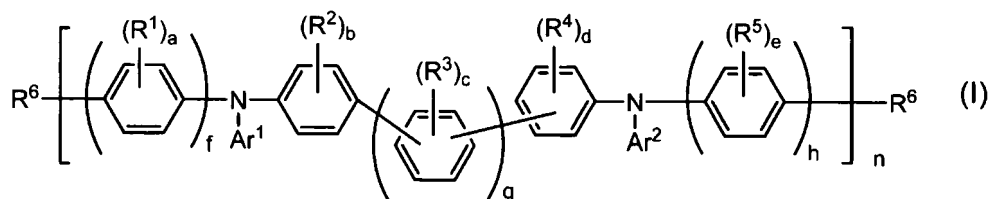
除非另加說明，否則在本文採用的所有技術以及科學名詞的含意，皆與熟習此項技術者所普遍認知者相同。儘管類似或同等於本文所述內容之方法或材料可用於本發明之實施例的實施或測試，但合適的方法與材料
20 仍如下所述。除非引用特定段落，否則本文所述之所有公開文獻、專利申請案、專利以及其他參考文獻均以引用方式全文併入本文中。在發生矛盾的情況下，以本說明書為準，包括定義在內。此外，該等材料、方法及實例僅係說明性質，而沒有意欲做限制拘束。

25 在本文未描述之範圍內，許多關於特定材料、加工行為(processing act)及電路的細節係習知的，且可在有

機發光二極體顯示器、光偵測器、光伏打及半導體構件技術領域的教科書及其他來源中找到。

2. 電活性化合物

5 本文所述之化合物具有式 I 或式 I'：



10

其中：

Ar^1 與 Ar^2 係相同或不同且為芳基；

R^1 至 R^5 於每次出現時係獨立為相同或不同，且係選自於由 D、F、烷基、芳基、烷氧基、矽基及一可交聯基所組成之群組；

15

R^6 於每次出現時係相同或不同，且係選自於由 H、D 及鹵素所組成之群組；

a 至 e 係獨立為 0 到 4 之一整數；

f 為 1 或 2；

g 為 0、1 或 2；

h 為 1 或 2；以及

n 為大於 0 的整數。

20

該化合物可為一 $n=1$ 之小分子、一寡聚物或一聚合物。在某些實施例中，該化合物為 $M_n > 20,000$ 之聚合物；在某些實施例中，該化合物為 $M_n > 50,000$ 之聚合物。

5 在某些實施例中， $n=1$ 且 R^6 為鹵素。此等化合物可作為用於形成聚合性化合物的單體。在某些實施例中，鹵素為 Cl 或 Br；在某些實施例中，鹵素為 Br。

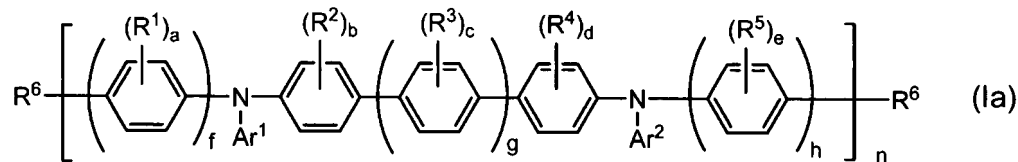
在某些實施例中， $n=1$ 且 R^6 為 H 或 D。

10 在某些實施例中，具有式 I 或式 I' 的化合物係經氘化。術語「氘化」係意指至少一個 H 已被 D 所取代。術語「氘化類似物」係指其中一或多個可用氫已被氘取代之化合物或基團的結構類似物。在一氘化化合物或氘化類似物中，所存在的氘比天然豐度含量多出至少 100 倍。在某些實施例中，該化合物係至少 10% 氘化。所謂的「%氘化的」或「%氘化」意謂氘核與質子加氘核之總和的比率，其以百分比表示。在某些實施例中，該化合物為至少 20% 氘化；在某些實施例中，至少 30% 氘化；在某些實施例中，至少 40% 氘化；在某些實施例中，至少 50% 氘化；在某些實施例中，至少 60% 氘化；在某些實施例中，至少 70% 氘化；在某些實施例中，至少 80% 氘化；在某些實施例中，至少 90% 氘化；在某些實施例中，100% 氘化。

25 氘化材料較不易被電洞、電子、激子或其組合所降解。氘化作用在裝置運作期間有潛力抑制化合物降解，故其可改善裝置壽命。一般而言，該改善不需要犧牲其它裝置性質。另外，氘化化合物經常比非氘化類似物具有更高的空氣穩定性(air tolerance)。此可導致在製備及

純化該材料，以及在使用該材料形成電子裝置的過程中具有更大的製程容差。

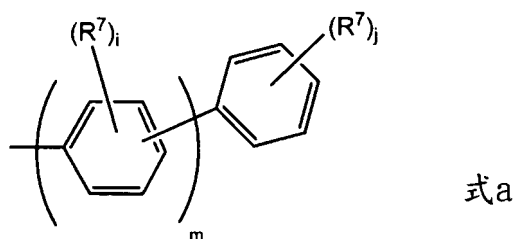
在某些實施例中，該式 I 或式 I' 的化合物具有式 Ia:



其中 R^1 至 R^6 、 Ar^1 、 Ar^2 、a-h 以及 n 係如上述式 I 中所定義。

在某些實施例中， Ar^1 與 Ar^2 為不具稠合環之芳基。

在某些實施例中， Ar^1 與 Ar^2 具有式 a



其中：

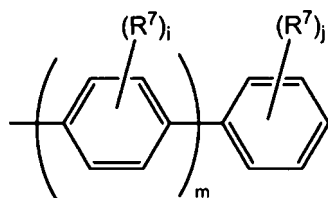
R^7 在每次出現時係相同或不同且係選自於由 D、烷基、烷氧基、矽氧烷及矽基所組成之群組；

i 在每次出現時係相同或不同，且為 0-4 之整數；

j 為 0-5 之整數；以及

m 為 1 至 5 之整數。

在某些實施例中， Ar^1 與 Ar^2 具有式 b



式b

其中：

R^7 在每次出現時係相同或不同且係選自於由 D、烷基、烷氧基、矽氧烷及矽基所組成之群組；

i 在每次出現時係相同或不同，且為 0-4 之整數；

j 為 0-5 之整數；以及

m 為 1 至 5 之整數。

在某些式 a 與 b 之實施例中， i 與 j 之至少一者非為零。在某些實施例中， $m = 1-3$ 。

在某些實施例中， Ar^1 與 Ar^2 係選自於由苯基、聯苯、聯三苯、其氘化衍生物及其衍生物所組成之群組，該等衍生物具有一個或多個選自於由烷基、烷氧基、矽基及一具有一交聯基之取代基所組成之群組之取代基。

在某些實施例中， R^1 至 R^5 為 D 或 C_{1-10} 烷基。在某些實施例中，該烷基係經氘化。

在某些實施例中， $a = e = 0$ 。在某些實施例中， $a = e = 4$ 且 R^1 與 R^5 為 D。

在某些實施例中， $b > 0$ 且至少一個 R^2 為烷基。在某些實施例中，該烷基係經氘化。在某些實施例中， $b = 4$ 、一個 R^2 為烷基且其他為 D。

在某些實施例中， $c > 0$ 且至少一個 R^3 為烷基。在某些實施例中，該烷基係經氘化。在某些實施例中， $c =$

4、一個 R^3 為烷基且其他為 D。在某些實施例中， $c = 4$ 、兩個 R^3 為烷基且兩個 R^3 為 D。

在某些實施例中， $d > 0$ 且至少一個 R^4 為烷基。在某些實施例中，該烷基係經氬化。在某些實施例中， $d =$
5 4、一個 R^4 為烷基且其他為 D。

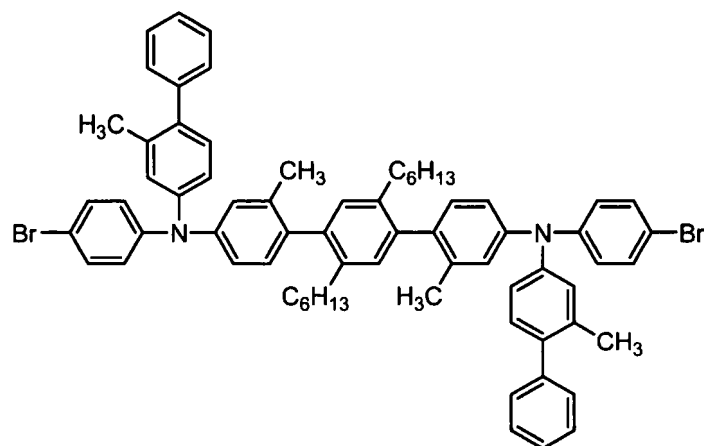
在某些實施例中， $f = h = 2$ 。

在某些實施例中， $g = 1$ 。

在某些實施例中，該具有式 I 或式 I' 之化合物具有高三重態能量。術語「三重態能量(triplet energy)」係指
10 一材料的最低激發三重態，以 eV 為單位。三重態能量係以正數記述且代表三重態相對於基態（通常為單重態）之能量。發光有機金屬材料從具有混合單重態與三重態特性的激態發射，且於本文中稱為「磷光」。當有機金屬磷光材料被用於發光層時，具有低三重態能量之
15 材料的存在會導致 >2.0 eV 能量之磷光發射的淬滅。這會造成效率降低。當該材料在該電致發光層（如一主體材料）中，或在鄰近該電致發光層之一層（如電洞傳輸層）中時，可發生淬滅。在某些實施例中，具有式 I 或式 I' 之材料具有大於 2.1 eV 的三重態能階；在某些實
20 施例中，大於 2.2 eV；在某些實施例中，大於 2.45 eV；在某些實施例中，大於 2.6 eV。該三重態能量可事先推算，或者可使用脈衝輻射分解(pulse radiolysis)或低溫發光光譜分析(low temperature luminescence spectroscopy)測量。

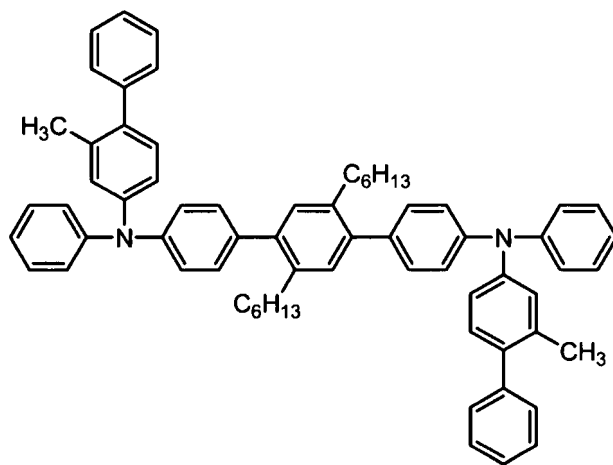
25 具有式 I 或式 I' 之化合物的某些非限制性實例包括下列化合物 A 至 EE。

化合物 A



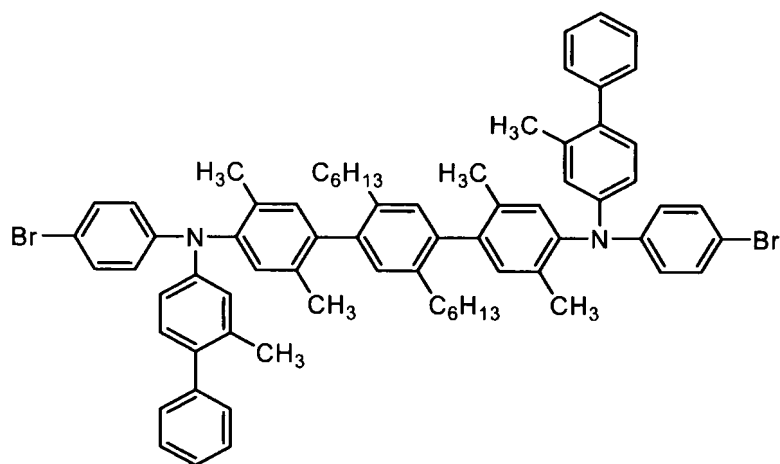
5

化合物 B

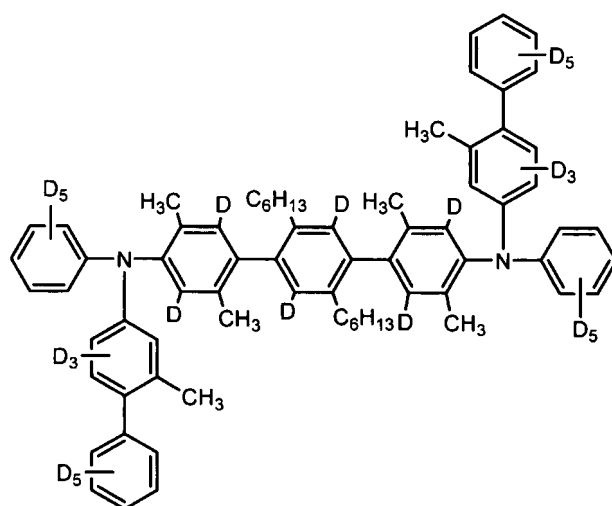


10

化合物 C

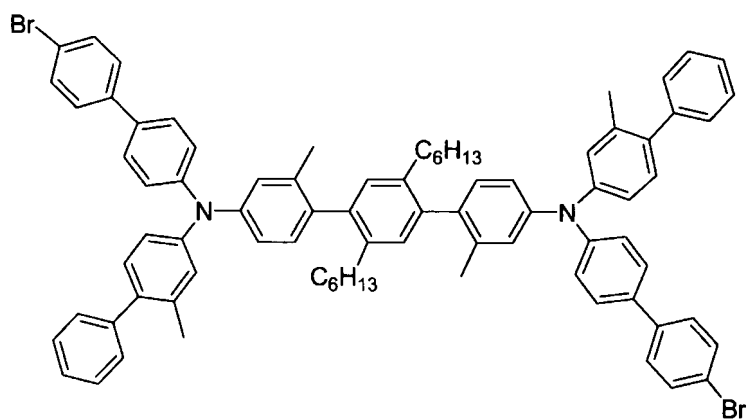


化合物 D

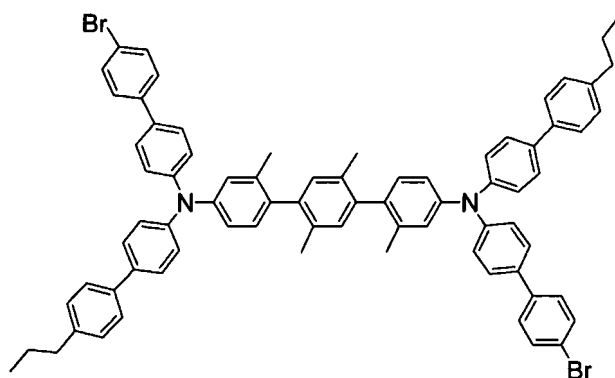


5

化合物 E

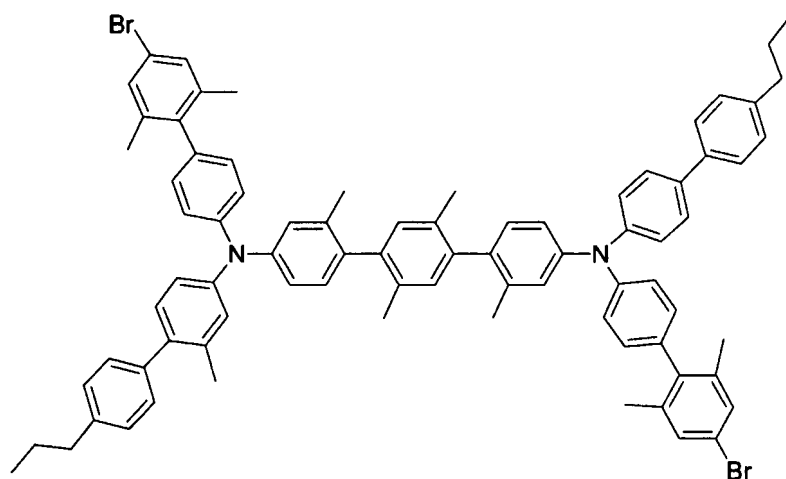


化合物 F



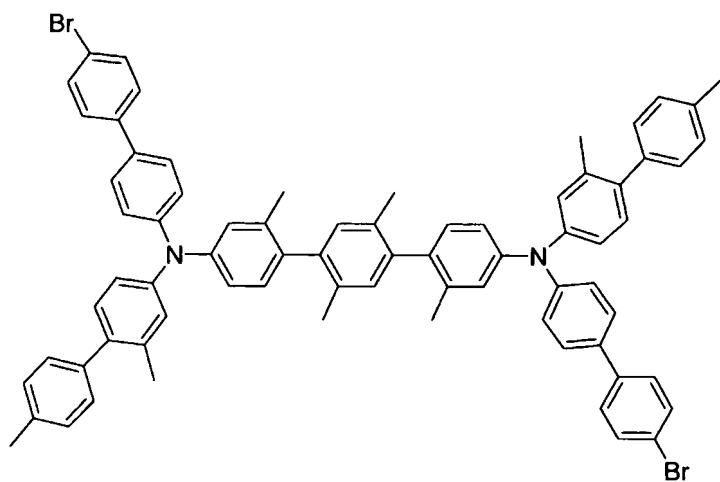
5

化合物 G

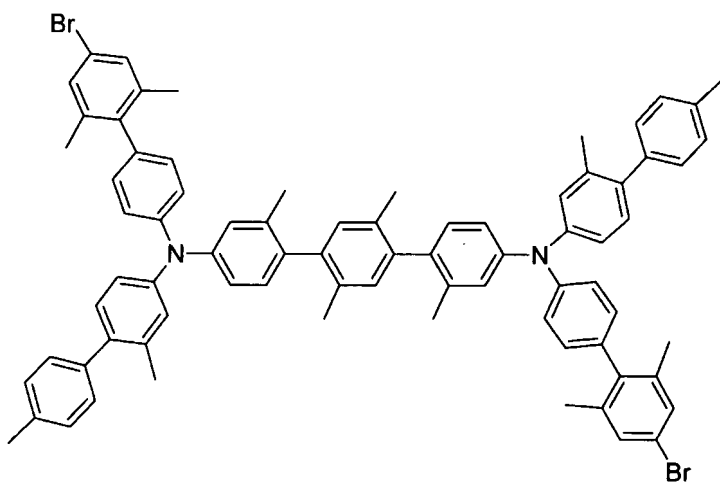


10

化合物 H

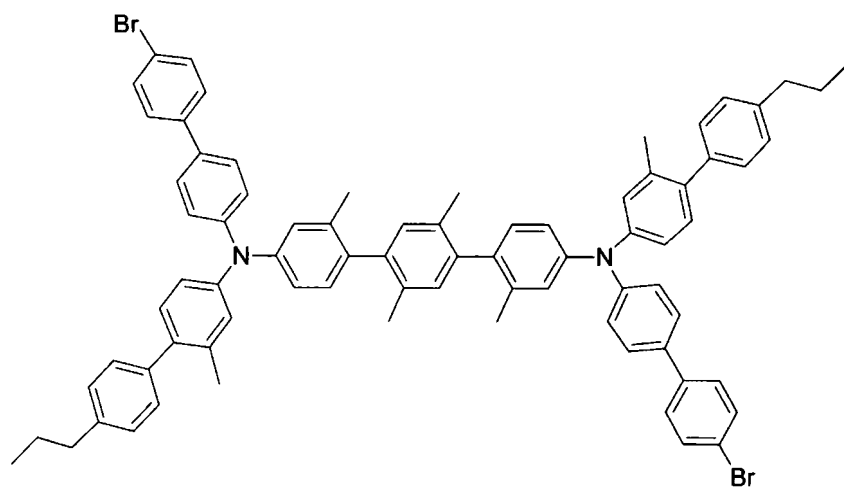


化合物 I

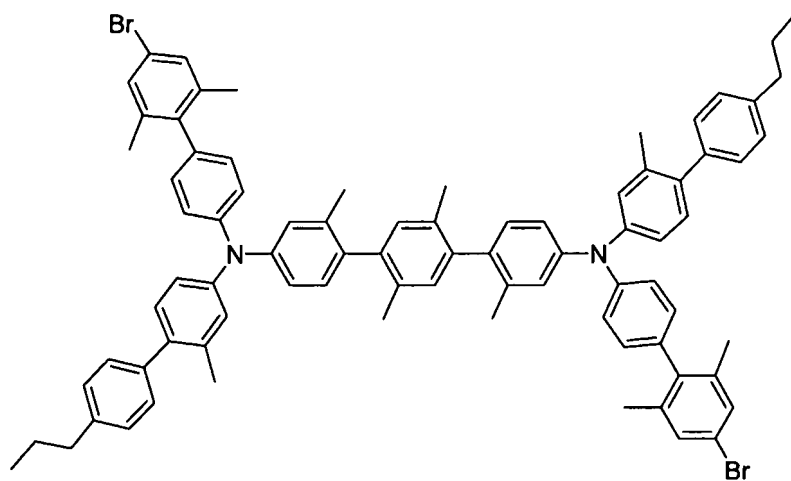


5

化合物 J

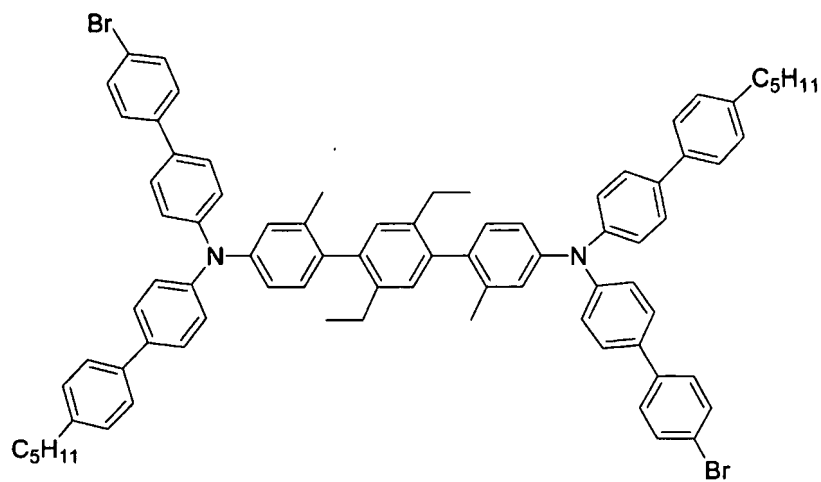


化合物 K



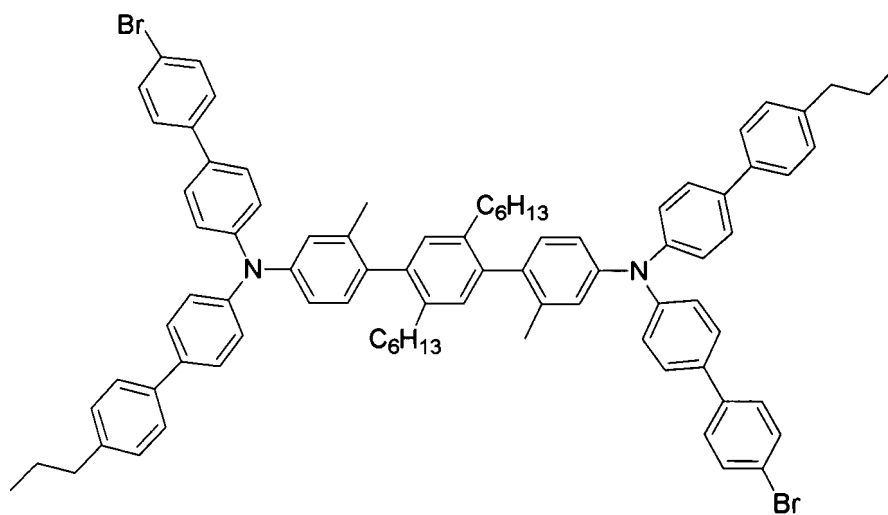
5

化合物 L

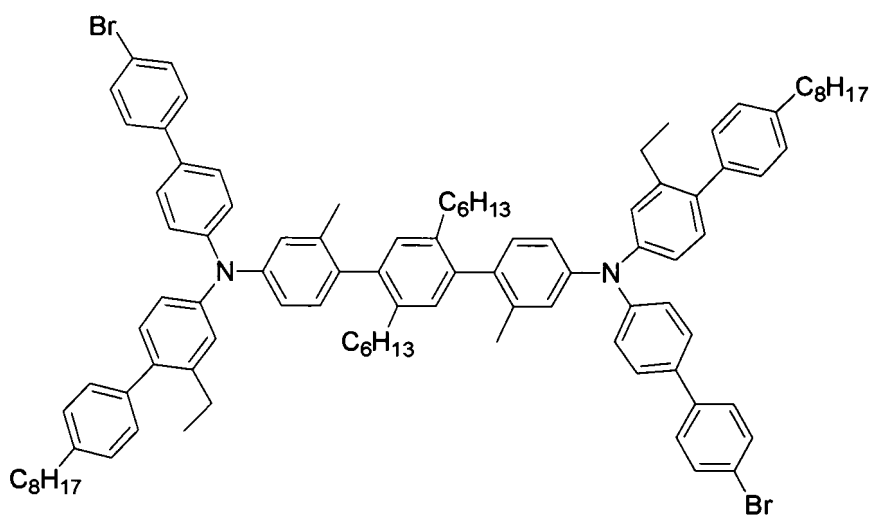


10

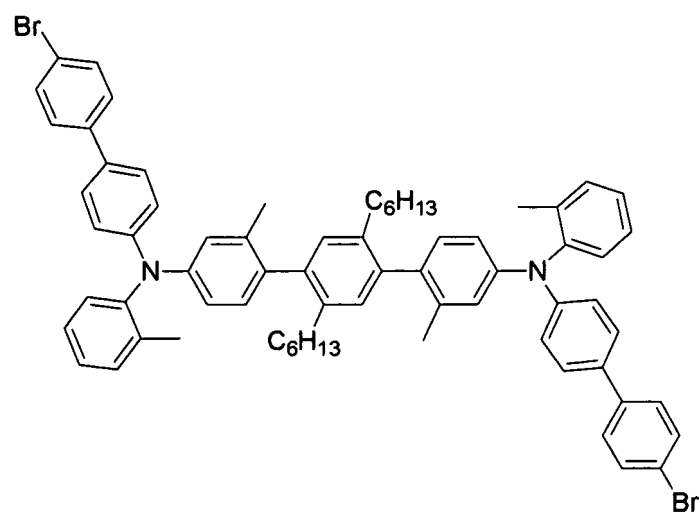
化合物 M



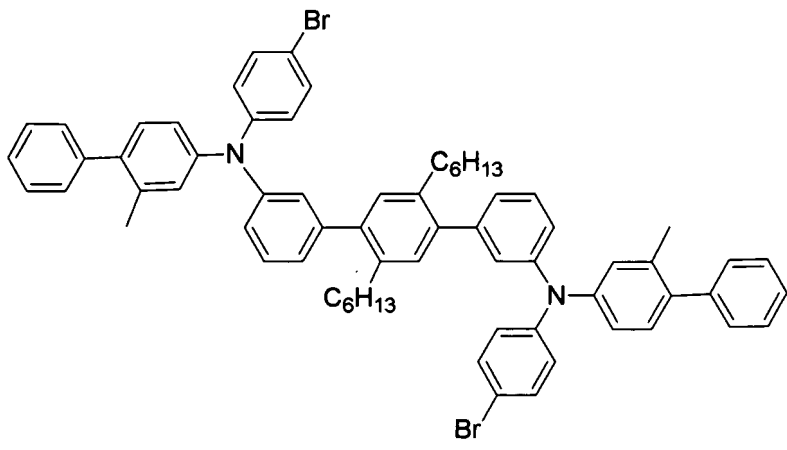
化合物 N



化合物 O

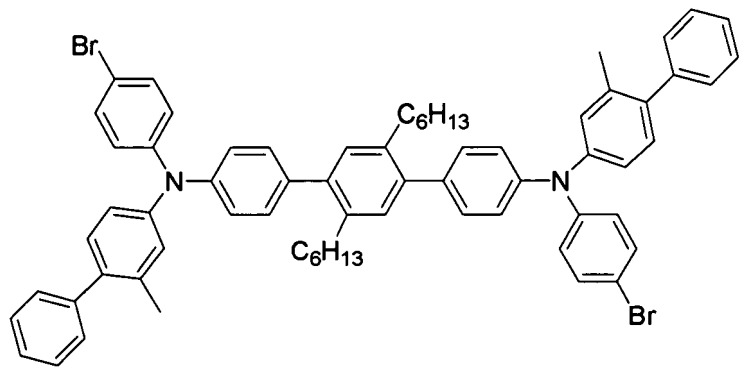


化合物 P



5

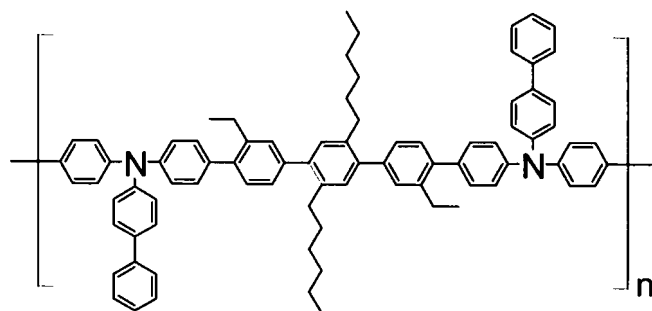
化合物 Q



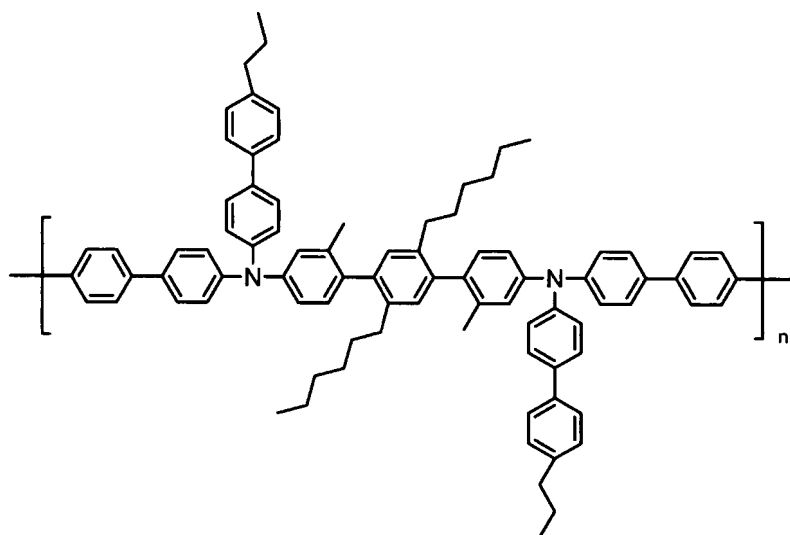
10



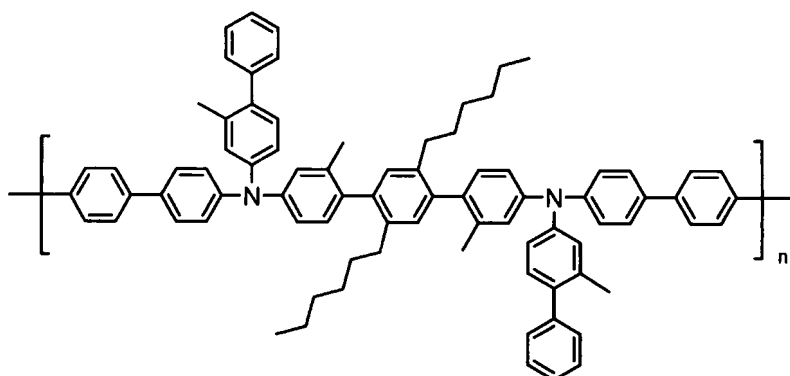
化合物 R



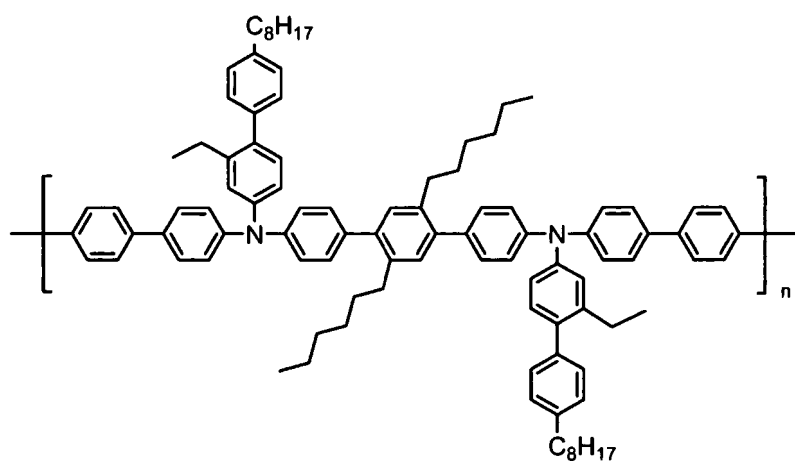
5 化合物 S



化合物 T

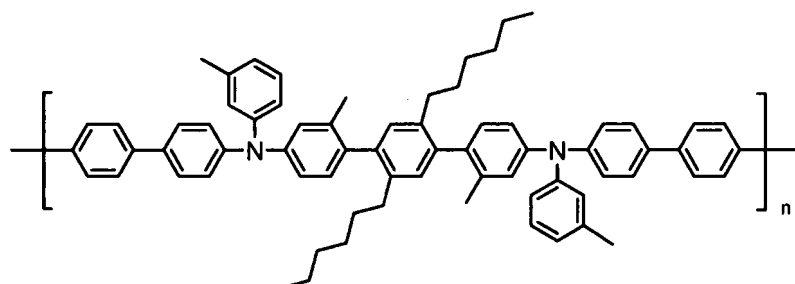


化合物 U



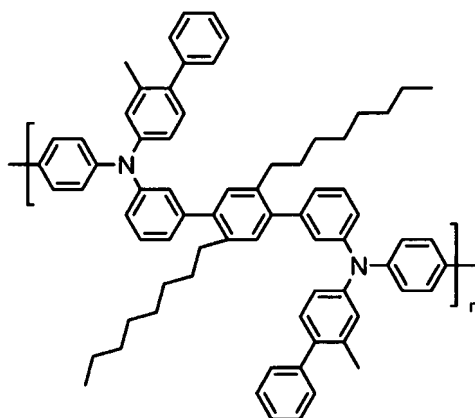
5

化合物 V

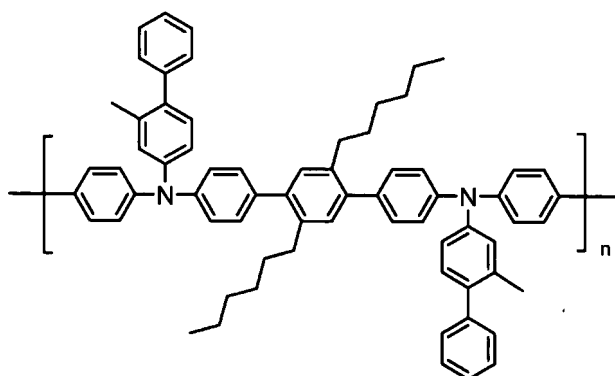


10

化合物 W

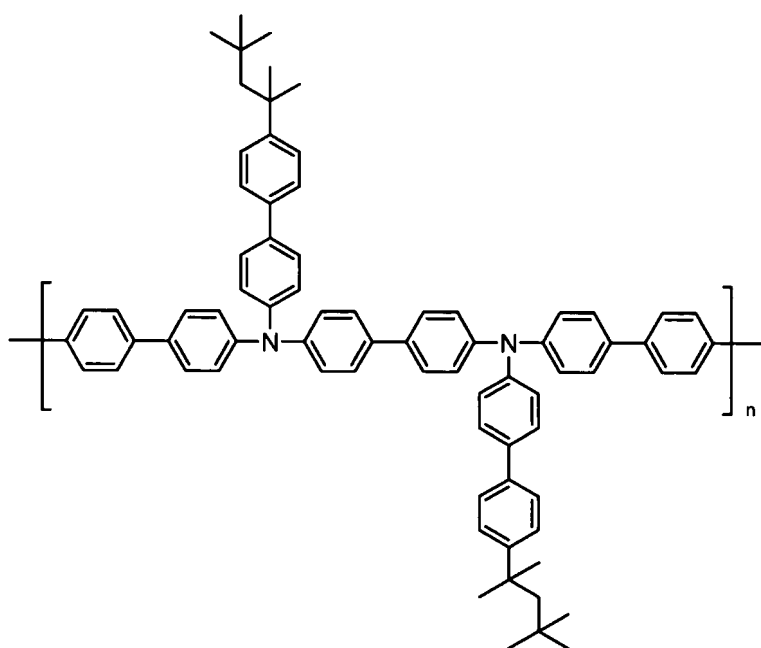


化合物 X



5

化合物 Y

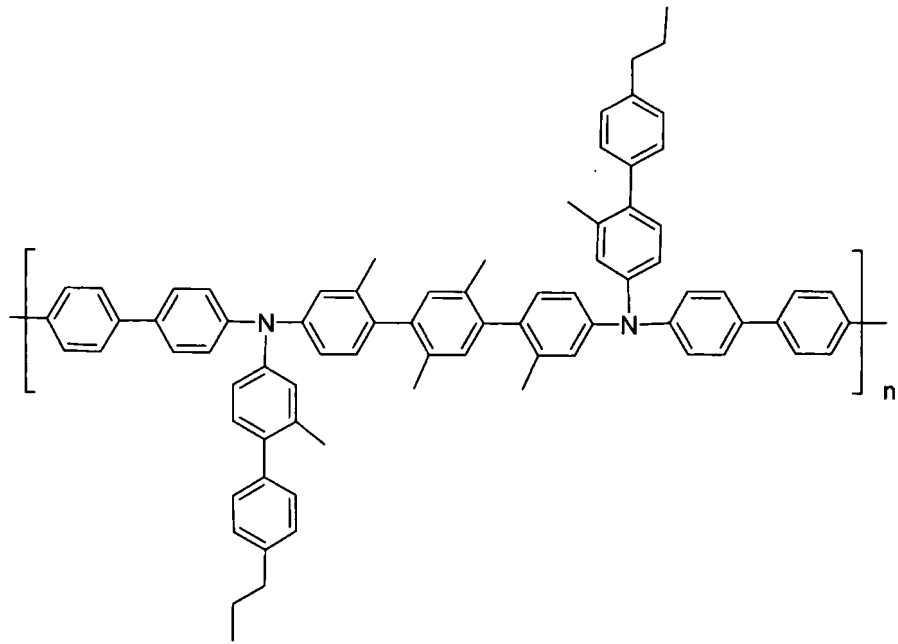


10

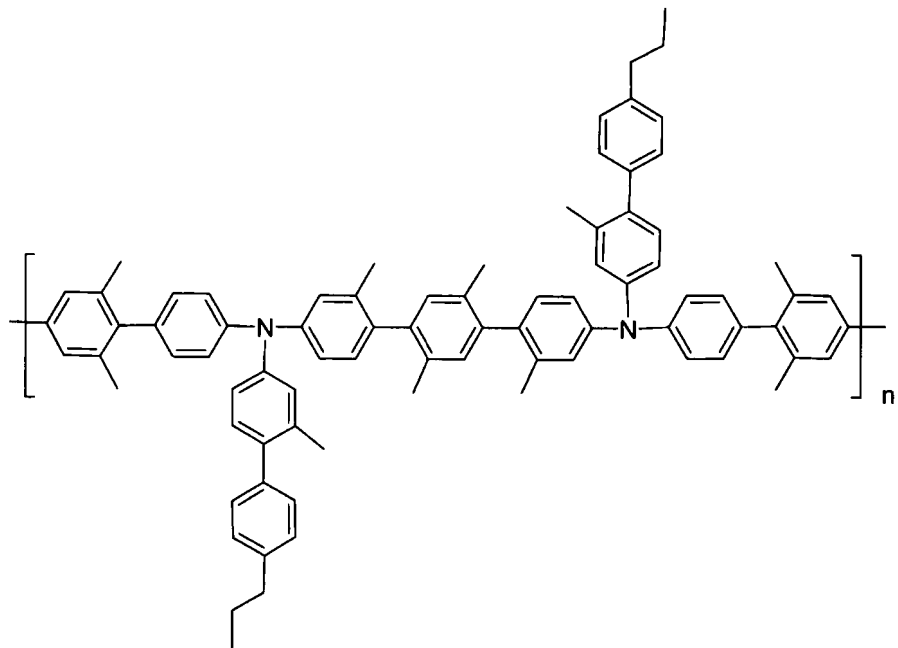
化合物 Z

*c1ccc(cc1)-c2ccc(cc2)N(c3ccc(cc3)-c4ccc(cc4)-c5ccc(cc5)-c6ccc(cc6)-c7ccc(cc7)-c8ccc(cc8)-c9ccc(cc9)-c10ccc(cc10)-c11ccc(cc11)-c12ccc(cc12)-c13ccc(cc13)-c14ccc(cc14)-c15ccc(cc15)-c16ccc(cc16)-c17ccc(cc17)-c18ccc(cc18)-c19ccc(cc19)-c20ccc(cc20)-c21ccc(cc21)-c22ccc(cc22)-c23ccc(cc23)-c24ccc(cc24)-c25ccc(cc25)-c26ccc(cc26)-c27ccc(cc27)-c28ccc(cc28)-c29ccc(cc29)-c30ccc(cc30)-c31ccc(cc31)-c32ccc(cc32)-c33ccc(cc33)-c34ccc(cc34)-c35ccc(cc35)-c36ccc(cc36)-c37ccc(cc37)-c38ccc(cc38)-c39ccc(cc39)-c40ccc(cc40)-c41ccc(cc41)-c42ccc(cc42)-c43ccc(cc43)-c44ccc(cc44)-c45ccc(cc45)-c46ccc(cc46)-c47ccc(cc47)-c48ccc(cc48)-c49ccc(cc49)-c50ccc(cc50)-c51ccc(cc51)-c52ccc(cc52)-c53ccc(cc53)-c54ccc(cc54)-c55ccc(cc55)-c56ccc(cc56)-c57ccc(cc57)-c58ccc(cc58)-c59ccc(cc59)-c60ccc(cc60)-c61ccc(cc61)-c62ccc(cc62)-c63ccc(cc63)-c64ccc(cc64)-c65ccc(cc65)-c66ccc(cc66)-c67ccc(cc67)-c68ccc(cc68)-c69ccc(cc69)-c70ccc(cc70)-c71ccc(cc71)-c72ccc(cc72)-c73ccc(cc73)-c74ccc(cc74)-c75ccc(cc75)-c76ccc(cc76)-c77ccc(cc77)-c78ccc(cc78)-c79ccc(cc79)-c80ccc(cc80)-c81ccc(cc81)-c82ccc(cc82)-c83ccc(cc83)-c84ccc(cc84)-c85ccc(cc85)-c86ccc(cc86)-c87ccc(cc87)-c88ccc(cc88)-c89ccc(cc89)-c90ccc(cc90)-c91ccc(cc91)-c92ccc(cc92)-c93ccc(cc93)-c94ccc(cc94)-c95ccc(cc95)-c96ccc(cc96)-c97ccc(cc97)-c98ccc(cc98)-c99ccc(cc99)-c100ccc(cc100)-c101ccc(cc101)-c102ccc(cc102)-c103ccc(cc103)-c104ccc(cc104)-c105ccc(cc105)-c106ccc(cc106)-c107ccc(cc107)-c108ccc(cc108)-c109ccc(cc109)-c110ccc(cc110)-c111ccc(cc111)-c112ccc(cc112)-c113ccc(cc113)-c114ccc(cc114)-c115ccc(cc115)-c116ccc(cc116)-c117ccc(cc117)-c118ccc(cc118)-c119ccc(cc119)-c120ccc(cc120)-c121ccc(cc121)-c122ccc(cc122)-c123ccc(cc123)-c124ccc(cc124)-c125ccc(cc125)-c126ccc(cc126)-c127ccc(cc127)-c128ccc(cc128)-c129ccc(cc129)-c130ccc(cc130)-c131ccc(cc131)-c132ccc(cc132)-c133ccc(cc133)-c134ccc(cc134)-c135ccc(cc135)-c136ccc(cc136)-c137ccc(cc137)-c138ccc(cc138)-c139ccc(cc139)-c140ccc(cc140)-c141ccc(cc141)-c142ccc(cc142)-c143ccc(cc143)-c144ccc(cc144)-c145ccc(cc145)-c146ccc(cc146)-c147ccc(cc147)-c148ccc(cc148)-c149ccc(cc149)-c150ccc(cc150)-c151ccc(cc151)-c152ccc(cc152)-c153ccc(cc153)-c154ccc(cc154)-c155ccc(cc155)-c156ccc(cc156)-c157ccc(cc157)-c158ccc(cc158)-c159ccc(cc159)-c160ccc(cc160)-c161ccc(cc161)-c162ccc(cc162)-c163ccc(cc163)-c164ccc(cc164)-c165ccc(cc165)-c166ccc(cc166)-c167ccc(cc167)-c168ccc(cc168)-c169ccc(cc169)-c170ccc(cc170)-c171ccc(cc171)-c172ccc(cc172)-c173ccc(cc173)-c174ccc(cc174)-c175ccc(cc175)-c176ccc(cc176)-c177ccc(cc177)-c178ccc(cc178)-c179ccc(cc179)-c180ccc(cc180)-c181ccc(cc181)-c182ccc(cc182)-c183ccc(cc183)-c184ccc(cc184)-c185ccc(cc185)-c186ccc(cc186)-c187ccc(cc187)-c188ccc(cc188)-c189ccc(cc189)-c190ccc(cc190)-c191ccc(cc191)-c192ccc(cc192)-c193ccc(cc193)-c194ccc(cc194)-c195ccc(cc195)-c196ccc(cc196)-c197ccc(cc197)-c198ccc(cc198)-c199ccc(cc199)-c200ccc(cc200)-c201ccc(cc201)-c202ccc(cc202)-c203ccc(cc203)-c204ccc(cc204)-c205ccc(cc205)-c206ccc(cc206)-c207ccc(cc207)-c208ccc(cc208)-c209ccc(cc209)-c210ccc(cc210)-c211ccc(cc211)-c212ccc(cc212)-c213ccc(cc213)-c214ccc(cc214)-c215ccc(cc215)-c216ccc(cc216)-c217ccc(cc217)-c218ccc(cc218)-c219ccc(cc219)-c220ccc(cc220)-c221ccc(cc221)-c222ccc(cc222)-c223ccc(cc223)-c224ccc(cc224)-c225ccc(cc225)-c226ccc(cc226)-c227ccc(cc227)-c228ccc(cc228)-c229ccc(cc229)-c230ccc(cc230)-c231ccc(cc231)-c232ccc(cc232)-c233ccc(cc233)-c234ccc(cc234)-c235ccc(cc235)-c236ccc(cc236)-c237ccc(cc237)-c238ccc(cc238)-c239ccc(cc239)-c240ccc(cc240)-c241ccc(cc241)-c242ccc(cc242)-c243ccc(cc243)-c244ccc(cc244)-c245ccc(cc245)-c246ccc(cc246)-c247ccc(cc247)-c248ccc(cc248)-c249ccc(cc249)-c250ccc(cc250)-c251ccc(cc251)-c252ccc(cc252)-c253ccc(cc253)-c254ccc(cc254)-c255ccc(cc255)-c256ccc(cc256)-c257ccc(cc257)-c258ccc(cc258)-c259ccc(cc259)-c260ccc(cc260)-c261ccc(cc261)-c262ccc(cc262)-c263ccc(cc263)-c264ccc(cc264)-c265ccc(cc265)-c266ccc(cc266)-c267ccc(cc267)-c268ccc(cc268)-c269ccc(cc269)-c270ccc(cc270)-c271ccc(cc271)-c272ccc(cc272)-c273ccc(cc273)-c274ccc(cc274)-c275ccc(cc275)-c276ccc(cc276)-c277ccc(cc277)-c278ccc(cc278)-c279ccc(cc279)-c280ccc(cc280)-c281ccc(cc281)-c282ccc(cc282)-c283ccc(cc283)-c284ccc(cc284)-c285ccc(cc285)-c286ccc(cc286)-c287ccc(cc287)-c288ccc(cc288)-c289ccc(cc289)-c290ccc(cc290)-c291ccc(cc291)-c292ccc(cc292)-c293ccc(cc293)-c294ccc(cc294)-c295ccc(cc295)-c296ccc(cc296)-c297ccc(cc297)-c298ccc(cc298)-c299ccc(cc299)-c300ccc(cc300)-c301ccc(cc301)-c302ccc(cc302)-c303ccc(cc303)-c304ccc(cc304)-c305ccc(cc305)-c306ccc(cc306)-c307ccc(cc307)-c308ccc(cc308)-c309ccc(cc309)-c310ccc(cc310)-c311ccc(cc311)-c312ccc(cc312)-c313ccc(cc313)-c314ccc(cc314)-c315ccc(cc315)-c316ccc(cc316)-c317ccc(cc317)-c318ccc(cc318)-c319ccc(cc319)-c320ccc(cc320)-c321ccc(cc321)-c322ccc(cc322)-c323ccc(cc323)-c324ccc(cc324)-c325ccc(cc325)-c326ccc(cc326)-c327ccc(cc327)-c328ccc(cc328)-c329ccc(cc329)-c330ccc(cc330)-c331ccc(cc331)-c332ccc(cc332)-c333ccc(cc333)-c334ccc(cc334)-c335ccc(cc335)-c336ccc(cc336)-c337ccc(cc337)-c338ccc(cc338)-c339ccc(cc339)-c340ccc(cc340)-c341ccc(cc341)-c342ccc(cc342)-c343ccc(cc343)-c344ccc(cc344)-c345ccc(cc345)-c346ccc(cc346)-c347ccc(cc347)-c348ccc(cc348)-c349ccc(cc349)-c350ccc(cc350)-c351ccc(cc351)-c352ccc(cc352)-c353ccc(cc353)-c354ccc(cc354)-c355ccc(cc355)-c356ccc(cc356)-c357ccc(cc357)-c358ccc(cc358)-c359ccc(cc359)-c360ccc(cc360)-c361ccc(cc361)-c362ccc(cc362)-c363ccc(cc363)-c364ccc(cc364)-c365ccc(cc365)-c366ccc(cc366)-c367ccc(cc367)-c368ccc(cc368)-c369ccc(cc369)-c370ccc(cc370)-c371ccc(cc371)-c372ccc(cc372)-c373ccc(cc373)-c374ccc(cc374)-c375ccc(cc375)-c376ccc(cc376)-c377ccc(cc377)-c378ccc(cc378)-c379ccc(cc379)-c380ccc(cc380)-c381ccc(cc381)-c382ccc(cc382)-c383ccc(cc383)-c384ccc(cc384)-c385ccc(cc385)-c386ccc(cc386)-c387ccc(cc387)-c388ccc(cc388)-c389ccc(cc389)-c390ccc(cc390)-c391ccc(cc391)-c392ccc(cc392)-c393ccc(cc393)-c394ccc(cc394)-c395ccc(cc395)-c396ccc(cc396)-c397ccc(cc397)-c398ccc(cc398)-c399ccc(cc399)-c400ccc(cc400)-c401ccc(cc401)-c402ccc(cc402)-c403ccc(cc403)-c404ccc(cc404)-c405ccc(cc405)-c406ccc(cc406)-c407ccc(cc407)-c408ccc(cc408)-c409ccc(cc409)-c410ccc(cc410)-c411ccc(cc411)-c412ccc(cc412)-c413ccc(cc413)-c414ccc(cc414)-c415ccc(cc415)-c416ccc(cc416)-c417ccc(cc417)-c418ccc(cc418)-c419ccc(cc419)-c420ccc(cc420)-c421ccc(cc421)-c422ccc(cc422)-c423ccc(cc423)-c424ccc(cc424)-c425ccc(cc425)-c426ccc(cc426)-c427ccc(cc427)-c428ccc(cc428)-c429ccc(cc429)-c430ccc(cc430)-c431ccc(cc43

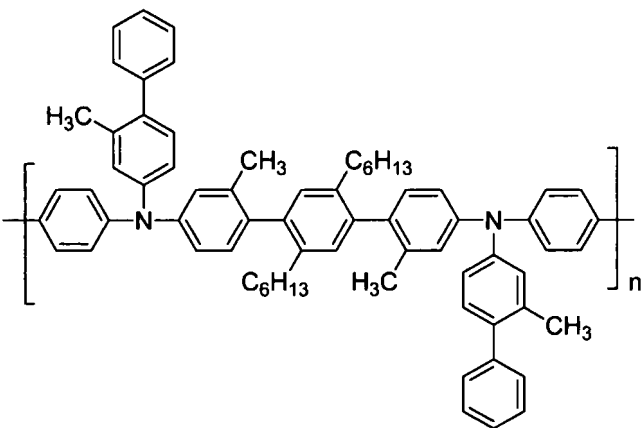
化合物 BB



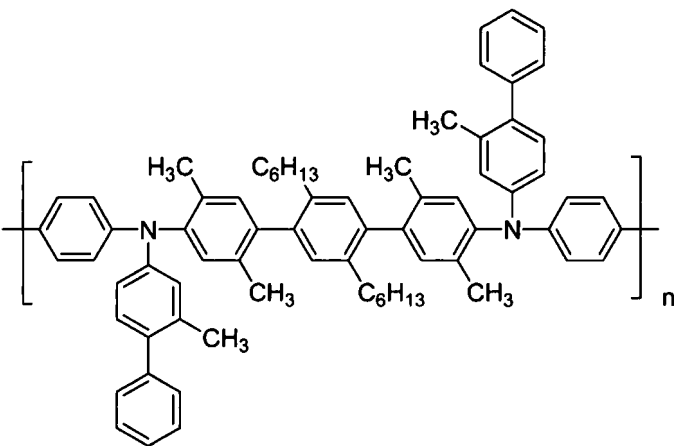
化合物 CC



化合物 DD



化合物 EE



5

10

使用任何可產生 C-C 或 C-N 鍵之技術來製造該等新穎化合物。已熟知各種不同的此類技術，如 Suzuki、Yamamoto、Stille 及 Pd 或 Ni 催化的 C-N 偶合。氙化之化合物可利用氙化之前驅物材料以類似方式進行製備，抑或是更一般而言，可利用氙化之溶劑（例如 d6-苯）在路易士酸 H/D 交換催化劑（例如三氯化鋁或二氯乙基鋁）存在下處理非氙化之化合物而進行製備。於實例中說明示範性製備過程。



可利用溶液處理技術將化合物形成為層。術語「層」可與「膜」交換使用，其指一覆蓋一所欲區域之塗層。該術語不受尺寸限制。該區域可與一整個裝置一樣大或與一特定功能區域（例如，實際視覺顯示）一樣小，或者與一單次像素一樣小。可藉由任何習知沈積技術，包括氣相沈積、液相沈積（連續及不連續技術）及熱傳遞，形成層及膜。連續沈積技術包括但不限於旋轉塗布、凹版塗布、簾式塗布、浸漬塗布、狹縫模具式塗布、噴灑塗布與連續噴嘴塗布。不連續的沈積技術包括但不限於噴墨印刷、凹版印刷及網版印刷。

本文所述之新穎化合物可作為電洞傳輸材料、電致發光材料以及電致發光材料之主體。此等新穎化合物具有類似於有效率的小分子電洞傳輸化合物（例如 N,N'-二苯-N,N'-雙(3-甲基苯基)-[1,1'-聯苯]-4,4'-二胺(TPD)）之 HOMO/LUMO 能量及電洞移動性。如 TPD 之化合物通常必須以氣相沉積技術施用。

3. 電子裝置

可受益於具有一或多層包括至少一種本文所述之化合物的有機電子裝置包括但不限於(1)將電能轉化為輻射的裝置（例如發光二極體、發光二極體顯示器、發光裝置、照明器具或二極體雷射）、(2)透過電子方法偵測訊號的裝置（例如光偵測器、光導管、光阻器、光開關、光電晶體、光電管、IR 偵測器、生物感測器）、(3)將輻射轉化為電能的裝置（例如光伏裝置或太陽能電池）以及(4)含有一或多個包括一或多個有機半導體層之

電子組件的裝置（例如電晶體或二極體）。依據本發明之組成物的其它使用包括用於記憶體儲存裝置、抗靜電薄膜、生物感測器、電致變色元件、固態電解質電容器、能量儲存裝置（例如，可充電電池）及電磁遮蔽應用等的塗層材料。

一有機電子裝置結構之一種態樣係如圖 1 所示。裝置 100 具有一第一電接觸層、一陽極層 110 以及一第二電接觸層、一陰極層 160 以及一介於其間的電活性層 140。在某些實施例中，電活性層 140 為一電致發光層。額外層可為選擇性地存在。鄰近於陽極者可為一電洞注入層 120，其有時稱為一緩衝層。鄰接該電洞注入層者可為包含電洞傳輸材料之電洞傳輸層 130。鄰接該陰極者可為電子傳輸層 150，其包含電子傳輸材料。視情況需要，裝置可使用一或多個額外的電洞注入或電洞傳輸層（圖未示）於該陽極 110 旁及/或一或多個額外的電子注入或電子傳輸層（圖未示）於該陰極 160 旁。層 120 至 150 係各別及統稱為活性層。

在某些實施例中，為達成全彩，該發光層為像素化，每種不同顏色各有次像素單元。一像素化裝置之一種態樣係如圖 2 所示。該裝置 200 具有陽極 210、電洞注入層 220、電洞傳輸層 230、電致發光層 240、電子傳輸層 250 及陰極 260。該電致發光層係分成次像素 241、242、243，其係重複越過該層。在某些實施例中，該等次像素代表紅色、藍色及綠色發光。儘管圖 2 繪示了三個不同的次像素單元，亦可使用兩個或大於三個次像素單元。

此處將參照圖 1 詳細說明不同的層。然而，所說明者亦適用於圖 2 及其他組態。

一實施例中，不同層具有以下厚度範圍：陽極 110，500-5000 Å，在一實施例為 1000-2000 Å；電洞注入層 120，50-2000 Å，在一實施例為 200-1000 Å；電洞傳輸層 130，50-2000 Å，在一實施例為 200-1000 Å；電致發光層 140，10-2000 Å，在一實施例為 100-1000 Å；電子傳輸層 150，50-2000 Å，在一實施例為 100-1000 Å；陰極 160，200-10000 Å，在一實施例為 300-5000 Å。層厚度之理想比例將取決於所使用材料的確切特性。

一或多種本文所述具有 I 或式 I' 之新穎化合物可存在於裝置的一或多個活性層中。在某些實施例中，該新穎化合物係可作為層 130 中的電洞傳輸材料。在某些實施例中，該新穎化合物係可作為用於電活性層 140 中的電活性摻雜劑材料的主體材料。術語「主體材料」意指一添加有摻雜劑的材料。該主體材料可具有或不具有電子特性或發射、接收或濾波輻射的能力。在某些實施例中，該主體材料係以較高的濃度存在。

該陽極 110 係一對注入正電荷載子特別有效之電極。它可以由例如含金屬、混合金屬、合金、金屬氧化物或混合金屬氧化物之材料所製成，或者它可以是一導電聚合物及其混合物。合適之金屬包括第 11 族金屬、第 4、5 及 6 族中之金屬，及第 8 至 10 族過渡金屬。若需該陽極具光穿透性，則通常使用第 12 族、第 13 族及第 14 族金屬的混合金屬氧化物，如銦錫氧化物。陽極亦可包含諸如「Flexible light-emitting diodes made from

soluble conducting polymer」，Nature 第 357 卷，第 477 479 頁(1992 年 6 月 11 日)中所描述之聚苯胺 (polyaniline) 之有機材料。該陽極及陰極中之至少一者應該是至少部分透明，以允許觀察到所產生之光。

5 選擇性的電洞注入層 120 包括電洞注入材料。術語「電洞注入層」或「電洞注入材料」係意指導電性或半導電性材料，且可於有機電子裝置中具有一或多種功能，包括但不限於下方之層的平坦化、電荷傳輸及/或電荷注入特性、清除雜質例如氧或金屬離子以及其他促進或改善有機電子裝置之性能的態樣。電洞注入材料可為聚合物、寡聚物或小分子，其形式可為溶液、分散液、懸浮液、乳化液、膠體混合物或其他組成物。

10

該電洞注入層可用聚合性材料，如聚苯胺(PANI)或聚伸乙二氧噻吩(PEDOT)加以形成，該等聚合性材料經常摻雜以質子酸。該等質子酸可以是如聚苯乙烯磺酸 (poly(styrenesulfonic acid))、聚(2-丙烯醯胺-2-甲基-1-丙磺酸)(poly(2-acrylamido-2-methyl-1-propanesulfonic acid))及類似者。該電洞注入層 120 可包括電荷傳輸化合物及類似者，如銅酞青(copper phthalocyanine)與四噻富瓦烯 - 四氰基苯醌二甲烷 (tetrathiafulvalene-tetracyanoquinodimethane, TTF-TCNQ)。在一實施例中，該電洞注入層 120 係含有一導電聚合物及一膠體形成聚合酸構成之分散液製成。此等材料已記載於例如已公開的美國專利申請案第 2004-0102577、2004-0127637 及 2005-0205860 號。

15

20

25

層 130 包括電洞傳輸材料。在某些實施例中，該電洞傳輸層包括一種具有式 I 或式 I' 之化合物。在某些實施例中，該電洞傳輸層主要由一種具有式 I 或式 I' 之化合物所組成。

在某些實施例中，層 130 包括其他電洞傳輸材料。舉例而言，Y. Wang 已在 Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology，第四版，第 18 卷，第 837 至 860 頁，1996 年中概述用於電洞傳輸層之電洞傳輸材料之實例。電洞傳輸小分子及聚合物兩者皆可使用。通常使用之電洞傳輸分子包括但不限於：4,4',4''-參(N,N-二苯基-胺基)-三苯基胺(TDATA)；4,4',4''-參(N-3-甲基苯基-N-苯基-胺基)-三苯基胺(MTDATA)；N,N'-二苯基-N,N'-雙(3-甲基苯基)-[1,1'-聯苯]-4,4'-二胺(TPD)；4,4'-雙(咔唑-9-基)聯苯(CBP)；1,3-雙(咔唑-9-基)苯(mCP)；1,1-雙[(二-4-甲苯基胺基)苯基]環己烷(TAPC)；N,N'-雙(4-甲基苯基)-N,N'-雙(4-乙基苯基)-[1,1'-(3,3'-二甲基)聯苯]-4,4'-二胺(ETPD)；肆-(3-甲基苯基)-N,N,N',N'-2,5-伸苯基二胺(PDA)； α -苯基-4-N,N-二苯基胺基苯乙烯(TPS)；對-(二乙基胺基)苯甲醛二苯基脞(DEH)；三苯基胺(TPA)；雙[4-(N,N-二乙基胺基)-2-甲基苯基](4-甲基苯基)甲烷(MPMP)；1-苯基-3-[對-(二乙基胺基)苯乙烯基]-5-[對-(二乙基胺基)苯基]吡啶啉(PPR 或 DEASP)；1,2-反-雙(9H-咔唑-9-基)環丁烷(DCZB)；N,N,N',N'-肆(4-甲基-苯基)-(1,1'-聯苯)-4,4'-二胺(TTB)；N,N'-雙(萘-1-基)-N,N'-雙-(苯基)聯苯胺(α -NPB)；以及紫質化合物(諸如銅酞菁)。一般常用的電洞傳輸聚合物包括但不限

於，聚乙炔吡啶、(苯甲基)聚矽烷、聚(二噻吩)、聚
苯胺及聚吡咯。藉由將上述那些的電洞傳輸分子摻雜至
像聚苯乙烯及聚碳酸酯之聚合物中，亦可能獲得電洞傳
輸聚合物。在一些情況中，使用三芳胺聚合物，尤其係
5 三芳胺-萸共聚合物。在一些情況中，該等聚合物及該
等共聚合物係可交聯的。可交聯之電洞傳輸聚合物的實
例舉例而言，可發現於公開之美國專利申請案
2005-0184287 及公開之 PCT 申請案 WO 2005/052027
中。在某些實施例中，該電洞傳輸層摻雜有一 p 型摻雜
10 劑 (p-dopant)，如四氟四氰萸對醌二甲烷
(tetrafluorotetracyanoquinodimethane) 和萸-3,4,9,10-
四羧-3,4,9,10-二酐。

取決於裝置的應用，該電活性層 140 可為一發光
層，其由一外施電壓（例如，在一發光二極體中或發光
15 電化電池中）活化，其為在有或無一外施偏壓（如在一
光偵測器中）下，能夠回應輻射能並產生訊號之一層材
料。在一實施例中，該電活性層包括一有機電致發光
（「EL」）材料。任何有機電致發光材料皆可使用在該等
裝置中，該等有機電致發光材料包括但不侷限於，小型
20 分子有機螢光化合物、螢光與磷光金屬錯合物、共軛聚
合物和它們的混合物。螢光化合物之實例包括但不侷限
於【⁺⁺+快】(chrysenes)、萸(pyrenes)、萸(perylene)s、
紅螢烯(rubrenes)、香豆素(coumarins)、蒽(anthracenes)、
噻二唑(thiadiazoles)、上述物質之衍生物及上述物質之
25 混合物。金屬錯合物之實例包括但不限於金屬螯合𬝰辛
類(oxinoid)化合物，例如參(8-羥基喹啉配位基)鋁

(tris(8-hydroxyquinolato)aluminum, Alq3)、環金屬化銦與鉑電致發光化合物，例如銦與苯基吡啶、苯基喹啉或苯基嘧啶配位基之錯合物，例如 Petrov et al.之美國第 6,670,645 專利與已公開之 PCT 第 WO 03/063555 及 WO 2004/016710 號申請案所揭露者，以及有機金屬錯合物，例如於已公開之 PCT 第 WO 03/008424、WO 03/091688 及 WO 03/040257 號申請案所述者及其混合物。在某些情況中，該小分子螢光或有機金屬材料係沉積作為主材料中之摻雜劑，以改良加工與/或電子特性。共軛聚合物之實例包括但不限於聚(苯伸乙烯)(poly(phenylenevinylenes))、聚芴(polyfluorenes)、聚(螺聯芴)(poly(spirobifluorenes))、聚噻吩(polythiophenes)、聚(對伸苯)(poly(p-phenylenes))、上述物質之共聚物及上述物質之混合物。

在某些實施例中，電活性層 140 包括在一在具有式 I 或式 I' 之主體材料中的電致發光材料。在某些實施例中，也存在一第二主體材料。在某些實施例中，電活性層 140 主要由一電致發光材料與一具有式 I 或式 I' 之主體材料所組成。在某些實施例中，電活性層 140 主要由一電致發光材料、一具有式 I 或式 I' 之第一主體材料及一第二主體材料所組成。第二主體材料之實例包括但不限於，【 π +快】(chrysenes)、菲(phenanthrenes)、聯伸三苯(triphenylenes)、啡啉(phenanthrolines)、萘(naphthalenes)、蒽(anthracenes)、喹啉(quinolines)、異喹啉(isoquinolines)、喹【 σ +呋】啉(quinoxalines)、苯

基吡啶(phenylpyridines)、苯并二呋喃(benzodifurans)、及金屬喹啉複合物(metal quinolate complexes)。

選擇性的層 150 可同時促進電子傳輸並作為電洞注入層或局限層，以防止激子在層介面淬滅。較佳而言，此層提昇電子移動率及減少激子淬滅。可用於該選擇性層 150 的電子傳輸材料之實例，包括金屬螯合𪔐辛類(oxinoid)化合物，其包括金屬喹啉衍生物，例如參(8-羥基喹啉配位基)鋁(AlQ)、雙(2-甲基-8-喹啉配位基)(對-苯基苯酚配位基)鋁(BAlq)、四-(8-羥基喹啉配位基)鈐(HfQ)以及四-(8-羥基喹啉配位基)鋯(ZrQ)；以及唑化合物如 2-(4-聯苯基基)-5-(4-三級丁基苯基)-1,3,4-【口+𪔐】二唑(2-(4-biphenyl)-5-(4-t-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole, PBD)、3-(4-聯苯基基)-4-苯基-5-(4-三級丁基苯基)-1,2,4-三唑(TAZ)與 1,3,5-三(苯基-2-苯并咪唑)苯(TPBI)；喹【口+𪔐】啉(quinoxaline)衍生物如 2,3-雙(4-氟苯基)喹【口+𪔐】啉；啡啉例如 4,7-二苯基-1,10-啡啉(DPA)以及 2,9-二甲基-4,7-二苯基-1,10-啡啉(DDPA)；三【口+井】(triazine)；富勒烯；及其混合物。在某些實施例中，該電子傳輸材料係選自於由金屬喹啉及啡啉衍生物所組成之群組。在某些實施例中，該電子傳輸層進一步包括一 n 型摻雜劑。n 型摻雜劑材料為已知技術。該 n 型摻雜劑包括但不限於第 1 與 2 族之金屬；第 1 與 2 族之金屬鹽，例如 LiF、CsF 與 Cs₂CO₃；第 1 與 2 族之金屬有機化合物，例如 Li 喹啉(Li quinolate)；與分子 n 型摻雜劑，例如無色染料、金屬錯

合物例如 $W_2(hpp)_4$ 其中 $hpp=1,3,4,6,7,8$ -六氫-2H-嘓啶并-[1,2-a]-嘓啶與鈷莘、四噻稠四苯、雙(伸乙二硫)四噻富瓦烯、雜環自由基或二自由基，以及雜環自由基或二自由基之二聚物、寡聚物、聚合物、雙螺化合物與多環。

該陰極 160 係一對於注入電子或負電荷載子特別有效的電極。該陰極可以是任何具有比該陽極低之功函數的金屬或非金屬。用於陰極的材料可選自第 1 族的鹼金屬(例如 Li、Cs)、第 2 族(鹼土)金屬、第 12 族金屬(包括稀土元素及鑰族元素)及銅系。可使用像鋁、銦、鈣、鋇、鈐及鎂以及其組合之材料。可在該有機層及陰極層之間沉積含 Li 之有機金屬化合物，如 LiF、 Li_2O ，含 Cs 之有機金屬化合物，如 CsF、 Cs_2O 與 Cs_2CO_3 ，以降低操作電壓。該層可稱作電子注入層。

已知在有機電子裝置中可具有其它層。例如，在該陽極 110 和電洞注入層 120 之間可具有一層(未顯示)，以控制所注入之正電荷的量，及/或提供該等層之帶隙匹配(band-gap matching)，或者用作一保護層。可使用本技術領域中已熟知之層，例如，銅酞青、氮氧化矽、氟碳化物、矽烷或例如 Pt 之超薄金屬層。或者，可對陽極層 110、活性層 120、130、140、150 或陰極層 160 之一些或全部進行表面處理，以增加電荷載子傳輸效率。較佳為藉由平衡發射層中的正電荷及負電荷來決定每一化合物層之材料的選擇，以提供一具有高電致發光效率之裝置。

應理解各功能性層可由多於一層所構成。

裝置之層可利用任何沉積技術形成，或利用不同技術的組合形成，包括氣相沉積、液相沉積及熱傳。可使用例如玻璃、塑膠及金屬的基板。可使用例如熱蒸鍍、化學氣相沈積與類似者之習用氣相沈積技術。可使用習用的塗布或印刷技術，自合適溶劑中的溶液或分散液施用有機層，該等技術包括但不限於，旋轉塗布 (spin-coating)、浸塗 (dip-coating)、卷對卷塗佈技術 (roll-to-roll)、噴墨印刷 (ink-jet printing)、連續式噴嘴印刷 (continuous nozzle printing)、網版印刷 (screen-printing)、凹印印刷 (gravure printing) 及類似者。

就液相沉積法而言，適用於特定化合物或化合物的相關類別之溶劑可為本領域具有通常知識者判斷而知。針對某些應用而言，其要求該等化合物需溶解在非水性溶劑中。此種非水性溶劑可為相對極性化合物（例如， C_1 至 C_{20} 醇類、醚類及酸酯），或可為相對非極性化合物（例如， C_1 至 C_{12} 烷烴或芳烴如甲苯、二甲苯、三氟甲苯及類似者）。可用於製造該液體組成物之其他適當液體，不論是本文所述之溶液或分散液，包含該新化合物，包括但不限於氯化烴類（例如二氯甲烷、氯仿、氯苯）、芳香碳氫化合物（例如經取代與非經取代甲苯以及二甲苯），包括三氟甲苯），極性溶劑（例如四氫呋喃 (THF)、N-甲基吡咯啉酮 (N-methyl pyrrolidone)、酯類（例如乙酸乙酯）、醇類（異丙醇）、酮類（環戊酮）及上述物質之混合物。適用於電致發光材料的溶劑已記載於例如已公開的 PCT 申請案 WO 2007/145979 中。

在某些實施例中，該裝置之製作透過該電洞注入層、該電洞傳輸層以及該電活性層之液相沉積，以及該陽極、該電子傳輸層、電子注入層及該陰極之氣相沉積達成。

5 可了解的是，利用本文所述之新穎組成物製備而得之裝置，其效率可藉由將裝置中的其他層最佳化而進一步改善。例如，可使用更高效率的陰極，如 Ca、Ba 或 LiF。亦可應用造型的基板及新穎的電洞傳輸材料，其等造成操作電壓減小或量子效率增加。亦可增添額外層，以修改各種不同層之能階，且有助於電致發光。

10 在一實施例中，該裝置依序具有以下結構：陽極、電洞注入層、電洞傳輸層、電活性層、電子傳輸層、電子注入層、陰極。

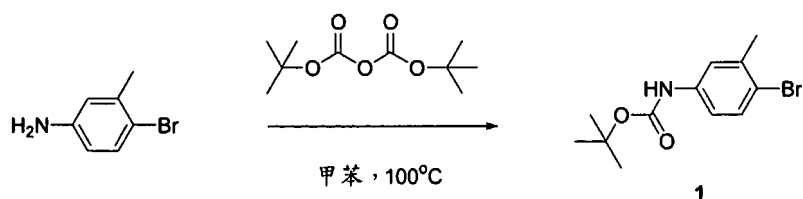
儘管類似或等效於此處所說明之方法及材料可用於實踐或測試本發明，但適當之方法及材料描述如下。此外，該等材料、方法及實例僅係說明性質，而沒有意欲做限制拘束。以提及方式併入在此所述之所有出版物、專利申請案、專利以及其他參考文獻之全部。

20 實例

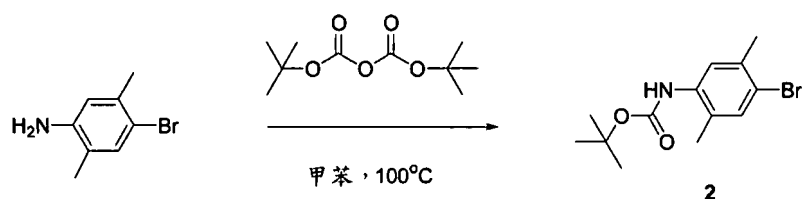
此處所描述的概念將以下列實例進一步說明之，該等實例不限制申請專利範圍中所描述本發明之範疇。

合成實例 1

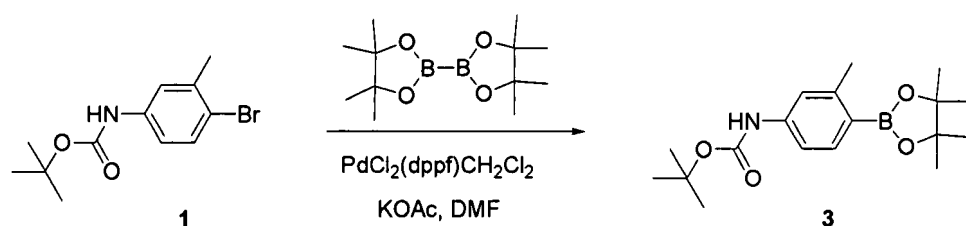
25 本實例說明某些中間體化合物之製備。



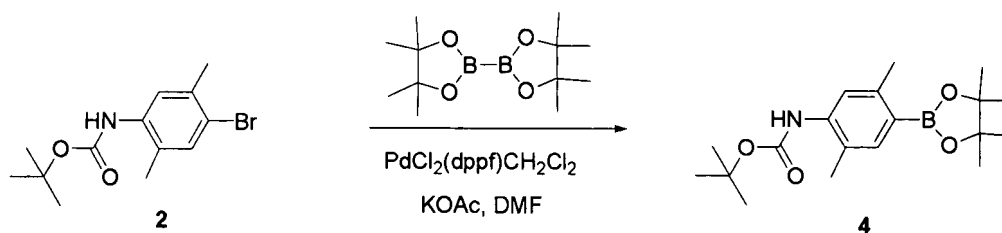
在氮氣中將於甲苯(110 ml)中的 4-溴-3-甲基苯胺 (11 g, 59.12 mmol)及(Boc)₂O (12.9 g, 59.12 mmol)反應混合物在 100°C 下攪拌 40 小時。在減壓濃縮該反應混合物之後，以管柱層析法(己烷中佔 5-10%的乙酸乙酯)獲得 15.9 g (產率 94%)之一白色固體 boc-NH-4-溴-3-甲基苯胺，1。



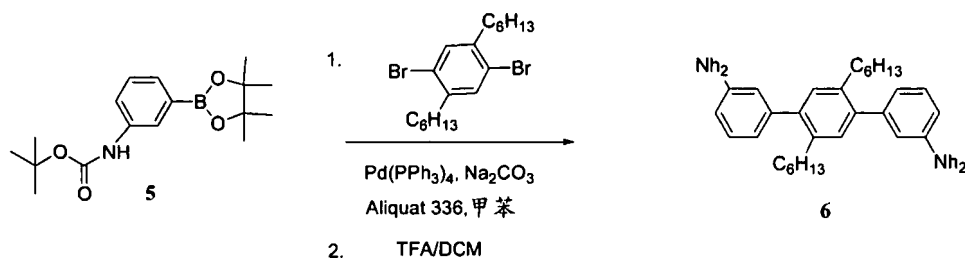
在氮氣中將於甲苯(60 ml)中的 4-溴-2,5-二甲基苯胺(5 g, 25 mmol)及(Boc)₂O (5.4 g, 25 mmol)反應混合物在 100°C 下攪拌 40 小時。在減壓濃縮該反應混合物之後，以管柱層析法(己烷中佔 5-10%的乙酸乙酯)獲得 5.82 g (產率 78%)之一白色固體 boc-NH-4-溴-2,5-二甲基苯胺，2。



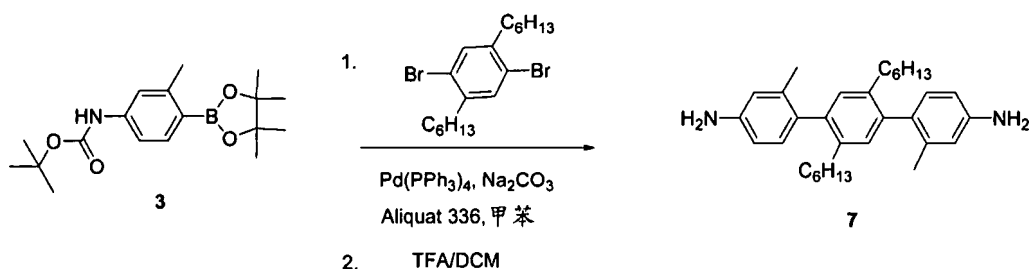
在一手套箱中，將一於乾燥除氣過之 DMF (300 mL) 中的 *boc*-NH-4-溴-3-甲基苯胺，**1**，(20.77 g, 72.58 mmol)、二硼【酉+品】酯(diboron pinacol ester) (22.12 g, 87.09 mmol)、1,1'-雙-(二苯基膦基)二茂鐵二氯化鈾(1.43 g, 1.96 mmol)及乙酸鉀(21.37 g, 217.7 mmol)混合物在 80°C 下油浴攪拌 16 小時。將該混合物冷卻至室溫並減壓濃縮之。將 DCM (100 mL)加入通過一填充矽藻土 (Celite)過濾的該混合物中。濃縮該濾液成赭色油狀物，利用一矽膠管柱層析法(5-10% ETOAc/己烷)將其純化以提供一白色固體產物，**3**，(18.57 g，產率 77%)。



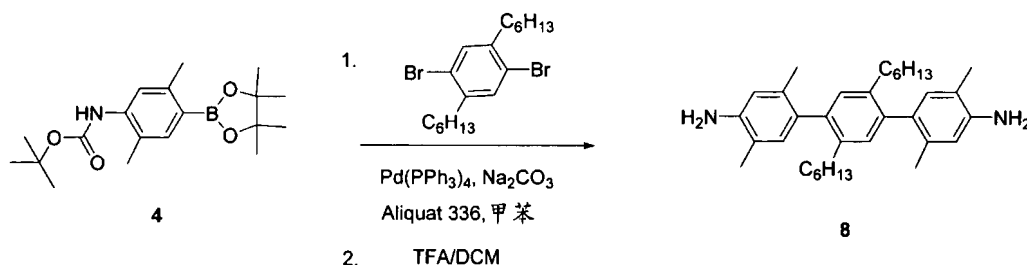
在一手套箱中，將一於乾燥除氣過之 DMF (300 mL) 中的 *boc*-NH-4-溴-2,5-二甲基苯胺，**2**，(5.8 g, 19.32 mmol)、二硼【酉+品】酯(5.88 g, 23.18 mmol)、1,1'-雙-(二苯基膦基)二茂鐵二氯化鈾(0.382 g, 0.522 mmol)及乙酸鉀(5.689 g, 57.96 mmol)混合物在 80°C 下油浴攪拌 16 小時。將該混合物冷卻至室溫並減壓濃縮之。將 DCM (100 mL)加入通過一填充矽藻土 (Celite)過濾的該混合物中。將濾液濃縮以獲得一白色固體，然後於己烷中將其磨碎以提供一白色粉末產物，**4**，(6.45 g，產率 96%)。



在乾燥箱中，製備於除氣過之甲苯(50 mL)中之硼
酸 5，(3.69 g, 15.58 mmol)、1,4-二溴-2,5-二己基苯(3.15
g, 7.8 mmol)、Aliquat 336 (0.8 g)、 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (0.858 g,
0.742 mmol)之混合物。在乾燥箱外，在氮氣中將除氣過
的 Na_2CO_3 (3.93 g, 37.11 mmol 於 50 mL 的水中)溶液加
入前述之混合物，然後將所得之混合物在 90°C 下攪拌
18 小時。分離有機層並以乙酸乙酯萃取水層。以無水
的 MgSO_4 乾燥合併的有機層。過濾、濃縮該濾液、然
後以矽土管柱層析法(己烷中佔 10-50%的 DCM)提供所
需之固體產物(3.7 g，產率 80%)。在室溫下，將該 diboc-
保護之材料與 TFA 溶液(2 mL 的 TFA 於 50 mL 的 DCM
中)經整夜反應以去保護。將該反應混合物減壓濃縮，
接著以飽和的 NaHCO_3 中和之。用乙酸乙酯萃取、以無
水的 MgSO_4 乾燥、減壓濃縮有機層、然後以矽土管柱
層析法(己烷中佔 10-50%的乙酸乙酯)提供為黏滯液體
態之所需二胺材料，6，(1.89 g，產率 75%)。

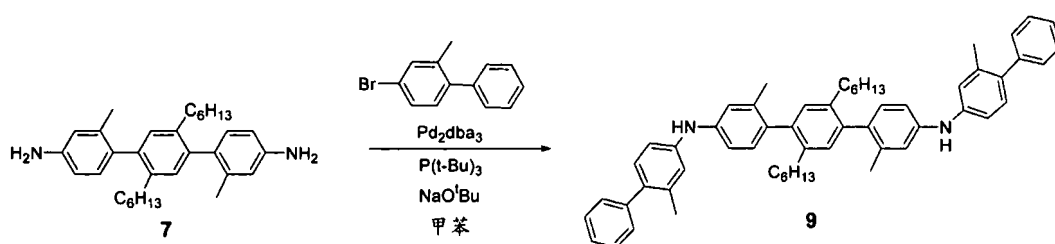


在乾燥箱中，製備於除氣過的甲苯(100 mL)中之二硼【酉+品】酯，3，(5.6 g, 16.82 mmol)、1,4-二溴-2,5-二己基苯(3.4 g, 8.4 mmol)、Aliquat 336 (0.8 g)及 Pd(PPh₃)₄ (0.486 g, 0.421 mmol)之混合物。在乾燥箱外，將除氣過的 Na₂CO₃ (2.67 g, 25.23 mmol 於 50 mL 的水中)溶液在氮氣中加入前述混合物，然後將所得之混合物在 90°C 下攪拌 42 小時。分離有機層並以乙酸乙酯萃取水層。以無水的 MgSO₄ 乾燥合併的有機層。過濾、濃縮該濾液、然後以矽土管柱層析法(己烷中佔 0-3% 的乙酸乙酯)提供為黏滯液體態之所需產物(2.11 g, 產率 38%)。在室溫下，將該 diboc-保護之材料與 TFA 溶液(5 mL 的 TFA 於 50 mL 的 DCM 中)經整夜反應以去保護。將該反應混合物減壓濃縮，接著以飽和的 NaHCO₃ 中和之。用乙酸乙酯萃取、以無水的 MgSO₄ 乾燥、減壓濃縮有機層、然後以矽土管柱層析法(己烷中佔 30% 的乙酸乙酯)提供為黏滯液體態之所需二胺材料，7，(1.16 g, 產率 80%)。



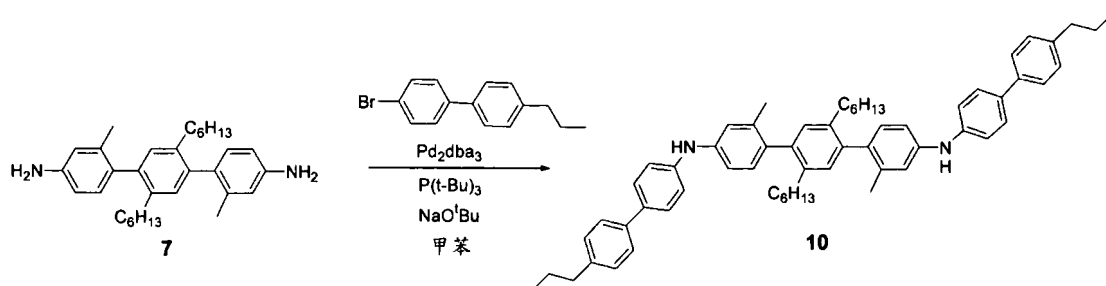
在乾燥箱中，製備於除氣過的甲苯(100 mL)中之二硼【酉+品】酯，4，(6.44 g, 18.55 mmol)、1,4-二溴-2,5-

二己基苯(3.75 g, 9.27 mmol)、Aliquat 336 (0.8 g)及
 Pd(PPh₃)₄ (0.536 g, 0.464 mmol)之混合物。在乾燥箱
 外，將除氣過的 Na₂CO₃ (2.95 g, 27.83 mmol 於 50 mL
 的水中)溶液在氮氣中加入前述混合物，然後將所得之
 5 混合物在 90°C 下攪拌 38 小時。分離有機層並以乙酸乙
 酯萃取水層。以無水的 MgSO₄ 乾燥合併的有機層。過
 濾、濃縮該濾液、然後以矽土管柱層析法(己烷中佔 0-4%
 乙酸乙酯)提供所需之一白色固體產物(3.62 g，產率
 60%)。在室溫下，將該 diboc-保護之材料與 TFA 溶液(4
 10 mL 的 TFA 於 30 mL 的 DCM 中)經整夜反應以去保護。
 將該反應混合物減壓濃縮，接著以飽和的 NaHCO₃ 中和
 之。用乙酸乙酯萃取、以無水的 MgSO₄ 乾燥、減壓濃
 縮有機層、然後以矽土管柱層析法(己烷中佔 30%的乙
 酸乙酯)提供所需之二胺材料，8，(2.5 g，產率 99%)。



將 pd₂dba₃ (362 mg, 0.363 mmol)及 P(t-Bu)₃ (160 mg,
 0.727 mmol)的甲苯(20 mL)溶液加至二胺，7，(2.77 g,
 6.06 mmol)及 2-甲基-4-溴聯苯(3.24 g, 12.12 mmol)的甲
 20 苯(30 mL)溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (1.262 g,
 12.12 mmol)。所得之混合物在室溫下攪拌整夜。通過一
 短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析

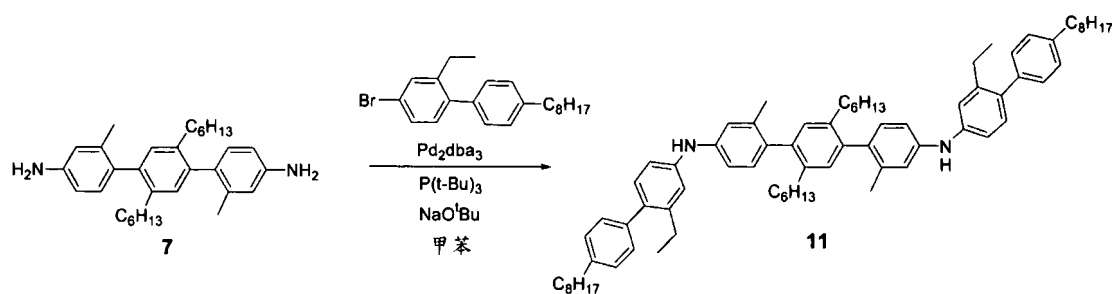
法(己烷中佔 10-30%的甲苯)獲得 3.4 g 之一固體產物，
9，(產率 71%)。



5

將 Pd_2dba_3 (128 mg, 0.139 mmol) 及 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (57 mg, 0.278 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二胺，7，(1.06 g, 2.32 mmol) 及 4-溴-4'-丙基-聯苯 (1.28 g, 4.65 mmol) 的甲苯 (20 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.45 g, 4.65 mmol)。所得之混合物在室溫下攪拌整夜。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法(己烷中佔 10-30%的甲苯)獲得 1.35 g 之一固體產物，10，(產率 69%)。

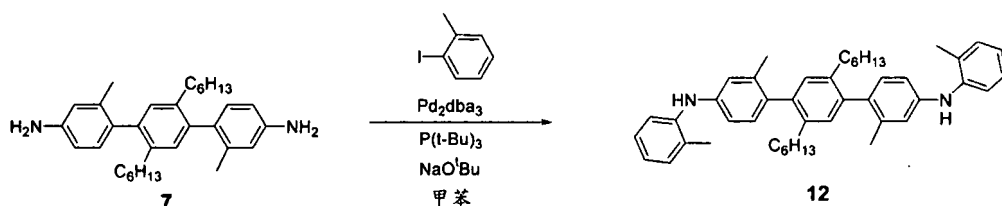
10



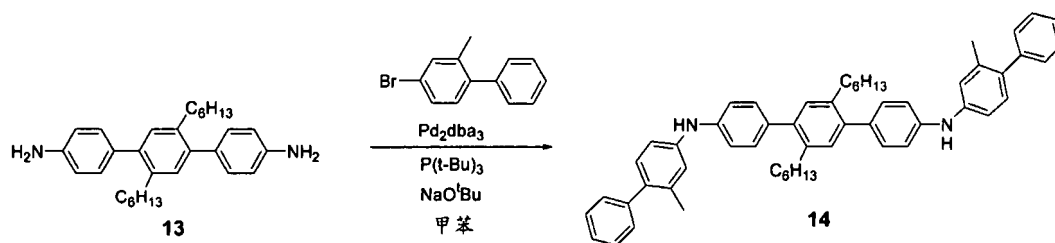
15

將 Pd_2dba_3 (120 mg, 0.131 mmol) 及 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (53 mg, 0.262 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二胺，7，(1 g, 2.19 mmol) 及 4-溴-2-乙基-4'-辛基-聯苯 (1.635 g, 4.38 mmol)

的甲苯(30 mL)溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.421 g, 4.38 mmol)。所得之混合物在室溫下攪拌整夜。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法(己烷中佔 5-12%的 DCM)獲得 1.34 g 之一固體產物，11，(產率 63%)。

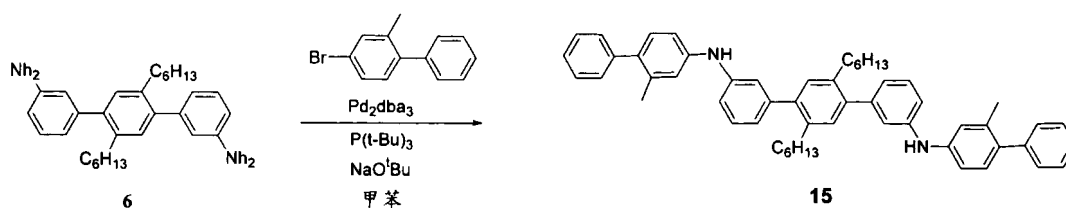


將 Pd_2dba_3 (379 mg, 0.414 mmol)及 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (167 mg, 0.829 mmol)的甲苯(10 mL)溶液加至二胺，7，(3.16 g, 6.91 mmol)及 2-碘甲苯(3.016 g, 13.83 mmol)的甲苯(30 mL)溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (1.4 g, 14.51 mmol)。所得之混合物在室溫下攪拌整夜。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法(己烷中佔 5-10%的甲苯)獲得 3.8 g 之一固體產物，12，(產率 86%)。

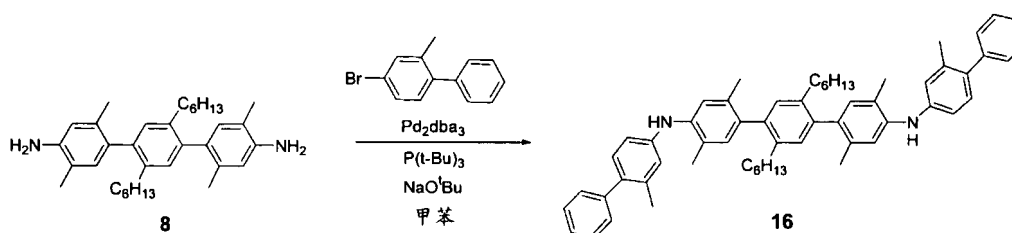


將 Pd_2dba_3 (128 mg, 0.14 mmol)及 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (57 mg, 0.28 mmol)的甲苯(10 mL)溶液加至二胺，13，(1 g, 2.33

mmol)及 2-甲基-4-溴聯苯(1.153 g, 4.66 mmol)的甲苯 (30 mL)溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.448 g, 4.66 mmol)。所得之混合物在室溫下攪拌整夜。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法(己烷中佔 10-40%的甲苯)獲得 1.53 g 之一固體產物，14，(產率 86%)。



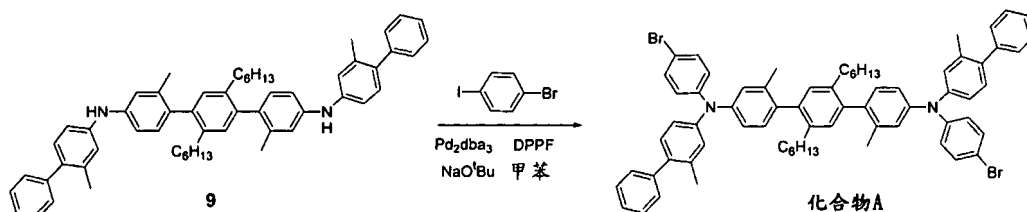
將 pd_2dba_3 (128 mg, 0.14 mmol)及 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (57 mg, 0.28 mmol)的甲苯(10 mL)溶液加至二胺，6，(1 g, 2.33 mmol)及 2-甲基-4-溴聯苯(1.153 g, 4.66 mmol)的甲苯 (30 mL)溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.448 g, 4.66 mmol)。所得之混合物在室溫下攪拌整夜。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法(己烷中佔 10-40%的甲苯)獲得 1.40 g 之一固體產物，15，(產率 79%)。



將 Pd_2dba_3 (172 mg, 0.188 mmol) 及 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (76 mg, 0.376 mmol) 的甲苯 (5 mL) 溶液加至二胺, 8, (1.52 g, 3.13 mmol) 及 2-甲基-4-溴聯苯 (1.55 g, 6.26 mmol) 的甲苯 (40 mL) 溶液中, 接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.603 g, 6.26 mmol)。所得之混合物在室溫下攪拌整夜。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法 (己烷中佔 0-1% 的乙酸乙酯) 獲得 1.1 g 之一固體產物, 16, (產率 43%)。

合成實例 2

本實例說明化合物 A 之合成。

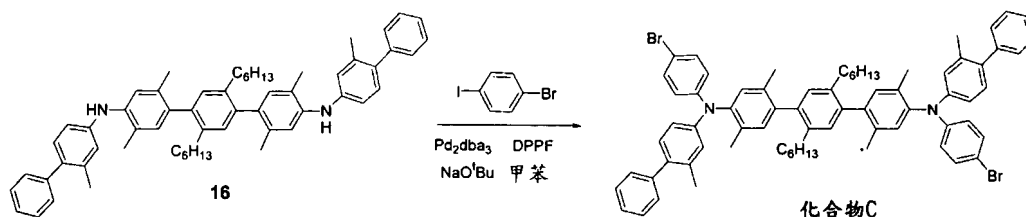


將 Pd_2dba_3 (38 mg, 0.041 mmol) 及 DPPF (45 mg, 0.081 mmol) 的甲苯 (5 mL) 溶液加至二胺, 9, (1.2 g, 1.52 mmol) 及 1-溴-4-碘苯 (1.29 g, 4.56 mmol) 的甲苯 (40 mL) 溶液中, 接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.365 g, 3.80 mmol)。所得之混合物在 95°C 下攪拌 16 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法 (己烷中佔 0-10% 的甲苯) 獲得 1.06 g 之一固體產物, 化合物 A, (產率 63%)。

藉由使用碘苯取代 1-溴-4-碘苯，可以類似的方法製備未經溴化的化合物 A 類似物。

合成實例 3

5 本實例說明化合物 C 之合成。

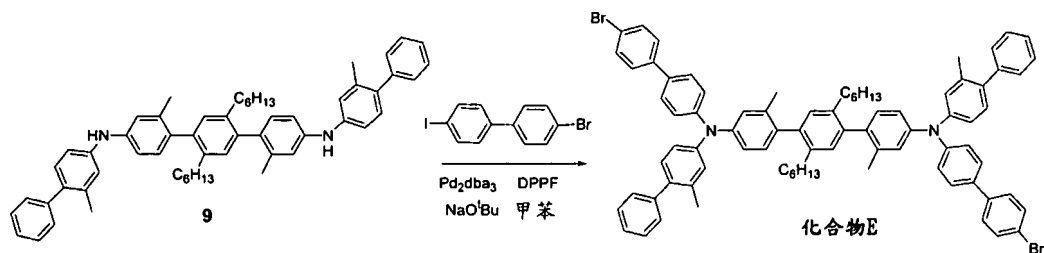


10 將 Pd_2dba_3 (65 mg, 0.071 mmol) 及 DPPF (79 mg, 0.143 mmol) 的甲苯 (5 mL) 溶液加至二胺，16，(1.1 g, 1.34 mmol) 及 1-溴-4-碘甲苯 (1.90 g, 6.73 mmol) 的甲苯 (40 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.388 g, 4.03 mmol)。所得之混合物在 105°C 下攪拌 24 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法 (己烷中佔 0-8% 的甲苯) 獲得 1.26 g 之一固體產物，化合物 C，(產率 83%)。

藉由使用碘苯取代 1-溴-4-碘苯，可以類似的方法製備未經溴化的化合物 C 類似物。

合成實例 4

20 本實例說明化合物 E 之合成。

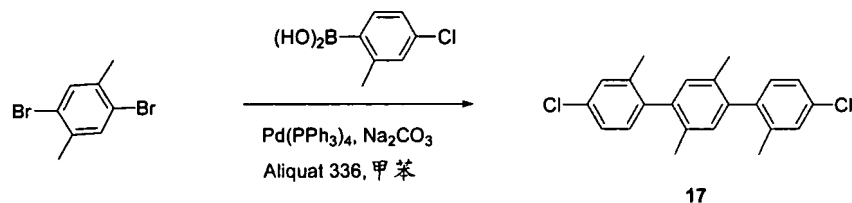


將 Pd_2dba_3 (44 mg, 0.048 mmol) 及 DPPF (52 mg, 0.094 mmol) 的甲苯 (5 mL) 溶液加至二胺，9，(1.6 g, 1.77 mmol) 及 4-溴-4'-碘聯苯 (1.91 g, 5.32 mmol) 的甲苯 (40 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.426 g, 4.44 mmol)。所得之混合物在 95°C 下攪拌 48 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法 (己烷中佔 0-10% 的甲苯) 獲得 1.55 g 之一固體產物，化合物 E，(產率 70%)。

藉由使用 4-碘聯苯取代 4-溴-4'-碘聯苯，可以類似的方法製備未經溴化的化合物 E 類似物。

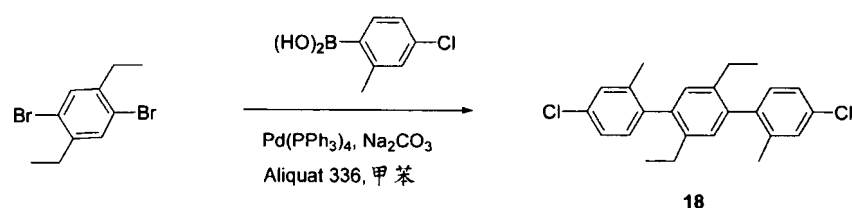
合成實例 5

本實例說明某些其他中間體材料之合成。

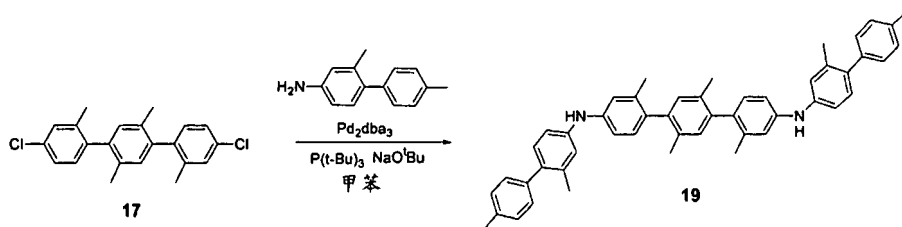


在手套箱中，製備於除氣過的甲苯 (200 mL) 中之 2,5-二溴-對-二甲苯 (5.64 g, 21.36 mmol)、4-氯-2-甲基苯硼酸 (7.28 g, 42.73 mmol)、Aliquat 336 (0.45 g)、及

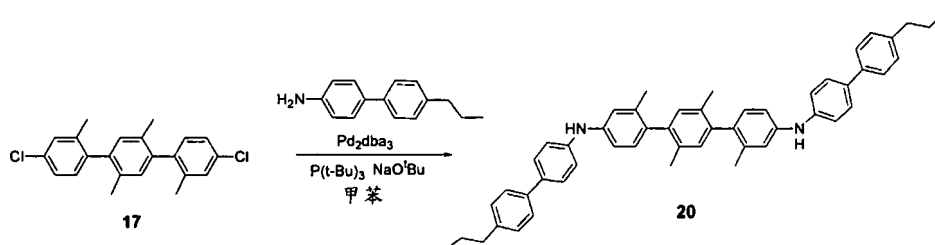
Pd(PPh₃)₄ (1.234 g, 1.068 mmol, 0.05 eq)以及 Na₂CO₃ (11.32 g, 106.8 mmol)之混合物。在乾燥箱外，將除氣過的水(60 mL)在氮氣中加入前述混合物，然後將所得之混合物在氮氣中於 88°C 下攪拌整夜。分離有機層並以乙酸乙酯萃取水層。以無水的 MgSO₄ 乾燥合併的有機層。過濾、濃縮該濾液、然後以矽土管柱層析法(己烷)提供所需之一白色固體產物，17，(6.5 g，產率 85%)。



在手套箱中，製備於除氣過的甲苯(200 mL)中之 1,4-二溴-2,5-二乙苯(7.11 g, 24.35 mmol)、4-氯-2-甲基苯硼酸(8.3 g, 48.70 mmol)、Aliquat 336 (0.5 g)、及 Pd(PPh₃)₄ (1.4 g, 1.21 mmol, 0.05 eq)以及 Na₂CO₃ (12.9 g, 121.7 mmol)之混合物。在乾燥箱外，將除氣過的水(65 mL)在氮氣中加入前述混合物，然後將所得之混合物在氮氣中於 88°C 下攪拌整夜。分離有機層並以乙酸乙酯萃取水層。以無水的 MgSO₄ 乾燥合併的有機層。過濾、濃縮該濾液、然後以矽土管柱層析法(己烷)提供所需之一白色固體產物，18，(6.7 g，產率 72%)。

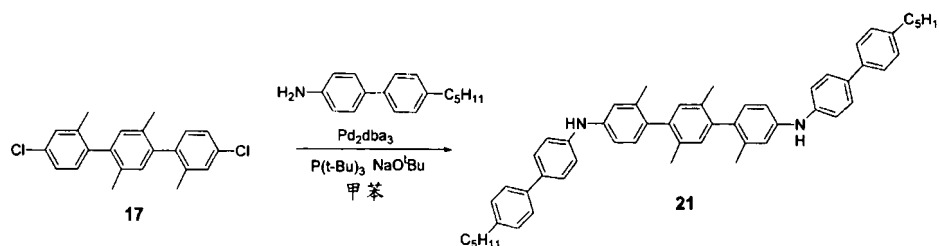


將 pd_2dba_3 (309 mg, 0.338 mmol) 及 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (137 mg, 0.675 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二氯三聯苯，17，
 (2.0 g, 5.63 mmol) 及 2,4'-二甲基-聯苯-4-基胺 (2.22 g, 11.25 mmol) 的甲苯 (50 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (1.35 g, 14.07 mmol)。所得之混合物在 80°C 下
 攪拌 6 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減
 壓濃縮。以管柱層析法 (己烷中佔 10-45% 的 DCM) 獲得
 2.91 g 之一固體產物，19，(產率 77%)。

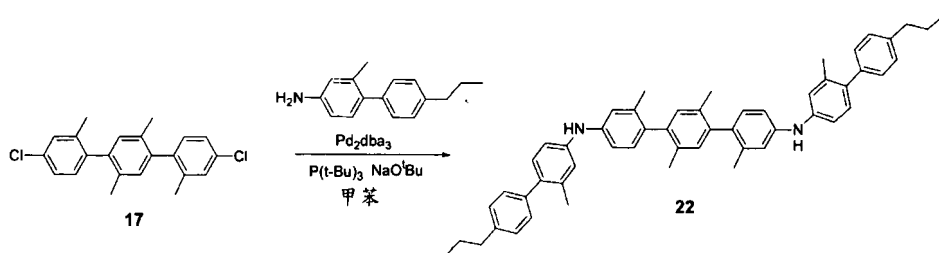


將 pd_2dba_3 (309 mg, 0.338 mmol) 及 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (137 mg, 0.675 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二氯三聯苯，17，
 (2.0 g, 5.63 mmol) 及 4-胺基-4'-丙基-聯苯 (2.38 g, 11.25 mmol) 的甲苯 (50 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (1.35 g, 14.07 mmol)。所得之混合物在 80°C 下
 攪拌 6 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減

壓濃縮。以管柱層析法(己烷中佔 10-45%的 DCM)獲得 2.4 g 之一固體產物，20，(產率 60%)。



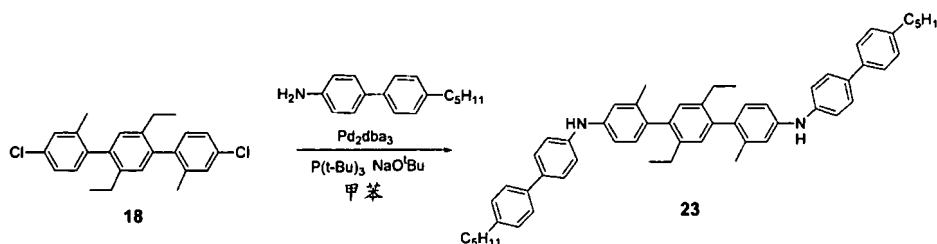
將 Pd_2dba_3 (402 mg, 0.439 mmol) 及 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (178 mg, 0.878 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二氯三聯苯，17，(2.6 g, 7.32 mmol) 及 4-胺基-4'-戊基-聯苯 (3.50 g, 14.64 mmol) 的甲苯 (45 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (1.76 g, 18.29 mmol)。所得之混合物在 80°C 下攪拌 4 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法(己烷中佔 10-45%的 DCM)獲得 4 g 之一固體產物，21，(產率 72%)。



將 Pd_2dba_3 (402 mg, 0.439 mmol) 及 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (178 mg, 0.878 mmol) 的甲苯 (5 mL) 溶液加至二氯三聯苯，17，(2.6 g, 7.32 mmol) 及 2-甲基-4'-丙基-聯苯-4-基胺 (3.3 g, 14.64 mmol) 的甲苯 (50 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入

NaO^tBu (1.76 g, 18.29 mmol)。所得之混合物在 80°C 下攪拌 4.5 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法(己烷中佔 10-45%的 DCM)獲得 4.11 g 之一固體產物，22，(產率 77%)。

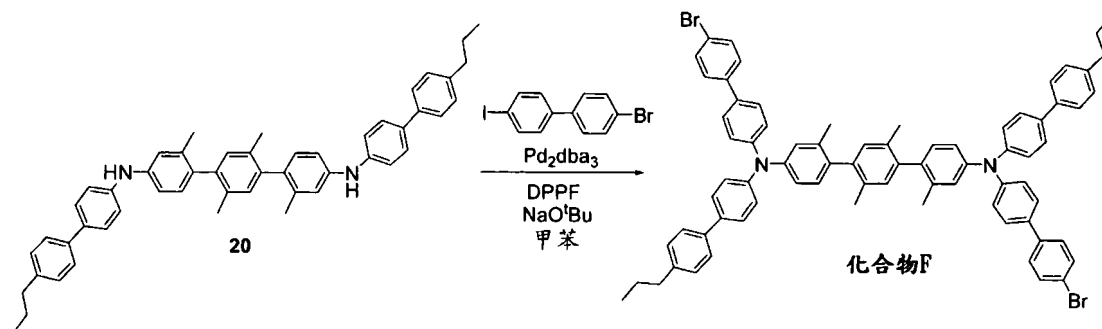
5



將 Pd_2dba_3 (229 mg, 0.252 mmol) 及 $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (101 mg, 0.504 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二氯三聯苯，18，(1.61 g, 4.2 mmol) 及 4-氨基-4'-戊基-聯苯 (2.0 g, 8.4 mmol) 的甲苯 (35 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (1.0 g, 10.5 mmol)。所得之混合物在 80°C 下攪拌 4 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法(己烷中佔 10-45%的 DCM)獲得 3 g 之一固體產物，23，(產率 91%)。

合成實例 6

本實例說明化合物 F 之合成。

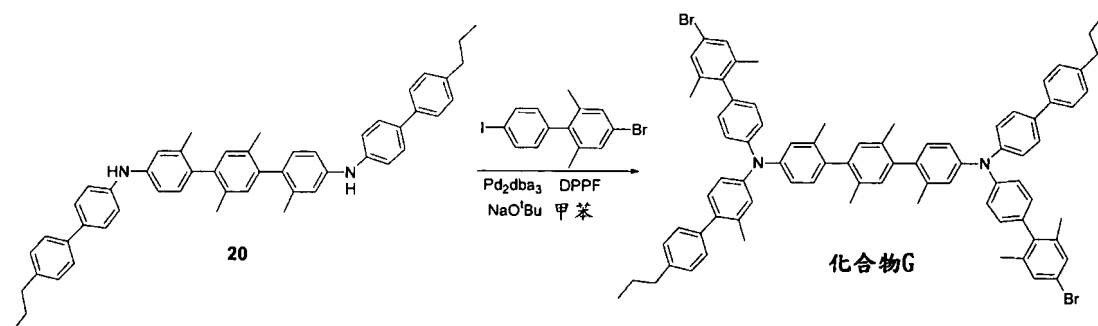


將 Pd_2dba_3 (92 mg, 0.1 mmol) 及 DPPF (112 mg, 0.2 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二胺，20，(1.18 g, 1.67 mmol) 及 4-溴-4'-碘聯苯 (1.80 g, 5.02 mmol) 的甲苯 (30 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.354 g, 3.67 mmol)。所得之混合物在 95°C 下攪拌 17 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法 (己烷中佔 10-20% 的甲苯) 獲得 1.7 g 之一固體產物，化合物 F，(產率 87%)。

藉由使用 4-碘聯苯取代 4-溴-4'-碘聯苯，可以類似的方法製備未經溴化的化合物 F 類似物。

合成實例 7

本實例說明化合物 G 之合成。

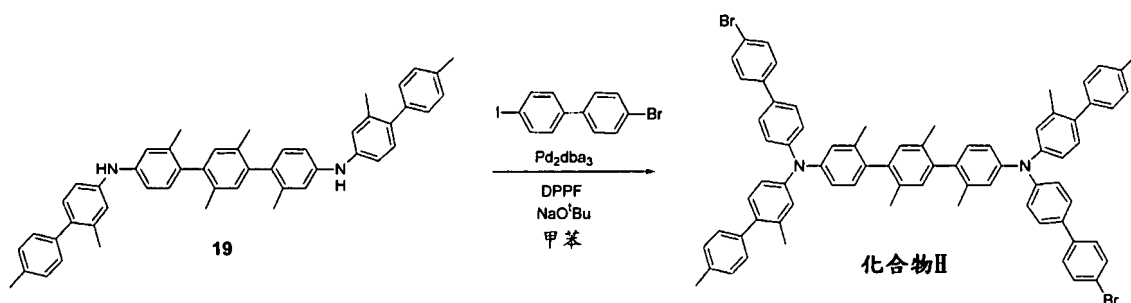


將 Pd_2dba_3 (92 mg, 0.1 mmol) 及 DPPF (112 mg, 0.2 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二胺，20，(1.18 g, 1.67 mmol) 及 4-溴-4'-碘-2,6-二甲基聯苯 (1.94 g, 5.02 mmol) 的甲苯 (30 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.354 g, 3.67 mmol)。所得之混合物在 95°C 下攪拌 17 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法 (己烷中佔 10-20% 的甲苯) 獲得 1.6 g 之一固體產物，化合物 G，(產率 79%)。

藉由使用 2,6-二甲基-4'-碘聯苯取代 2,6-二甲基-4-溴-4'-碘聯苯，可以類似的方法製備未經溴化的化合物 G 類似物。

合成實例 8

本實例說明化合物 H 之合成。



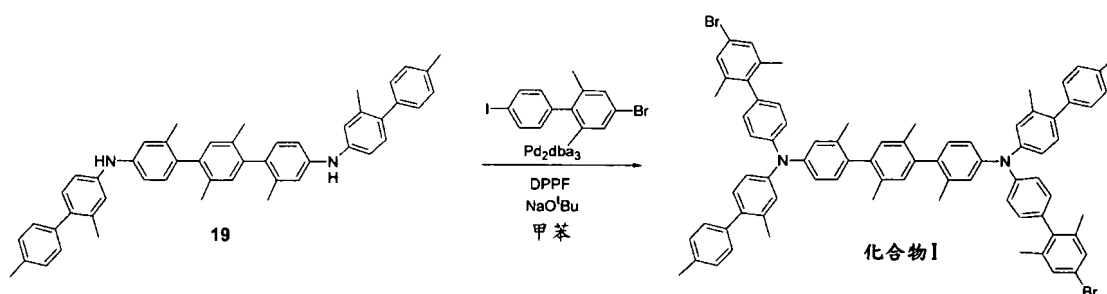
將 Pd_2dba_3 (47 mg, 0.051 mmol) 及 DPPF (56 mg, 0.102 mmol) 的二【口+号】烷 (10 mL) 溶液加至二胺，19，(1.3 g, 1.92 mmol) 及 4-溴-4'-碘聯苯 (2.06 g, 5.76 mmol) 的二【口+号】烷 (40 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.461 g, 4.801 mmol)。所得之混合物在 95°C 下

攪拌 16 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法(己烷中佔 3-11%的甲苯)獲得 1.0 g 之一固體產物，化合物 H，(產率 46%)。

藉由使用 4-碘聯苯取代 4-溴-4'-碘聯苯，可以類似的方法製備未經溴化的化合物 H 類似物。

合成實例 9

本實例說明化合物 I 之合成。

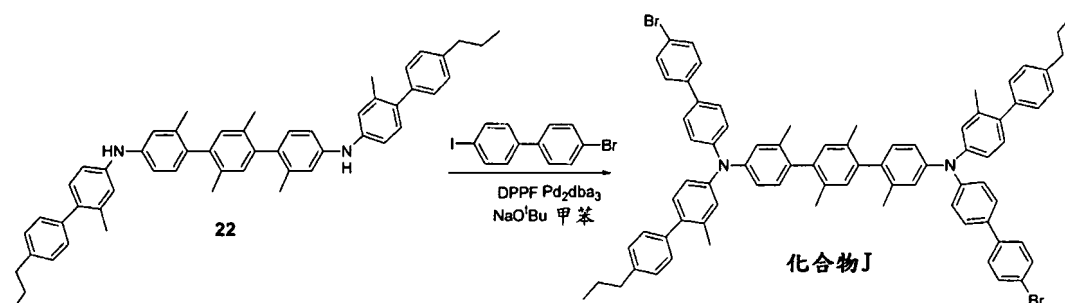


將 pd_2dba_3 (44 mg, 0.048 mmol)及 DPPF (52 mg, 0.094 mmol)的 甲苯(5 mL)溶液加至二胺，19，(1.2 g, 1.77 mmol)及 4-溴-4'-碘-2,6-二甲基聯苯(2.06 g, 5.32 mmol)的 甲苯(40 mL)溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.426 g, 4.432 mmol)。所得之混合物在 95°C 下攪拌 16 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法(己烷中佔 3-20%的甲苯)獲得 0.867 g 之一固體產物，化合物 I，(產率 41%)。

藉由使用 2,6-二甲基-4'-碘聯苯取代 2,6-二甲基-4-溴-4'-碘聯苯，可以類似的方法製備未經溴化的化合物 I 類似物。

合成實例 10

本實例說明化合物 J 之合成。



將 pd_2dba_3 (71 mg, 0.077 mmol) 及 DPPF (84 mg, 0.152 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二胺，22，(2.1 g, 2.86 mmol) 及 4-溴-4'-碘聯苯 (3.08 g, 8.6 mmol) 的甲苯 (60 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.688 g, 7.16 mmol)。所得之混合物在 95°C 下攪拌 16 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法 (己烷中佔 5-20% 的甲苯) 獲得 1.33 g 之一固體產物，化合物 J，(產率 39%)。

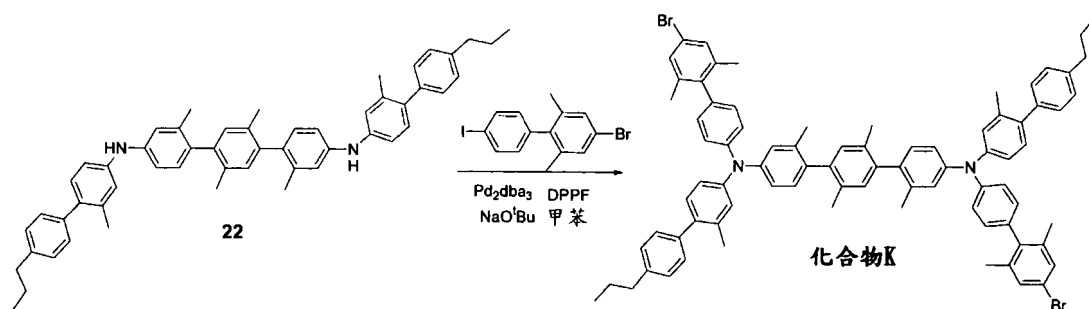
10

藉由使用 4-碘聯苯取代 4-溴-4'-碘聯苯，可以類似的方法製備未經溴化的化合物 J 類似物。

15

合成實例 11

本實例說明化合物 K 之合成。

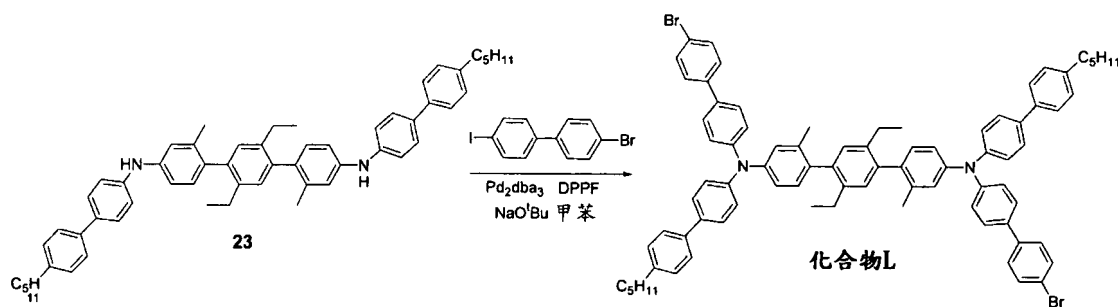


將 Pd_2dba_3 (67 mg, 0.074 mmol) 及 DPPF (80 mg, 0.145 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二胺，22，(2.0 g, 2.73 mmol) 及 4-溴-4'-碘-2,6-二甲基聯苯 (3.17 g, 8.18 mmol) 的甲苯 (50 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.655 g, 6.821 mmol)。所得之混合物在 95°C 下攪拌 16 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法 (己烷中佔 5-18% 的甲苯) 獲得 0.95 g 之一固體產物，化合物 K，(產率 28%)。

藉由使用 2,6-二甲基-4'-碘聯苯取代 2,6-二甲基-4-溴-4'-碘聯苯，可以類似的方法製備未經溴化的化合物 K 類似物。

合成實例 12

本實例說明化合物 L 之合成。

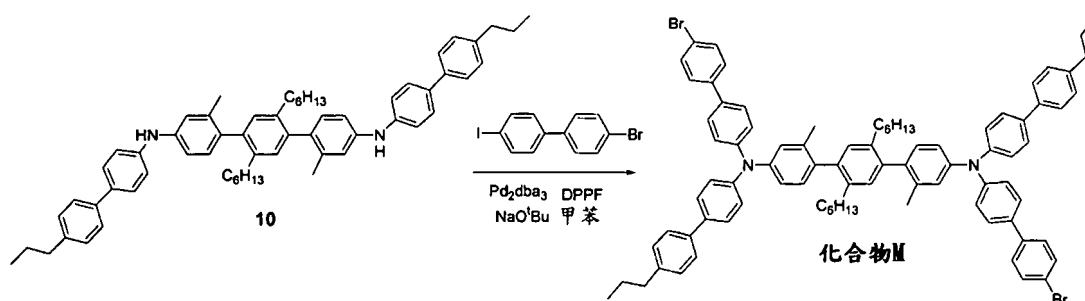


將 Pd_2dba_3 (100 mg, 0.110 mmol) 及 DPPF (122 mg, 0.220 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二胺，23，(1.45 g, 1.84 mmol) 及 4-溴-4'-碘聯苯 (1.97 g, 5.51 mmol) 的甲苯 (30 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.388 g, 4.04 mmol)。所得之混合物在 95°C 下攪拌 18 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法 (己烷中佔 3-11% 的 DCM) 獲得 1.52 g 之一固體產物，化合物 L，(產率 65%)。

藉由使用 4-碘聯苯取代 4-溴-4'-碘聯苯，可以類似的方法製備未經溴化的化合物 L 類似物。

合成實例 13

本實例說明化合物 M 之合成。



將 Pd_2dba_3 (37 mg, 0.04 mmol) 及 DPPF (43 mg, 0.078 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二胺，10，(1.25 g, 1.48 mmol) 及 4-溴-4'-碘聯苯 (1.59 g, 4.44 mmol) 的甲苯 (30 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.355 g, 3.70 mmol)。所得之混合物在 95°C 下攪拌 16 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱

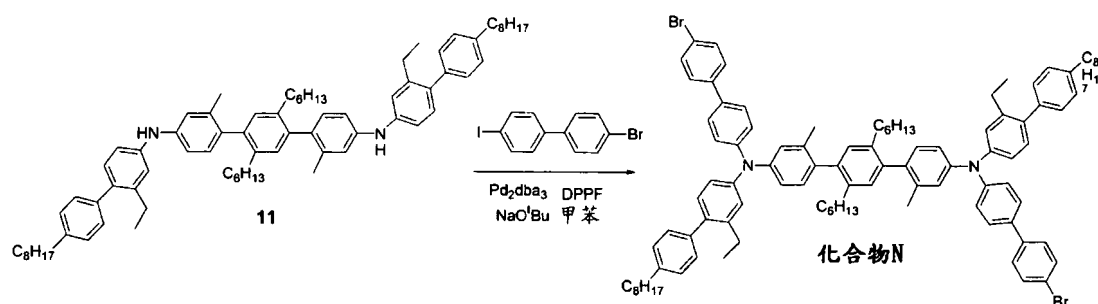
層析法(己烷中佔 0-12%的甲苯)獲得 1.10 g 之一固體產物，化合物 M，(產率 57%)。

使用 4-碘聯苯取代 4-溴-4'-碘聯苯，以類似的方法可製備未經溴化的化合物 M 類似物。

5

合成實例 14

本實例說明化合物 NL 之合成。



10

將 Pd_2dba_3 (34 mg, 0.037 mmol) 及 DPPF (40 mg, 0.072 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二胺，11，(1.42 g, 1.36 mmol) 及 4-溴-4'-碘聯苯 (1.47 g, 4.09 mmol) 的甲苯 (30 mL) 溶液中，接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.328 g, 3.41 mmol)。所得之混合物在 95°C 下攪拌 16 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法(己烷中佔 0-12%的甲苯)獲得 1.33 g 之一固體產物，化合物 N，(產率 60%)。

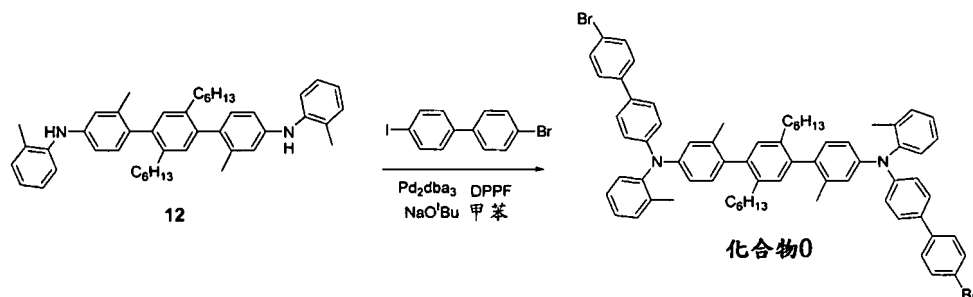
15

藉由使用 4-碘聯苯取代 4-溴-4'-碘聯苯，可以類似的方法製備化合物 N 的未經溴化類似物。

20

合成實例 15

本實例說明化合物 O 之合成。

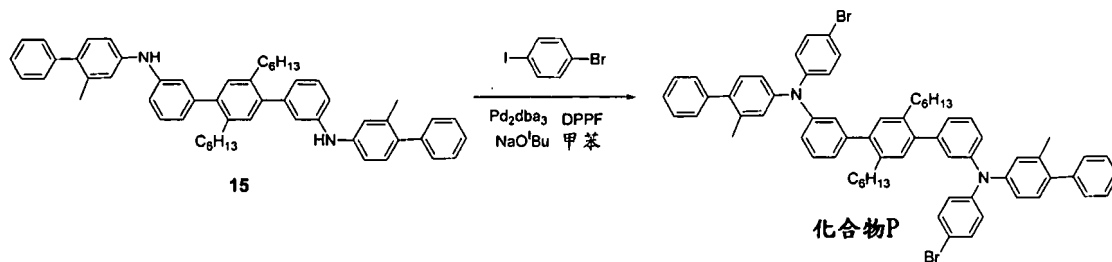


將 Pd_2dba_3 (174 mg, 0.191 mmol) 及 DPPF (211 mg, 0.38 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二胺, 12, (1.5 g, 2.35 mmol) 及 4-溴-4'-碘聯苯 (2.53 g, 7.06 mmol) 的甲苯 (30 mL) 溶液中, 接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.565 g, 5.88 mmol)。所得之混合物在 95°C 下攪拌 18 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法 (己烷中佔 5-10% 的甲苯) 獲得 2.4 g 之一固體產物, 化合物 O, (產率 93%)。

藉由使用 4-碘聯苯取代 4-溴-4'-碘聯苯, 可以類似的方法製備化合物 O 的未經溴化類似物。

合成實例 16

本實例說明化合物 P 之合成。

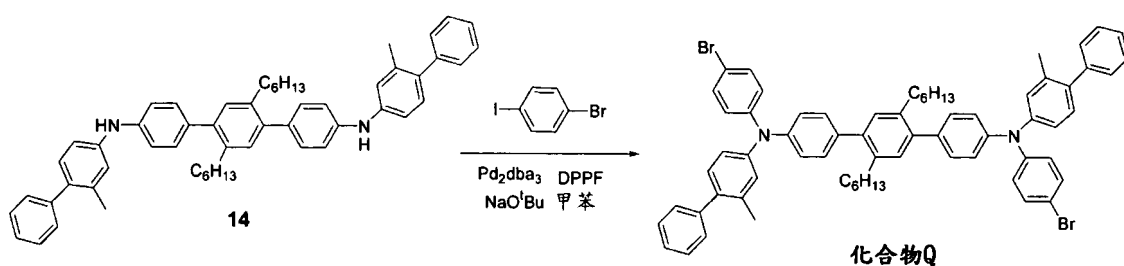


將 Pd_2dba_3 (45 mg, 0.049 mmol) 及 DPPF (54 mg, 0.097 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二胺, 15, (1.39 g, 1.826 mmol) 及 1-溴-4-碘苯 (1.55 g, 5.48 mmol) 的甲苯 (30 mL) 溶液中, 接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.439 g, 4.56 mmol)。所得之混合物在 95°C 下攪拌 16 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析法 (己烷中佔 0-3% 的甲苯) 獲得 1.53 g 之一固體產物, 化合物 P, (產率 78%)。

藉由使用碘苯取代 1-溴-4-碘苯, 可以類似的方法製備化合物 P 的未經溴化類似物。

合成實例 17

本實例說明化合物 Q 之合成。



將 Pd_2dba_3 (49 mg, 0.053 mmol) 及 DPPF (58 mg, 0.104 mmol) 的甲苯 (10 mL) 溶液加至二胺, 14, (1.5 g, 1.97 mmol) 及 1-溴-4-碘苯 (1.67 g, 5.91 mmol) 的甲苯 (30 mL) 溶液中, 接著在氮氣中加入 NaO^tBu (0.473 g, 4.93 mmol)。所得之混合物在 95°C 下攪拌 16 小時。通過一短矽土床過濾該混合物並將濾液減壓濃縮。以管柱層析

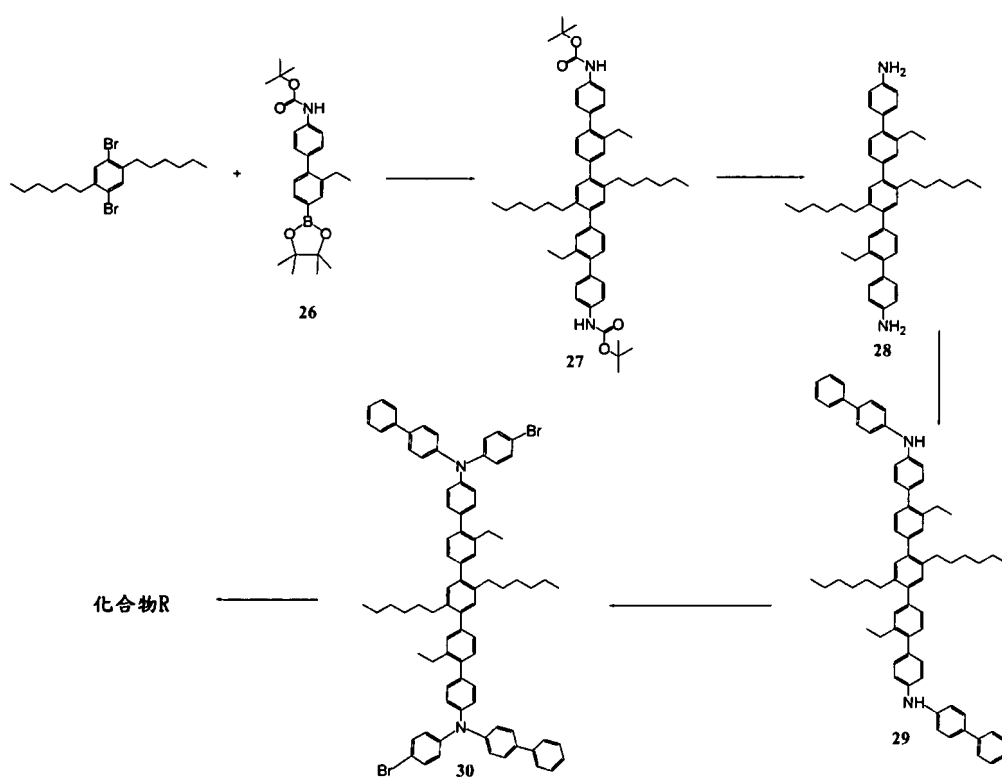
法(己烷中佔 0-10%的甲苯)獲得 1.30 g 之一固體產物，
化合物 Q，(產率 62%)。

藉由使用碘苯取代 1-溴-4-碘苯，可以類似的方法
製備化合物 Q 的未經溴化類似物。

5

合成實例 18

本實例說明化合物 R 之合成。



10

於一設有攪拌棒及冷凝器之 250 mL 雙頸圓底瓶
內，使 1,4-二溴-2,5-二己基苯(8.05 mmols, 3.255 g)、
硼酸酯 26 (17.7 mmols, 7.545 g)、 Na_2CO_3 (40.3
mmols, 4.268 g)及 Aliquat 336 (0.500 g)懸浮在甲苯
(100 mL)中。將該反應混合物除氣並加入 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$
(0.403 mmols, 0.465 g)，接著加入除氣過的水(50 mL)。

15

將反應加熱至 90°C 兩天。所得之反應混合物以乙酸乙酯(150 mL)稀釋，以乙酸乙酯(3 × 100 mL)萃洗。以鹽水(2 × 100 mL)萃洗有機層、以硫酸鎂乾燥、過濾並濃縮之。藉由使用 DCM：己烷為 1:3 之矽膠管柱層析法純化以產出白色粉末(56%, 3.8 g)。¹H NMR (500 MHz, CD₂Cl₂) δ = 7.45 (d, J = 8.5 Hz, 4H), 7.33-7.31 (m, 5H), 7.26-7.19 (m, 5H), 6.65 (s, 2H), 2.71-2.63 (m, 9H), 1.54 (s, 18H), 1.31-1.20 (m, 14H), 1.15 (t, J = 7.49, 7H), 0.83 (t, J = 6.85 Hz, 6H)。

將化合物 27 (4.54 g, 3.800 mmol) 加至 200 mL 的圓底瓶並使其溶於二氯甲烷(90 mL)中。將三氟乙酸(45.4 g, 5.175 mmol)逐滴加入該溶液中。一天後，以旋轉蒸發法將二氯甲烷移除並將所得之灰色粉末溶於乙醚(100 mL)中，加入碳酸氫鈉(100 mL)以中和 TFA，將各層分離並依序以水(2 × 100 mL)及鹽水(2 × 100 mL)萃洗有機層。以硫酸鎂乾燥並濃縮產出一灰白色的粉末(100%, 2.891 g)。¹H NMR (500 MHz, CD₂Cl₂) δ = 7.28 (m, 2H), 7.23-7.18 (m, 6H), 7.16 (d, J = 8.47 Hz, 4H), 6.76 (d, J = 8.37 Hz, 4H), 3.77 (s, 4H), 2.71-2.63 (m, 6H), 1.3-1.19 (m, 16H), 1.15 (t, J = 7.5 Hz, 8H), 0.83 (t, J = 6.86 Hz, 6H)。

在一 250 mL 的圓底瓶中，加入二胺 28(4.539 mmol, 2.891 g)、溴聯苯(9.123 mmol, 2.127 g)及甲苯(65 mL)。接著加入 Pd₂(dba)₃ (0.227 mmol, 0.208 g) 及 P^tBu₃ (0.454 mmol, 0.092 g)。在加入鹼 (NaO^tBu (9.078 mmol, 0.845 g)) 之前，將該反應混合物攪拌 5

分鐘。三天後，以甲苯(100 mL)稀釋所得之反應混合物，通過一矽土及矽藻土墊過濾，依序以甲苯(3 × 100 mL)及乙酸乙酯(2 × 100 mL)萃洗，並濃縮成一褐色固體。使用乙酸乙酯：己烷為 1:6 的沖提液，以矽膠管柱層析法純化以產出一白色粉末(55%, 2.367 g)。¹H NMR (500 MHz, CD₂Cl₂) δ = 7.61 (d, J = 7.24Hz, 4H), 7.57 (d, J = 8.51Hz, 4H), 7.43 (t, J = 7.6Hz, 4H), 7.34-7.28 (m, 12H), 5.99 (s, 2H), 2.73 (q, J = Hz, 4H), 2.66 (t, J = 7.7Hz, 6H), 1.33-1.17 (m, 20H), 0.84 (t, J = 7.2Hz, 6H)。

於一設有冷凝器及攪拌棒之 100 mL 的雙頸圓底瓶內，使化合物 29 (2.515 mmol, 2.367 g)及 1-溴-4-碘苯(3.772 mmol, 1.067 g)、Pd₂(dba)₃ (0.126 mmol, 0.115 g)及 1,1-雙(二苯基膦基)二茂鐵(0.251 mmol, 0.139 g)懸浮在甲苯(100 mL)中。攪拌該混合物，將三級丁醇鈉(2.766 mmol, 0.266 g)加入。在 90°C 下加熱該反應混合物直到反應完成。將所得之反應混合物以甲苯(50 mL)稀釋，通過一矽土及矽藻土墊進行過濾，以甲苯(2 × 200 mL)萃洗並濃縮成褐色固體。以使用 1:2 的二氯甲烷：己烷的矽膠管柱層析法進行純化，以 MeOH 萃洗產物沖提部分，經過濾以獲得白色粉末(23%, 0.715 g)。¹H NMR (500 MHz, CD₂Cl₂) δ = 7.61 (d, J = 6.95Hz, 4H), 7.56 (d, J = 8.73Hz, 4H), 7.46-7.4 (m, 8H), 7.34-7.29 (m, 10H), 7.24-7.18 (m, 12H), 7.08 (d, J = 8.89Hz, 4H), 2.74 (q, J = 7.5Hz, 4H), 2.65 (t, J = 8.12Hz, 6H), 1.32-1.18 (m, 22H), 0.83 (t, J = 6.88Hz, 6H)。

將化合物 30 (0.626 g, 0.50mmol)加至一閃爍瓶，且溶解於 16 mL 的甲苯中。將雙(1,5-環辛二烯)鎳(0) (0.278 g, 1.010mmol)倒入一乾淨、乾的 50 mL Schlenk 試管。將 2,2'-二吡啶(0.158 g, 1.010 mmol)及 1,5-環辛二烯(0.109, 1.010 mmol)稱重並置入一閃爍瓶，且使其溶於 4 mL 的 N,N'-二甲基甲醯胺中。將該溶液加入 Schlenk 試管中。該 Schlenk 試管係插入一鋁塊(aluminum block)中，加熱該鋁塊並於一熱板/攪拌器上在一會造成內溫 60°C 的設定點攪拌。將催化劑系統維持在 60°C 共 30 分鐘，然後將溫度提高至 70°C。將甲苯中的單體溶液加至該 Schlenk 試管中並密封該試管。將該聚合反應混合物在 70°C 下攪拌 18 小時。18 小時之後，將 Schlenk 試管自鋁塊移除並使其冷卻至室溫。自手套箱移除該試管，並將內容物倒入一濃鹽酸(conc. HCl)/甲醇(MeOH)溶液(1.5% v/v 濃鹽酸)中。攪拌兩小時後，以真空過濾法收集該聚合物並在高真空狀態下乾燥之。經連續析出將聚合物由甲苯純化至 HCl/MeOH (1% v/v 濃鹽酸)、MeOH、甲苯(CMOS 等級)及乙酸乙酯。獲得一白色、纖維狀的聚合物(0.27 g, 產率 47%)。以 GPC(THF 移動相，聚苯乙烯標準品)測定該聚合物之分子量： $M_w=140,399$ ； $M_n=47,682$ 。NMR 分析證實化合物 R 之結構。

合成實例 19

以一類似的方法可製備其他的二溴化合物。可用類似於敘述在合成實例 18 的方法由這些二溴化合物製備

其他的聚合物。某些其他的聚合物之分子量提供在下方表 1 中。以 GPC(THF 移動相，聚苯乙烯標準品)測定分子量。

5

表 1. 聚合物分子量

化合物	Mn	Mw
S	152,561	270,588
T	145,262	386,212
U	252,211	535,643
V	524,354	1,099,173
W	22,778	109,105
X	81,920	861,804
AA	91,314	197,397
BB	111,502	356,234
CC	139,464	385,906
DD	59,391	1,058,617
EE	196,812	515,643

裝置實例 1-10

這些實例說明該新穎化合物在一裝置中的性能。

10

(a) 材料：

HIJ-1 係一種導電聚合物以及一種聚合性氟化磺酸之水性分散液。這類材料已記載於例如公開之美國專利申請案 US 2004/0102577、US 2004/0127637 及 US 2005/0205860 與公開之 PCT 申請案 WO 2009/018009 中。

15



E-1 係一種具有藍色電致發光之雙(二芳胺基)蔥化合物。

主體-1 係一種二芳基蔥化合物。

ET-1 係一種金屬喹啉(quinolate)衍生物

5

(b) 裝置

在這些實例中，裝置係經由溶液加工及氣相沉積技術之組合所製成。使用一具有 50 nm 氧化銦錫(「ITO」)之基材作為陽極。從一水性分散液之旋轉塗佈法施用 HIJ-1。從 0.38 w/v% 甲苯溶液之旋轉塗佈法施用該電洞

10

傳輸材料。以蒸發沉積法施用其他材料。該裝置結構為：

陽極：ITO (50 nm)

電洞注入層：HIJ-1 (50 nm)

電洞傳輸層：表 2 所示之材料及厚度

15

電活性層：E-1 於主體-1 中，其比例為 1:13 (32 nm)

電子傳輸層：ET-1 (10 nm)

電子注入層：CsF (沉積 1 nm)

陰極：Al (100 nm)

藉由量測下列數據來描述 OLED 樣本之特徵，(1)

20

電流-電壓(I-V)曲線，(2)電致發光輻射強度對電壓，及(3)電致發光光譜對電壓。以上所有三個測量皆於相同時間執行，並由一電腦控制。該裝置在某一特定電壓處的電流效率，為藉由把 LED 之電發光輻射強度除以該裝置運轉所需之電流密度確認。其單位為 cd/A。之後由電

25

流效率(cd/A)及電致發光光譜計算外部量子效率

(EQE)，採用發射光之朗伯分佈 (Lambertian distribution)。結果如表 3 所示。

表 2. 電洞傳輸層

實例	電洞傳輸材料	HTL 厚度，nm
1A	化合物 R	20
1B	化合物 R	20
2A	化合物 S	20
2B	化合物 S	20
3A	化合物 T	20
3B	化合物 T	20
4A	化合物 U	20
4B	化合物 U	20
5A	化合物 V	20
5B	化合物 V	20
6A	化合物 W	20
6B	化合物 W	20
7A	化合物 X	20
7B	化合物 X	20
8A	化合物 Y	16
8B	化合物 Y	16
9A	化合物 DD	20
9B	化合物 DD	20
10A	化合物 EE	20
10B	化合物 EE	20

5

表 3. 裝置之結果值

實例	x,y	電壓 (V)	E.Q.E. (%)	C.E. (cd/A)	P.E. (lm/W)	壽命測試 電流密度 (mA/cm ²)	壽命測 試發光 強度	原始 T50 (h)	壽命 T50 (h)
1A	0.138, 0.141	4.38	8.0	9.1	65.	122	8868	93	3800
1B	0.138, 0.141	4.34	7.9	9.0	6.5	131	9397	88	3968

2A	0.139, 0.116	3.22	7.2	7.1	7.0	126	7084	173	4829
2B	0.138, 0.117	3.21	7.3	7.3	7.1	122	7185	203	5814
3A	0.138, 0.120	3.20	7.8	7.8	7.7	128	7862	197	6543
3B	0.138, 0.119	3.19	7.8	7.8	7.7	122	7603	220	6916
4A	0.138, 0.117	4.26	8.1	8.1	6.0	127	7867	155	5154
4B	0.139, 0.118	4.32	7.7	7.7	5.6	126	7445	156	4749
5A	0.138, 0.117	4.16	8.2	8.2	6.2	129	8154	175	6183
5B	0.138, 0.117	4.21	8.0	8.0	6.0	123	7641	184	5822
6A	0.140, 0.115	4.48	8.0	7.9	5.5	131	7524	11	345
6B	0.140, 0.114	4.52	8.1	8.0	5.5	122	7231	11	320
7A	0.137, 0.119	3.91	7.8	7.8	6.3	125	7699	128	4125
7B	0.137, 0.119	3.94	7.8	7.9	6.3	118	7466	131	4003
8A	0.140, 0.105	3.16	6.2	5.7	5.7	129	4526	141	1835
8B	0.141, 0.105	3.17	6.2	5.7	5.6	124	4364	153	1867
9A	0.139, 0.111	4.15	7.3	7.0	5.3	132	7257	73	2118
9B	0.138, 0.110	4.11	7.4	7.0	5.4	123	6906	86	2292
10A	0.139, 0.113	4.65	7.7	7.5	5.1	133	7460	16	474
10B	0.139, 0.113	4.61	7.7	7.5	5.1	128	7198	18	524

x,y =根據 C.I.E.之 x 及 y 顏色座標色度(國際照明協會, 1931 年); EQE =

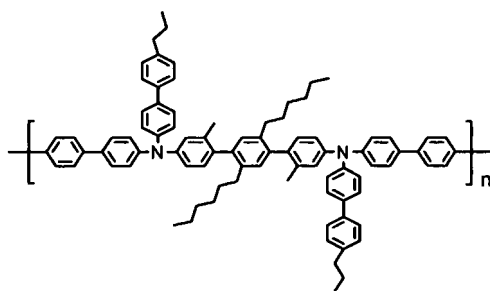
外部量子效率 ; CE = 電流效率 ; PE = 功率效率 ;

V, E.Q.E., C.E.及 P.E.係於 1000 尼特

T50 為到達 50% 初始光度之時間 (小時); 壽命 T50 係使用 1.7 之加速因子進行計算。

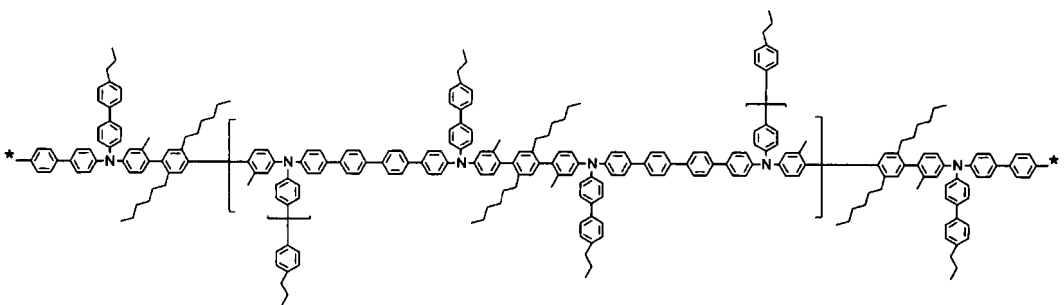
實例 11

5 計算某些化合物的三重態能量。於 Gaussian 03 套
件程式中利用密度泛函理論(DFT)法進行能量計算
(*Gaussian 03*, D.01 修訂版; Gaussian, Inc., Wallingford,
CT, 2004)。先將分子結構在 BP86/6-31G+IrMWB60 等
級下最佳化, 之後在此相同的計算等級下將其用於後續
10 的分析振動頻率計算中, 以確保這些結構的確是平衡
者。對於激態計算, 先前的經驗顯示, 時間相關的 DFT
(TDDFT)在 B3LYP/6-31G+IrMWB60 等級下可滿足計算
前七個單重態及三重態能量過渡之需求。為獲得此等分
子的 HOMO 及 LUMO 值, 使用
15 B3LYP/6-31+G(d)+IrMWB60 等級。

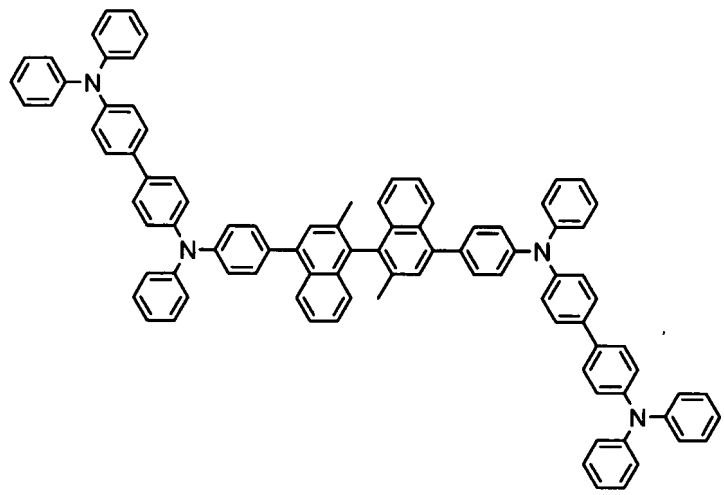


20 作為該聚合性材料的模型, 中心單體單元係延伸至每一
側上的次一個二苯基胺基。因此, 舉例而言, 對於化合物 S

係針對如下所示於括弧中的單元進行計算



5 為了進行比較，也計算對照化合物 Comp-1 的三重態能量。如 Comp-1 之材料係曾記載於已公開之 PCT 申請案 WO2009/067419 中。



Comp-1

10

計算而得的三重態能量乃列於表 4。

表 4.三重態能量

化合物	三重態能量，eV
Comp-1	2.41
化合物 S	2.50
化合物 T	2.50
化合物 U	2.50
化合物 W	2.57

化合物 X	2.56
化合物 Z	2.50
化合物 AA	2.99
化合物 BB	2.50
化合物 CC	2.90
化合物 DD	2.50
化合物 EE	2.60

裝置實例 12-13 及對照例 A

此等實例說明裝置中之新穎化合物的性能，其中裝置的發光材料為磷光有機金屬錯合物。

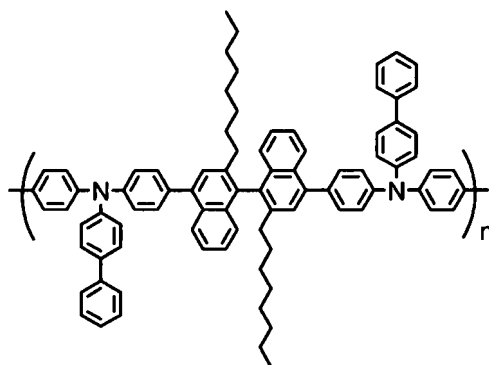
5

(a) 材料：

E-2 為參-環金屬化之銥錯合物，其具有藍綠光發射。

H-2 為吲哚咔唑(indolocarbazole)化合物。

10 對照化合物 Comp-2 為具有下示結構的電洞傳輸聚合物。



15 HIJ-1 及 ET-1 如上所述。

(b) 裝置

裝置係如裝置實例 1-10 所述方式製備。

裝置結構為：

陽極：ITO (50 nm)

5 電洞注入層：HIJ-1 (50 nm)

電洞傳輸層(全部 20 nm)：

實例 12：化合物 T

實例 13：化合物 AA

對照例 A：Comp-2

10 電活性層：E-2 於主體-2 中以 16:84 比例(60 nm)

電子傳輸層：ET-1 (10 nm)

電子注入層：CsF (沉積 1 nm)

陰極：Al (100 nm)

裝置係以上述方式進行特性分析。結果係列於表 5。

15

表 5.裝置之結果值

實例	x,y	電壓 (V)	E.Q.E. (%)	C.E. (cd/A)	P.E. (lm/W)	壽命測試 電流密度 (mA/cm ²)	壽命測 試發光 強度	原始 T50 (h)	壽命 T50 (h)
對照 實例 A	0.227, 0.585	3.49	13.4	40.6	36.5	122	12260	176	15984
對照 實例 A	0.226, 0.584	3.49	12.9	39.0	35.1	34	11510	187	15216
12A	0.225, 0.585	3.30	16.4	49.6	47.3	36	14610	140	17416
12B	0.221, 0.581	3.28	16.4	49.2	47.1	35	14160	144	17013
13A	0.214, 0.573	3.37	19.8	58.1	54.2	37	17890	58	10450
13B	0.214, 0.575	3.37	20.9	61.3	57.2	33	16820	65	10429

x, y = 根據 C.I.E. 之 x 及 y 顏色座標色度 (國際照明協會, 1931 年); EQE = 外部量子效率; CE = 電流效率; PE = 功率效率;

V 、 $E.Q.E.$ 、 $C.E.$ 及 $P.E.$ 係於 1000 尼特

$T50$ 為到達 50% 初始光度之時間 (小時); 壽命 $T50$ 係使用 1.8 之加速因子進行計算。

Comp-2 之三重態能量可估計大約和 Comp-1 計算而得者相同。因此，三重態能量增加如下：

Comp-2 < 化合物 T < 化合物 AA

可發現具有磷光發射體之裝置效能隨著三重態能量增加而增加。

對照實例 A < 實例 12 < 實例 13

應留意的是，並非上文一般性描述或實例中所述之動作都是必要的，特定動作之一部分可能並非必要的，並且除了所描述之動作外，可進一步執行一或多個其他動作。此外，所列動作之次序不必然是執行該等步驟之次序。

在上述說明中，已描述關於特定實施例之概念。然而，本領域普通技術人員應理解在不脫離下列申請專利範圍所提出之本發明範圍的情況下，可進行各種修改和變更。因此，應將本說明書與圖式視為說明性而非限制性之觀念，且意欲將所有這類修改涵括於本發明之範疇中。

前文已描述關於特定實施例之效益、其他優點及問題解決方案。然而，不可將效益、優點、問題解決方案

以及任何可使這些效益、優點或問題解決方案更為突顯的特徵解讀為是任何或所有專利申請範圍之關鍵、必需或必要特徵。

應當理解為了清楚說明起見，本文所述之各實施例內容中的某些特徵，亦可以組合之方式於單獨實施例中別加以提供。相反地，簡潔起見，本文所述許多特徵於同一實施例中，其亦可分別提供或提供於任何次組合中。本文所指定之各種範圍內的數值的使用係恰如所述之範圍內的最小值及最大值的近似值，其使用「約為」作表示。據此，高於或低於所述範圍的些微變化可用以達到和範圍中之數值實質上相同的結果。並且，這些範圍之揭露意欲成為一連續範圍，其包括最小與最大平均值間各個數值，各個數值包括當一些具有某值之成分與其他不同值之成分混合時所產生的分數值。再者，當揭露較寬與較窄的範圍時，本發明之規劃包含使某一範圍之最小值配合另一範圍之最大值，且反之亦然。

【圖式簡單說明】

實施例說明於隨附圖式中，以增進對本文中所呈現之概念的理解。

圖 1 包括一有機電子裝置之實例的說明。

圖 2 包括一有機電子裝置之說明。

熟習此項技術者應瞭解，圖式中之物件係為達成簡單及清楚之目的而說明，且不一定按比例繪製。例如，在該等圖式中，某些物件的尺寸相對於其他物件可能有所放大，以有助於對實施例的瞭解。

【主要元件符號說明】

100...裝置
110...陽極
120...電洞注入層
130...電洞傳輸層
140...電致發光層
150...電子傳輸層
160...陰極
200...裝置
210...陽極
220...電洞注入層
230...電洞傳輸層
240...電致發光層
241...次像素
242...次像素
243...次像素
250...電子傳輸層
260...陰極

發明專利說明書

(本說明書格式、順序，請勿任意更動，※記號部分請勿填寫)

※申請案號：100120840

※申請日：100.6.15

 ※IPC 分類：C07C 21/56 (2006.01)
 C08G 73/52 (2006.01)
 H01L 51/54 (2006.01)
 H05B 33/62 (2006.01)

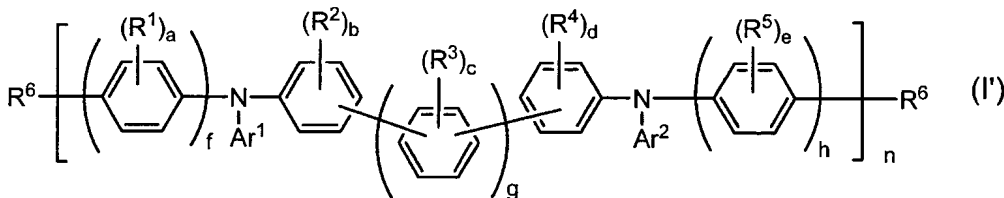
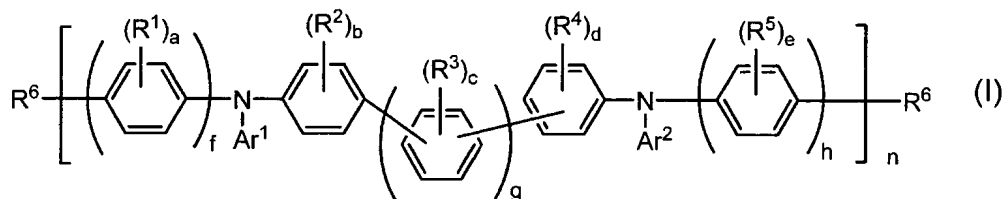
5 一、發明名稱：(中文/英文)

電活性材料

ELECTROACTIVE MATERIALS

二、中文發明摘要：

所揭露者為一具有式 I 或式 I' 之化合物：



於式 I 及式 I' 中：

Ar¹ 與 Ar² 係相同或不同且為芳基；R¹ 至 R⁵ 於每次出現時係獨立為相同或不同，且為

D、F、烷基、芳基、烷氧基、矽基或可交聯基；

R⁶ 為 H、D 或鹵素；

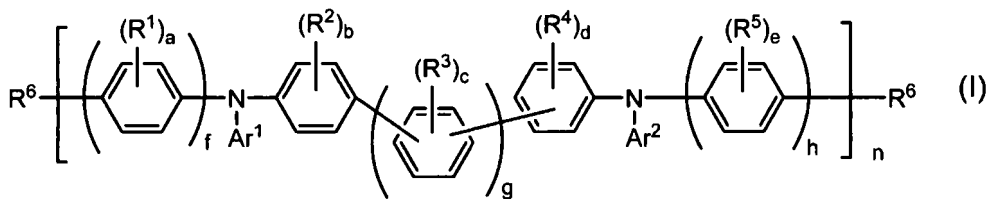
a 至 e 係各自獨立為 0 到 4 之一整數；

f 為 1 或 2；

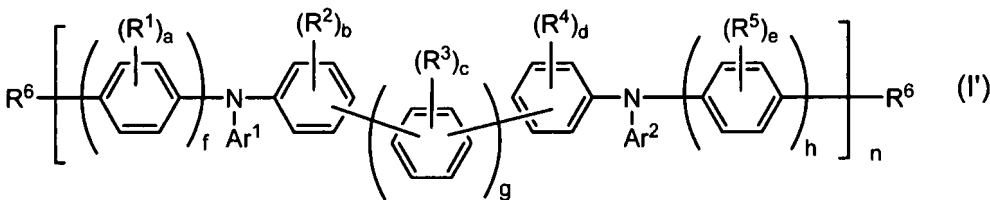
g 為 0、1 或 2；
h 為 1 或 2；以及
n 係大於 0 的整數。

5 三、英文發明摘要：

There is disclosed a compound having Formula I or
Formula I':



10



15

In Formula I and Formula I':
Ar¹ and Ar² are the same or different and are aryl
groups;

R¹ through R⁵ are independently the same or
different at each occurrence and are D, F, alkyl
groups, aryl groups, alkoxy groups, silyl groups,
or crosslinkable groups;

20

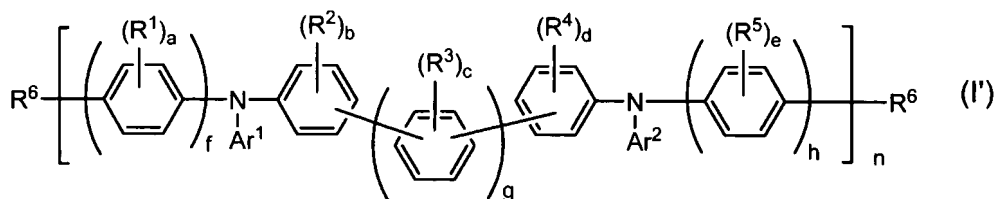
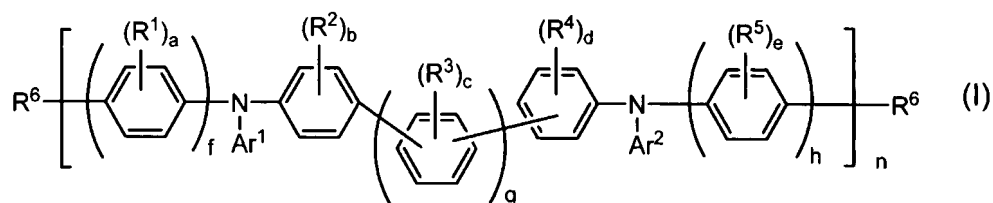
R⁶ is H, D, or halogen;
a through e are independently an integer from 0 to 4;
f is 1 or 2;

201204687

- g is 0, 1 or 2;
- h is 1 or 2; and
- n is an integer greater than 0.

七、申請專利範圍：

1. 一種具有式 I 或式 I' 之化合物：



其中：

Ar^1 與 Ar^2 係相同或不同且為芳基；

R^1 至 R^5 於每次出現時係獨立為相同或不同，且係選自於由 D、F、烷基、芳基、烷氧基、矽基及一可交聯基所組成之群組；

R^6 於每次出現時係為相同或不同，且係選自於由 H、D 及鹵素所組成之群組；

a 至 e 係獨立為 0 到 4 之一整數；

f 為 1 或 2；

g 為 0、1 或 2；

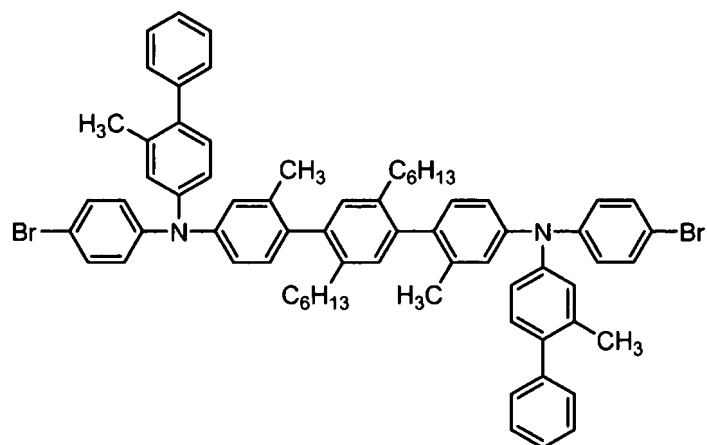
h 為 1 或 2；以及

n 為大於 0 的整數。

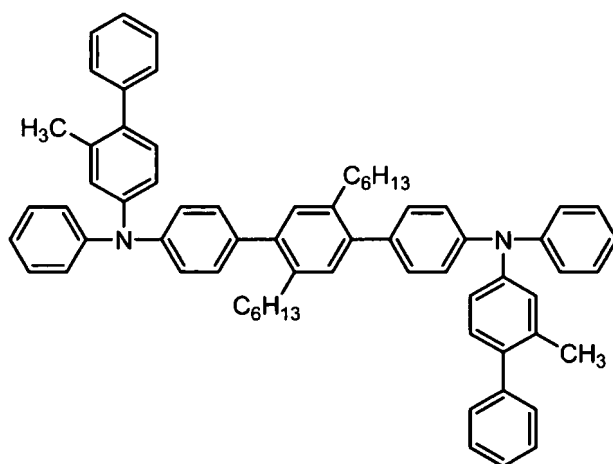
2. 一種選自於由化合物 A 至化合物 EE 所組成之群組之化合物

201204687

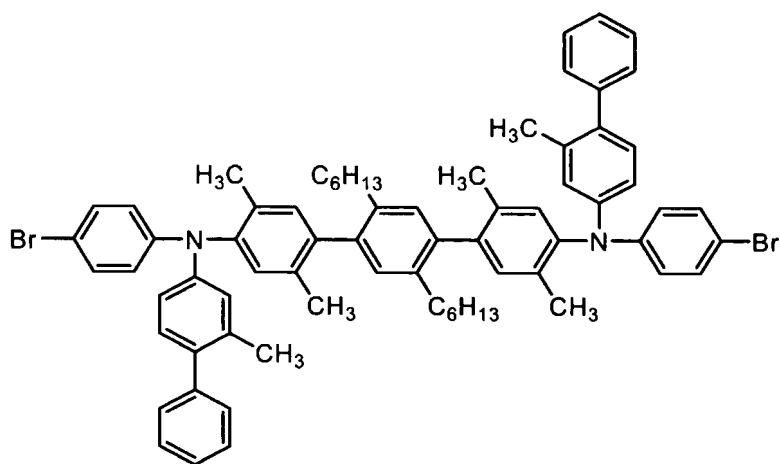
化合物 A



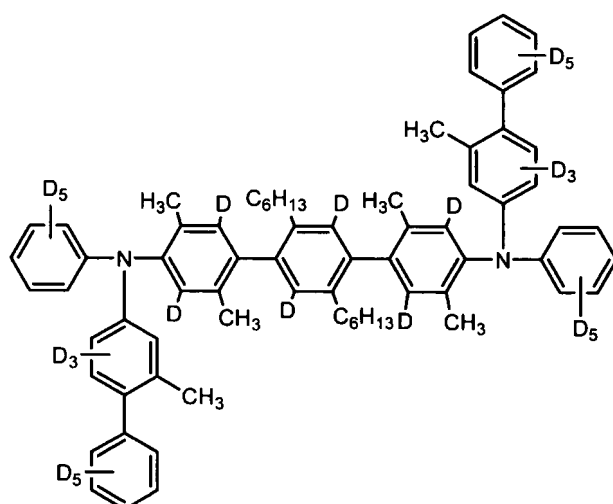
化合物 B



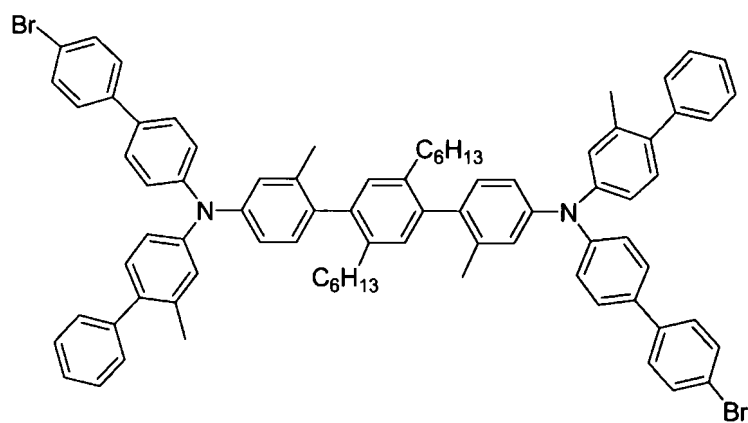
化合物 C



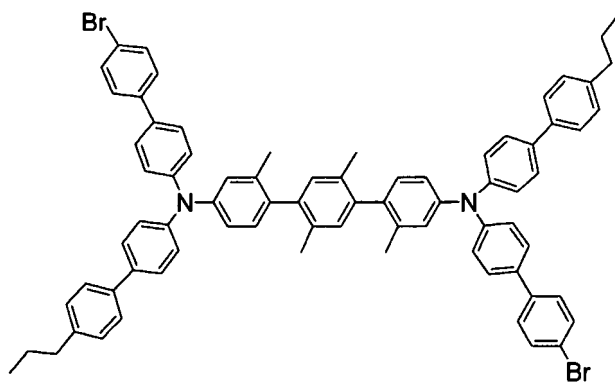
化合物 D



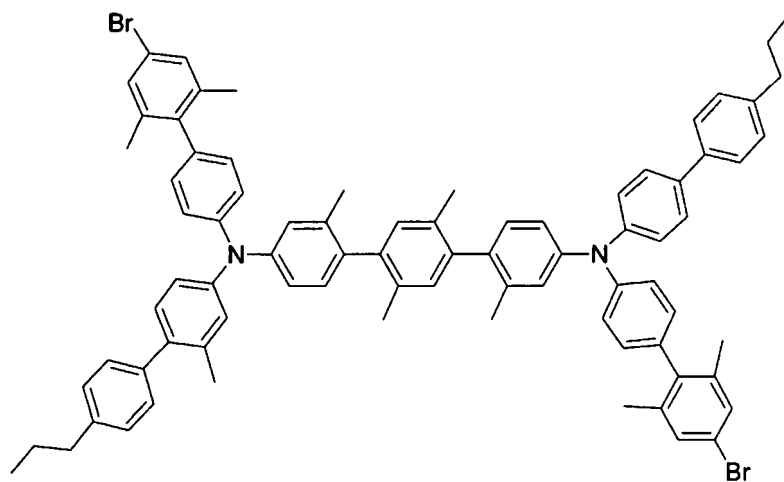
化合物 E



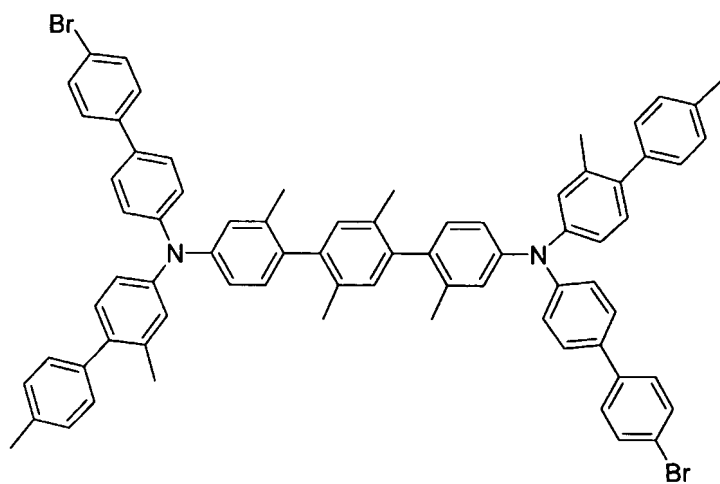
化合物 F



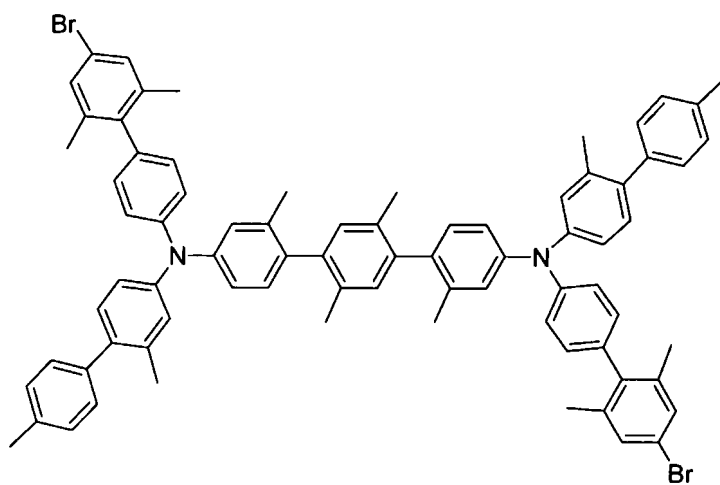
化合物 G



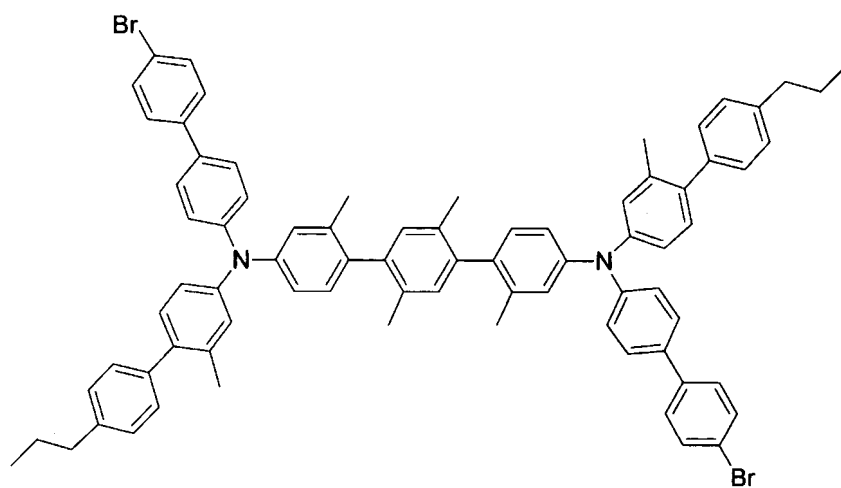
化合物 H



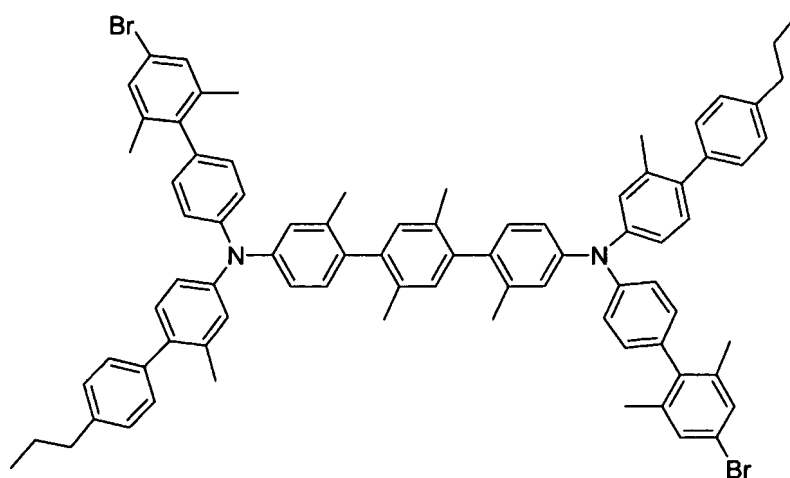
化合物 I



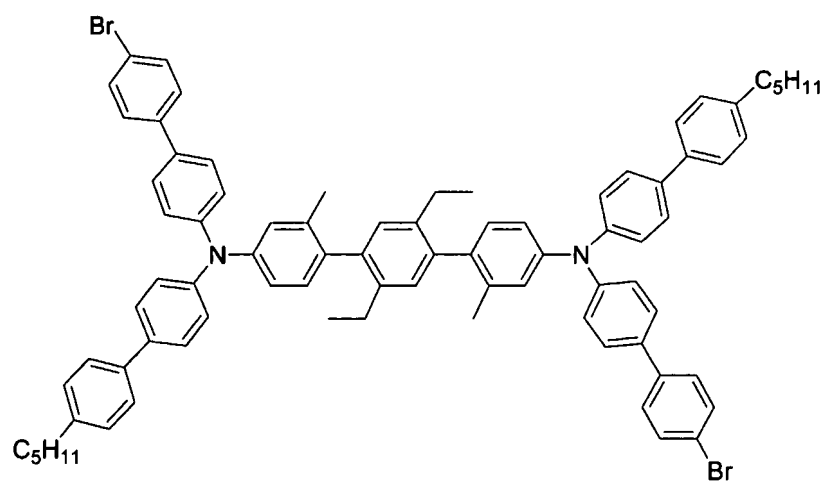
化合物 J



化合物 K

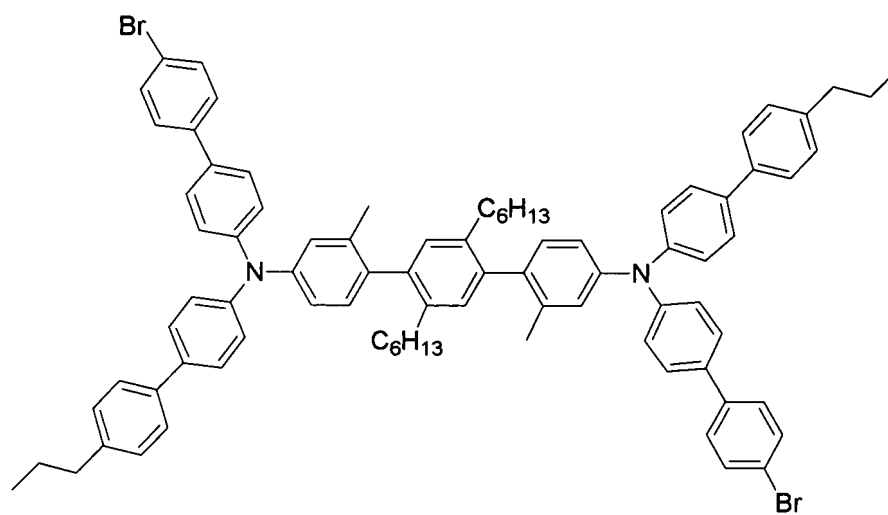


化合物 L

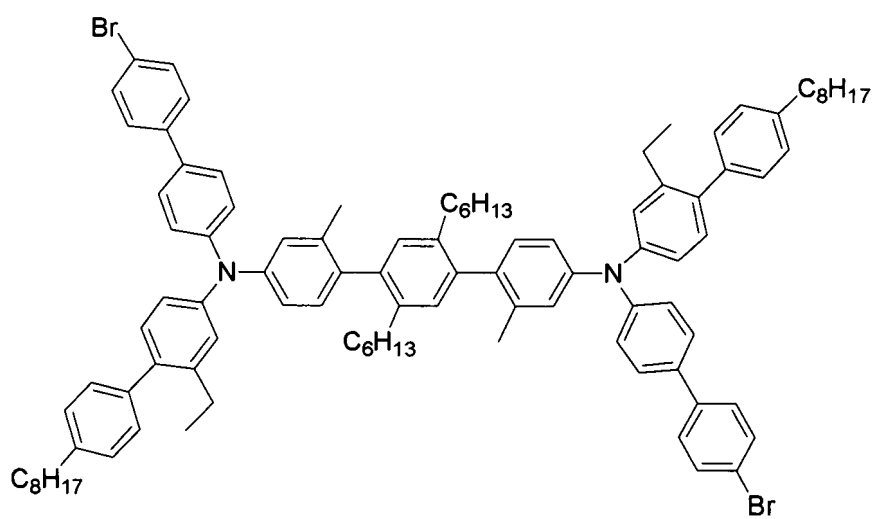


化合物 M

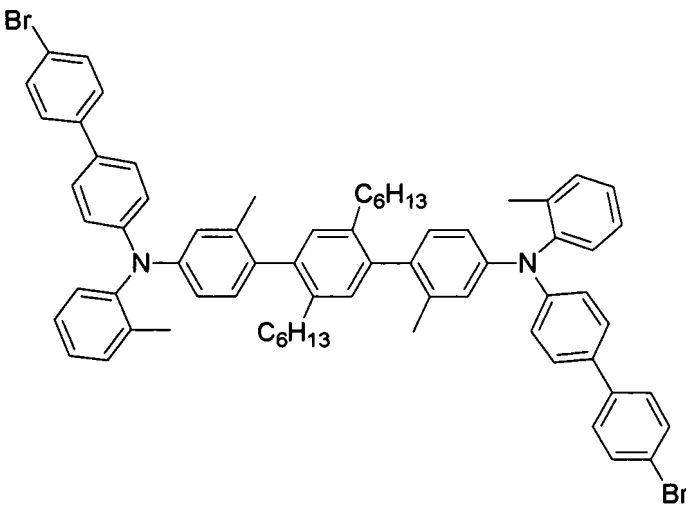
201204687



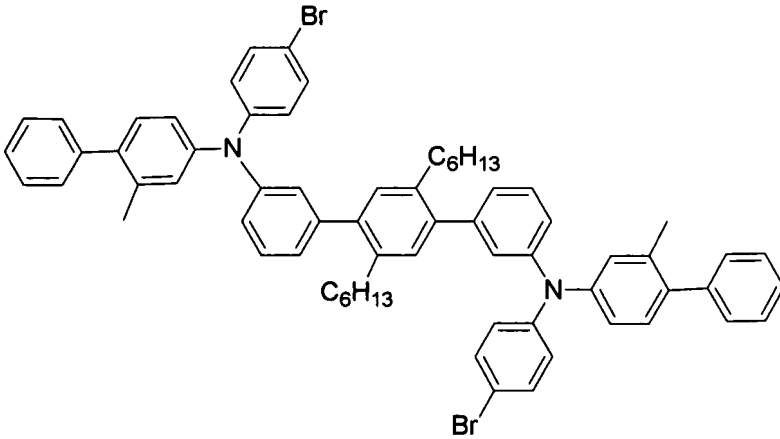
化合物 N



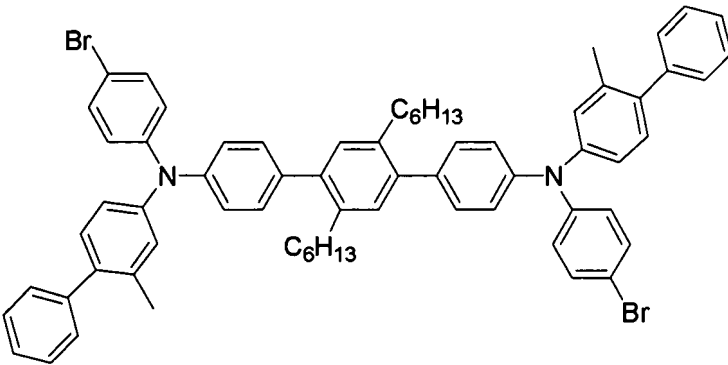
化合物 O



化合物 P

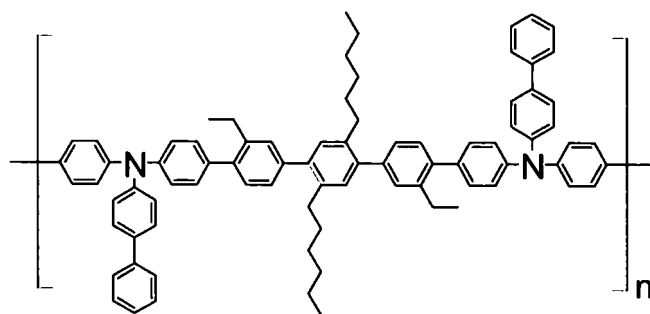


化合物 Q

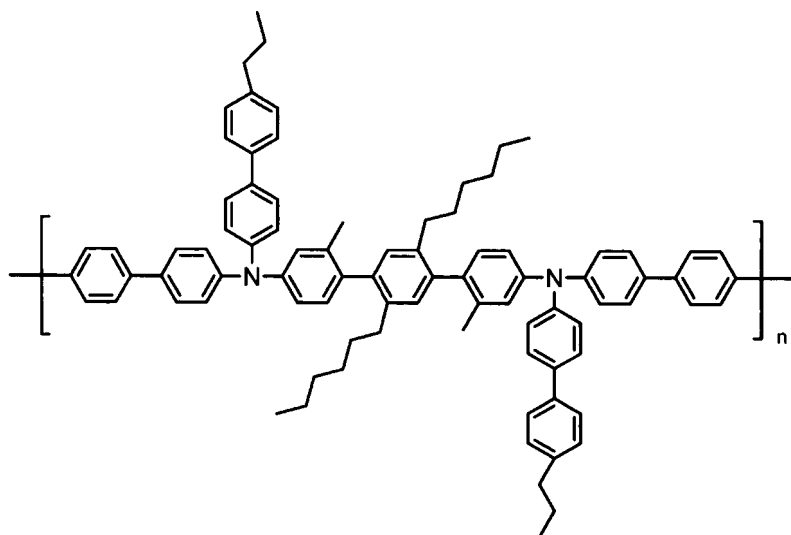


201204687

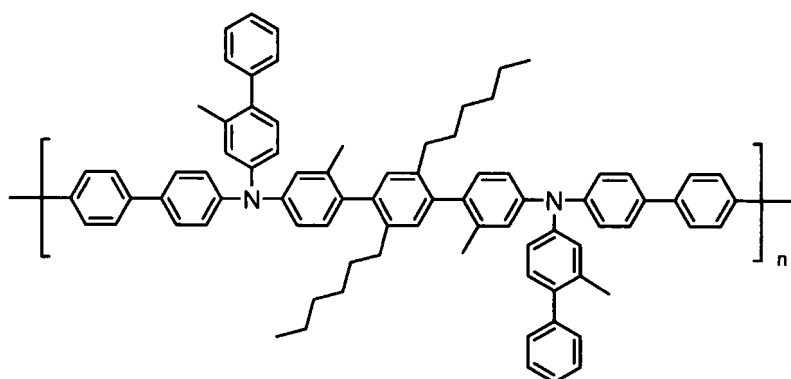
化合物 R



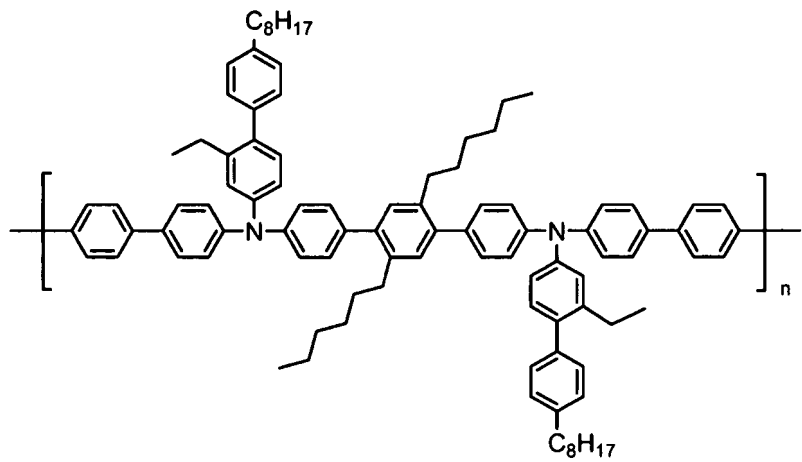
化合物 S



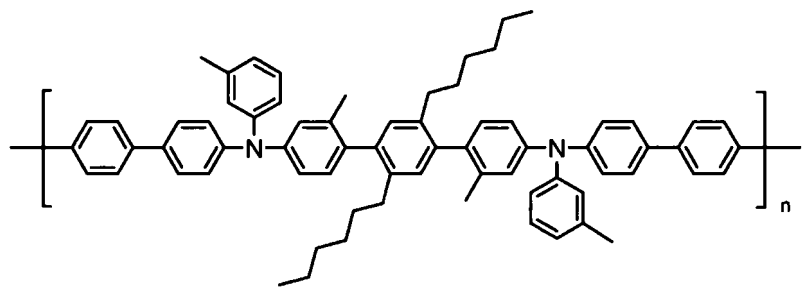
化合物 T



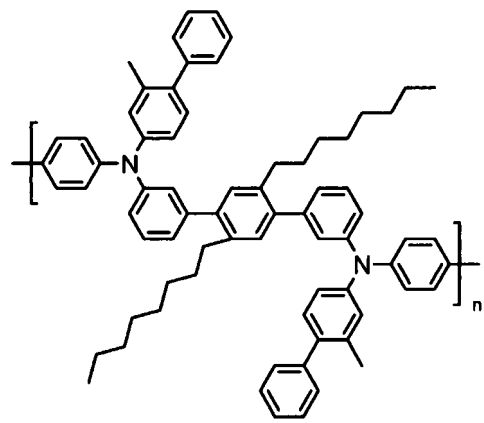
化合物 U



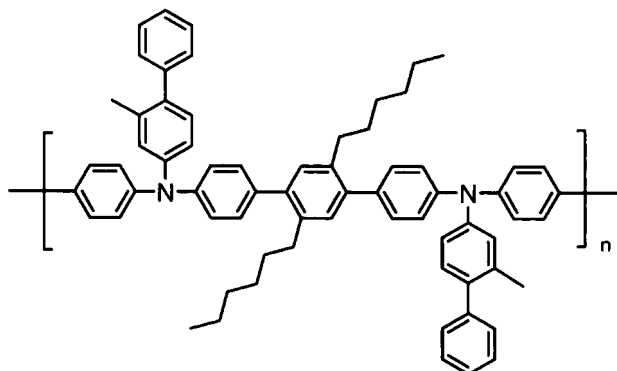
化合物 V



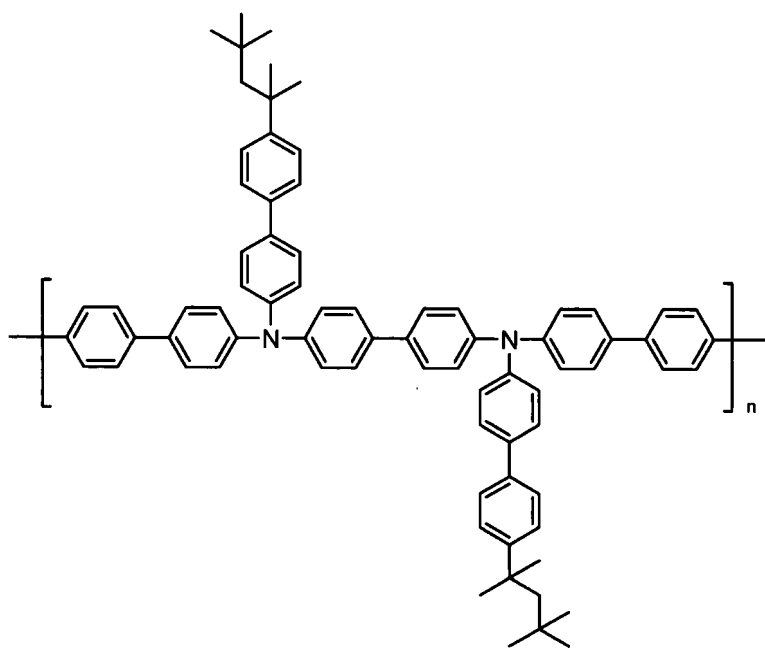
化合物 W



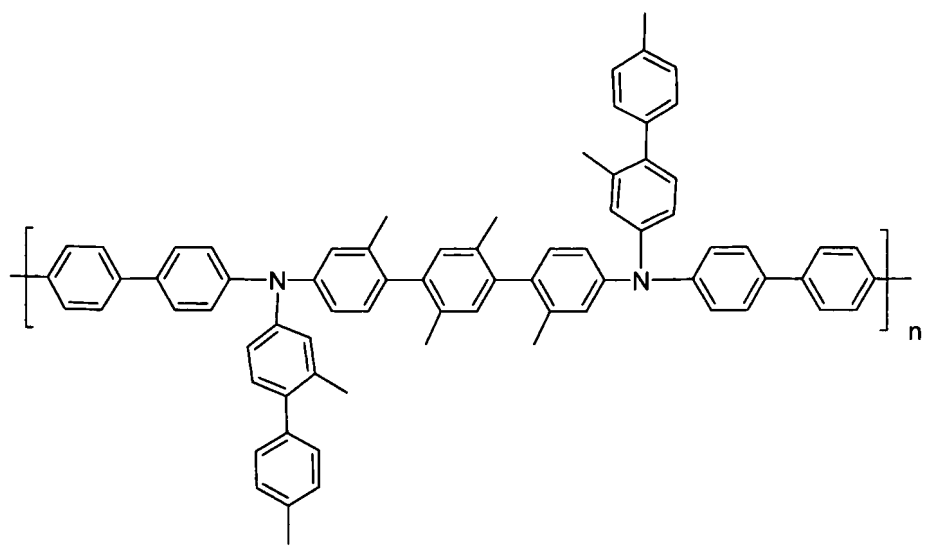
化合物 X



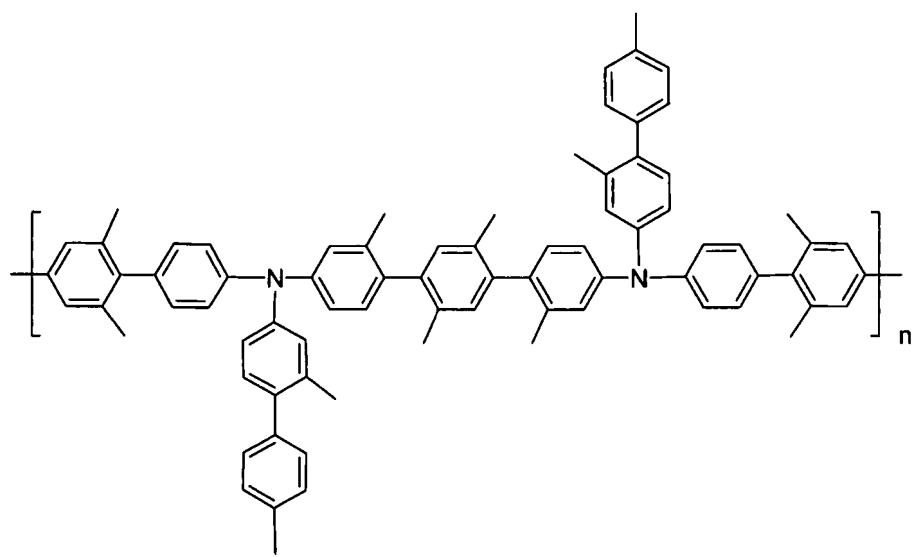
化合物 Y



化合物 Z

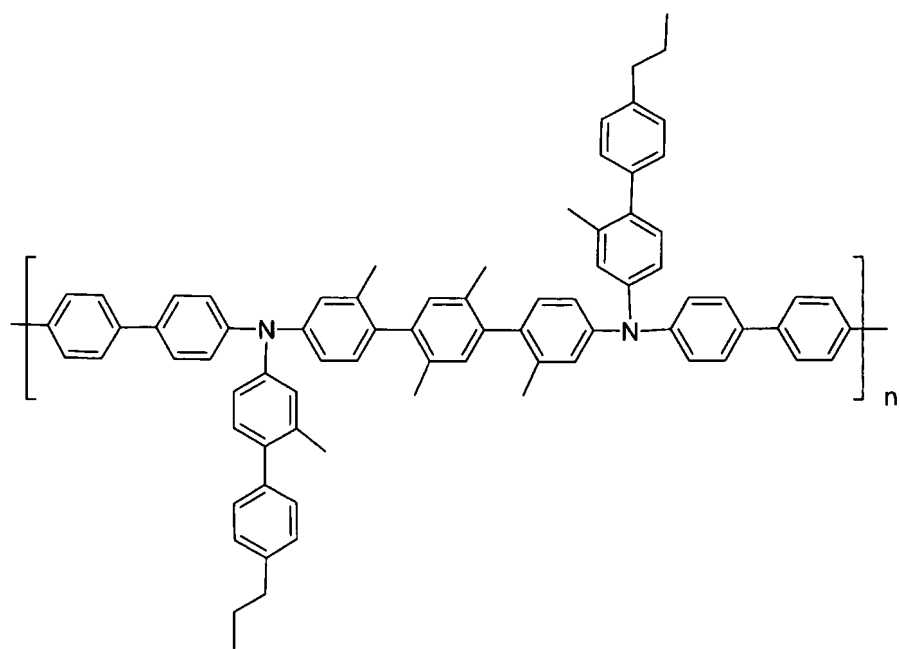


化合物 AA

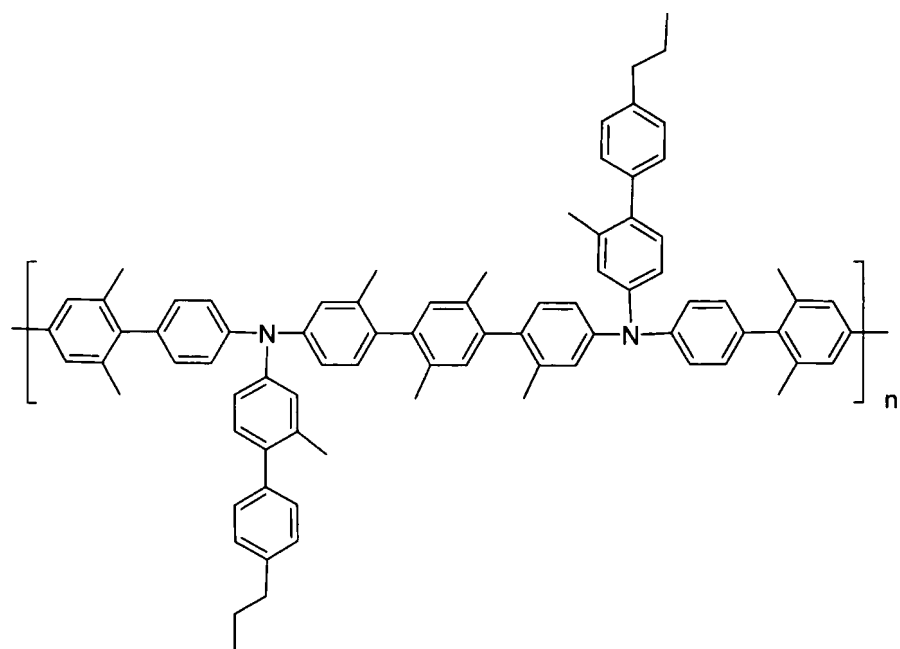


化合物 BB

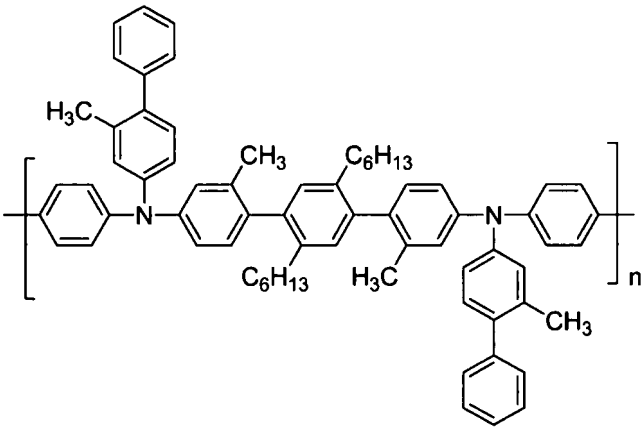
•



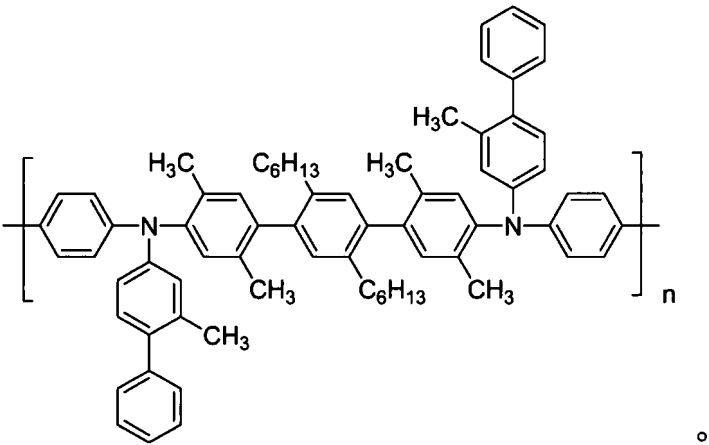
化合物 CC



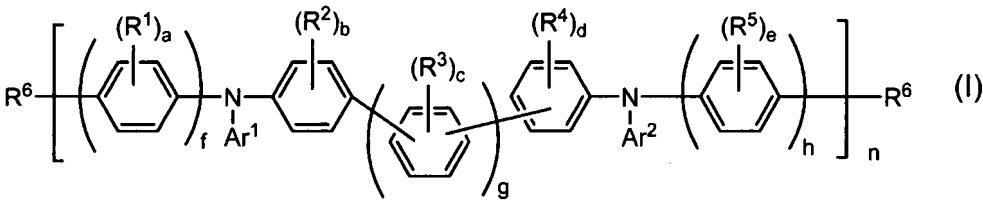
化合物 DD

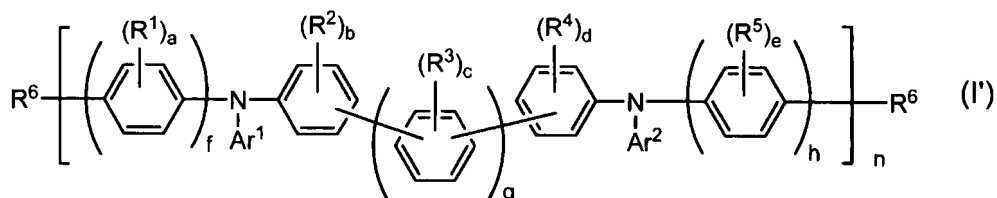


化合物 EE



3. 一種有機電子裝置，其包括一第一電接觸層、一第二電接觸層以及一介於其間之活性層，其中該活性層包括一具有式 I 或式 I' 之化合物：





其中：

Ar^1 與 Ar^2 係相同或不同且為芳基；

R^1 至 R^5 於每次出現時係獨立為相同或不同，且係選自於由 D、F、烷基、芳基、烷氧基、矽基及一可交聯基所組成之群組；

R^6 於每次出現時係為相同或不同，且係選自於由 H、D 及鹵素所組成之群組；

a 至 e 係獨立為 0 到 4 之一整數；

f 為 1 或 2；

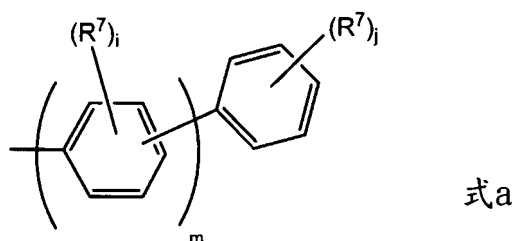
g 為 0、1 或 2；

h 為 1 或 2；以及

n 為大於 0 的整數。

4. 如請求項 3 所述之裝置，其中 Ar^1 與 Ar^2 為不具稠合環之芳基。

5. 如請求項 3 所述之裝置，其中 Ar^1 與 Ar^2 具有式 a



其中：

R^7 在每次出現時係相同或不同，且係選自於由 D、烷基、

烷氧基、矽氧烷及矽基所組成之群組；

i 在每次出現時係相同或不同，且為 0-4 之整數；

j 為 0-5 之整數；以及

m 為 1 至 5 之整數。

6. 如請求項 3 所述之裝置，其中 Ar^1 與 Ar^2 係選自於由苯基、聯苯、聯三苯、其氘化衍生物及其衍生物所組成之群組，該等衍生物具有一個或多個選自於由烷基、烷氧基、矽基及一具有交聯基之取代基所組成之群組之取代基。

7. 如請求項 3 所述之裝置，其中 R^1 至 R^5 係選自於由 D 及 C_{1-10} 烷基所組成之群組。

8. 如請求項 3 所述之裝置，其中 $a = e = 0$ 。

9. 如請求項 3 所述之裝置，其中 $a = e = 4$ 且 R^1 與 R^5 為 D。

10. 如請求項 3 所述之裝置，其中 $b > 0$ 且至少一個 R^2 為烷基。

11. 如請求項 3 所述之裝置，其中 $c > 0$ 且至少一個 R^3 為烷基。

12. 如請求項 3 所述之裝置，其中 $d > 0$ 且至少一個 R^4 為烷基。
13. 如請求項 3 所述之裝置，其中該活性層為一電洞傳輸層。
14. 如請求項 3 所述之裝置，其中該電洞傳輸層主要由具有式 I 或式 I' 之化合物所組成。
15. 如請求項 3 所述之裝置，其中該活性層為一電活性層，該電活性層包括一具有式 I 或式 I' 之主體化合物以及一摻雜劑。
16. 如請求項 3 所述之裝置，其中該活性層主要由具有式 I 或式 I' 之主體化合物以及一摻雜劑所組成。

八、圖式：

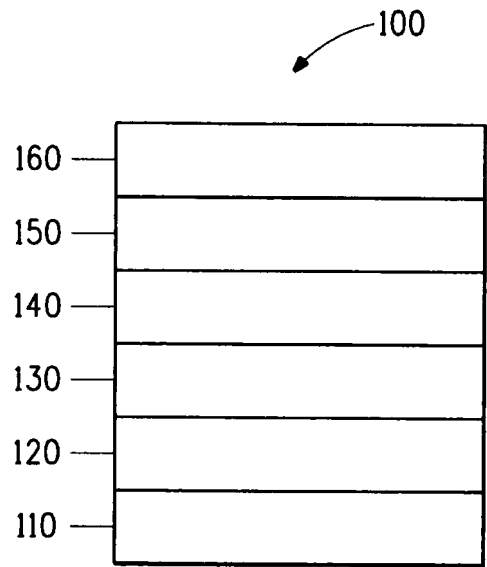


圖1

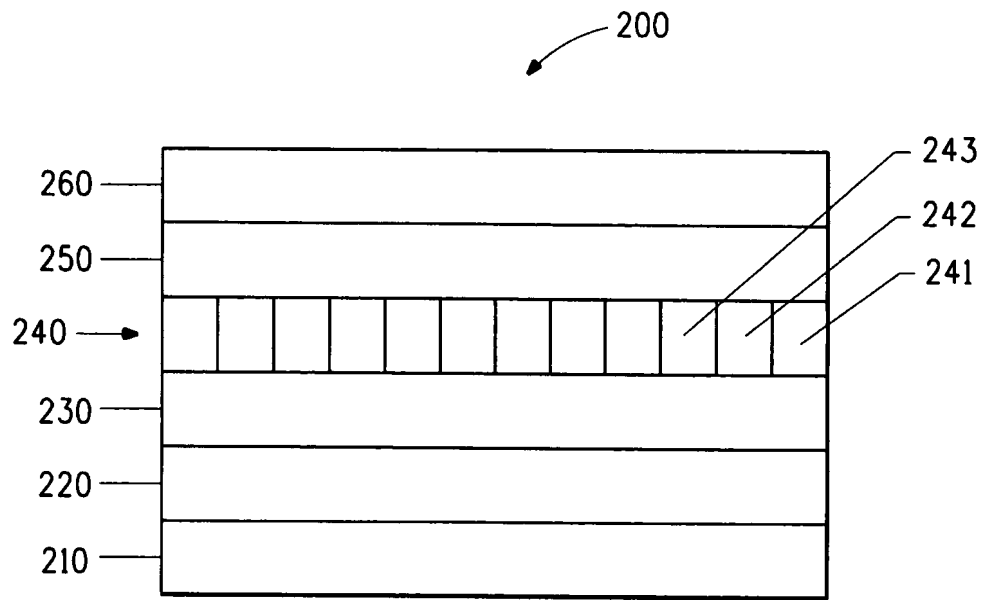


圖2

四、指定代表圖：

(一)本案指定代表圖為：第(1)圖。

(二)本代表圖之元件符號簡單說明：

- 5 100...裝置
 110...陽極
 120...電洞注入層
 130...電洞傳輸層
 140...電致發光層
 10 150...電子傳輸層
 160...陰極

五、本案若有化學式時，請揭示最能顯示發明特徵的化學式：

15

